

Description du concept de fusion entre Phytodel et STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM pour la modélisation du transfert des pesticides vers l'atmosphère et les eaux de surface et souterraines

Elodie Moreau Guigon^{1*}, Alessia Bacchi¹, Fabrizio Botta¹, Pascal Viennot², Florence Habets² et Hélène Blanchoud¹

¹ EPHE, UMR 7619, Sisyphe, F-75005 Paris.

² ENSMP-CIG, UMR 7619, Sisyphe, F-75005 Paris.

* elodie.guigon@ccr.jussieu.fr

1 Introduction

Dans de nombreuses eaux de surface et souterraines du bassin de la Seine, la présence des pesticides est avérée. Cette contamination entraîne parfois des problèmes pour l'alimentation en eau potable, obligeant les collectivités à traiter cette eau ou à rechercher des nouvelles ressources non contaminées. De plus, la directive cadre européenne sur l'eau implique de préserver ou de ramener les eaux superficielles et souterraines à un bon état général d'ici 2015. Or une fois dans les eaux souterraines, les pesticides sont peu dégradés et peuvent contaminer une ressource pendant de nombreuses années.

Au cours de la précédente phase du programme PIREN-Seine, deux modèles de transfert des pesticides avaient été développés afin de simuler le devenir de ces molécules dans un bassin versant au cours du temps. Phytodel est un modèle de transfert vers l'atmosphère et les eaux superficielles et STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM un modèle de transfert pour les eaux souterraines. Ces deux modèles sont alimentés par la base de données ASPPR'Eaux qui permet de donner une estimation des intrants phytosanitaires basés sur les pratiques phytosanitaires des cultures sur les 30 dernières années. Ayant chacun des avantages et des inconvénients mais restant complémentaires, il a été décidé de les fusionner en un seul modèle de transfert des pesticides.

Au cours de cette année, la création de la plateforme Eau-dyssée a été décidée pour harmoniser les différents modèles du PIREN Seine. Elle est présentée dans le chapitre « modélisation ». Dans ce cadre, il semblait nécessaire de rendre plus cohérent la modélisation du transfert des pesticides en accord avec les autres développements. Ainsi, il était plus judicieux de fusionner les deux modèles pour que l'application soit intégrée dans son ensemble dans la plateforme de modélisation sous le chapitre « simulation du transfert des pesticides ». Une première analyse des avantages et inconvénients a été réalisée pour les deux modèles afin de définir les choix appropriés pour intégrer la plateforme Eau-dyssée et pouvoir décrire un protocole de fusion des deux modèles développés dans la phase précédente du PIREN Seine. La première étape de cette fusion va consister en l'intégration des processus de dégradation et d'adsorption des pesticides dans la zone non saturée et à l'actualisation du code de STICS.

2 Le modèle PHYTODEL

2.1 Description

Ce modèle comprend un module hydrologique et un module de transfert de pesticides. Il permet de simuler des concentrations en pesticides dans la rivière et l'atmosphère à l'échelle du bassin versant. Il a été développé sur le bassin versant de la Vesle (Guigon-Moreau, 2006).

2.1.1 Le module hydrologique

Le module hydrologique utilisé est basé sur le modèle HYDROSTRAHLER. C'est un modèle pluie-débit utilisant en entrée la pluviométrie et l'évapotranspiration potentielle journalières, et calculant l'écoulement superficiel et de base (Figure 1).

Le modèle décrit chaque bassin versant comme comportant deux réservoirs, un réservoir « SOL » et un

réservoir « AQUIFERE ». Les précipitations (P) alimentent directement le réservoir SOL. L'évapotranspiration potentielle (ETP) s'exprime tant que le réservoir sol n'est pas épuisé. Si le niveau du réservoir sol dépasse un seuil de saturation (Solsat), l'excédent du SOL par rapport à Solsat alimente aussitôt un ruissellement superficiel. Sinon ce ruissellement est nul. Le réservoir SOL a deux autres sorties : l'une d'elles produit l'écoulement intermédiaire, prélevant une fraction t_{ecs} du niveau du réservoir SOL ; l'autre produit l'infiltration profonde, en prélevant de SOL une fraction t_{inf} . L'infiltration alimente le réservoir AQUIFERE, qui produit l'écoulement de base, prélevant une fraction t_{en} de son niveau de remplissage. Les quatre paramètres cités (Solsat, niveau de saturation du sol ; t_{ecs} , taux d'écoulement du sol ; t_{inf} , taux d'infiltration ; t_{en} , taux d'écoulement de la nappe), sont à caler pour chaque bassin (Billen et Christophe, 2006).

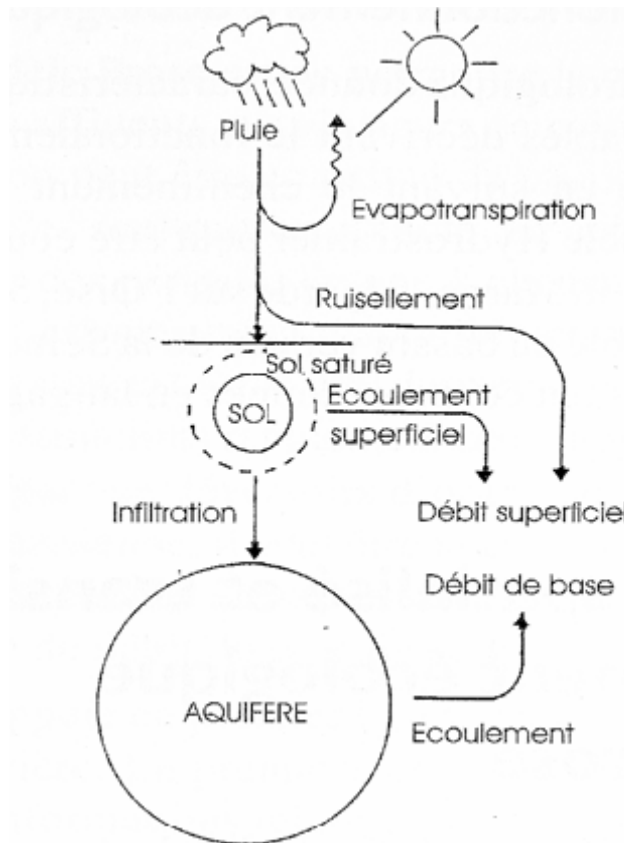


Figure 1 : Schéma conceptuel du modèle Hydrostrahler (Billen et Christophe, 2006)

Afin de tenir compte des pesticides, plusieurs modifications ont été effectuées. Un compartiment « atmosphère » a été ajouté pour prendre en compte les molécules les plus volatiles. Afin d'améliorer la simulation des échanges sol-atmosphère, le compartiment sol a été scindé en 2 couches. Une couche de surface, peu épaisse d'un cm d'épaisseur, a alors été définie au dessus de la couche de sol (Figure 2). Ce nouveau compartiment reçoit l'application des pesticides, permet de générer le ruissellement superficiel et constitue l'interface pour la volatilisation.

