

RAPPORT D'ÉTUDE
N° 45959/25

03/01/2006

Etude d'intercomparaison de modèles
multimédia d'exposition

Etude d'intercomparaison de modèles multimédia d'exposition

MINISTERE DE L'ENVIRONNEMENT ET DU DEVELOPPEMENT DURABLE

R. BONNARD :

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 équivalents 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	A. CIOLELLA	P. HUBERT
Qualité	Ingénieur à la Direction des Risques Chroniques	Responsable de l'unité Evaluation des Risques Sanitaires	Directeur de la Direction des Risques Chroniques
Visa			

TABLE DES MATIÈRES

1	RÉSUMÉ	5
2	OBJECTIF DE L'ÉTUDE	6
3	OUTILS ET MÉTHODE	7
3.1	Présentation des modèles étudiés.....	7
3.1.1	CalTOX.....	7
3.1.2	HHRAP (Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities).....	8
3.1.3	HESP (Human Exposure to Soil Pollutant).....	9
3.2	Simulations réalisées	11
3.3	Travaux préparatoires à l'étude d'intercomparaison.....	12
3.3.1	Préparation des feuilles de calcul	12
3.3.1.1	CalTOX 2.3	12
3.3.1.2	CalTOX 4.0	12
3.3.1.3	HHRAP.....	12
3.3.1.4	HESP.....	12
3.3.2	Définition du jeu commun de données.....	13
3.3.3	Homogénéisation des données d'entrée	14
4	RÉSULTATS DES SIMULATIONS	15
4.1	Présentation générale des résultats	15
4.2	Présentation détaillée des résultats du cas 1	20
5	ANALYSE DES RÉSULTATS	27
5.1	Impact des paramètres environnementaux et des paramètres d'exposition.....	28
5.2	Impact des paramètres des substances	34
5.2.1	Paramètres les plus sensibles pour l'exposition à la 2,3,7,8 TCDD	35
5.2.2	Paramètres les plus sensibles pour l'exposition au naphthalène	38
5.2.3	Paramètres les plus sensibles sur l'exposition au cadmium	40
5.2.4	Paramètres les plus sensibles pour l'exposition au benzo(a)pyrène	42
5.3	Impact des équations de calcul.....	44
5.3.1	Résultats de la simulation 7 pour la 2,3,7,8 TCDD.....	45
5.3.2	Résultats de la simulation 7 pour le naphthalène	47

5.3.3 Résultats de la simulation 7 pour le cadmium.....	50
5.3.4 Résultats de la simulation 7 pour le benzo(a)pyrène	52
6 LEÇONS TIRÉES DE L'ÉTUDE	54
7 BIBLIOGRAPHIE	59
8 LISTE DES ANNEXES	61

1 RÉSUMÉ

Ce rapport présente les résultats d'une étude d'intercomparaison de modèles multimédia d'exposition, utilisés dans les évaluations de risques liés aux retombées des émissions atmosphériques de polluants par des installations classées pour l'environnement.

La démarche adoptée consiste à comparer les résultats obtenus avec plusieurs outils de modélisation, à partir d'un cas type théorique décliné selon deux options :

- l'une utilisant les valeurs de paramètres fournies par défaut dans chaque modèle,
- l'autre faisant intervenir un jeu de données défini par l'INERIS et identique pour tous les modèles.

Ce travail a porté sur les modèles CalTOX 2.3, CalTOX 4.0, HHRAP et HESP.

Les niveaux d'exposition pour quatre substances : la 2,3,7,8 TCDD, le naphtalène, le cadmium et le benzo(a)pyrène ont été estimés à l'aide de ces quatre modèles, au travers de sept étapes successives de simulation, visant à homogénéiser les hypothèses utilisées par les différents modèles.

Les calculs réalisés ont :

- mis en évidence
 - des divergences de résultats plus ou moins fortes en fonction des substances, avec, selon les modèles, des doses d'exposition pouvant varier de quatre ordres de grandeur,
 - et une représentation parfois différente des voies et des milieux environnementaux contribuant majoritairement à l'exposition, même lorsque les doses totales d'exposition estimées par les modèles sont proches ;
- souligné la sensibilité des modèles à certains paramètres environnementaux, à certains paramètres d'exposition et aux paramètres propres aux substances ;
- mis en évidence la forte variabilité et la forte incertitude caractérisant certains de ces paramètres, et la nécessité de procéder à un travail de redéfinition des valeurs à leur affecter, plutôt que d'utiliser les valeurs fournies par défaut dans les bases de données des modèles ;
- permis de mesurer l'impact lié aux différences de représentations mathématiques entre les modèles, de montrer ainsi la nécessité de choisir des modèles adaptés et l'importance d'intégrer, dans l'étude des incertitudes d'une évaluation des risques, la question de la pertinence des représentations mathématiques employées ;
- montré la nécessité d'approfondir la connaissance sur certains phénomènes de transfert et de poursuivre le travail de validation des modules de calcul correspondant dans les modèles utilisés.

2 OBJECTIF DE L'ÉTUDE

La modélisation constitue souvent un élément central des évaluations de risques sanitaires. Dans le cadre d'études à caractère prospectif (projet d'aménagement), il s'agit même d'un passage obligé. Or, l'expérience montre que des résultats très différents (plusieurs ordres de grandeur sur des concentrations d'exposition) peuvent être obtenus suite à l'utilisation de plusieurs modèles d'exposition.

Ces différences de résultats peuvent être dues :

- au fait que les modèles ont été conçus pour répondre à des objectifs différents. Ainsi, certains modèles correspondent à des outils génériques faits pour comparer l'impact potentiel de plusieurs sites dans des conditions standards, tandis que d'autres sont mieux adaptés à l'estimation des expositions à partir de scénarios spécifiques. Des modèles peuvent aussi avoir été construits pour évaluer les risques liés à une pollution présente dans le sol (liée à la fuite de cuves par exemple), tandis que d'autres sont adaptés pour représenter le devenir d'un polluant déposé à la surface du sol ;
- à la prise en compte ou non, par les modèles, de certains phénomènes physico-chimiques ou biologiques intervenant dans le devenir des polluants dans l'environnement ;
- aux équations, hypothèses et simplifications utilisées ;
- aux valeurs des paramètres utilisées.

En 2001, un premier repérage des modèles disponibles pour évaluer les expositions par voies indirectes liées aux retombées atmosphériques des installations classées a été réalisé (Rapport référencé INERIS DRC-01-25584/ERSA-RBn-n°445).

Une étude d'intercomparaison des modèles multimédia permettant d'estimer les expositions liées aux retombées atmosphériques est réalisée, avec les objectifs suivants :

- mieux connaître l'amplitude des différences de résultats générés par les différents modèles, voie par voie et milieu par milieu,
- aider à comprendre l'origine de ces différences de résultats,
- aider à mieux comprendre l'intérêt et à mieux connaître les limites de chaque modèle,
- aider à tirer des règles d'utilisation de ces différents outils selon les cas à traiter.

3 OUTILS ET MÉTHODE

Le principe de l'étude consiste à comparer les résultats intermédiaires et finaux obtenus avec plusieurs outils de modélisation, à partir d'un cas type, bâti par l'INERIS et décliné selon deux options,

- l'une déroulée à partir des valeurs de paramètres fournies par défaut dans chaque modèle,
- l'autre faisant intervenir un jeu de données définies par l'INERIS et identiques pour tous les modèles.

3.1 PRÉSENTATION DES MODÈLES ÉTUDIÉS

3.1.1 CALTOX

CalTOX (The University of California, 1993 a,b,c, 1997) est un modèle développé sous Excel, pour le Department of Toxic Substances Control (DTSC) dans le but d'aider à évaluer les risques pour la santé liés aux sols pollués. Il est toutefois possible d'évaluer les risques liés à d'autres sources de pollution, comme celles dues à une pollution atmosphérique.

CalTOX comporte deux parties principales : un modèle de transfert des polluants dans l'environnement, permettant de calculer les concentrations dans les compartiments environnementaux (sol superficiel, couche de sol cultivable, végétaux, air,...) et un modèle d'exposition, permettant de calculer les concentrations dans les compartiments d'exposition (fruits et légumes consommés, viande, œufs,...) et les doses d'exposition (cf. *Figure 1*).

Deux versions de CalTOX sont actuellement disponibles sur internet :

- la version 2.3 datant de 1997. Le logiciel et la documentation correspondante sont disponibles à l'adresse :
http://www.dtsc.ca.gov/ScienceTechnology/ctox_dwn.html.
Pour une présentation détaillée de cette version du logiciel, le lecteur pourra se reporter au rapport référencé INERIS DRC-04-45959/ERSA-n°97-RBn.
- la version 4.0 datant 2002. Le logiciel est disponible à l'adresse : <http://eetd.lbl.gov/ied/ERA/CalTOX>. En revanche, il n'existe, pour cette version, aucune documentation décrivant les modifications apportées au modèle.

Dans les deux cas, le modèle de transfert est basé sur une représentation de l'environnement à partir de plusieurs compartiments :

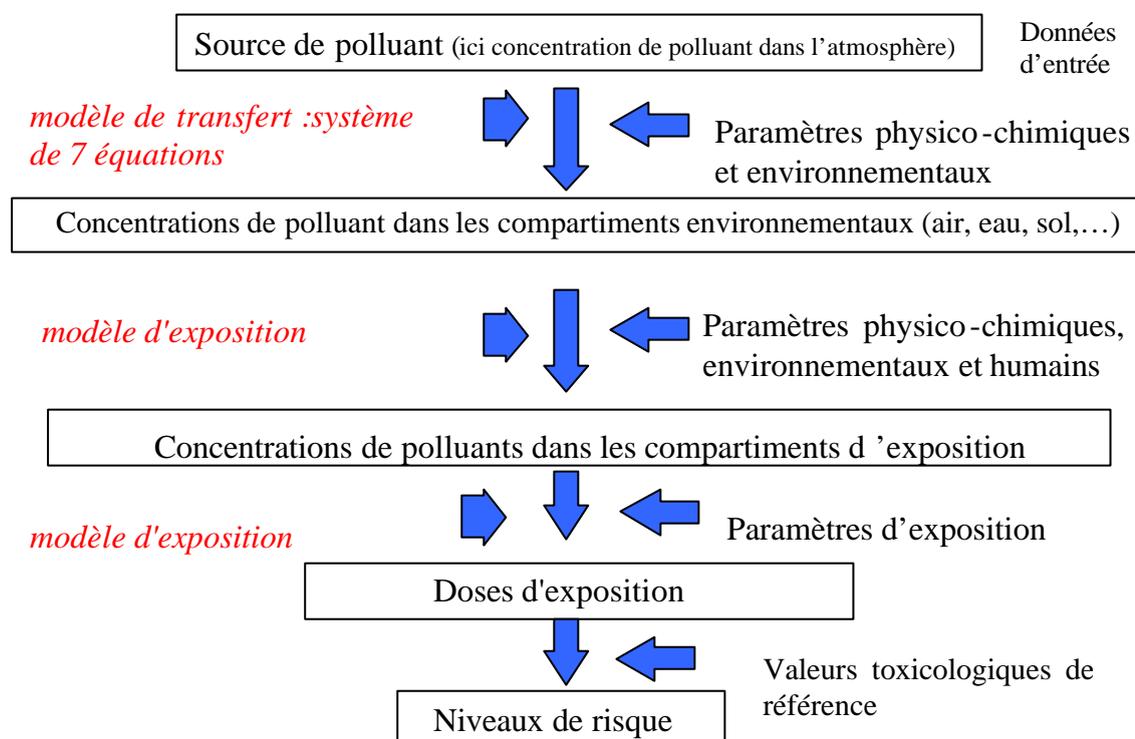
- 7 pour la version 2.3. Il s'agit du sol superficiel, du sol sous-jacent cultivable ou végétal, du sol plus profond correspondant à la zone située entre la couche cultivable et la nappe, de l'atmosphère, des eaux superficielles, des sédiments et de la partie aérienne des végétaux ;
- 8 pour la version 4.0, la partie supérieure des végétaux considérée dans la version précédente étant divisée en deux compartiments : les feuilles et la cuticule.

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

Un système d'équations représente les échanges diffusifs et convectifs de polluants entre ces différents compartiments. Les variations de la masse de polluant dans la couche de sol végétal et la couche de sol la plus profonde au cours du temps sont représentées grâce à deux équations différentielles du premier ordre. Les échanges entre les autres compartiments sont représentés par des équations linéaires, ces compartiments étant considérés dans un état quasi-stationnaire par rapport à la couche de sol cultivable et la couche de sol profond. Ce système d'équations permet d'assurer la prise en compte du principe de conservation de la masse du polluant.

Les concentrations de polluant dans les milieux d'exposition sont ensuite calculées par le module d'exposition à partir des concentrations dans les milieux environnementaux.

Figure 1: Schéma de principe de CalTOX



Les versions logicielles mises à disposition sur internet sont des versions bêta. La version 4.0 est actuellement la plus utilisée, bien qu'elle ne semble avoir fait l'objet d'aucune revue scientifique, contrairement à la précédente. Dans ce contexte, compte-tenu de l'intérêt de ce modèle et des différences substantielles de résultats pouvant être générées par ces deux versions, CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0 ont été intégrés à l'étude d'intercomparaison.

3.1.2 HHRAP (HUMAN HEALTH RISK ASSESSMENT PROTOCOL FOR HAZARDOUS WASTE COMBUSTION FACILITIES)

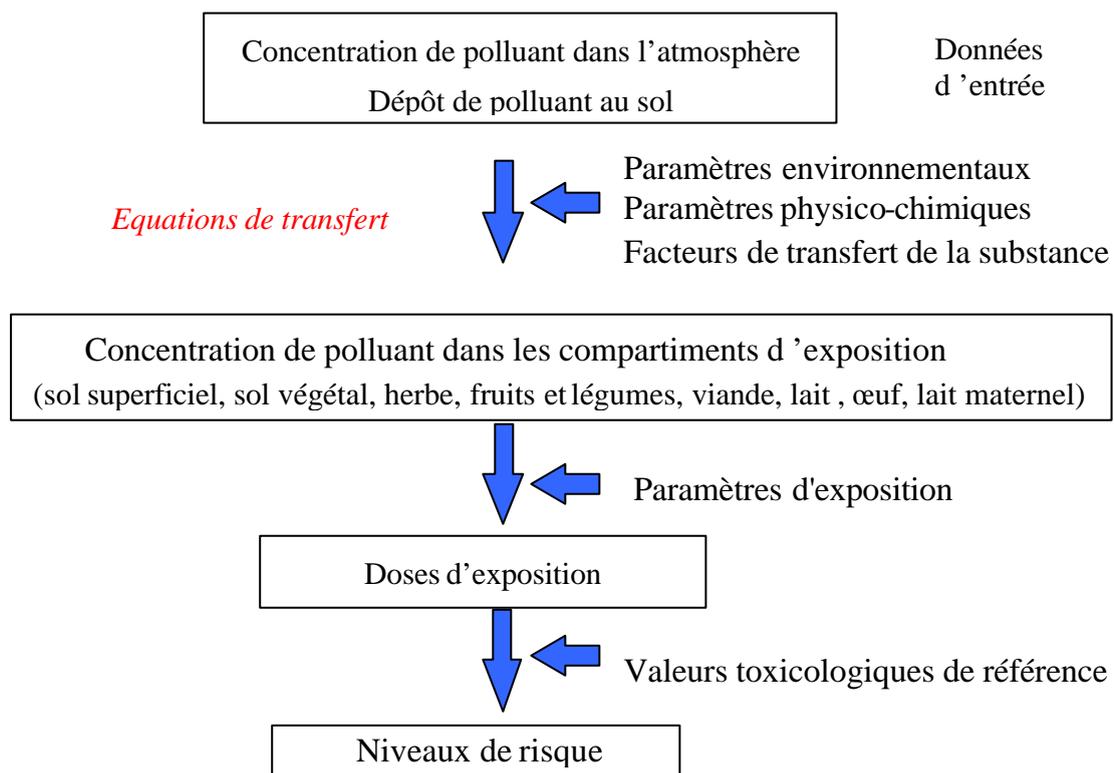
Il s'agit d'une méthode de calcul publiée en 1998 par l'Office of Solid Waste (structure appartenant à l'US-EPA) et développée dans le but d'évaluer les risques liés aux émissions d'incinérateurs de déchets dangereux. Les documents Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

présentant cette méthode sont disponibles sur internet à l'adresse : www.epa.gov/epaoswer/hazwaste/combust/riskvol.htm)

Dans HHRAP, les données d'entrée sont les concentrations atmosphériques et les retombées au sol de polluants dans la zone d'étude. Ces éléments d'entrée sont calculés par un logiciel de dispersion atmosphérique.

Les concentrations dans les milieux d'exposition sont ensuite calculées à partir de la concentration dans le ou les milieu(x) amont(s) ou source(s). A titre d'exemple, la concentration de polluant dans les végétaux est calculée à partir de la concentration dans le sol, de la concentration gazeuse de polluant dans l'air et du dépôt particulaire. Une des différences par rapport à un modèle comme CalTOX vient du fait que les transferts de polluants sont pris en compte dans un seul sens : du compartiment A (source) vers le compartiment B (récepteur) tandis que sous CalTOX, les équations de calcul représentent les échanges de polluants dans les deux sens : le transfert principal du compartiment A vers le compartiment B, mais aussi le transfert secondaire du compartiment B vers le compartiment A.

Figure 2 : Schéma de principe du modèle proposé dans les documents de HHRAP



3.1.3 HESP (HUMAN EXPOSURE TO SOIL POLLUTANT)

HESP est un logiciel développé par la compagnie Shell International Petroleum (Veerkamp et al., 1994). La dernière version disponible de ce logiciel date de 1995 et est indexée 2.10b.

Ce modèle a été conçu en relation avec l'institut de l'environnement et de la santé publique néerlandais (RIVM) sur la base d'une monographie du groupement ECETOC (European Chemical Industry Ecology & Toxicology Centre). Ses équations sont identiques à celles décrites dans le rapport du modèle C-Soil, ayant servi à l'élaboration des valeurs d'intervention néerlandaises pour les sols.

Ayant été le premier logiciel disponible sur le marché européen pour estimer les expositions liées aux sols pollués, les équations de HESP ont été utilisées au départ comme base de travail par les groupes du Ministère de l'Environnement chargés de proposer une méthode d'évaluation des risques liés aux sites et sols pollués. Par la suite, le logiciel a souvent été repris par des bureaux d'études pour évaluer les risques liés à différentes situations de pollution.

Puisque ce logiciel a été conçu pour évaluer les expositions liées à des sols pollués, la source de pollution ne peut être définie que sous la forme d'une concentration de polluant dans le sol.

Les voies d'exposition représentées sont :

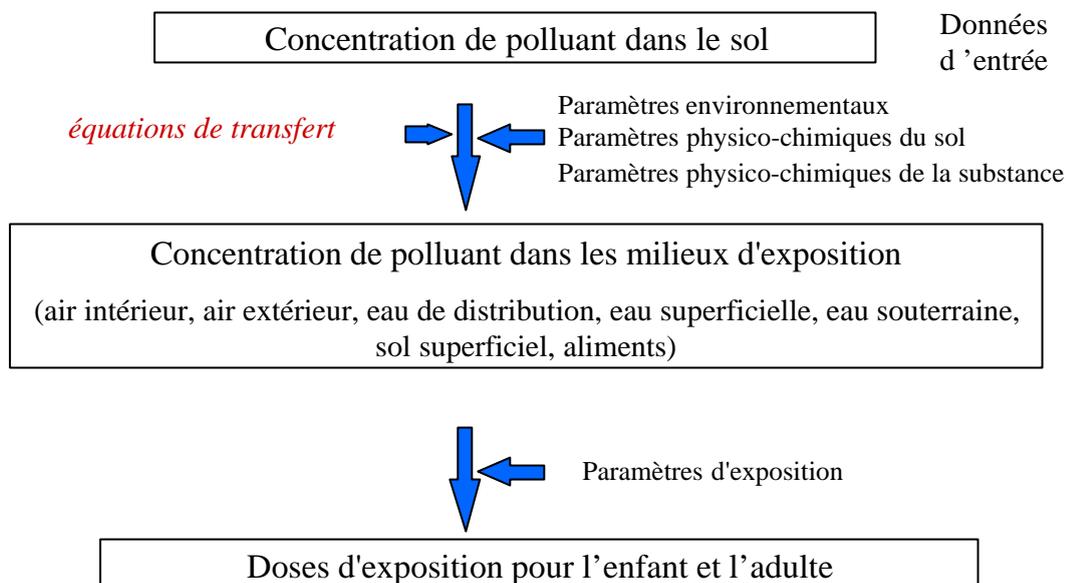
- l'inhalation de polluant :
 - sous forme gazeuse émis à partir du sol,
 - sous forme de particules remises en suspension à partir du sol,
 - en mélange avec la vapeur d'eau formée à partir d'eau de distribution contaminée,
- l'ingestion :
 - de sol et de poussières issues du sol,
 - d'eau de distribution contaminée par diffusion du polluant à travers les canalisations,
 - de produits végétaux contaminés par passage racinaire et dépôt atmosphérique de particules remises en suspension à partir du sol,
 - de viande, de lait et d'œufs issus d'animaux inhalant des polluants sous forme gazeuse et particulaire, ingérant du sol, des végétaux et de l'eau (souterraines, superficielles ou de distribution) éventuellement contaminée,
- l'absorption cutanée de polluant :
 - à partir d'eau de distribution (lors de la prise de bains ou de douches) ou d'eau superficielle (lors de baignades),
 - l'absorption cutanée à partir de particules de sol et de poussières.

HESP distingue trois couches de sol (de 0 à 25 cm, de 25 cm à 1,5 m de profondeur et de 1,5 à 2,5 m de profondeur), qui peuvent être caractérisées par des concentrations différentes et qui contribuent chacune à une ou plusieurs voies d'exposition.

HESP fournit, à partir des paramètres d'entrée, les concentrations de polluants dans les milieux d'exposition et les doses d'exposition d'un adulte et d'un enfant.

Pour une présentation détaillée du logiciel, le lecteur pourra se reporter à la fiche technique référencée INERIS, DRC-02-41200/DESP-R30a.

