

RAPPORT D'ÉTUDE
N° 67645/166

01 / 09/ 2005

Analyse de la sensibilité et de l'incertitude
liées au modèle d'exposition de l'homme
aux substances chimiques (EUSES)

Module d'exposition de l'homme via
l'environnement

Analyse de la sensibilité et de l'incertitude liées au modèle d'exposition de l'homme aux substances chimiques (EUSES)

Module d'exposition de l'homme via l'environnement

MINISTÈRE DE L'ENVIRONNEMENT ET DU DÉVELOPPEMENT DURABLE

R. BONNARD, F. LE GOFF, J. DE SAINT JORES :

PRÉAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	R. BONNARD	F. LE GOFF	A. CICOLELLA
Qualité	Ingénieur à la Direction des Risques Chroniques	Ingénieur à la Direction des Risques Chroniques	Responsable de l'unité Evaluation des Risques Sanitaires
Visa			

TABLE DES MATIÈRES

1	RÉSUMÉ.....	6
2	INTRODUCTION	8
3	PRÉSENTATION DU MODULE DE CALCUL DE L'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT ET LIMITES DE CE MODELE	8
3.1	Contenu du modèle d'exposition de l'homme via l'environnement	8
3.2	Concentration dans le poisson.....	9
3.2.1	Equations utilisées	9
3.2.2	Hypothèses sous-tendant l'application du sous-modèle « concentration dans le poisson » et domaine d'application.....	9
3.3	Concentration dans les plantes.....	10
3.3.1	Equations utilisées	10
3.3.2	Hypothèses sous-tendant l'application du sous-modèle «concentration dans les plantes » et conditions d'application.....	12
3.4	Concentration dans le lait et la viande	13
3.4.1	Equations utilisées	13
3.4.2	Hypothèses sous-tendant l'application du sous-modèle «concentration dans le lait et la viande » et conditions d'application.....	14
3.5	Concentration dans l'eau de boisson.....	15
3.5.1	Equations utilisées	15
3.5.2	Nature du modèle utilisé.....	15
3.6	Calcul de la dose totale d'exposition de l'Homme.....	15
3.6.1	Equations utilisées	15
3.6.2	simplification et hypothèses sous-tendant le calcul de la dose totale d'exposition.....	16
3.7	Nature et domaine d'application de l'ensemble du modèle d'exposition de l'homme via l'environnement.....	17
4	PRÉSENTATION ET CONCLUSIONS DES TRAVAUX DE SCHWARTZ SUR LE MODÈLE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT	18
4.1	Observations issues de l'étude de comparaison des résultats fournis par le modèle avec des données issues de mesure.....	19
4.2	Analyse de sensibilité et d'incertitude	20
5	ELÉMENTS D'ANALYSE COMPLÉMENTAIRE CONCERNANT LE MODULE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT	22

5.1	Méthode.....	22
5.2	Résultats.....	23
5.2.1	Calcul des concentrations et doses d'exposition pour les quatre substances étudiées.....	23
5.2.2	Analyse de sensibilité monoparamétrique	25
5.2.3	Analyse probabiliste des incertitudes	29
5.2.3.1	Définition de la distribution statistique des paramètres d'entrée.....	30
5.2.3.2	Distribution des de la dose d'exposition totale	31
5.2.3.3	Analyse de sensibilité	32
6	SYNTHÈSE ET CONCLUSION	34
6.1	Estimation de la concentration de substance dans le poisson.....	35
6.2	Estimation des concentrations de substances dans les végétaux.....	36
6.3	Estimation des concentrations de substances dans le lait et la viande	37
7	RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	39
8	LISTE DES ANNEXES.....	40

1 RÉSUMÉ

A la demande du bureau des substances et des préparations chimiques, une analyse de sensibilité et des incertitudes du modèle servant à estimer l'exposition de l'homme à partir de l'environnement, dans le cadre de la réglementation des substances chimiques nouvelles et existantes, a été réalisée. Les concepts sur lesquels repose le modèle, les équations utilisées et les limites d'application ont été exposées. L'étude de l'INERIS a pu s'appuyer sur la thèse de Schwartz, réalisée en l'an 2000, et portant sur la qualité des modèles utilisés pour évaluer l'exposition de l'homme aux substances chimiques. Une analyse de sensibilité monoparamétrique et une analyse probabiliste de la dose totale d'exposition réalisée pour différentes substances aux propriétés physico-chimiques contrastées ont permis de compléter l'analyse.

Le modèle utilisé pour estimer l'exposition de l'homme via l'environnement est constitué d'un ensemble d'équations simples, permettant de calculer les concentrations dans les différents milieux d'exposition à l'état stationnaire et la dose totale d'exposition. Les voies d'exposition prises en compte sont l'ingestion de poisson, de végétaux (partie racinaire, partie aérienne), de produits laitiers, l'ingestion de viande, d'eau de boisson et l'inhalation d'air.

Le modèle comporte de nombreuses hypothèses simplificatrices, génératrices d'incertitudes, en particulier pour la modélisation des concentrations dans la chaîne alimentaire.

Le calcul des concentrations dans ces milieux, à partir des équations fournies pour estimer par défaut les coefficients de transfert, repose toujours sur le coefficient de partition octanol-eau (K_{ow}), supposé être un bon indicateur de la partition des substances organiques entre les phases aqueuses et les phases lipidiques, caractéristiques des êtres vivants. Le coefficient de partage octanol-eau joue donc un rôle important dans le modèle, en l'absence de mesures permettant de renseigner les paramètres de transfert de manière spécifique.

Compte-tenu du domaine de validité des différentes équations de transfert utilisées, la construction du modèle est orienté pour traiter les substances persistantes, non ionisables, ayant un caractère lipophile intermédiaire. Les concentrations de substances inorganiques, comme les métaux, ne peuvent donc pas être estimées à partir des équations fournies.

Toutefois, les résultats obtenus montrent que pour les substances peu lipophiles, solubles ou volatiles, l'exposition est liée principalement à des voies d'exposition directes (ingestion d'eau ou inhalation d'air). Pour ces substances, les incertitudes sur la dose totale d'exposition calculée par EUSES sont limitées. Elles sont liées principalement à la variabilité des paramètres d'exposition et la contribution des voies à la dose totale d'exposition, fournie par le modèle, est correcte.

Pour les substances lipophiles ou très lipophiles, l'exposition est indirecte et met en jeu la chaîne alimentaire. Les résultats du modèle pour ces substances posent des problèmes : répartition de l'exposition entre les différentes voies erronée, concentrations déviant de 1 à 3 ordres de grandeur par rapport aux mesures, courbes de distribution de la dose d'exposition très étendues et incertitudes très importantes.

Ces mauvais résultats sont liés à l'estimation des concentrations dans le poisson, les végétaux, le lait et la viande et la détermination des quantités d'aliments consommés.

Ainsi, les priorités d'amélioration du modèle d'exposition de l'homme via l'environnement semblent être :

- la définition du facteur de bioconcentration dans le poisson,
- la prise en compte du dépôt de particules sur les végétaux et l'estimation de la fraction de substance sous forme particulaire,
- la définition de modèles pour estimer les concentrations dans les graisses animales,
- une meilleure différenciation des aliments consommés avec la prise en compte des mécanismes de transfert propres à ces différents types d'aliments.

2 INTRODUCTION

Le bureau des substances et des préparations chimiques a demandé à l'INERIS d'étudier la sensibilité du modèle servant à estimer l'exposition de l'homme à partir de l'environnement, dans le cadre de la réglementation des substances chimiques nouvelles et existantes.

Le but étant d'identifier dans le modèle les facteurs de transfert sur lesquels il serait souhaitable de travailler de manière prioritaire pour améliorer la qualité du modèle, il est proposé de compléter l'analyse de sensibilité demandée (qui renseigne sur l'influence de ces paramètres sur le résultat) par une analyse des incertitudes (qui permettra également d'apporter des informations sur la précision des équations de régression servant à estimer les paramètres de transfert des substances dans les milieux d'exposition).

Le modèle utilisé pour estimer l'exposition de l'homme via l'environnement est constitué d'un ensemble d'équations simples permettant de calculer les concentrations dans les différents milieux d'exposition et la dose d'exposition totale. Ce modèle est décrit dans le Technical Guidance Document (TGD) (European Commission, 2003) et les équations de ce modèle ont été codées dans le logiciel EUSES (European Commission, 2004).

Dans un premier temps, le contenu du modèle et ses équations seront rappelés, les concepts théoriques sur lesquels reposent le modèle et les conditions d'application seront exposés. Pour cela, l'INERIS s'appuiera sur l'analyse de Schwartz (2000) qui a rédigé une thèse sur la qualité des modèles utilisés pour évaluer l'exposition de l'homme aux substances chimiques. Ses travaux sur l'incertitude du modèle seront ensuite présentés. Enfin, les résultats d'essais de calcul menés par l'INERIS sur des substances aux propriétés contrastées viendront compléter les conclusions de cette analyse.

3 PRÉSENTATION DU MODULE DE CALCUL DE L'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT ET LIMITES DE CE MODELE

3.1 CONTENU DU MODÈLE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT

Les voies d'exposition prises en compte dans le modèle dédié à l'estimation de l'exposition de l'homme via l'environnement sont au nombre de six :

- l'ingestion de poisson,
- l'ingestion de végétaux (partie racinaire, partie aérienne),
- l'ingestion de lait,
- l'ingestion de viande,
- l'ingestion d'eau de boisson,
- l'inhalation d'air.

Le mode de calcul de la concentration des substances chimiques dans les milieux d'exposition et de la dose d'exposition totale est décrit ci-dessous. Ce module est constitué d'équations linéaires, qui suppose l'état stationnaire atteint dans les

différents compartiments, et d'équations de régression. Ces équations de régression encore appelées QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) ou QPPR (Quantitative Property Property Relationship) sont des relations statistiques établies entre un paramètre connu, descripteur de la substance et un paramètre à estimer.

3.2 CONCENTRATION DANS LE POISSON

3.2.1 EQUATIONS UTILISÉES

La concentration dans le poisson est obtenue par le produit de la concentration de substance dissoute dans les eaux superficielles douces par un facteur de bioconcentration (BCF).

$$C_{\text{poisson}} = BCF_{\text{poisson}} \cdot C_{\text{eau}} \quad (1)$$

avec C_{poisson} : concentration dans le poisson [kg_c.kg_{frais}⁻¹]
 BCF_{poisson} : facteur de bioconcentration pour le poisson [m³.kg_{frais}⁻¹]
 C_{eau} : concentration dans les eaux superficielles [kg_c.m⁻³]

En l'absence de données de mesures utilisables pour une substance, le BCF peut être calculé à partir des relations suivantes :

$$\log BCF_{\text{poisson}} = 0,85 \cdot \log Kow - 0,70 - 3 \quad (2) \quad \text{si } 1 < \log Kow \leq 6$$

n=55, r² = 0,90

$$\log BCF_{\text{poisson}} = -0,20 \cdot (\log Kow)^2 + 2,74 \cdot \log Kow - 4,72 - 3 \quad (3) \quad \text{si } 6 < \log Kow \leq 10$$

n=52, r² = 0,78

avec BCF_{poisson} : facteur de bioconcentration pour le poisson [m³.kg_{frais}⁻¹]
 Kow : coefficient de partition octanol-eau [m³.m⁻³]
n : nombre de couples de données Kow/BCF ayant servi à établir l'équation
r² : Coefficient de détermination

Le domaine d'application des équations 2 et 3 correspond à des substances ayant un log Kow allant de 1 à 10. En dehors de ce domaine, le BCF est estimé à l'aide de la valeur minimale ou maximale du domaine d'application.

L'incertitude sur le facteur de bioconcentration dérivé de la relation (3) est plus importante que pour la relation (2), compte-tenu des difficultés expérimentales rencontrées lors de mesures réalisées sur des substances ayant un coefficient de partage octanol-eau (Kow) élevé (c'est-à-dire les substances très lipophiles).

3.2.2 HYPOTHÈSES SOUS-TENDANT L'APPLICATION DU SOUS-MODÈLE « CONCENTRATION DANS LE POISSON » ET DOMAINE D'APPLICATION

L'utilisation du facteur de bioconcentration suppose que la concentration dans le poisson atteint un niveau stationnaire. Cela suppose également une concentration constante de la substance chimique dans l'eau. Par ailleurs, cet état stationnaire

doit être atteint rapidement, car la croissance des organismes aquatiques est négligée.

L'estimation du facteur de bioconcentration ne repose que sur le caractère lipophile des substances. Les phénomènes de biomagnification ne sont pas pris en compte. Les concentrations calculées dans le poisson correspondent donc à des poissons de petites tailles, appartenant plutôt au bas de l'échelle trophique.

Les relations (2) et (3) ne s'appliquent normalement que pour :

- des substances ayant une masse molaire inférieure à 700 g/mol, compte-tenu des propriétés des substances ayant servi à les définir ;
- des substances ne se dissociant pas dans l'eau. En effet, ces relations s'appuient sur la liposolubilité des substances. Or, la fraction ionique est essentiellement hydrophile. Les relations ne peuvent donc s'appliquer qu'à la fraction non ionisée des substances ;
- des substances relativement persistantes, car ces relations ont été établies à partir de substances peu métabolisées par les organismes aquatiques et la métabolisation de la substance par le poisson n'est pas considérée par ailleurs ;
- des poissons d'eau douce, car les données utilisées pour définir les relations sont issues de poissons de ce type et non de poissons d'origine marine.

