

RAPPORT D'ÉTUDE  
DRC-14-141968-00696A

Mars 2014

# MODUL'ERS

Guide de l'utilisateur

INERIS

maîtriser le risque |  
pour un développement durable |

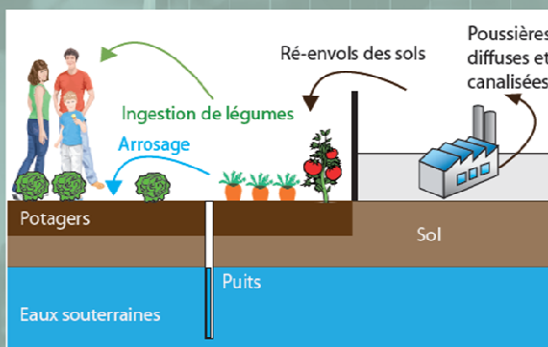




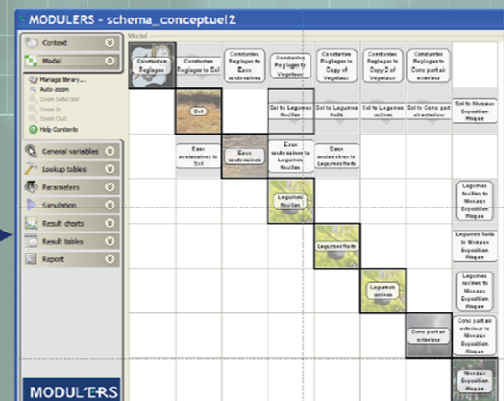
# MODUL'ERS

## Guide de l'utilisateur

### Modélisation des risques sanitaires ICPE et sites et sols pollués



MODUL'ERS



environnement - santé





## PRÉAMBULE


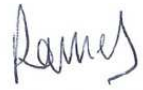
Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

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

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

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

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

	Rédaction	Vérification	Approbation
<b>NOM</b>	Roseline BONNARD	Muriel ISMERT	Martine RAMEL
<b>Qualité</b>	Ingénieur de l'unité Impact sanitaire et expositions	Responsable de l'unité Impact sanitaire et expositions	Responsable du pôle Risques et technologies durables
<b>Visa</b>			

## TABLE DES MATIÈRES

<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>9</b>
<b>2. MATERIEL ET INSTALLATION .....</b>	<b>10</b>
<b>2.1 MATERIEL .....</b>	<b>10</b>
<b>2.2 INSTALLATION.....</b>	<b>10</b>
<b>2.3 MISE A JOUR DES VERSIONS.....</b>	<b>10</b>
<b>3. PRESENTATION GENERALE DE MODUL'ERS.....</b>	<b>12</b>
<b>3.1 QU'EST-CE QUE MODUL'ERS ? .....</b>	<b>12</b>
<b>3.2 QUELLES SONT LES SPECIFICITES DE MODUL'ERS ? .....</b>	<b>13</b>
<b>3.3 PRESENTATION DE L'INTERFACE .....</b>	<b>15</b>
<b>3.4 PRESENTATION DE LA BIBLIOTHEQUE DE MODULES .....</b>	<b>18</b>
<b>4. TUTORIELS.....</b>	<b>23</b>
<b>4.1 EXERCICE 1 .....</b>	<b>23</b>
<b>4.2 EXERCICE 2 .....</b>	<b>36</b>
<b>4.3 EXERCICE 3 .....</b>	<b>47</b>
<b>4.4 EXERCICE 4 .....</b>	<b>54</b>
<b>4.5 SCHEMA DE PRINCIPE POUR L'UTILISATION DE MODUL'ERS .....</b>	<b>59</b>
<b>5. INFORMATIONS COMPLEMENTAIRES .....</b>	<b>61</b>
<b>5.1 PRESENTATION DETAILLEE DE L'INTERFACE .....</b>	<b>61</b>
<b>5.2 RENSEIGNER LES DONNEES D'ENTREE .....</b>	<b>75</b>
<b>5.3 LES CONNEXIONS ENTRE MODULES ET LES DONNEES         ENTREE/SORTIE DE CHAQUE MODULE .....</b>	<b>78</b>
<b>5.4 LA SYNTAXE DES EXPRESSIONS DE CALCUL.....</b>	<b>80</b>
<b>5.5 MODE OPERATOIRE POUR REDEMARRER UNE SIMULATION         INTERROMPUE SUR UN MESSAGE D'ERREUR .....</b>	<b>82</b>



## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Contenu de la bibliothèque .....	18
Tableau 2 : Etapes d'insertion des modules.....	24
Tableau 3 : Etapes de connexion des modules.....	27
Tableau 4 : Etapes de renseignement des données d'entrée .....	30
Tableau 5 : Etapes de définition des conditions de la simulation et lancement de la simulation .....	33
Tableau 6 : Etapes de formatage des tableaux et des graphes de résultats.....	34
Tableau 7 : Exercice 2 - Concentrations dans les sols au temps $t=0$ .....	36
Tableau 8 : Exercice 2 - Données à utiliser pour le sol .....	36
Tableau 9 : Exercice 2 - Paramètres physico-chimiques de l'indénopyrène .....	36
Tableau 10 : Exercice 2 - Paramètres physico-chimiques du plomb.....	37
Tableau 11 : Etapes d'insertion et de connexion des modules.....	38
Tableau 12 : Etapes de définition des données d'entrée en utilisant des modules de données d'entrée .....	40
Tableau 13 : Etapes de définition des données d'entrée en utilisant les fonctions Export to Excel et Import from Excel.....	44
Tableau 14 : Dépôts totaux au sol de 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine en 10 points de la zone d'étude .....	47
Tableau 15 : Valeurs des paramètres d'exposition à modifier .....	48
Tableau 16 : Fichier Excel à importer pour modifier les paramètres d'exposition .....	49
Tableau 17 : Etapes de réalisation d'une simulation multiple .....	50
Tableau 18 : Etapes pour la déclinaison d'un scénario en x points d'une zone d'étude caractérisés par des dépôts différents.....	53
Tableau 19 : Etapes de préparation de la simulation probabiliste .....	56
Tableau 20 : Etapes d'édition du tableau de résultat.....	58

## LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Interface de MODUL'ERS correspondant au panneau de commandes Context.....	15
Figure 2 : Interface de MODUL'ERS correspondant au panneau de commandes Model .....	16
Figure 3 : Schéma conceptuel du cas d'étude du tutoriel 1 .....	23
Figure 4 : Matrice du modèle du tutoriel 1 (étapes d'insertion des modules).....	25
Figure 5 : Paramétrage du connecteur Sol to Niveaux_Exposition_Risque .....	28
Figure 6: Fenêtre d'informations relative au connecteur Sol to Niveaux_Exposition_Risque .....	28
Figure 7 : Matrice du modèle de l'exercice 1 (étapes de connexion des modules).....	29
Figure 8 : Matrice finale du modèle de l'exercice 1 .....	32
Figure 9 : Tableau de résultats formaté (avec l'excès de risque cancérigène et la dose d'exposition chronique de la classe d'âge la plus exposée).....	35
Figure 10 : Schéma conceptuel du cas d'étude du tutoriel 2 .....	37
Figure 11 : Matrice du modèle de l'exercice 2 .....	39
Figure 12 : Matrice du modèle du tutoriel 2 (méthode 1) .....	43
Figure 13 : Fenêtre Import des données du module Sol_superficiel vers le module Tubercules .....	46
Figure 14 : Fenêtre de définition des paramètres à tester dans la simulation multiple .....	51
Figure 15 : Tableau des niveaux de risque à 30 ans pour 3 quantités de sol différentes ingérées par les enfants de 1 à 2 ans .....	52
Figure 16 : Graphique du quotient de danger des enfants âgés de 1 à 2 ans pour 3 quantités de sol différentes ingérées par jour .....	52
Figure 17 : Illustration du tableau de résultats obtenus .....	59
Figure 18 : Schéma de principe pour l'utilisation de MODUL'ERS .....	60
Figure 19 : Exemple d'un extrait de rapport mettant en évidence les modifications de valeurs apportées au paramètre logKd_E .....	78
Figure 20 : Illustration d'une connexion multiple vers la même donnée d'entrée.....	79
Figure 21 : Fenêtre d'informations de la donnée test_porosite_sol dans le panneau Sol .....	83



## VUE D'ENSEMBLE

L'évaluation des risques sanitaires liés à l'aménagement d'un site pollué ou à l'implantation d'une installation industrielle nécessite de modéliser les niveaux d'exposition de la population à partir des différentes sources/milieus de l'environnement, via plusieurs modes de transfert et voies d'administration des polluants.

La qualité des études réalisées dépend notamment de la pertinence de l'outil de modélisation et des paramètres d'entrée utilisés par rapport au cas d'étude. Le niveau de risque estimé peut varier d'un ou plusieurs ordres de grandeur selon les hypothèses utilisées, comme l'ont montré différentes études d'intercomparaison réalisées par l'INERIS. Ces divergences engendrent un manque de cohérence entre les études et une perte de crédibilité auprès des différents acteurs et du public.

En vue d'améliorer les pratiques et la transparence des estimations réalisées dans ces études, l'INERIS, dans le cadre de ses missions d'appui pour le ministère chargé de l'environnement, met à disposition et diffuse des outils de modélisation.

Une plateforme de modélisation et de simulation nommée MODUL'ERS a été créée. Cet outil permet de faire le lien entre l'étape de définition du schéma conceptuel et celle de l'évaluation prospective des expositions et des risques, en donnant aux utilisateurs la possibilité de construire un modèle d'exposition adapté au schéma conceptuel défini pour le site étudié, à partir d'une bibliothèque de modules prédéfinis.

MODUL'ERS permet d'estimer les concentrations dans les milieux, les niveaux d'exposition et les niveaux de risque en fonction du temps à partir des équations décrites dans le manuel intitulé « Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle » et référencé INERIS DRC-08-94882-16675B<sup>1</sup>. Ce document, relu par plusieurs experts nationaux et internationaux, présente les équations utilisées à l'INERIS pour modéliser les concentrations dans les milieux, les doses d'exposition et les niveaux de risques attendus, en s'appliquant à tracer l'origine de ces équations, les hypothèses sur lesquelles elles reposent et leurs limites d'utilisation.

MODUL'ERS a été développé avec un double objectif de flexibilité et de transparence. Il permet à l'utilisateur de choisir les phénomènes de transfert qu'il souhaite prendre en compte, offre pour différents mécanismes de transfert le choix entre plusieurs modèles conceptuels et permet à tous les niveaux d'utiliser des résultats de mesure à la place de ceux de la modélisation. L'ensemble des équations, des données d'entrée et des résultats intermédiaires sont facilement accessibles et les modifications apportées par l'utilisateur aux valeurs prédéfinies pour les données d'entrée sont mises en évidence.

---

<sup>1</sup> Document accessible sur internet : <http://www.ineris.fr/centredoc/quations-modifrbn-relecture6-couverture.pdf>

MODUL'ERS permet aussi de conduire une analyse des incertitudes et une analyse de sensibilité des résultats.

Le présent document constitue le mode d'emploi de ce logiciel.



## **1. INTRODUCTION**

L'évaluation des risques sanitaires liés à l'aménagement d'un site pollué ou à l'implantation d'une installation industrielle nécessite de modéliser les niveaux d'exposition de la population à partir des différentes sources/milieus de l'environnement, via plusieurs modes de transfert et voies d'administration des polluants.

Les principes de spécificité et de proportionnalité de ces évaluations de risque supposent d'adapter la modélisation au contexte des sites à analyser. Or, les outils de modélisation existants s'avèrent souvent inadaptés pour représenter de manière spécifique les situations d'exposition à étudier. Un certain nombre de travaux (analyses de modèles, études d'intercomparaison de modèles, travaux sur les coefficients de transfert) ont aussi montré des divergences importantes de résultats obtenues pour des cas d'études identiques, à partir de modèles et d'hypothèses de départ différents. Ces divergences engendrent un manque de cohérence et une perte de crédibilité de l'ERS auprès des différents acteurs et du public.