Pour tenir compte des caractéristiques du bassin de la Vesle, il a été ajouté un niveau d'eau limite dans le réservoir SOL qui est calé manuellement. Lorsqu'il est atteint, l'eau peut uniquement s'infiltrer vers la nappe, il n'y a alors pas d'écoulements vers la rivière à partir de la couche SOL. Un niveau similaire est également présent dans le compartiment nappe qui apporte l'écoulement de base (étiage) de la rivière (Figure 2).

Deux coefficients de transfert de l'eau dans le modèle ont été également introduits. T_{inf} et T_{ecnb} sont des coefficients calés manuellement. T_{ecs} et T_{ecn} sont des coefficients variables calculées suivant les équations ci-dessous où K_{sol} et K_{nappe} sont des constantes calées, comprises entre 0 et 1. La quantité d'eau exportée dépend de ces coefficients et de la quantité d'eau présente dans la couche.

$$T_{ecs} = \frac{\text{Niveau d'eau}_{(SOL)} - \text{Niveau d'eau limite}_{(SOL)}}{\text{Niveau d'eau maximum}_{(SOL)} - \text{Niveau d'eau limite}_{(SOL)}} \times K_{sol}$$

$$T_{ecn} = \frac{\text{Niveau d'eau}_{(NAPPE)} - \text{Niveau d'eau limite}_{(NAPPE)}}{\text{Niveau d'eau maximum}_{(NAPPE)} - \text{Niveau d'eau limite}_{(NAPPE)}} \times K_{nappe}$$

La genèse du ruissellement a aussi été modifiée pour ce bassin. En effet, le modèle était trop réactif aux pluies or dans la Vesle, une partie du ruissellement générée lors des pluies s'infiltré avant d'atteindre la rivière (Bardet et Rouxel-David, 2002). Pour tenir compte de ce phénomène à l'échelle du bassin, nous avons fait la correction suivante : Lorsque le bilan « pluie – évapotranspiration » est supérieur à la capacité de la couche de surface, l'eau s'infiltré dans la couche de sol transférant dans le même temps une partie des pesticides en phase dissoute. Lorsque la couche de sol est saturée alors le ruissellement est déclenché entraînant des pesticides de la couche de surface vers la rivière.

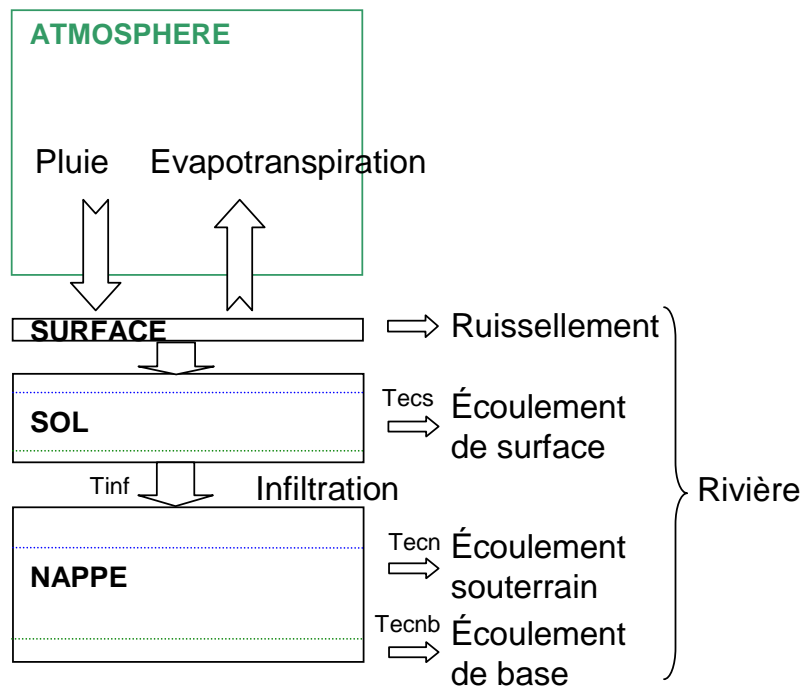


Figure 2 : Modélisation des transferts d'eau

2.1.2 Le module « pesticides »

Le transfert des pesticides dans les différents compartiments et vers la rivière est effectué sous forme dissoute avec l'eau. C'est le transfert de l'eau qui régit le transport des pesticides. Le module prend également en compte les processus d'adsorption et les processus de dégradation dans la surface, le sol et la nappe (Figure 3). La description de ces processus tient compte des propriétés physico-chimiques moyennes des molécules issues de la littérature afin de pouvoir appliquer le module à tous les pesticides (Blanchoud, 2001).

Les apports journaliers de pesticides sont intégrés à la quantité totale dans le sol. Les intrants en pesticides proviennent de la base de données « ASPPR'Eaux » développée par C. Schott de l'INRA Mirecourt (Schott *et al.*, 2006). La quantité disponible sous forme dissoute est alors calculée en considérant que l'adsorption – désorption est instantanée.

L'équilibre est basé sur l'équation suivante : $K_d = \frac{C_s}{C_l}$

Où K_d : coefficient de partage entre les phases solide et dissoute, avec $K_d = K_{oc} \times f_{oc}$ (K_{oc} coefficient de partage normalisé suivant le pourcentage de carbone organique et f_{oc} la fraction de carbone organique du sol)

C_s : concentration en phase solide et C_l celle en phase dissoute

Le transfert des pesticides dissous, le calcul de l'adsorption-désorption et la dégradation sont calculés au pas de temps horaire. La dégradation des molécules est réalisée sur la quantité dissoute des pesticides dans un compartiment et les coefficients de dégradation sont différents pour la surface, le sol et la nappe. La dégradation des pesticides tient compte de la demi-vie des molécules en milieu aérobie pour la Surface et le Sol, en milieu anaérobie pour la Nappe (PAN Pesticides Database). Les valeurs des demi-vies sont celles de la littérature.

