

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides : isoproturon et atrazine

Thomas Puech, Nicolas Gallois, Céline Schott, Pascal Viennot, Catherine

Mignolet

▶ To cite this version:

Thomas Puech, Nicolas Gallois, Céline Schott, Pascal Viennot, Catherine Mignolet. Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides : isoproturon et atrazine. [Contrat] Agence de l'Eau Seine Normandie (AESN). 2016. hal-02798378

HAL Id: hal-02798378 https://hal.inrae.fr/hal-02798378

Submitted on 5 Jun2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides : isoproturon et atrazine

Thomas Puech¹, Nicolas Gallois², Céline Schott¹, Pascal Viennot^{2*}, Catherine Mignolet¹

¹ INRA SAD-Aster, 662 avenue Louis Buffet, 88 500 Mirecourt ² MINES ParisTech/ARMINES, 35 rue Saint-Honoré, 77 300 Fontainebleau *pascal.viennot@mines-paristech.fr

Résumé

Dans le cadre de travaux initiés en 2014 pour l'Agence de l'Eau Seine-Normandie sur la thématique de modélisation de la pollution d'origine agricole à l'échelle du bassin, il a été proposé d'intégrer le module PeSTICS, modélisant le transfert de pesticides dans les sols, au sein de la plateforme de simulation spatialisée STICS-MODCOU.

L'utilisation exploratoire menée ici de ces modèles poursuit un objectif de définition d'une méthodologie de modélisation spatialisée pouvant permettre, à terme, une reconstitution satisfaisante de l'évolution, à la fois, des niveaux et des dynamiques de concentrations en pesticides mesurés en nappe. Cette première application spatialement distribuée a été mise en œuvre à l'échelle d'une surface d'étude volontairement restreinte (région du Provinois - 1 500 km²).

L'association conjointe de ces outils permet d'englober une majeure partie des paramètres influant sur le devenir des pesticides dans l'environnement, qu'ils soient d'origine intrinsèque, structurale ou extérieure.

En plus de tenter de caractériser les transferts de produits phytosanitaires par la modélisation, cette étude avait également pour objectif d'évaluer la faisabilité d'une reconstruction de l'évolution des pratiques phytosanitaires à grande échelle et sur le temps long, afin de pouvoir alimenter de manière satisfaisante le module agronomique. La plateforme bénéficie ainsi des entrées issues de la base ARSeiNe (base de données Agricole Régionalisée sur le bassin Seine-NormandiE) constituée par l'INRA SAD-Aster, laquelle mobilise plusieurs sources de données permettant de caractériser les systèmes de culture avec un recul de 20 ans.

Même si dans le cas de l'isoproturon, par comparaison aux chroniques de mesures aux points d'observation, les concentrations sous-racinaires calculées par PeSTICS et celles restituées en nappe par le modèle hydrogéologique sont d'ordres de grandeur comparables, l'obtention de ces premiers résultats a permis d'identifier, notamment dans le cas de l'atrazine, des verrous et limites à explorer par la suite afin d'améliorer la méthodologie ainsi que les résultats associés : amélioration des descriptions menées par matière active, caractérisation des usages agricoles antérieurs aux années 1990 de certaines molécules, intégration de sources complémentaires de description des usages sur la période récente (BNVD), association précise entre type de sol et de culture, intégration plus finement spatialisée des caractéristiques physico-chimiques des sols (RRP au 1/250 000^{ème}), etc. Ces aspects feront chacun l'objet de pistes à investiguer au cours de la nouvelle phase de l'étude (2017-2018).

Table des matières

Introdu	uction	2
1	Etude de faisabilité : Évolution des pratiques phytosanitaires à partir du début des an 1990 sur la partie affleurante de la nappe du Champigny	nées 3
1.1	Localisation de la zone d'étude	3
1.2	Données et méthodes mobilisées	4
1.3	Résultats	6
1.3.1	Caractérisation des matières actives par culture : l'exemple du blé tendre	6
1.3.2	Caractérisation des matières actives par culture : l'exemple du maïs grain	7
1.3.3	Caractérisation de l'usage des matières actives : les cas de l'atrazine et de l'isoproturon	8
2	Modélisation exploratoire spatialisée du transfert de pesticides en domaine souterrain : cas de l'isoproturon et de l'atrazine	: les 11
2.1	Le module PeSTICS et sa spatialisation	11
2.1.1	Présentation du module de simulation des flux de pesticides	11
2.1.2	Les données d'entrée du modèle agronomique spatialisé	12
2.2	Pré-requis : Calibration du modèle hydrogéologique à partir des concentrations nitriques mesu en nappes	rées 17
2.3	Modélisations du transfert de pesticides	22
2.3.1	Evaluation des flux de pesticides par le module PeSTICS spatialisé	22
2.3.2	Modélisation du transfert des pesticides dans le domaine souterrain	23
2.3.3	Résultats de simulations pour l'isoproturon	24
2.3.4	Résultats de simulations pour l'atrazine	28
Conclu	usion	32

Introduction

Le phénomène d'intensification des cultures a entrainé l'augmentation des recours aux produits phytosanitaires en vue d'assurer le maintien d'une production agricole abondante. La diversité des matières actives utilisées en agriculture pour protéger les cultures contre les ravageurs ou maladies et lutter contre les adventices a constamment augmenté ces dernières décennies, portant la France au rang de plus gros consommateur de pesticides de l'Union Européenne¹ (et 3^{ème} au niveau mondial²). De récents inventaires de la qualité des eaux³ font état d'une contamination significative par certains pesticides : plus de 90% des points de suivi de la qualité des cours d'eau ainsi qu'environ 60% pour les eaux souterraines indiquaient la présence de pesticides en 2015. Sur le bassin Seine-Normandie en particulier, la quantification de la somme des pesticides recherchés était supérieure à 0,5 μ g.L⁻¹ pour environ un tiers des stations de prélèvements. Outre des conséquences néfastes sur les systèmes aquatiques (difficultés de restauration de ces écosystèmes), les autres compartiments de l'environnement ne sont pas épargnés par ce type de polluants, les processus physico-chimiques et certains modes d'application de ces molécules facilitant la propagation dans l'atmosphère (pulvérisation, dérives) et/ou dans les sols (sorption, formation de résidus liés). Enfin, des études montrent l'implication de pesticides dans certaines pathologies humaines (cancers, maladies neurologiques, etc.⁴).

¹ UIPP (2012). *Rapport d'activité 2011-2012*.

² INRA, IRSTEA (2005). Pesticides, agriculture et environnement – Réduire l'utilisation des pesticides et en limiter les impacts environnementaux, Expertise scientifique collective - Synthèse, Décembre 2005, 68p.

³ Service de l'Observation et des Statistiques du ministère de l'environnement, de l'énergie et de la mer (SOeS), (2015).

⁴ Expertise collective INSERM (2012). *Pesticides – Effets sur la santé*.

La multitude et la complexité des processus physico-chimiques et biologiques intervenant dans l'exercice de modélisation rendent celui-ci particulièrement délicat. Ces phénomènes vont déterminer le devenir des pesticides dans l'environnement, mais la prépondérance de chacun (adsorption, lixiviation, etc.) est influencée par de multiples facteurs, lesquels peuvent être soit d'origine :

- intrinsèque (propriétés physico-chimiques du principe actif^{5,6}),
- structurale (propriétés du sol, activité biologique, présence de matière organique⁷, contexte géologique et hydrogéologique, etc.),
- extérieure (climat et pratiques culturales⁸).

Sur seul l'aspect agronomique, peu d'études comparatives menées à l'aide de modèles capables de fournir des résultats à l'échelle du bassin versant ont été répertoriées dans la littérature. Sur 5 applications de longue durée recensées, seules trois d'entre elles ont été confrontées à des données mesurées⁹.

Ainsi, afin de mener une approche quantitative, ce constat soulève la question de la diversité des données nécessaires, qui plus est, à l'échelle d'un bassin versant. De plus, cette problématique implique la collecte de données d'observations sur le long terme, une partie des pesticides actuellement retrouvés dans les eaux souterraines étant des molécules interdites depuis plus d'une décennie telle que l'atrazine.

Il est ici proposé d'expérimenter l'intégration au sein de la chaîne de simulation STICS-MODCOU, d'une version de STICS implémentée d'un nouveau module de transfert de pesticides (PeSTICS¹⁰). Les premières simulations spatialisées associées, le sont à l'échelle d'une petite zone d'étude localisée entre les départements de la Seine-et-Marne et de la Marne (Provinois).

La chaîne de modélisation bénéficie des données élaborées par l'INRA SAD-Aster, décrivant les systèmes de cultures. La mise en œuvre de cette version de la chaîne de modélisation doit pouvoir permettre la reconstitution de l'évolution des niveaux de concentrations en pesticides mesurées en nappe sur le secteur étudié.