En réponse à ces difficultés et à la demande du Ministère chargé de l'Environnement, l'INERIS a produit un nouvel outil logiciel, en se focalisant sur deux principes : la flexibilité et la transparence. Cet outil intitulé MODUL'ERS, permet de construire des modèles multimédia adaptés pour évaluer les concentrations dans les milieux, les niveaux d'exposition et de risques dans le cadre des Analyses de Risques Résiduels réalisées pour un site pollué et des évaluations de risque liés à des installations industrielles.

Le présent document constitue le mode d'emploi de MODUL'ERS. Néanmoins, compte-tenu des spécificités de ce logiciel par rapport à ceux existants déjà dans le domaine de l'évaluation des risques, l'INERIS a mis en place une formation ad'hoc et considère son suivi ou l'accompagnement intra-entreprise par une personne ayant suivi la formation comme un pré-requis pour utiliser le logiciel.

La section 2 de ce document explique le mode d'installation du logiciel.

La section 3 constitue une présentation générale de l'outil avec une présentation des spécificités de MODUL'ERS, ainsi qu'une description de l'interface et de la bibliothèque de modules.

La section 4 est constituée de plusieurs tutoriels montrant comment construire un modèle et effectuer des simulations. Ils illustrent différentes fonctionnalités de calcul de MODUL'ERS des plus simples au plus évoluées.

La dernière partie du document présente de manière plus détaillée les différents éléments de l'outil (liste des commandes, valeurs attribuées aux données d'entrée, connexions entre modules, syntaxe des équations...).

Enfin, les annexes fournissent un complément d'information sur les modèles de calcul inclus dans MODUL'ERS, listent les données connectables en entrée et en sortie de chaque module de calcul et décrivent les éléments de validation mis en place lors du développement de MODUL'ERS.

## **2. MATERIEL ET INSTALLATION**

### **2.1 MATERIEL**

MODUL'ERS fonctionne sous PC avec un système d'exploitation Microsoft Windows.

Il a été testé avec un ordinateur équipé d'un processeur Intel Core Duo, 32 bits avec 1,86 Go de mémoire vive, Windows XP Service Pack et Excel 2007. Il fonctionne également avec un processeur à 64 bits et Windows 7. En revanche, le fonctionnement sous Windows 8 n'a pas été testé.

MODUL'ERS est fourni sur une clé USB sous la forme d'un fichier zippé, lors de la formation spécifique mise en place par l'INERIS.

### **2.2 INSTALLATION**

Pour installer MODUL'ERS,

- 1) copier le fichier sur l'ordinateur
- 2) extraire le fichier sur le disque C ou dans un sous dossier du disque C.

Une fois le processus terminé, deux dossiers MODUL'ERS ont été créés :

- le premier à l'emplacement choisi pour l'extraction,
- le second dans le dossier Mes documents. Ce dossier MODUL'ERS contient la documentation disponible en lien avec le logiciel.

Pour démarrer MODUL'ERS, ouvrir le premier dossier et double-cliquer sur *start.bat*. La première fois que le logiciel est lancé, plusieurs minutes sont nécessaires pour son ouverture.

Remarque : Un raccourci peut être créé sur le bureau pour démarrer plus facilement MODUL'ERS. Pour cela, faire un clic droit sur *start.bat*, sélectionner *créer un raccourci*, puis faire un clic droit sur le raccourci et renommer le « MODUL'ERS ». Enfin, glisser ce raccourci sur le bureau.

### **2.3 MISE A JOUR DES VERSIONS**

A l'avenir, l'INERIS est susceptible de fournir des mises à jour du logiciel. Il existe deux types de mise à jour possibles :

- Une mise à jour complète : mise à jour de la plateforme de modélisation/simulation (fonctionnalités du logiciel, interface,...) et éventuellement de la bibliothèque de modules (contenu équationnel et/ou valeurs de données d'entrée) ;
- Une mise à jour partielle correspondant à une modification de la bibliothèque de modules.

Le premier cas nécessite une réinstallation complète du logiciel et pour cela, la version initiale doit être préalablement désinstallée. Cette désinstallation consiste à supprimer les deux dossiers MODUL'ERS suivants :

- celui extrait sous C : à partir du fichier zippé initial (cf. ci-dessus),

- celui créé par MODUL'ERS lors de la première utilisation est situé dans C:\Documents and Settings\Nom\_utilisateur\Application Data ou C:\Documents and Settings\Nom\_utilisateur\Application Data\Roaming.

La nouvelle version peut alors être installée selon la démarche décrite dans la section 2.2.

Dans le second cas, il suffit de remplacer les fichiers modele\_base.ine et/ou librairie.inl contenus dans le dossier C:\Documents and Settings\Nom\_utilisateur\Application Data\MODULERS\lib ou C:\Documents and Settings\Nom\_utilisateur\Application Data\Roaming\MODULERS\lib par les nouvelles versions de fichiers fournies.



### **3. PRESENTATION GENERALE DE MODUL'ERS**

#### **3.1 QU'EST-CE QUE MODUL'ERS ?**

MODUL'ERS a été produit par l'INERIS dans le cadre des programmes d'appui de l'institut pour le Ministère de l'Ecologie, du Développement Durable et de l'Energie (MEDDE).

**MODUL'ERS est un outil logiciel pour la réalisation des évaluations prospectives des risques sanitaires effectuées dans le cadre de l'analyse des effets sur la santé des Installations Classées Pour l'Environnement (ICPE) et pour la réalisation des Analyses de Risques Résiduels (ARR) des sites et sols pollués. Il permet d'estimer les concentrations dans les milieux, les niveaux d'exposition et des niveaux de risque en fonction du temps.**

Il consiste en une plateforme de modélisation et de simulation et en une bibliothèque de modules, basée sur le manuel référencé DRC-08—94882-16675B et intitulé « Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle », disponible dans le dossier de documentation créé à l'installation (dans Mes documents\MODULERS\Documents\Deliverables).

**MODUL'ERS permet de :**

- **construire des modèles multimédia adaptés, en agencant les modules prédéfinis de la bibliothèque, selon le schéma conceptuel du site étudié ;**
- **mener des simulations déterministes, probabilistes et des analyses de sensibilité sur les résultats.**

Cet outil a été développé à partir de la plateforme de modélisation et simulation ECOLEGO, logiciel de la société Facilia. MODUL'ERS est en fait un applicatif d'ECOLEGO, dont les fonctionnalités ont été augmentées et adaptées, avec le concours de Facilia, aux besoins des études menées dans le cadre de la politique de gestion des Installations Classées Pour l'Environnement (ICPE) et des sites et sols pollués.

### 3.2 QUELLES SONT LES SPECIFICITES DE MODUL'ERS ?

MODUL'ERS n'est pas un logiciel classique, où l'utilisateur définit les valeurs des données d'entrée d'un modèle prédéfini, afin d'obtenir un niveau d'exposition et de risque.

**MODUL'ERS est un outil permettant de faire concrètement le lien entre le schéma conceptuel défini pour le site d'étude et l'évaluation prospective des expositions et des risques sanitaires**, puisque la première étape consiste pour l'utilisateur à construire son modèle sur la base du schéma conceptuel.

MODUL'ERS se veut donc avant tout **un outil flexible, permettant de construire un modèle adapté au cas d'étude**, en terme de mécanismes de transfert à prendre en compte (principe de spécificité) et en terme de précision requise et d'informations disponibles (principe de proportionnalité).

Ainsi, pour chaque substance étudiée, l'utilisateur peut choisir :

- **de prendre en compte ou non un mécanisme de transfert pour modéliser la concentration attendue dans un milieu.** Par exemple, il peut tenir compte de la perte de polluant par le sol lié au ruissellement pour calculer la concentration dans le sol et de l'apport équivalent vers les eaux superficielles pour calculer la concentration dans les eaux superficielles. Mais ces deux aspects « apport » et « perte », liés au phénomène de ruissellement peuvent être découplés, et l'utilisateur peut, dans une approche conservatoire, ne considérer que le phénomène d'apport pour éviter de sous-estimer la concentration attendue dans le sol ;
- **entre différentes approches de modélisation, pour représenter certains mécanismes de transfert ou estimer des coefficients de transfert entre différentes matrices** (exemples : modèle Volasoil ou Johnson et Ettinger pour le transfert de polluant du sol vers l'air intérieur, approche dynamique ou stationnaire pour le calcul des concentrations dans les matrices animales...) ;
- **entre l'utilisation de données mesurées pour les concentrations dans les milieux et les niveaux d'exposition ou le recours à la modélisation.** Si, par exemple, l'utilisateur voulant évaluer l'exposition aux polychlorodibenzodioxines (PCDD) et aux polychlorobiphényles (PCB) par ingestion d'œufs dispose de données de mesure uniquement pour le premier groupe de substances, il pourra entrer ses données pour des dioxines et estimer les concentrations de PCB dans les œufs par modélisation au cours d'une même simulation.

**MODUL'ERS vise aussi à améliorer la transparence des études.**

Les éléments contribuant à cet objectif sont :

- **la fourniture d'un manuel présentant les équations sur lesquelles MODUL'ERS est basé. Ce document, revu par des experts nationaux et internationaux, présente les hypothèses et les limites des équations utilisées.** Ce manuel et le rapport reprenant les commentaires et les réponses apportées par l'INERIS sont accessibles dans la documentation jointe au logiciel ;

- **la possibilité de visualiser la manière dont les équations ont été implémentées dans le logiciel**, grâce à une syntaxe simple du type de celle utilisée sous Excel (cf. section 5.4). La navigation par lien hypertexte permet ainsi de retrouver facilement l'ensemble des équations utilisées pour estimer une grandeur donnée ;
- **la mise en évidence des données d'entrée modifiées par l'utilisateur dans son étude par rapport aux valeurs prédéfinies**. Cette mise en évidence se traduit, à l'écran, par l'apparition des valeurs modifiées en caractères gras et, dans le rapport éditables, par la fourniture des valeurs prédéfinies dans l'outil, à côté de celles retenues par l'utilisateur.
- **l'accès aux valeurs, intervalles de valeurs ou/et distributions statistiques renseignant les données d'entrée, la fourniture au sein du logiciel des références utilisées pour définir ces valeurs par défaut et le statut de validation accordée à ces valeurs**.

Le travail de collecte, de vérification et de sélection de valeurs, intervalles de valeurs ou/et distributions statistiques pour chaque donnée d'entrée est un travail très consommateur de temps, mais important au vu de la sensibilité des modèles d'exposition à un certain nombre de données d'entrée. Dans un premier temps, ce statut de validation vise à qualifier le niveau d'analyse effectuée par l'INERIS pour renseigner la donnée d'entrée considérée, et ainsi aider l'utilisateur, ayant réalisé une analyse de sensibilité, à identifier les données d'entrée pour lesquelles une estimation plus fine est possible. In fine, cela permettra à l'utilisateur d'améliorer la qualité de son étude en réduisant les incertitudes entourant le résultat.

A terme, l'objectif est d'aller plus loin en fournissant des rapports spécifiques pour présenter les sources consultées de manière plus détaillée, les données collectées et leur contexte d'obtention, ainsi que les raisons ayant orienté la sélection de valeurs pour chaque donnée d'entrée du modèle. Ce travail a déjà été réalisé pour les paramètres d'exposition relatifs aux animaux. Le rapport correspondant est accessible dans la documentation annexée au logiciel<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup> Chemin d'accès Mes documents\MODULERS\Documents\Deliverables\Donnes\_entrees

### 3.3 PRESENTATION DE L'INTERFACE

L'interface de MODUL'ERS présente à gauche de l'écran une colonne regroupant neuf petits panneaux de commandes, qui s'ouvrent lorsque l'on clique dessus. Sur le reste de l'écran, au fil des manipulations apparaissent les éléments manipulés et des informations relatives à ces éléments.

Une présentation succincte des panneaux de commandes et de leurs principales fonctions est donnée ci-dessous. Une présentation exhaustive des commandes et des informations affichées est fournie en section 5.1.

Le panneau de commandes **Context** (cf. Figure 1) permet de créer un nouveau modèle, d'ouvrir un modèle précédemment enregistré, de sélectionner les substances à prendre en compte parmi celles prédéfinies et d'en créer de nouvelles. A partir de ce menu, l'utilisateur peut également accéder à un glossaire (fichier Excel) recensant toutes les grandeurs utilisées dans tous les modules de la bibliothèque.