Pour ces transferts, les paramètres importants sont ceux identifiés par les expérimentations et les études précédentes c'est-à-dire les propriétés physico-chimiques des matières actives : Solubilité, K_{oc} , durée de demi-vie dans les différents compartiments, ainsi que les quantités de pesticides appliqués sur le bassin versant.

Afin de représenter le transfert des pesticides les plus volatils dans l'environnement, un compartiment atmosphérique a été intégré permettant d'inclure les processus de volatilisation et de lessivage des molécules lors des évènements pluvieux.

Pour la volatilisation, la formule utilisée découle de l'équilibre entre les phases gazeuse et liquide (Jury et al., 1983), défini ainsi :

$$\frac{C_{liq}}{C_{gaz}} = \frac{R \times T}{K_H}$$

où C_{liq} : concentration dans la phase liquide

C_{gaz} : concentration dans la phase gazeuse

K_H : constante de Henry (= Pression de vapeur/ Solubilité)

R : constante des gaz parfaits

T : température

Le processus de lessivage est alors décrit comme étant l'inverse de la volatilisation (Guigon-Moreau, 2006). Nous supposons que la concentration dans la phase liquide est en équilibre avec celle en phase gazeuse. En effet, le temps de résidence atmosphérique de la substance dans le nuage ainsi que le temps de chute des gouttes de pluie sont suffisamment longs pour que l'équilibre puisse être atteint (Seinfeld, 1986; van Pul *et al.*, 1998).

La volatilisation s'effectue à partir des molécules dissoutes du compartiment « Surface » et la température prise en compte est celle de l'atmosphère. Pour calculer la concentration en pesticides dans l'atmosphère, nous avons émis deux hypothèses : le compartiment atmosphérique est homogène car bien mélangé; et la concentration dans la phase gazeuse de l'air est égale à celle déterminée à l'équilibre dans la couche de surface.

Une fois émises dans l'atmosphère, les molécules peuvent être adsorbées sur les particules atmosphériques ou éliminées par dégradation et par lessivage par les retombées humides (Guigon-Moreau, 2006).

La demi-vie atmosphérique prise en compte dans le modèle est celle calculée par le modèle AOPWin « Atmospheric Oxidation Program » basé sur les travaux d'Atkinson (Atkinson *et al.*, 1999) (logiciel de EPI-Suite de l'U.S. Environmental Protection Agency).

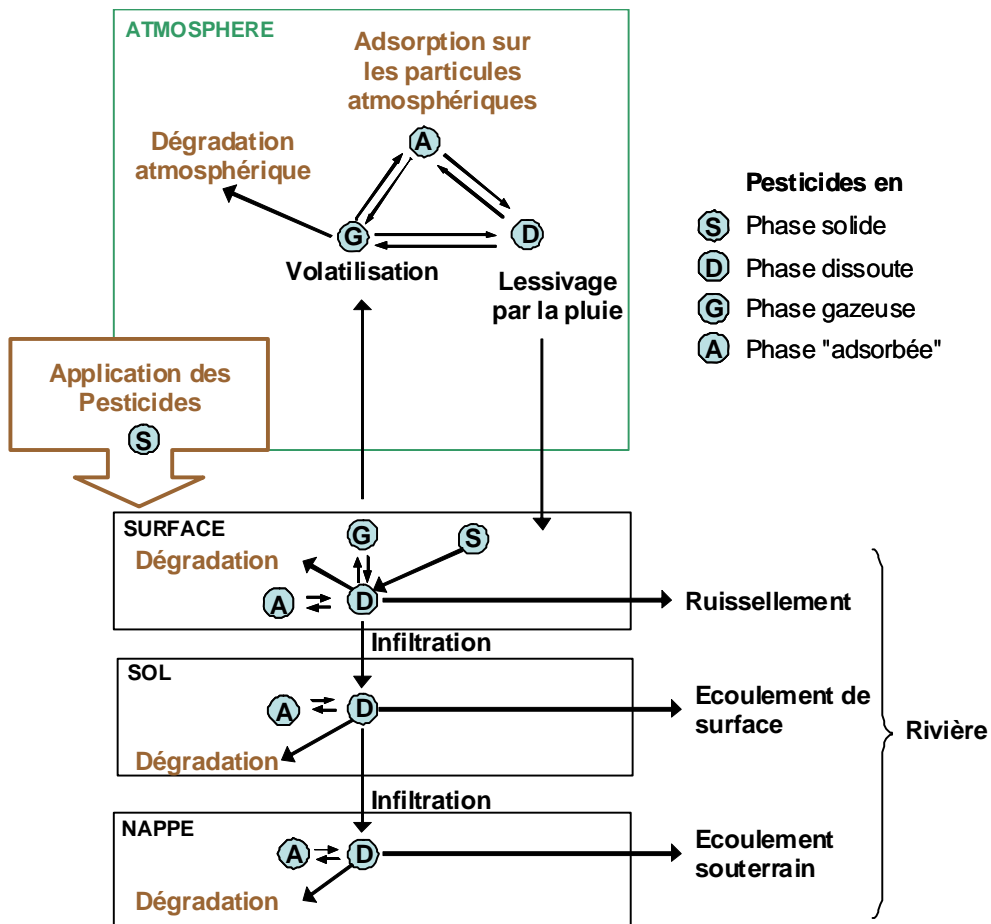


Figure 3 : Schéma du transfert des pesticides dans le modèle Phytodel

2.2 Avantages et inconvénients

Le transfert des pesticides est simulé dans PHYTODEL en fonction des paramètres physico-chimiques des molécules qui peuvent être trouvés dans la littérature. Certaines bases de données ont été mises en ligne et permettent une meilleure estimation des incertitudes sur ces données obtenues, soit par expériences in situ, soit en parcelles expérimentales (AGRITOX ; FOOTPRINT, 2007). Ces données sont donc généralement accessibles et permettent à PHYTODEL de simuler diverses molécules phytosanitaires. Ainsi, il est possible de comparer l'effet de changements de pesticides sur la contamination du milieu et les effets cumulés de la totalité des pesticides employés sur un bassin versant.