1 Étude de faisabilité : Évolution des pratiques phytosanitaires à partir du début des années 1990 sur la partie affleurante de la nappe du Champigny

1.1 Localisation de la zone d'étude

Cette première partie a pour objectif d'évaluer la faisabilité de reconstruire l'évolution des pratiques phytosanitaires à l'échelle du bassin de la Seine et sur le temps long, dans un objectif final de modélisation.

En concertation entre les équipes prenant part à l'étude (ARMINES, INRA Infosol, INRA AgroImpact, UMR METIS) et l'Agence de l'Eau Seine-Normandie, il a été décidé d'appliquer une méthodologie de modélisation spatialisée sur une aire se situant, pour sa majeure partie, dans le département de la Seine-et-Marne (région du Provinois, cf. Figure 1).

⁵ Worral F. et al. (2002). Groundwater vulnerability: Interactions of chemicals and site properties. Sci. Tot. Env., 299, 1-3, p. 131-143.

⁶ Tariq. M.-I. et al. (2004). Pesticides in shallow groundwater of Bahawalnagar, Muzafargarh, D.G. Khan and Rajan Pur districts of Punjab, Pakistan. Environnement International 30, 4, p. 471-479.

⁷ Carter A.-D. (2000). *Herbicide movement in soils: principles, pathways and processes*. Weed Research, 40, p. 113-122.

⁸ Gigleux S. (2009). Modélisation du transfert des pesticides du sol jusqu'à l'aquifère : étude par approches de complexité croissante site de Montreuil-sur-Epte. Thèse de doctorat, Avignon.

⁹ Boithias L. et al. (2011). Occurrence of metolachlor and trifluralin losses in the save river agricultural catchment during floods. Journal of Hazardous Materials, 196(0), p. 210-219.

¹⁰ Queyrel W. (2014). *Modélisation du devenir des pesticides dans les sols à partir d'un modèle agronomique : Evaluation sur le long terme*. Thèse de doctorat de l'université Pierre et Marie Curie, Paris.



Figure 1 : Localisation de la zone sélectionnée pour l'étude expérimentale du transfert des pesticides - lithologie intégrée au modèle hydrogéologique

D'une surface d'environ 1 500 km², bordée en sa limite Nord par le Grand Morin et au sud, par la cuesta d'Île-de-France, ce secteur constitue une zone d'affleurement de la nappe des calcaires de Champigny *ss*. (Éocène supérieur). Le choix spécifique de cette zone a été appuyé par plusieurs facteurs :

- la préexistence d'un modèle hydrogéologique local¹¹, d'une résolution fine de mailles comprise entre 125 et 1 000 m de côté,
- l'existence d'une base de données de mesures de concentrations de pesticides en nappe fournie par l'association Aqui'Brie, et regroupant les mesures de plusieurs acteurs de l'eau sur le secteur dont Eau de Paris, les DDASS, Agence de l'Eau, etc. depuis le début des années 1990. Ces mesures permettront, en fin de chaîne de modélisation, d'y confronter les chroniques simulées.

1.2 Données et méthodes mobilisées

L'objectif de ce travail de caractérisation des pratiques agricoles orientée vers l'utilisation des produits phytosanitaires est de concevoir une base de données mobilisant les acquis de l'étude menée à l'échelle du bassin entier de Seine-Normandie¹² (maillage en Unités de Modélisation Agricole (ou UMA), successions de cultures, itinéraires techniques « azote », etc.) ainsi que des travaux antérieurs réalisés dans le cadre du PIREN-Seine, complétés par des statistiques simples sur l'usage des produits phytosanitaires (produits, dates, doses, etc.).

Dans un premier temps, cette première approche est jugée satisfaisante pour l'application aux outils de modélisation.

 ¹¹ Bellier S. (2013). Modélisation de la pollution nitrique de la nappe des Calcaires du Champigny – Application en vue d'actions de prévention aux captages prioritaires de la fosse de Melun et de la basse vallée de l'Yerres. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 312p.
 ¹² Puech T. et al. (2015). Modélisation de la pollution nitrique d'origine agricole des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des

¹² Puech T. et al. (2015). Modélisation de la pollution nitrique d'origine agricole des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des masses d'eau : Évolution des systèmes de culture sur le bassin depuis les années 2000 – Construction d'une base de données spatialisée sur les pratiques agricoles. Rapport d'étude, 136 p.

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides

L'intérêt du choix de cette zone d'étude est qu'il existe déjà un certain nombre de données disponibles sur les itinéraires techniques, notamment phytosanitaires, collectées dans le cadre de précédentes études PIREN sur la modélisation du transfert de pesticides¹³.

La base de données OSITOP (Outil de Saisie des Itinéraires Techniques Orientés Pesticides¹⁴) regroupe les données issues des enquêtes menées sur l'Orgeval par L. Nicola, des enquêtes menées par le Service Régional de Protection des Végétaux (SRPV) d'Île-de-France et enfin les enquêtes pratiques culturales sur Grandes Cultures 1994, 2001, 2006 et 2011. Ces enquêtes sont recueillies sur une période de plus de 20 ans (1989-2011). De ce fait, la durée couverte par cette étude de faisabilité sera identique. Les cultures ciblées dans cette l'étude sont celles dont l'effectif est suffisant dans la base de données pour fournir des résultats statistiquement significatifs.

• Extension spatiale

Le nombre d'enquêtes disponibles ne permet pas l'étude statistique des itinéraires techniques à l'échelle stricte de la zone de modélisation. Un travail à une échelle plus large est nécessaire. La zone d'étude se trouvant partagée entre deux grandes régions agricoles (les ensembles « *Plateau Picard-Brie-Soissonnais et Champagne crayeuse* » au Nord et « *Beauce et Gâtinais* » au Sud), il n'est pas cohérent de remobiliser ce découpage territorial d'un point de vue représentativité des pratiques. L'étude des pratiques phytosanitaires a donc été menée à l'échelle d'une région agricole couvrant approximativement la région administrative d'Île-de-France.

• Périodes temporelles

L'évolution rapide de l'usage des produits, notamment en réponse à l'évolution de la règlementation, impose un découpage temporel relativement fin. Aussi, durant les 20 ans d'étude, on identifie 4 périodes supposées homogènes (quelle que soit la culture étudiée), structurées et centrées autour des dates de l'enquête pratiques culturales (1994, 2001, 2006 et 2011) et de dates notables quant à l'utilisation des produits phytosanitaires (2003 : interdiction de l'atrazine, 2009 : carbendazime). Les périodes ainsi retenues sont les suivantes : 1989-1997, 1998-2003, 2004-2008 et 2009-2011.

• Cultures

Plus de 30 cultures sont présentes dans la base de données OSITOP mais la fréquence d'enquêtes de certaines d'entre elles est insuffisante pour considérer les résultats acquis comme solides. Ainsi, seules les cultures enquêtées à plus de 20 reprises (pour chaque période) seront conservées dans l'analyse soit : betterave, blé tendre, colza, féverole, lin, maïs grain, orge d'hiver, orge de printemps, pomme de terre et pois.

• Matières actives

Les connaissances et avancées techniques en terme de modélisation des transferts de produits phytosanitaires sont réduites à une liste limitée de molécules. Des progrès seront probablement faits dans les années à venir et cette liste pourrait s'étoffer. La méthode employée est relativement simple et il serait dommage de se limiter aux molécules actuellement modélisables alors qu'une extension ultérieure de l'analyse à d'autres molécules est possible. L'analyse des produits n'a donc pas été limitée aux molécules actuellement modélisée mais à l'ensemble des molécules significativement utilisées, pour plus de sens d'un point de vue agronomique et afin de pouvoir mobiliser ces travaux à l'avenir, lorsque les modèles auront évolué et permettront la modélisation d'un panel plus conséquent de molécules.

¹³ Blanchoud H. et al. (2011). Les pesticides dans le bassin de la Seine. Comprendre les origines et le transfert des pesticides pour évaluer l'impact sur l'homme et l'environnement. Programme PIREN-Seine.

¹⁴ Nicola L. et al. (2012). Dynamiques de changement des pratiques agricoles dans le bassin versant de l'Orgeval et création de la base de données APOCA (Agricultural Practices of the Orgeval Catchment Area). Programme PIREN-Seine.

Lors de la représentation graphique des résultats présentée dans le paragraphe suivant (cf. Figure 2 par exemple), le nom des matières actives est précédé à titre informatif du type d'usage¹⁵ de la matière active entre accolades¹⁶.