Figure 3 : Schéma de principe de HESP



3.2 SIMULATIONS RÉALISÉES

Les voies d'exposition indirectes liées aux retombées d'émissions atmosphériques sont pertinentes pour des polluants peu volatils. Pour comparer les modèles sur la gamme de propriétés la plus large possible, l'exercice a été mené sur quatre substances :

- deux polluants organiques persistants : la 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine (2,3,7,8 TCDD), et le benzo(a)pyrène (BaP),
- une substance pouvant être qualifiée de semi-volatile : le naphthalène,
- un polluant métallique : le cadmium (Cd).

Pour chaque modèle et chaque substance, sept simulations sont effectuées. D'étape en étape, des éléments supplémentaires sont homogénéisés entre les modèles testés. Les différentes phases de calcul sont les suivantes :

1. Utilisation de chaque modèle avec l'ensemble des valeurs de paramètres fournies par défaut. Seules sont homogénéisées les surfaces des zones d'étude et le terme source de la pollution ;
2. Utilisation des modèles avec la même cible, à savoir un adulte exposé pendant 30 ans, et avec la même durée d'émission de polluant ;
3. Homogénéisation des valeurs des paramètres environnementaux ;
4. Homogénéisation des valeurs des paramètres d'exposition ;

5. Homogénéisation des valeurs des paramètres propres aux substances chimiques. Seules les constantes de dégradation utilisées par chacun des modèles ne sont pas modifiées (afin de cerner l'impact des paramètres physico-chimiques et des paramètres de transfert sur les résultats, en faisant abstraction de l'influence des phénomènes de dégradation, qui par nature, sont très variables) ;
6. Elimination des phénomènes de dégradation (par application de durées de demi-vie très longues) ;
7. Limitation des calculs aux voies et modes d'exposition considérés dans les trois modèles.

3.3 TRAVAUX PRÉPARATOIRES À L'ÉTUDE D'INTERCOMPARAISON

Pour mener à bien ces travaux d'intercomparaison, il a été nécessaire :

- de préparer les feuilles de calcul correspondant à chacun des modèles étudiés,
- de définir l'ensemble du jeu commun de données à affecter aux modèles,
- d'analyser les différences existant entre les modèles dans la définition des paramètres d'entrée, afin d'affecter des valeurs équivalentes à tous les modèles.

3.3.1 PRÉPARATION DES FEUILLES DE CALCUL

3.3.1.1 CALTOX 2.3

Cette version du logiciel a fait l'objet d'une analyse approfondie et d'un rapport rédigé par l'INERIS (INERIS DRC-04-45959/ERSA-n°97-RBn). L'utilisation du logiciel dans cette étude repose sur l'expérience acquise.

3.3.1.2 CALTOX 4.0

Une analyse axée sur les modifications apportées par rapport à la version 2.3 a été réalisée afin de connaître l'utilisation des données d'entrée dans le logiciel et de définir des valeurs adaptées. Plusieurs erreurs existant dans le code distribué ont pu être repérées et corrigées.

3.3.1.3 HHRAP

HHRAP se présentant sous la forme d'un guide méthodologique (USEPA, 1998 a), il a été nécessaire de coder l'ensemble des équations du modèle et d'attribuer aux paramètres d'entrée les valeurs par défaut proposées dans la méthode.

3.3.1.4 HESP

Dans sa forme originale, HESP se présente sous la forme d'un logiciel, où le code de calcul n'est pas accessible, et où de nombreux paramètres ne sont pas modifiables par l'utilisateur.

Pour réaliser cette étude d'intercomparaison, il apparaissait néanmoins souhaitable que les simulations réalisées à l'aide de HESP suivent a minima les grands principes de calcul repris dans les différents guides sectoriels pour l'évaluation des risques sanitaires.

L'approche suivante a donc été adoptée :

- Hypothèse d'un fonctionnement et d'émissions atmosphériques de l'installation industrielle pendant 30 ans,
- Exposition des populations résidant autour de l'installation pendant la même période,
- Calcul des concentrations de polluants dans une couche de sol de 1 cm d'épaisseur et dans une couche de 20 cm d'épaisseur, liées aux dépôts atmosphériques. Les vitesses de dépôts utilisées sont celles du jeu commun de données. Les concentrations de polluant dans le sol sont calculées comme si tout le polluant déposé était réparti de manière homogène dans la couche de sol considérée, sans prise en compte d'aucun phénomène d'atténuation (par érosion, ruissellement, lixiviation, évaporation ou dégradation).

La concentration calculée sur une hauteur de 1 cm est utilisée dans HESP pour estimer :

- les doses d'exposition par inhalation de poussières remises en suspension à partir du sol,
- les doses d'exposition par ingestion de sol,
- les doses d'exposition par absorption cutanée après contact avec le sol,
- la concentration dans les eaux superficielles (contaminées par érosion des sols) et les doses d'exposition découlant de la contamination des eaux superficielles (ingestion de poisson, contact cutané avec les eaux superficielles).

Quant à la concentration calculée sur une hauteur de 20 cm, elle est entrée sous HESP pour estimer les doses d'exposition reçues par ingestion de produits végétaux et de produits d'origine animale.

Chaque simulation nécessite donc de faire « tourner » deux fois HESP. Concrètement, l'INERIS disposant d'une feuille EXCEL reprenant l'ensemble des calculs effectués sous HESP (codée à partir des équations fournies dans Veerkamp , 1994), les simulations ont été effectuées à l'aide de cette feuille offrant plus de souplesse. Les résultats obtenus ont été systématiquement vérifiés avec ceux fournis par le logiciel original.

Les valeurs par défaut utilisées dans chacun des modèles sont reportées en annexes A, B, C et D.

3.3.2 DÉFINITION DU JEU COMMUN DE DONNÉES

Les valeurs des paramètres d'entrée utilisées pour les différentes simulations sont fournies en annexe E. Les valeurs du jeu commun de paramètres ont été renseignés, pour l'essentiel, à partir des données définies dans l'étude réalisée

pour le Ministère de L'Ecologie et du Développement Durable et intitulée « Evaluation de l'impact sur la santé des rejets atmosphériques des tranches charbon d'une grande installation de combustion - Partie 2 : Exposition par voies indirectes » (rapport référencé INERIS DRC-03-45956/ERSA-RBn). Les valeurs affectées aux paramètres d'exposition correspondent à la moyenne pondérée des valeurs utilisées dans cette dernière étude pour les classes d'âge allant de 6 ans à plus de 15 ans.

3.3.3 HOMOGÉNÉISATION DES DONNÉES D'ENTRÉE

L'homogénéisation des données d'entrée utilisées dans les différents modèles a parfois nécessité de procéder à des ajustements sur les valeurs des paramètres.

Ainsi, les données utilisées pour renseigner les modèles doivent parfois être agrégées ou bien redécoupées pour s'adapter aux différentes catégories de végétaux, d'animaux et de classes d'âge définies dans chaque modèle. Sous HHRAP, par exemple, on distingue les expositions par ingestion de viande bovine, de viande de porc et de viande de volaille, tandis que HESP ne tient compte que de l'ingestion de viande bovine et de viande de volaille. Pour HESP, la viande de porc consommée a donc été assimilée à de la viande bovine. De même, sous HHRAP, l'exposition des animaux est estimée à partir de plusieurs catégories d'aliments, alors que CalTOX et HESP ne procèdent pas à cette distinction.

L'utilisation d'un jeu commun de données nécessite également la résolution de plusieurs problèmes d'hétérogénéité entre les équations des différents modèles. Sous CalTOX, par exemple, le flux de particules qui sédimentent à partir des eaux superficielles est une donnée d'entrée, alors que sous HHRAP, ce flux peut se déduire de calculs intermédiaires. Dans ce cas, le jeu commun de données s'est donc vu renseigné à partir du flux calculé sous HHRAP.

Cas particulier de HESP

Bien que les équations du modèle original ait été recodées sous EXCEL, le choix a été fait pour cette étude de ne pas affecter au modèle l'ensemble des valeurs du jeu commun de paramètres lors des phases successives de calcul. Le principe retenu a été de limiter les modifications aux paramètres réellement modifiables dans HESP et à la majorité des paramètres d'exposition de la cible humaine. Les calculs d'exposition conduits de cette manière sont en effet réalisables par tout utilisateur de HESP. Pour cela, il suffit à l'évaluateur d'utiliser les concentrations de polluant calculées par HESP dans les différents milieux pour estimer les doses d'exposition correspondantes, selon l'équation générale suivante¹ :

$$D_{ij} = C_i * Q_j / P$$

Avec D_{ij} : dose d'exposition administré à partir du milieu i par la voie d'exposition j ,

C_i : concentration dans le milieu d'exposition i ,

Q_j : quantité j de milieu ingéré ou inhalé,

- P : poids corporel de la cible.

¹ Le calcul des doses d'exposition liées au contact cutané étant un peu différent, les paramètres d'exposition relatifs à cette voie n'ont pas été modifiés et la dose estimée par HESP est reprise telle quelle pour le calcul de la dose totale d'exposition.

Par conséquent, lors de l'étape de calcul n°3 visant à homogénéiser les valeurs des paramètres environnementaux, seuls les paramètres suivants ont vu leurs valeurs ajustées : la teneur en carbone organique du sol, la masse volumique du sol, les teneurs en eau et en air du sol, la perméabilité, le gradient hydraulique, le débit des eaux superficielles, le flux d'eau évaporée à partir des eaux superficielles, le flux de décharge des eaux souterraines dans les eaux superficielles, la longueur et la largeur du site contaminé.

Lors de la phase 4 correspondant à l'homogénéisation des valeurs de paramètres d'exposition, les paramètres pour lesquels les valeurs du jeu commun de paramètres ont été adoptées sont : la quantité de sol ingéré, les quantités d'aliments ingérés, les pourcentages d'aliments autoproduits, le volume respiratoire et le poids.

Pour la phase 5 visant à homogénéiser les paramètres physico-chimiques des substances, seuls les paramètres pouvant être définis par l'utilisateur ont été modifiés selon les valeurs du jeu commun de paramètres. Il s'agit de la masse molaire, de la solubilité, de la pression de vapeur, de la constante de Henry, de la constante de partage octanol-eau, de la constante de partage particules du sol-eau, du facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes, du facteur de bioconcentration sol-parties racinaires, et pour le cadmium, du facteur de bioconcentration dans le poisson.

4 RÉSULTATS DES SIMULATIONS

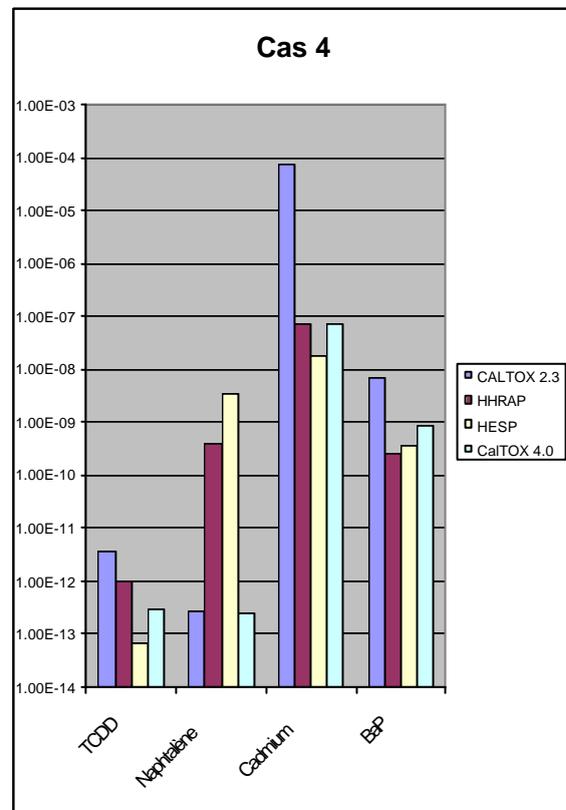
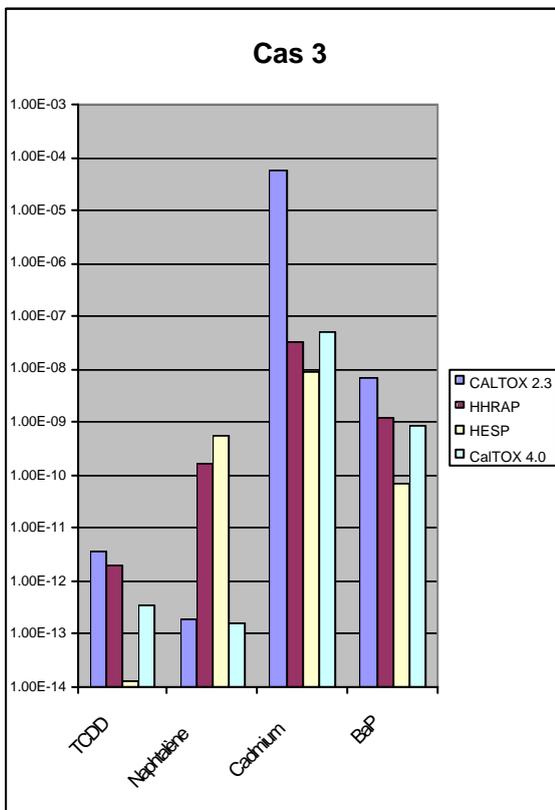
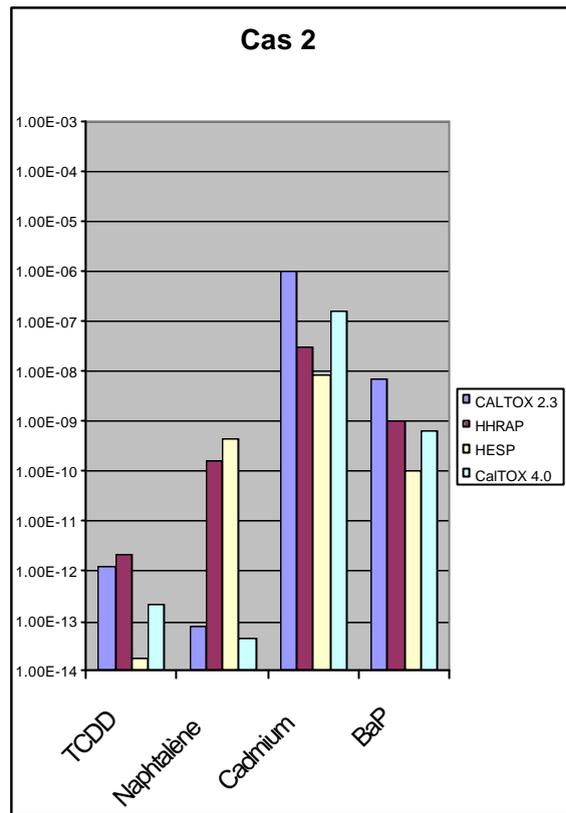
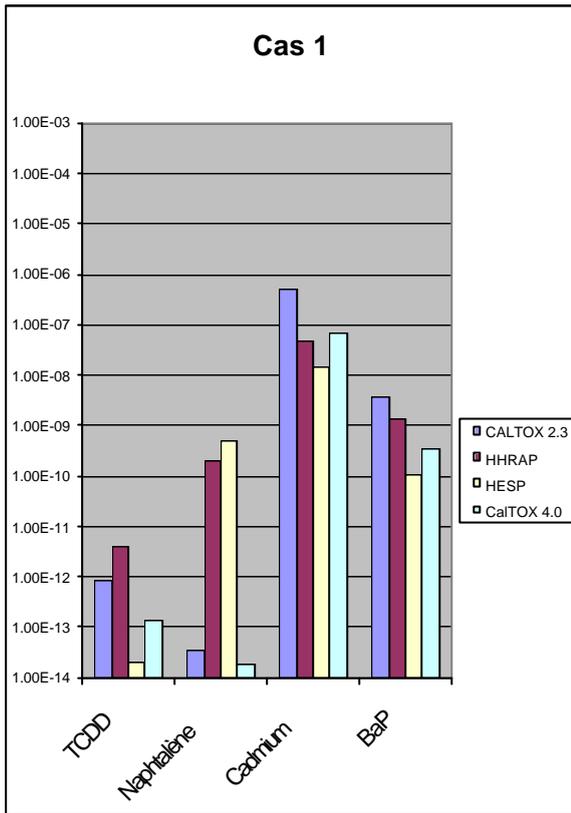
4.1 PRÉSENTATION GÉNÉRALE DES RÉSULTATS

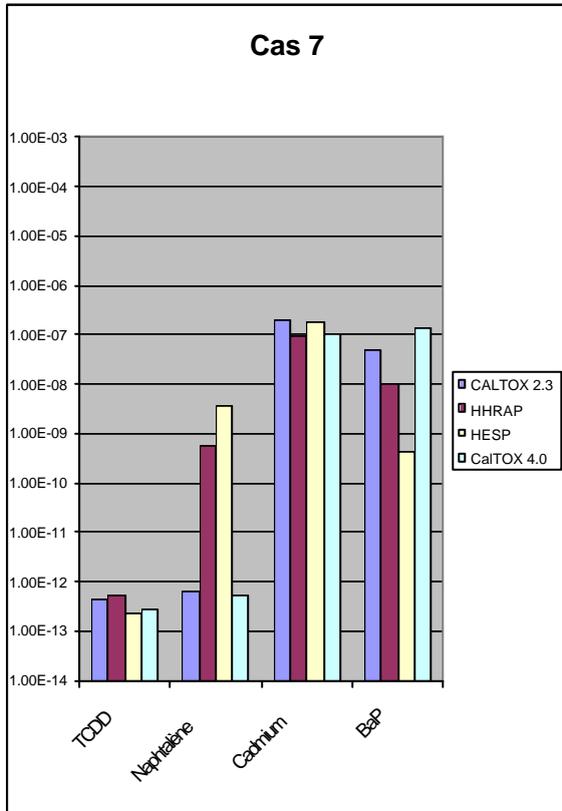
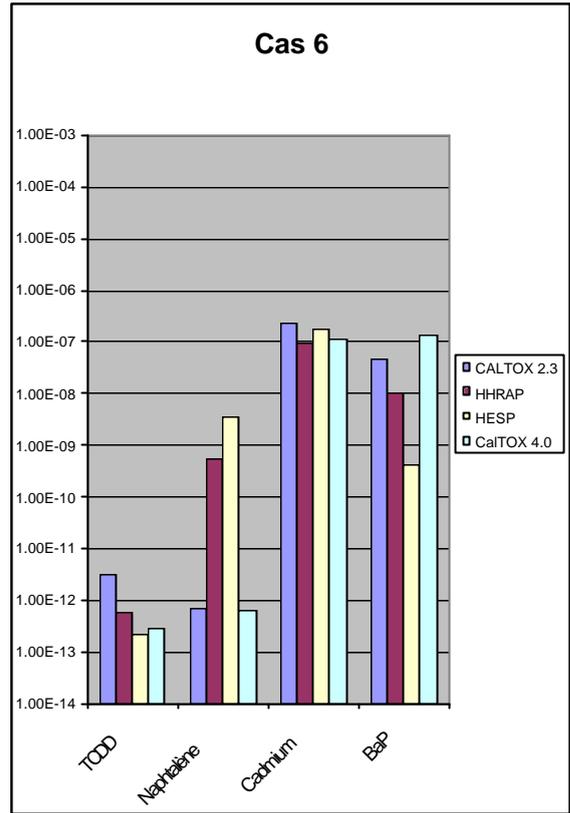
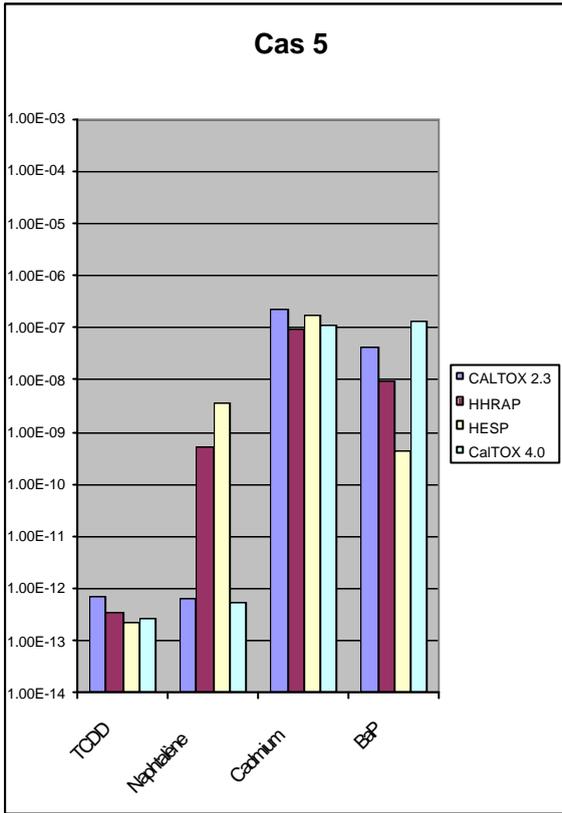
Les résultats des sept simulations sont présentés dans les pages suivantes sous forme de graphes et reportés dans les tableaux de l'annexe E.

Les « doses moyennées sur la vie entière » sont les doses totales d'exposition journalière, calculées à partir des concentrations moyennes dans les milieux d'exposition pendant la durée de l'exposition. Elles sont rapportées sur la vie entière, c'est-à-dire multipliées par la durée d'exposition et divisées par 70 ans. Ces doses permettent de calculer l'excès de risque cancérigène, en étant multipliées par l'excès de risque unitaire. Pour HESP, ce sont les concentrations moyennes de polluant pendant les trente années d'exposition dans une couche de sol de 1 cm et de 20 cm d'épaisseur qui ont été utilisées comme données d'entrée.