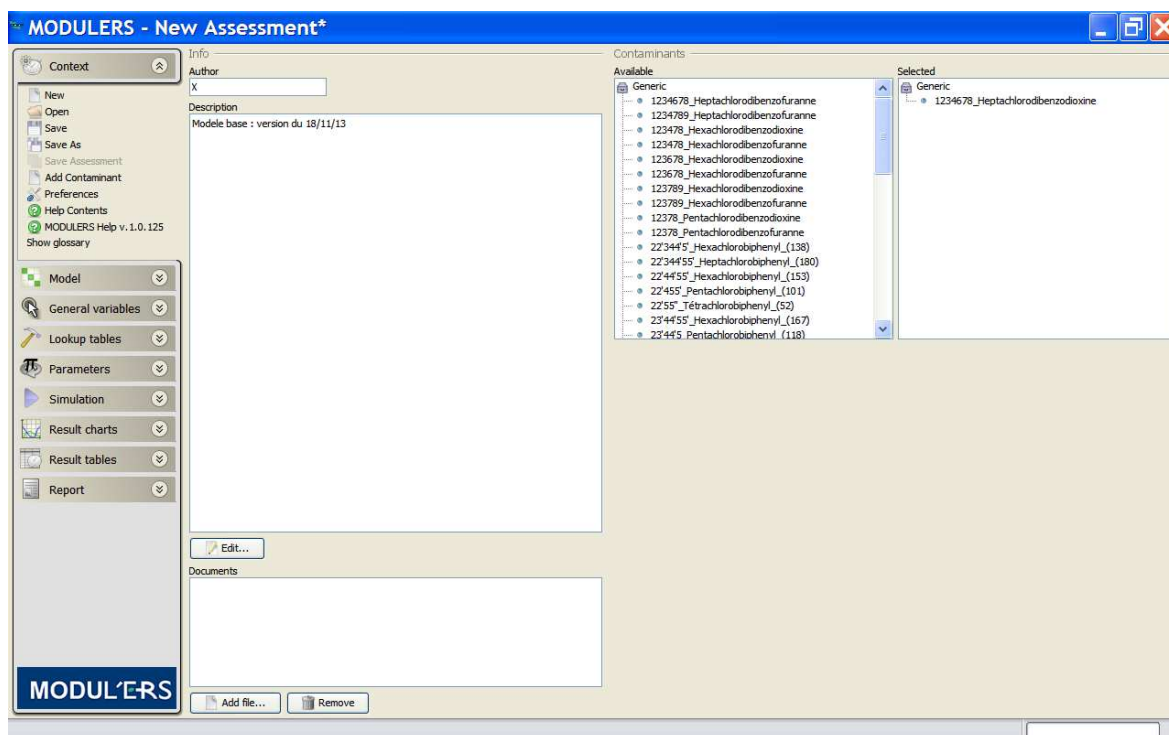


Figure 1 : Interface de MODUL'ERS correspondant au panneau de commandes *Context*

A partir du panneau **Model** (cf. Figure 2), l'utilisateur construit son modèle en allant chercher les modules nécessaires dans la bibliothèque de modules.

**Le modèle se présente sous forme de matrice.** Lors de la création d'un modèle, un module nommé *Constantes\_Reglages* est placé sur la première case de la matrice. Il s'agit d'un module contenant des données utilisées par tous les autres modules. **Les modules suivants, téléchargés de la bibliothèque par l'utilisateur, sont placés sur la diagonale de la matrice. Sur les autres cases, des connexions entre modules peuvent être créées. Elles se lisent dans le sens des aiguilles d'une montre.** Ainsi, dans la figure suivante, le connecteur situé entre le module *Sol* et le module *Fruits* correspond à une connexion du sol vers le



fruit (par exemple, prise en compte de la concentration calculée dans le sol pour estimer le transfert de polluant vers le fruit par prélèvement racinaire). Le connecteur entre le module *Eaux souterraines* et le module *Sol* correspond à une connexion des eaux souterraines vers le sol (par exemple, prise en compte de la concentration de polluant dans les eaux pour estimer le transfert de polluants vers le sol *via* l'irrigation).

La colonne droite de l'écran donne des informations sur la case sélectionnée dans la matrice. Lorsqu'un module de la matrice est sélectionné, un descriptif du module apparaît dans la colonne de droite, ainsi que l'ensemble des éléments utilisés. Ces éléments correspondent à des liens hypertextes : en cliquant dessus, apparaît l'ensemble des informations relatives à ces éléments, y compris l'expression mathématique et les données d'entrée de cette expression.

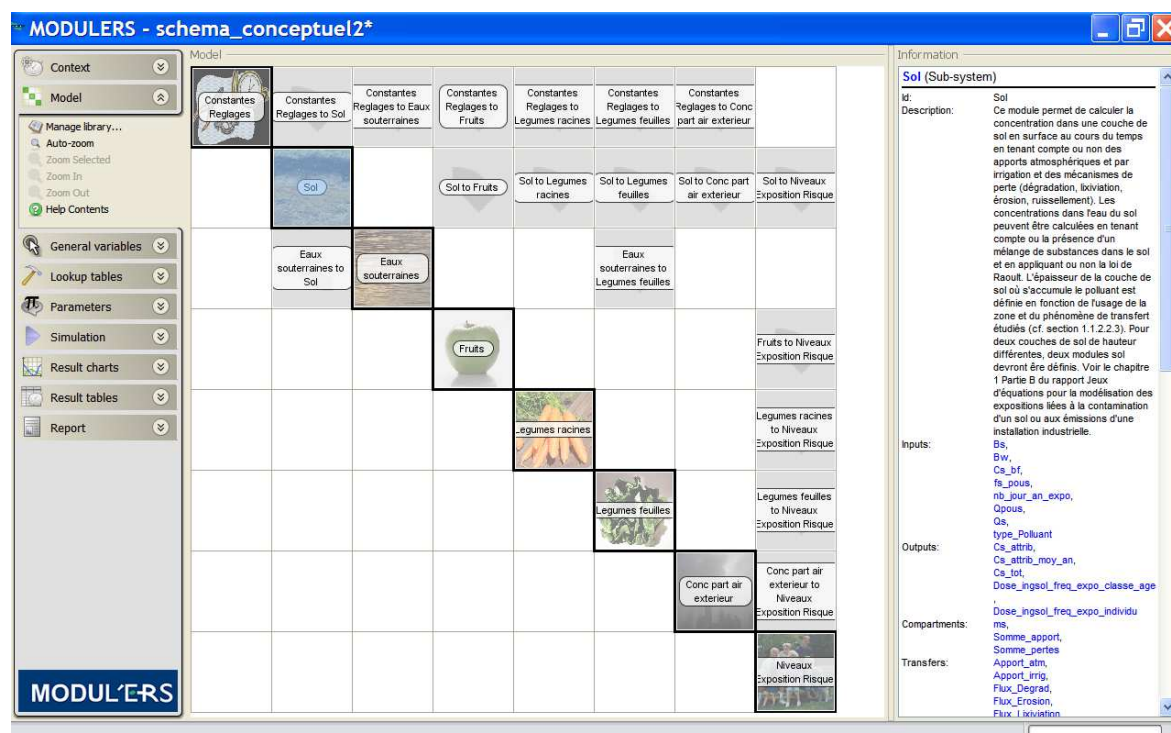


Figure 2 : Interface de MODUL'ERS correspondant au panneau de commandes *Model*

Les trois panneaux de commande suivants correspondent à **trois types de données d'entrée différents** :

- les **General variables**, permettant à l'utilisateur de choisir entre **différentes options d'estimation ou de calcul** (exemple : mode de définition de la concentration dans le sol : valeur entrée par l'utilisateur ou valeur calculée par MODUL'ERS) ;
- les **Lookup tables**, qui correspondent à **des données variables dans le temps**. L'utilisateur peut définir la grandeur à différentes dates et indiquer le mode d'interpolation entre ces dates (cf. détails en section 5.1) ;
- les **Parameters**, qui correspondent aux **données d'entrée constantes dans le temps**. L'utilisateur peut attribuer à ces données, une valeur, un ensemble de différentes valeurs, pour faire exécuter par MODUL'ERS, une simulation avec

chacune de ces valeurs, ou bien une distribution statistique utilisable avec une simulation de type probabiliste.

Lors de la sélection de l'un de ces trois panneaux de commande, la liste des données d'entrée du type correspondant apparaît. Sur le reste de l'écran, toutes les informations relatives à l'élément sélectionné dans cette liste sont fournies (cf. détails en section 5.1).

Le panneau **Simulation** permet de paramétrer une simulation (définition du type de simulation : **ponctuelle, probabiliste ou simulation multiple**, définition de la date de début et de fin de simulation,...) et de la lancer.

Les deux panneaux de commande : **Result charts** et **Result tables** permettent d'accéder aux résultats, le premier sous forme de **graphes**, le second sous forme de **tableaux**. Différents types de graphes et tableaux sont disponibles (données de sortie en fonction du temps, données statistiques,...).

Enfin, le dernier panneau de commandes **Report** permet de paramétrer, d'éditer et d'imprimer le **rapport de modélisation**.

### 3.4 PRESENTATION DE LA BIBLIOTHEQUE DE MODULES

**La bibliothèque de modules** à partir de laquelle les modèles sont construits **comprend des modules de données d'entrée et des modules de calcul.**

Tableau 1 : Contenu de la bibliothèque

Modules de calcul	Modules de données d'entrée
<ul style="list-style-type: none"><li>• Sol</li><li>• Eaux_superficielles</li><li>• Eaux_souterraines</li><li>• Conc_gaz_air_exterieur</li><li>• Conc_gaz_air_interieur_Volasoil</li><li>• Conc_gaz_air_interieur_JE</li><li>• Conc_part_air_exterieur</li><li>• Conc_part_air_interieur</li><li>• Dossier Vegetaux contenant :<ul style="list-style-type: none"><li>- un module Nouveau_vegetal</li><li>- huit déclinaisons différentes</li></ul></li><li>• Dossier Animaux_terrestres contenant :<ul style="list-style-type: none"><li>- un module Nouvel_animal</li><li>- cinq déclinaisons différentes</li></ul></li><li>• Animaux_aquatiques</li><li>• Niveaux_Exposition_Risque</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Par_Subst</li><li>▪ Par_Expo</li><li>▪ Par_Sol</li><li>▪ Par_Envir</li><li>▪ Par_Emission_Air</li></ul>

Comme indiqué dans le tableau ci-dessus, le dossier « Vegetaux » comprend plusieurs modules construits de manière identique, mais paramétrés de façon différente, selon le type de végétal à considérer. Si l'utilisateur veut prendre en compte, dans son modèle, un type de végétal différent de ceux prédéfinis, il peut utiliser le module *Nouveau\_vegetal* et le paramétrer de manière spécifique.

De même, le dossier « Animaux\_terrestres » comprend un module type nommé *Nouvel\_animal* pouvant être paramétré par l'utilisateur et cinq déclinaisons correspondant à des animaux d'élevage différents.

#### 3.4.1 LES MODULES DE CALCUL

Chaque module de calcul, à l'exception du module *Niveaux\_Exposition\_Risque*, correspond à un milieu et **permet de calculer la concentration de polluant dans ce milieu** (concentration attribuable à la source (ou aux) sources étudiée(s) et concentration totale, intégrant le bruit de fond) et **le niveau d'exposition correspondant pour les cibles humaines en fonction du temps. Les niveaux**

d'exposition sont calculés par classe d'âge en fonction du temps<sup>3</sup> et pour un profil d'individus dont l'utilisateur définit l'âge en début d'exposition et la date de début d'exposition<sup>4</sup>.

**Les fonctions de chaque module sont décrites dans le logiciel.** Pour savoir ce que chaque module permet de calculer, il est conseillé de lire sa description dans la fenêtre *Information*, en cliquant une fois sur sa représentation dans la matrice. Comme indiqué précédemment toutes les équations sont accessibles et l'utilisateur peut également se reporter au document « Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle ».

Les modalités de calcul des concentrations par chacun des modules sont résumées ci-dessous et les termes sources de pollution pouvant être utilisés sont listés.

- Le module **Sol** sert au calcul de la concentration dans une couche de sol en surface en tenant compte ou non des apports atmosphériques, des apports par irrigation et des mécanismes de perte (dégradation, lixiviation, érosion, ruissellement).