PHYTODEL a la particularité de prendre en compte le compartiment atmosphérique en tant que puits et source, ce qui est un avantage très important pour un modèle de transfert dans l'environnement. En effet, certains pesticides sont très volatils et la voie préférentielle de dispersion se fera par le compartiment atmosphérique. Les modèles simulant la dispersion des pesticides dans l'atmosphère sont séparés de ceux simulant le transfert dans le bassin versant, ce qui confère à PHYTODEL un avantage certain. Le transfert des pesticides entre le sol et l'atmosphère est décrit par la volatilisation d'une part et par les apports des retombées humides d'autre part, via la couche de surface. Au sein du compartiment atmosphérique considéré comme homogène et bien mélangé, le modèle prend en compte la dégradation des pesticides gazeux, leur adsorption sur les aérosols particuliers et le lessivage par la pluie. Ces relations sont régies par la température de l'air et par les propriétés physico-chimiques des molécules.

De plus, ce modèle intègre la dégradation et la sorption dans les trois compartiments (surface, sol et nappes). Les paramètres de la dégradation varient en fonction des conditions du milieu, la couche de surface et sol est considérée comme milieu aérobie et la couche de nappe est considérée comme milieu anaérobie. Il n'y a donc pas de transport passif mais bien une interaction des pesticides avec le milieu. Les paramètres choisis pour décrire les processus de sorption et de dégradation correspondent à la littérature pour avoir des sources d'information plus facile à obtenir pour les différents pesticides testés.

Par contre, le principal inconvénient de ce modèle est qu'il considère le bassin versant dans son ensemble, il ne tient donc pas en compte de la position des différents de zone (agricoles, urbains ...). Il n'est donc pas spatialisé. De plus, il ne considère que la première nappe et de manière simplifiée, l'hydrogéologie du bassin versant n'est pas intégrée. Sa simplicité qui lui confère un accès rapide aux résultats de simulation est également un frein quant aux résultats de simulation. En effet, la répartition uniforme des traitements phytosanitaires issus d'ASPPR'Eaux dans un bassin versant considéré ne permet pas de tester l'efficacité du changement d'occupation du sol sur la réduction des transferts. C'est pourquoi une version spatialisée a été développée pour le transfert des pesticides vers les eaux souterraines.

3 STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM

3.1 Description

Le principe de ce modèle couplé est basé sur l'union des trois modèles existant :

- Le modèle agronomique STICS-PHYTO (Rat, Ledoux et Viennot, 2006)
- Le modèle hydrologique MODCOU (Ledoux 1980)
- Le modèle hydrogéologique NEWSAM (Levassor et Ledoux 1996)

3.1.1 STICS-PHYTO

STICS-PHYTO est un modèle dynamique et spatialisé dérivé de STICS (Brisson et al., 1998). Il permet de simuler chaque jour les transferts des pesticides lessivés à la base du sol au cours d'une année. L'atmosphère représente la limite supérieure du système et est caractérisé par les variables climatiques standards (température minimale et maximale, pluviométrie, évapotranspiration potentielle et rayonnement global) et la limite inférieure correspond à l'interface sol/sous-sol. Comme dans STICS, le sol est divisé en couches de 1 cm où les pesticides peuvent exister sous plusieurs formes : en solution, sorbés instantanément sur un site d'échange, sorbés sur un site où il y a des limitations cinétiques (sorption/désorption lente) et sous forme précipitée (Figure 4).

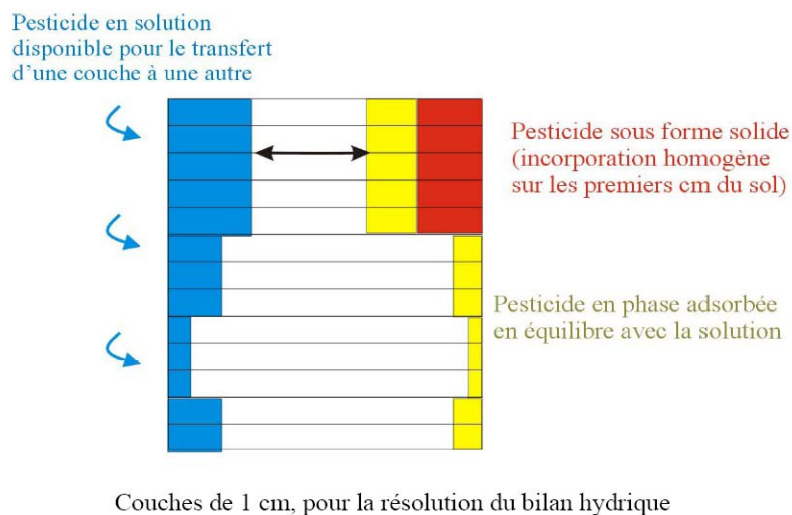


Figure 4 : Schéma de principe de fonctionnement de STICS PHYTO

Les processus qui sont modélisés dans STICS-PHYTO sont : la simulation de la sorption /désorption instantanée et lente, la dégradation, la création de métabolites et le transfert d'eau et de soluté au sein du sol. Comme ce modèle a été développé pour les pesticides peu volatils (atrazine et ses métabolites), la volatilisation n'a pas été considérée mais ce processus peut devenir important si nous considérons une application des pesticides par pulvérisation ou pour des pesticides volatils. Pour assurer le transfert des pesticides depuis le sol vers les eaux souterraines, il est indispensable de coupler STICS-PHYTO avec un

autre modèle de transport et d'écoulement souterrain comme le Modèle Hydrologique Couplé MODCOU selon le schéma suivant (Figure 5):

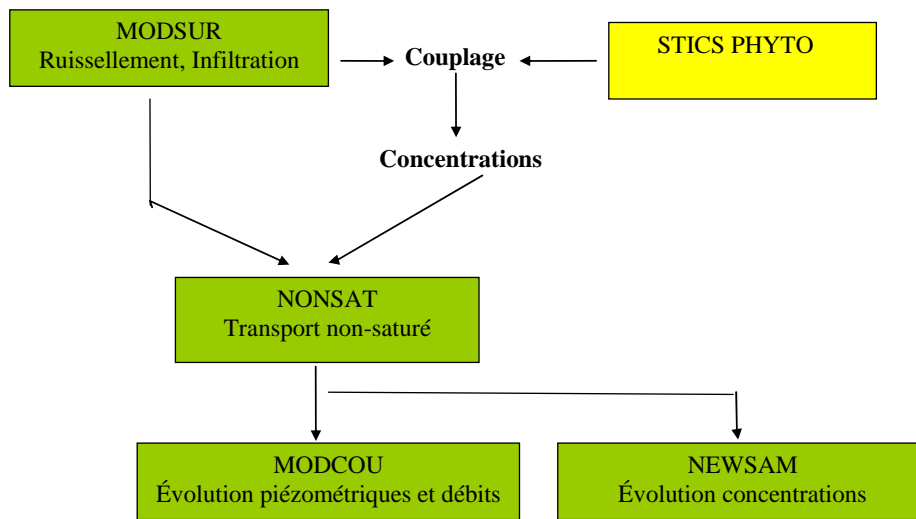


Figure 5 : Schéma du modèle intégré: STICS PHYTO-MODCOU-NEWSAM

Ce modèle hydrologique couplé comprend cinq parties :