3.3 CONCENTRATION DANS LES PLANTES

3.3.1 EQUATIONS UTILISÉES

Le sous-modèle utilisé pour estimer les concentrations dans la partie aérienne des plantes est issue du modèle de Trapp et Matthies (1995, 1996). Les apports de substance à la plante sont liés au prélèvement d'eau du sol, suivis du phénomène de translocation, et au prélèvement par les feuilles de substance sous forme gazeuse à partir de l'atmosphère. A l'état stationnaire, la quantité apportée est égale à la quantité de substance perdue par la plante par diffusion et dégradation ou diluée du fait de la croissance de la plante, d'où :

$$C_{\text{feuille}} = \frac{\mathbf{a}}{\mathbf{b}} \quad (4)$$

avec C_{feuille} : concentration dans la partie aérienne des plantes [kg_c.kg_{frais}⁻¹]
 α : terme d'apport à la plante [kg_c.m⁻³.j⁻¹]
 β : terme de perte de la plante [kg_{frais}.m⁻³.j⁻¹]

$$\mathbf{a} = C_{\text{eau_du_sol}} \cdot TSCF \cdot \frac{Q}{V_l} + (1 - F_{pa}) \cdot C_{\text{air}} \cdot g_l \cdot \frac{A_l}{V_l} \quad (5)$$

$$\mathbf{b} = \left(\frac{A_l \cdot g_l}{K_{la} \cdot V_l} + k_m + k_{ph} + k_g \right) \cdot \mathbf{r}_p \quad (6)$$

et Q : flux ascendant dans la plante	[m ³ .j ⁻¹]
C _{eau_du_sol} : concentration dans l'eau du sol	[kgc.m ⁻³]
(Pour le calcul de la concentration dans le fourrage consommé par les animaux, la concentration utilisée est celle correspondant à l'eau du sol de pâturage. S'il s'agit de la concentration dans les végétaux destinés à la consommation humaine, la concentration utilisée est celle de l'eau du sol agricole)	
C _{air} : concentration dans l'air	[kgc.m ⁻³]
g _l : conductance	[m.j ⁻¹]
TSCF : facteur de concentration dans le flux ascendant	[-]
F _{pa} : fraction de substance adsorbée sur les particules	[-]
K _{la} : coefficient de transfert entre la plante et l'air	[-]
A _l : surface foliaire des plantes	[m ²]
V _l : volume de la partie aérienne des plantes	[m ³]
k _m : taux de métabolisation dans la plante	[j ⁻¹]
k _{ph} : taux de dégradation par photolyse	[j ⁻¹]
k _g : taux de dilution par croissance de la partie aérienne des plantes	[j ⁻¹]
ρ _p : masse volumique de la plante	[kg _{frais} .m ⁻³]

Les coefficients de partition ou de transfert dépendent du caractère lipophile des substances. TSCF et K_{la} sont estimés selon les relations suivantes :

$$TSCF = 0.784 \cdot \exp \left[\frac{-(\log Kow - 1.78)^2}{2.44} \right] \quad (7)$$

$$K_{la} = F_a + \frac{K_{pw}}{K_{aw}} \quad (8)$$

avec K _{aw} : coefficient de partition air-eau	[m ³ .m ⁻³]
F _a : fraction volumique d'air dans la plante	[m ³ .m ⁻³]
K _{pw} : coefficient de partition plante-eau	[m ³ .m ⁻³]

$$\text{et } K_{pw} = F_w + F_{lipide} \cdot Kow^b \quad (9)$$

avec F _w : fraction volumique d'eau dans la plante	[m ³ .m ⁻³]
F _{lipide} : fraction volumique des lipides dans la plante	[m ³ .m ⁻³]
b : facteur de correction tenant compte des différences entre la nature des lipides de la plante et l'octanol	[-]

La relation (7) a été définie à partir d'un petit nombre de pesticides. Elle est applicable pour des substances présentant une valeur de log Kow comprise entre -0.5 et 4.5. Au-delà et en deçà, le TSCF est calculé à l'aide de la valeur maximale ou minimale du domaine d'application.

Le paramètre F_{pa} représentant la fraction de substance adsorbée sur des particules dans l'air est calculée par EUSES, pour définir le devenir de la substance dans l'environnement, en amont du module d'exposition de l'homme. Toutefois, il intervient également dans le module d'exposition (équation 5). Il est estimé grâce à l'équation de Junge (1977) :

$$F_{pa} = \frac{CONjunge \cdot Surf_{aer}}{VP_L + CONjunge \cdot Surf_{aer}} \quad (10)$$

avec P_L : Pression de vapeur de la substance à l'état liquide	[Pa]
CONjunge : constante de Junge	[Pa.m]
Surf _{aer} : surface moyenne des particules d'aérosols	[m ² .m ⁻³]

Si $TEMP_{fusion} \leq TEMP$ (la substance est liquide à la température ambiante) : $VP_L = VP$

Si $TEMP_{fusion} > TEMP$ (la substance est solide à la température ambiante) :

$$P_L = \frac{VP}{e^{6.79 \left(1 - \frac{TEMP_{fusion}}{TEMP}\right)}} \quad (11)$$

avec P : pression de vapeur	[Pa]
TEMP : température ambiante	[K]
TEMP _{fusion} : température de fusion de la substance	[K]

Quant à la concentration dans la partie racinaire des plantes, elle est calculée selon l'équation suivante :

$$C_{root} = \frac{K_{pw} \cdot C_{eau_du_sol}}{\rho_p} \quad (12)$$

avec C _{racine} : concentration dans les racines	[kg _c .kg _{frais} ⁻¹]
K _{pw} : coefficient de partition plante-eau	[m ³ .m ⁻³]
C _{eau_du_sol} : concentration dans l'eau du sol	[kg _c .m ⁻³]
ρ _p : masse volumique de la plante	[kg _{frais} .m ⁻³]

3.3.2 HYPOTHÈSES SOUS-TENDANT L'APPLICATION DU SOUS-MODÈLE «CONCENTRATION DANS LES PLANTES » ET CONDITIONS D'APPLICATION

Le transfert des substances dans les plantes met en œuvre des phénomènes complexes. L'utilisation des équations présentées ci-dessus suppose de nombreuses hypothèses et simplifications :

- Les différentes parties d'une plante pouvant être consommées sont les racines, les tiges, les feuilles, les fruits et les graines. Le modèle utilisé dans EUSES ne distingue que deux parties : une partie racinaire et une partie aérienne.

La partie racinaire est supposée à l'équilibre avec l'eau du sol. Cette hypothèse peut se concevoir pour des racines fines et ramifiées. Elle n'est pas applicable pour des légumes-racines comme des carottes ou bien des tubercules. De plus, cet équilibre peut être difficile à atteindre dans le cas de substances dégradables ou très lipophiles.

Pour la partie aérienne, le modèle développé est adapté pour représenter la concentration dans les feuilles. La concentration dans les fruits et dans les graines est pourtant assimilée à celles des feuilles.

- Le sous-modèle pour la partie aérienne des plantes suppose aussi une croissance exponentielle des plantes, et donc que les végétaux sont récoltés avant maturité (comme la salade).
- Des caractéristiques génériques sont définies pour représenter une plante-type. Aucune distinction n'est faite entre les différentes espèces de plantes,

alors même que la variabilité interespèces est connue pour être importante. Ainsi, Schwartz (2000) cite Böhme et al., qui ont mesuré, pour des substances volatiles, des coefficients de partition plante/air présentant un facteur de variabilité interespèces supérieur à 30.

- La contamination des végétaux par dépôt particulaire à partir de l'atmosphère et par remise en suspension à partir du sol n'est pas considérée dans ce modèle. Or, les substances peu volatiles sont présentes dans l'air principalement, voire exclusivement, sous forme adsorbée sur des particules.
- Les conditions environnementales sont supposées uniformes : température égale à 12°C durant toute la période de culture des végétaux, concentration constante et uniforme dans la couche de sol végétal et dans l'air.

Enfin, le modèle n'est applicable qu'aux substances organiques. Dans le cas de substances organiques partiellement dissociables, le modèle n'est applicable qu'à la fraction non dissociée, qui doit être définie en fonction du pH. Les substances inorganiques, les substances ionisées ou fertilisantes ont un comportement différent. Elles peuvent être prélevées par la plante de manière active.

3.4 CONCENTRATION DANS LE LAIT ET LA VIANDE

3.4.1 EQUATIONS UTILISÉES

La concentration dans ces deux médias est calculée en multipliant les quantités de substances ingérées et inhalées par les animaux par un facteur de bioaccumulation.

$$C_{viande} = BAF_{viande} \cdot \sum C_i \cdot IC_i \quad (13)$$

$$C_{lait} = BAF_{lait} \cdot \sum C_i \cdot IC_i \quad (14)$$

avec C_{viande} : concentration dans la viande (poids frais)	[kg _c .kg _{frais} ⁻¹]
C_{lait} : concentration dans le lait (poids frais)	[kg _c .kg _{frais} ⁻¹]
C_i : concentration dans les médias inhalés	[kg _c .m _{air} ⁻³]
ou ingérés (air, sol, herbe, eau)	ou [kg _c .kg _{frais} ⁻¹]
IC_i : quantité de médias inhalés ou ingérés (air, sol, herbe, eau)	[m ³ .j ⁻¹]
	ou [kg _{frais} .j ⁻¹]
BAF_{viande} : facteur de bioaccumulation dans la viande	[j.kg _{viande} ⁻¹]
BAF_{lait} : facteur de bioaccumulation dans le lait	[j.kg _{lait} ⁻¹]

Les facteurs de bioaccumulation sont estimés à partir des équations établies par Travis et Arms (1988).

$$BAF_{viande} = 10^{-7.6 + \log Kow} \quad (15)$$

n=36, r² = 0,67

$$BAF_{lait} = 10^{-8.1 + \log Kow} \quad (16)$$

n=28, r² = 0,55

avec K_{ow} : coefficient de partition octanol-eau

n : nombre de couples de données K_{ow} /BAF ayant servi à établir l'équation

r^2 : coefficient de détermination de l'équation

Les équations (15) et (16) ont été établies pour une valeur de $\log K_{ow}$ variant respectivement de 1,5 à 6,5 et de 3 à 6,5. En dehors de ces domaines d'application, les valeurs minimales ou maximales du $\log K_{ow}$ sont utilisées.

3.4.2 HYPOTHÈSES SOUS-TENDANT L'APPLICATION DU SOUS-MODÈLE «CONCENTRATION DANS LE LAIT ET LA VIANDE » ET CONDITIONS D'APPLICATION

L'estimation des facteurs de bioaccumulation par les relations (15) et (16) repose sur l'hypothèse :

- d'une absence de métabolisation des substances par les animaux, ces relations de régression ayant été établies à partir de substances peu ou pas métabolisables. Par conséquent, elles conduisent à une surestimation des coefficients de transfert pour des substances métabolisables ;
- l'hypothèse d'une accumulation des substances uniquement dans la fraction lipidique de l'organisme des animaux ;
- une durée d'exposition suffisante des animaux pour que l'état stationnaire ait été atteint dans le lait et dans la viande. Si la lactation constitue une voie d'élimination des substances potentiellement importante, réduisant le temps de résidence des substances dans l'organisme des vaches laitières, dans le cas des animaux non producteurs de lait, l'abattage peut intervenir avant que l'état stationnaire n'ait été atteint dans l'organisme de l'animal. Ceci conduit à une surestimation du facteur de bioaccumulation.

L'utilisation de ces facteurs dans les équations (13) et (14) suppose :

- une biodisponibilité de la substance identique, quelle que soit la voie d'exposition et la matrice ingérée par les animaux ;
- une alimentation des animaux basée uniquement sur du fourrage, sans utilisation de grains (a priori moins exposés et donc moins contaminés).

Enfin, les équations de régression obtenues pour les facteurs de bioaccumulation dans le lait et la viande ont été établies à partir d'une connaissance sur les transferts plus réduite que dans le cas du poisson. L'incertitude liée à ces deux équations est donc plus importante. C'est la raison pour laquelle, le guide d'utilisation de EUSES pointe l'équation décrivant le transfert des substances des aliments au bétail comme un élément à améliorer dans le modèle.

3.5 CONCENTRATION DANS L'EAU DE BOISSON

3.5.1 EQUATIONS UTILISÉES

L'eau de boisson est produite à partir d'eau d'origine superficielle ou souterraine.

La concentration dans les eaux de boisson est estimée à l'aide de l'expression suivante :

$$C_{eb} = \max (C_{eau_super} \cdot F_{pur} , C_{eau_souter}) \quad (16)$$

avec C_{eb} : concentration dans l'eau de boisson [kg_c.m⁻³]

F_{pur} : facteur de purification de l'eau de surface [-]

C_{eau_super} : concentration de substance dissoute de l'eau superficielle [kg_c.m⁻³]

C_{eau_souter} : concentration de substance dans l'eau souterraine [kg_c.m⁻³]

Dans le cas d'une eau d'origine superficielle, un facteur de purification est appliqué pour tenir compte des traitements effectués sur l'eau prélevée. Ce facteur est défini en fonction du coefficient de partage octanol-eau, de la constante de Henry et de la biodégradabilité de la substance. Selon les valeurs de ces paramètres, une valeur discrète comprise entre 0,0625 et 1 est attribuée au paramètre F_{pur} .

3.5.2 NATURE DU MODÈLE UTILISÉ

La concentration dans l'eau de boisson n'est pas calculée à partir d'un modèle décrivant les procédés physico-chimiques de traitement mis en place. Il s'agit simplement d'une table proposée par Hrubec et Toet (1992) pour estimer l'impact des traitements sur la qualité de l'eau. Selon Jager et al. (cités par Schwartz, 2000), l'application d'un coefficient unique de 0,15, quelle que soit la substance serait plus réaliste, compte-tenu de la pauvreté de la base de données disponible.