Expression possible du terme source de pollution : dépôts atmosphériques, concentration dans l'eau.

- Le module **Nouveau\_vegetal** permet de calculer les concentrations dans les végétaux liées aux dépôts atmosphériques directs, à l'absorption gazeuse (polluants organiques), aux dépôts de particules du sol remises en suspension à partir du sol de surface, à l'irrigation par aspersion, au prélèvement direct à partir du sol racinaire. Les concentrations sont recalculées chaque année et données au moment de la récolte et de récolte en récolte.

Expression possible du terme source de pollution : dépôts atmosphériques, concentration dans l'eau, concentration dans l'air, concentration dans le sol.

- Le module **Eaux\_superficielles** donne les concentrations dans les eaux superficielles et les sédiments à l'état stationnaire. La concentration dans les eaux peut être calculée au point x en aval d'un rejet ponctuel (approche applicable à un cours d'eau) ou comme une concentration homogène dans un volume d'eau *Vol\_e\_sup* (approche applicable notamment à une étendue d'eau). Ce calcul peut être fait en tenant compte de rejets diffus (apports atmosphériques, par ruissellement sur les zones imperméables, par ruissellement sur les zones perméables, par érosion) et des pertes par dégradation, volatilisation et sédimentation.

Expression possible du terme source de pollution : dépôts atmosphériques, concentration dans le sol, concentration dans le cours d'eau au point  $x=0$ .

---

<sup>3</sup> Pour une simulation sur 30 années, les niveaux d'exposition calculés par classe d'âge correspondent au cours du temps à des individus différents. Ainsi, la classe d'âge des enfants de 1 à 3 ans correspond à des individus différents à la date  $t=0$  et à  $t=30$ .

<sup>4</sup> Les niveaux d'exposition calculés pour un profil d'individus durant une simulation sur 30 ans se rapportent aux mêmes individus durant toute la simulation. Les valeurs des paramètres d'exposition de ces individus évoluent en fonction de leur âge, qui lui-même dépend de l'âge défini par l'utilisateur en début d'exposition et du temps  $t$ .



- Le module **Eaux\_souterraines** donne la concentration de polluant en phase dissoute au point de coordonnées x, y, z à l'instant t, à partir de la solution de Domenico, pour une source surfacique de polluant dans la zone saturée, perpendiculaire à l'écoulement et de concentration constante. Le module permet également de calculer cette concentration à partir d'une concentration constante dans le sol au bas de la zone insaturée.

Expression possible du terme source de pollution : concentration dans le sol en bas de la zone insaturée, concentration dans la nappe au point  $x=0$ .

- Le module **Animaux\_aquatiques** permet de calculer les concentrations dans l'animal selon une approche stationnaire ou dynamique à partir de la concentration dans le milieu d'exposition. Dans le dernier cas, la concentration dans le tissu animal est estimée pour un animal en fin de vie.

Expression possible du terme source de pollution : concentration dans l'eau, concentration dans les sédiments.

- Le module **Nouvel\_animal** donne les concentrations dans l'animal (tissu 1 : viande, matières grasses) et dans les produits excrétés par l'animal (tissu 2 : œufs, lait ou matières grasses de ces produits). Ces concentrations peuvent être calculées à l'état stationnaire ou avec une approche dynamique. Dans ce cas, les concentrations dans les tissus animaux sont estimées pour un animal en fin de vie. La dose d'exposition de l'animal est estimée à partir de son ingestion de sol, d'eau et/ou de végétaux contaminés. L'utilisateur peut tenir compte des concentrations de trois sols différents, de trois ressources en eau différentes et de cinq végétaux différents.

Expression possible du terme source de pollution : concentration dans l'eau, concentration dans le sol, concentration dans les végétaux.

Les cinq modules suivants permettent de calculer les concentrations dans l'air.

- Le module **Conc\_gaz\_air\_exterieur** permet le calcul du flux d'émission à partir d'une source sol (source sol supposée infinie ou supposée finie à la surface du sol) ou d'une source nappe et l'estimation des concentrations dans l'air à hauteur de respiration des cibles et/ou à une hauteur  $H_b$  définie par l'utilisateur.
- Le module **Conc\_gaz\_air\_interieur\_Volasoil** donne le flux d'émission à partir d'une source sol ou d'une source nappe et l'estimation des concentrations dans un bâtiment (endroit où a lieu l'émission : vide sanitaire, sous-sol ou pièces à vivre selon les cas) et dans le lieu de vie, si le bâtiment comporte un vide sanitaire ou un sous-sol. Les calculs sont réalisés selon une approche dérivée du modèle Volasoil du RIVM (institut néerlandais de santé publique et de l'environnement).
- Le module **Conc\_gaz\_air\_interieur\_JE**, basé sur les équations du modèle de Johnson et Ettinger (US EPA, 2004; Johnson et al., 1991), permet le calcul des concentrations gazeuses dans l'air d'un bâtiment à partir d'une source sol ou d'une source nappe. Ce module est conçu pour un bâtiment construit sur une dalle. Dans le cas d'une source sol, la concentration attendue dans le bâtiment peut être estimée en utilisant la solution pour une source infinie ou la solution pour une source finie, proposée par l'US EPA. La solution en source finie implémentée suppose nécessairement que la dalle du bâtiment se situe au niveau du sol (pas de sous-sol enterré).

Pour ces trois modules, l'utilisateur peut définir les caractéristiques de deux couches de sol différentes au-dessus de la source, tenir compte du mélange de substances présentes dans le sol en appliquant la loi de Raoult et de la diffusion dans la nappe dans le cas d'une source nappe.

Expression possible du terme source de pollution pour ces trois modules : concentration dans l'eau de la nappe, concentration dans l'air du sol, concentration dans le sol.

- Le module **Conc\_part\_air\_exterieur** donne les concentrations inhalables de polluant sous forme particulaire dans l'air extérieur à partir de la concentration dans le sol et de la fraction de particules issues du sol ou du modèle de Cowherd calculant le flux moyen annuel de particules inférieures ou égales à 10 µm, due à l'érosion éolienne.

Expression possible du terme source de pollution : concentration dans le sol.

- Le module **Conc\_part\_air\_interieur** permet le calcul des concentrations inhalables à partir de la concentration particulaire inhalable dans l'air extérieur (*Cap\_e\_inh\_attrib*).

Expression possible du terme source de pollution : concentration dans l'air extérieur sous forme particulaire.

Les modules dédiés à l'air extérieur *Conc\_gaz\_air\_exterieur* et *Conc\_part\_air\_exterieur* permettent, en plus de la source sol ou de la source nappe du site, de tenir compte de la concentration dans l'air liée à d'autres sources de polluants issues du site.

A la différence des autres modules dédiés aux calculs des concentrations dans les milieux, les cinq modules pour la concentration dans l'air calculent les niveaux d'exposition en moyenne annuelle et le niveau d'exposition moyen sur la durée d'exposition. Ces grandeurs servent au calcul des risques chroniques.

- Enfin, le module **Niveaux\_Exposition\_Risque** est dédié au calcul des niveaux d'exposition chronique et au calcul des niveaux de risque chronique. Les doses d'exposition orales sont calculées en moyenne annuelle pour les différentes classes d'âge, afin d'estimer les risques à effet de seuil. Elles sont aussi calculées en moyenne sur toute la durée d'exposition pour un profil d'individus, dont l'utilisateur a défini l'âge en début d'exposition et la date de début d'exposition, afin d'estimer les risques sans effet de seuil. Pour les expositions par inhalation, le calcul des niveaux d'exposition moyens est fait directement dans les modules relatifs au milieu (cf. paragraphe précédent). Les niveaux de risque sont définis par substance individuelle et pour toutes les substances et peuvent aussi être définis par organe cible pour les effets à seuil.

### 3.4.2 LES MODULES DE DONNEES D'ENTREE

A l'exception de quelques données contenues dans le module *Constantes\_Reglages*, **tous les modules de calcul contiennent les données d'entrée nécessaires à leur utilisation.** Par exemple, pour calculer la concentration de polluant dans une plante liée au transfert sol-racine, si l'utilisateur dispose de données de mesures de la concentration dans le sol, il peut les entrer directement dans le module correspondant au végétal. L'utilisation du module *Sol* est dans ce cas inutile. De même, pour estimer le risque cancérigène lié à l'ingestion de sol, le module *Sol* s'avère également inutile, si l'on dispose des doses d'exposition externes de l'individu en fonction du temps (obtenues par exemple à partir d'un autre modèle), puisque elles peuvent être entrées directement dans le module *Niveau\_Exposition\_Risque*.

Néanmoins, la bibliothèque propose cinq modules de données d'entrée. **L'usage de ces modules est donc facultatif.** Ils permettent d'éviter d'avoir à renseigner plusieurs fois, une même donnée d'entrée utilisée dans plusieurs modules. Par exemple, en renseignant le paramètre *Solubilité* du module *Par\_Subst* et en le connectant aux modules de calcul des concentrations dans les milieux, l'utilisateur pourra éviter d'avoir à renseigner ce paramètre dans les différents modules de calcul utilisant ce paramètre.

Le module **Par\_Subt** regroupe les données physico-chimiques, qui ne sont pas susceptibles de prendre des valeurs différentes (dans MODUL'ERS) en fonction des conditions environnementales.

Le module **Par\_Sol** rassemble des données dépendant des caractéristiques et/ou des conditions du sol (teneur en carbone organique, porosité, pression de vapeur du polluant à la température du sol...).

Le module **Par\_Expo** regroupe les données d'exposition indépendantes d'un module de calcul particulier (masse corporelle, volume d'eau ingéré par jour). En revanche, sont absentes les masses d'aliments consommées par jour, car elles sont spécifiques de chaque aliment ou groupes d'aliments.

Le module **Par\_Emission\_Air** rassemble des données communes à deux modules ou plus dédiés au calcul des concentrations dans l'air extérieur et intérieur (Volume de la source, pression de vapeur du polluant à la température de l'air intérieur...).

Enfin, le module **Par\_Envir** regroupe différentes données d'entrée relatives à l'environnement du site étudié (dépôts atmosphériques, vitesse du vent...).

## 4. TUTORIELS

Cette section contient quatre exercices de complexité graduelle, illustrant différentes fonctionnalités de MODUL'ERS.

Pour installer et démarrer MODUL'ERS, consulter la section 2.2.

### 4.1 EXERCICE 1

**Objectifs :** Savoir

- ✓ construire un modèle simple,
- ✓ connecter des modules entre eux,
- ✓ renseigner les données d'entrée,
- ✓ effectuer une simulation déterministe,
- ✓ consulter et éditer les résultats,
- ✓ éditer un rapport.

#### Description du cas d'étude

Calculer les risques attribuables à un incinérateur émettant de la 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine, par ingestion de sol et d'œufs autoproduits sur la zone de retombées.

Les dépôts totaux sur le sol sont de  $10^{-13}$  mg/m<sup>2</sup>/s. La concentration dans le sol de surface sera calculée sur une épaisseur de 0,01 m et une porosité de 0,5 (V/V) sera définie. Un coefficient de transfert vers les œufs de 340 j/kg de matières grasses, une dose journalière tolérable par ingestion de  $10^{-9}$  mg.kg<sup>-1</sup> et un excès de risque unitaire de  $10^6$  seront considérés.

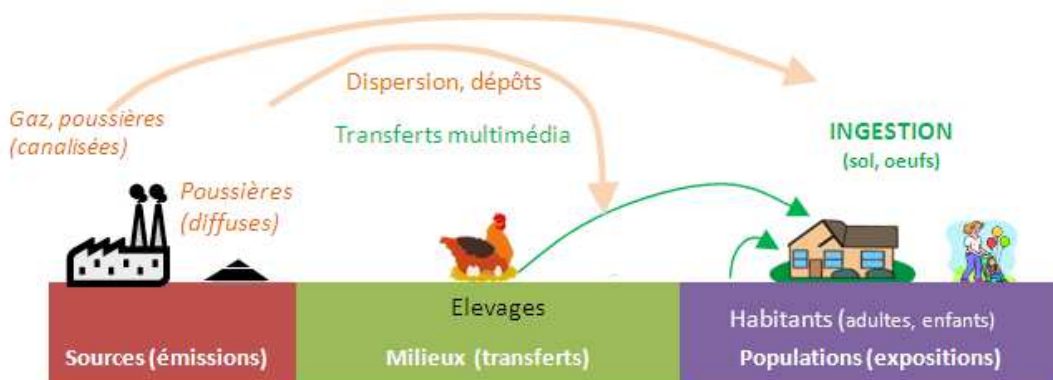


Figure 3 : Schéma conceptuel du cas d'étude du tutoriel 1

A partir du schéma conceptuel, les étapes à dérouler dans l'utilisation de MODUL'ERS sont les suivantes :

1. construction de la matrice (cf. Tableau 2 et Tableau 3),
2. renseignement des données d'entrée (cf. Tableau 4),
3. définition des conditions de la simulation (cf. Tableau 5),
4. consultation des résultats,
5. édition du rapport.