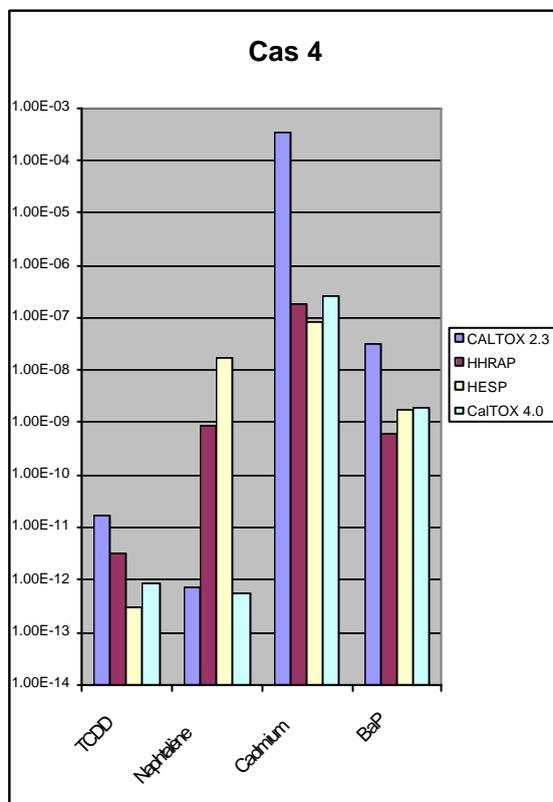
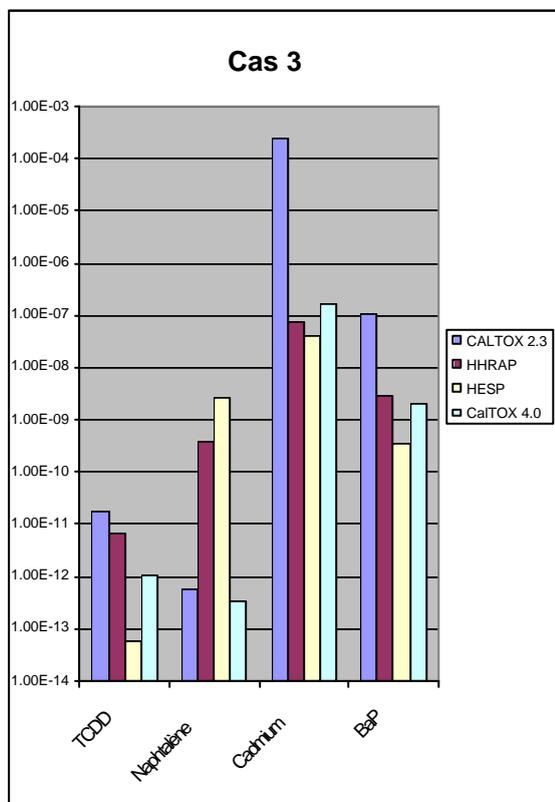
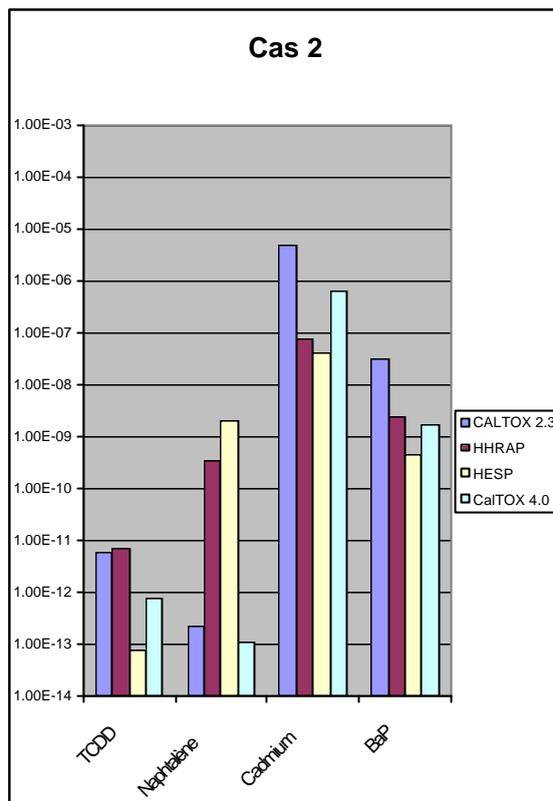
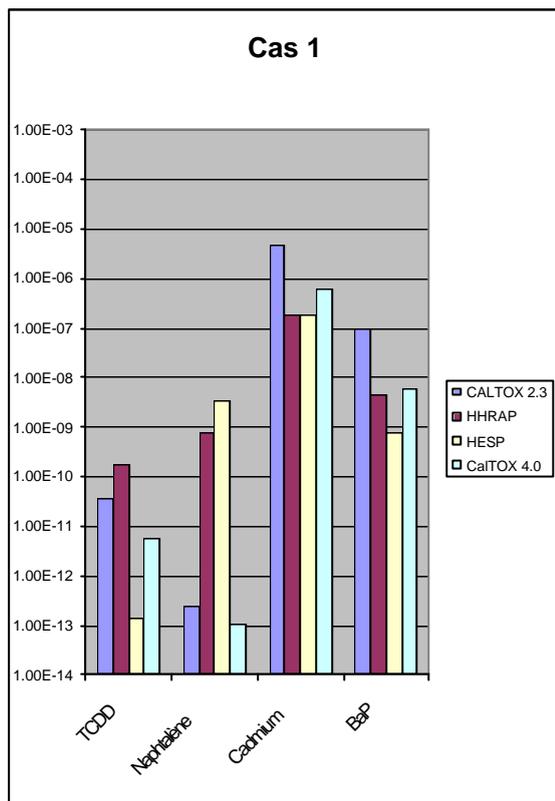
Les « doses maximales au cours de la période d'exposition » sont les doses totales d'exposition journalière, calculées avec les concentrations dans les milieux d'exposition à la fin de la période d'exposition. Ces concentrations étant les concentrations maximales de la période d'exposition, les doses correspondantes permettent de calculer l'indice de risque. Pour HESP, ce sont les concentrations de polluant, dans une couche de sol de 1 cm et de 20 cm d'épaisseur, après trente années d'émission atmosphérique, qui ont été utilisées comme données d'entrée.

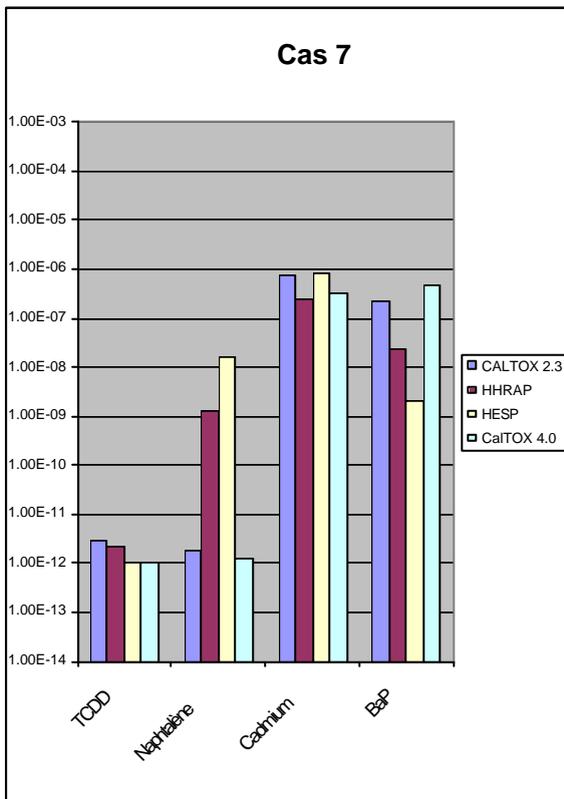
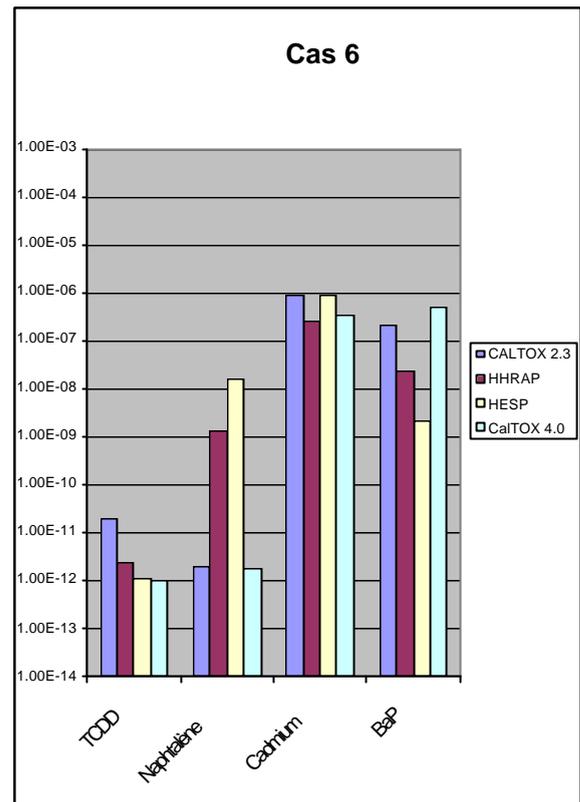
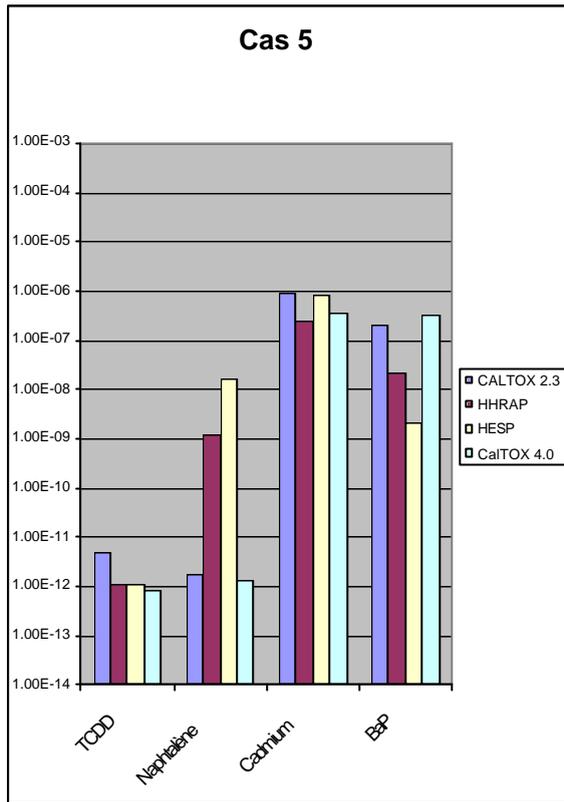
Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière (mg/kg/j)





Doses totales et maximales observées au cours de la période d'exposition (mg/kg/j)





D'une manière générale, en fonction des différentes simulations réalisées, on observe que :

- pour la 2,3,7,8 TCDD, CalTOX 2.3 et HHRAP fournissent des résultats relativement proches. Selon les cas, les résultats diffèrent d'un facteur 1,3 à 8,3. Entre CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0, les différences de résultats sont un peu plus fortes allant jusqu'à un facteur 20. Quant à HESP, lors des premières simulations, il fournit des résultats nettement plus faibles que les autres modèles (une différence allant jusqu'à trois ordres de grandeur a été obtenue par rapport à HHRAP) ;
- pour le naphtalène, c'est HESP qui donne les résultats les plus élevés puis HHRAP, tandis que CalTOX fournit les résultats les plus faibles. Quelle que soit la simulation, CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0 fournissent des résultats très proches (un facteur 2 de différence au maximum). En revanche, entre HESP et CalTOX, les résultats divergent d'un facteur 3600 à un facteur 31000 ;
- pour le cadmium, à l'inverse, c'est CalTOX 2.3 qui donne les résultats les plus élevés. CalTOX 4.0, HESP et HHRAP donnent souvent des résultats assez proches. Les écarts maximaux (écarts entre le modèle donnant la dose d'exposition la plus faible et celui donnant la dose d'exposition la plus forte) entre les modèles vont d'un facteur 2 à un facteur 6300, selon les simulations. Les résultats fournis par les deux versions de CalTOX diffèrent d'un facteur 2 jusqu'à un facteur 1600, en fonction des simulations ;
- pour le benzo(a)pyrène, le classement des modèles en fonction des résultats obtenus est variable selon les simulations. Néanmoins, les résultats les plus élevés sont fournis, par l'une ou l'autre version de CalTOX, et les résultats les plus faibles sont le plus souvent donnés par HESP. Selon les simulations, les écarts maximaux entre les doses d'exposition calculées par les différents modèles vont d'un facteur 26 à 310. Entre les deux versions de CalTOX, les différences de résultats vont d'un facteur 1,6 à 51.

Pour la 2,3,7,8 TCDD et le cadmium, les rapports de doses entre le modèle donnant le résultat le plus élevé et celui donnant le résultat le plus faible tendent à se réduire lors des dernières simulations. Lors de la 7^{ème} simulation, lorsque les conditions de calcul ont été rendues les plus homogènes possibles, ce rapport est compris entre 2 et 3 pour la 2,3,7,8 TCDD et pour le cadmium. En revanche, pour le naphtalène, les résultats fournis par CalTOX 4.0 et HESP, lors de la dernière simulation, diffèrent encore de trois à quatre ordres de grandeur et pour le benzo(a)pyrène de deux ordres de grandeur. Enfin, lors de la dernière simulation, les résultats obtenus, à l'aide des deux versions de CalTOX, pour les quatre substances étudiées, sont proches : ils diffèrent au maximum d'un facteur 2,8, quelle que soit la substance.

4.2 PRÉSENTATION DÉTAILLÉE DES RÉSULTATS DU CAS 1

Pour cette première étape, les quatre modèles sont utilisés avec leur paramétrage et leurs options par défaut. Dans la mesure où cette étude s'intéresse aux expositions par voies indirectes liées aux retombées des émissions atmosphériques, la seule voie existant dans ces modèles et non retenue ici est la voie d'inhalation.

HHRAP, HESP et CalTOX 4.0 proposent plusieurs scénarios d'exposition par défaut. Dans cet exercice, le scénario pris en référence pour HHRAP est celui d'un agriculteur et de ses enfants, car c'est le seul scénario qui intègre la consommation de viande et de lait de vache. De même pour HESP, le scénario retenu pour le cas 1 est le scénario nommé « agriculture ». Dans HESP, le mode de calcul de la dose totale d'exposition, moyennée sur la vie entière et servant au calcul de l'ERI n'étant pas défini, on retient le calcul d'une moyenne pondérée prenant en compte 6 années d'exposition d'un enfant et 24 années d'exposition d'un adulte. Enfin, pour CalTOX 4.0, le scénario utilisé est le scénario résidentiel apparaissant par défaut dans le logiciel.

Tableau 1 : Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière et principales voies d'exposition

Substance	Modèle	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
2,3,7,8 TCDD	CaITOX 2.3	$8,5.10^{-13}$	57 % : ingestion de viande 34 % : ingestion de lait maternel
	HHRAP	$4,1.10^{-12}$	53 % : ingestion de viande 41 % : ingestion d'œufs
	HESP	$2,1.10^{-14}$	69 % : ingestion de poisson 19 % : ingestion de sol
	CaITOX 4.0	$1,4.10^{-13}$	58 % : ingestion de viande 34 % : ingestion de lait maternel
Naphtalène	CaITOX 2.3	$3,6.10^{-14}$	62 % : ingestion de végétaux 23 % : ingestion de poisson
	HHRAP	$2,1.10^{-10}$	95 % : ingestion d'eau
	HESP	$4,9.10^{-10}$	61 % : ingestion de poisson 26 % : ingestion de végétaux 12 % : ingestion de sol
	CaITOX 4.0	$1,8.10^{-14}$	40 % : ingestion de poisson 35 % : ingestion de végétaux 16 % : contact cutané
Cadmium	CaITOX 2.3	$4,9.10^{-7}$	92 % : ingestion de végétaux
	HHRAP	$4,9.10^{-8}$	80 % : ingestion d'eau 23 % : ingestion de végétaux
	HESP	$1,5.10^{-8}$	37 % : ingestion d'œuf 34 % : ingestion de lait de vache 17 % : ingestion de sol
	CaITOX 4.0	$7,2.10^{-8}$	55 % : ingestion de végétaux 44 % : ingestion de viande
B(a)P	CaITOX 2.3	$3,9.10^{-9}$	33 % : ingestion de viande 29 % : ingestion de lait de vache 19 % : ingestion de lait maternel 14 % : ingestion de légumes
	HHRAP	$1,4.10^{-9}$	72 % : ingestion de lait de vache 22 % : ingestion de viande
	HESP	$1,1.10^{-10}$	73 % : ingestion de poisson 17 % : ingestion de sol
	CaITOX 4.0	$3,6.10^{-10}$	33 % : ingestion de viande 28 % : ingestion de lait de vache 20 % : ingestion de lait maternel 14 % : ingestion de légumes

Tableau 2 : Doses totales et maximales observées au cours de la période d'exposition et principales voies d'exposition

Substance	Modèle	Dose totale et maximale observée au cours de la période d'exposition (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
2,3,7,8 TCDD	CalTOX 2.3	$3,7.10^{-11}$	100 % : ingestion de lait maternel
	HHRAP	$1,7.10^{-10}$	100 % : ingestion de lait maternel
	HESP	$1,4.10^{-13}$	59 % : ingestion de poisson 24 % : ingestion de sol
	CalTOX 4.0	$5,6.10^{-12}$	100 % : ingestion de lait maternel
Naphtalène	CalTOX 2.3	$2,5.10^{-13}$	62 % : ingestion de végétaux 23 % : ingestion de poisson
	HHRAP	$8,1.10^{-10}$	96 % : ingestion d'eau
	HESP	$3,4.10^{-9}$	51 % : ingestion de poisson 33 % : ingestion de végétaux 15 % : ingestion de sol
	CalTOX 4.0	$1,1.10^{-13}$	40 % : ingestion de poisson 35 % : ingestion de végétaux 16 % : contact cutané
Cadmium	CalTOX 2.3	$4,6.10^{-6}$	92 % : ingestion de végétaux
	HHRAP	$1,9.10^{-7}$	81 % : ingestion d'eau 17 % : ingestion de végétaux
	HESP	$1,9.10^{-7}$	42 % : ingestion de lait de vache 37 % : ingestion d'œuf 12 % : ingestion de sol
	CalTOX 4.0	$6,4.10^{-7}$	55 % : ingestion de végétaux 44 % : ingestion de viande
B(a)P	CalTOX 2.3	$9,9.10^{-8}$	100 % : ingestion de lait maternel
	HHRAP	$4,4.10^{-9}$	91 % : ingestion de lait de vache
	HESP	$7,5.10^{-10}$	73 % : ingestion de poisson 17 % : ingestion de sol
	CalTOX 4.0	$5,7.10^{-9}$	100 % : ingestion de lait maternel

Tableau 3 : Concentrations moyennes dans les principaux milieux pendant la durée d'exposition

Substance	Milieux d'exposition	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
2,3,7,8 TCDD	Végétaux (mg/kg frais)	$1,3 \cdot 10^{-10}$ (exposés) *	$1,0 \cdot 10^{-10}$ (herbe de pâturage)	$1,0 \cdot 10^{-10}$ (aériens)	$2,3 \cdot 10^{-11}$ (exposés)
	Viande (mg/kg)	$2,0 \cdot 10^{-9}$	$6,1 \cdot 10^{-9}$ (volaille) $2,1 \cdot 10^{-10}$ (bœuf) $5,6 \cdot 10^{-11}$ (porc)	$6,3 \cdot 10^{-12}$ (bœuf) $4,6 \cdot 10^{-14}$ (volaille)	$3,3 \cdot 10^{-10}$
	Œuf (mg/kg)	$5,8 \cdot 10^{-10}$	$5,0 \cdot 10^{-9}$	$1,8 \cdot 10^{-14}$	$1,0 \cdot 10^{-10}$
	Lait maternel (mg/l)	$1,8 \cdot 10^{-10}$	$2,2 \cdot 10^{-9}$	n. c.	$3,1 \cdot 10^{-11}$
Naphtalène	Fruits et légumes (mg/kg frais)	$1,0 \cdot 10^{-10}$ (exposés) * $1,3 \cdot 10^{-11}$ (non exposés) *	$7,1 \cdot 10^{-10}$ (aériens exposés) $5,1 \cdot 10^{-9}$ (aériens non exposés) $2,2 \cdot 10^{-8}$ (souterrains)	$2,8 \cdot 10^{-7}$ (aériens) $8,6 \cdot 10^{-7}$ (souterrains)	$2,8 \cdot 10^{-11}$ (exposés) $1,5 \cdot 10^{-11}$ (non exposés)
	Poisson (mg/kg)	$2,0 \cdot 10^{-10}$	$3,9 \cdot 10^{-6}$	$6,5 \cdot 10^{-5}$	$2,1 \cdot 10^{-10}$
	Sol végétal (mg/kg)	$4,1 \cdot 10^{-12}$	$1,3 \cdot 10^{-8}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$	$2,4 \cdot 10^{-11}$
	Eaux superficielles (mg/l)	$1,8 \cdot 10^{-12}$	$1,8 \cdot 10^{-8}$	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$1,8 \cdot 10^{-12}$
Cadmium	Végétaux (mg/kg frais)	$1,4 \cdot 10^{-4}$ (exposés) $3,4 \cdot 10^{-3}$ (non exposés)	$2,9 \cdot 10^{-6}$ (aériens exposés) $1,3 \cdot 10^{-5}$ (aériens non exposés) $1,5 \cdot 10^{-6}$ (souterrains)	$4,4 \cdot 10^{-6}$ (aériens) $1,6 \cdot 10^{-6}$ (souterrains)	$2,0 \cdot 10^{-4}$ (exposés) $4,7 \cdot 10^{-8}$ (non exposés)
	Lait de vache (mg/l)	$7,7 \cdot 10^{-7}$	$2,0 \cdot 10^{-8}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$8,5 \cdot 10^{-7}$
	Œuf (mg/kg)	$1,0 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-8}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$
	Eaux superficielles (mg/l)	$3,0 \cdot 10^{-8}$	$3,6 \cdot 10^{-6}$	$4,3 \cdot 10^{-6}$	$2,6 \cdot 10^{-10}$
B(a)P	Végétaux (mg/kg frais)	$3,0 \cdot 10^{-6}$ (exposés)	$2,8 \cdot 10^{-7}$ (herbe de pâturage)	$8,4 \cdot 10^{-11}$ (aériens)	$2,8 \cdot 10^{-7}$ (exposés)
	Viande (mg/kg)	$5,2 \cdot 10^{-6}$	$4,7 \cdot 10^{-7}$ (bœuf) $4,8 \cdot 10^{-8}$ (porc) $5,9 \cdot 10^{-10}$ (volaille)	$1,6 \cdot 10^{-8}$ (bœuf) $1,6 \cdot 10^{-10}$ (volaille)	$4,9 \cdot 10^{-7}$
	Lait de vache (mg/l)	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-7}$	$4,1 \cdot 10^{-9}$	$2,1 \cdot 10^{-7}$
	Lait maternel (mg/l)	$4,8 \cdot 10^{-7}$	n. c.	n. c.	$4,5 \cdot 10^{-8}$

* : Sous CalTOX, deux catégories de végétaux sont définies : les végétaux exposés et les végétaux non exposés. Les premiers correspondent à la catégorie des végétaux aériens exposés aux polluants dans l'air (courgettes, tomates, salade,...) définis sous HHRAP et HESP, les seconds regroupent la catégorie des végétaux aériens non exposés aux contaminants de l'air (grains, petits pois,...) de HHRAP et les végétaux souterrains de HHRAP et HESP (navets, carottes,...) ;

n. c. : non calculé par le logiciel.