3.6 CALCUL DE LA DOSE TOTALE D'EXPOSITION DE L'HOMME

3.6.1 EQUATIONS UTILISÉES

$$DOSE_{tot} = \sum_i DOSE_i \quad (17)$$

avec $DOSE_{tot}$: dose totale d'exposition journalière [kg_c.kg⁻¹.j⁻¹]

$DOSE_i$: dose d'exposition journalière par la voie d'exposition i [kg_c.kg⁻¹.j⁻¹]

(i : ingestion d'eau, de poisson, de végétaux, de viande et de lait, inhalation d'air)

Les doses ingérées sont calculées de la manière suivante :

$$DOSE_j = \frac{C_j \cdot IH_j}{P} \quad (18)$$

avec $DOSE_j$: dose d'exposition journalière par la voie d'exposition j [kg_c.kg⁻¹.j⁻¹]
(j : ingestion d'eau, de poisson, de végétaux, de viande et de lait)
 C_j : concentration dans le milieu j [kg_c.kg_{frais}⁻¹] ou [kg_c.m⁻³]
 IH_j : quantité de milieu j ingéré par jour [kg_{frais}.j⁻¹] ou [m³.j⁻¹]
 P : Poids d'un adulte [kg]

tandis que la dose inhalée est calculée en tenant compte de la différence de biodisponibilité entre la voie respiratoire et la voie orale :

$$DOSE_{air} = \frac{F_{resp} \cdot C_{air} \cdot IH_{air}}{P} \cdot \frac{BIO_{inh}}{BIO_{oral}} \quad (19)$$

avec $DOSE_{air}$: dose d'exposition journalière par la voie respiratoire [kg_c.kg⁻¹.j⁻¹]
 C_{air} : concentration de substance dans l'air [kg_c.m⁻³]
 IH_{air} : volume d'air inhalé par jour [m³.j⁻¹]
 F_{resp} : fraction respirable [-]
 BIO_{oral} : facteur de biodisponibilité de la substance par voie orale [-]
 BIO_{inh} : facteur de biodisponibilité de la substance par voie respiratoire [-]

3.6.2 SIMPLIFICATION ET HYPOTHÈSES SOUS-TENDANT LE CALCUL DE LA DOSE TOTALE D'EXPOSITION

L'exposition par ingestion de sol, l'exposition par contact cutané avec le sol et les expositions par l'eau superficielle, lors de baignades, ou l'eau de distribution, lors des soins corporels, ne sont pas prises en compte.

Concernant les différentes voies d'exposition retenues, il convient de noter que :

- l'ensemble de la viande consommée est assimilé à du bœuf. Or les autres animaux producteurs de viande peuvent avoir un régime alimentaire différent entraînant une contamination différente de la viande (les grains étant par exemple moins exposés que l'herbe de pâturage). Par ailleurs, l'équation de régression (15) suppose un taux moyen de matière grasse de 25% dans la viande. Ce pourcentage paraît élevé par rapport aux types de viandes consommées par la population. Cette hypothèse tend à surestimer l'exposition ;
- la concentration de substance présente dans les différents produits laitiers consommés (lait, ultra-frais, fromages, beurre) est assimilée à celle du lait de vache. Si la substance s'accumule dans la fraction lipidique des produits alimentaires, comme l'utilisation d'équations de régression basées sur le Kow le laisse supposer, assimiler la concentration de substance dans les fromages et dans le beurre (produits ayant une teneur en matière grasse beaucoup plus élevée que celle du lait) à celle du lait tend à sous-estimer la dose d'exposition liée à l'ingestion de différents produits laitiers dans leur ensemble. A cet égard, l'étude menée par l'AFSSA (2000) sur l'exposition de la population française aux dioxines montre que le beurre est l'aliment qui a la contribution la plus forte à l'exposition de la population (19,4 % de l'exposition totale contre 3,5 % pour le lait) ;

- la concentration calculée dans le poisson se rapporte à celle de poissons d'eaux douces. Or, la population dans son ensemble a une consommation beaucoup plus orientée vers les poissons d'eau de mer que vers les poissons de lacs ou de rivières. Un scénario plus réaliste viserait donc à prendre en compte la consommation de poissons d'eau de mer ;
- la bioaccessibilité de la substance en fonction des matrices ingérées n'est pas prise en compte. Si les données toxicologiques sont établies à partir d'essais réalisés à partir d'eau contaminée, il est possible que la substance soit alors plus accessible que lorsqu'elle est ingérée avec un aliment. Dans ce cas, le fait de ne pas prendre en compte la bioaccessibilité réduite de la substance tend à surestimer le risque et à sous-estimer la marge de sécurité, calculée à l'aide de cette dose d'exposition.

3.7 NATURE ET DOMAINE D'APPLICATION DE L'ENSEMBLE DU MODÈLE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT

Le modèle développé pour estimer l'exposition de l'homme via l'environnement est un modèle simple, rapide à utiliser, qui se veut raisonnablement majorant et adapté pour des évaluations de risque de niveau simple ou intermédiaire. D'après le guide technique (European Commission, 2003, Technical guidance Document : TGD, part I), ce modèle allié au scénario générique a pour but de mettre en évidence des problèmes potentiels, il ne vise pas à fournir une estimation réelle de l'exposition humaine en un lieu et à une époque donnés.

Il comporte de nombreuses hypothèses simplificatrices, génératrices d'incertitudes, en particulier pour la modélisation des concentrations dans la chaîne alimentaire.

Le calcul des concentrations dans ces milieux, à partir des équations fournies pour estimer par défaut les coefficients de transfert, repose toujours sur le coefficient de partition octanol-eau (K_{ow}), supposé être un bon indicateur de la partition des substances organiques entre les phases aqueuses et les phases lipidiques, caractéristiques des êtres vivants. Le coefficient de partage octanol-eau joue donc un rôle important dans le modèle, en l'absence de mesures permettant de renseigner les paramètres de transfert de manière spécifique.

Ces équations ne s'appliquent qu'aux substances organiques non dissociées. Les concentrations de substances inorganiques, comme les métaux, ne peuvent donc pas être estimées à partir des équations fournies. Quant aux substances organiques partiellement ionisées, seule la fraction non dissociée, qui doit être estimée en fonction du pH, peut être traitée à l'aide de ces équations.

Enfin, les équations de régression (2), (3), (7), (15) et (16) ont été établies pour un intervalle de variation donné du coefficient de partage octanol-eau, qui correspond au domaine de validité de l'équation. Or, les domaines de validité des différentes équations ne se recoupent que sur une zone restreinte allant d'un log K_{ow} de 3,0 à 4,6. En toute rigueur, l'ensemble du modèle décrit ci-dessus n'est donc applicable que pour des substances présentant un caractère lipophile moyen, avec un log K_{ow} compris entre 3,0 et 4,6. Son utilisation en dehors de ce domaine constitue une source supplémentaire d'incertitudes.

4 PRÉSENTATION ET CONCLUSIONS DES TRAVAUX DE SCHWARTZ SUR LE MODÈLE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT

En 2000, Schwartz a rédigé une thèse, à l'université de Osnabrück, intitulée « Quality Assurance of Exposure Models for Environmental Risk Assessment of Substances » (Schwartz, 2000). Cette thèse a consisté à évaluer les modèles décrits dans le TGD. Les objectifs étaient d'élaborer une méthode d'évaluation d'une part et de définir les conditions d'application et les limites de ces modèles d'autre part.

Le rapport de thèse comporte ainsi :

- une analyse de sensibilité,
- une analyse des incertitudes paramétriques,
- une comparaison des résultats fournis par le modèle avec des résultats issus de mesures, ces comparaisons portant à la fois sur certaines parties du modèle et sur l'ensemble du système de calcul,
- une analyse des concepts théoriques sur lesquels reposent les algorithmes de calcul,
- une vérification de la stabilité et de l'absence d'erreurs dans le logiciel EUSES, associé au TGD,
- une comparaison de certains des modules de calcul utilisés avec d'autres approches de calcul.

Ce travail a été réalisé sur la version 1.0 du logiciel EUSES dans le cadre d'un scénario d'émission régional. Il a porté sur la chaîne de modélisation allant de l'émission à la dose d'exposition reçue par l'homme via l'environnement. Il intègre donc à la fois la modélisation des concentrations dans les milieux environnementaux (air, eau superficielle, eau souterraine, sols) par l'application du modèle multimédia SimpleBox (intégré dans EUSES) et le module de calcul de l'exposition de l'homme par l'environnement, auquel la présente étude s'intéresse spécifiquement.

Les changements apportés entre la version 1.0 et 2.0 de EUSES n'ont qu'un impact indirect sur l'exposition de l'homme, à travers d'éventuelles modifications des concentrations calculées dans les milieux environnementaux.

Les seules modifications pouvant avoir un impact sur les concentrations estimées dans les milieux environnementaux sont :

- l'introduction d'équations permettant de corriger la valeur des paramètres physico-chimiques (pression de vapeur, solubilité) pour tenir compte de la différence de température entre les conditions de mesure des paramètres physico-chimiques et la température dans l'environnement,
- l'introduction de relations structure-activité complémentaires pour la définition du coefficient de partage carbone organique-eau (Koc), en fonction du type de substances étudiées ;
- le remplacement de la version 2.0 de SimpleBox pour le calcul des concentrations dans l'environnement au niveau régional par la version 3.0, avec notamment l'introduction d'un compartiment marin.

Aussi, les conclusions issues de l'étude réalisée par Schwartz sur le module d'exposition de l'homme via l'environnement dans la version 1 de EUSES peuvent être, pour l'essentiel, reformulées dans le cadre de la présente étude.

4.1 OBSERVATIONS ISSUES DE L'ÉTUDE DE COMPARAISON DES RÉSULTATS FOURNIS PAR LE MODÈLE AVEC DES DONNÉES ISSUES DE MESURE

Schwartz a travaillé sur 17 substances aux propriétés différentes (5 polychlorodibenzo-p-dioxines (PCDD), 6 polychlorobiphényles (PCB), le di-(2-éthylhexyl)phtalate (DEHP), le 1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexaméthylcyclopenta-[g]-2 benzopyrane (HHCB), des alkyl benzène sulfonates linéaires (LAS), l'acide éthylènediaminotétraacétique sel disodique (EDTA), le 1,2-dichloréthane (EDC) et le benzène) pour lesquelles des mesures dans les milieux sont suffisamment nombreuses. Il a ainsi comparé les concentrations modélisées aux concentrations mesurées et la dose totale d'exposition de l'homme calculée par le modèle avec celle estimée par d'autres méthodes.

Les résultats de modélisation sont apparus particulièrement éloignés des données de mesures dans le cas des substances très lipophiles ($\log Kow > 6$) et des substances dégradables. Les travaux de comparaison montrent qu'une précision de l'ordre d'un facteur 10 entre les résultats de la modélisation et ceux issus des mesures peut rarement être atteinte.

Les concentrations dans le poisson sont surestimées jusqu'à deux ordres de grandeur. Pour les substances très lipophiles et persistantes, les incertitudes peuvent être encore plus fortes, mais dans certains cas, les concentrations peuvent également être sous-estimées. Les raisons du phénomène de surestimation semblent liées à la non prise en compte du métabolisme et de la croissance des poissons. Quant au phénomène de sous-estimation, il peut être dû à la non prise en compte de la biomagnification pour le poisson consommé par l'homme. La teneur en lipides du poisson considéré joue également un rôle (des concentrations très élevées ayant été mesurées sur des poissons gras). Compte-tenu des mauvais résultats obtenus pour des substances présentant un $\log Kow > 6$, Schwartz remet en cause la validité de l'équation (3).

Les facteurs de biotransfert dans la viande et dans le lait définis à l'aide des équations (15) et (16) conduisent la plupart du temps à une surestimation. Cette surestimation peut être supérieure à deux ordres de grandeur pour les substances très lipophiles. Elle peut être liée au fait que l'état stationnaire n'est pas atteint. Elle peut aussi être due à une absorption réduite de ces substances et/ou à une métabolisation par l'animal. Toutefois, pour les PCB les plus persistants, les résultats obtenus avec le modèle sont bons (moins d'un ordre de grandeur de différence par rapport aux mesures).

Le module « plante » tend en revanche à sous-estimer les concentrations. De fortes déviations sont obtenues pour les dioxines. La prise en compte du dépôt par voie particulaire améliore les prédictions du modèle. Mais, l'estimation de la fraction de substances présente dans l'air sous forme particulaire (par l'équation de Junge) semble générer une forte incertitude. L'auteur conclut à la nécessité d'intégrer dans le modèle une approche plus réaliste pour estimer ce paramètre (modification des paramètres utilisés par défaut pour renseigner l'équation de Junge, ou approche alternative).

Les doses totales d'exposition sont surestimées de 1 à 3 ordres de grandeur. Mais d'après l'auteur, certaines valeurs définies par défaut pour les quantités de média ingérées sont peu réalistes. Ainsi, la valeur par défaut pour la quantité de végétaux aériens consommés par jour est égale à 1,2 kg dans EUSES, alors que la consommation de fruits et légumes (hors pommes de terre) par adulte est en moyenne de 260 gramme/jour selon l'étude INCA (AFSSA, 2000). L'utilisation de données plus appropriées permettrait d'obtenir de meilleurs résultats (avec des déviations d'environ un ordre de grandeur par rapport aux doses attendues).