### 4.1.1 CONSTRUIRE LA MATRICE

Tableau 2 : Etapes d'insertion des modules

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Créer un nouveau modèle	Cliquer sur <i>New</i> dans le panneau de commandes <i>Context</i> .	La liste des substances prédéfinies dans MODUL'ERS apparaît.
Choisir la 2,3,7,8 TCDD comme substance à étudier	Cliquer sur la 1234678 HpCDD dans la colonne <i>Selected</i> . Cliquer sur la 2,3,7,8 TCDD dans la colonne <i>Available</i> .	La 1234678 HpCDD disparaît de la liste des substances sélectionnées. La 2,3,7,8 TCDD apparaît dans la colonne des substances sélectionnées.
Ajouter un module <i>Sol</i>	Cliquer sur le panneau de commandes <i>Model</i> . Se positionner sur une case vide de la diagonale de la matrice et faire un clic droit. Cliquer sur <i>Get from library...</i>  Cliquer sur le module <i>Sol</i> dans la bibliothèque. Cliquer sur <i>OK</i> .  Accepter en cliquant sur <i>OK</i> .	Une matrice avec un module <i>Constantes_Reglages</i> apparaît.  Une fenêtre avec les différents modules disponibles dans la librairie apparaît. Le descriptif du module <i>Sol</i> apparaît. Le module <i>Sol</i> se positionne sur la case de la matrice précédemment sélectionnée. MODUL'ERS a identifié des connexions possibles entre le modules de la matrice et demande s'il doit effectuer les connexions.
Ajouter un module <i>Poule</i>	Se positionner sur une case vide de la diagonale de la matrice et faire un clic droit. Cliquer sur <i>Get from library...</i>  Cliquer sur le module <i>Poule</i> dans la bibliothèque. Cliquer sur <i>OK</i> .	La fenêtre avec les différents modules de la librairie apparaît. Le descriptif du module apparaît. Le module <i>Poule</i> se positionne sur la case de la matrice précédemment sélectionnée.
Ajouter un module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>	Se positionner sur une case vide de la diagonale de la matrice et faire un clic droit. Cliquer sur <i>Get from library...</i> Cliquer sur le module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i> dans la bibliothèque. Cliquer sur <i>OK</i> .	Le module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i> se positionne sur la case de la matrice précédemment sélectionnée.



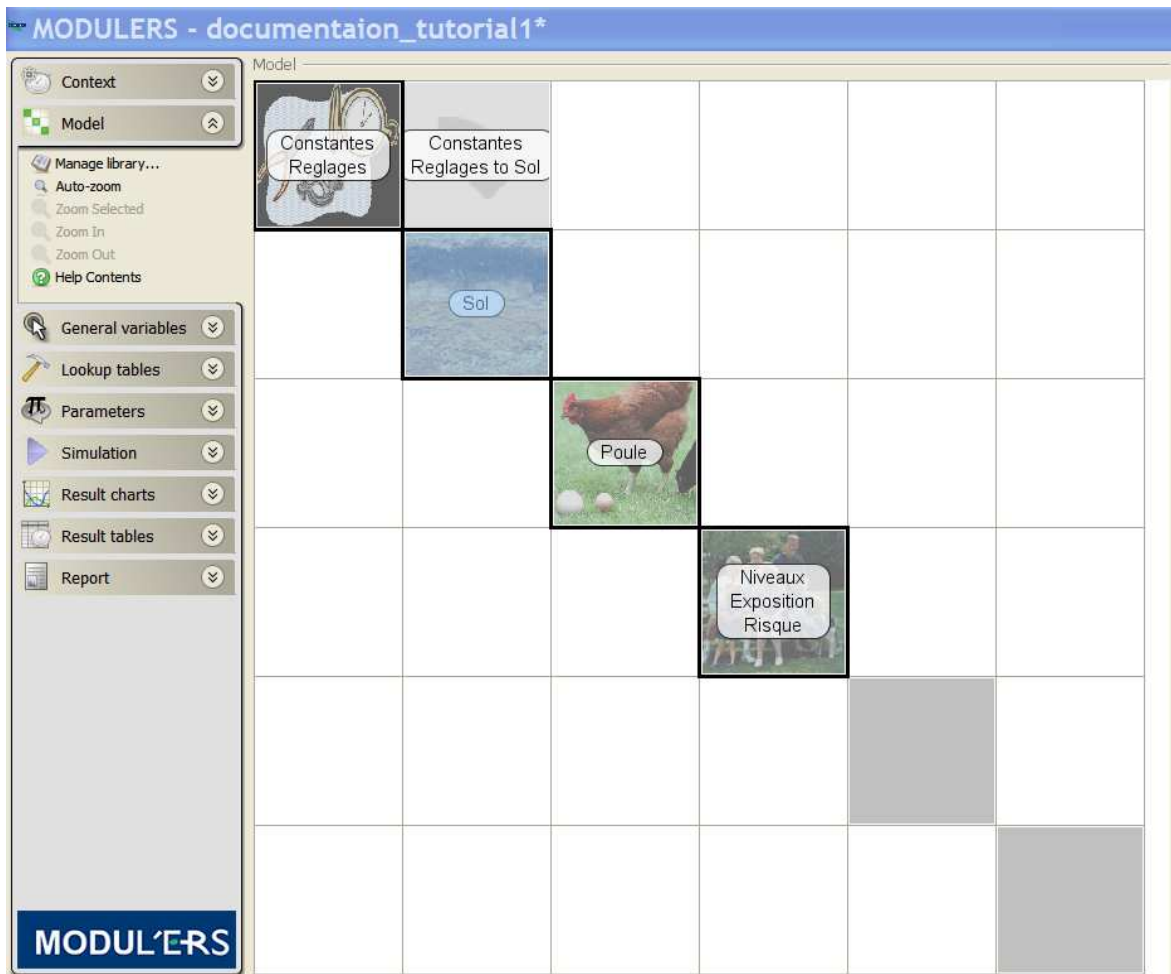


Figure 4 : Matrice du modèle du tutoriel 1 (étapes d'insertion des modules)

#### Remarques :

- 1) Accepter les connexions proposées entre le module *Constantes\_Reglages* et les modules de calcul, pour éviter d'avoir à renseigner la donnée *type\_polluant* plusieurs fois.
- 2) Pour agrandir la diagonale de la matrice et ainsi pouvoir ajouter des modules supplémentaires, se positionner sur la diagonale, faire un clic droit, puis sélectionner *Insert above* ou *Insert below*.

Une fois les modules mis en place sur la matrice, il faut relier le module *Sol* et le module *Poule* au module *Niveaux\_Exposition\_Risque*, pour que ce dernier calcule les doses d'exposition chroniques et les niveaux de risque correspondants.

Les liaisons entre modules se font par des connecteurs dont le **rôle est d'affecter une donnée de sortie d'un module amont à une donnée d'entrée d'un module aval**. Chaque module contient une liste prédéfinie et limitée de grandeurs connectables et seules des données de même dimension (vecteur avec vecteur, matrice avec matrice) et de nature identique peuvent être connectées entre elles (exemple : une concentration dans le sol à une concentration dans le sol et non à une dose d'exposition).

Pour les voies d'exposition orale, seules les doses d'exposition calculées pour les différentes classes d'âge et les doses d'exposition d'un individu (défini en fonction de son âge en début d'exposition et de la date de début d'exposition) peuvent être connectées entre un module dédié à un milieu comme le sol et le module *Niveaux\_Exposition\_Risque*. Ces doses, qui sont calculées en fonction du temps, sont ensuite moyennées par le module *Niveaux\_Exposition\_Risque* pour estimer les niveaux de risque chronique (calcul des moyennes annuelles pour les risques à effet de seuil, calcul intégré sur la vie entière pour les risques sans effet de seuil).

Remarque : Pour les expositions par voie respiratoire, le calcul des niveaux d'exposition chronique (moyenne annuelle de la concentration inhalée, pondérée par la fraction du temps d'exposition et concentration inhalée, moyennée sur la durée d'exposition) est fait dans chacun des modules dédiés à l'air et ce sont ces niveaux d'exposition chroniques qui doivent être reliés au module *Niveaux\_Exposition\_Risque* pour permettre le calcul des risques chroniques correspondants.



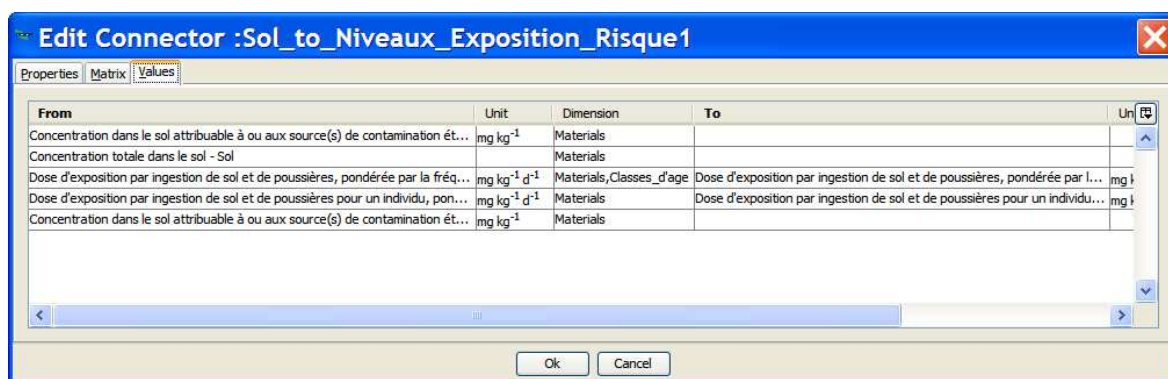


Figure 5 : Paramétrage du connecteur *Sol to Niveaux\_Exposition\_Risque*



Figure 6 : Fenêtre d'informations relative au connecteur *Sol to Niveaux\_Exposition\_Risque*

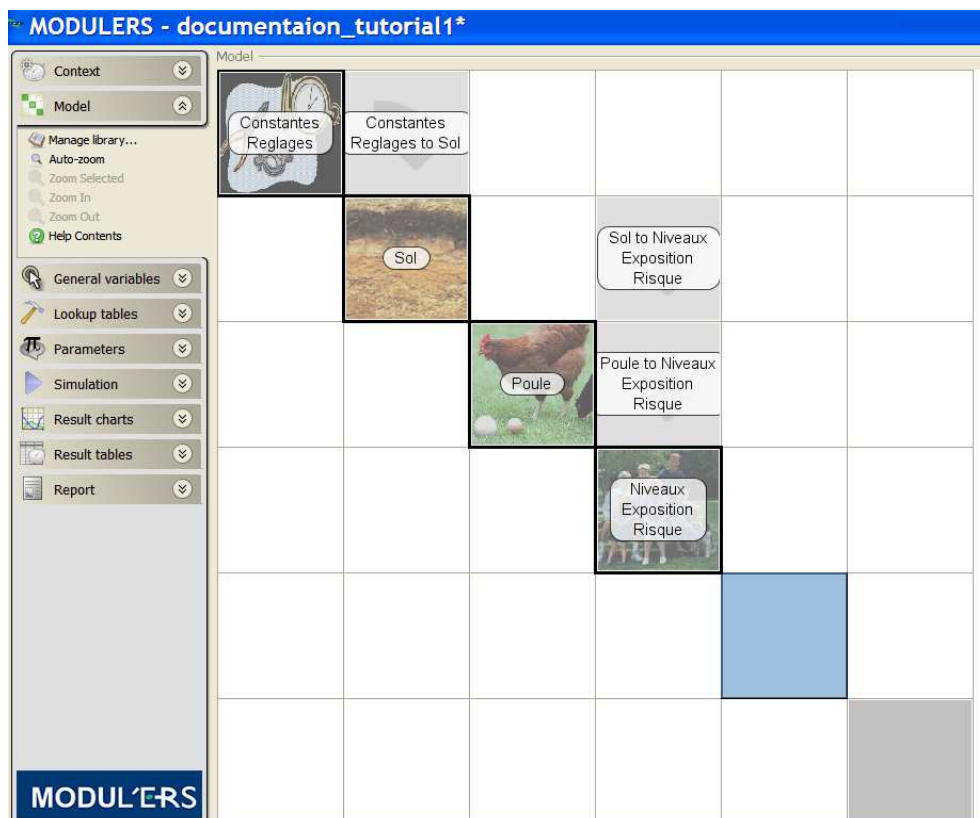


Figure 7 : Matrice du modèle de l'exercice 1 (étapes de connexion des modules)