• Fréquences, dates et doses des produits

L'analyse est conduite par période, culture et matière active (MA) et recense pour chacune d'elle la fréquence d'utilisation de la MA (pouvant être supérieure à 1 si une matière active est utilisée à plusieurs reprises durant l'année culturale), des indicateurs temporels d'utilisation (quartiles¹⁷ de jours juliens, cycle de 730 jours) et de dose (quartiles de dose, en g.ha⁻¹). Toutes les surfaces d'une même culture recevront (pour chaque période), un ensemble de molécules représentant une pratique moyennée. Pour des raisons de représentativité, les MA utilisées à une fréquence inférieure de 0,2 utilisations par an ne seront pas représentées.

1.3 Résultats

Parmi toutes les cultures traitées, les résultats suivants sont présentés à titre d'exemple pour deux cultures : le blé tendre et le maïs grain. L'intégralité de ces éléments est stockée dans une base de données mobilisable pour la modélisation (« ArSeiNE-Champigny »). Cette base, structurellement identique à la base ArSeiNE¹⁸, diffère seulement par l'emprise spatiale, limitée au territoire d'étude délimité sur la Figure 1. La segmentation spatiale et les systèmes de culture sont également identiques aux données d'ArSeiNE (UMA, successions de cultures, itinéraires techniques [hors utilisation de produits phytosanitaires]). On suppose dans un premier temps une utilisation homogène des produits par culture, période et UMA (selon les modalités identifiées ci-après).

La spatialisation quantitative (exprimée en g.ha⁻¹), indispensable pour la modélisation, se fait par la coévolution des assolements (évolution de la sole en maïs dans chaque UMA au cours du temps, par exemple) et des pratiques d'usage des produits phytosanitaires (mobilisant des pratiques moyennées par périodes, difficilement spatialisables à une échelle spatiale inférieure à celle retenue).

Les dates et doses médianes calculées sont utilisées pour décrire l'usage des produits phytosanitaires. À titre d'exemple, pour la culture du blé tendre durant la période 2009-2011, l'époxiconazole (fongicide) est utilisé en moyenne 0,8 fois. La date médiane d'utilisation est début mai¹⁹, la dose médiane à 44 g.ha⁻¹⁽²⁰⁾. Il sera donc modélisé : « *utilisation d'époxiconazole sur 80% de la surface en blé tendre le 3 mai à 44 g.ha⁻¹* ». La connaissance de la sole de blé tendre sur chaque UMA (en ha) durant cette période permet donc d'estimer la quantité totale d'époxiconazole utilisée (exprimé en grammes ou kilogrammes sur le territoire) au niveau de la modélisation (par croisement entre dose moyenne par hectare et surface totale en blé tendre).

1.3.1 Caractérisation des matières actives par culture : l'exemple du blé tendre

Le blé tendre est une des cultures les plus présentes et enquêtées sur le territoire avec plus de 2 300 enquêtes sur la période 1989-2011. C'est également la culture sur laquelle le plus de molécules appliquées sont observées (41) de manière significative sur au moins une période. Les dynamiques d'usage des MA sont variables et dépendent de l'évolution de la règlementation, des autorisations de mise sur le marché des produits commerciaux et plus globalement des politiques commerciales des organismes distributeurs. À noter une diminution à partir du milieu des années 2000 de l'utilisation de l'isoproturon (urées substituées), molécule progressivement remplacée par l'iodosulfuron et le mésosulfuron (sulfonylurées) pour le

¹⁵ Certaines matières actives peuvent avoir plusieurs types d'usage possible (metconazole et tébuconazole, par exemple, homologués en tant que régulateur de croissance et fongicide). Dans ce cas, seul un des usages est renseigné.

¹⁶ Adj : adjuvant, F : fongicide, H : herbicide, I : insecticide, Mol : mollucide, Reg : régulateur de croissance.

¹⁷ En cas de molécules utilisées à l'automne et au printemps, la moyenne pourrait fournir une information incohérente (date moyenne du 15 novembre et 15 février est le 1^{er} janvier), d'où l'intérêt de travailler sur la médiane et les quartiles afin d'apprécier les plages temporelles.

¹⁸ Puech T. et al. (2015). Modélisation de la pollution nitrique d'origine agricole des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des masses d'eau : Évolution des systèmes de culture sur le bassin depuis les années 2000 – Construction d'une base de données spatialisée sur les pratiques agricoles. Rapport d'étude, 136 p.

¹⁹ 1^{er} quartile le 25 avril, médiane le 03 mai, 3^{ème} quartile le 13 mai.

²⁰ 1^{er} quartile $Q^{surf} = 31,25$ g.ha⁻¹, médiane $Q^{surf} = 43,75$ g.ha⁻¹, 3^{hme} quartile $Q^{surf} = 62,5$ g.ha⁻¹.

désherbage. On observe que l'isoproturon est principalement utilisé à l'automne mais quelques utilisations en sont également faites au printemps. Le chlortoluron, quant à lui, n'est utilisé qu'à l'automne.

Plus généralement, et quel que soit le type d'action des produits utilisés, il y a une tendance à la diversification des produits utilisés : durant la période 2009-2011, aucune molécule n'est utilisée plus de 0,8 fois en moyenne, contrairement aux autres périodes. Il apparaît également que certaines molécules ne s'observent que sur une période donnée (ex : carbendazime), tandis que d'autres sont présentes tout au long de la période d'étude (epoxiconazole, chlormequat).



Figure 2 : Fréquence d'utilisation des matières actives sur le blé tendre (source : BdD OSITOP)

1.3.2 Caractérisation des matières actives par culture : l'exemple du maïs grain

Après le blé tendre, le maïs grain est la deuxième culture la plus enquêtée avec 749 enquêtes sur toute la période couverte. C'est également la culture ayant le moins de matières actives recensées avec une utilisation significative. Sur les 13 matières actives retenues, 10 sont des herbicides. L'atrazine, qui constituera dans la suite de l'étude un des deux objets du travail de modélisation appliquée, est l'herbicide le plus utilisé sur le maïs avant les années 2000.

La diminution régulière des doses homologuées et utilisées (médiane de 1,25 kg.ha⁻¹ en 1989-1997 et 0,72 kg.ha⁻¹ en 1998-2003) puis son interdiction en 2003 ont fait émerger d'autres familles d'herbicides (sulfonylurées : nicosulfuron et tricétones : sulcotrione et mésotrione) à partir du début des années 2000. On remarque qu'il y a peu de stabilité des molécules utilisées d'une période à l'autre.



Principales matières actives utilisées sur le maïs grain

Figure 3 : Fréquence d'utilisation des matières actives sur le maïs grain (source : BdD **OSITOP**)

1.3.3 Caractérisation de l'usage des matières actives : les cas de l'atrazine et de l'isoproturon

L'atrazine

L'atrazine est utilisée principalement sur maïs grain jusqu'au début des années 2000 et ressort de manière significative des analyses statistique sur les périodes 1989-1997 et 1998-2003. Durant la première période, 70% des surfaces en maïs grain sont désherbées avec de l'atrazine. Les traitements sont faits dans la seconde quinzaine du mois d'avril et à une dose variant entre 1 et 1,25 kg.ha⁻¹. Durant la seconde période, 80% des surfaces en maïs sont traitées à l'atrazine. Les traitements se font plus tardivement (début mai) et à des doses inférieures à celles observées lors de la première période (0.5 à 1 kg.ha⁻¹).

Les surfaces concernées par l'utilisation de l'atrazine sont renseignées telles que dans la base de données²¹ sont présentées dans le Tableau 1.

L'isoproturon

L'usage d'isoproturon est détecté de manière significative sur le blé tendre d'hiver, l'orge d'hiver et de printemps. La molécule est utilisée principalement sur le blé tendre. Le Tableau 2 présente les surfaces concernées par l'utilisation de l'isoproturon selon les trois cultures.

La fréquence de chacune de ces trois cultures dans les UMA (ainsi que leur évolution) permet de moduler les statistiques d'usage de l'isoproturon et d'estimer la surface totale concernée par la molécule, soit environ 30% sur les périodes 1990-1997 et 1998-2003, 20% sur la période 2004-2008 et moins de 10% sur la période 2009-2011 (cf. Figure 4).

La variabilité et l'évolution des doses utilisées sont présentées dans le Tableau 3 et montrent une évolution tendancielle à l'augmentation des doses utilisées.

²¹ Et donc utilisées pour la modélisation des transferts d'atrazine par PeSTICS.