Pourtant, même si les doses totales d'exposition sont assez proches des doses attendues, les résultats ne sont souvent corrects qu'en apparence, la contribution des voies d'exposition à la dose totale, fournie par le modèle, étant différente. Schwartz donne deux explications à ce problème :

- la première est liée à un manque de différentiation dans la manière de prendre en compte les différents aliments consommés. En effet, même en remplaçant les concentrations de PCDD calculées par le modèle dans les milieux d'exposition par des concentrations mesurées, le modèle ne fournit pas une répartition réaliste de la dose d'exposition entre les différentes voies : la contribution des produits laitiers à la dose d'exposition totale est toujours fortement sous-estimée ;
- la seconde est due au fait que le modèle surestime certaines concentrations et en sous-estime d'autres, ces défauts tendant au final à se compenser. Dans le cas des PCDD, Schwartz montre ainsi que l'estimation d'une dose totale d'exposition proche de la dose attendue est due à une surestimation des concentrations dans le lait et la viande, compensée par la sous-estimation de la concentration dans le poisson.

4.2 ANALYSE DE SENSIBILITÉ ET D'INCERTITUDE

Schwartz a réalisé une analyse de sensibilité et d'incertitude sur l'ensemble de la chaîne de modélisation allant de l'émission au calcul de la dose d'exposition.

Il a d'abord réalisé une analyse de sensibilité en faisant varier tour à tour chaque paramètre d'un pourcentage donné et en regardant l'impact sur le résultat. Cette analyse a montré que pour un éventail de substances aux propriétés variées la dose d'exposition totale se révèle sensible à la majorité des paramètres du modèle (40% des paramètres ayant un impact négligeable sur le résultat). En fonction du type de paramètres qui paraissent avoir un effet sensible sur le modèle, trois classes de substances peuvent être distinguer : les lipophiles, les solubles et les volatiles.

Ensuite, il a réalisé une évaluation probabiliste de la dose totale d'exposition pour les différentes substances sélectionnées. Des distributions statistiques ont été attribuées aux paramètres d'entrée du modèle, ces distributions étant préférentiellement de type lognormal. Toutefois, pour certains paramètres, en l'absence de données suffisantes, des distributions triangulaires ou uniformes ont parfois été utilisées . La contribution des différents paramètres à la variance du résultat final a été calculée par la méthode des rangs. Par cette méthode, le nombre de paramètres qui paraissent avoir un impact sur le résultat est relativement réduit. En effet, pour la chaîne de modélisation allant de l'émission jusqu'à la dose d'exposition totale, le nombre de paramètres présentant un

coefficient de corrélation supérieur à 0,01 est compris entre 5 et 17, selon les substances étudiées.

Ces travaux montrent que le module d'exposition est très dépendant du caractère lipophile des substances et que plus une substance est lipophile, plus l'incertitude liée au résultat est forte. L'exposition à ces substances est principalement due à l'ingestion indirecte de produits issus de la chaîne alimentaire. Pour certaines de ces substances, Schwartz a calculé que le rapport entre le 90^{ème} et le 10^{ème} percentile de la courbe de distribution de la dose totale d'exposition pouvait atteindre 4^{1/2} ordres de grandeur¹. Il s'agit d'incertitude vraie, la variabilité des paramètres décrivant l'environnement ou les quantités de média ingérés ou inhalés par la cible jouant alors peu de rôle. Ce sont les paramètres relatifs au sous-module dédié au calcul de la concentration dans les plantes qui paraissent jouer le rôle le plus important, notamment le facteur b (facteur correctif permettant de tenir compte de la différence de nature entre l'octanol et les lipides des plantes) et la teneur en lipide des plantes. Pour quelques substances lipophiles, la pression de vapeur joue aussi un rôle important, car elle détermine la partition entre fraction particulaire et fraction gazeuse et donc la capacité de la substance à entrer dans la chaîne alimentaire par la contamination des plantes (seule la contamination par la fraction gazeuse est prise en compte dans EUSES, la contamination des plantes par dépôt particulaire à partir de l'atmosphère n'étant pas considérée).

L'incertitude sur le résultat est plus faible pour les substances moins lipophiles, ou les substances plutôt hydrophiles (selon la terminologie employée par l'auteur). Pour ces substances, la voie principale d'exposition est l'ingestion directe d'eau ou l'inhalation d'air. Dans ce cas, le rapport entre le 90^{ème} et le 10^{ème} percentile de la courbe de distribution de la dose totale d'exposition ne dépasse pas un ordre de grandeur. L'incertitude sur le résultat est principalement liée à la variabilité de la quantité d'eau ingérée ou d'air inhalé ou à certains paramètres environnementaux utilisés dans SimpleBox.

Enfin, il faut noter que l'estimation de la dose totale d'exposition à partir des valeurs ponctuelles de paramètres fournis dans le TGD correspond, pour la plupart des substances étudiées, aux faibles percentiles de la courbe de distribution calculée. L'estimation de la dose totale d'exposition de l'homme via l'environnement calculée par EUSES, à partir des valeurs de paramètres fournies par défaut, ne constitue donc pas une estimation pire-cas, au regard de l'intervalle de variation obtenu pour le résultat, avec les distributions choisies par l'auteur pour les paramètres d'entrée.

¹ Compte-tenu de la pauvreté des données disponibles pour définir les distributions liées aux paramètres d'entrée, Schwartz juge l'incertitude sur les queues de distributions élevée et limite l'analyse de la distribution de la donnée de sortie aux valeurs comprises entre le 10^{ème} et le 90^{ème} percentiles.

5 ELÉMENTS D'ANALYSE COMPLÉMENTAIRE CONCERNANT LE MODULE D'EXPOSITION DE L'HOMME VIA L'ENVIRONNEMENT

Afin de compléter les travaux réalisés par Schwartz qui s'est intéressé à un scénario régional, l'INERIS a réalisé quelques essais de calcul complémentaires pour analyser la sensibilité et l'incertitude du modèle dans le cadre d'un scénario local. Contrairement à Schwartz, l'analyse réalisée par l'INERIS porte exclusivement sur le module d'exposition de l'homme via l'environnement, sans prendre en compte l'incertitude liée au calcul des concentrations dans les milieux environnementaux (air, eau souterraine, eau superficielle, sols, eau du sol), qui constituent des données d'entrée du module d'exposition.

5.1 MÉTHODE

Comme pour Schwartz, les travaux menés ont consisté :

- en une analyse de sensibilité monoparamétrique. Chacun des paramètres d'entrée est modifié tour à tour d'un pourcentage donné (1%) et l'effet sur le résultat est mesuré à l'aide de l'indicateur suivant :

$$S(x_i) = \frac{Y_{0,99 \cdot x_i} - Y}{0,99 \cdot x_i - x_i} \cdot \frac{x_i}{Y}$$

avec $Y_{0,99 \cdot x_i}$: valeur du résultat lorsque x_i est multiplié par 0,99.

Ce type d'analyse renseigne sur la sensibilité du modèle de « manière locale », autour de la valeur initiale du paramètre, mais ne permet pas de tenir compte du fait que les différents paramètres peuvent eux-mêmes présenter des coefficients de variation plus ou moins grands et donc *in fine* conduire à des plages de résultats plus ou moins larges.

- en une analyse probabiliste de la dose totale d'exposition par la méthode Monte-Carlo. Une analyse de l'impact des différents paramètres sur le résultat a ainsi pu être obtenue par la méthode des rangs, ainsi qu'une mesure de l'incertitude du résultat, grâce à la courbe de distribution de la dose totale d'exposition.

Pour réaliser ce travail, les équations du module d'exposition ont été retranscrites sous EXCEL. La feuille de calcul obtenue a été vérifiée en comparant les résultats fournis par cette dernière avec ceux de EUSES 2.0. L'analyse probabiliste a été menée à l'aide du logiciel Crystal Ball.

Ces travaux ont porté sur quatre substances aux propriétés physico-chimiques variées, et donc susceptibles de se comporter de manière différente dans l'environnement :

- le 2-méthoxy-2-méthylbutane, très volatil, soluble et non biodégradable,
- l'éthylène, moins soluble et moins volatil, mais facilement biodégradable et ayant un caractère lipophile intermédiaire,
- le 2-butoxyéthanol acétate, soluble, moins volatil et facilement biodégradable,
- et la 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine (2,3,7,8 TCDD), très lipophile et persistante dans l'environnement.

Par ailleurs, pour la 2,3,7,8 TCDD, la dose d'exposition calculée à partir de l'ensemble des valeurs fournies par défaut dans le modèle a été comparée au résultat obtenu en employant des valeurs spécifiques, issues de la littérature scientifique, pour les coefficients de transfert et les facteurs de bioconcentration.

Pour les trois premières substances, des flux d'émission dans l'air, dans le sol et en sortie de station d'épuration ont été définis. Pour la 2,3,7,8 TCDD, faute de données sur les émissions, seul un flux dans l'air représentatif des émissions d'un incinérateur a été considéré (1 gramme/an), ainsi qu'une concentration dans les eaux superficielles ($2,2 \cdot 10^{-11}$ mg/l correspondant à la concentration totale mesurée dans les rivières en Grande-Bretagne). A partir des paramètres par défaut de EUSES, les concentrations dans les milieux environnementaux, servant de données d'entrée au modèle d'exposition, ont été calculées.

5.2 RÉSULTATS

5.2.1 CALCUL DES CONCENTRATIONS ET DOSES D'EXPOSITION POUR LES QUATRE SUBSTANCES ÉTUDIÉES

Le tableau suivant présente les concentrations calculées dans les milieux environnementaux par EUSES.

Tableau 1 : Concentrations dans les milieux environnementaux

Données d'entrée	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD
Concentration dans l'eau superficielle (dissous) (kg/m^3)	$1,43 \cdot 10^{-4}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$5,14 \cdot 10^{-5}$	$1,33 \cdot 10^{-14}$
Concentration dans l'eau souterraine (kg/m^3)	$4,00 \cdot 10^{-6}$	$5,52 \cdot 10^{-6}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$8,40 \cdot 10^{-14}$
Concentration l'eau du sol agricole (kg/m^3)	$4,00 \cdot 10^{-6}$	$5,52 \cdot 10^{-6}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$8,40 \cdot 10^{-14}$
Concentration dans l'eau du sol de prairie (kg/m^3)	$9,51 \cdot 10^{-7}$	$1,28 \cdot 10^{-6}$	$8,13 \cdot 10^{-6}$	$9,81 \cdot 10^{-14}$
Concentration dans le sol de prairie (kg/kg)	$4,98 \cdot 10^{-10}$	$9,99 \cdot 10^{-9}$	$1,01 \cdot 10^{-8}$	$7,03 \cdot 10^{-13}$
Concentration dans l'air (kg/m^3)	$2,29 \cdot 10^{-9}$	$2,29 \cdot 10^{-9}$	$2,29 \cdot 10^{-9}$	$7,86 \cdot 10^{-16}$

A partir des concentrations ci-dessus et des paramètres fournis par défaut dans le TGD et repris dans EUSES, le module de calcul de l'exposition de l'homme via l'environnement donne les résultats suivants. Les paramètres physico-chimiques utilisés pour chacune des substances sont présentés en annexe 1.

Tableau 2 : Doses totales d'exposition et contribution des différentes voies à l'exposition, en utilisant l'ensemble des paramètres par défaut de EUSES

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD
Dose totale d'exposition (kg.kg ⁻¹ .j ⁻¹)	3,5.10 ⁻⁹	4,3.10 ⁻⁹	2,6.10 ⁻⁹	2,2.10 ⁻¹³
Contribution des différentes voies à la dose totale d'exposition (%)				
ingestion d'eau	58	7	56	0
ingestion de poisson	28	71	12	0,5
ingestion de légumes-feuilles	0	0	8	29
ingestion de légumes-racines	0,8	10	6	9
ingestion de viande	0	0	0	39
ingestion de lait	0	0	0	23
inhalation d'air	14	12	19	0,1

Dans le cas de la 2,3,7,8 TCDD, qui est une substance bien étudiée, une deuxième simulation a été réalisée à l'aide de valeurs spécifiques pour les coefficients de transfert. Des coefficients de transfert du sol vers les différents types de végétaux consommés par l'Homme, un coefficient de transfert de l'air vers la partie aérienne des plantes, et un coefficient de transfert vers les graisses animales ont été sélectionnés, suite à une analyse critique d'articles scientifiques originaux (INERIS, 2003). Ils ont permis de renseigner les paramètres utilisés dans EUSES, après transformation mathématique. Les valeurs utilisées sont présentées en annexe 2.

Tableau 3 : Doses totales d'exposition et contribution des différentes voies à l'exposition, en utilisant les valeurs de coefficients de transfert spécifiques.

	2,3,7,8 TCDD
Dose totale d'exposition (kg.kg ⁻¹ .j ⁻¹)	9,7.10 ⁻¹⁴
Contribution des différentes voies à la dose totale d'exposition (%)	
ingestion d'eau	0
ingestion de poisson	1
ingestion de légumes-feuilles	45
ingestion de légumes-racines	0
ingestion de viande	26
ingestion de lait	28
inhalation d'air	0,2

Les contributions liées à l'ingestion de viande et de lait ne sont significatives que pour la substance la plus lipophile, c'est-à-dire la 2,3,7,8 TCDD. Comme pour Schwartz, la part liée à l'ingestion directe de végétaux reste élevée, que les équations de régression de EUSES soient utilisées pour définir les coefficients de transfert ou non.

Globalement, l'utilisation de coefficients de transfert spécifiques conduit à réduire d'un facteur 2, la dose d'exposition totale, ce qui est peu, en regard des incertitudes relevées par Schwartz. Toutefois, il faut noter une réduction d'un facteur 1000 de la concentration dans les légumes-racines.