#### 4.1.2 RENSEIGNER LES DONNEES D'ENTREE

Tableau 4 : Etapes de renseignement des données d'entrée

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les options de calcul	<p>Cliquer sur <i>General variables</i>.</p> <p>En dessous de la liste des <i>Options</i> de calcul, sélectionner le module <i>Constantes_Reglages</i> dans la liste déroulante <i>Sub-system</i>.</p> <p>En dessous de la liste des <i>Options</i> de calcul, sélectionner le module <i>Sol</i> dans la liste déroulante <i>Sub-system</i> et renseigner les différentes <i>General Variables</i>. Sélectionner <i>valeur_calculée</i> pour <i>definition_Cs_attrib</i>.</p> <p>Sélectionner <i>non</i> pour <i>apport_irrigation</i> et <i>option_depots3</i> pour <i>definitions_depots_atmospheriques</i>.</p> <p>Laisser les valeurs prédéfinies pour les autres <i>General Variables</i>.</p> <p>Dans le module <i>Poule</i>, sélectionner <i>approche stationnaire</i> pour <i>definition_Canim2</i> et laisser les valeurs par défaut des autres <i>General Variables</i>.</p> <p>Sélectionner le module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>, laisser les valeurs par défaut des <i>General Variables</i>.</p>	<p>La colonne du milieu donne la liste des différentes <i>Options</i> de calcul des modules <i>Sol</i> et <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>. A droite, des informations sur la donnée d'entrée sélectionnée sont présentées.</p> <p>La liste des <i>General Variables</i> se réduit alors à <i>type_polluant</i>. Le panneau d'informations contient une rubrique <i>Description</i> indiquant ce qui est demandé à l'utilisateur.</p> <p>Les valeurs modifiées apparaissent en caractère gras indiquant une modification apportée par l'utilisateur. Plusieurs nouvelles <i>General Variables</i> apparaissent.</p>

Tableau 4 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les données variables en fonction du temps	<p>Cliquer sur <i>Lookup tables</i>.</p> <p>Module par module, consulter les valeurs par défaut des données d'entrée.</p> <p>Modifier la valeur de <i>Depot total sur le sol</i> en fonction de l'énoncé. Entrer la valeur de <math>10^{-13} \text{ mg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}</math> au temps <math>t=0</math> (cette valeur sera prise en compte sur toute la durée de la simulation).</p> <p>Connecter la <i>Concentration dans le sol attribuable à ou aux source(s) de contamination étudiée(s)</i> du module <i>Sol</i> à la <i>Concentration de polluant dans le sol 1</i> du module <i>Poule</i>.</p>	
Renseigner les données constantes dans le temps	<p>Cliquer sur <i>Parameters</i>.</p> <p>Module par module, consulter les valeurs par défaut des données d'entrée.</p> <p>Modifier la valeur de :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Epaisseur de la couche de sol considérée,</i></li> <li>▪ <i>Porosité du sol,</i></li> <li>▪ <i>Facteur de biotransfert pour le tissu 2 de l'animal</i></li> <li>▪ des VTR à seuil et sans seuil par voie orale</li> </ul> <p>en fonction des éléments de l'énoncé.</p>	

Remarques :

- Pour renseigner les données d'entrée, l'utilisateur peut se référer à la rubrique *Description*, précisant la nature de la donnée, dans quels cas elle doit être renseignée et/ou pour des *General Variables*, quels sont les choix possibles.
- En haut de la fenêtre *Information*, en cliquant sur le bouton *Full*, l'utilisateur a accès à des informations complémentaires, comme la liste des grandeurs dans le calcul desquelles la donnée est utilisée. Des liens hypertextes permettent d'accéder aux formules mathématiques correspondantes.
- Dans le cadre d'une simulation déterministe, les valeurs des paramètres utilisées pour le calcul sont celles de la colonne *Value*. Les valeurs présentes dans les colonnes *Min* et *Max* renseignent l'utilisateur sur le domaine de variation d'un paramètre, mais ces valeurs ne sont pas prises en compte dans les calculs (cf. section 5.2.2 sur les valeurs prédéfinies dans la bibliothèque de modules).
- Le module *Constantes\_Reglages* permet de définir les classes d'âge à prendre en compte dans le cas d'étude. Par défaut, sept classes d'âge sont définies. Ce nombre est modifiable en suivant les indications données dans la rubrique *Description* du paramètre *Age minimal de chaque classe d'âge*.

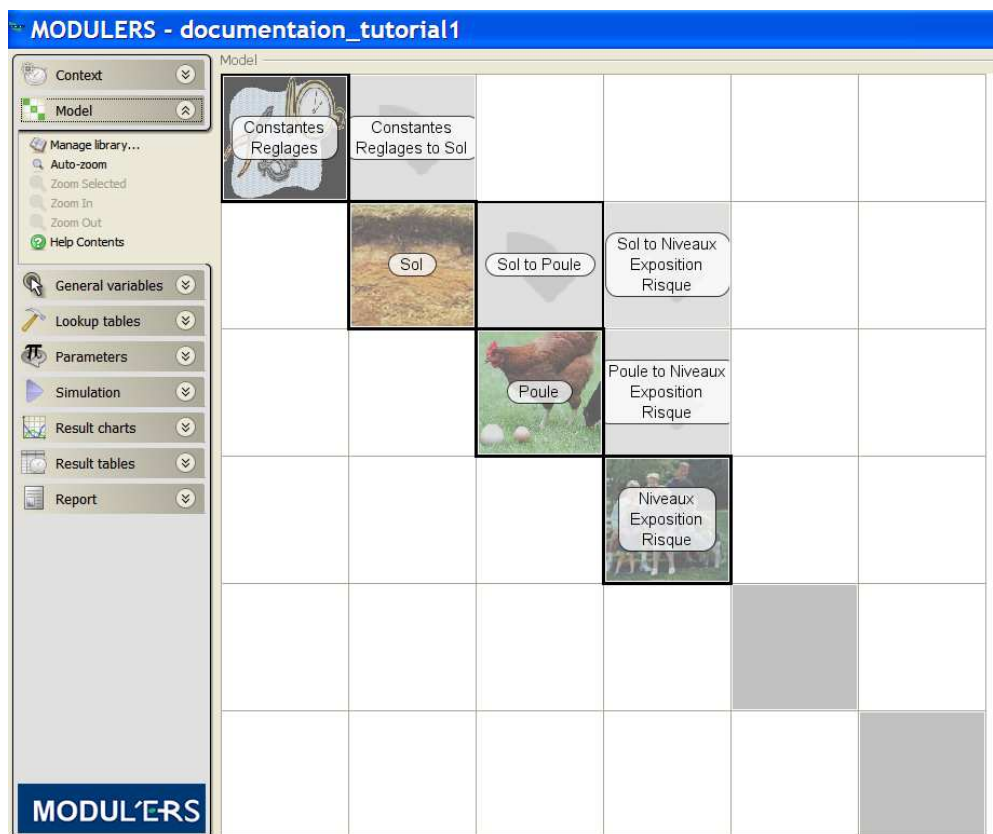


Figure 8 : Matrice finale du modèle de l'exercice 1

#### 4.1.3 PREPARER LA SIMULATION

Pour éviter des erreurs et des calculs inutiles, **il est fortement conseillé, avant de lancer la simulation, de vérifier que toutes les données d'entrée ont été renseignées de manière adéquate.** En effet, quand des données sont renseignées de manière inappropriée (valeurs par défaut nécessitant d'être modifiées), des tests intégrés dans les modules ont pour fonction de bloquer la simulation. Pour faciliter la vérification, l'utilisateur peut :

- soit consulter le rapport, listant les données d'entrée des modules utilisés, avec les valeurs prédéfinies et celles modifiées par l'utilisateur.

Pour éditer un rapport, il faut cliquer sur la commande *Refresh* dans le panneau de commandes *Report*.

- soit visualiser les données, après les avoir exportées dans fichiers Excel.

Pour cela, dans chacun des panneaux de commandes *General variables*, *Lookup tables* et *Parameters*, il faut sélectionner la liste des données d'entrée (sélectionner les variables avec la souris, en maintenant la touche *Shift* enfoncée), puis cliquer sur la commande *Export to Excel*. Une fenêtre s'ouvre alors pour enregistrer les données dans un fichier de type .xlsx.

Par ailleurs, quand une donnée d'entrée n'a pas de valeur (case vide), un message d'erreurs apparaît dans la fenêtre *Errors* correspondant au panneau de commandes *Simulation*.

Tableau 5 : Etapes de définition des conditions de la simulation et lancement de la simulation

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Définir la durée de simulation	Cliquer sur le panneau de commandes <i>Simulation</i> Laisser les dates de simulation définies par défaut de 0 à 30	
Définir une simulation de type ponctuel	Laisser le type de simulation défini par défaut : <i>Best estimate</i>	
Lancer la simulation	Cliquer sur <i>Save</i> ou <i>Save as</i> dans le panneau <i>Context</i> Lancer la simulation en cliquant sur la flèche bleue en haut ou sur le bouton <i>Run</i> dans le panneau de commandes	La fenêtre <i>Information</i> montre l'avancement des calculs

#### 4.1.4 CONSULTER ET EDITER LES RESULTATS

Pour visualiser les résultats sous forme graphique, cliquer sur *Result charts* et sélectionner dans la liste les données de sortie souhaitées. Pour visualiser les résultats sous forme de tableaux, cliquer sur *Results tables* et procéder de même.

Pour visualiser, plusieurs variables de sortie dans le même graphique ou le même tableau, sélectionner les données voulues dans la liste de résultats à l'aide de la souris, en maintenant la touche *Shift* ou *Ctrl* enfoncée.

Par défaut, toutes les données de sortie du modèle sont affichées. Elles sont rangées par module et au sein de chaque module par ordre alphabétique. La liste déroulante de la rubrique *Category* permet de retrouver plus facilement les principaux résultats généralement attendus. Ainsi, l'utilisateur peut obtenir :

- les concentrations dans les milieux en moyenne annuelle en sélectionnant *Concentration* dans la liste déroulante,
- les niveaux d'exposition en moyenne annuelle par vecteur d'exposition et classe d'âge (données dont le nom fini par *\_classe\_age\_moy\_an*), ainsi que les niveaux d'exposition d'un individu moyennés sur la durée d'exposition (données dont le nom fini par *\_vie\_entiere*), en sélectionnant *Niveaux\_expo* dans la liste déroulante,
- les quotients de danger par vecteur d'exposition, organe cible et classe d'âge (données commençant par *QD\_*), les quotients de danger de la classe d'âge la plus exposée par organe cible (données commençant par *Max\_Age\_QD\_*), ainsi que les excès de risque individuel (données commençant par *ERI\_*) en sélectionnant *Niveaux\_risque* dans la liste déroulante,
- les coefficients de transfert et les transferts de masse de polluant vers et à partir d'un milieu (quand ils ont été calculés) en sélectionnant *Transfert* dans la liste déroulante.

La rubrique *Name* permet aussi de sélectionner les variables de sortie ayant en commun un groupe de lettres. Par exemple, en tapant « *ingsol* », seules les

données de sortie en rapport avec la dose de sol ingérée apparaissent dans la liste des données de sortie.