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides

UMA	Période	Surface en maïs (% _{SAU})	Surface concernée par l'usage d'atrazine (% _{SAU}) ²²	Date d'utilisation	Dose d'utilisation (kg.ha ⁻¹)
116	1989 - 1997	8	6,4	20 avril	1,25
	1998 - 2003		5,6	5 mai	0,7
163	1989 - 1997	9.5	7,6	20 avril	1,25
	1998 - 2003	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	6,7	5 mai	0,7
181	1989 - 1997	4 5	3,6	20 avril	1,25
101	1998 - 2003	1,5	3,2	5 mai	0,7
361	1989 - 1997	10	8	20 avril	1,25
501	1998 - 2003		7	5 mai	0,7

Tableau 1 : Surfaces concernées par l'utilisation de l'atrazine, dates et doses d'utilisation renseignées dans la base de donnés

Tableau 2 : Surfaces concernées par l'utilisation de l'isoproturon

	Surface concernée par l'usage de l'isoproturon (% _{SAU} par culture)				
Période	Blé tendre	Orge d'hiver	Orge de printemps		
1989 - 1997	70 %	55 %	50 %		
1998 - 2003	70 %	55 %	35 %		
2004 - 2008	40 %	30 %	20 %		
2009 - 2011	20 %	NC ²³	NC		

 Tableau 3 : Doses médianes d'isoproturon utilisées par période et par culture

	Dose médiane (g.ha ⁻¹)				
Culture / Période	1990-1997	1998-2003	2004-2008	2009-2011	
Blé tendre	750	750	750	860	
Orge d'hiver	500	750	900		
Orge de printemps	500	600	500		

 ²² Obtenu par produit entre surfaces en maïs et pourcentages de surfaces traitées avec de l'atrazine.
 ²³ NC = non concerné : moins d'une parcelle sur 1 utilise de l'isoproturon (cf. hypothèses précédentes).

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides



Surfaces concernées par l'utilisation de l'isoproturon

Figure 4 : Évolution des surfaces concernées par l'utilisation d'isoproturon sur les 4 périodes d'étude

Enfin, les périodes d'usage de la matière active sont variables selon les cultures (cf. Tableau 4).

- L'isoproturon utilisé sur blé tendre est tantôt utilisé en fin d'automne, tantôt en fin d'hiver/début de printemps. À noter que pour la période 2009-2011, les traitements herbicides à base de la molécule sont très largement effectués en automne.
- Sur orges d'hiver, l'isoproturon est principalement utilisé en sortie d'hiver même si certaines utilisations sont observées en désherbage de novembre.
- Enfin sur les orges semées au printemps, les traitements herbicides se font quelques semaines après le semis, soit à partir de la fin du mois de mars jusqu'aux premiers jours du mois de mai.

Culture	Période	1 ^{er} quartile	Médiane	3 ^{ème} quartile
	1990-1997	Mi-novembre	Mi-décembre	Début mars
Blé tendre	1998-2003	Fin novembre	Fin février	Mi-mars
	2004-2008	Début novembre	Mi-novembre	Début mars
	2009-2011	Début novembre	Début novembre	Mi-novembre
	1990-1997	Début novembre	Début février	Début mars
Orge d'hiver	1998-2003	Début janvier	Début mars	Mi-mars
	2004-2008	Début novembre	Début mars	Fin mars
Orres de	1990-1997	Mi-avril	Début mai	Début mai
printemps	1998-2003	Fin mars	Début avril	Début mai
	2004-2008	Début avril	Mi-avril	Fin avril

 Tableau 4 : Périodes d'utilisation d'isoproturon utilisées par période et par culture

2 Modélisation exploratoire spatialisée du transfert de pesticides en domaine souterrain : les cas de l'isoproturon et de l'atrazine

Il est question, dans cette partie, d'intégrer au sein de la chaîne de simulation STICS-MODCOU, une version du modèle STICS implémentée du module de transfert de pesticides PeSTICS, développé en 2014, dans le cadre d'une thèse PIREN portant sur la modélisation du devenir des pesticides sur le long terme dans les sols.

2.1 Le module PeSTICS et sa spatialisation

2.1.1 Présentation du module de simulation des flux de pesticides

Ce module, s'inscrit dans la continuité de travaux menés dans le cadre du programme PIREN-Seine sur la modélisation des transferts de pesticides et fait suite à de premiers travaux élaborés autour de STICS (*STICS-Phytos*)²⁴. Ce module a été conçu en cohérence avec la structure et le formalisme du modèle agronomique STICS²⁵ et répond ainsi aux contraintes imposées par les développeurs (généricité, robustesse, modularité et opérationnalité). De manière analogue au fonctionnement de STICS, ce module permet, entre autres, une quantification journalière des flux lessivés en base du profil de sol, pour une matière active donnée.

Un certain nombre d'autres modèles traitant également du transfert des pesticides sont disponibles dans la littérature. Cependant, peu d'entre eux intègrent explicitement et de manière détaillée les pratiques agricoles. PeSTICS présente la particularité d'intégrer plusieurs des fonctionnalités qu'offre STICS, bénéficiant ainsi des notions de culture et de pratiques agricoles dans son fonctionnement en relation avec le devenir des molécules dans les sols. La phase de développement de ce module a permis de le tester sur 4 herbicides dont l'atrazine (ainsi que sur un de ses métabolites : la déséthylatrazine ou DEA), la simazine, le chlortoluron et l'isoproturon. Les processus intégrés au module sont tous associés au compartiment sol. Ceux-ci sont précisés en Figure 5. Les formalismes mathématiques associés sont très largement détaillés dans Queyrel, 2014²⁶.



Figure 5 : Les différents processus physico-chimiques intégrés au module PeSTICS²⁷

²⁴ Rat A. et al. (2006). *Modélisation des transferts de pesticides vers les eaux souterraines - Application au devenir de l'atrazine*. Rapport PIREN-Seine, Ecole des Mines de Paris.

²⁵ Brisson N. et al. (2003). An overview of the STICS crop model. *European journal of agronomy*, p. 309-332.

²⁶ Queyrel W., (2014). *Modélisation du devenir des pesticides dans les sols à partir d'un modèle agronomique : évaluation sur le long terme*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie.

²⁷ Queyrel W. et al. (2014). *Notice utilisateur PeSTICS*.

Les processus de transformation et de dégradation sont primordiaux pour simuler le devenir des pesticides et leur persistance dans les sols. Le phénomène de transformation permet d'intégrer la création et l'évolution de métabolites.

L'adsorption et la désorption sont également importants afin d'intégrer les phénomènes de rétention des matières actives dans les sols (mécanismes physico-chimiques et biologiques permettant le passage des molécules de la phase liquide à la phase solide).

De plus, la formation de résidus liés est une composante majeure permettant d'expliquer le devenir des pesticides sur le long terme. En effet, leur formation et leur remobilisation conditionne grandement l'évolution du stock des pesticides dans les sols et par la même occasion, leur temps de résidence. Enfin, la perte en pesticides par lixiviation constituant le principal objectif environnemental de cette étude, il en résulte la nécessité de considérer également le transfert sous forme dissoute.

En revanche, les mécanismes tels que les pertes atmosphériques par volatilisation, l'interception foliaire, la photodégration et l'adsorption racinaire ne sont actuellement pas intégrés au module.

Remarque : Les deux matières actives testées lors de cette étude présentent une faible tendance à la volatilisation. En conséquence, les pertes atmosphériques sont considérées comme négligeables pour ces deux substances.

Compte tenu du grand nombre de molécules utilisées depuis ces dernières décennies, les modélisations réalisées par la suite se focalisent sur deux molécules parmi celles les plus mesurées dans les aquifères : l'isoproturon et l'atrazine.

2.1.2 Les données d'entrée du modèle agronomique spatialisé

L'application du module à une échelle spatiale supérieure à celle de la parcelle agricole, réalisée par Queyrel dans le cas d'étude du bassin versant de l'Orgeval, impliquait certaines hypothèses simplificatrices (*ie.* prise en compte d'une unique typologie de sol et d'un unique itinéraire technique moyen pour les deux cultures simulées, assolement considéré comme temporellement invariant, etc.) considérant ainsi les quantités de pesticides, à la fois appliquées et lixiviées, comme réparties de façon homogène sur l'ensemble du bassin.

L'objectif est, ici, de faire bénéficier au module de la méthode de spatialisation précédemment mise en œuvre dans le volet de l'étude portant sur les nitrates²⁸, pouvant ainsi intégrer trois grands types d'information spatialisée :

• les données météorologiques journalières issues de l'analyse atmosphérique SAFRAN, au pas de 8 km. D'une façon générale, l'hétérogénéité spatiale des facteurs climatiques tels que la température et les précipitations ont une influence sur le comportement des pesticides appliqués. La distribution spatio-temporelle des précipitations module la quantité d'eau disponible pour l'entrainement des composés dissous au travers de la zone racinaire. La Figure 6 ci-dessous proposant un détail sur la zone cible, et ce, pour deux paramètres : la pluviométrie et l'évapotranspiration potentielle (ETP).