5.2.2 ANALYSE DE SENSIBILITÉ MONOPARAMÉTRIQUE

L'analyse de sensibilité a été réalisée :

- d'une part sur l'ensemble des paramètres d'entrée du modèle, les paramètres étant renseignés à l'aide de l'ensemble des valeurs fournies par défaut dans EUSES,
- d'autre part sur les coefficients de bioconcentration ou de transfert, paramètres intermédiaires, calculés par le modèle à l'aide des équations de régression ou fournis comme données d'entrée pour la deuxième simulation réalisée pour la 2,3,7,8 TCDD.

Le Tableau 4 présente les paramètres d'entrée pour lesquels l'indicateur $S(x)$ est supérieur à 0,1.

Tableau 4 : Indicateur de sensibilité des paramètres d'entrée du modèle pour les quatre substances étudiées

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD ¹	2,3,7,8 TCDD ²
Paramètres relatifs à la substance étudiée					
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow	0,8	4,9	0,5	4,5	
Solubilité : S				0,2	
Pression de vapeur : VP					0,3
Masse molaire : M				-0,2	
Température d'ajustement : Temp _{ajust} ³	-58		-1,4	3,0	6,6
Température de mesure de la pression de vapeur : Temp _{test_VP}			1,5	-0,8	-6,1
Température de mesure de la solubilité : Temp _{test_S}	-58		-0,3	0,2	
Température de fusion : Temp _{fusion}				4,0	4,4
Paramètres environnementaux					
Température ambiante : Temp				-3,7	-4,2
Surface des particules d'aérosols : Surf _{aer}				-0,3	-0,3
Facteur de correction : b		0,6	0,1	4,5	
Masse volumique des végétaux : ρ _p		-0,1	-0,1	-1,0	-0,5
Teneur en lipides des plantes : F _{lipide}				0,3	
Surface foliaire de la partie aérienne des plantes (pour 1 m ² de sol) : A _l				0,7	0,5
Conductance : g _l				0,7	0,5
Volume de la partie aérienne des plantes (pour 1 m ² de sol) : V _l				-0,7	-0,5
Taux de dilution par croissance des plantes : k _g				-0,7	-0,5

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD ¹	2,3,7,8 TCDD ²
Facteur de conversion : $conv_{herbe}^4$				0,6	0,5
Quantité d'herbe ingérée par les bovins : IC_{herbe}				0,6	0,5
Taux de matière grasse dans les produits laitiers consommés : t_{prod_lait}				0,6	0,3
Taux de matière grasse dans la viande consommée : t_{viande}				0,6	0,3
Paramètres relatifs à l'homme					
Consommation journalière de légumes-feuilles : $IH_{lég-feuilles}$				0,3	0,5
Consommation journalière de légumes-racines : $IH_{lég-racines}$		0,1			
Consommation journalière de poisson : $IH_{poisson}$	0,3	0,7	0,1		
Consommation journalière d'eau de boisson : IH_{eau}	0,6		0,6		
Consommation journalière de viande : IH_{viande}				0,4	0,3
Consommation journalière de produits laitiers : IH_{lait}				0,2	0,3
Fraction de particules inhalable : F_{resp}	0,1	0,1	0,2		
Volume d'air inhalé par jour : IH_{air}	0,1	0,1	0,2		
Facteur de biodisponibilité par la voie orale BIO_{oral}	-0,1	-0,1	-0,2		
Facteur de biodisponibilité par la voie respiratoire : BIO_{inh}	0,1	0,1	0,2		
Masse corporelle de la cible : P	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0

¹ : analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide des équations de régression de EUSES

² : Analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide des valeurs spécifiques de la 2,3,7,8 TCDD

³ : La valeur des paramètres physico-chimiques n'est pas toujours définie à la même température. Un ajustement est réalisé sur la valeur de la pression de vapeur et la solubilité pour que les valeurs utilisées dans le modèle correspondent à la même température de référence (fixée à 25°C).

⁴ : la concentration dans les végétaux est estimée en poids frais par le modèle, tandis que la quantité de fourrage ingérée par le bétail est définie en poids sec, ce qui nécessite d'utiliser dans le modèle un facteur de conversion appelé $conv_{herbe}$.

Le *Tableau 5* présente les facteurs de bioconcentration et les coefficients de transfert pour lesquels l'indicateur S(x) est supérieur à 0,1.

Tableau 5 : Indicateurs de sensibilité des facteurs de bioconcentration et les coefficients de transfert pour les quatre substances étudiées

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD¹	2,3,7,8 TCDD²
Facteur de bioconcentration dans le poisson : BCF _{poisson}	0,3	0,7	0,1		
Coefficient de partition plante-eau : K _{pw}		0,1	0,1	0,3	
Coefficient de partition plante-air : K _{la}				0,2	
Facteur de concentration dans le flux ascendant : TSCF					
Facteur de transfert vers la viande : BAF _{viande}				0,4	
Facteur de transfert vers les produits laitiers : BAF _{lait}				0,2	
Facteur de transfert vers les graisses : B _t					0,5

¹ : analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide des équations de régression de EUSES.

² : Analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide des valeurs spécifiques de la 2,3,7,8 TCDD

Les paramètres ayant les indicateurs de sensibilité ($S(x_i)$) les plus élevés ($>0,5$) sont présentés en gras dans les tableaux ci-dessus.

Le Tableau 4 montre que le modèle se révèle sensible à de plus nombreux paramètres (22 paramètres), dans le cas de la 2,3,7,8 TCDD, que pour les trois autres substances (de 10 à 13 paramètres selon les substances), et que les paramètres ayant un indicateur de sensibilité élevé sont également plus nombreux pour cette substance.

Quelle que soit la substance étudiée, le log Kow est un paramètre ayant un impact important sur le résultat, si l'utilisateur du modèle a recours aux équations de régression pour définir la valeur des coefficients de transfert. En effet, le coefficient de partage octanol-eau joue alors un rôle dans l'estimation de la concentration de chacun des milieux d'exposition, hormis la concentration dans l'air.

Quelques paramètres présentent aussi des indicateurs de sensibilité très élevés avec des valeurs supérieures à 1. C'est le cas pour les températures auxquelles ont été mesurées la solubilité et la pression de vapeur de la substance ($Temp_{test-S}$, $Temp_{test-VP}$), la température d'ajustement, la température de fusion ($Temp_{fusion}$), la température ambiante ($Temp$), le coefficient b (facteur de correction permettant de tenir compte de la différence de nature entre les lipides de la plante et l'octanol) et le coefficient de partage octanol-eau. Les valeurs d'indicateurs très élevées obtenues sont liées au fait que ces paramètres interviennent dans des relations de type exponentiel. Toutefois, certains de ces paramètres se caractérisent par une très faible ou une absence d'incertitude ($Temp_{fusion}$, $Temp_{ajust}$, $Temp_{test-S}$, $Temp_{test-VP}$) et ne contribuent finalement pas à l'incertitude du résultat.

Compte-tenu de la linéarité des équations 1, 13 et 14 (pour le calcul des concentrations dans le poisson, la viande et le lait), les indicateurs de sensibilité du facteur de bioconcentration dans le poisson, du coefficient de partition plante-eau et des coefficients de transfert vers la viande et le lait présentent des valeurs égales aux contributions de ces voies à la dose totale d'exposition (ainsi, la valeur de 0,7 obtenue pour le facteur de bioconcentration dans le cas de l'éthylène correspond au fait que l'ingestion de poisson représente 70% de la dose totale d'exposition). La même remarque peut être faite pour tous les paramètres relatifs à l'homme présentés dans le Tableau 4. Pour une raison identique, le poids intervenant de manière inversement proportionnelle sur le calcul de chacune des doses d'exposition, présente, pour toutes les substances, un indicateur de sensibilité égal à -1.

5.2.3 ANALYSE PROBABILISTE DES INCERTITUDES

Pour les quatre substances étudiées ci-dessus, une analyse probabiliste de la dose totale d'exposition a été réalisée, par la méthode Monte-Carlo.

5.2.3.1 DÉFINITION DE LA DISTRIBUTION STATISTIQUE DES PARAMÈTRES D'ENTRÉE

Une distribution statistique a été définie pour chacun des paramètres d'entrée présentant un indicateur de sensibilité supérieur à 0,1² (cf. Tableau 4 et Tableau 5), à l'exception de quelques paramètres caractérisés par une incertitude très faible (comme les températures auxquelles ont été mesurées la solubilité et la pression de vapeur, la température de fusion, la masse molaire des substances) ou une absence d'incertitude (comme la température d'ajustement).

Les distributions définies pour les paramètres d'entrée sont présentées en annexe 3. Pour un certain nombre de paramètres, les données disponibles sont très limitées. La définition d'une distribution est donc délicate. Certaines des distributions utilisées sont reprises de l'étude de Schwartz. Toutefois, compte-tenu de la pauvreté des données disponibles, l'INERIS a parfois préféré retenir des distributions uniformes ou triangulaires à la place des distributions lognormales, largement employées par Schwartz dans son étude (par exemple, pour la consommation d'herbe et de sol par les bovins).

Dans le cas de la 2,3,7,8 TCDD, lorsque les valeurs de coefficients de transfert estimées par les équations de régression de EUSES sont remplacées par des valeurs spécifiques, des distributions statistiques ont également pu être définies.

En outre, par rapport aux travaux réalisés par Schwartz, des distributions statistiques complémentaires ont été introduites dans cette étude, pour tenir compte de l'erreur résiduelle, liée à la prédiction des coefficients de transfert ou des facteurs de bioconcentration par des équations de régression.

A l'aide des publications originales, présentant les relations pour l'estimation des différents coefficients de transfert et des facteurs de bioconcentration, l'écart-type résiduel s_r a été recalculé pour chaque relation, et une variable aléatoire e représentant l'erreur liée à la prédiction de ces coefficients a été introduite dans la feuille de calcul Excel retranscrivant le module d'exposition. En effet,

$$y_k = \hat{y}_k + e_k$$

avec y_k : une réalisation de y

\hat{y}_k : la valeur prédite pour y_k par le modèle

e_k : l'erreur de mesure, encore appelé résidu de y_k

L'erreur e_k est supposée suivre une distribution normale de moyenne 0 et d'écart-type s_r . s_r est calculé à partir du jeu de données ayant servi à définir la relation, selon l'expression suivante :

$$s_r = \sqrt{\frac{\sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - p}}$$

avec n : le nombre de points (x_i, y_i) ayant permis de définir la relation,

\hat{y}_i : la valeur prédite pour y_i par la relation,

2 : Quelques essais de calcul ont montré que la prise en compte de paramètres complémentaires, caractérisés par une forte incertitude ou variabilité, mais présentant un indicateur de sensibilité inférieur à 0,1, ne modifie pas les résultats obtenus.

p : le nombre de paramètres dans la relation.

Ainsi, pour le facteur de bioconcentration dans le poisson estimé à l'aide de la relation établie par Veith et al. (cf. équation 2 du présent rapport), la variable aléatoire e_{BCF} suit une loi normale centrée, d'écart-type 0,447 ($e_{BCF} \sim N(0 ; 0,45)$).

L'erreur résiduelle liée à l'équation 3 (du présent rapport), permettant l'estimation du facteur de bioconcentration dans le poisson pour un log Kow supérieur à 6, n'a pas été calculée. Dans cette étude, seule la 2,3,7,8 TCDD possède un log Kow supérieur à 6, et l'exposition liée à l'ingestion de poisson y est faible. Toutefois, la comparaison des coefficients r^2 obtenus pour l'équation 2 ($r^2=0,90$) et l'équation 3 ($r^2=0,78$) montre que les prédictions attendues avec l'équation 2 doivent être de meilleure qualité que celles obtenues lorsque l'équation 3 s'applique.

Pour le facteur de concentration dans le flux ascendant de la plante (TSCF) défini selon la relation établie par Briggs et al. (cf. équation 7 du présent rapport), la variable aléatoire e_{TSCF} suit une loi normale centrée, d'écart-type 0,15 ($e_{TSCF} \sim N(0 ; 0,15)$).

Pour le facteur de transfert dans le lait (BAF_{lait}) estimée à l'aide de la relation établie par Travis et al. (cf. équation 16 du présent rapport), la variable aléatoire $e_{BAFlait}$ suit une loi normale centrée, d'écart-type 0,87 ($e_{BAFlait} \sim N(0 ; 0,87)$). Pour le facteur de transfert dans la viande (BAF_{viande}) définie selon la relation établie par les mêmes auteurs (cf. équation 15 du présent rapport), la variable aléatoire $e_{BAFviande}$ suit une loi normale centrée, d'écart-type 0,97 ($e_{BAFviande} \sim N(0 ; 0,97)$).

5.2.3.2 DISTRIBUTION DES DE LA DOSE D'EXPOSITION TOTALE

Le tableau suivant fournit un résumé des principales données statistiques relatives aux courbes de distributions obtenues pour la dose totale d'exposition des quatre substances étudiées. L'ensemble des données est présenté en annexe 4.