3.1.2 GEOCOU

Le programme GEOCOU permet de définir la structure du système hydrologique. Elle est fondée sur la discrétisation spatiale du domaine de surface et souterrain en couches, elle-même étant basée sur l'utilisation de mailles carrées emboîtées (Figure 6). En général il y a une couche supérieure et un nombre variable de couches profondes. Sur chaque couche une direction unique de vidange est définie selon la ligne de plus grande pente (Figure 7). Il y aussi deux types de mailles le premier type correspondant aux zones de ruissellement et le second type correspondant aux zones où il existe un échange avec le domaine souterrain (mailles rivières en grisé).

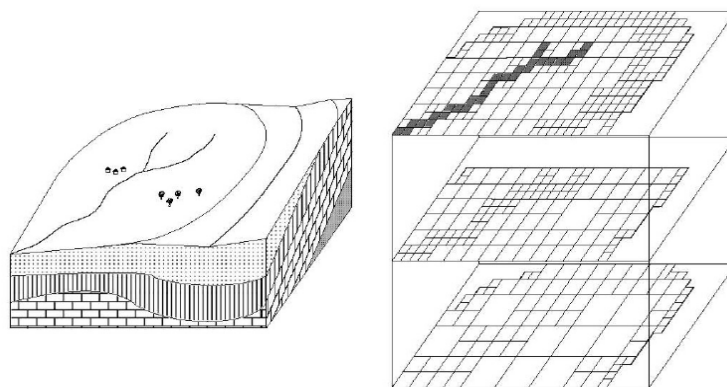


Figure 6 : Schéma du système multicouche

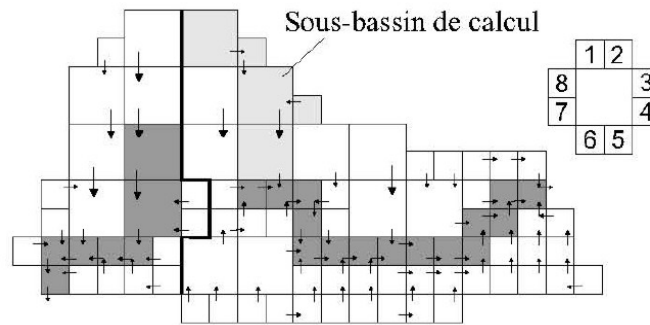


Figure 7 : Schéma de drainage de la couche de surface

3.1.3 MODSUR

Le programme MODSUR permet de calculer le bilan hydrique sur la couche de surface. Il a pour objectif la répartition de la lame d'eau disponible au sol entre le ruissellement, l'infiltration, l'ETP et la quantité d'eau restant stockée dans le sol. Le calcul a le même pas de temps que la pluie (journalier) et il est effectué au moyen des fonctions production. Chaque fonction de production correspond à une catégorie de sol et il est basé sur un schéma de fonctionnement de type « réservoir » (Figure 8). Pour effectuer le bilan hydrique dans le réservoir de bilan (réservoir primaire) à chaque pas de temps, on doit connaître : la lame d'eau précipitée P, l'évapotranspiration potentielle ETP et l'état du stock en eau du réservoir. Les paramètres DCRT (niveaux minimal du réservoir sol) et CRT (niveaux moyen du réservoir sol) conditionnent la quantité d'eau disponible pour l'écoulement. Le second réservoir réalise la séparation de l'eau en lame ruisselée (QR) et en lame infiltrée (QI), en fonction du paramètre FN (seuil d'infiltration). Les autres réservoirs de transfert apportent un retard à ces quantités.

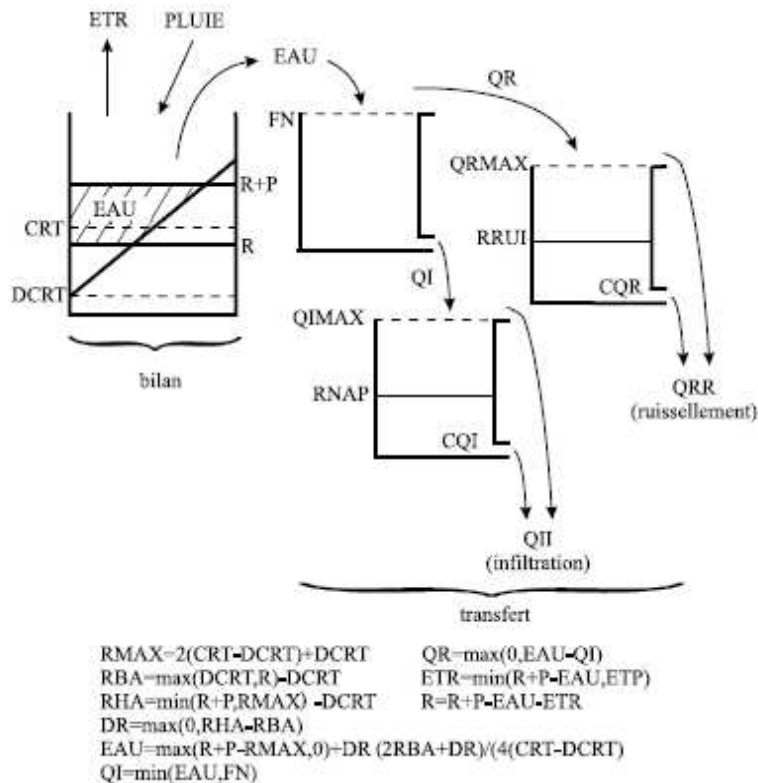


Figure 8 : Schéma de principe de fonctionnement de la fonction production

3.1.4 NONSAT

NONSAT modélise l'infiltration de l'eau dans la zone non saturée et le transport d'éléments en solution. Pour décrire la zone non saturée on utilise un modèle à réservoir en cascade de Nash où le nombre de

réservoirs dépend de l'épaisseur de cette zone (Figure 9). Chaque réservoir se vide dans le suivant selon un processus de vidange exponentielle. En sortie de NONSAT il est possible avoir les lames d'eau ruisselées directes vers le fleuve et les lames d'eau infiltrées dans la nappe.