Pour la dioxine, HHRAP donne des doses d'exposition 5 fois plus élevées que CalTOX 2.3, 30 fois plus élevées que CalTOX 4.0 et 200 (dose moyennée sur la vie entière) ou 1200 (dose maximale au cours de la période d'exposition) fois supérieures à celles de HESP.

Une des raisons expliquant l'obtention de doses d'exposition plus faibles dans HESP est la non prise en compte par le modèle de l'ingestion de lait maternel par le nourrisson. Dans HHRAP au contraire, le calcul de la dose d'exposition maximale durant la période d'exposition est basée sur l'exposition du nourrisson. Quant à CalTOX, il intègre cette voie à la fois pour le calcul de la dose d'exposition maximale et de la dose d'exposition moyennée sur la vie entière.

Par ailleurs, l'ingestion de viande, qui est responsable d'une part importante de l'exposition dans les deux versions de CalTOX, ainsi que l'ingestion d'œufs dans HHRAP, ne joue qu'un rôle mineur d'après HESP. Les concentrations de 2,3,7,8 TCDD dans ces produits, calculées par HESP, sont beaucoup plus faibles que celles estimées par CalTOX et HHRAP, la différence pouvant aller jusqu'à 5 ordres de grandeur.

Quant à CalTOX 2.3 et à CalTOX 4.0, ils présentent des doses d'exposition variant d'un facteur 6, mais les voies d'exposition principales sont les mêmes. Cette différence de niveaux d'exposition a pour origine une contamination plus forte des végétaux exposés par voie aérienne dans la version 2.3, contamination qui se répercute sur les aliments d'origine animale.

Pour le naphtalène, HESP produit des doses d'exposition 2 (dose moyennée sur la vie entière) ou 4 (dose maximale sur la période d'exposition) fois plus élevées que HHRAP et des doses supérieures de 4 ordres de grandeur à celles estimées par CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0. Ces variations sont liées :

- à de fortes différences de concentrations dans le poisson, elles-mêmes dues à des différences de concentrations importantes dans les eaux superficielles (4 ordres de grandeur entre HHRAP et les deux versions de CalTOX, 5 ordres de grandeur entre HESP et CalTOX 2.3 ou 4.0) ;
- à de fortes différences de concentrations dans les végétaux, elles-mêmes dues à des différences de concentrations importantes dans le sol végétal (2 ordres de grandeur entre HESP et HHRAP, 4 entre HESP et CalTOX 4.0 et 5 entre HESP et CalTOX 2.3).

Par ailleurs, entre CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0, les doses d'exposition estimées diffèrent seulement d'un facteur 2. Mais, pour la version 2.3, c'est l'ingestion de végétaux qui représente la voie d'exposition principale (62 % de la dose totale), alors qu'avec la version 4.0, la voie d'exposition principale est l'ingestion de poisson (40 % de la dose d'exposition totale). Cette différence est due à une estimation 3 fois plus forte de la concentration de naphtalène dans les végétaux exposés avec la version 2.3.

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

Pour le cadmium, c'est CalTOX 2.3 qui fournit les doses d'exposition les plus élevées. CalTOX 2.3 donne une dose moyennée sur la vie entière 33 fois supérieure à celle de HESP et une dose maximale sur la période d'exposition 24 fois supérieure à celles de HESP et HHRAP. Ces divergences proviennent des concentrations estimées dans les végétaux : la concentration des végétaux non exposés à la pollution atmosphérique, sous CalTOX 2.3, est 260 fois supérieure à celle des végétaux aériens non exposés sous HHRAP, et plus de 2000 fois supérieure à celles calculées par HESP et HHRAP pour les légumes-racines. Sous CalTOX 2.3, les végétaux aériens exposés présente également une concentration 32 fois supérieure à celle de HESP et près de 50 fois supérieure à celle d'2e HHRAP. Dans ce cas de figure, sous CalTOX (quelle que soit la version du modèle), les végétaux sont principalement, voire exclusivement contaminés par l'eau superficielle utilisée pour irriguer les cultures. Tandis que, sous HHRAP et HESP, la contamination des plantes par irrigation n'est pas considérée.

Pour le cadmium, les écarts entre les doses d'exposition estimées par HESP et HHRAP sont plus faibles (un facteur 3 pour la dose moyennée sur la vie entière, valeurs identiques pour la dose maximale calculée sur la période d'exposition). Toutefois, les voies contribuant de manière prépondérante à l'exposition sont différentes. Dans HESP, la contamination de la ressource en eau pour l'alimentation humaine n'est pas prise en compte, alors qu'il s'agit du mode d'exposition prépondérant dans HHRAP. En effet, sous HESP, seule la contamination de l'eau destinée à l'alimentation humaine via son transfert dans le réseau de distribution souterrain est considérée.

Par conséquent, dans HESP, les voies d'exposition principales sont l'ingestion d'œufs et de lait de vache, dont les concentrations, estimées par ce logiciel, sont notablement supérieures à celles de HHRAP (par exemple, la concentration de cadmium estimée par HESP dans les œufs est 1000 fois supérieure à celle de HHRAP).

Enfin, entre CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0, il existe une différence d'un facteur 7 sur la dose moyennée sur la vie entière et la dose maximale de la période d'exposition. Pour le premier modèle, l'exposition est liée principalement aux végétaux non exposés, alors qu'elle est principalement liée aux végétaux exposés pour le second modèle. CalTOX 2.3 calcule en effet une concentration dans les végétaux non exposés 72000 supérieure à celle fournie par CalTOX 4.0 et une concentration de l'eau superficielle servant à irriguer 100 fois supérieure.

Pour le benzo(a)pyrène, la dose moyennée sur la vie entière calculée par CalTOX 2.3 est 3 fois supérieure à celle de HHRAP, 10 supérieure à celle de CalTOX 4.0 et 35 supérieure à celle de HESP. Les voies d'exposition prépondérantes sont l'ingestion de lait de vache et de viande pour CalTOX 2.3, CalTOX 4.0 et HHRAP, et l'ingestion de poisson et de sol pour HESP. Les concentrations dans la viande bovine et dans le lait sous CalTOX 2.3 sont respectivement 330 et 550 fois supérieures à celles estimées par HESP.

2 Dans HHRAP, il est possible de considérer un cours d'eau ou une étendue d'eau. Le type de ressource pris en compte, dans HHRAP, pour cette étude, est une étendue d'eau.

La dose maximale observée au cours de la durée d'exposition fournie par CalTOX 2.3 est environ 20 fois supérieure à celles de CalTOX 4.0 et de HHRAP et environ 130 fois supérieure à celle de HESP. Sous CalTOX, cette dose correspond à l'exposition du nourrisson via le lait maternel, alors que pour HHRAP et HESP, la dose maximale est calculée à partir de l'exposition d'un enfant. En effet, les guides de l'US-EPA (1998 a) proposant le modèle HHRAP ne recommandent de prendre en compte l'exposition du nourrisson, via le lait maternel, que pour les dioxines.

L'obtention de niveaux d'exposition plus forts avec CalTOX 2.3 par rapport à CalTOX 4.0 est liée, comme pour les dioxines, à une contamination plus élevée des végétaux exposés par voie aérienne, contamination qui se répercute sur les aliments d'origine animale.

5 ANALYSE DES RÉSULTATS

Afin de cerner plus précisément l'origine des différences de résultats fournis par les deux modèles, une analyse plus poussée a été réalisée sur les simulations des étapes 4, 5 et 7.

Une analyse de sensibilité des modèles aux paramètres a été réalisée à partir des résultats de l'étape 4, pour les quatre substances. La valeur de chacun des paramètres d'entrée a été modifiée (en laissant les autres paramètres à leur valeur nominale) et la variation engendrée sur le résultat a été observée. Pour les paramètres témoignant des variations les plus fortes, de nouveaux calculs de doses ont été réalisés en attribuant à chacun de ces paramètres, une valeur minimale et une valeur maximale (choisies le plus souvent entre les jeux de données par défaut de CalTOX 2.3, celui de HHRAP et celui défini par l'INERIS pour les besoins de cette étude). Les deux paragraphes suivants présenteront exclusivement les paramètres pour lesquels l'affectation de ces nouvelles valeurs fait varier la dose d'exposition initiale d'un facteur égal ou supérieur à 2. D'autres paramètres peuvent donc avoir un impact sensible sur le résultat. Mais dans les conditions testées lors de cette étude, les variations produites sur le résultat se sont avérées être inférieures au critère fixé.

Les modèles étant particulièrement sensibles aux paramètres des substances, un examen comparatif des résultats de la simulation 4 et de la simulation 5 a également été effectué, afin d'analyser l'impact cumulé des valeurs affectées à l'ensemble des paramètres de substance sur les concentrations dans les milieux et sur les doses d'exposition.

Enfin, après avoir renseigné tous les paramètres modifiables avec des valeurs identiques et supprimé les modes d'exposition qui ne sont pas communs à tous les modèles³, les divergences de calcul entre les quatre modèles sont analysées.

3 La logique retenue a été de ne conserver que les voies d'exposition communes à tous les modèles et les modes de transfert qui résultent de phénomènes naturels. Pour CalTOX 2.3 et 4.0, les modes d'exposition suivants ont été supprimés : irrigation des végétaux, utilisation d'eaux souterraines et superficielles pour alimenter les animaux terrestres et les cibles humaines, contact cutané. Pour HESP, le contact cutané et l'inhalation de particules remises en suspension à partir du sol ont été supprimés.

Remarque : Les variations de résultats présentées dans ce chapitre n'ont pas un caractère généralisable. En fonction des substances et des scénarios étudiés, les variations observées et l'impact des paramètres pourraient être différents. Il n'est pas exclu que d'autres paramètres puissent jouer un rôle important dans d'autres exemples. Néanmoins, compte tenu des différents types de substances balayés dans cette étude et de l'exhaustivité des voies d'exposition prises en compte, un certain nombre de facteurs de variation mis en évidence ici joueront évidemment un rôle important dans d'autres études.

5.1 IMPACT DES PARAMÈTRES ENVIRONNEMENTAUX ET DES PARAMÈTRES D'EXPOSITION

Les analyses de sensibilité menées à partir de HHRAP ont mis en évidence treize paramètres influents. Les cinq premiers sont liés à la définition de la concentration de polluant estimée dans les eaux superficielles. En effet, les équations utilisées dans HHRAP pour estimer cette teneur font appel à des paramètres environnementaux, caractérisant le site, plus nombreux que les trois autres modèles de cette étude.

Les paramètres relevés sont les suivants.

- **La surface du bassin versant.** Par défaut, un bassin versant de 30 kilomètres sur 30 a été considéré. A titre d'exemple, si la surface du bassin versant est ramenée à un carré de 15 km de côté, la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est divisée par un facteur 2,5.
- **Le pourcentage de surface imperméabilisée.** Par défaut, la surface imperméabilisée est supposée représenter 5% de la superficie du bassin versant. A titre d'exemple, si ce pourcentage est doublé, la dose d'exposition au naphthalène moyennée sur la vie entière est également multipliée par 2. Il convient toutefois de noter que l'importance de ce paramètre a pu être, quel que peu, surestimé dans ce travail, car faute de données suffisantes, le dépôt gazeux humide a dû être assimilé à l'ensemble du dépôt gazeux. Cela conduit à surestimer l'apport de polluant à l'étendue d'eau par ruissellement sur surface imperméabilisée par comparaison aux autres types d'apports contribuant à la contamination des eaux superficielles.
- **Les précipitations.** Dans le jeu commun de données, la hauteur des précipitations a été fixée à 700 mm par an. En faisant varier la valeur des précipitations de 600 mm (correspondant à la situation de Perpignan) à 1100 mm par an (correspondant à la situation de Brest), la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière présente une amplitude de variation d'un facteur 2.
- **Le ruissellement.** Pour le jeu commun de paramètres, un ruissellement de l'ordre de 10 % des précipitations, soit 70 mm/an ou 0,19 mm/j été retenu. Sous CalTOX 2.3, la valeur par défaut est de 0,64 mm/j (soit 43 % des précipitations californiennes). En remplaçant la valeur du jeu commun de paramètres par celle de CalTOX 2.3, la dose d'exposition au cadmium sur la vie entière est multipliée par 2,5.

- **Le débit d'eau sortant de l'étendue d'eau.** Par défaut un débit de 2m³/s a été utilisé. A titre d'exemple, en divisant cette valeur par un facteur 2, la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est également divisée par 2.
- **L'épaisseur de la couche de sol non bêché.** L'épaisseur de la couche de sol est un paramètre qui joue un rôle important sous HHRAP, car par construction, les polluants se déposant sur le sol sont supposés se diluer de manière homogène dans cette couche. HHRAP considère deux épaisseurs de couche, l'une se rapportant au sol bêché, l'autre se rapportant au sol non bêché. La concentration dans la première sert à calculer la contamination des végétaux par voie racinaire, la seconde l'exposition par ingestion de sol. L'épaisseur de la première est classiquement fixée autour de 20 cm, et celle de la seconde autour de 1 ou 2 cm. Une ambiguïté demeure néanmoins pour la contamination par voie racinaire de l'herbe de pâturage et du foin, considéré comme l'élément de base de l'alimentation des animaux. Le suivi strict de la méthode décrite dans le guide HHRAP, suppose de considérer une épaisseur de sol de 1 cm pour la contamination de l'herbe de pâturage, puisqu'elle pousse sur des zones non bêchées. Pourtant, l'emprise racinaire de l'herbe va au-delà. En faisant varier l'épaisseur de la couche de sol non bêché entre 5 et 15 cm, la dose d'exposition sur la vie entière liée à la dioxine est ainsi divisée d'un facteur 4 à un facteur 9 par rapport à la dose calculée lors de l'étape 4.
- **La quantité de sol ingéré par la volaille** susceptible de picorer librement. Cette quantité présente des valeurs très différentes entre CalTOX et HHRAP : 1,3.10⁻⁵ kg/j pour le premier et 0,022 kg/j pour le second. A titre d'exemple, en appliquant la valeur de 1,3.10⁻⁵ kg/j sous HHRAP, la dose d'exposition de l'adulte, à la 2,3,7,8 TCDD, moyennée sur la vie entière est divisée par 12.
- **La consommation de poisson.** Les valeurs utilisées dans le jeu commun de données pour les quantités d'aliments consommés par jour sont issues de l'étude INCA de 1999 (Volatier, 2000). La valeur utilisée dans le jeu commun de données pour ce paramètre est de 2,8.10⁻³ kg/j pour un individu de plus de 6 ans. Dans HESP, une valeur de 7,0.10⁻³ kg/j est utilisée et dans HHRAP, la valeur proposée est de 8,2.10⁻² kg/j, d'où une amplitude de variation importante pour ce paramètre. En faisant varier, la quantité de poisson consommée entre ces deux valeurs, les doses d'exposition au naphthalène et au cadmium présentent une amplitude de variation d'un facteur 2.
- **La fraction de poisson autoconsommé.** Il s'agit de la part de poisson consommé, pêché directement par la cible, et de ce fait pouvant être affecté par les émissions atmosphériques de l'installation étudiée. Dans le jeu commun de données, une valeur de 0,15 a été défini pour ce paramètre à partir des données de l'étude INSEE de 1991 sur l'autoconsommation (données correspondant à la population agricole). En remplaçant cette valeur par celle de HHRAP (fixée à 1) la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est multipliée par 3.
- **La fraction de viande volaille autoconsommée.** Il s'agit de la part de produit consommé, produit sur place par la cible et pouvant être affecté par les émissions de l'installation étudiée. Dans le jeu commun de données, une valeur de 0,79 a été définie pour ce paramètre, avec les mêmes critères que ceux

cités précédemment. Dans HHRAP, le scénario proposé considère un agriculteur autosubsistant. Pour chaque aliment pris en compte dans l'étude, la fraction autoconsommée est donc fixée à 1. Dans HESP, à l'inverse, la fraction de viande de volaille d'origine locale, et pouvant ainsi subir l'impact de l'installation, est égale à 0,1. En faisant varier le paramètre entre ces deux valeurs extrêmes, la dose d'exposition à la 2,3,7,8 TCDD moyennée sur la vie entière présente une amplitude de variation d'un facteur 3.

- **La fraction de lait autoconsommé.** La valeur utilisée dans le jeu commun de données a la même origine que celle employée pour les deux paramètres précédents. Elle est égale à 0,35. Son remplacement par celle de HHRAP (fixée à 1) conduit à un doublement de la dose d'exposition au benzo(a)pyrène moyennée sur la vie entière.
- **La quantité de viande de bœuf autoconsommée.** Il s'agit de la quantité de viande de bœuf ingérée par jour multipliée par la fraction autoconsommée. La quantité de viande de bœuf autoconsommée par jour est estimée, dans le jeu commun de données, à $7,7 \cdot 10^{-3}$ kg/j. Dans HHRAP, la valeur correspondante attribuée à ce paramètre est égale à $8,0 \cdot 10^{-2}$ kg/j, soit un ordre de grandeur de différence. Même si la sensibilité locale du modèle vis-à-vis de ce paramètre est limitée, le remplacement de la valeur du jeu commun de données par la valeur de HHRAP induit un doublement de la dose d'exposition au benzo(a)pyrène moyennée sur la vie entière.
- **L'usage de l'eau superficielle pour l'alimentation humaine.** Les hypothèses en terme d'usage de l'eau sont très différentes selon les modèles. Dans le scénario proposé par HHRAP, 100 % de l'eau consommée par l'agriculteur sont supposés provenir directement et sans traitement de la ressource en eaux superficielles, dont la concentration peut être modélisée à partir du jeu d'équations fourni dans le guide. Sous CalTOX par défaut, la part d'eau consommée provenant de cette ressource est supposée représenter 20 % de la consommation de la cible étudiée, le reste provenant d'une ressource souterraine. Quant à HESP, il ne prend pas en compte la contamination de la ressource en eau, la concentration de polluant estimée dans l'eau consommée résultant uniquement de son transfert dans le réseau souterrain. En considérant une alimentation en eau provenant à 20 % de la ressource superficielle, les doses d'exposition au naphthalène et au cadmium moyennées sur la vie entière sont divisées par 2.

Les analyses de sensibilité menées à partir de CalTOX 2.3 ont mis en évidence les paramètres suivants :

- **La concentration de particules en suspension dans les eaux superficielles.** Sous CalTOX 2.3, une valeur de 88 mg/l a été définie par défaut. Cette valeur est la moyenne relevée à partir de 14 stations de mesures californiennes (écart-type : 88 mg/l). Une valeur de 10 mg/l par défaut a été recommandée par NC DEHNR (1997) et retenue dans le jeu commun de paramètres. En remplaçant cette valeur par celle fournie par défaut dans CalTOX 2.3, la dose d'exposition au cadmium sur la vie entière est divisée par 6,5.

- **L'usage d'eaux superficielles pour irriguer les cultures et les pâturages.** Sous CalTOX 2.3 par défaut, 25 % des contaminants présents dans l'eau d'irrigation sont supposés être transférés au sol et 20 % de l'eau utilisée provient de la ressource superficielle (80 % provenant de ressources souterraines). La « fraction de contaminants présents dans l'eau et transférés au sol » (selon la terminologie employée par CalTOX 2.3) paraît difficile à définir. Mais si l'on affecte une valeur 0 à ce paramètre, ce qui revient à considérer l'absence d'irrigation ou si l'on considère que l'eau utilisée provient intégralement de la nappe souterraine, alors la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est divisée par près de 300.
- **La teneur en carbone organique du sol superficiel et du sol végétal.** Dans le jeu commun de données, la valeur de ce paramètre a été fixée à 3 %. Dans CalTOX 2.3, elle est égale à 0,3 %. En remplaçant la valeur du jeu commun de paramètres par celle de CalTOX 2.3, la dose d'exposition à la 2,3,7,8 TCDD sur la vie entière est divisée par 3.
- **Le ruissellement.** Pour le jeu commun de paramètres, un ruissellement de l'ordre de 10 % des précipitations, soit 70 mm/an ou 0,19 mm/j été retenu. Sous CalTOX 2.3, la valeur par défaut est de 0,64 mm/j (soit 43 % des précipitations californiennes). En remplaçant la valeur du jeu commun de paramètres par celle de CalTOX 2.3, la dose d'exposition au cadmium sur la vie entière est divisée par 3. Il convient de noter que les variations de valeur de ce paramètre produit un effet inverse sur CalTOX 2.3 et HHRAP.
- **Le rendement de biomasse végétale.** Ce paramètre intervient dans le calcul des concentrations des 7 compartiments environnementaux, qui servent ensuite à calculer les concentrations des compartiments d'exposition. Ce paramètre n'intervient donc pas directement dans le calcul des concentrations de végétaux consommés par le récepteur, toutefois il peut avoir un impact sensible sur le résultat. En fonction du type de végétation, ce paramètre peut avoir des valeurs très différentes. Dans CalTOX 2.3, une valeur de 2,8 kg sec/m² a été fixée par défaut. Cette valeur a été définie en fonction des types de plantes et du pourcentage occupé par chacun dans la région de Californie. La documentation associée à CalTOX indique que selon le cas, la valeur de ce paramètre peut aller de 0 à 16,1 kg sec/m². Si l'on remplace la valeur du jeu commun de paramètres utilisée dans la simulation 4, à savoir 0,24 kg sec/m² (correspondant à une couverture végétale de type herbe) par la valeur de fournie par défaut dans CalTOX 2.3, la dose d'exposition à la 2,3,7,8 TCDD sur la vie entière est multipliée par 4.
- **La fraction de végétaux ingérés et produits localement.** Il s'agit de la proportion de fruits et légumes entrant dans le régime alimentaire, qui subit l'impact des émissions atmosphériques étudiées. Dans le jeu commun de paramètres, cette fraction a été fixée à 0,59, tandis que sous CalTOX, elle est fixée par défaut à 0,24. Le remplacement de la valeur du jeu commun de paramètres par la valeur utilisée par défaut sous CalTOX engendre une réduction de la dose d'exposition au cadmium sur la vie entière d'un facteur 2,5.