Tableau 6 : Données statistiques relatives à la distribution de la dose totale d'exposition pour les différentes substances étudiées

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD ¹	2,3,7,8 TCDD ²
médiane (kg/kg/j)	$3,2 \cdot 10^{-9}$	$5,1 \cdot 10^{-9}$	$2,5 \cdot 10^{-9}$	$5,2 \cdot 10^{-13}$	$1,2 \cdot 10^{-13}$
moyenne (kg/kg/j)	$3,5 \cdot 10^{-9}$	$9,2 \cdot 10^{-9}$	$2,6 \cdot 10^{-9}$	$6,7 \cdot 10^{-12}$	$1,4 \cdot 10^{-13}$
coefficient de variation	0,4	1,8	0,3	32	0,6
90 ^{ème} perc. / 10 ^{ème} perc.	2,5	9,7	2,2	127	4,6
Percentile de la distribution correspondant à l'estimation ponctuelle	70	45	69	33	40

¹ : utilisation des relations de régression de EUSES pour définir les valeurs des coefficients de transfert

² : utilisation de valeurs de coefficients de transfert spécifiques

La distribution la plus étalée est obtenue pour la 2,3,7,8 TCDD, lorsque les coefficients de transfert sont estimés à partir des relations par défaut présentes dans EUSES (coefficient de variation égal à 32). Le remplacement des coefficients de transfert estimés par les relations de régression de EUSES par des valeurs spécifiques permet de réduire considérablement l'incertitude liée au résultat (coefficient de variation inférieure à 1). Bien que plus faible, le coefficient de variation obtenu pour l'éthylène témoigne d'une incertitude relativement importante, avec une queue de distribution très étalée. Comme pour Schwartz, les incertitudes les plus élevées sont obtenues pour les substances les plus lipophiles.

Enfin, compte-tenu de distributions statistiques attribuées aux paramètres d'entrée, l'estimation ponctuelle de la dose totale d'exposition pour la 2,3,7,8 TCDD et l'éthylène est inférieure à la médiane de la courbe de distribution obtenue.

5.2.3.3 ANALYSE DE SENSIBILITÉ

Crystal Ball détermine la sensibilité du modèle aux différents paramètres par la méthode des rangs. Contrairement à l'analyse monoparamétrique réalisée précédemment, qui ne reposait que sur la structure du modèle et les relations mathématiques entre la variable de sortie et les variables d'entrée, l'analyse réalisée ici prend également en compte l'incertitude liée aux variables d'entrée.

Pour chaque substance, la liste des paramètres présentant un pourcentage de contribution à la variance supérieure à 5 % est fournie ci- dessous.

Tableau 7 : Sensibilité du modèle aux paramètres d'entrée : pourcentage de contribution à la variance (%)

	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD (1)	2,3,7,8 TCDD (2)
Paramètres relatifs à la substance étudiée					
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow		34		23	
Erreur résiduelle sur le facteur de bioconcentration : e_{BCF}	26	48	9		
Erreur résiduelle sur le facteur de transfert dans la viande : $e_{BAFviande}$				24	
Erreur résiduelle sur le facteur de transfert dans le lait : $e_{BAFlait}$				13	
Paramètres environnementaux					
Facteur de correction : b		12		20	
Conductance : g_l					23
Taux de dilution par croissance des plantes : k_g					11
Volume de la partie aérienne des plantes (pour 1 m ² de sol) : V_l					12
Taux de matière grasse des produits laitiers: t_{prod_lait}					20
Paramètres relatifs à l'homme					
Consommation journalière d'eau de boisson : $I_{H_{eau}}$	60		68		
Consommation journalière de produits laitiers : $I_{H_{lait}}$					7
Masse corporelle des hommes: P_h	6		9		
Masse corporelle des femmes: P_f	6		7		

¹ : analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide des équations de régression de EUSES

² : analyse de sensibilité portant sur la simulation réalisée à l'aide de valeurs de coefficients de transfert spécifiques

L'analyse de sensibilité montre que dans le cas la 2,3,7,8 TCDD, substance pour laquelle EUSES a généré la distribution la plus large, les paramètres ayant le plus d'influence sur le résultat sont : les erreurs résiduelles sur les équations de régression des coefficients de transfert dans la viande et dans le lait, le coefficient de partage octanol-eau (paramètre sur lequel repose ces relations) et les paramètres intervenant dans le calcul de la contamination de la partie aérienne des plantes à partir de l'atmosphère, en particulier le paramètre b. L'incertitude caractérisant la dose d'exposition obtenue pour cette substance très lipophile est donc une incertitude vraie, liée à celle de ces paramètres et des équations de régression utilisées pour le transfert vers les aliments d'origine animale.

Lorsque les équations de régression utilisées dans EUSES sont remplacées par des valeurs spécifiques, l'incertitude sur la dose totale d'exposition est fortement réduite. De nombreux paramètres peuvent alors jouer un rôle équivalent sur le résultat. Parmi ceux-ci, il y a les nouveaux paramètres introduits, comme le taux de matière grasse dans les produits laitiers, les paramètres intervenant dans le module de calcul de la contamination de la partie aérienne des plantes à partir de l'atmosphère, comme la conductance, mais aussi des paramètres relatifs à l'homme et aux consommations alimentaires. La variance de la dose totale d'exposition est liée donc d'une part à des incertitudes vraies, mais aussi à la variabilité des comportements humains.

Dans le cas de l'éthylène, substance ayant un caractère lipophile intermédiaire, les paramètres contribuant le plus à la variance sont ceux liés à la définition du facteur de bioconcentration dans le poisson (erreur résiduelle sur l'équation de régression du BCF et coefficient de partage octanol-eau).

Pour le 2-méthoxy-2-méthylbutane et le 2-butoxyéthanol acétate, pour lesquels la voie principale d'exposition est l'ingestion d'eau, la variance du résultat est due en premier lieu, à la variabilité de la quantité d'eau ingérée.

Ces résultats concordent avec ceux de Schwartz. Toutefois, la prise en compte de l'erreur résiduelle liée à l'utilisation des équations de régression permet de mettre en évidence, pour les substances très lipophiles, l'impact des incertitudes des coefficients de transfert dans le lait et la viande sur le résultat.

6 SYNTHÈSE ET CONCLUSION

Les équations utilisées pour estimer la concentration dans le poisson, la viande et le lait reposent sur un simple facteur de bioconcentration ou bioaccumulation. A l'inverse, le modèle développé pour la partie aérienne des plantes cherche à représenter de manière mathématique les transferts de substances chimiques entre la plante et les médias avec lesquels celle-ci est en contact. Mais dans tous les cas, les équations font intervenir le coefficient de partition octanol-eau (K_{ow}) qui joue donc un rôle très important dans le modèle d'exposition de l'homme via l'environnement. Compte-tenu du domaine de validité des différentes équations du modèle, l'ensemble de ces équations n'est applicable, en toute rigueur, que pour des substances persistantes, non ionisables, ayant un caractère lipophile intermédiaire, avec un $\log K_{ow}$ (coefficient de partage octanol-eau), compris entre 3,0 et 4,6.

Pour les substances peu lipophiles, solubles ou volatiles, l'exposition est liée principalement à des voies d'exposition directes (ingestion d'eau ou inhalation d'air). Pour ces substances, les incertitudes sur la dose totale d'exposition calculées par EUSES sont limitées (1 ordre de grandeur entre le 90^{ème} et le 10^{ème} percentile dans l'étude de Schwartz, intégrant la dispersion dans l'environnement à partir de l'émission, un facteur 2-3 dans cette étude utilisant les concentrations dans l'environnement comme données d'entrée) et sont liées principalement à la variabilité des paramètres d'exposition. Le modèle fournit, pour ces substances, une contribution des voies à la dose totale d'exposition correcte.

Pour les substances lipophiles ou très lipophiles, l'exposition est indirecte et met en jeu la chaîne alimentaire. Les résultats du modèle pour ces substances posent des problèmes : répartition de l'exposition entre les différentes voies erronée, concentrations déviant de 1 à 3 ordres de grandeur par rapport aux mesures, courbes de distribution de la dose d'exposition très étendues et incertitudes très importantes (jusqu'à 4^{1/2} ordre de grandeur entre le 90^{ème} et le 10^{ème} percentile dans l'étude de Schwartz, 2 ordres de grandeur dans cette étude).

Ces mauvais résultats sont liés à l'estimation des concentrations dans le poisson, les végétaux, le lait et la viande et la détermination des quantités d'aliments consommés.

6.1 ESTIMATION DE LA CONCENTRATION DE SUBSTANCE DANS LE POISSON

L'étude montre que le facteur de bioconcentration dans le poisson peut être un facteur d'incertitude prépondérant dans l'estimation de la dose d'exposition (cas de l'éthylène). Schwartz indique que l'erreur est de l'ordre de 1, voire 2 ordres de grandeur dans certains cas, pour des substances présentant un log Kow compris entre 1 et 6. Cette observation concorde avec les données obtenues pour l'éthylène : des valeurs de BCF comprises entre 1 et 4 sont trouvées dans la littérature, alors que la valeur estimée par EUSES est égale à 91. Toutefois, le remplacement de la valeur estimée par les valeurs trouvées dans la littérature ne modifie que d'un facteur 3 la dose totale d'exposition. Il modifie, en revanche, la contribution des voies d'exposition, l'exposition par ingestion de poisson devenant alors secondaire.

Bien que l'incertitude liée à l'utilisation de l'équation 3 (permettant d'estimer le BCF pour des substances présentant un log Kow supérieur à 6) n'ait pas été testée ici, l'étude de Schwartz indique que des différences supérieures à deux ordres de grandeur peuvent être obtenues sur le BCF par rapport aux valeurs mesurées. Pour ces substances très lipophiles, EUSES surestime les valeurs de BCF dans certains cas, mais dans d'autres cas, le modèle les sous-estime. Pour certains congénères des polychlorobiphényles, une sous-estimation de près de 3 ordres de grandeur du BCF a été observée. Un calcul réalisé pour le PCB 138, à partir de mesures dans l'environnement, recueillies par Schwartz, montre que la concentration dans le poisson peut alors être sous-estimée d'un facteur 25 et la dose d'exposition totale d'un facteur 10.

De nouveaux travaux visant à définir un modèle pour estimer le facteur de bioconcentration dans les animaux aquatiques pour les substances très lipophiles semblent donc nécessaires. Les pistes citées par Schwartz sont :

- une analyse plus approfondie des données disponibles en vérifiant les conditions d'obtention des données (concentration de substances dans l'eau ne dépassant pas la solubilité, durée suffisante des tests),
- l'expression d'un BCF se rapportant à la concentration de substance dans la fraction lipidique, la concentration de substance variant beaucoup en fonction de la teneur en lipide du poisson,
- l'analyse des différences de concentration entre poissons d'eaux douces et poissons d'eau de mer. La concentration de substance dans les poissons d'eau de mer paraît plus faible (deux ordres de grandeur) et la consommation des populations est principalement orientée vers ce type de poisson ;
- l'investigation des relations basées sur la structure de molécules (avec comme paramètre un indice de connectivité moléculaire³), plutôt que sur le coefficient de partage octanol-eau.

En revanche, le recours à des modèles physiologiques pour représenter le devenir des substances dans le poisson nécessite la définition de nombreux paramètres, difficiles à renseigner, autrement que par des valeurs génériques, et paraît trop complexe dans un outil de criblage comme EUSES.

6.2 ESTIMATION DES CONCENTRATIONS DE SUBSTANCES DANS LES VÉGÉTAUX

Concernant les végétaux, Schwartz a mis en évidence une surestimation de l'exposition liée à l'ingestion de ces aliments, pour les substances lipophiles, qu'ils s'agissent de la partie racinaire ou de la partie supérieure. Les calculs réalisés ici avec EUSES pour la 2,3,7,8 TCDD montrent la même tendance.

Pour la partie racinaire, cette surestimation semble liée au calcul de la concentration dans les racines. En effet, le remplacement des concentrations calculées par EUSES par des concentrations mesurées réduit considérablement la contribution de cette voie à la dose d'exposition. Le modèle utilisé repose en fait sur l'hypothèse d'un équilibre entre l'eau du sol et la racine. Or, cette hypothèse semble peu réaliste pour de grosses racines, comme les carottes. Quant aux pommes de terre, il s'agit de tubercules et sur un plan botanique, elles ne peuvent être assimilées à des racines. L'équilibre peut aussi être difficile à atteindre pour des substances, très lipophiles, d'où une surestimation des concentrations estimées dans les légumes-racines.

Le modèle développé pour la partie aérienne des plantes est plus complexe. Il permet de prendre en compte la contamination des plantes à la fois par l'air et par le sol. En revanche, il nécessite un ensemble de paramètres spécifiques aux végétaux, qu'il est difficile de définir et qui sont finalement renseignés par l'attribution de valeurs génériques correspondant à une plante-type. Les fortes incertitudes des paramètres d'entrée du module « plante » se répercutent ainsi sur le résultat final. C'est le cas, en particulier, pour le facteur de correction b (supposé tenir compte de la différence de nature entre les lipides de la plante et l'octanol), qui intervient dans une relation exponentielle à la fois pour le calcul des concentrations dans la partie aérienne et dans la partie racinaire des plantes, ainsi que pour la conductance, le volume foliaire et le taux de croissance des plantes.

³ Index de connectivité moléculaire : index basé sur la topographie des molécules

Malgré une surestimation de la dose d'exposition liée à l'ingestion de légumes-feuilles, de légumes-fruits et de fruits, l'étude de Schwartz montre que le modèle sous-estime de 1,3 à 2,4 unités log, les concentrations dans la partie aérienne des plantes pour les PCDD possédant de 5 à 8 atomes de chlore. Cette sous-estimation des concentrations peut être liée à la non prise en compte du dépôt de particules sur les végétaux. En effet, dans l'air, ce type de substance est principalement sous forme particulaire, et Kaupp (cité par Schwartz) a montré, à partir de feuilles de maïs, exposées à de l'air filtré et non filtré, que la contamination pouvait être 2 à 3 fois plus importante pour les PCDD les plus chlorés, dans le second cas. L'intégration du dépôt de particules dans le modèle améliore effectivement les valeurs de concentration estimées dans les plantes par rapport aux mesures. Mais les meilleurs résultats sont obtenus lorsque le paramètre « fraction de substance sous forme particulaire : F_{pa} » se voit attribuer une valeur mesurée et non estimée. Les valeurs estimées par EUSES à l'aide de la relation de Junge (équation 10) sont éloignées des valeurs mesurées. La sensibilité du modèle d'exposition à ce paramètre intermédiaire conduit Schwartz à recommander un ajustement des paramètres utilisés pour calculer F_{pa} , et une mise à jour de la méthode d'estimation de ce paramètre, en fonction des avancées scientifiques.