²⁸ Gallois N., Viennot P. (2015). Modélisation de la pollution nitrique d'origine agricole des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des masses d'eau : modélisations couplées hydrogéologie-agriculture. Rapport d'étude, 154 p.



Figure 6 : Répartition spatiale du cumul annuel moyen des précipitations et de l'évapotranspiration potentielle sur la zone d'étude, pour la période 1990-2013 (d'après la base de données SAFRAN²⁹)

Sur cette période, les précipitations annuelles s'élèvent en moyenne à 729 mm (moyenne du bassin Seine-Normandie de 820 mm) avec un gradient modéré, du fait de la faible extension de la zone, d'environ 60 mm et d'orientation Sud-Ouest/Nord-Est. La variabilité annuelle est cependant très marquée (-/+ 104 mm.an⁻¹) avec des extremums variant du simple (1995 avec 476 mm) au double (1036 mm en 2000). L'ETP annuelle, en moyenne de 924 mm (moyenne du bassin Seine-Normandie de 840 mm), se présente, elle, comme moins erratique, avec une variabilité de -/+ 43 mm.an⁻¹ (cf. Figure 7).



Figure 7 : Évolution des cumuls annuels des précipitations et de l'évapotranspiration potentielle sur la zone d'étude

la distribution spatiale des différents types de sols selon la base BDGSF³⁰ au 1/1 000 000^{ème} : Le domaine d'étude est régionalisé en plusieurs grandes catégories de sols (polygones UCS pour « Unités Cartographiques de Sol »). Celles-ci regroupent différents types de sol (ou « Unités

²⁹ Système d'Analyse Fournissant des Renseignements Adaptés à la Nivologie, Météo-France.

³⁰ Base de Données Géographiques des Sols de France, INRA.

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides

Typologiques de Sol » - UTS), d'un nombre variant de 1 à 5, sous la forme d'une distribution surfacique, non spatialisée, au sein d'un même polygone. C'est cette double répartition, représentée selon la nomenclature officielle *FAO-Unesco*, sur la Figure 8a ci-après, qui sera prise en compte afin de décrire spatialement les différents types de sol dans ces premières modélisations. Par souci de simplification et de compréhension, la Figure 8b fournit une version simplifiée de cette sectorisation, ne mentionnant que la nature prépondérante des sols. Pour chaque UTS, le sol y est décrit comme une succession de couches horizontales caractérisées par leurs propriétés physiques (épaisseurs, masses volumiques, teneurs en eau à la capacité au champ et au point de flétrissement, teneur en cailloux, teneur en carbone organique, etc.). Des paramètres physico-chimiques supplémentaires viennent compléter cette description (teneur en azote organique, en argile, en carbonate de calcium, etc.).



Figure 8 : Régionalisation des unités cartographiques selon la base BDGSF au 1/1 000 000^{ème} (les données entre parenthèses indiquent les pourcentages surfaciques de chaque UTS au sein de l'UCS)

les données descriptives des systèmes de culture : Tel qu'évoqué précédemment, les évolutions spatio-temporelles des assolements et des itinéraires techniques sont décrites à l'échelle des Unités de Modélisation Agronomique (ou UMA, cf. Figure 9) sur la zone sélectionnée, et ce, au regard, à la fois des applications en azote et en pesticides. Ces descriptions sont essentielles car elles déterminent la quantité de pesticides disponibles pour le lessivage potentiel en profondeur. La prise en considération du devenir des pesticides dans les sols nécessite de fournir de nouvelles informations propres au module (en addition de celle déjà nécessaires à STICS - cf. Figure 10) :

- **le calendrier des apports en pesticides** : Ces données représentent l'ensemble des traitements réalisés au cours d'un cycle cultural. Pour rappel, il s'agit du nombre d'applications, du type de matière active ainsi que la dose appliquée.
- le profil détaillé en carbone organique du sol : Le profil utilisé, l'est, dans ces premières simulations, de façon homogène pour l'ensemble des 23 unités typologiques de la BDGSF croisant la zone modélisée. Le profil de référence utilisé, a été élaboré à partir de données collectées en différents points d'un versant du sous-bassin des Avenelles par Billy et al., 2010³¹ et utilisé en tant que profil moyen de référence pour l'application du module réalisée par Queyrel sur le bassin versant de l'Orgeval.
- les caractéristiques physico-chimiques des matières actives modélisées : Ces paramètres sont pour la plupart issus de bases de données génériques, indépendants du contexte d'utilisation du modèle. Le Tableau 5 ci-dessous précise la source et les valeurs de chaque paramètre nécessaire au fonctionnement du module.

Paramètre	Sources	Atrazine	Isoproturon
Solubilité du pesticide	Basas de données das	33 000 μg.L ⁻¹	70 000 μg.L ⁻¹
Coefficient de partition des produits de dégradation du pesticide	propriétés physico-chimiques (PPDB, 2013)	0,21 (vers DEA) 0,33 (vers DIA)	-
Energie d'activation	Rapports d'experts de la commission Européenne (EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues, 2007)	45 400 J.mol ⁻¹	47 700 J.mol ⁻¹
Coefficient de partition entre la phase liquide et solide	Rapport FOCUS (FOrum for the Co-ordination of pesticide fate models and their USe)	70 L.kg ⁻¹	40 L.kg ⁻¹
Demie-vie du pesticide (phase dissoute, adsorbée)	ou Bases de données des propriétés physico- chimiques PPDB	26 j ⁻¹	25 j ⁻¹
Constantes de cinétique	à partir la littérature	0,1488 j ⁻¹ (<i>adsorp.</i>) 0,0148 j ⁻¹ (<i>désorp.</i>)	0,85 j ⁻¹ (adsorp.) 0,085 j ⁻¹ (désorp.)

Tableau 5 : Paramètres physico-chimiques d'entrée du module PeSTICS

³¹ Billy C. et al. (2010). Nitrogen isotopic composition of leached nitrate and soil organic matter as an indicator of denitrification in a sloping drained agricultural plot and adjacent uncultivated riparian buffer strips. Soil Biology and Biochemistry, 42 (1), p. 108–117.



Figure 9 : Découpage des Unités de Modélisation Agricole (UMA) sur la zone d'étude

La version associée STICS-PeSTICS dispose de sa propre version du logiciel de spatialisation, laquelle permet de gérer automatiquement les particularités techniques propres au module (création et gestion des fichiers d'entrées/sorties, etc.). Le schéma adopté de gestion des cultures, successions et types de sols est, pour la majeure partie identique à celui mis en œuvre dans le cas des simulations nitrates à la différence près qu'il n'intègre pas la notion de permutation cyclique des cultures au sein d'une même succession³². Cet aspect sera repris plus en détail par la suite. Le croisement sous SIG des zones à pratiques agricoles homogènes (UMA), des unités cartographiques des sols (UCS) et de la grille météorologique SAFRAN présentés précédemment, permet de créer 198 unités générales de simulations (ou UGSM) sur la zone d'étude sélectionnée (cf. Figure 10).



Figure 10 : Schéma des différents éléments et types de données nécessaires au fonctionnement de la chaîne de modélisation STICS/PeSTICS-MODCOU

³² Gallois N., Viennot P. (2015). Modélisation de la pollution nitrique d'origine agricole des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des masses d'eau : modélisations couplées hydrogéologie-agriculture. Rapport d'étude, 154 p.

Modélisation exploratoire de la pollution des eaux souterraines par deux pesticides

Précisons que l'utilisation du modèle MODCOU implique l'hypothèse d'un transport de matière conservatif une fois le flux de pesticides en phase liquide entré dans la zone non saturée, les phénomènes physicochimiques propres aux pesticides étant simulés par PeSTICS en-deçà de cette limite. D'après la littérature, les observations et conclusions de certaines études^{33,34,35} sur le transport et le devenir des pesticides dans les eaux souterraines semblent aller dans ce sens, celles-ci ayant identifié des vitesses de biodégradation beaucoup plus rapides dans la zone superficielle du sol (PeSTICS) que dans la zone non saturée et saturée (MODCOU) tandis que d'autres³⁶ tendent à montrer que les taux de biodégradation sont limités par l'absence de carbone organique et/ou de populations microbiennes, qui généralement, décroissent en fonction de la profondeur.

2.2 Pré-requis : Calibration du modèle hydrogéologique à partir des concentrations nitriques mesurées en nappes

Cette exploitation conjointe des modèles agronomiques et hydrogéologiques l'est, dans un premier temps, à titre exploratoire. Cette application a pour vocation de mettre en exergue les difficultés rencontrées ainsi que les possibles voies à explorer par la suite afin de préciser la méthodologie employée en vue d'une amélioration des résultats. Les « résultats » présentés ci-après ne peuvent être, en l'état, interprétés d'aucune manière que ce soit selon un objectif opérationnel de gestion de la pollution des eaux souterraines.