La rubrique *Index* permet de sélectionner toutes les données vectorielles et matricielles se rapportant à un indice particulier (variables relatives à une substance, variables relatives à une classe d'âge).

Remarque : Les graphiques et les tableaux qui apparaissent en cliquant sur *Result charts* et *Result tables* portent le nom *Quickview* et présentent les résultats en fonction du temps. Ces graphiques et tableaux donnent à l'utilisateur une vue rapide des résultats et peuvent être exportés vers Excel. En revanche, ils n'apparaissent pas dans le rapport. **Pour publier des résultats dans le rapport, il est nécessaire de formater des graphiques et des tableaux.**

Tableau 6 : Etapes de formatage des tableaux et des graphes de résultats

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Créer un graphique ou un tableau	Positionner la souris sur la fenêtre <i>Charts</i> (dans <i>Result charts</i> ) ou <i>Tables</i> (dans <i>Result tables</i> ) Faire un clic droit Sélectionner <i>Create</i> Sélectionner le type de graphique ou de tableau souhaité (cf. sections 5.1.7 et 5.1.8) pour la description des différents types de graphiques et tableaux disponibles)	
Nommer le graphique ou le tableau	Faire un clic droit Sélectionner <i>Edit</i> Sélectionner l'onglet <i>Properties</i> Donner un titre Cliquer sur OK	Une fenêtre d'édition apparaît
Définir le contenu du graphique ou du tableau	<u>Méthode 1</u> Sélectionner les données voulues dans la liste de résultats à l'aide de la souris, en maintenant la touche <i>Shift</i> ou <i>Ctrl</i> enfoncée. <u>Méthode 2</u> Dans la fenêtre d'édition du tableau ou du graphique, sélectionner l'onglet <i>Data</i> . Ajouter des colonnes en cliquant sur <i>Add column</i> . Se positionner sur une colonne vide et sélectionner dans la liste déroulante <i>Output</i> la variable de sortie à afficher.	Une colonne ou une série de points correspondant à chaque donnée de sortie sélectionnée est ajoutée au tableau ou au graphique.  Des colonnes vides apparaissent.

Time (year)	ERI_ing[2378_Tétrachlorodibenzodioxine] (unitless)	Max_Age_QD_ing (unitless)
0,0000E0	0,0000E0	0,0000E0
1,0000E0	0,0000E0	1,5666E-2
2,0000E0	0,0000E0	4,6996E-2
3,0000E0	0,0000E0	7,8327E-2
4,0000E0	0,0000E0	1,0966E-1
5,0000E0	0,0000E0	1,4099E-1
6,0000E0	0,0000E0	1,7232E-1
7,0000E0	0,0000E0	2,0365E-1
8,0000E0	0,0000E0	2,3498E-1
9,0000E0	0,0000E0	2,6631E-1
1,0000E1	0,0000E0	2,9764E-1
1,1000E1	0,0000E0	3,2897E-1
1,2000E1	0,0000E0	3,6030E-1
1,3000E1	0,0000E0	3,9163E-1
1,4000E1	0,0000E0	4,2296E-1
1,5000E1	0,0000E0	4,5430E-1
1,6000E1	0,0000E0	4,8563E-1
1,7000E1	0,0000E0	5,1696E-1
1,8000E1	0,0000E0	5,4829E-1
1,9000E1	0,0000E0	5,7962E-1
2,0000E1	0,0000E0	6,1095E-1
2,1000E1	0,0000E0	6,4228E-1
2,2000E1	0,0000E0	6,7361E-1
2,3000E1	0,0000E0	7,0494E-1
2,4000E1	0,0000E0	7,3627E-1
2,5000E1	0,0000E0	7,6760E-1
2,6000E1	0,0000E0	7,9893E-1
2,7000E1	0,0000E0	8,3026E-1
2,8000E1	0,0000E0	8,6159E-1
2,9000E1	0,0000E0	8,9292E-1
3,0000E1	5,7593E-5	9,2428E-1

Figure 9 : Tableau de résultats formaté (avec l'excès de risque cancérigène et la dose d'exposition chronique de la classe d'âge la plus exposée)

La sauvegarde du modèle et de ses résultats se fait en cliquant sur **Save Assessment**, ce qui génère un fichier avec l'extension **.ina**. Les fichiers avec l'extension **.ine** contiennent tout le modèle et ses hypothèses, mais pas les résultats de simulation.

#### 4.1.5 EDITER LE RAPPORT

Cliquer sur le panneau de commandes **Report**, puis sur la commande **Refresh**. Un rapport avec des liens hypertextes est alors édité.

Par défaut, le rapport donne le nom du projet, le nom de l'auteur, la version du modèle de base utilisée (correspondant au module *Constantes\_Reglages*), les valeurs de chaque donnée d'entrée et les tableaux et graphiques formatés.

Un fichier de type **.pdf** peut être généré grâce à la commande **Generate and open PDF**. Le rapport peut aussi être imprimé en cliquant sur la commande **Print**.



## 4.2 EXERCICE 2

### Objectifs : Savoir

- ✓ Créer et utiliser une nouvelle substance, absente de la liste des substances prédéfinies dans MODUL'ERS,
- ✓ Renseigner, à partir des mêmes valeurs les données, de plusieurs modules,
- ✓ Renseigner un module à partir des données d'un autre module,
- ✓ Utiliser les fonctions import-export.

### Description du cas d'étude

Une zone résidentielle avec des jardins potagers est implanté sur un sol pollué par de l'indéno(c,d)pyrène et du plomb. Calculer les doses d'exposition des enfants de 0 à 10 ans vivant sur le site liée à une ingestion de sol et de pommes de terre. On prendra en compte les pertes par lixiviation dans le sol.

Tableau 7 : Exercice 2 - Concentrations dans les sols au temps t=0 (hors bruit de fond)

Couches de sol	Plomb (mg/kg)	Indénopyrène (mg/kg)
Entre 0 et 5 cm	220	1
Entre 0 et 30 cm	130	0,5

Le bruit de fond dans les sols dans la région est de l'ordre 30 mg/kg pour le plomb et de l'ordre de  $10^{-3}$  mg/kg pour l'indénopyrène.

Tableau 8 : Exercice 2 - Données à utiliser pour le sol

Paramètres	Valeurs
Teneur en carbone organique (-)	0,03
Porosité (-)	0,5
Teneur en eau (-)	0,2
Recharge en eau (m/an)	0,4

Tableau 9 : Exercice 2 - Paramètres physico-chimiques de l'indénopyrène<sup>5</sup>

Paramètres	Valeurs
Solubilité (mg/m <sup>3</sup> )	62
Log Kow	6,6
Coefficient de partage carbone organique-eau (l/kg)	$6,3 \cdot 10^6$
Constante de Henry (Pa.m <sup>3</sup> /mol)	$2,9 \cdot 10^{-2}$
Facteur de bioconcentration sol-plante	Utilisation de la relation QSAR donnant le facteur de bioconcentration eau du sol-plante

<sup>5</sup> Références issues de la fiche de données toxicologiques et environnementales des substances chimiques, Indéno[1,2,3,c,d]pyrène, INERIS –DRC-01-25590-01DR122.doc, Version n°2, Mai 2005

Tableau 10 : Exercice 2 - Paramètres physico-chimiques du plomb

Paramètres	Valeurs
Log Kd	3,7
Facteur de bioconcentration sol-plante (kg/kg sec) : Br_E	$1,5 \cdot 10^{-2}$

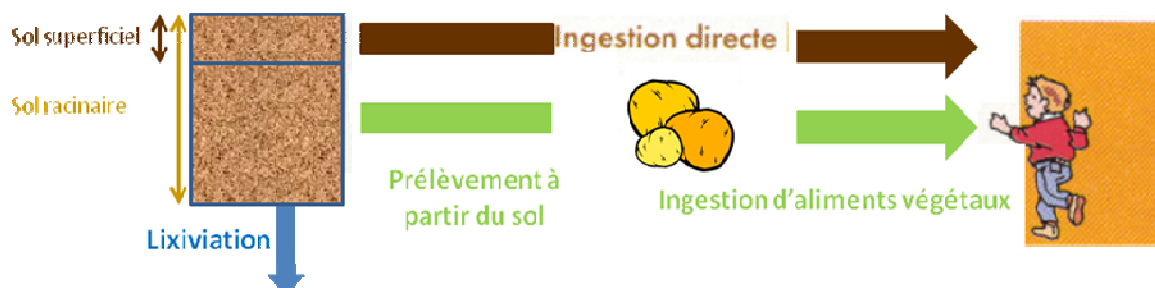


Figure 10 : Schéma conceptuel du cas d'étude du tutoriel 2

L'exposition par ingestion de sol est liée à la contamination de la couche superficielle du sol (c'est-à-dire à la contamination sur les premiers centimètres). La contamination des végétaux suppose de s'intéresser à la contamination dans la couche de sol servant de support au végétal, soit une épaisseur de sol de quelques dizaines de centimètres pour des cultures maraîchères. Dans cet exercice, la concentration de polluant dans le sol doit donc être estimée pour deux couches de sol différentes. Par conséquent, le modèle comportera deux modules *Sol* (le module *Sol* s'applique à une couche de sol en surface, il ne permet pas de représenter la superposition de plusieurs couches de sol).

## 4.2.1 CONSTRUIRE LA MATRICE

Tableau 11 : Etapes d'insertion et de connexion des modules

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Sélectionner les substances à étudier	<p>Créer un nouveau modèle (<i>New</i> dans <i>Context</i>).</p> <p>Désélectionner la 1234678 <i>Heptachlorodibenzodioxine</i>.</p> <p>Sélectionner le plomb.</p> <p>Cliquer sur <i>Add Contaminant</i> dans <i>Context</i>.</p> <p>Entrer <i>Indénopyrène</i> (ne pas utiliser de signe « , » dans le nom des substances) et cliquer <i>OK</i>.</p>	<p>La liste des substances disponibles apparaît</p> <p>Une fenêtre apparaît pour entrer le nom de la nouvelle substance</p> <p><i>Indénopyrène</i> apparaît dans la liste des substances sélectionnées</p>
Créer la matrice correspondant au schéma conceptuel	<p>Ajouter :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ deux modules <i>Sol</i> dans la matrice,</li> <li>▪ un module <i>Tubercules</i>,</li> <li>▪ un module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>.</li> </ul>	
Renommer les modules Sol	<p>Faire un clic droit sur le module <i>Sol</i> et sélectionner <i>Edit</i>,</p> <p>Dans l'onglet <i>Propriétés</i>, remplacer <i>Sol</i> par <i>Sol_superficiel</i>.</p> <p>De même remplacer le module <i>Copy_Sol</i> par <i>Sol_racinaire</i>.</p>	<p>La fenêtre d'édition du module apparaît.</p> <p>Le nom du module <i>Sol</i> sur la matrice est modifié.</p>
Connecter les modules entre eux	<p>Connecter :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ la <i>Concentration dans le sol attribuable à ou aux source(s) étudiées</i> du module <i>Sol racinaire</i> à la <i>Concentration dans le sol de culture</i> du module <i>Tubercules</i>,</li> <li>▪ les doses d'exposition du module <i>Sol_superficiel</i> au module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>,</li> <li>▪ les doses d'exposition du module <i>Tubercules</i> au module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i>.</li> </ul>	