Les analyses de sensibilité menées à partir de HESP ont mis en évidence les paramètres suivants :

- **L'épaisseur de la couche de sol supportant l'herbe de pâturage des bovins.** Bien que ce paramètre n'apparaisse pas de manière directe dans HESP, il s'agit, comme pour HHRAP, d'un paramètre important qui sert à calculer la concentration de polluant dans le sol, c'est-à-dire à caractériser le terme source sous HESP. Pour utiliser HESP, deux épaisseurs de couche ont été définies, l'une de 1 cm servant au calcul des doses d'exposition liées à l'ingestion de sol, au contact cutané avec le sol et au calcul de la contamination des eaux superficielles par érosion, la seconde de 20 cm pour estimer la contamination des produits végétaux et animaux et les doses d'exposition liées à l'ingestion de ces produits. La dose d'exposition des animaux par ingestion de sol ou par ingestion d'herbe de pâturage est donc estimée à partir d'une concentration unique de polluant réparti de manière homogène dans le sol sur 20 cm d'épaisseur. Or si l'on supposait que l'emprise racinaire de l'herbe broutée par les bovins est de 5 cm et que cette herbe est contaminée par une quantité de polluant diluée sur cette couche de 5 cm d'épaisseur, alors la dose d'exposition au cadmium, moyennée sur la vie entière serait multipliée par 2,5.
- **La teneur en carbone organique du sol.** Dans le jeu commun de données, la valeur de ce paramètre a été fixée à 3 %. Dans CalTOX 2.3, la couche de sol racinaire ayant une épaisseur par défaut de 88 cm est caractérisée par une teneur de 0,3 % de carbone organique. En remplaçant, la valeur du jeu commun de paramètres par celle de CalTOX 2.3 dans HESP, la dose d'exposition au benzo(a)pyrène moyennée sur la vie entière est multipliée par 9,5. Avec une teneur de 1 % (valeur plus adaptée que 0,3 % pour une couche de sol de 20 cm d'épaisseur), la dose d'exposition serait multipliée par 3,5 par rapport au résultat obtenu avec la valeur du jeu commun de paramètres.
- **La quantité de poisson consommé d'origine locale.** Il s'agit de la quantité de poissons consommés par jour multipliée par la fraction d'origine locale. Les fractions d'aliments d'origine locale ont été estimées à partir de l'enquête INSEE de 1991 en les assimilant aux fractions d'aliments autoconsommées. Dans le jeu commun de données, la valeur de $4,2 \cdot 10^{-3}$ kg/j a été attribuée au paramètre « quantité de poisson consommé par jour et d'origine locale ». Dans HESP, cette valeur est égale à $7,0 \cdot 10^{-4}$ kg/j et dans HHRAP, la valeur proposée est de $8,2 \cdot 10^{-2}$ kg/j, d'où une amplitude de variation de deux ordres de grandeur pour ce paramètre, selon les modèles. En remplaçant la valeur du jeu commun de données par celle fixée dans HESP, la dose d'exposition au benzo(a)pyrène, calculée par HESP et moyennée sur la vie entière est divisée par 4,5, et en utilisant la valeur proposée par défaut dans HHRAP, cette dose est multipliée par 18.

- **La quantité de lait ingéré et produite localement.** Ce paramètre est calculé comme le produit de la quantité de lait ingéré par jour et la fraction de lait d'origine locale. La valeur utilisée dans le jeu commun de paramètres correspond à 0,092 l/j. Dans le scénario « agriculteur autosubsistant » de HHRAP, tout le lait consommé est supposé autoproduit et la valeur proposée pour ce paramètre est de 0,589 l/j. En utilisant cette valeur dans la feuille de calcul reprenant le code de HESP, la dose d'exposition au cadmium, moyennée sur la vie entière est multipliée par 3,5. Il faut noter que la valeur fixée par défaut dans HESP, et non modifiable par l'utilisateur dans le logiciel original, est inférieure à celle du jeu commun de paramètres. Elle vaut 0,03 l/j.

Les analyses de sensibilité menées à partir de CalTOX 4.0 ont mis en évidence les paramètres suivants :

- **La fraction volumique de l'eau dans les tissus des feuilles.** La valeur définie par défaut dans CalTOX 4.0 pour ce paramètre est de 0,5. Ce paramètre ne constitue pas une donnée d'entrée des autres modèles étudiés. Il s'agit dans CalTOX 2.3 d'un paramètre interne qui sert à estimer la capacité fugace des plantes. Dans cette version, la fraction volumique de l'eau dans les tissus des feuilles a été fixée à 0,4. Cette valeur a été retenue pour la définition du jeu commun de données. En la remplaçant par 0,656, valeur calculée à partir des données d'entrée du modèle TRIM.Fate (modèle de transfert multimédia présentant des similitudes avec CalTOX 4.0, US EPA, 2004), la dose d'exposition au benzo(a)pyrène, moyennée sur la vie entière est divisée par 3.
- **La fraction volumique de lipide dans les tissus des feuilles.** La valeur définie par défaut dans CalTOX 4.0 pour ce paramètre est de 2.10^{-3} . Comme pour la fraction volumique de l'eau dans les tissus des feuilles, ce paramètre ne constitue pas une donnée d'entrée des autres modèles étudiés. Toutefois l'estimation de la capacité fugace des plantes dans la version 2.3 de CalTOX repose sur l'hypothèse d'une fraction volumique de lipides dans la partie supérieure des plantes de 0,01. Cette valeur a été retenue pour la définition du jeu commun de données. En remplaçant cette valeur par la valeur proposée par défaut dans CalTOX 4.0, la dose d'exposition au naphtalène, moyennée sur la vie entière est divisée par 2,5.
- **La demi-vie du dépôt à la surface des feuilles.** La valeur par défaut proposée dans CalTOX 4.0 est égale à 14 jours. Dans HHRAP et HESP, c'est un coefficient de perte qui est défini. La valeur de ce coefficient de perte équivaut à une demi-vie de 14 jours dans HHRAP et de 20 jours dans HESP. Toutefois, la valeur de ce paramètre peut être très variable. Miller et Hoffman (1983) ont rapporté des valeurs allant de 2,8 à 34 jours pour des plantes herbacées. En faisant varier la valeur de ce paramètre entre les bornes de cet intervalle, la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière varie d'un facteur 8.

- **La quantité de viande ingérée et produite localement.** Ce paramètre est calculé comme le produit de la quantité de viande ingérée par jour et la fraction de viande d'origine locale. Comme pour les autres aliments, des valeurs très différentes sont fournies par défaut dans les différents modèles pour ce paramètre. La valeur obtenue à partir du jeu commun de données est égale à $5,8 \cdot 10^{-2}$ kg/j. Dans le scénario « agriculteur autosubsistant » de HHRAP, toute la viande consommée est supposée autoproduite et la valeur correspondant à ce paramètre est de $1,6 \cdot 10^{-1}$ kg/j. En utilisant cette valeur dans CalTOX 4.0, la dose d'exposition à la 2,3,7,8 TCDD moyennée sur la vie entière est multipliée par 2,5.
- **La quantité de lait ingéré et produit localement.** La valeur obtenue pour ce paramètre à partir du jeu commun de données est égale à 0,092 l/j. Dans le scénario « agriculteur autosubsistant » de HHRAP, la valeur correspondant à ce paramètre est de 0,589 l/j. En utilisant cette valeur dans CalTOX 4.0, la dose d'exposition au benzo(a)pyrène moyennée sur la vie entière est multipliée par 2.
- **La fraction de végétaux ingérés produits localement.** Dans le jeu commun de paramètres, cette fraction a été fixée à 0,59, alors que dans les deux versions de CalTOX, elle a été fixée par défaut à 0,24. Le remplacement de la valeur du jeu commun de paramètres par la valeur utilisée par défaut sous CalTOX 4.0 engendre une réduction de la dose d'exposition au cadmium sur la vie entière d'un facteur 2.

5.2 IMPACT DES PARAMÈTRES DES SUBSTANCES

Deux types de paramètres servant à renseigner les substances chimiques peuvent être distingués :

- Les paramètres physico-chimiques (masse molaire, température de fusion, solubilité, pression de vapeur, constante de Henry, ...), qui, dans des conditions définies de température et de pression, possèdent une valeur invariable. En revanche, cette valeur peut être entachée d'une incertitude.
- Les paramètres faisant intervenir des processus biologiques, qui peuvent présenter des valeurs très différentes selon les conditions (comme par exemple le coefficient de transfert d'un polluant du sol vers une plante qui peut varier en fonction de la nature du sol, de l'espèce du végétal, du niveau de concentration dans le sol,...). Ces paramètres, en particulier les coefficients de transfert, nécessitant des procédures complexes de détermination (comme par exemple le coefficient reliant le niveau d'exposition de la vache au lait produit), peuvent être en outre entachés d'une incertitude élevée.

Les variations de résultats engendrées par ces paramètres paraissent autant liées à la structure du modèle (place du paramètre dans la suite d'équations), qu'à la variabilité et à l'incertitude entourant les valeurs de ces paramètres, et donc à la dispersion des données trouvées dans la littérature.

5.2.1 PARAMÈTRES LES PLUS SENSIBLES POUR L'EXPOSITION À LA 2,3,7,8 TCDD

L'étude de sensibilité fait apparaître comme facteurs importants de variation des résultats : la pression de vapeur, le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes⁴, le coefficient de transfert vers la viande de bœuf et celui vers la viande de volaille⁵.

La littérature présente des valeurs très différentes pour la pression de vapeur de la 2,3,7,8 TCDD. Dans CalTOX 2.3 et 4.0, une valeur de $1,6 \cdot 10^{-6}$ Pa est fournie par défaut. Cette valeur est supérieure d'un facteur 16 à celle proposée dans HHRAP ($9,9 \cdot 10^{-8}$). En utilisant cette dernière dans CalTOX 2.3, la dose d'exposition à la 2,3,7,8 TCDD, moyennée sur la vie entière est multipliée par 3,5.

La valeur du facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes, proposée par défaut dans CalTOX 2.3, est issue d'une publication rapportant des mesures dans des légumes et dans le sol correspondant. Elle est égale à $3,4 \cdot 10^{-1}$ kg sec/kg frais. Celle proposée par défaut sous HHRAP est estimée grâce à une relation quantitative structure-activité (QSAR) et vaut $6,7 \cdot 10^{-4}$ kg sec/kg frais, soit un facteur 500 entre les deux valeurs. En remplaçant la première par la seconde dans CalTOX 2.3, la dose d'exposition moyennée sur la vie entière et calculée lors de la simulation 4 est divisée par 3,5.

Dans CalTOX 2.3 et 4.0, la valeur employée pour le coefficient de transfert viande est supposée adaptée à la viande de bovins. La valeur définie pour la 2,3,7,8 TCDD est de $2,4 \cdot 10^{-1}$ j/kg, alors que celle proposée par défaut dans HHRAP pour le même type de viande est égale à $5,4 \cdot 10^{-2}$ j/kg. Le remplacement de la première par la seconde dans CalTOX 4.0 conduit à une réduction de la dose d'exposition au 2,3,7,8 TCDD, moyennée sur la vie entière d'un facteur 2,5.

Dans le guide de HHRAP, le coefficient de transfert vers la viande de volaille est égal à 151 j/kg. Pour le jeu commun de paramètres⁶, une valeur de 16,6 j/kg a été définie, soit une différence d'un facteur 9 entre les deux données. Le remplacement de la première valeur par la seconde dans le modèle HHRAP, induit une réduction d'un facteur 2,5 de la dose d'exposition au 2,3,7,8 TCDD, moyennée sur la vie entière.

Concernant HESP, il convient de rappeler qu'un certain nombre de paramètres ne sont pas directement modifiables par l'utilisateur. C'est le cas par exemple du coefficient de partage carbone organique-eau, des facteurs de transfert vers la viande, vers le lait, vers les œufs et du facteur de bioconcentration dans le poisson. Pourtant, si l'on pouvait remplacer les valeurs estimées pour le coefficient

4 Le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes permet d'estimer la contamination des parties aériennes des plantes par translocation à partir du sol. Il correspond au rapport entre les concentrations de polluant dans les parties aériennes des plantes et le sol.

5 Le coefficient de transfert vers la viande correspond à la concentration de polluant dans la viande divisée par la quantité journalière de polluant ingéré par l'animal.

6 Les valeurs utilisées dans le jeu commun de paramètres pour le paramétrage des substances sont celles présentées dans l'annexe du rapport intitulé « Evaluation de l'impact sur la santé des rejets atmosphériques des tranches charbon d'une grande installation de combustion - Partie 2: Exposition par voies indirectes » (référence INERIS DRC-03-45956/ERSA-RBn).

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

de partage carbone organique-eau⁷ et le facteur de bioconcentration dans le poisson sous HESP par les valeurs proposées par défaut dans CalTOX 2.3 ou 4.0 par exemple, la dose d'exposition serait multipliée dans chaque cas par un facteur 3.

De la simulation 4 à la simulation 5, les valeurs de tous les paramètres (modifiables par l'utilisateur) de la 2,3,7,8 TCDD fournies par défaut dans les modèles sont remplacées par les valeurs du jeu commun de données. Le tableau suivant permet de mesurer l'impact de ce remplacement dans chaque modèle.

Tableau 4 : Comparaison des résultats obtenus pour la 2,3,7,8 TCDD lors des simulations 4 et 5

Modèle		Simulation 4	Simulation 5
CalTOX 2.3	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$3,7.10^{-12}$	$7,3.10^{-13}$
	Concentrations dans :		
	Les végétaux non exposés (mg/frais)	$4,6.10^{-9}$	$9,4.10^{-10}$
	La viande (mg/kg)	$3,8.10^{-9}$	$5,0.10^{-10}$
HHRAP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$9,6.10^{-13}$	$3,4.10^{-13}$
	Concentrations dans :		
	La viande (mg/kg)	$3,5.10^{-9}$ (volaille)	$3,5.10^{-10}$ (volaille)
	Les œufs (mg/kg)	$2,8.10^{-9}$	$1,7.10^{-10}$
	Le lait de vache (mg/l)	$4,3.10^{-11}$	$2,2.10^{-10}$
HESP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$6,7.10^{-14}$	$2,2.10^{-13}$
	Concentrations dans :		
	Les végétaux aériens (mg/frais)	$1,2.10^{-14}$	$2,3.10^{-11}$
	La viande (mg/kg)	$6,3.10^{-12}$ (bœuf)	$4,5.10^{-10}$ (bœuf)
	Le lait de vache (mg/l)	$1,4.10^{-12}$	$1,0.10^{-10}$
CalTOX 4.0	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$2,9.10^{-13}$	$2,8.10^{-13}$
	Concentrations dans :		
	La viande (mg/kg)	$5,4.10^{-10}$	$3,7.10^{-10}$
	Les végétaux exposés (mg/frais)	$3,8.10^{-11}$	$7,9.10^{-11}$
	Le lait (mg/l)	$1,4.10^{-11}$	$6,3.10^{-11}$

Ce remplacement des valeurs de paramètres de la 2,3,7,8 TCDD conduit à :

⁷ Le coefficient de partage carbone organique-eau⁷ (Koc) est utilisé dans les modèles multimédia d'exposition pour estimer le coefficient de partage particules-eau du sol (Kd) des polluants organiques, selon la relation suivante : $Kd = Koc \times foc$, avec foc : teneur en carbone organique dans le sol.

- Une diminution de la dose d'exposition par un facteur 5 sous CalTOX 2.3, due à une diminution de la concentration dans les végétaux d'un facteur 5 et dans la viande d'un facteur 7,5. Ces diminutions de concentrations sont liées à l'effet cumulé des variations de plusieurs paramètres : le coefficient de partage carbone organique-eau et le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes pour les végétaux non exposés, le facteur de bioconcentration air-plantes et le coefficient de transfert vers la viande pour la viande, en plus des deux paramètres précédents ;
- Une diminution de la dose d'exposition par un facteur 3 sous HHRAP, due à une diminution de la concentration dans la viande de volaille d'un facteur 10 et dans les œufs d'un facteur 17. Ces diminutions de concentrations sont directement imputables aux coefficients de transfert dans la viande de volaille et dans les œufs. Il convient de noter que les valeurs fixées dans HHRAP pour ces deux paramètres et celles utilisées dans le jeu commun de paramètres sont pourtant issues de la même étude scientifique, ce qui témoigne de la difficulté et de l'importance de l'interprétation et de la transposition des données scientifiques en données utilisables pour l'évaluation des risques.

A l'inverse, on notera que la concentration dans le lait de vache est multipliée par un facteur 5. Cette augmentation est liée à l'estimation d'une contamination plus forte de l'herbe broutée par les bovins. La contamination de l'herbe, principalement due à l'absorption foliaire et au dépôt atmosphérique dans la simulation 4, est dominée par le phénomène de translocation à partir du sol dans la simulation 5, car le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes a été multiplié par 250 entre les deux simulations ;

- Une multiplication de la dose d'exposition sous HESP par 3,5. Cette augmentation est liée à une forte augmentation des concentrations de polluants dans les végétaux aériens et dans l'herbe de pâturage des animaux. Ces concentrations sont multipliées par 2000, lorsque le facteur de bioconcentration sol-plantes aériennes estimé à partir de la relation de Briggs et al. (1982, 1983) dans la simulation 4 est remplacé par la valeur du jeu commun de données ;
- L'obtention d'une dose d'exposition quasi identique dans CalTOX 4.0. Toutefois, une variation du pourcentage de contribution des principales voies d'exposition à la dose totale peut être observée. Elle est due à une augmentation du coefficient de transfert vers le lait, à une diminution du coefficient de transfert vers les œufs et à une contamination plus importante des végétaux exposées par l'air. Lors de la simulation 5, le transfert air-plante de la 2,3,7,8 TCDD est estimé à l'aide de la valeur du coefficient de transfert air-plante, défini dans le jeu commun de données, alors que pour la simulation 4, aucune valeur n'est définie a priori pour ce paramètre : la contamination à partir de l'air des végétaux consommés y étant modélisée à l'aide du système d'équations du module de transfert.

5.2.2 PARAMÈTRES LES PLUS SENSIBLES POUR L'EXPOSITION AU NAPHTALÈNE

L'étude de sensibilité fait apparaître comme facteurs de variation importants des résultats : la constante de Henry, le coefficient de partage carbone organique-eau, les facteurs de bioconcentration air- plante⁸ et le facteur de bioconcentration dans le poisson.

Les valeurs trouvées pour la constante de Henry du naphthalène sont relativement variables : elles vont de 10 (valeur par défaut dans HESP) à 48,9 (valeur par défaut proposée dans HHRAP) Pa.m³.mol⁻¹. En utilisant dans CalTOX 4.0, la valeur fournie dans HESP, la dose d'exposition au naphthalène moyennée sur la vie entière est multipliée par 4,5.

Les fiches de données toxicologiques et environnementales de l'INERIS reportent une plage de valeurs allant de 2,6 à 3,4 pour le logarithme décimal du coefficient de partage carbone organique-eau. En faisant varier la valeur de ce paramètre entre ces deux bornes sous CalTOX 2.3, la dose d'exposition moyennée sur la vie entière varie d'un facteur 2.

Le facteur de bioconcentration air-plantes est un paramètre dont les valeurs semblent mal connues. Le plus souvent, les valeurs qui lui sont attribuées ne sont pas issues de mesures, mais de différentes techniques d'estimation. Sous CalTOX 2.3, la valeur attribuée par défaut à ce paramètre est égale à 1,2 m³ d'air /kg frais de végétal. Pour le jeu commun de paramètres, la valeur retenue est de 6,1 m³ d'air /kg frais de végétal, soit un facteur 5 entre les deux valeurs. En fait, ces deux estimations sont basées sur des équations faisant appel à des concepts très différents. Le remplacement de la valeur par défaut de CalTOX 2.3 par celle du jeu commun de paramètres induit une augmentation de la dose d'exposition, moyennée sur la vie entière d'un facteur 2,5.

Le facteur de bioconcentration dans le poisson est estimé dans HESP et CalTOX à partir de deux relations différentes mettant en jeu le coefficient de partage octanol-eau. La valeur ainsi obtenue et proposée dans CalTOX 2.3 et 4.0 pour le naphthalène est égale à 115. La valeur retenue pour le jeu commun de paramètres est, en revanche, issue de la fiche de données toxicologiques et environnementale relative au naphthalène. Elle est égale à 427. En faisant varier le facteur de bioconcentration dans le poisson de 115 à 427, la dose d'exposition au naphthalène, calculée grâce au code de calcul de HESP, retranscrit sous EXCEL, varie d'un facteur 3.

8 Le facteur de bioconcentration air- plante permet d'estimer la contamination des parties aériennes des plantes à partir de la concentration de polluant dans l'air. Il correspond au rapport de concentration entre la partie aérienne des plantes et l'air.

Tableau 5 : Comparaison des résultats obtenus pour le naphthalène lors des simulations 4 et 5

Modèle		Simulation 4	Simulation 5
CalTOX 2.3	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$2,6.10^{-13}$	$6,5.10^{-13}$
	Concentrations dans : Les végétaux exposés (mg/frais)	$1,1.10^{-10}$	$5,1.10^{-10}$
HHRAP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$3,9.10^{-10}$	$5,0.10^{-10}$
	Concentrations dans : Les eaux superficielles (mg/l)	$1,8.10^{-8}$	$1,8.10^{-8}$
	Le poisson (mg/kg)	$4,0.10^{-6}$	$7,9.10^{-6}$
HESP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$3,6.10^{-9}$	$3,6.10^{-9}$
	Concentrations dans : Le poisson (mg/frais)	$2,1.10^{-9}$	$2,1.10^{-9}$
CalTOX 4.0	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$2,5.10^{-13}$	$5,5.10^{-13}$
	Concentrations dans : Les végétaux exposés (mg/frais)	$2,1.10^{-10}$	$5,0.10^{-10}$

Le remplacement (pour les paramètres modifiables) des valeurs fournies par défaut dans les quatre modèles provoque :

- Sous CalTOX 2.3, une augmentation de l'exposition d'un facteur 2,5, due à une accroissement de la concentration des végétaux exposés, imputable à l'augmentation du facteur de bioconcentration air-plantes ;
- Sous HHRAP, une légère augmentation de l'exposition, due à l'augmentation de la concentration dans le poisson d'un facteur 2, augmentation directement imputable à celle de la valeur du facteur de bioconcentration utilisée ;
- Sous HESP, peu de changement. La principale voie d'exposition est l'ingestion de poisson. Or, le facteur de bioconcentration dans le poisson ne peut pas être défini de manière directe par l'utilisateur. Il est estimé à partir d'une relation dépendant du coefficient de partage octanol-eau (pouvant lui être modifié par l'utilisateur de HESP). Dans ces conditions, le remplacement des valeurs fournies par défaut pour le naphthalène par celles du jeu commun de paramètres n'a qu'un effet réduit sur les résultats ;
- Pour CalTOX 4.0, une augmentation de l'exposition d'un facteur 2. Cette augmentation a la même origine que dans CalTOX 2.3, bien que la valeur par défaut du facteur de bioconcentration air-plantes soit estimée par des approches différentes entre les versions 2.3 et 4.0 du modèle.