La partie relative au transport des éléments en solution, depuis la zone racinaire jusqu'à la zone saturée, a été développée par Gomez (2002). Gomez considère un modèle capacitif où les éléments sont transportés de manière conservative par mouvements des flux d'eau uniquement verticaux et descendants.

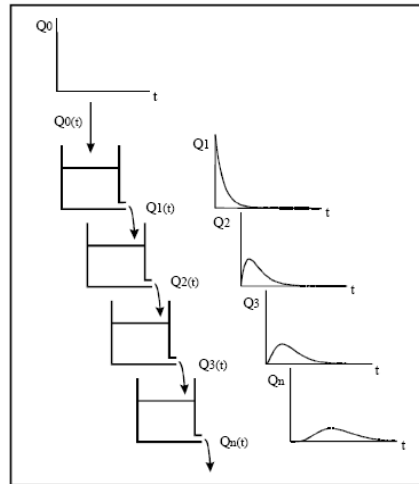


Figure 9 : Schéma de principe de fonctionnement de NONSAT

3.1.5 MODCOU

Ce programme est utilisé pour un couplage entre les transferts superficiels et souterrains.

Le transfert souterrain est basé sur l'intégration numérique de l'équation de diffusivité. Avec la schématisation multicouche adoptée, il est possible de distinguer des niveaux dits aquifères, sub-horizontaux avec des écoulements bidimensionnels, et des niveaux dits semi-perméables où les écoulements sont monodimensionnels et se font par drainage verticale entre les aquifères.

Le transfert en rivière est calculé sur les mailles « rivières » qui échangent de l'eau avec le domaine souterrain et collectent les eaux acheminées par ruissellement pur.

On peut avoir différents scénarios de transfert entre la zone souterraine et la zone superficielle (Figure 10) :

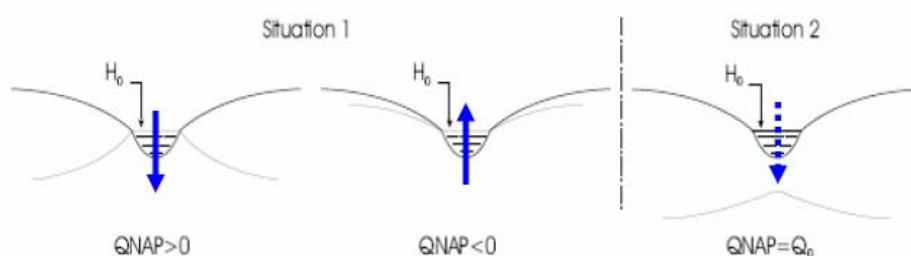


Figure 10 : relations nappe- rivière

Dans le premier cas, la nappe et la rivière sont connectées, et les échanges sont contrôlés par le niveau de la nappe, le niveau de la rivière étant fixée. : $Q_{Nap} = Q_{TP} (H - H_0)$

Dans le deuxième cas, la rivière et la nappe sont déconnectées, et on suppose un flux d'échange constant de la rivière vers la nappe qui traverse une zone non-saturée : $Q_{Nap} = Q_0$

3.1.6 NEWSAM

La simulation du transport d'éléments en solution dans les aquifères multicouches est réalisée par NEWSAM. Les données en entrée de ce modèle viennent du modèle NONSAT ; en effet il reçoit un flux d'eau et de solutés et résout le transport convectif par la méthode des différences finies sur chaque couche souterraine (Figure 11).

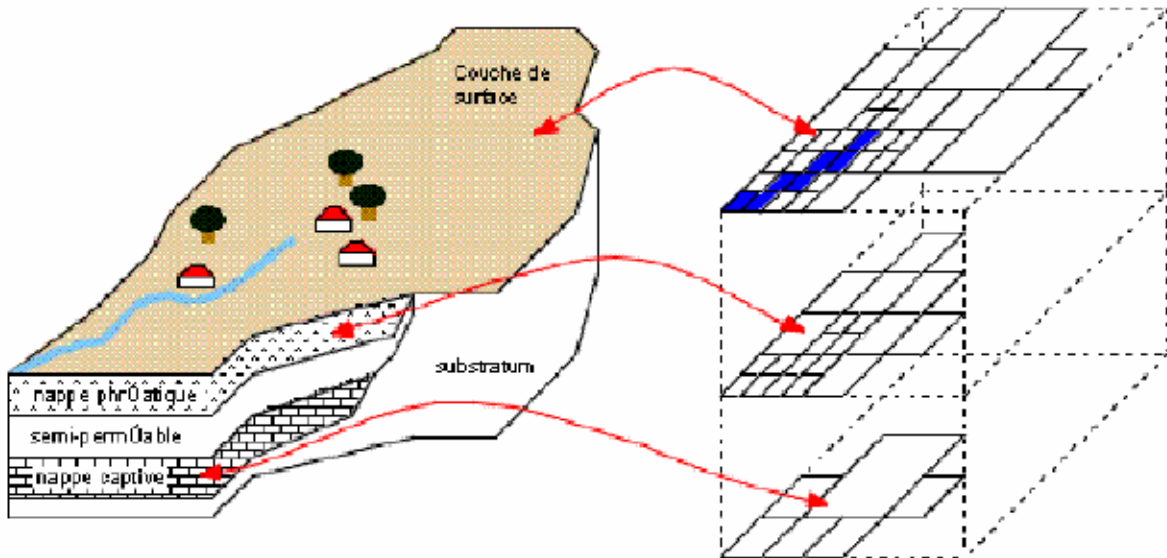


Figure 11 : schématisation multicouche

3.2 Avantages et inconvénients

Ce modèle résulte du couplage de trois modèles. STICS-Phyto est basé sur le modèle agronomique STICS qui a été modifié afin de simuler le transfert de pesticides dans la zone sous racinaire. Ce modèle permet de décrire le sol, la croissance des plantes et les différentes interactions pesticides-sol. En effet, il intègre l'absorption/désorption lente et instantanée des pesticides et également la dégradation de ces molécules et la création de métabolites. Ce modèle utilise des données d'entrées spatialisées telles que la météorologie, l'occupation du sol, la pédologie, la nature des cultures et les intrants phytosanitaires. La conservation de ce modèle est un avantage car il pourra permettre d'activer par la suite des fonctions en relation avec la plante, notamment pour les échanges sol-plante-atmosphère. Ces échanges avec l'atmosphère ne sont pour l'instant pas pris en compte.