L'étape préliminaire à la modélisation du transfert des pesticides consiste à injecter au modèle hydrogéologique (après une phase de calage hydrodynamique), les flux de nitrates simulés sur la période 1971-2013 à partir de « STICS nitrates » spatialisé. Cette phase de travail occasionne alors un réajustement de la porosité cinématique.

Après cette phase de calage, aucune modification supplémentaire n'est alors apportée sur les paramètres régissant l'hydrodynamique (*ie.* transmissivités et coefficients d'emmagasinement) et le transport de solutés (porosité efficace) au sein du système. Le pas de temps de calcul est décadaire. La Figure 11 répertorie l'ensemble des qualitomètres retenus pour la phase de calage soit 70 points de mesure, sélectionnés sur la base de la densité et de la répartition temporelle de mesures disponibles.

La quantité d'azote sous-racinaire lessivée est fortement conditionnée par les précipitations (et *a fortiori* par la quantité d'eau drainée) comme le souligne la Figure 12 précisant l'évolution annuelle des cumuls moyens simulés des lames d'eau drainées et flux d'azote à l'échelle de la zone investiguée. Il est globalement constaté deux périodes de lixiviation azotée plus intenses que la moyenne, associées à des lames drainées supérieures à 200 mm.an⁻¹ (1977 à 1983 et 1998 à 2002).

³³ Wehtje G.-R. et al. (1983). *Biological significance and fate of atrazine under aquifer conditions*. Weed Science, 31, p. 610-618.

³⁴ McMahon P.-B. et al. (1992). Atrazine mineralization potential of alluvial-aquifer sediments under aerobic conditions. Environmental Science and Technology 26, 8, p. 1556-1559.

³⁵ Vinther F.-P. et al. (2001). Heterogeneity of bacterial populations and pesticide degradation potentials in the unsaturated zone of loamy and sandy soils. Biology and fertility of soils 33, 6, p. 514-520.

³⁶ Chapelle F.-H. (1993). Ground-Water Microbiology and Geochemistry.



Figure 11 : Localisation géographique des ouvrages utilisés pour le calage du transfert de solutés



Figure 12 : Évolution annuelle : (a) des lames d'eau drainées moyennes (mm.an⁻¹), (b) des flux d'azote lessivés (kgN.ha⁻¹) moyens à l'échelle de la zone d'étude pour la période 1970-2013

Pour un forçage techno-pédo-climatique donné, à l'échelle de la rotation culturale, il est plus facilement appréhendable de raisonner en termes de concentration moyenne qu'en flux azoté, ce dernier étant beaucoup plus variable avec le volume d'eau drainé. Ainsi, la Figure 13 représente les concentrations sous-racinaires en nitrates (exprimées en mgNO₃-.L⁻¹), moyennées par décennies, obtenues à partir des flux d'azote et d'eau simulés. Ce sont ces concentrations qui seront susceptibles d'être entrainées dans l'hydrosystème par ruissellement de surface, de subsurface ou par infiltration vers les formations aquifères sous-jacentes. C'est également lors de l'injection au module de surface du modèle hydrogéologique des concentrations calculées que sont pris en compte les proportions de surfaces cultivées par rapport aux zones non agricoles (cf. Figure 14). Sur ces dernières, une concentration constante est imposée dans les flux d'eau respectivement à 10 mgNO₃-.L⁻¹ sous les zones urbanisées et 8 mgNO₃-.L⁻¹ sous couverts forestiers.



Figure 13 : Concentrations moyennes décennales sous-racinaires en nitrates simulées par le modèle STICS à l'échelle de l'UGSM (en mgNO3⁻.L⁻¹)



Figure 14 : Occupation du sol à l'échelle de la zone d'étude selon la base de données CorineLandCover

Dans la suite du document, la Figure 15 présente des exemples de comparaisons des chroniques observées et simulées, sur des ouvrages captant l'ensemble Éocène supérieur, moyen et inférieur. La Figure 16 se focalise sur ceux captant l'Éocène supérieur et moyen tandis que la Figure 17 indique les résultats du calage pour des points à l'Éocène inférieur.



Figure 15 : Comparaisons des concentrations en nitrates mesurées et calculées sur la période 1971-2013 pour certains points de calage captant l'ensemble Éocène supérieur, moyen et inférieur



Figure 16 : Comparaisons des concentrations en nitrates mesurées et calculées sur la période 1971-2013 pour certains points de calage captant l'Éocène supérieur et l'Éocène moyen



Figure 17 : Comparaisons des concentrations en nitrates mesurées et calculées sur la période 1971-2013 pour certains points de calage captant l'Éocène inférieur

2.3 Modélisations du transfert de pesticides

2.3.1 Évaluation des flux de pesticides par le module PeSTICS spatialisé

Afin de permettre une vue d'ensemble, la Figure 18 ci-dessous précise l'évolution annuelle des concentrations moyennes calculées en atrazine et isoproturon sur l'ensemble des zones agricoles de la zone d'étude.



Figure 18 : Concentrations sous-racinaires moyennes en atrazine (courbe rouge) et isoproturon (courbe bleue) sur l'ensemble de la zone de modélisation (en $\mu g.L^{-1}$)

En première approche, le cas de l'isoproturon permet de constater un ordre de grandeur des concentrations sous-racinaires simulées cohérent avec celui des observations réalisées sur la zone d'étude (cf. Figure 22 à Figure 24). Les concentrations moyennes simulées sur la période 2004-2013 semblent effectivement témoigner d'une diminution par comparaison avec la période 1992-1998, observation en cohérence avec le constat formulé en paragraphe 1.3.1 suite au traitement des résultats d'enquêtes (*ie.* diminution de l'utilisation de l'isoproturon à partir du milieu des années 2000). Cependant, les concentrations, globalement très faibles, ainsi que la dynamique calculées pour l'atrazine surprennent.

Quelques premières pistes d'explications peuvent être avancées afin d'expliquer l'évolution de la dynamique simulée. Dans cette première version de spatialisation du module, le schéma de simulation permettant d'utiliser le module PeSTICS à une échelle autre (bassin), que celle pour laquelle il a été initialement conçu (parcelle agricole), s'appuie en majeure partie, sur celui développé dans le cas des nitrates.

Cependant, il diffère de ce dernier par la non-intégration des simulations cycliques des cultures composant une succession culturale. Pour rappel, dans le cas des nitrates, en fin de simulation des différentes permutations de tête de rotation possibles pour une succession culturale donnée, une moyenne journalière des flux de sortie est alors calculée sur le nombre de permutations. Ce procédé permet, en particulier :

- d'intégrer dans la spatialisation l'hypothèse d'une équi-répartition des cultures composant une succession sur une même zone agricole à un temps donné,
- de s'affranchir, dans la simulation de l'ordre linéaire avec lequel sont renseignées les successions de cultures dans les bases de données,
- de traduire au mieux dans les simulations les observations réalisées à l'échelle du paysage.

Cependant, cette étape présuppose l'apport d'intrants azotés sur la quasi-totalité des types de cultures simulées afin, lors du calcul du flux moyen sur l'ensemble des permutations, de ne pas biaiser le calcul, à une même date, par des flux de lixiviation significativement différents les uns des autres (*ie*. cas des cycles culturaux sans apports).

Or, dans le cas des simulations spatialisées « pesticides », ces apports se faisant uniquement sur des types de cultures ciblés (atrazine sur maïs), un tel calcul conduit à modifier considérablement la dynamique temporelle des flux finaux (et donc des concentrations injectées dans la zone non saturée), en amenant à moyenner des chroniques de flux issus de cycles culturaux avec et sans apports en atrazine à une même date. C'est la raison pour laquelle la version actuelle du code de spatialisation utilisée pour les pesticides n'intègre pas cette étape. En conséquence, les successions de cultures sont simulées, dans ces premiers tests, dans l'ordre linéaire avec lequel elles sont renseignées dans les bases.

Afin d'illustrer ce point, considérons l'exemple d'une succession « blé-maïs-blé-pois » occupant 8% de la surface agricole utile et sur laquelle des apports d'atrazine ne sont appliqués que sur les cultures de maïs. La Figure 19 illustre les successions *réellement* simulées dans le cas des simulations « nitrates » et « pesticides ».