5.2.3 PARAMÈTRES LES PLUS SENSIBLES SUR L'EXPOSITION AU CADMIUM

L'étude de sensibilité fait apparaître comme facteurs de variation importants des résultats : le coefficient de partage particules du sol-eau (K_d), le coefficient de partage sédiment-eau ($K_d_{\text{sédiment}}$), le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes et le facteur de bioconcentration dans le poisson.

Le coefficient de partage particules du sol-eau est un paramètre extrêmement variable, dépendant de la nature du sol. Des valeurs de 2,7 à 17000 l/kg sont reportées dans le document technique Soil Screening Guidance (US-EPA, 1996). Sous CalTOX 2.3 et 4.0, une valeur de 500000 est présente dans la base de données. Pour le jeu commun de paramètres, la valeur de 40 l/kg proposée par l'IRSN (Beaugelin, 2001) a été retenue. Cette valeur est intermédiaire entre les valeurs retenues par l'US-EPA (suite à la modélisation de l'isotherme de sorption) pour un pH du sol compris entre 4,9 et 6,8. Le remplacement de la valeur du coefficient de partage particules du sol-eau dans CalTOX 2.3 par celle du jeu commun de paramètres induit une réduction de la dose d'exposition, moyennée sur la vie entière, d'un facteur environ égal à 700.

Le coefficient de partage sédiment-eau est renseigné sous CalTOX 2.3 et 4.0 avec la même valeur de 500000 l/kg. En la remplaçant par 40 l/kg, la dose d'exposition, moyennée sur la vie entière et calculée par la version 2.3 est multipliée par 7.

Le facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes est défini dans CalTOX 2.3 avec une valeur de $1,3 \cdot 10^{-1}$ kg sec de sol/kg frais de végétal. En remplaçant cette valeur par la valeur reportée dans les fiches de données toxicologiques et environnementales de l'INERIS et définie par Cobb et al. (2000) à partir de haricots verts, à savoir $1,2 \cdot 10^{-2}$ kg sec de sol/kg frais de végétal, la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est divisée par 10.

Le facteur de bioconcentration dans le poisson est défini sous HHRAP avec une valeur de 250. En remplaçant cette valeur par celle proposée dans CalTOX, qui est égale à 3000, la dose d'exposition au cadmium moyennée sur la vie entière est multipliée par 4,5.

Tableau 6 : Comparaison des résultats obtenus pour le cadmium lors des simulations 4 et 5

Modèle		Simulation 4	Simulation 5
CalTOX 2.3	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$7,5 \cdot 10^{-5}$	$2,3 \cdot 10^{-7}$
	Concentrations dans Les végétaux non exposés (mg/kg frais)	$1,9 \cdot 10^{-1}$	$4,8 \cdot 10^{-4}$
HHRAP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$7,4 \cdot 10^{-8}$	$9,6 \cdot 10^{-8}$
	Concentrations dans Les eaux superficielles (mg/l)	$3,4 \cdot 10^{-6}$	$3,5 \cdot 10^{-6}$
	Le poisson (mg/kg)	$8,4 \cdot 10^{-4}$	$8,1 \cdot 10^{-4}$
	Les fruits et légumes aériens exposés (mg/kg frais)	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$
	Les végétaux souterrains (mg/kg frais)	$5,7 \cdot 10^{-7}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$
HESP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$1,8 \cdot 10^{-8}$	$1,8 \cdot 10^{-7}$
	Concentrations dans Les végétaux aériens (mg/kg frais)	$4,4 \cdot 10^{-6}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$
	Les végétaux souterrains (mg/kg frais)	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$
	Le lait de vache (mg/l)	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$4,1 \cdot 10^{-5}$
	Le poisson	$5,1 \cdot 10^{-6}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$
CalTOX 4.0	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$7,6 \cdot 10^{-8}$	$1,1 \cdot 10^{-7}$
	Concentrations dans Les végétaux exposés (mg/kg frais)	$6,3 \cdot 10^{-5}$	$6,8 \cdot 10^{-5}$
	Les végétaux non exposés (mg/kg frais)	$1,5 \cdot 10^{-9}$	$2,9 \cdot 10^{-7}$
	La viande (mg/kg)	$3,8 \cdot 10^{-5}$	$6,5 \cdot 10^{-5}$
	Le poisson (mg/kg)	$4,9 \cdot 10^{-6}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$
	Les eaux superficielles	$1,6 \cdot 10^{-9}$	$8,4 \cdot 10^{-6}$

Le remplacement des valeurs fournies par défaut pour les paramètres du cadmium dans les quatre modèles provoque :

- Sous CalTOX 2.3, une diminution de l'exposition par un facteur supérieur à 300. Lors des deux simulations, l'exposition est principalement liée à l'ingestion de végétaux non exposés. Dans la simulation 4, la contamination de ces végétaux est due à l'eau d'irrigation. En effet, le coefficient de partage particules du sol-eau très élevé, utilisé par CalTOX, limite la lixiviation du cadmium dans le sol. Or, le modèle suppose que cet apport de cadmium à la couche végétale du sol est partiellement disponible pour les plantes ;

- Sous HHRAP, une légère augmentation de l'exposition. Elle correspond à une absence de variation de concentration dans les matrices contribuant majoritairement à l'exposition et à une augmentation de la concentration dans les végétaux aériens exposés. La contamination de ces végétaux par passage racinaire est accrue dans la simulation 5, du fait de l'emploi d'un facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des plantes 20 fois plus élevé que dans la simulation 4. Il convient aussi de signaler que la concentration des légumes souterrains est multipliée par 20, compte-tenu de l'augmentation équivalente du facteur de bioconcentration sol-légumes souterrains.
- Sous HESP, une multiplication de la dose d'exposition par un facteur 10, liée à l'augmentation de la concentration dans le poisson. Cette augmentation est liée
 - d'une part à une concentration de cadmium plus élevée dans les eaux superficielles. Celle-ci résulte de la valeur plus faible attribuée au coefficient de partage particule du sol-eau du sol (K_d), ce qui se traduit par un relargage plus important du polluant dans les eaux ;
 - d'autre part à une forte augmentation de la valeur du facteur de bioconcentration dans le poisson. Une valeur de 229 ayant été attribuée à ce paramètre dans le jeu commun de données, alors que HESP définit une valeur par défaut égale à 1, pour tous les éléments inorganiques.
- Sous CalTOX 4.0, une augmentation de 50 % de la dose d'exposition. Malgré cette faible différence de résultats, liée à une concentration dans les végétaux exposés qui évolue peu, il faut noter, lors de la simulation 5, l'apparition de l'ingestion de poisson comme troisième voie d'exposition. Lors de cette simulation, la concentration dans le poisson augmente fortement car la concentration dans les eaux superficielles est multipliée par 780. La réduction de la valeur du coefficient de partage particules du sol-eau induit, comme ci-dessus, une plus grande mobilité du polluant.

Remarque : lors de la simulation 4, CalTOX 2.3 fournit une dose d'exposition supérieure de trois ordres de grandeur à celle de CalTOX 4.0. Lors de la simulation 5, cette différence de résultat est ramenée à un facteur 2. Toutefois, CalTOX 2.3 présente toujours une concentration dans les végétaux non exposés de trois ordres de grandeur supérieure à celle calculée avec la version 4.0.

5.2.4 PARAMÈTRES LES PLUS SENSIBLES POUR L'EXPOSITION AU BENZO(A)PYRÈNE

L'étude de sensibilité a mis en évidence le facteur de bioconcentration air-plante comme facteur de variation important des résultats :

Les valeurs définies par défaut sont égales à $5,9 \cdot 10^5$ et à $3,8 \cdot 10^4$ m³/kg frais de végétal respectivement sous CalTOX 2.3 et HHRAP. Comme pour le naphthalène, ces valeurs ont été estimées à partir d'une méthode propre à chaque modèle. En remplaçant la valeur de CalTOX 2.3 par celle de HHRAP et inversement, CalTOX 2.3 présente une dose d'exposition moyennée sur la vie entière divisée par 15 et HHRAP une dose multipliée par 6.

Comme pour la 2,3,7,8 TCDD, le coefficient de partage carbone organique-eau et le facteur de bioconcentration dans le poisson du benzo(a)pyrène ne sont pas directement modifiables sous HESP. Pourtant en remplaçant ces valeurs (égales respectivement à $9,2 \cdot 10^5$ et à $3,9 \cdot 10^4$), obtenues à partir de méthodes d'estimation, par les valeurs issues de l'expérimentation et proposées par défaut dans CalTOX 2.3 et 4.0 (égales respectivement à $2,5 \cdot 10^6$ et $3,3 \cdot 10^2$), la feuille de calcul Excel reprenant le code de calcul de HESP fournit une dose d'exposition divisée par 2,5 dans le premier cas et par 12 dans le second cas.

Tableau 7 : Comparaison des résultats obtenus pour le benzo(a)pyrène lors des simulations 4 et 5

Modèle		Simulation 4	Simulation 5
CalTOX 2.3	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$6,9 \cdot 10^{-9}$	$4,4 \cdot 10^{-8}$
	Concentrations dans :		
	Les végétaux exposés (mg/kg frais)	$2,9 \cdot 10^{-6}$	$2,1 \cdot 10^{-5}$
	La viande (mg/kg)	$5,0 \cdot 10^{-6}$	$3,2 \cdot 10^{-5}$
	Le lait de vache (mg/l)	$2,0 \cdot 10^{-6}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$
HHRAP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$2,6 \cdot 10^{-10}$	$9,7 \cdot 10^{-9}$
	Concentrations dans :		
	Le lait de vache (mg/l)	$2,1 \cdot 10^{-7}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$
	Le poisson (mg/kg)	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$
	La viande (mg/kg)	$5,4 \cdot 10^{-7}$ (bœuf)	$3,1 \cdot 10^{-5}$ (bœuf)
	L'herbe de pâturage (mg/kg frais)	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$
HESP	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$3,8 \cdot 10^{-10}$	$4,3 \cdot 10^{-10}$
	Concentrations dans :		
	Le poisson (mg/kg)	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$
	Les eaux superficielles (mg/l)	$3,0 \cdot 10^{-10}$	$6,7 \cdot 10^{-10}$
CalTOX 4.0	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	$8,5 \cdot 10^{-10}$	$1,3 \cdot 10^{-7}$
	Concentrations dans :		
	Les végétaux exposés (mg/kg frais)	$3,6 \cdot 10^{-7}$	$6,4 \cdot 10^{-5}$
	La viande (mg/kg)	$6,3 \cdot 10^{-7}$	$9,7 \cdot 10^{-5}$
	Le lait de vache (mg/l)	$2,5 \cdot 10^{-7}$	$4,1 \cdot 10^{-5}$

Le remplacement des valeurs fournies par défaut pour les paramètres du benzo(a)pyrène dans les quatre modèles provoque :

- Sous CalTOX 2.3, une augmentation de l'exposition par un facteur 6, liée à une contamination plus élevée de la viande, du lait de vache et des légumes exposés. L'augmentation de la concentration de polluant dans la viande et le lait est liée à une contamination plus élevée des aliments destinés au bétail,

due, comme pour les végétaux exposés, à une valeur plus forte attribuée au facteur de bioconcentration air-plante. Entre les simulations 4 et 5, cette valeur a été multipliée par 7 ;

- Sous HHRAP, une augmentation de l'exposition par un facteur 37, due à une contamination plus élevée de la viande et du lait de vache. L'augmentation de la contamination de ces deux média est, là encore, liée à l'augmentation de la concentration estimée dans les végétaux exposés, et notamment l'herbe destinée aux animaux. En effet, entre les simulations 4 et 5, la valeur du facteur de bioconcentration air-plante est multipliée par plus de 100. Dans HHRAP, le facteur de bioconcentration air-plante K_{pa} est estimé à partir de la relation de corrélation de Bacci (1990, 1992). Mais, suite à plusieurs observations, l'US-EPA considère que cette relation surestime K_{pa} et recommande de diviser la valeur obtenue grâce à cette relation par 100. Dans le jeu commun de paramètres, la même relation de Bacci a été utilisée, mais la valeur obtenue n'a pas été divisée par un facteur supplémentaire. Dans un autre guide de l'US-EPA (1998 b), intitulé « Methodology for assessing health risks associated with multiple pathways of exposure », il est en effet indiqué, à partir de mesures faites sur des épines de pin, des feuilles et des graines de hêtres, que diviser le résultat de cette relation par 100, pourrait sous-estimer les facteurs de bioconcentration pour les hydrocarbures aromatiques polycycliques. D'une manière générale, les valeurs de ce paramètre semblent mal assises.
- Sous HESP, une légère augmentation de l'exposition, qui est liée à l'augmentation de la concentration de polluant dans le poisson, elle-même liée à celle des eaux superficielles. L'accroissement de la concentration de polluant dans les eaux superficielles est due à la diminution du coefficient de partage particules du sol-eau, estimé à partir du K_{ow} ;
- Sous CalTOX 4.0, une augmentation de l'exposition par un facteur 160, liée à une concentration plus importante de polluants dans les végétaux exposés, dans la viande et dans lait. L'augmentation de la concentration dans ces deux dernières matrices est due à celle du fourrage ingéré par les bovins. Quant à la contamination des végétaux exposés (dont le fourrage destiné aux animaux), elle provient, d'après le modèle, du milieu air. Or, entre la simulation 4 et la simulation 5, le mode d'estimation du transfert air-plante pour le benzo(a)pyrène est différent : la concentration des végétaux exposés, estimée par le système d'équations différentielles du module de transfert dans la simulation 4, est calculée, dans la version 5, à l'aide du coefficient de partage K_{pa} (valeur du jeu commun de données), fourni comme paramètre d'entrée.

5.3 IMPACT DES ÉQUATIONS DE CALCUL

Lors de la septième étape, les paramètres des modèles pouvant être renseignés par l'utilisateur sont définis dans les quatre modèles avec les mêmes valeurs, ainsi que le poids, les consommations alimentaires et la quantité de sol ingéré par la cible humaine étudiée. La même cible est prise en référence et l'exposition est réduite à l'ingestion de sol, de fruits et légumes, de viande, de lait de vache, d'œufs et de poisson.

La comparaison des résultats obtenus permet de mettre en évidence des différences de représentation mathématique entre les modèles.

5.3.1 RÉSULTATS DE LA SIMULATION 7 POUR LA 2,3,7,8 TCDD

Tableau 8 : Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière et principales voies d'exposition pour la 2,3,7,8 TCDD

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
CalTOX 2.3	$4,2 \cdot 10^{-13}$	38 % : ingestion de viande 28 % : ingestion de poisson 20 % : ingestion de végétaux 10 % : ingestion de lait de vache
HHRAP	$5,3 \cdot 10^{-13}$	47 % : ingestion de viande 40 % : ingestion de lait de vache
HESP	$2,2 \cdot 10^{-13}$	33 % : ingestion de viande 30 % : ingestion de lait de vache 28 % : ingestion de poisson
CalTOX 4.0	$2,8 \cdot 10^{-13}$	55 % : ingestion de viande 27 % : ingestion de végétaux 15 % : ingestion de lait de vache

Tableau 9 : Concentrations moyennes de 2,3,7,8 TCDD dans les milieux pendant la durée d'exposition

Milieux d'exposition	CalTOX 2.3	HHRAP	HESP	CalTOX 4.0
Viande (mg/kg)	$4,0 \cdot 10^{-10}$	$2,1 \cdot 10^{-9}$ (bœuf) $5,7 \cdot 10^{-10}$ (volaille) $2,3 \cdot 10^{-10}$ (porc)	$4,5 \cdot 10^{-10}$ (bœuf) $7,3 \cdot 10^{-12}$ (volaille)	$3,7 \cdot 10^{-10}$
Lait de vache (mg/l)	$6,7 \cdot 10^{-11}$	$3,4 \cdot 10^{-10}$	$1,0 \cdot 10^{-10}$	$6,3 \cdot 10^{-11}$
Herbe de pâturage (mg/kg frais)	$8,0 \cdot 10^{-11}$	$5,0 \cdot 10^{-10}$	$2,3 \cdot 10^{-11}$	$7,9 \cdot 10^{-11}$
Fruits et légumes (mg/kg frais)	$8,0 \cdot 10^{-11}$ (exposés)	$2,3 \cdot 10^{-11}$ (aériens exposés)	$2,3 \cdot 10^{-11}$ (aériens)	$7,9 \cdot 10^{-11}$ (exposés)
Poisson (mg/kg)	$4,0 \cdot 10^{-9}$	$8,8 \cdot 10^{-10}$	$2,1 \cdot 10^{-9}$	$4,7 \cdot 10^{-11}$
Eaux superficielles (mg/l)	$2,2 \cdot 10^{-13}$ (fraction dissoute)	$7,5 \cdot 10^{-14}$ (fraction dissoute)	$3,1 \cdot 10^{-14}$ (concentration totale)	$2,4 \cdot 10^{-15}$ (fraction dissoute)
Sol superficiel (mg/kg)	$4,4 \cdot 10^{-10}$	$1,5 \cdot 10^{-9}$	$3,3 \cdot 10^{-9}$	$4,4 \cdot 10^{-12}$

Si les doses d'exposition moyennées sur la vie entière et calculées par les quatre modèles sont proches, en revanche, la contribution des voies à l'exposition totale est différente. Ainsi, CalTOX 2.3 et HESP indiquent que plus d'un quart de l'exposition est liée à l'ingestion de poisson, tandis que, sous HHRAP et CalTOX 4.0, cet aliment joue un rôle beaucoup moins important, voire négligeable.

La concentration dans le poisson la plus élevée est obtenue avec CalTOX 2.3 et la plus faible avec CalTOX 4.0 : près de deux ordres de grandeur séparent les concentrations obtenues par ces deux modèles dans cette matrice. Cette différence de concentration dans le poisson est directement liée à celle des eaux superficielles. Celles-ci sont principalement contaminées par érosion à partir du sol superficiel. Or, le modèle de diffusion de la pollution dans le sol à partir de la surface n'est pas le même dans les versions 2.3 et 4.0. Dans la première version, l'algorithme de calcul utilisé induit une mobilité moins grande des polluants dans le sol, d'où des concentrations plus élevées dans la couche superficielle du sol. Dans le cas de la 2,3,7,8 TCDD, il y a un facteur 100 entre la concentration calculée par CalTOX 2.3 et celle calculée par CalTOX 4.0 pour le sol superficiel⁹.

Pour les autres modèles, la différence de concentration dans le poisson est liée à l'utilisation d'équations différentes pour le calcul de cette concentration (les équations utilisées par chaque modèle pouvant par ailleurs être différentes selon les substances traitées) :

- sous CalTOX (quelle que soit la version), sont utilisés un facteur de bioconcentration et la concentration de polluant dissous dans l'eau superficielle,
- sous HESP, la concentration est estimée à partir d'un facteur de bioconcentration et de la concentration totale de polluant dans l'eau superficielle,
- sous HHRAP, la concentration dans le poisson est calculée à l'aide d'un facteur de bioaccumulation et de la concentration de polluant dans les sédiments.

Pour les autres matrices jouant un rôle important dans l'exposition (viande, lait, végétaux exposés), les concentrations estimées par CalTOX 2.3 et 4.0 restent proches, d'où l'obtention, pour ce cas de figure, d'une dose totale d'exposition peu différente malgré tout, entre ces deux versions du modèle.

Les différences de concentrations dans la viande, le lait et les végétaux peuvent, en revanche, être plus marquées avec les deux autres modèles.

Dans HHRAP, trois types différents de viande sont considérés, dans HESP deux types et dans CalTOX (quelle que soit la version), un seul. Sous CalTOX, d'après les équations, cette viande est censée correspondre à de la viande bovine. Sa concentration est 5 fois inférieure à celle calculée sous HHRAP, mais elle présente en fait une valeur intermédiaire entre les différents types de viande pris en compte sous HHRAP. Au final, dans cet exemple, la dose d'exposition par ingestion de viande, calculée par HHRAP n'est pas très différente de celle de

⁹ Lors des simulations précédentes, l'impact de cette différence d'approche sur les résultats de CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0 est accentué par la prise en compte de l'irrigation des végétaux à partir des eaux superficielles.

CalTOX. Concernant HESP, on remarquera principalement une concentration dans la viande de volaille très inférieure à celle estimée par HHRAP. Cette différence est principalement due à la valeur du coefficient de transfert, estimée, sous HESP, par une relation de type QSAR. La valeur ainsi obtenue est très inférieure à celle utilisée dans le jeu commun de données.

La concentration dans le lait sous CalTOX est également inférieure d'un facteur 5 à celle de HHRAP. Cela est dû à une contamination plus faible de l'herbe de pâturage consommée par le bétail. Sous CalTOX, cette herbe est principalement contaminée par voie foliaire, alors que sous HHRAP, c'est la contamination par translocation à partir du sol qui domine. En effet, dans HHRAP, l'herbe de pâturage est supposée croître dans une couche de sol non bêchée, de faible épaisseur (cf. paragraphe 5.1). Les dépôts atmosphériques étant supposés se diluer de manière homogène sur la hauteur de sol considérée, la concentration de polluant dans une couche de sol est d'autant plus élevée que son épaisseur est faible. Dans HHRAP, l'herbe de pâturage est donc soumise à une pollution de sol plus élevée que les autres végétaux, dont les racines sont supposées couvrir toute la hauteur du sol bêché, et que l'herbe, sous CalTOX et HESP, dont la contamination n'est pas différenciée de celles des autres végétaux aériens.