La fonction MODSUR et NONSAT sont discrétisés pour représenter l'inertie du système et temporiser les flux de sortie de contaminants dans la nappe. MODSUR permet la séparation du ruissellement vrai du ruissellement de subsurface et pourra ainsi intégrer un calage plus fin à partir des données du modèle de ruissellement STREAM. NONSAT simule l'écoulement des eaux dans la zone non saturée du sol. La détermination d'un volume minimum présent dans chaque sous-réservoir de NONSAT ralentit voire stoppe temporairement l'écoulement, ce qui correspond plus à la dynamique hydrique des sols. Par contre, il n'est pas adapté au transfert de polluants car il ne prend en compte qu'un transport passif ; aucun processus de dégradation et/ou de sorption ne sont intégrés.

MODCOU-NEWSAM est une chaîne de modélisation hydrogéologique spatialisée qui permet de tenir compte des positionnements des cultures et des zones urbaines dans le bassin versant. Il permet également de simuler les relations hydrogéologiques entre les trois aquifères superposés, les écoulements horizontaux au sein d'une nappe et les apports aux cours d'eau. Ce modèle est une base forte de la modélisation développée dans le PIREN Seine et est au centre de la plateforme EAU-dyssée

4 Elaboration du nouveau modèle de transfert des pesticides dans

l'environnement

Les deux modèles sont complémentaires : PHYTODEL pour les transferts vers l'atmosphère et les eaux de surface et STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM pour ceux vers les eaux souterraines. Ils ont été développés en parallèle mais séparément car les différents transferts présentent des caractéristiques qui leurs sont propres. Afin de conserver une cohérence dans le transfert des contaminants dans l'environnement, ils vont être fusionnés afin d'avoir un modèle permettant de simuler les concentrations en pesticides vers les eaux superficielles, souterraines et l'atmosphère à l'échelle d'un bassin versant.

Chacun des deux modèles présente des processus spécifiques pour les pesticides : volatilisation, lessivage atmosphérique, la sorption /désorption instantanée et lente, la dégradation, la création de métabolites. De plus, la spatialisation, la description de l'hydrogéologie et la modélisation de l'évolution des plantes dans STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM sont des atouts importants dans la simulation du transfert des pesticides vers les eaux superficielles, souterraines et l'atmosphère.

La base de données des intrants en pesticides « ASPPR'EAUX » étant la même pour les deux modèles, celle-ci est conservée pour le nouveau modèle.

4.1 Dans la zone sous racinaire

Le choix de garder STICS comme base de modélisation a été fait car c'est un modèle agronomique qui intègre la plante dans son fonctionnement. Dans les relations entre le sol et l'atmosphère, les paramètres qui manquent à PHYTODEL pour simuler correctement les échanges sont calculés par STICS (température du sol, couvert végétal). La simulation de la croissance des plantes dans STICS nous permettra de modéliser l'incorporation des pesticides dans la plante, leur volatilisation à partir du feuillage et le lessivage des feuilles par la pluie. La volatilisation des pesticides à partir du sol sera également améliorée car nous pourrions prendre en compte l'évolution du couvert végétal. De plus, la spatialisation des cultures permettra de simuler des variations de concentrations dans l'atmosphère. En effet, dans un premier temps nous ne considérerons que les transferts atmosphériques verticaux, mais il est envisagé de coupler les transferts atmosphériques avec un modèle de transport atmosphérique adapté à l'échelle du bassin de la Seine.

Le processus de volatilisation des pesticides à partir des sols initialement présenté dans PHYTODEL était essentiellement adapté aux herbicides employés principalement sur sol nu. Les fonctions de STICS pourront intégrer la volatilisation à partir des feuilles pour les traitements (insecticides et fongicides) sur culture en place. Ce développement se fera en parallèle des améliorations à apporter au compartiment atmosphérique car ces molécules sont les plus volatiles et sont donc susceptibles de se retrouver dans l'atmosphère. Une première étape de simulation des transferts par volatilisation à partir des feuilles est à l'étude cette année pour caler les paramètres dans un module intermédiaire à l'aide de données acquises par l'INRA Grignon. La dégradation atmosphérique et la l'adsorption/désorption sur les particules atmosphériques décrite dans PHYTODEL sera reprise. Une fonction de lessivage des feuilles permettra de transférer par temps de pluie les résidus situés sur les feuilles vers le sol pour être ensuite disponibles pour l'infiltration.

La première étape est d'actualiser le module STICS-Phyto. En effet, les premiers travaux ont été réalisés avec une version ancienne de STICS. Or les versions plus récentes prennent en compte les macropores. La présence de ces macropores va nous permettre de simuler les chemins préférentiels des écoulements dans le sol et les transports de pesticides qui y sont associés. En effet, les processus d'adsorption/ désorption dans ces macropores peuvent être réduits, entraînant rapidement de fortes concentrations en pesticides vers la zone non saturée.

4.2 Dans la zone non saturée

Le deuxième étape va consister à introduire dans le module NONSAT les équations de dégradation qui sont décrites par les deux modèles par une cinétique d'ordre 1, et celles de sorption / désorption instantanée et lente (AGRIFLUX, Laroque et al.,1997). En effet, Lapworth et Gooddy (2006) ont observé une augmentation des concentrations en pesticides dans un aquifère suite à la remontée du niveau piézométrique, montrant ainsi que les pesticides adsorbés dans le substrat, peuvent se désorber en fonction des variations du niveau piézométrique. Un effet « piston » sera donc recréé par la superposition successive de masses d'eau contaminées différemment en fonction du temps (Figure 12). Dans un même réservoir de simulation de la couche non saturée, l'idée serait de considérer un compartiment homogène où les processus de sorption et de

dégradation seraient identiques. Ces réservoirs seront plus petits que ceux décrits pour le transfert hydrique de NONSAT qui considère que chaque réservoir correspond à 5 mètres de sol. La sorption serait alors représentée par des processus instantanés et lents définis en fonction des types de sol. La dégradation pourra par contre être considérée comme un processus moins actif en profondeur, allant de la biodégradation en surface jusqu'à une dégradation limitée aux processus d'hydrolyse chimique en profondeur.