Observations à l'échelle du paysage	Traduction dans la base de données	Intégration dans les simulations <mark>nitrates</mark>
blé-maïs-blé-pois = 2% SAU maïs-blé-pois-blé = 2% SAU blé-pois-blé-maïs = 2% SAU maïs-blé-maïs-blé = 2% SAU	maïs-blé-pois-blé = 8% de SAU	maïs-blé-pois-blé sur 8% de SAU simulé avec permutation de tête de rotation = blé-maïs-blé-pois (pondération ¼) maïs-blé-pois-blé (pondération ¼) blé-pois-blé-maïs (pondération ¼) pois-blé-maïs-blé (pondération ¼)
Observations à l'échelle du paysage	Traduction dans la base de données	Intégration dans les simulations <mark>pesticides</mark>
blé-maïs-blé-pois = 2% SAU maïs-blé-pois-blé = 2% SAU blé-pois-blé-maïs = 2% SAU pois-blé-maïs-blé = 2% SAU	maïs-blé-pois-blé = 8% SAU	maïs-blé-pois-blé sur 8% de SAU simulé sans permutation de tête de rotation = maïs-blé-pois-blé (pondération 1)

Figure 19 : Comparaison des modes d'intégration de l'ordre des cultures renseignées dans les bases de données agricoles (cas des modélisations « nitrates » et « pesticides »)

Les occurrences de cultures de maïs étant *par convention* renseignées en première position des successions dans la base de données, la dynamique sous-racinaire calculée en atrazine est ainsi très fortement liée à l'interaction entre le mode de schématisation des successions de cultures dans les bases et le schéma de modélisation.

Cet aspect constitue déjà un biais identifié dans la transposition du raisonnement de la simulation à l'échelle de la parcelle (apport en pesticides binaire sur maïs la première année) à l'échelle du paysage (en moyenne une année = 2% maïs + 2% pois + 4% blé). Ce point fera l'objet d'investigations futures, tant du point de vue de la réalisation de tests de sensibilités sur l'ordre des cultures dans la spatialisation que de la modification du code lui-même.

2.3.2 Modélisation du transfert des pesticides dans le domaine souterrain

Une des premières difficultés rencontrées au niveau de la modélisation hydrogéologique concerne l'initialisation. La durée de la phase d'initialisation (sa date de début plus précisément) se doit ici d'être contrainte de manière à ne pas anticiper l'entrée du polluant en question dans l'hydrosystème relativement aux premières dates d'utilisation connues. Tel que mentionné précédemment, l'atrazine ayant été homologuée en 1959 et l'isoproturon en 1973, il a respectivement été retenu des dates limites de début

d'initialisation en 1965 et 1975. Pendant la phase d'initialisation (jusqu'en 1990 donc), sont imposées en surface des concentrations spatialisées constantes permettant de coïncider au mieux avec les niveaux moyens de contamination observés au début des années 1990. Par la suite, les calculs s'enchainent sur la période 1990-2013 avec les flux d'eau et de matière simulés. Les simulations hydrogéologiques menées pour chacune des deux molécules sont indépendantes. Les Figure 20 et Figure 21 résument les modes d'initialisation alors adoptés pour les deux pesticides.



*: Le flux d'eau moyen décadaire utilisé sur la période 1965-1971 est calculé à partir des flux simulés par MODCOU sur la période 1971-1979.





Figure 21 : Scénario de simulation retenu dans le cas de l'isoproturon

L'influence du mode d'initialisation retenu pour les deux molécules sur le signal de simulation sur la période 1990-2013 sera plus particulièrement abordé dans les paragraphes 2.3.3 et 2.3.4 suivants.

2.3.3 Résultats de simulations pour l'isoproturon

Environ 360 occurrences différentes de cultures simulées subissent un traitement à l'isoproturon. La culture recevant les doses les plus importantes sur la zone d'étude est le blé tendre (530 g.ha⁻¹). Les cultures d'orge d'hiver ainsi que, dans une moindre mesure, celles d'orge de printemps sont également traitées avec des doses comprises entre 110 et 500 g.ha⁻¹.

La Figure 22 présente les comparaisons des chroniques calcul-mesures sur certains ouvrages captant l'Éocène supérieur et moyen. La Figure 23 se focalise sur ceux captant l'Éocène inférieur, tandis que la Figure 24 indique les résultats du calage pour des points captant l'ensemble Éocène supérieur/moyen/inférieur.

Pour ces Figure 22 à Figure 24, les figurés ponctuels rouges indiquent les valeurs de limites de quantification recensées à chaque mesure tandis que les verts mentionnent le dosage d'une concentration strictement supérieure à cette limite.



Figure 22 : Comparaisons des concentrations en isoproturon mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'Éocène supérieur et moyen



Figure 23 : Comparaisons des concentrations en isoproturon mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'Éocène inférieur





Figure 24 : Comparaisons des concentrations en isoproturon mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'ensemble Éocène supérieur/moyen/inférieur

D'une façon générale, l'observation des chroniques simulées aux ouvrages permet de constater une certaine cohérence entre les ordres de grandeurs des concentrations simulées et observées. Cependant, il est à noter qu'une majorité de points présente des profils calculés inférieurs aux valeurs référencées dans la base de données, ceci pouvant tout de même constituer un résultat acceptable considérant que la grande majorité des profils observés sont représentatifs des différents paliers limites de quantification (cf. Figure 25) et non de concentrations effectivement présentes dans les eaux prélevées (ces valeurs étant inférieures aux limites de quantification mentionnées).

En effet, une quantification du ratio [nombre de valeurs mesurées strictement supérieures à la limite de quantification / nombre total de mesures] indique que, pour les données relatives à cette molécule, moins de 3 % des valeurs satisfont ce critère (69 mesures sur 3221). À titre de comparaison, une analyse similaire sur les données nitrates indique un ratio largement supérieur à 90 % pour plus de 9/10 des points renseignés. Ainsi, en première approche, la cohérence des simulations ne peut être évaluée qu'en ne considérant le profil mesuré comme borne supérieure des chroniques simulées.



Figure 25 : Évolution temporelle des limites de quantifications recensées pour les mesures en isoproturon d'après la « base Aqui'Brie »

Le zonage associé aux plus fortes concentrations simulées, comprises entre 0,4 et 0,5 μ g.L⁻¹, est très probablement lié à un paramétrage incorrect en lien avec les données descriptives des sols. Une analyse spatiale des flux de sortie du module PeSTICS indiquent des valeurs significativement plus importantes sur une unité cartographique de sol en particulier. Les incertitudes et approximations actuelles en lien, entre autres, avec le paramétrage « sol » des différents modèles utilisés ici (STICS/PeSTICS) sera plus largement repris en conclusion.

Un autre point qu'il convient d'aborder quant à une validité de telles simulations est de déterminer dans quelle mesure le signal simulé associée à la période 1990-2013 est influencé par le mode d'initialisation retenu. Pour ce faire, plusieurs tests « simples » ont été effectués. Cela consiste uniquement à réitérer la précédente méthodologie de simulation - cas pour lequel on note la concentration d'initialisation imposée C_i -pour différentes valeurs imposées en phase d'initialisation.

Trois cas simulés ont ainsi été mis en œuvre avec des concentrations respectivement égales à $C_i/2$, $2C_i$ et $C_i = 0$, ce dernier cas permettant d'évaluer, au niveau du système aquifère, la stricte contribution des apports issus du modèle agronomique.

La Figure 26 présente pour 4 points de mesures localisés en zone majoritairement agricole (ouvrages localisés en Figure 14), l'évolution des chroniques simulées pour les différents scenarii d'initialisation :

- la courbe rouge utilise la condition des Figure 22 à Figure 24 ($C_i = 0.1 \ \mu g.L^{-1}$),
- la courbe bleue illustre les apports issus de PeSTICS ($C_i = 0$),
- les courbes en pointillés illustrant les 2 cas de concentrations supplémentaires ($C_i/2$ et $2C_i$).

Dans le cas de la molécule d'isoproturon, il est intéressant de constater à la fois, une certaine cohérence des concentrations injectées dans l'hydrosystème, calculées à partir du module PeSTICS ainsi que l'atténuation à moyen terme de l'initialisation sur les résultats de simulation.



Figure 26 : Tests d'initialisations réalisés dans le cas des simulations pour l'isoproturon

2.3.4 *Résultats de simulations pour l'atrazine*

Dans notre cas d'étude, l'ensemble du territoire est, sur la base des données d'entrée, marqué par des apports en atrazine réalisés uniquement sur les cultures de maïs grain. De 1990 à 2003, la proportion de SAU constituée par ce type de culture est globalement comprise entre 8 et 10 %, à l'exception de la partie centrale (Brie française et champenoise), où cette proportion est moitié moindre (4,5% environ). Les doses totales apportées sont homogènes par UMA avec deux quantités d'apport différentes recensées (598 et 900 g.ha⁻¹ respectivement sur les périodes 1990-1997 et 1998-2003). Au total, seules 12 occurrences de cultures de maïs simulées sont traitées en atrazine.