Si la dose d'exposition liée à l'ingestion de la partie supérieure des végétaux est surestimée, malgré la sous-estimation de la concentration, il semble que cela soit dû à une surestimation des quantités consommées et à un manque de différenciation entre les différents types de végétaux. En effet, dans la catégorie légumes-feuilles de EUSES, sont regroupés les légumes-feuilles, les fruits et légumes-fruits, ainsi que les céréales. Or ces trois derniers types d'aliments, moins exposés que les légumes-feuilles (ayant une surface spécifique élevée), présentent généralement des concentrations de substance plus faibles. D'où finalement, l'existence d'hypothèses simplificatrices dont les effets sur le résultat tendent à se compenser.

6.3 ESTIMATION DES CONCENTRATIONS DE SUBSTANCES DANS LE LAIT ET LA VIANDE

L'analyse probabiliste de la dose totale d'exposition a montré que les substances très lipophiles présentaient les incertitudes les plus fortes et qu'une part prépondérante de cette incertitude était liée à l'estimation des concentrations dans le lait et la viande consommée, à l'aide des équations de régression 15 et 16.

Ces équations sont applicables pour des substances ayant un log Kow allant jusqu'à 6,5. Au-delà, EUSES attribue une valeur de $2,5 \cdot 10^{-2}$ à BAF_{lait} et de $7,9 \cdot 10^{-2}$ à BAF_{viande} , calculée avec cette valeur de log Kow.

Or, les données recueillies par Schwartz et les données disponibles pour d'autres substances comme les HAP (Rychen, 2004) montrent que le modèle peut surestimer de manière importante les concentrations dans le lait et la viande, pour les substances métabolisées (les équations 15 et 16 ayant été établies pour des substances peu métabolisées) ou faiblement absorbées par l'animal.

Compte-tenu de l'importance de ces voies d'exposition pour les substances très lipophiles, et des nombreuses hypothèses, non vérifiées (atteinte de l'état stationnaire en particulier) sur lesquelles repose l'estimation des concentrations

dans ces matrices, certaines équipes de chercheurs développent (école polytechnique fédérale de Lausanne) ou ont développé des modèles pharmacocinétiques pour décrire le devenir de la substance dans l'organisme de l'animal. Ce type de modèle requiert toutefois beaucoup plus de paramètres d'entrée.

Parallèlement, Dowdy et al. (1996) ont développé une relation de régression permettant de définir le facteur de transfert dans le lait à partir de l'indice de connectivité moléculaire des substances. L'intérêt de ce type de relation est d'éviter le recours au coefficient de partage octanol-eau, caractérisé par une incertitude souvent importante (plusieurs ordres de grandeur) pour les substances très lipophiles. Par ailleurs, la relation définie est caractérisée par une incertitude plus faible que celle de Travis et al. (respectivement $r^2 = 0,88$ et $r^2 = 0,55$).

Enfin, l'équation 15 est établie sous l'hypothèse d'un taux de matière grasse dans la viande de 25%, ce qui paraît bien plus élevé que la concentration moyenne de matière grasse dans la viande consommée. De plus, cette équation se réfère à de la viande bovine. Or les autres types de viande peuvent présenter une contamination différente liée à un régime alimentaire différent des animaux (céréales moins contaminées que l'herbe).

A l'inverse, l'équation 16 est définie pour le lait et devrait être corrigée pour tenir compte d'un taux de matière grasse plus important dans les autres produits laitiers consommés (potentiellement plus contaminés par les substances lipophiles que le lait). En d'autres termes, il serait préférable d'établir un modèle pour estimer la concentration des substances lipophiles dans la fraction lipidique des aliments et d'estimer parallèlement la fraction lipidique des aliments consommés par la population.

Comme pour les aliments d'origine végétale, il y a donc un manque de différenciation entre les différents aliments consommés, ce qui est générateur d'incertitudes sur le résultat et peut conduire à une distribution erronée des différentes voies d'exposition.

En conclusion, les priorités d'amélioration du modèle d'exposition de l'homme via l'environnement semblent être :

- la définition du facteur de bioconcentration dans le poisson,
- la prise en compte du dépôt de particules sur les végétaux et l'estimation de la fraction de substance sous forme particulaire,
- la définition de modèles pour estimer les concentrations dans les graisses animales,
- une meilleure différenciation des aliments consommés avec la prise en compte des mécanismes de transfert propres à ces différents types d'aliments.

7 RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

AFSSA, Dioxines : données de contamination et d'exposition de la population française, Juin 2000

Briggs G., Bromilow R., Evans A., Relationships between lipophily and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barleys, *Pestic. Sci.* 13,495-504, 1982

Decisoneering, Crystal Ball 2000, Standard edition

Dowdy, D., McKone T., Hsieh D., Prediction of chemical biotransfer of organic chemicals from cattle diet into beef and milk using the molecular connectivity index, *Environ. Sci. Technol.*, 30 :984-989, 1996

European Commission, Technical Guidance Document on risk assessment of substances following european regulations and directives, Second edition, 2003

European Commission, European Union System for the Evaluation of Substances 2.0 (EUSES 2.0). Prepared for the European Chemicals Bureau by the National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands. Available via the European Chemicals Bureau, 2004

Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS), Bonnard R., Paramètres physico-chimiques de transfert des dioxines pour l'évaluation des risques, DRC-03-45959 / ERSA-n°272-RBn, 2003

Junge C., In : Fate of pollutants in the air and water environment. I.H. Sufflet (ed), Wiley interscience, 7-25, 1977

National Institute of Public Health, RIVM, Hubrec J. , Toet C. , Predictability of the removal of organic compounds by drinking water treatment, Report 71401007, 1992

Rychen G., Fismes J., Feidt C., Crépineau C., Schwartz C., Le point des connaissances sur les transferts de HAP dans la chaîne alimentaire, Dioxines et polluants organiques persistants, Journées techniques nationales, Ademe et Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable, 10 & 11 Mars 2004

Schwartz, Quality assurance of exposure models for environmental risk assessment of substances, Doctorat thesis, Institute of Environmental Systems Research, University of Osnabrück, 2000

Trapp S., Matthies M., Generic one-compartment model for uptake of organic chemicals by foliar vegetation, *Environ. Sci. Technology*, 29 : 2333-2338, 1995

Trapp S., Matthies M., Rectification to Trapp and Matthies (1995), *Environ. Sci. Technol.*, 30 : 360, 1996

Travis C, Arms A., Bioconcentration of organics in beef, milk, and vegetation, *Environmental Science and Technology*, 22, 271-274, 1988

Veith G., Defoe D., Bergsted B., Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals in fish, *J. Fish Board Can.*, 36, 1040-1048, 1979

Volatier, Enquête INCA individuelle et nationale sur les consommations alimentaires, Editions Technique & Documentation, ISBN : 2-7430-0426-6, 2000

8 LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation	Nombre de pages
Annexe 1	Valeurs des paramètres physico-chimiques utilisées pour les quatre substances étudiées	1
Annexe 2	Valeurs spécifiques des paramètres de transfert de la 2,3,7,8 TCDD utilisées dans l'étude	2
Annexe 3	Distributions statistiques définies pour les paramètres d'entrée du modèle	8
Annexe 4	Distributions et données statistiques sur la dose totale d'exposition aux quatre substances étudiées	39

ANNEXE 1 : VALEURS DES PARAMÈTRES PHYSICO-CHIMIQUES UTILISÉES POUR LES QUATRE SUBSTANCES ÉTUDIÉES

Valeurs des paramètres physico-chimiques utilisées en données d'entrée dans EUSES

Paramètres	2-méthoxy-2-méthylbutane	éthylène	2-butoxyéthanol acétate	2,3,7,8 TCDD
Masse molaire : M (g/mol)	102	106	160	322
Pression de vapeur (Pa)	12000	930	40	$2,0 \cdot 10^{-7}$
Température de mesure de la pression de vapeur (°C)	25	20	20	25
Solubilité (g/l)	11	0,160	15	$1,93 \cdot 10^{-8}$
Température de mesure de la solubilité (°C)	20	25	25	25
log Kow	1,55	3,13	1,51	6,8
Température de fusion (°C)	-80	-94,5	-64	306
Biodégradabilité	non biodégradable	facilement biodégradable	facilement biodégradable	non biodégradable

ANNEXE 2 : VALEURS SPÉCIFIQUES DES PARAMÈTRES DE TRANSFERT DE LA 2,3,7,8 TCDD UTILISÉES DANS L'ÉTUDE

Les valeurs utilisées sont issues d'une revue critique de la littérature (INERIS, 2003) ayant permis de définir un jeu de données spécifiques et un intervalle de variation pour les différents paramètres physico-chimiques et coefficients de transfert de la 2,3,7,8 TCDD, ainsi que pour les congénères ayant un atome de chlore en position 2,3,7,8.

Les valeurs extraites de l'étude citée ci-dessus correspondent :

- au transfert du sol vers les légumes-racines : $K_{ps_root} = 5.10^{-3} \text{ kg}_{\text{sec}} (\text{sol}) / \text{kg}_{\text{frais}} (\text{végétaux})$,
- au transfert du sol vers les légumes feuilles et fruits : $K_{ps} = 0^{\wedge}$
- au transfert de l'air vers la partie aérienne des plantes : $K_{pa} = 1,03.10^{-4} \text{ m}^3 (\text{air}) / \text{kg}_{\text{frais}} (\text{végétaux})$,
- au transfert vers les graisses animales : $Bt = 1,8.10^{-1} \text{ j} / \text{kg}_{\text{mat. grasse}}$

Dans la mesure où il n'y a pas une stricte correspondance entre les paramètres ci-dessus et ceux employés dans EUSES, l'utilisation de ces données dans EUSES a nécessité différentes transformations mathématiques.

A partir des paramètres ci-dessus, les coefficients de partition et de transfert de EUSES ont été calculés de la manière suivante :

Coefficient de partition plante-eau : K_{pw}

$$K_{pw} = \frac{C_{\text{sol}} \cdot \text{conv}_{\text{sol}} \cdot K_{ps_root} \cdot \rho_p}{C_{\text{eau_du_sol}}}$$

avec K_{pw} : coefficient de partition plante-eau	$[\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}]$
C_{sol} : concentration dans le sol	$[\text{kg}_c \cdot \text{kg}_{\text{frais}}^{-1}]$
$C_{\text{eau_du_sol}}$: concentration dans l'eau du sol	$[\text{kg}_c \cdot \text{m}^{-3}]$
conv_{sol} : facteur de conversion tenant compte de la différence de masse volumique entre le sol sec et le sol humide	$[\text{kg}_{\text{frais}} \cdot \text{kg}_{\text{sec}}^{-1}]$
ρ_p : masse volumique de la plante (en poids frais)	$[\text{kg}_{\text{frais}} \cdot \text{m}^{-3}]$

Facteur de concentration dans le flux ascendant : TSCF

TSCF = 0 (pas de transfert du sol vers les parties aériennes des plantes)

♣ Différentes publications démontrent l'absence de contamination des feuilles et des fruits des végétaux à partir du sol.

Coefficient de transfert entre la plante et l'air : K_{la}

$$K_{la} = Kpa \cdot r_p$$

avec K_{la} : coefficient de transfert entre la plante et l'air [-]

Facteur de bioaccumulation dans le lait : BAF_{lait}

$$BAF_{lait} = Bt \cdot t_{prod_lait}$$

avec t_{prod_lait} : taux de matière grasse dans les produits laitiers consommés [-]

$$t_{prod_lait} = 0,11$$

Ce taux de matière grasse a été déterminé en tenant compte des proportions de lait, d'ultra-frais, de fromages et de beurre consommés par un adulte et des taux de matière grasse propres à chacun de ces aliments (données issues de l'étude INCA (Volatier, 2000).

Facteur de bioaccumulation dans le lait : BAF_{lait}

$$BAF_{viande} = Bt \cdot t_{viande}$$

avec t_{viande} : taux de matière grasse dans la viande [-]

$$t_{viande} = 0,19$$

Le taux de matière grasse de la viande varie fortement selon les morceaux. Compte-tenu du type de viande et des morceaux les plus couramment consommés, la valeur retenue pour t_{viande} correspond à une estimation haute du taux de matière grasse moyen dans la viande consommée (données issues de www.boeuf.be/html/voedingswaarde_wetten_fr.ht).

Sources bibliographiques

[1] INERIS, Bonnard, Paramètres physico-chimiques de transfert des dioxines pour l'évaluation des risques, DRC-03-45959 / ERSA-n°272-RBn, 2003.

[2] Volatier, Enquête INCA individuelle et nationale sur les consommations alimentaires, Editions Technique & Documentation, ISBN : 2-7430-0426-6, 2000

[3] Des lipides en bonne quantité, document internet, www.boeuf.be/html/voedingswaarde_wetten_fr.htm

ANNEXE 3 : DISTRIBUTIONS STATISTIQUES DÉFINIES POUR LES PARAMÈTRES D'ENTRÉE DU MODÈLE

Notation adoptée pour la définition des distributions statistiques :

- U (I ; S) désigne une distribution uniforme de borne inférieure I et de borne supérieure S ;
- T (P ; I ; S) désigne une distribution triangulaire ayant pour valeur la plus probable P, pour borne inférieure I et pour borne supérieure S ;
- N (M ; ET) désigne une distribution normale de moyenne M et d'écart-type ET ;
- L (M ; ET) désigne une distribution lognormale de moyenne M et d'écart-type ET.