En revanche et contrairement à l'herbe de pâturage, les végétaux aériens exposés et destinés à l'alimentation des cibles humaines sont moins contaminés sous HHRAP que sous CalTOX. En effet, HHRAP fait intervenir un facteur d'atténuation supplémentaire de 0,01, pour les substances lipophiles ($K_{ow} > 4$), dans l'équation de calcul de la contamination des fruits et légumes par absorption foliaire. Ce coefficient a été introduit pour tenir compte du fait que le facteur de bioconcentration air- plante a été estimé à partir d'une relation établie sur des feuilles, et qu'il peut donc surestimer la contamination de fruits et légumes charnus par des substances lipophiles, migrant difficilement vers les parties internes des végétaux.

Concernant HHRAP et HESP, on peut constater que les concentrations de polluants obtenues dans les végétaux aériens sont identiques, et cela malgré des divergences importantes dans l'algorithme de calcul de ces deux modèles. Cette égalité de concentrations résulte de trois éléments : la non prise en compte du phénomène d'absorption foliaire des polluants gazeux dans HESP, la prédominance de la voie racinaire dans la contamination des fruits et légumes sous HHRAP, le rôle réduit joué par les phénomènes d'atténuation naturelle des polluants dans les sols (pris en compte dans HHRAP), dans le cas de la dioxine.

5.3.2 RÉSULTATS DE LA SIMULATION 7 POUR LE NAPHTALÈNE

Tableau 10 : Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière et principales voies d'exposition pour le naphthalène

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
CalTOX 2.3	$6,4 \cdot 10^{-13}$	91 % : ingestion de végétaux
HHRAP	$5,5 \cdot 10^{-10}$	48 % : ingestion d'eau 43 % : ingestion de poisson

HESP	$3,6.10^{-9}$	87 % : ingestion de poisson 13 % : ingestion de végétaux
CalTOX 4.0	$5,4.10^{-13}$	87 % : ingestion de végétaux 10 % : ingestion de poisson

Tableau 11 : Concentrations moyennes de naphthalène dans les milieux pendant la durée d'exposition

Milieux d'exposition	CalTOX 2.3	HHRAP	HESP	CalTOX 4.0
Fruits et légumes (mg/kg frais)	$5,1.10^{-10}$ (exposés) $2,8.10^{-10}$ (non exposés)	$1,2.10^{-8}$ (aériens exposés) $1,0.10^{-7}$ (souterrains)	$6,4.10^{-8}$ (aériens exposés) $5,6.10^{-7}$ (souterrains)	$5,0.10^{-10}$ (exposés) $4,1.10^{-11}$ (non exposés)
Sol végétal (mg/kg)	$9,7.10^{-11}$	$2,3.10^{-7}$	$1,3.10^{-6}$	$1,2.10^{-10}$
Poisson (mg/kg)	$1,8.10^{-9}$	$7,9.10^{-6}$	$1,1.10^{-4}$	$1,8.10^{-9}$
Eaux superficielles (mg/l)	$4,2.10^{-12}$	$1,9.10^{-8}$	$4,7.10^{-7}$	$4,2.10^{-12}$
Sol superficiel (mg/kg)	412.10^{-10}	$9,8.10^{-9}$	$2,6.10^{-5}$	$1,3.10^{-10}$

Pour cette septième étape, les doses d'exposition moyennées sur la vie entière et calculées à l'aide des deux versions de CalTOX sont proches et les principales voies d'exposition sont les mêmes. En revanche, les doses d'exposition obtenues avec HHRAP et HESP sont supérieures de trois ordres de grandeur à celles de CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0.

Ces différences de résultats sont dues en premier lieu aux différences de concentrations calculées pour le poisson. Les concentrations estimées par CalTOX (quelle que soit la version) sont 4400 fois inférieures à la valeur fournie par HHRAP et 610000 fois inférieure à celle de HESP. Pour le naphthalène, la concentration dans le poisson est pourtant calculée par les quatre modèles à partir d'un facteur de bioconcentration du même ordre de grandeur et de la concentration de polluant dans l'eau superficielle (tout le polluant étant quasiment sous forme dissoute dans l'eau, d'après HHRAP et CalTOX).

Les différences de concentration relevées pour le poisson sont donc dues aux différences de concentrations calculées pour les eaux superficielles (un facteur 4500 entre la valeur donnée par HHRAP et celles de CalTOX 2.3 ou 4.0, 5 ordres grandeur entre celles de HESP et celles de CalTOX 2.3 ou 4.0). En effet, les concepts utilisés par ces modèles pour définir la contamination des eaux superficielles sont très variables. Ainsi, HESP suppose un apport de polluant par ruissellement et par décharge de la nappe, et une perte par écoulement hors de la zone d'étude. Quant à HHRAP et CalTOX, ils ne considèrent aucun lien du milieu « eaux superficielles » avec la nappe souterraine. En revanche, ils prennent en compte les apports suivants : dépôts atmosphériques, ruissellement, érosion, diffusion à partir de l'atmosphère (plus la remise en suspension des sédiments pour CalTOX) et les pertes suivantes : sédimentation, évaporation ou diffusion

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

vers l'atmosphère, sortie de la zone d'étude par écoulement. Les différences de concentrations dans les eaux superficielles s'expliquent aussi par des différences de concentration marquées dans la couche de sol superficiel, selon les modèles, car l'apport par ruissellement ou érosion à partir du sol constitue une source majeure de contamination des eaux superficielles .

Enfin, les concentrations de naphthalène estimées dans les fruits et légumes participent à la divergence des doses d'exposition fournies par les modèles. Ainsi, la concentration dans les végétaux exposés sous HESP est supérieure de deux ordres de grandeur à celles fournies par CalTOX (quelle que soit la version) et celle des végétaux souterrains est supérieure de 4 ordres de grandeur à celle des végétaux non exposés obtenues par CalTOX 4.0.

Sous CalTOX, ce sont les légumes aériens les plus contaminés, et leur contamination est due à l'absorption foliaire de polluant à partir de l'atmosphère. Sous HHRAP et HESP, la contamination des végétaux est principalement liée à celle du sol et ce sont les légumes-racines qui sont les plus contaminés. La concentration dans le sol végétal estimée par CalTOX est en effet 2000 fois inférieure à celle calculée par HHRAP et plus de 10000 fois inférieure à celle utilisée en donnée d'entrée dans HESP. La manière de modéliser la concentration dans le sol végétal est en fait très différente entre les modèles. Dans HHRAP, les polluants atmosphériques se déposent entièrement sur la couche de sol végétal et sont censés se répartir de manière homogène dans cette couche, une partie des polluants présents étant éliminée au cours du temps par plusieurs phénomènes d'atténuation naturelle (lixiviation, volatilisation, ruissellement, érosion et dégradation éventuelle). Pour HESP, la concentration de polluant dans le sol a été calculée en supposant l'ensemble des dépôts atmosphériques répartis de manière homogène dans la couche de sol végétal, de hauteur prédéfinie, sans prise en compte d'aucun phénomène d'atténuation naturelle. Dans CalTOX, la couche de sol végétal n'est pas directement contaminée par les dépôts atmosphériques, mais par diffusion et lixiviation de la pollution à partir de la couche superficielle. Toutefois, comme indiqué dans le paragraphe précédent, l'algorithme de calcul n'est pas le même pour les deux versions de ce modèle.

5.3.3 RÉSULTATS DE LA SIMULATION 7 POUR LE CADMIUM

Tableau 12 : Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière et principales voies d'exposition pour le cadmium

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
CaITOX 2.3	$2,0 \cdot 10^{-7}$	87 % : ingestion de végétaux
HHRAP	$9,5 \cdot 10^{-8}$	52 % : ingestion d'eau 25 % : ingestion de poisson 17 % : ingestion de végétaux
HESP	$1,8 \cdot 10^{-7}$	89 % : ingestion de poisson 11 % : ingestion de végétaux
CaITOX 4.0	$1,0 \cdot 10^{-7}$	62 % : ingestion de végétaux 26 % : ingestion de viande

Tableau 13 : Concentrations moyennes de cadmium dans les milieux pendant la durée d'exposition

Milieu d'exposition	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
Fruits et légumes (mg/kg frais)	$4,3 \cdot 10^{-4}$ (non exposés) $1,8 \cdot 10^{-5}$ (exposés)	$1,2 \cdot 10^{-5}$ (souterrains) $1,3 \cdot 10^{-5}$ (aériens exposés)	$1,6 \cdot 10^{-5}$ (souterrains) $1,6 \cdot 10^{-5}$ (aériens exposés)	$9,2 \cdot 10^{-8}$ (non exposés) $6,7 \cdot 10^{-5}$ (exposés)
Eaux superficielles	$2,4 \cdot 10^{-6}$	$3,5 \cdot 10^{-6}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$
Poisson	$5,6 \cdot 10^{-4}$	$8,1 \cdot 10^{-4}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$

Les doses d'exposition moyennées sur la vie entière calculées à l'aide des quatre modèles diffèrent au maximum d'un facteur 2. Mais, les contributions des voies d'exposition à la dose totale sont divergentes d'un modèle à un autre.

Dans CaITOX 2.3, l'exposition est principalement due à l'ingestion de légumes non exposés, dont la concentration est 36 fois supérieure à celle calculée par HHRAP et 27 fois supérieure à celle calculée par HESP, pour les légumes souterrains. En effet, dans ces deux derniers modèles, le facteur de bioconcentration sol-racines ($K_{ps-root}$) peut être renseigné à partir d'une valeur spécifique, alors que dans CaITOX 2.3, $K_{ps-root}$ n'est pas une donnée d'entrée, mais est calculé comme le produit du facteur de bioconcentration sol-parties aériennes des végétaux (K_{ps}) multiplié par 35. Cette valeur correspond en fait au rapport de $K_{ps-root}$ par K_{ps} , estimés respectivement par les relations de corrélation de Topp et al. (1986) et de Travis et al. (1988), relations basées sur le coefficient de partage octanol-eau. Cette approche, d'une nature très incertaine pour les substances organiques, n'a donc aucun fondement pour estimer le facteur de bioconcentration sol-légumes racines des substances inorganiques.

Dans CalTOX 4.0 aussi, l'exposition repose en majorité sur l'ingestion de végétaux. Mais, contrairement à CalTOX 2.3, pour lequel l'exposition provient principalement des végétaux non exposés (végétaux aériens non exposés à la contamination aérienne et végétaux souterrains), par transfert à partir du sol, ici ce sont les végétaux exposés qui sont de loin les plus contaminés, et ce par le biais du dépôt direct des particules atmosphériques.

Sous CalTOX 2.3, la concentration dans les végétaux exposés est en effet 4 fois inférieure à celle calculée avec CalTOX 4.0 et celle des végétaux non exposés 4700 fois supérieure à celle de CalTOX 4.0. Entre ces deux versions, le mode d'estimation de la concentration dans les végétaux a été revu. Dans la version 4.0, la concentration des végétaux non exposés n'est plus estimée à partir du coefficient Kps multiplié par 35 (comme indiqué ci-dessus), mais à partir de la concentration dans l'eau du sol, d'un facteur de bioconcentration entre l'eau du sol et le xylème (TSCF)¹⁰ et d'un coefficient de partage entre le xylème et la tige (K_{s_x}). Quant aux végétaux exposés, leur concentration au cadmium est estimée par le module de transfert alors que dans CalTOX 2.3, elle est calculée à partir des concentrations dans l'air et dans le sol calculées par le module de transfert et des coefficients de partage Kps et Kpa, définis comme données d'entrée du modèle.

Selon la version de CalTOX, l'exposition des individus au cadmium ne met donc pas en jeu les mêmes média environnementaux. Dans la première version, elle passe par une accumulation de polluant dans le sol, à partir du dépôt atmosphérique. Dans la seconde, un dépôt direct sur les végétaux explique l'exposition.

Pour HHRAP, les deux principales voies d'exposition sont l'ingestion d'eau et l'ingestion de poisson. Comme indiqué dans le paragraphe 4.2, la contamination de la ressource en eau pour l'alimentation humaine, qu'elle soit d'origine superficielle ou souterraine n'est pas prise en compte dans HESP.

Pour ce modèle, qui indique une concentration dans l'eau destinée à l'alimentation nulle, la principale voie d'exposition est l'ingestion de poisson, dont la concentration est 13 fois plus élevée que celle calculée par CalTOX 4.0. Cette différence est directement liée à celle observée pour les eaux superficielles.

10 : TSCF = 1 pour les substances inorganiques comme le cadmium
Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

5.3.4 RÉSULTATS DE LA SIMULATION 7 POUR LE BENZO(A)PYRÈNE

Tableau 14 : Doses totales d'exposition moyennées sur la vie entière et principales voies d'exposition pour le benzo(a)pyrène

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière (mg/kg/j)	Principales voies d'exposition
CalTOX 2.3	$4,8 \cdot 10^{-8}$	42 % : ingestion de végétaux 28 % : ingestion de viande 19 % : ingestion de lait de vache
HHRAP	$9,8 \cdot 10^{-9}$	77 % : ingestion de lait de vache 19 % : ingestion de viande
HESP	$4,3 \cdot 10^{-10}$	98 % : ingestion de poisson
CalTOX 4.0	$1,3 \cdot 10^{-7}$	45 % : ingestion de végétaux 30 % : ingestion de viande 20 % : ingestion de lait de vache

Tableau 15 : Concentrations moyennes de benzo(a)pyrène dans les milieux pendant la durée d'exposition

Milieux d'exposition	CalTOX 2.3	HHRAP	HESP	CalTOX 4.0
Fruits et légumes (mg/kg frais)	$2,1 \cdot 10^{-5}$ (exposés)	$2,6 \cdot 10^{-7}$ (aériens exposés)	$1,2 \cdot 10^{-9}$ (aériens exposés)	$6,4 \cdot 10^{-5}$ (exposés)
Lait de vache	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-9}$	$4,1 \cdot 10^{-5}$
Viande (mg/kg)	$3,3 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-5}$ (bœuf)	$1,1 \cdot 10^{-8}$ (bœuf)	$9,7 \cdot 10^{-5}$
Poisson (mg/kg)	$8,7 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-7}$
Eaux superficielles (mg/l)	$3,3 \cdot 10^{-8}$ (fraction dissoute)	$5,8 \cdot 10^{-10}$ (fraction dissoute)	$6,7 \cdot 10^{-10}$ (concentration totale)	$6,6 \cdot 10^{-11}$ (fraction dissoute)

La dose d'exposition moyennée sur la vie entière calculée à l'aide de CalTOX 4.0 est 2,5 fois supérieure à celle calculée avec CalTOX 2.3, 13 fois supérieure à celle calculée avec HHRAP et plus de 300 fois supérieure à celle calculée à l'aide de HESP. Ces variations sont liées aux différences de concentrations dans les végétaux aériens obtenues dans les quatre modèles (un facteur 3 entre les concentrations fournies par CalTOX 4.0 et CalTOX 2.3, 2 ordres de grandeur entre les concentrations de CalTOX 4.0 et HHRAP et 4 ordres de grandeur entre celles de CalTOX 4.0 et HESP).

Dans CalTOX (quelle que soit la version) et HHRAP, la contamination de ces végétaux est principalement due à l'absorption de polluant gazeux par voie foliaire. Or, ce type de transfert n'est pas pris en compte dans HESP. La non prise en compte de ce phénomène se répercute sur le niveau de contamination des produits d'origine animale. Dans CalTOX et HHRAP, ces produits sont

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

principalement contaminés via l'ingestion d'herbe par les animaux. Sous HESP, le phénomène d'absorption foliaire par l'herbe n'étant pas pris en compte, la teneur de cette dernière en benzo(a)pyrène est beaucoup moins forte et la contamination des animaux se fait principalement par l'ingestion directe de sol, mais avec un niveau global d'exposition beaucoup moins élevé.

Entre HHRAP et CalTOX 2.3, la différence de concentration dans les légumes aériens est liée à l'emploi du coefficient d'atténuation de 0,01 pour les végétaux « charnus » (cf. paragraphe 5.3.1), facteur qui vient réduire l'efficacité du phénomène de transfert des polluants par absorption foliaire pour les substances lipophiles.

Entre CalTOX 4.0 et CalTOX 2.3, la différence de concentration dans les légumes aériens est due, d'une part à une répartition différente du polluant entre la fraction gazeuse et la fraction particulaire, et d'autre part à une définition et une utilisation différente du coefficient de transfert air- plante K_{pa} entre les deux versions du modèle. Dans la version 4.0, ce coefficient représente effectivement le rapport entre la concentration dans la plante et la concentration de polluant dans l'air et sert à calculer, la contribution du benzo(a)pyrène atmosphérique, à la fois sous forme gazeuse et sous forme particulaire, à la contamination de la plante. Dans CalTOX 2.3, en revanche, le K_{pa} ne sert pas à calculer la contamination de la plante à partir du polluant présent sous forme particulaire dans l'air. Un coefficient de partage différent (K_{pa} -part) est défini pour le transfert du polluant des particules vers les plantes. Une valeur unique est proposée par défaut pour ce paramètre, quelle que soit la substance chimique.

De fortes différences de concentrations sont également retrouvées dans le poisson (un facteur d'environ 480 entre les concentrations obtenues par CalTOX 2.3 et CalTOX 4.0). Comme dans le cas du naphthalène, ces différences sont principalement dues à des concentrations très différentes calculées pour l'eau superficielle. Il convient également de noter que HESP, pour lequel cette voie d'exposition est de loin la plus importante, utilise un facteur de bioconcentration, (estimé par une QSAR) 8 fois plus élevé que la valeur retenue dans le jeu commun de données.

6 LEÇONS TIRÉES DE L'ÉTUDE

- Les résultats obtenus sont plus ou moins différents selon les substances et les modèles. Dans les exemples développés ci-dessus, des résultats variant de 4 ordres de grandeur ont été obtenus pour le cadmium et le naphtalène. Même si les deux versions de CalTOX ont souvent donné des doses d'exposition proches, des résultats divergeant de trois ordres de grandeur ont également été obtenus pour une même substance et une même simulation.

Les résultats les plus élevés ne sont pas toujours obtenus avec le même modèle. Dans cette étude, il est apparu que, pour chaque substance, les quatre modèles étudiés se classaient de manière différente. Ainsi, les niveaux d'exposition les plus élevés étaient obtenus avec HESP pour le naphtalène, avec CalTOX 2.3 pour le cadmium et avec l'une ou l'autre version de CalTOX pour le benzo(a)pyrène. Les niveaux d'exposition les plus faibles étaient fournis par CalTOX 4.0 pour le naphtalène, par HHRAP pour le cadmium et par HESP pour le benzo(a)pyrène.

De manière analogue, le modèle qui donnera les doses d'exposition et donc les risques les plus élevés pourra changer en fonction des voies d'exposition privilégiées et donc du choix du scénario.

Même lorsque les doses totales d'exposition sont proches, la contribution des différentes voies à l'exposition et les concentrations de polluants dans les milieux peuvent être très différentes, révélant l'existence d'hypothèses de calcul très divergentes entre les modèles.

A partir des outils de modélisation aujourd'hui disponibles au public, **le choix d'un modèle unique, donnant toujours les résultats les plus élevés dans un souci de prudence et de simplicité, n'est donc pas possible.**

- Lors de l'utilisation d'un modèle, la première règle à respecter consiste à **réfléchir et à définir de manière appropriée les cibles et les voies à prendre en compte en fonction des usages existants ou envisagés sur le site étudié.**

Lors de la première simulation réalisée avec le modèle HHRAP, la dose maximale d'exposition du nourrisson à la 2,3,7,8 TCDD était 21 fois supérieure à celle calculée pour l'adulte. En fonction de la cible retenue, l'indice de risque peut donc être très différent.

D'une manière plus marquée encore, on a vu dans les exemples précédents que le fait de supprimer l'irrigation par l'eau superficielle dans CalTOX divisait la dose d'exposition au cadmium, moyennée sur la vie entière par 300. En d'autres termes, dans le cadre d'une évaluation des risques, la prise en compte par défaut ou non de cet usage de l'eau superficielle aurait fait varier l'excès de risque individuel lié au cadmium d'un facteur 300.

- Concernant le paramétrage des modèles, il est recommandé de **ne pas utiliser les valeurs fournies par défaut sans réflexion.** Certains paramètres environnementaux, certains paramètres d'exposition ou de substances sont en effet très variables et/ou très incertains.

Parmi ces paramètres, quelques-uns se retrouvent dans tous les modèles et leur usage fréquent a conduit les évaluateurs à définir implicitement ou explicitement des plages de variation acceptables pour ceux-là. C'est le cas par exemple pour l'ingestion de sol par les jeunes enfants. En dehors des phénomènes de pica, les valeurs affectées à ce paramètre sont généralement comprises entre 50 et 200 mg/j. En revanche, un paramètre comme l'ingestion de sol par la volaille est d'un usage moins courant. Ainsi la valeur par défaut dans CalTOX est de $1,3 \cdot 10^{-5}$ kg/j, tandis qu'elle s'élève à $2,2 \cdot 10^{-2}$ kg/j dans HHRAP. Dans les exemples développés ci-dessus, il est apparu qu'une telle différence de valeurs engendrait une variation d'un facteur 10 de l'excès de risque individuel lié à la 2,3,7,8 TCDD.

Il convient aussi de noter que les valeurs proposées par défaut pour les quantités d'aliments consommés et les fractions d'aliments autoproduites ou d'origine locale peuvent varier avec de fortes amplitudes selon les modèles. Dans HHRAP, le scénario retenant la consommation de poisson pêché localement propose de prendre en compte une quantité supérieure d'un facteur 100 à celle utilisée dans HESP.

- **Une attention toute particulière doit être portée aux paramètres des substances.** A plusieurs reprises, il a été montré que le comportement des modèles pouvait être très sensible à ces paramètres, alors même que ces derniers pouvaient être très variables en fonction des conditions environnementales, et aussi très incertains.

Pour les métaux, il faut rappeler l'importance d'une définition correcte du coefficient de partage particules du sol-eau (K_d), en fonction des propriétés du sol. Ainsi, la différence entre la valeur retenue par défaut dans CalTOX et celle du jeu commun de paramètres s'est accompagnée d'une variation d'un facteur 700 de la dose d'exposition au cadmium, moyennée sur la vie entière.