La Figure 27 présente les comparaisons des chroniques calcul-mesures sur des ouvrages captant l'ensemble Éocène supérieur, moyen et inférieur. La Figure 28 se focalise sur ceux captant l'Éocène supérieur et moyen, tandis que la Figure 29 indique les résultats du calage pour certains points captant l'Éocène inférieur.

De même que précédemment, les figurés ponctuels rouges indiquent, sur les Figure 27 à Figure 29, les valeurs de limites de quantification recensées à chaque mesure tandis que les verts mentionnent le dosage d'une concentration strictement supérieure à cette limite. Les quelques points gris occasionnels précisent que la limite de quantification associée à la mesure est inconnue.



Figure 27 : Comparaisons des concentrations en atrazine mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'Éocène supérieur, moyen et inférieur



Figure 28 : Comparaisons des concentrations en atrazine mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'Éocène supérieur et l'Éocène moyen



Figure 29 : Comparaisons des concentrations en atrazine mesurées et calculées sur la période 1990-2013 pour des ouvrages captant l'Éocène inférieur

Même s'il semble, de prime abord que les résultats soient partiellement satisfaisants (ordres de grandeurs et évolutions comparables à ceux obtenus dans le cas de l'isoproturon), les tests d'initialisation tendent à montrer que le signal calculé est quasi-exclusivement contraint par l'initialisation.

En effet, la Figure 30 illustre, à ce titre, pour deux des points de mesures présentés dans le cas de l'isoproturon (cf. Figure 26), les évolutions comparées des chroniques calculées selon les mêmes conditions d'initialisation mises en œuvre précédemment. En cohérence avec la Figure 18, les apports issus de la modélisation agronomique sont très faibles (matérialisés par la courbe bleue), comme en témoigne l'utilisation des échelles logarithmiques sur les graphiques (a_2) et (b_2) ci-dessous.



Figure 30 : Tests d'initialisations réalisés dans le cas des simulations pour l'atrazine exemples pour deux points de mesure : 02593X0023-S1 (échelle linéaire (a_1), échelle logarithmique (a_2)) et 02225X0006-F1 (échelle linéaire (b_1) et échelle logarithmique (b_2))

Les décroissances observées au niveau des différents points ne sont ainsi que majoritairement associées à la vidange naturelle de l'aquifère des flux de polluant imposés lors de l'initialisation.

À ce stade, ces résultats obtenus sur l'atrazine soulèvent un certain nombre d'interrogations. En effet, on observe bien que les très faibles flux calculés par PeSTICS ne peuvent permettre de reproduire les fortes et persistantes concentrations mesurées dans les aquifères jusqu'aux périodes récentes. Seule une initialisation forcée et imposée permet de reproduire ces concentrations mesurées.

Plusieurs raisons peuvent être avancées mais ne seront pas traitées dans le cadre de cette étude :

- Les flux sous-racinaires en atrazine calculés par PeSTICS en fonction des doses apportées sont beaucoup trop faibles : problème de formalisme interne, paramètres sol erronés, etc. ?
- Les doses indiquées dans la base de données des pratiques sont trop faibles et ne représentent donc pas la *réalité* du terrain ?
- La culture du maïs grain est-elle la seule concernée par ce produit ? Les quantités importantes retrouvées dans les aquifères tendraient à démontrer que ce n'est peut-être pas le cas car cette culture a été loin d'être majoritaire sur le secteur étudié.
- Pour quelle autre utilisation agronomique l'atrazine aurait-elle été employée ?

Conclusion

Un des bénéfices de la mise en œuvre de ces simulations dans leur ensemble, ainsi que de l'obtention de résultats de tests exploratoires est de mettre en évidence quelques limites rencontrées que l'on se propose de lister ici. Pour chaque aspect évoqué ci-dessous, est proposée une piste d'amélioration qui sera investiguée dans la phase suivante de l'étude (2016-2018).

- Concernant la méthodologie de reconstruction de l'évolution des pratiques phytosanitaires, les analyses réalisées sont satisfaisantes du point de vue de la modélisation car elles fournissent des apports chronologiques (dates d'apports) et quantifiés (doses) de matières actives ordonnés selon 4 périodes différentes. Cependant, la description menée par matière active n'est pas complètement satisfaisante du point de vue agronomique puisqu'elle ne permet pas de travailler sur les objectifs des traitements (herbicides, fongicides), leur cohérence au sein d'un même itinéraire technique (traitements fongicides et herbicides sont-ils corrélés ?), leur cohérence avec d'autres variables de l'itinéraire technique (traitements herbicides et travail du sol, traitements fongicides et fertilisation) et l'évolution du raisonnement des pratiques phytosanitaires au cours du temps. Cette voie d'étude sera envisagée par la suite en vue de l'amélioration des données.
- Cette méthodologie pourrait bénéficier, dans la suite des travaux, de sources complémentaires d'informations afin de décrire les usages des pesticides. La mobilisation de sources de données pour décrire l'évolution des usages des produits phytosanitaires comme celles de la BNVD (Banque Nationale des Ventes des Distributeurs) répertoriant les ventes de produits phytosanitaires depuis 2008 à l'échelle des points de vente (et non des points de distribution) est envisagée. Ces informations pourront être mobilisées en vue de valider les quantités utilisées sur les périodes récentes. En revanche, cette validation sera impossible pour les années antérieures.
- Toujours en termes de données d'entrée, un des facteurs limitant de ces simulations est la donnée disponible concernant le profil en carbone organique des horizons des différents types de sol utilisée par PeSTICS. En effet, face à la quasi-absence de données à disposition et leur collecte impossible dans le temps imparti sur ce volet du projet, le profil de carbone organique a été utilisé de façon homogène pour l'ensemble des UTS de la base sol. Il semble raisonnable de penser que l'acquisition de données spatialisées, si elles existent, permettra d'améliorer de façon significative les simulations, ce paramètre ayant une influence directe sur le module de transfert des pesticides. De plus, précisons que le profil de sol considéré en carbone organique est considéré comme temporellement invariant. Il serait possible, grâce au logiciel de spatialisation, de l'actualiser au cours du temps, à l'issue des simulations en fin de chaque période homogène par exemple, tel que ce fut mis en place pour le stock d'azote organique dans le cas des « simulations nitrates ».
- Le schéma de spatialisation agronomique, tel qu'actuellement conçu implique l'hypothèse simplificatrice d'une répartition homogène des cultures d'une UMA donnée sur tous les types de sols rencontrés au sein de cette même UMA. De même, le mode d'élaboration actuel des données de description des systèmes de cultures (et donc des apports en pesticides) implique l'hypothèse d'une répartition homogène des assolements au sein de cette unité. Or, des croisements réalisés par l'INRA-SAD Aster entre les données issues du Référentiel Régional Pédologique (RRP base de données sol à l'échelle départementale à l'échelle 1/250 000^{ème}), le Registre Parcellaire Graphique (RPG) et la BD ALTI[©] (au pas de 75 m) ont mis évidence une différenciation spatiale d'occupation du sol selon les types de sols et la topographie. Cette différenciation des occupations du sol reflète une hétérogénéité de localisation des successions de cultures au sein d'une UMA qu'il faudra intégrer de manière différenciée dans les modélisations futures. S'ajouteront à ce point, des études complémentaires afin d'intégrer au mieux au code de spatialisation les permutations cycliques des têtes de rotations.
- Les types de sols pouvant avoir un impact significatif sur les flux lessivés (nitrates et pesticides), il serait préférable de pouvoir tenir compte de leurs caractéristiques physico-chimiques à partir de données plus finement spatialisées que celles de la BDGSF ici utilisée, dans l'optique d'affiner localement les résultats. Les données cartographiques nécessaires à l'échelle du 1/250 000^{ème} étant d'ores et déjà disponibles à pour le département de la Seine-et-Marne, ces travaux d'associations sol/cultures pourront être réalisés dans la suivante phase de l'étude sur ce secteur.

De fait, la comparaison des résultats alors obtenus (avec localisation précise des successions de cultures par rapport aux types de sols) avec ceux présentés dans ce document permettra d'évaluer dans quelle mesure une spatialisation fine des systèmes de cultures améliore la qualité des résultats de simulation.

• Enfin, il est à noter que cette phase de simulation exploratoire a été réalisée en parallèle de travaux sur le modèle hydrogéologique (calage et exploitation) lesquels se sont jusqu'ici essentiellement focalisés sur la partie Ouest du modèle (fosse de Melun et basse vallée de l'Yerres). En conséquence, le calage hydrodynamique n'était alors pas encore finalisé au début de l'étude sur la zone ici sélectionnée. Ces travaux, d'ores et déjà prévus, constitueront une piste supplémentaire pouvant contribuer à l'amélioration des résultats.