Paramètres environnementaux

Paramètre	Unité	Valeur par défaut	Distribution utilisée	Source utilisée pour définir la distribution
Température ambiante : Temp	°C	12	U (9,6 ; 14,8)	Borne inférieure : température moyenne annuelle de la région française la plus froide Borne supérieure : température moyenne annuelle de la région française la plus chaude
Surface des particules d'aérosols : Surf _{aer}	m ² .m ⁻³	10 ⁻²	T(3,5.10 ⁻⁴ ; 1,5.10 ⁻⁴ ; 1,1.10 ⁻³)	Valeurs fournies par Bidleman [1] Valeur la plus probable : conditions de bruit de fond avec des sources locales
Facteur de correction : b	-	0,95	L(0,95 ; 0,128)	Distribution issue de Schwartz [2]
Masse volumique des végétaux : ρ _p	kg _{rais} .m ⁻³	700	L(750 ; 166)	Distribution issue de [2]
Teneur en lipides des plantes : F _{lipide}	-	0,01	L(7,8.10 ⁻³ ; 9,0.10 ⁻³)	Distribution issue de [2]

Paramètres environnementaux (suite)

Surface foliaire de la partie aérienne des plantes (pour 1 m ² de sol) : A _l	m ²	5	T(2 ; 2 ;5)	Borne inférieure et valeur la plus probable : valeur définie par défaut dans le modèle TRIM [3] pour des cultures de type agricole Borne supérieure : valeur définie par défaut dans le modèle TRIM [3] pour une couverture végétale de type herbager
Conductance : g _l	m.j ⁻¹	86,4	T(86,4 ; 8,64 ; 432)	Distribution issue de [2]
Volume de la partie aérienne des plantes (pour 1 m ² de sol) : V _l	m ³	2.10 ⁻³	T(4,9.10 ⁻⁴ ; 4,9.10 ⁻⁴ ; 2,4.10 ⁻³)	Borne inférieure et valeur la plus probable : valeur calculée à partir des données de TRIM pour des cultures de type agricole [3] Borne supérieure : valeur maximale calculée à partir des données de TRIM pour une couverture végétale de type conifère [3]
Taux de dilution par croissance des plantes : k _g	j ⁻¹	0,035	L(4,3.10 ⁻² ; 2,2.10 ⁻²)	Distribution issue de [2]
Facteur de conversion : con _{herbe}	kg _{frais} .kg _{sec} ⁻¹	4	T(5 ; 4 ; 7,14)	Valeur la plus probable : valeur classiquement utilisée dans les études [4 ; 5] Borne inférieure : valeur par défaut de EUSES Borne supérieure : 90% percentile d'une distribution de valeurs issues d'un guide méthodologique sur le pâturage [6]
Quantité d'herbe ingérée par les bovins : IC _{herbe} ♦	kg _{sec}	16,9	T(16 ; 10 ;16,9)	Valeur la plus probable : valeur attendue d'après IAEA [7] et valeur classiquement utilisée [4, 5, 8] Borne inférieure : estimation basse de la consommation de fourrage par une vache laitière [7] Borne supérieure : valeur par défaut de EUSES
Quantité de sol ingéré par les bovins : IC _{soil} ♦	kg _{sec}	0,41	T(0,5 ; 0,1 ; 0,5)	Distribution issue de l'étude Nord-Cotentin [9]

♦ : Comme dans l'étude de Schwartz, un coefficient de corrélation de + 0,5 a été pris en compte entre la quantité d'herbe ingéré et le sol ingéré par les bovins.

Paramètres relatifs à l'homme

Paramètre	Unité	Valeur par défaut	Distribution utilisée	Source utilisée pour définir la distribution
Consommation journalière de légumes-feuilles : $IH_{\text{lég-feuilles}}$ (inclus les fruits et les céréales)	$kg_{\text{frais}} \cdot j^{-1}$	1,2	T(365 ; 182,5 ; 730)	Distribution issue des données de [9]. Le paramètre « quantité de légumes-feuilles consommés » dans EUSES intégrant les consommations de légumes-feuilles, de légumes-fruits, de fruits et de céréales, les consommations de légumes-feuilles, de légumes-fruits et de fruits reportées dans [9] ont été sommées. Les quantités de pain, biscottes, pâtes, riz et semoule de [10] ont été ajoutées.
Consommation journalière de légumes-racines : $IH_{\text{lég-racines}}$	$kg_{\text{frais}} \cdot j^{-1}$	0,384	T(0,12 ; 0,06 ; 0,24)	Distribution issue de [9].
Consommation journalière de poisson : IH_{poisson}	$kg_{\text{frais}} \cdot j^{-1}$	0,115	T(0,4 ; 0,2 ; 0,8)	Distribution issue de l'étude Nord-Cotentin [9] (<i>N.B. : les valeurs de base ayant servi à définir la distribution ne correspondent pas spécifiquement à des populations habitant en bord de mer</i>)
Consommation journalière d'eau de boisson : IH_{eau}	$m^3 \cdot j^{-1}$	0,002	L($2,1 \cdot 10^{-3}$; $8,4 \cdot 10^{-4}$)	Distribution issue de [2]
Consommation journalière de viande : IH_{viande}	$kg_{\text{frais}} \cdot j^{-1}$	0,301	T(0,15 ; 0,075 ; 0,3)	Distribution issue des données de [9]. Le paramètre « quantité de viande consommée » dans EUSES intégrant les différents types de viande consommée, les consommations de viande de bœuf, de porc, de volailles et de lapins, reportées dans [9] ont été sommées.
Consommation journalière de produits laitiers : IH_{lait}	$kg_{\text{frais}} \cdot j^{-1}$	0,561	T(0,32 ; 0,16 ; 0,64)	Distribution issue des données de [9]. Les consommations de lait et de produits laitiers reportées dans [9] ont été sommées.
Fraction de particules inhalable : F_{resp}	-	1	U(0,75 ; 1)	Borne inférieure : valeur utilisée dans le modèle HESP [11] Borne supérieure : valeur par défaut de EUSES
Volume d'air inhalé par jour : IH_{air}	$m^3 \cdot j^{-1}$	20	L(19 ; 5,7)	Distribution issue de [2]

Paramètres relatifs à l'homme (suite)

Paramètre	Unité	Valeur par défaut	Distribution utilisée	Source utilisée pour définir la distribution
Facteur de biodisponibilité par la voie respiratoire : BIO_{inh}	-	0,75	U(0,46 ; 1)	Distribution issue de [2]
Masse corporelle de la cible* : P	kg	70	L(73,7 ; 11,1) pour les hommes L(60,7 ; 11,2) pour les femmes	La moyenne et l'écart-type utilisés dans ces distributions sont issues de l'enquête INSEE datant de 1991 [12]. En l'absence d'informations sur la forme de la distribution des poids corporels dans la population, l'hypothèse d'une distribution lognormale a été faite.

* : Pour l'étude d'incertitudes, les doses d'exposition sont calculées par rapport à un poids corporel défini comme la moyenne du poids d'un homme et du poids d'une femme.

Paramètres physico-chimiques des substances

Paramètre	Unité	Valeur par défaut	Distribution utilisée	Source utilisée pour définir la distribution
2-méthoxy-2-méthylbutane				
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow	-	1,55	N(1,55 ; 2,1.10 ⁻²)	Données issues du rapport d'évaluation des risques de l'Union Européenne [13]
Ethylène				
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow	-	3,13	T(3,13 ; 3,13 ; 4,34)	Borne inférieure et valeur la plus probable issues de la base de données environnementales [14] Borne supérieure : valeur maximale de l'intervalle de valeurs fournies dans les fiches INERIS [15]
2-butoxyéthanol acétate				
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow	-	1,51	N(1,51 ; 1,5.10 ⁻¹)	Moyenne : issue de la base de données environnementales [14] En l'absence de donnée complémentaire, un écart-type égal à 10 % de la moyenne a été défini par défaut
2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine				
Coefficient de partage octanol-eau : log Kow	-	6,8	T(6,8 ; 5,4 ; 8,9)	Distribution définie à partir de la valeur ponctuelle et de l'intervalle de valeurs fournies pour le log Kow de la 2,3,7,8 TCDD dans l'étude [16]
Solubilité : S	kg.m ⁻³	1,93.10 ⁻⁸	T(1,93.10 ⁻⁸ ; 7,9.10 ⁻⁹ ; 4,8.10 ⁻⁷)	Distribution définie à partir de la valeur ponctuelle et de l'intervalle de valeurs fournies pour la solubilité de la 2,3,7,8 TCDD dans l'étude [17]
Pression de vapeur : VP	Pa	1,93.10 ⁻⁸	T(2,0.10 ⁻⁷ ; 9,9.10 ⁻⁸ ; 4,5.10 ⁻⁶)	Distribution définie à partir de la valeur ponctuelle et de l'intervalle de valeurs fournies pour la pression de vapeur de la 2,3,7,8 TCDD dans l'étude [16]

Paramètres spécifiques utilisés pour le transfert de la 2,3,7,8 TCDD dans les milieux d'exposition

Paramètre	Unité	Valeur par défaut	Distribution utilisée	Source utilisée pour définir la distribution
Coefficient de transfert de l'air vers la plante : K_{pa}	$m^3.kg_{\text{grais}}^{-1}$	$1,03.10^4$	$T(1,03.10^4 ; 8,3.10^3 ; 2,4.10^4)$	Distribution définie à partir des données de l'étude [16]
Coefficient de transfert vers les graisses animales : B_t	$j.kg_{\text{mat.grasse}}^{-1}$	$1,8.10^{-1}$	$T(1,8.10^{-1}; 1,4.10^{-1} ; 2,7.10^{-1})$	Distribution définie à partir des données de l'étude [16]
Taux de matière grasse dans les produits laitiers consommés : $t_{\text{prod_lait}}$	-	0,11	$U(0,04 ; 0,27)$	Borne inférieure correspondant au taux de matière grasse du lait entier [17] Borne supérieure correspondant au taux de matière grasse du fromage [17]
Taux de matière grasse dans la viande consommée : t_{viande}	-	0,19	$U(0,02 ; 0,22)$	Borne inférieure correspondant au taux de matière grasse du filet d'après [18] Borne supérieure correspondant à une viande de bœuf grasse d'après [18]

Erreurs résiduelles sur les coefficients de transfert

Erreurs résiduelles liées à l'équation de définition du	Distribution utilisée
Coefficient de transfert vers le lait BAF_{lait}	$N(0 ; 0,87)$
Coefficient de transfert vers la viande BAF_{viande}	$N(0 ; 0,97)$

Sources bibliographiques

- [1] Bidleman, T.F., Atmospheric processes : wet and dry deposition of organic compounds are controlled by their vapor-particle partitioning. Environmental Science and Technology 22 : 361-367
- [2] Schwartz, Quality assurance of exposure models for environmental risk assessment of substances, Doctorat thesis, Institute of Environmental Systems Research, University of Osnabrück, 2000
- [3] USEPA, Office of Air Quality Planning and Standards, TRIM.FaTE Reference Library Values, Background document, 2004
- [4] IPSN, Rommens, Etude bibliographique et choix des données par défaut pour les logiciels de calcul des impacts dosimétriques, Note technique SEGR/SAER/97 n°25
- [5] INERIS, Bonnard, Evaluation de l'impact sur la santé des rejets atmosphériques des tranches charbon d'une grande installation de combustion. Rapport final, DRC-03-45956 / ERSA-n°92-RBn, 2003
- [6] Swiss Agricultural Research, Mosimann, Méthodologie appliquée au pâturage, Guidelines, 2001
- [7] IAEA, Handbook of parameter values for the predictions of radionuclide transfer in temperate environments, 1994
- [8] US EPA, HHRAP : Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities, Peer review draft, Office of Solid Waste, 1998, EPA/530/0-98/001A
- [9] Groupe Radioécologique Nord-Cotentin, Analyse de sensibilité et d'incertitude sur le risque de leucémie attribuable aux installations nucléaires du Nord-Cotentin, 2002
- [10] Volatier, Enquête INCA individuelle et nationale sur les consommations alimentaires, Editions Technique & Documentation, ISBN : 2-7430-0426-6, 2000
- [11] Veerkamp W., Ten Berge W., 1994, The concepts of HESP, Reference Manual, Shell Internationale Petroleum Maatschappij, The Hague.
- [12] INSEE, Bodier, Le corps change, son image aussi, INSEE Première, Janvier 1995
- [13] European Risk Assessment Report, 2-méthoxy-2-méthylbutane, cas n°994-05-8, Final draft, Rapporteur Finland, R413_0409
- [14] INERIS, Base de données environnementales, Portail substances chimiques, <http://chimie.ineris.fr>
- [15] INERIS, Fiches de données toxicologiques et environnementales – Ethylbenzène, 2003, www.ineris.fr
- [16] INERIS, Bonnard, Paramètres physico-chimiques de transfert des dioxines pour l'évaluation des risques, DRC-03-45959 / ERSA-n°272-RBn, 2003.
- [17] AFSSA, Dioxines : données de contamination et d'exposition de la population française, Juin 2000

[18]: Des lipides en bonne quantité, document internet,
www.boeuf.be/html/voedingswaarde_wetten_fr.htm

ANNEXE 4 : DISTRIBUTIONS ET DONNÉES STATISTIQUES SUR LA DOSE TOTALE D'EXPOSITION AUX QUATRE SUBSTANCES ÉTUDIÉES