Concernant les substances organiques, le facteur de bioconcentration air-plantes apparaît comme un paramètre particulièrement mal connu. Il est estimé à partir de diverses méthodes pas ou mal validées. Parmi les quatre modèles intégrés dans cette étude, trois prennent en compte ce mode de transfert : CalTOX 2.3, CalTOX 4.0 et HHRAP. Mais chacun de ces modèles utilise un mode d'estimation différent.

Ainsi, lorsque la valeur définie à partir de la méthode d'estimation de HHRAP est remplacée par celle du jeu commun de paramètres, la dose totale d'exposition au benzo(a)pyrène, fournie par HHRAP, est multipliée par 50.

Il faut aussi citer :

- les facteurs de bioconcentration ou bioaccumulation dans le poisson, pouvant présenter des valeurs très variables selon les modèles et les sources bibliographiques consultées,
- et les facteurs de bioconcentration sol-plantes, paramètres à la fois variables et incertains, qui constituent comme le facteur de bioconcentration air-plante, un élément important dans l'estimation de la contamination de toute la chaîne alimentaire.

Faute de mesures directes dans les végétaux, les facteurs de bioconcentration utilisés pour les plantes devraient être définis en tenant compte des caractéristiques du sol et des espèces végétales considérées. Or, généralement, les modèles fournissent peu ou pas d'information sur l'origine des données proposées par défaut.

Par ailleurs, l'analyse qui est faite des publications pour dériver une valeur de paramètre est souvent rapide, voire entachée d'erreurs de calcul (cf. rapport IERNIS DRC/ERSA/RBn-67645/204). Compte-tenu de toutes ces approximations, **il apparaît nécessaire dans les études d'évaluation de risques, de travailler sur la définition des paramètres auxquels le modèle s'est avéré le plus sensible.**

A fortiori, un modèle comme HESP où de nombreux paramètres ne sont pas modifiables par l'utilisateur est un modèle qui n'est pas adapté pour évaluer les expositions et les risques liés à des situations spécifiques. Ce type d'outils peut servir, par exemple, dans une démarche de hiérarchisation des priorités, à comparer des situations à partir d'un même crible, mais il n'a pas vocation à servir d'outil de modélisation pour évaluer, de manière détaillée, les expositions liées à des situations particulières.

- Les équations propres à chaque modèle expliquent également une part importante des différences de résultats observées (cf. les résultats comparés entre les modèles lors de la simulation 7).

Certains mécanismes de transfert peuvent être considérés par certains modèles et pas par d'autres. Ainsi, le fait que la dose d'exposition au benzo(a)pyrène calculée par HESP soit plus faible que celles estimées par les trois autres modèles est lié à la non prise en compte dans HESP du phénomène d'absorption foliaire des polluants par les plantes. Les concentrations dans les fruits et légumes, dans le lait et la viande calculées sous HESP sont alors inférieures de 3 à 4 ordres de grandeur à celles calculées à l'aide de HHRAP et CalTOX. Ce phénomène de transfert apparaît donc comme un élément déterminant malgré le fait que le benzo(a)pyrène soit considéré comme un polluant présent dans l'air essentiellement sous forme particulaire.

Parfois les représentations mathématiques adoptées sont totalement différentes d'un modèle à un autre. C'est le cas entre HHRAP et CalTOX dans le calcul de la concentration de polluant dans le sol. Dans le cas du naphthalène, cela conduit à un schéma d'exposition différent ; d'après CalTOX, l'exposition est liée à la contamination directe des végétaux à partir de l'atmosphère, alors que pour HHRAP, l'exposition passe par un phénomène d'accumulation du polluant dans le sol.

Ces différences de représentation mathématique peuvent aussi traduire un parti-pris différent concernant le type d'environnement à modéliser (comme l'existence ou non d'une nappe souterraine alimentant une rivière). Or ces éléments de base perceptibles à travers les équations utilisées ne sont pas toujours commentés de manière explicite dans la documentation accompagnant le modèle ou le logiciel.

Dans d'autres cas, un jeu d'équations différents peut avoir été appliqué sur un même schéma de représentation de l'environnement. Ceci a été observé entre CalTOX 2.3 et CalTOX4.0 pour la modélisation des transferts de polluant dans le sol à partir d'un dépôt en surface. L'algorithme de calcul utilisé dans la version 4.0 induit une plus grande mobilité du polluant dans le sol par lixiviation, avec pour conséquence, des concentrations en 2,3,7,8 TCDD inférieures de deux ordres de grandeur dans les eaux superficielles et le poisson par rapport à celles calculées par CalTOX 2.3.

D'autres fois, la même équation peut servir de base à plusieurs modèles, mais de légères modifications dans la forme de l'équation peuvent néanmoins avoir été introduites dans certains modèles, conduisant à des divergences importantes de résultats. Dans CalTOX 2.3 et HHRAP par exemple, le même principe de modélisation est utilisé pour calculer la contamination des végétaux par absorption foliaire. Dans HHRAP toutefois, un facteur d'atténuation de 0,01 est utilisé pour tenir compte du transfert réduit des substances lipophiles à l'intérieur des fruits et légumes. L'absence d'un tel facteur dans CalTOX peut induire, à lui seul, une concentration 100 plus forte des fruits et légumes dans ce modèle.

Une étude d'incertitude bien faite ne doit donc pas uniquement passer en revue l'incertitude liée aux paramètres. Elle doit souligner aussi les différences générées par la prise en compte ou non dans un modèle de phénomènes donnés, discuter la pertinence des représentations mathématiques adoptées par rapport au cas traité, voire illustrer, par des calculs, l'impact de représentations mathématiques alternatives, qui faute de connaissances scientifiques suffisantes sur la réalité des mécanismes physico-chimiques et biologiques mis en jeu, n'auraient pas pu être départagées.

- Enfin, de très fortes différences de concentrations ont souvent été obtenues pour les eaux superficielles. A cet égard, il convient de souligner que les modèles multimédia étudiés ici ne permettent pas de prendre en compte la complexité de tous les phénomènes intervenant dans la contamination des milieux aquatiques, et en particulier la variabilité spatiale liée aux phénomènes de dispersion. Les approches utilisées dans ce type de modèles restent relativement simples. Par conséquent, lorsque les voies liées au milieu aquatique représentent une part prépondérante de l'exposition totale, il peut être nécessaire d'utiliser d'autres moyens d'estimation, comme par exemple des modèles plus spécifiques de la modélisation des transferts dans ces milieux.

Pour conclure, un modèle destiné à évaluer les expositions liées à des situations spécifiques, doit être :

- **adaptable par le biais des options et des paramètres à renseigner,**
- **capable de prendre en compte toutes les voies d'exposition et les phénomènes de transfert pertinents,**
- **compréhensible par l'utilisateur: l'algorithme de calcul doit être entièrement connu.**

Les discordances constatées, entre les modèles multimédia étudiés ici, sur le schéma de contamination (expliquant le passage du polluant de la source à la cible) montrent la nécessité de poursuivre la confrontation et la validation des modules de calcul dédiés à certains phénomènes de transfert, comme les transferts de polluant dans le sol à partir des retombées atmosphériques et les transferts air-plante.

7 BIBLIOGRAPHIE

Bacci, E., Cereija, M.J., Gaggi, C., Chemello, G., Calamari, D., Vighi, M., 1992. Chlorinated dioxins: volatilisation from soils and bioconcentration in plant leaves. Bulletin of environmental contamination and toxicology, 48: 401-408

Bacci, E., Calamari, D., Gaggi, C., Vighi, M., 1990. Bioconcentration of organic chemical vapors in plant leaves : experimental measurements and correlation. Environmental Science and Technology, 24(6) : 885-889.

Briggs, Bromilow, 1982, Relationship between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barley, Pestic. Sci., 13, 495-504.

Briggs, Bromilow, 1983, Relationships between lipophilicity and root uptake and the distribution of non-ionised chemicals in barley shoots following uptake by roots, Pestic. Sci., 14, 492-500.

ECETOC, Technical report, n°40, Hazard assessment of chemical contaminants in soil.

INERIS, Bonnard, 2001, Les modèles d'exposition multimédia pour l'évaluation des expositions liées aux émissions atmosphériques des installations classées, DRC-01-25584/ERSA-RBn-n°445, INERIS, Verneuil-en-Halatte, France.

INERIS, Bonnard, 2003, Evaluation de l'impact sur la santé des rejets atmosphériques des tranches charbon d'une grande installation de combustion - Partie 2 : Exposition par voies indirectes. DRC-03-45956/ERSA-RBn, Verneuil-en-Halatte, France.

INERIS, Bonnard, 2003, Etude d'intercomparaison de modèles multimédia d'exposition, Rapport intermédiaire, DRC-03-45959/ERSA-n°273-RBn, Verneuil-en-Halatte, France.

INERIS, Bonnard, 2004, Le logiciel de calcul CalTOX, version 2.3, DRC-04-45959/ERSA-n°97-RBn, Verneuil-en-Halatte, France.

INERIS, Bonnard, 2005, Impact des incertitudes liées aux coefficients de transfert dans les évaluations de risque sanitaire, DRC/ERSA/RBn, 67645/204, Verneuil-en-Halatte, France

INERIS, Heuzé, 2002, Evaluation détaillée des risques pour la santé, Fiches techniques de présentation des modèles d'exposition aux sols pollués, HESP, DRC-02-41200/DESR-R30a, Verneuil-en-Halatte, France

INSEE, 1991, Bertrand, Consommation et lieux d'achat des produits alimentaires en 1991.

IRSN, Rommens, 1997, Etude bibliographique et choix des données par défaut pour les logiciels de calcul des impacts dosimétriques, Note technique SEGR/SAER/97 n°25

IRSN, Beaugelin-Sellier, 2001, Adaptation du modèle de transfert GT3-GRNC dans un écosystème agricole aux polluants inorganiques non radioactifs, Paramètres de transfert, DPRE/SERLAB/01

Kim S., Chang A., Page A., Warneke J., 1988, Relative concentrations of cadmium and zinc in tissue selected food plants grown on sludge treated soils, J. Environ. Qual., 17, 2, 239-246

Réf. : INERIS – DRC/ERSA/RBn-45959/25-impact_coef_transfert.doc

Miller C., Hoffman F., 1983, An examination of the environment half-time for radionuclides deposited on vegetation, Health physics, 45(3) : 732-744

North Carolina Department of Health Environment and Natural Resources (NC DEHNR), 1997, North Carolina protocol for performing indirect exposure risk assessments for hazardous waste combustion units

Topp et al., 1986, Factors affecting uptake of C14-labeled chemicals by plants from soil, Ecotoxicol. Environ. Saf., 11, 219-228

Travis C.C., Arms A.D., 1988, Bioconcentration of organics in beef, milk and vegetation, Environ. Sci. Technol., 22, 271-274

The University of California, 1993 (a). CalTOX, a multimedia total exposure model for hazardous-waste sites : Executive summary. Berkeley : The department of Toxic Substances control (DTSC) : 31 pages

The University of California. CalTOX, 1993 (b), a multimedia total exposure model for hazardous-waste sites : The dynamic multimedia transport and transformation model. Berkeley : The department of Toxic Substances control (DTSC)

The University of California. CalTOX, 1993 (c), a multimedia total exposure model for hazardous-waste sites : The multiple pathway exposure model. Berkeley : The Department of Toxic Substances control (DTSC)

The University of California. 1997, CalTOX version 2.3, Description of modifications and revisions. Berkeley : The Department of Toxic Substances control (DTSC)

US-EPA, 1996, Soil Screening Guidance, Technical background document, Office of Emergency and Remedial Response, EPA/540/R-95/128

US-EPA, 1998 (a), Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities (HHRAP), Peer review draft, Office of Solid Waste, EPA/530/0-98/001A

US-EPA, 1998 (b), Methodology for assessing health risks associated with indirect exposure to combustor emissions, National Center for Environmental Assessment, EPA 600/R-98/137.

US-EPA, 2002, Total Risk Integrated Methodology, TRIM.Fate, Technical Support Document, Vol. I et II, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, EPA-453/R-02-011a, EPA-453/R-02-011b

US-EPA, 2004, TRIM.Fate Reference Library Values, Background Document, www.epa.gov/ttn/fera/data/fate_ver3/publicreferencelibrarydocumentation_041304.pdf

Veerkamp W., Ten Berge W., 1994, The concepts of HESP, Reference Manual, Shell Internationale Petroleum Maatschappij, The Hague

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

8 LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation précise	N°pages
A	Valeurs affectées par défaut aux paramètres de CalTOX 2.3	13
B	Valeurs affectées par défaut aux paramètres de HHRAP	4
C	Valeurs affectées par défaut aux paramètres de HESP	4
D	Valeurs affectées par défaut aux paramètres de CalTOX 4.0	16
E	Valeurs communes affectées aux paramètres des quatre modèles	35
F	Doses totales d'exposition calculées lors des sept simulations	3

Annexe A

Valeurs affectées par défaut aux paramètres de CalTOX 2.3

ANNEXE B

Valeurs affectées par défaut aux paramètres de HHRAP

ANNEXE C

Valeurs affectées par défaut aux paramètres de HESP

ANNEXE D

Valeurs affectées par défaut aux paramètres de CalTOX 4.0

ANNEXE E

**Valeurs communes affectées aux paramètres
des quatre modèles**

ANNEXE F

**Doses totales d'exposition calculées lors
des sept simulations**

Tableau 16 : Doses d'exposition à la 2,3,7,8 tétrachlorodibendioxine (mg/kg/j)

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière				Dose totale et maximale d'exposition au cours de la période d'exposition			
	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
Simulation 1	$8,5 \cdot 10^{-13}$	$4,1 \cdot 10^{-12}$	$2,1 \cdot 10^{-14}$	$1,4 \cdot 10^{-13}$	$3,7 \cdot 10^{-11}$ nourrisson	$1,7 \cdot 10^{-10}$ nourrisson	$1,4 \cdot 10^{-13}$ enfant	$5,6 \cdot 10^{-12}$ nourrisson
Simulation 2	$1,3 \cdot 10^{-12}$	$2,2 \cdot 10^{-12}$	$1,8 \cdot 10^{-14}$	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$5,9 \cdot 10^{-12}$	$7,4 \cdot 10^{-12}$	$8,2 \cdot 10^{-14}$	$7,9 \cdot 10^{-13}$
Simulation 3	$3,8 \cdot 10^{-12}$	$2,0 \cdot 10^{-12}$	$1,3 \cdot 10^{-14}$	$3,6 \cdot 10^{-13}$	$1,7 \cdot 10^{-11}$	$6,9 \cdot 10^{-12}$	$6,1 \cdot 10^{-14}$	$1,1 \cdot 10^{-12}$
Simulation 4	$3,7 \cdot 10^{-12}$	$9,6 \cdot 10^{-13}$	$6,7 \cdot 10^{-14}$	$2,9 \cdot 10^{-13}$	$1,7 \cdot 10^{-11}$	$3,4 \cdot 10^{-12}$	$3,1 \cdot 10^{-13}$	$8,7 \cdot 10^{-13}$
Simulation 5	$7,3 \cdot 10^{-13}$	$3,4 \cdot 10^{-13}$	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$2,8 \cdot 10^{-13}$	$4,8 \cdot 10^{-12}$	$1,1 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-12}$	$8,4 \cdot 10^{-13}$
Simulation 6	$3,2 \cdot 10^{-12}$	$5,6 \cdot 10^{-13}$	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$2,8 \cdot 10^{-13}$	$2,0 \cdot 10^{-11}$	$2,4 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-12}$
Simulation 7	$4,2 \cdot 10^{-13}$	$5,3 \cdot 10^{-13}$	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$2,8 \cdot 10^{-13}$	$2,8 \cdot 10^{-12}$	$2,2 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-12}$

Tableau 17 : Doses d'exposition au naphtalène (mg/kg/j)

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière				Dose totale et maximale d'exposition au cours de la période d'exposition			
	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
Simulation 1	$3,6 \cdot 10^{-14}$	$2,1 \cdot 10^{-10}$	$4,9 \cdot 10^{-10}$	$1,8 \cdot 10^{-14}$	$2,5 \cdot 10^{-13}$	$8,1 \cdot 10^{-10}$	$3,4 \cdot 10^{-9}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$
Simulation 2	$7,7 \cdot 10^{-14}$	$1,6 \cdot 10^{-10}$	$4,3 \cdot 10^{-10}$	$4,6 \cdot 10^{-14}$	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$3,7 \cdot 10^{-10}$	$2,0 \cdot 10^{-9}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$
Simulation 3	$1,9 \cdot 10^{-13}$	$1,6 \cdot 10^{-10}$	$5,7 \cdot 10^{-10}$	$1,6 \cdot 10^{-13}$	$5,5 \cdot 10^{-13}$	$3,8 \cdot 10^{-10}$	$2,7 \cdot 10^{-9}$	$3,3 \cdot 10^{-13}$
Simulation 4	$2,6 \cdot 10^{-13}$	$3,9 \cdot 10^{-10}$	$3,6 \cdot 10^{-9}$	$2,5 \cdot 10^{-13}$	$7,5 \cdot 10^{-13}$	$9,0 \cdot 10^{-10}$	$1,7 \cdot 10^{-8}$	$5,4 \cdot 10^{-13}$
Simulation 5	$6,5 \cdot 10^{-13}$	$5,0 \cdot 10^{-10}$	$3,6 \cdot 10^{-9}$	$5,5 \cdot 10^{-13}$	$1,8 \cdot 10^{-12}$	$1,2 \cdot 10^{-9}$	$1,7 \cdot 10^{-8}$	$1,3 \cdot 10^{-12}$
Simulation 6	$6,8 \cdot 10^{-13}$	$5,5 \cdot 10^{-10}$	$3,6 \cdot 10^{-9}$	$6,5 \cdot 10^{-13}$	$1,9 \cdot 10^{-12}$	$1,3 \cdot 10^{-9}$	$1,7 \cdot 10^{-8}$	$1,7 \cdot 10^{-12}$
Simulation 7	$6,4 \cdot 10^{-13}$	$5,5 \cdot 10^{-10}$	$3,6 \cdot 10^{-9}$	$5,4 \cdot 10^{-13}$	$1,8 \cdot 10^{-12}$	$1,3 \cdot 10^{-9}$	$1,7 \cdot 10^{-8}$	$1,3 \cdot 10^{-12}$

Tableau 18 : Doses d'exposition au cadmium (mg/kg/j)

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière				Dose totale et maximale d'exposition au cours de la période d'exposition			
	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
Simulation 1	$4,9.10^{-7}$	$4,9.10^{-8}$	$1,5.10^{-8}$	$7,2.10^{-8}$	$4,6.10^{-6}$	$1,9.10^{-7}$	$1,9.10^{-7}$	$6,4.10^{-7}$
Simulation 2	$1,1.10^{-6}$	$3,2.10^{-8}$	$8,7.10^{-9}$	$1,6.10^{-7}$	$4,8.10^{-6}$	$7,9.10^{-8}$	$4,1.10^{-8}$	$6,4.10^{-7}$
Simulation 3	$5,5.10^{-5}$	$3,2.10^{-8}$	$8,7.10^{-9}$	$5,0.10^{-8}$	$2,5.10^{-4}$	$7,7.10^{-8}$	$4,1.10^{-8}$	$1,6.10^{-7}$
Simulation 4	$7,5.10^{-5}$	$7,4.10^{-8}$	$1,8.10^{-8}$	$7,6.10^{-8}$	$3,4.10^{-4}$	$1,8.10^{-7}$	$8,3.10^{-8}$	$2,5.10^{-7}$
Simulation 5	$2,3.10^{-7}$	$9,6.10^{-8}$	$1,8.10^{-7}$	$1,1.10^{-7}$	$8,7.10^{-7}$	$2,5.10^{-7}$	$8,6.10^{-7}$	$3,4.10^{-7}$
Simulation 6	$2,3.10^{-7}$	$9,6.10^{-8}$	$1,8.10^{-7}$	$1,1.10^{-7}$	$8,7.10^{-7}$	$2,5.10^{-7}$	$8,6.10^{-7}$	$3,4.10^{-7}$
Simulation 7	$2,0.10^{-7}$	$9,5.10^{-8}$	$1,8.10^{-7}$	$1,0.10^{-7}$	$7,6.10^{-7}$	$2,5.10^{-7}$	$8,6.10^{-7}$	$3,2.10^{-7}$

Tableau 19 : Doses d'exposition au benzo(a)pyrène (mg/kg/j)

	Dose totale d'exposition moyennée sur la vie entière				Dose totale et maximale d'exposition au cours de la période d'exposition			
	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0	CaITOX 2.3	HHRAP	HESP	CaITOX 4.0
Simulation 1	$3,9.10^{-9}$	$1,4.10^{-9}$	$1,1.10^{-10}$	$3,6.10^{-10}$	$9,9.10^{-8}$ nourrisson	$4,4.10^{-9}$ enfant	$7,5.10^{-10}$ enfant	$5,7.10^{-9}$ nourrisson
Simulation 2	$7,2.10^{-9}$	$1,1.10^{-9}$	$9,9.10^{-11}$	$6,7.10^{-10}$	$3,2.10^{-8}$	$2,5.10^{-9}$	$4,7.10^{-10}$	$1,7.10^{-9}$
Simulation 3	$7,0.10^{-9}$	$1,2.10^{-9}$	$7,2.10^{-11}$	$8,7.10^{-9}$	$1,1.10^{-7}$	$2,8.10^{-9}$	$3,5.10^{-10}$	$2,1.10^{-9}$
Simulation 4	$6,9.10^{-9}$	$2,6.10^{-10}$	$3,8.10^{-10}$	$8,5.10^{-10}$	$3,1.10^{-8}$	$6,2.10^{-10}$	$1,8.10^{-9}$	$2,0.10^{-9}$
Simulation 5	$4,4.10^{-8}$	$9,7.10^{-9}$	$4,3.10^{-10}$	$1,3.10^{-7}$	$2,0.10^{-7}$	$2,3.10^{-8}$	$2,1.10^{-9}$	$3,2.10^{-7}$
Simulation 6	$4,7.10^{-8}$	$9,9.10^{-9}$	$4,3.10^{-10}$	$1,3.10^{-7}$	$2,1.10^{-7}$	$2,3.10^{-8}$	$2,1.10^{-9}$	$4,9.10^{-7}$
Simulation 7	$4,8.10^{-8}$	$9,8.10^{-9}$	$4,3.10^{-10}$	$1,3.10^{-7}$	$2,2.10^{-7}$	$2,3.10^{-8}$	$2,1.10^{-9}$	$4,9.10^{-7}$