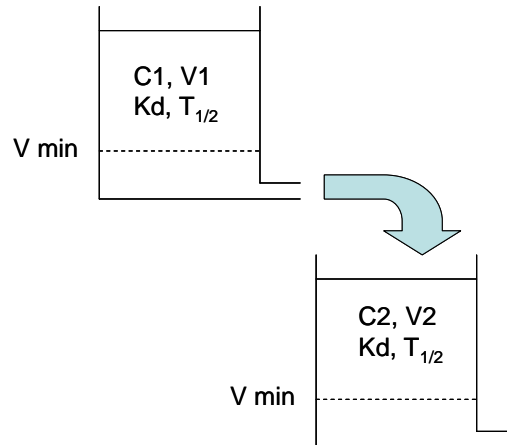


Figure 12 Schématisation du transfert actif de contaminants incluant la sorption et la dégradation dans NONSAT

4.3 A l'échelle du bassin versant

Une fois ces différentes étapes effectuées, la fusion entre STICS-Phyto-MODCOU-NEWSAM et PHYTODEL devra alors être vérifiée et calée avec des valeurs observées dans l'atmosphère, les cours d'eau et la nappe. Dans un premier temps, les essais seront réalisés sur les bassins versants de l'Orge et de l'Orgeval où un effort de caractérisation du milieu a été initié et où les intrants phytosanitaires seront caractérisés dans ASPPR'EAUX.

Les développements futurs seront orientés, outre l'amélioration des processus de transfert dans le modèle, vers un développement à l'échelle du bassin versant de la Seine. En effet, l'intégration à cette échelle géographique reste un objectif de l'étude et les choix de modélisation ont été faits dans ce sens. Cette approche ne pourra être menée qu'à partir du moment où une méthode de détermination des intrants phytosanitaires à grande échelle sera trouvée et validée. Il ne s'agira donc pas uniquement de mettre en pratique les enquêtes à dire d'expert sur une telle superficie mais plutôt d'identifier les bases de données susceptibles de représenter au mieux les pratiques de traitement à l'échelle régionale et d'en connaître les limites. Une analyse plus fine de la contamination des milieux mesurée dans le cadre des réseaux de suivi de la contamination par les pesticides permettra de valider l'utilisation de certaines molécules par apport à d'autres pour une même pratique de traitement.

5 Références :

AGRITOX - Base de données sur les substances actives phytopharmaceutiques. INRA: www.inra.fr/agritox/.

Atkinson R., Guicherit R., Hites R.A., Palm W.-U., Seiber J.N. et De Voogt P. 1999. Transformations of pesticides in the atmosphere: a state of art. *Water, Air, Soil Pollut.*, 115, 219-243.

Bardet C. et Rouxel-David E. 2002. *Synthèse des études menées sur le bassin versant du champ captant de Couraux (Marne)*. Rapport BRGM - FREDONCA, 165 p.

Blanchoud H. 2001. *Apports et transfert de pesticides en milieux agricole et urbain dans le bassin versant de*

- la Marne: vers une évaluation globale*. Thèse: Sciences et techniques de l'environnement. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris, 87 p.
- Billen G. et Christophe S. 2006. Une procédure pour le calcul systématique des écoulements spécifiques à partir des débits. Rapport d'activité 2005 du programme PIREN Seine; 6 p.
- Brisson, N., B. Mary, D. Ripoche, M. Jeuffroy, F. Ruget, B. Nicoullaud et al. 1998. STICS: a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances.1- theory and parametrization applied to wheat and corn. *Agronomie* 18, 311-346.
- FOOTPRINT (2007). The FOOTPRINT Pesticide Properties DataBase. Database collated by the University of Hertfordshire as part of the EU-funded FOOTPRINT project (FP6-SSP-022704). <http://www.eu-footprint.org/ppdb.html>.
- Gomez, E. 2002. Modélisation intégrée du transfert de nitrate à l'échelle régionale dans un système hydrologique: application au bassin de la Seine. Thèse, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Guigon-Moreau E. 2006. Transferts des pesticides vers les eaux superficielles et l'atmosphère : Caractérisation et modélisation sur le bassin versant de la Vesle –Thèse : Université Paris VI - Pierre et Marie Curie, 251 p.
- Habets F., Ledoux E., Viennot P., Philippe E., David C., Moreau-Guigon E., Blanchoud H., Jayet P.A., Bacchi A. et Zakharov P. 2008. Evolution du modèle hydrogéologique MODCOU et stratégie de couplage avec un modèle économique et un modèle de pesticides. Rapport d'activité 2007 du programme PIREN Seine; 9 p.
- Jury W.A., Spencer W.F. et Farmer W.J. 1983. Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model Description. *J Environ Qual*, 12 (4), 558-564.
- Lapworth D.J. et Goody D.C. 2006. Source and persistence of pesticides in a semi-confined chalk aquifer of southeast England. *Environmental Pollution*. 144 (3), 1031-1044.
- Larocque, M., Banton O. et Lafrance P. 1997. Simulation par le modèle Agriflux du devenir de l'atrazine et du dééthylatrazine dans un sol du Québec sous maïs sucré, *Revue des sciences de l'eau*, 11, 191-208.
- Ledoux, E. 1980. Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. Thèse, ENSMP, UPMC.
- Levassor, A. et E. Ledoux. 1996. Programme NEWSAM - notice d'utilisation. Rapport technique, Ecole des Mines de Paris- CIG.
- Rat, A., E. Ledoux et P. Viennot. 2006. Transferts de pesticides vers les eaux souterraines, modélisation à l'échelle d'un bassin versant: cas d'étude du bassin amont de la Vesle. Rapport d'activité 2005 du programme PIREN-Seine, 116 p.
- Schott C., Brajot C., Mignolet C., Ruelland D. et Benoît M. 2006. Dynamiques spatiales des activités agricoles dans le bassin de la Seine: méthodes et résultats sur les sites - ateliers de la Vesle et de la Blaise. Rapport d'activité 2005 du programme PIREN Seine; 37 p.
- Seinfeld J.H. 1986. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. New York: John Wiley & Sons, 738 p.
- Van Pul W.A.J., De Leeuw F.A.A.M., Van Jaarsveld J.A., Van Der Gaag M.A. et Sliggers C.J. 1998. The potential for long-range transboundary atmospheric transport. *Chemosphere*, 37 (1), 113-141.