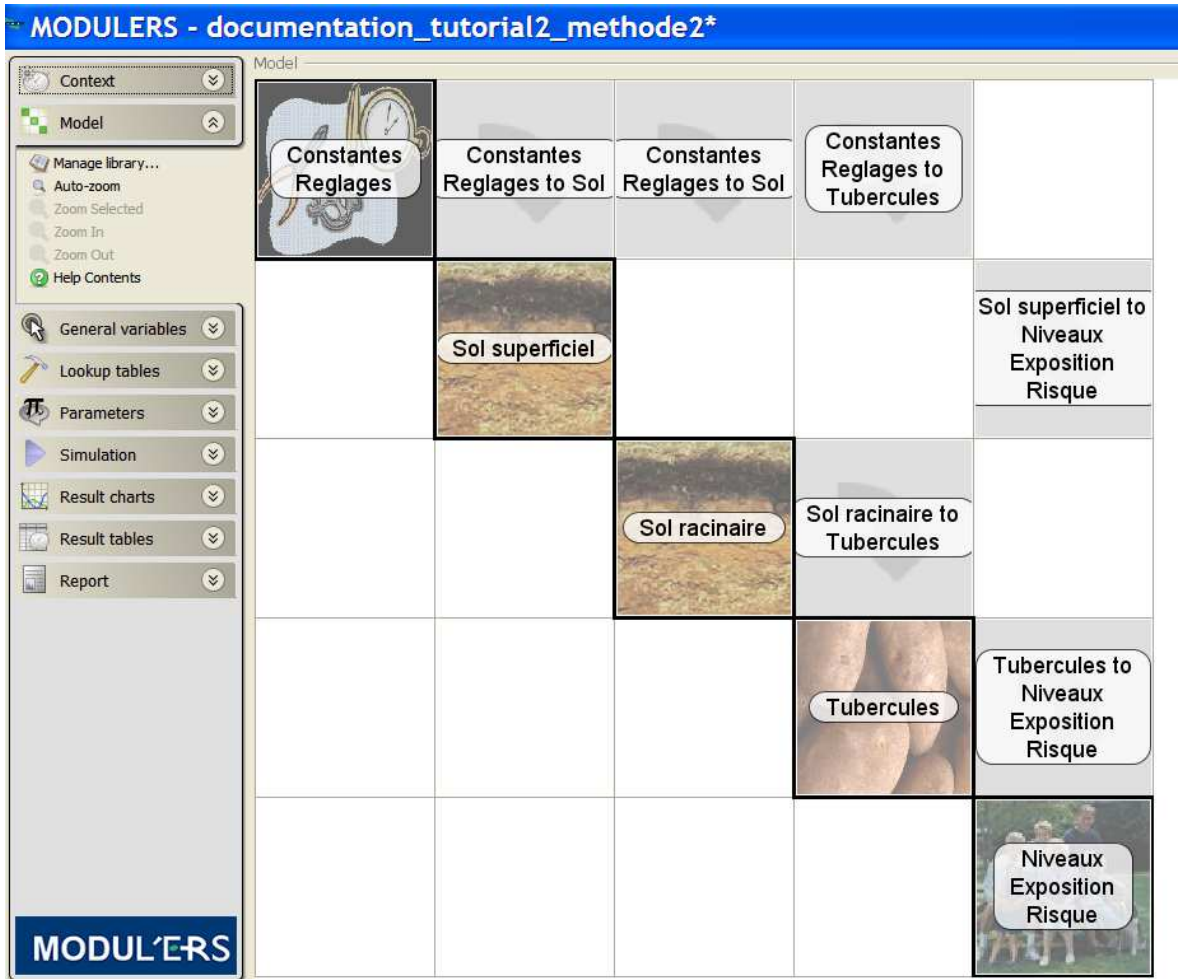


Figure 11 : Matrice du modèle de l'exercice 2

## 4.2.2 RENSEIGNER LES DONNEES D'ENTREE

Les données de chaque module peuvent être renseignées les unes après les autres. Toutefois, quand plusieurs modules font appel aux mêmes données d'entrée et doivent être renseignées avec les mêmes valeurs, il existe deux méthodes pour éviter de renseigner manuellement chacune des occurrences d'une même donnée.

La première consiste à utiliser les modules de données d'entrée, à connecter les données communes à plusieurs modules puis à les renseigner.

Dans la seconde, il s'agit de renseigner les données d'un des modules, d'exporter les données communes dans un fichier Excel, puis de les réimporter vers les autres modules.

Dans ce cas d'étude, certaines données d'entrée des modules *Sol* et du module *Tubercules* sont communes (données relatives aux caractéristiques du sol et aux substances chimiques). Selon la première méthode, les modules *Par\_Sol* et *Par\_Subst* vont être utilisés pour attribuer aux données d'entrée les valeurs fournies dans l'énoncé. Avec la seconde méthode, les valeurs de l'énoncé seront entrées dans le module *Sol\_superficiel*, puis exportées dans un fichier Excel avant d'être importées vers les modules *Sol\_racinaire* et *Tubercules*. Dans cet exercice, les données d'entrée pour lesquelles des valeurs significatives (données différentes de 0, -1 et NaN) sont prédéfinies dans les modules de la bibliothèque n'auront pas à être modifiées.

### Méthode 1 : Utiliser les modules de données d'entrée

Avec cette méthode, il est possible de renseigner les données d'entrée de type *Lookup tables* (données d'entrée variables dans le temps) et *Parameters* (données d'entrée constantes dans le temps) mais pas les *General Variables* (options de calcul). Celles-ci doivent donc être définies pour chacun des deux modules *Sol*.

Tableau 12 : Etapes de définition des données d'entrée en utilisant des modules de données d'entrée

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les options de calcul	<p>Pour la <i>General variable type_Polluant</i> module <i>Constantes_Reglages</i>, attribuer la <i>valeur organique</i> à l'indénopyrène .</p> <p>Pour les deux modules <i>Sol</i>, sélectionner :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>▪ <i>valeur_calculée</i> pour <i>definition_Cs_attrib</i>,</li><li>▪ <i>non</i> pour <i>apport_atm</i> et <i>apport_irrig</i>,</li><li>▪ <i>oui</i> pour <i>perte lixiviation</i>.</li></ul> <p>Pour le module <i>Tubercules</i>, sélectionner :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>▪ <i>valeur_calculée</i> pour <i>definition_Cp</i>,</li><li>▪ <i>Br_prime_QSAR</i> pour <i>Facteur de bioconcentration du sol ou de l'eau du sol vers la plante</i> de l'indénopyrène.</li></ul> <p>Laisser les valeurs par défaut des autres <i>General Variables</i>.</p>	

Tableau 12 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Consulter la liste des <i>Lookup tables</i> et <i>Parameters</i> à définir (données d'entrée pour lesquelles il n'y a pas de valeur signifiante prédéfinie dans la colonne <i>Value</i> )		<p>Les valeurs spécifiques à définir par l'utilisateur et communes à plusieurs modules sont :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Recharge en eau</i>,</li> <li>▪ <i>Teneur en eau du sol</i>,</li> <li>▪ <i>Concentration de bruit de fond dans le sol</i>,</li> <li>▪ <i>Teneur en carbone organique du sol</i>,</li> <li>▪ <i>Porosité du sol</i>,</li> <li>▪ <i>LogKd_E*</i> du plomb,</li> <li>▪ <i>LogKow_E</i> de l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>Koc</i> de l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>Solubilité</i> de l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>Constante de Henry à température du sol</i> de l'indénopyrène.</li> </ul>
Insérer les modules de données d'entrée correspondant aux données d'entrée listées ci-dessus	<p>Ajouter les modules <i>Par_Subst</i> et <i>Par_Sol</i> sur la diagonale de la matrice</p> <p>Accepter les connexions proposées par le modèle</p> <p>Si nécessaire, agrandir la matrice en positionnant la souris sur la diagonale de la matrice, faire un clic droit puis sélectionner <i>Insert above</i> ou <i>Insert below</i> (cf. Figure 12)</p>	<p>Des connecteurs sont créés entre le module <i>Par_sol</i> et les modules <i>Sol</i> et <i>Tubercules</i>, et entre le module <i>Par_Subst</i> et les modules <i>Sol</i> et <i>Tubercules</i>.</p> <p>Parmi les données citées ci-dessus, plusieurs données ont été connectées automatiquement :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Concentration de bruit de fond dans le sol</i> entre le module <i>Par_sol</i> et les deux modules <i>Sol</i>,</li> <li>▪ <i>Constante de Henry à température du sol</i> entre le module <i>Par_sol</i> et les modules <i>Sol</i> et <i>Tubercules</i>,</li> <li>▪ <i>Koc</i> et <i>Solubilité</i> entre le module <i>Par_Subst</i> et les modules <i>Sol</i> et <i>Tubercules</i></li> <li>▪ <i>LogKow_E</i> entre le module <i>Par_Subst</i> et <i>Tubercules</i></li> </ul>

\* : le suffixe *\_E* correspond à une donnée d'entrée par opposition au suffixe *\_C*, qui correspond à une valeur calculée



Tableau 12 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Connecter les autres données devant être renseignées de manière commune	<p>Connecter les données :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Recharge en eau, Teneur en eau du sol, Teneur en carbone organique du sol, Porosité du sol, logKd_E</i> du module <i>Par_Sol</i> aux deux modules <i>Sol</i> ;</li> <li>▪ <i>Teneur en eau du sol, Teneur en carbone organique, Porosité du sol, LogKd_E</i>, du module <i>Par_Sol</i> au module <i>Tubercules</i>.</li> </ul>	<p>Les nouveaux paramètres connectés apparaissent dans les fenêtres d'Information des connecteurs.</p> <p>Les données des modules de calcul connectées aux modules de données d'entrée (ex : <i>Recharge en eau</i> du module <i>Sol_superficiel</i>) ont disparu des listes de données des panneaux de commandes <i>Lookup tables</i> et <i>Parameters</i>.</p>
Renseigner les données d'entrée de <i>Par_Sol</i> et <i>Par_Subst</i> utilisées par les modules <i>Sol</i> et/ou <i>Tubercules</i>	<p>Dans le panneau de commandes <i>Lookup tables</i>, sélectionner le module <i>Par_Sol</i> grâce à la liste déroulante <i>Sub_system</i> et renseigner selon les données de l'énoncé :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Recharge en eau</i>,</li> <li>▪ <i>Teneur en eau de sol</i>.</li> </ul> <p>Dans le panneau de commandes <i>Parameters</i>, sélectionner le module <i>Par_Sol</i> grâce à la liste déroulante <i>Sub_system</i> et renseigner :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Teneur en carbone organique du sol</i>,</li> <li>▪ <i>Porosité du sol</i>,</li> <li>▪ <i>LogKd_E</i> du plomb,</li> <li>▪ <i>Constante de Henry</i> à température du sol pour l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>Concentration de bruit de fond dans le sol</i>.</li> </ul> <p>Sélectionner le module <i>Par_Subst</i> et renseigner :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Koc</i> de l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>logKow_E</i> de l'indénopyrène,</li> <li>▪ <i>Solubilité</i> de l'indénopyrène.</li> </ul>	
Renseigner les autres données d'entrée	<p>Dans le module <i>Constantes_Reglages</i>, effacer les valeurs définies par défaut pour les classes_5, 6 et 7 du paramètre <i>Age minimal de chaque classe d'âge</i>.</p> <p>Dans les modules <i>Sol</i>, utiliser les données de l'énoncé pour renseigner les paramètres suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Concentration de polluant dans la couche de sol considérée au temps t=0</i>,</li> <li>▪ <i>Epaisseur de la couche de sol considérée</i>.</li> </ul> <p>Dans le module <i>Tubercules</i>, renseigner le <i>Facteur de bioconcentration sol-plante</i> pour le plomb (inutile pour l'indénopyrène car utilisation d'une relation QSAR).</p>	La valeur par défaut, c'est-à-dire le symbole $\infty$ remplace les valeurs prédéfinies des 3 classes d'âge.

### Remarques :

Les données d'entrée des modules de calcul apparaissent dans les panneaux de commandes *General Variables*, *Lookup tables* et *Parameters*, en fonction des options de calcul définies par l'utilisateur. Elles doivent être vérifiées par l'utilisateur et éventuellement doivent se voir attribuées des valeurs spécifiques.

En revanche, les grandeurs des modules de données d'entrée (bien qu'apparaissant dans la liste des données d'entrée des panneaux *Lookup tables* et *Parameters*) **n'ont pas besoin d'être renseignées par l'utilisateur si elles ne sont pas connectées**. En cliquant sur le bouton *Full* de la fenêtre d'informations d'une donnée d'entrée, une rubrique *Referenced by* (listant les expressions mathématiques dans lesquelles la donnée d'entrée est utilisée par le modèle) apparaît si cette donnée est utilisée. L'absence de rubrique *Referenced by* pour certaines données des modules de données d'entrée indique que celles-ci ne sont pas connectées et n'ont donc pas besoin d'être renseignées (l'utilisateur peut également le vérifier en retournant sur l'écran *Model* et en cliquant sur la case des connecteurs pour visualiser, dans la fenêtre *Information*, la liste des données connectées entre deux modules).

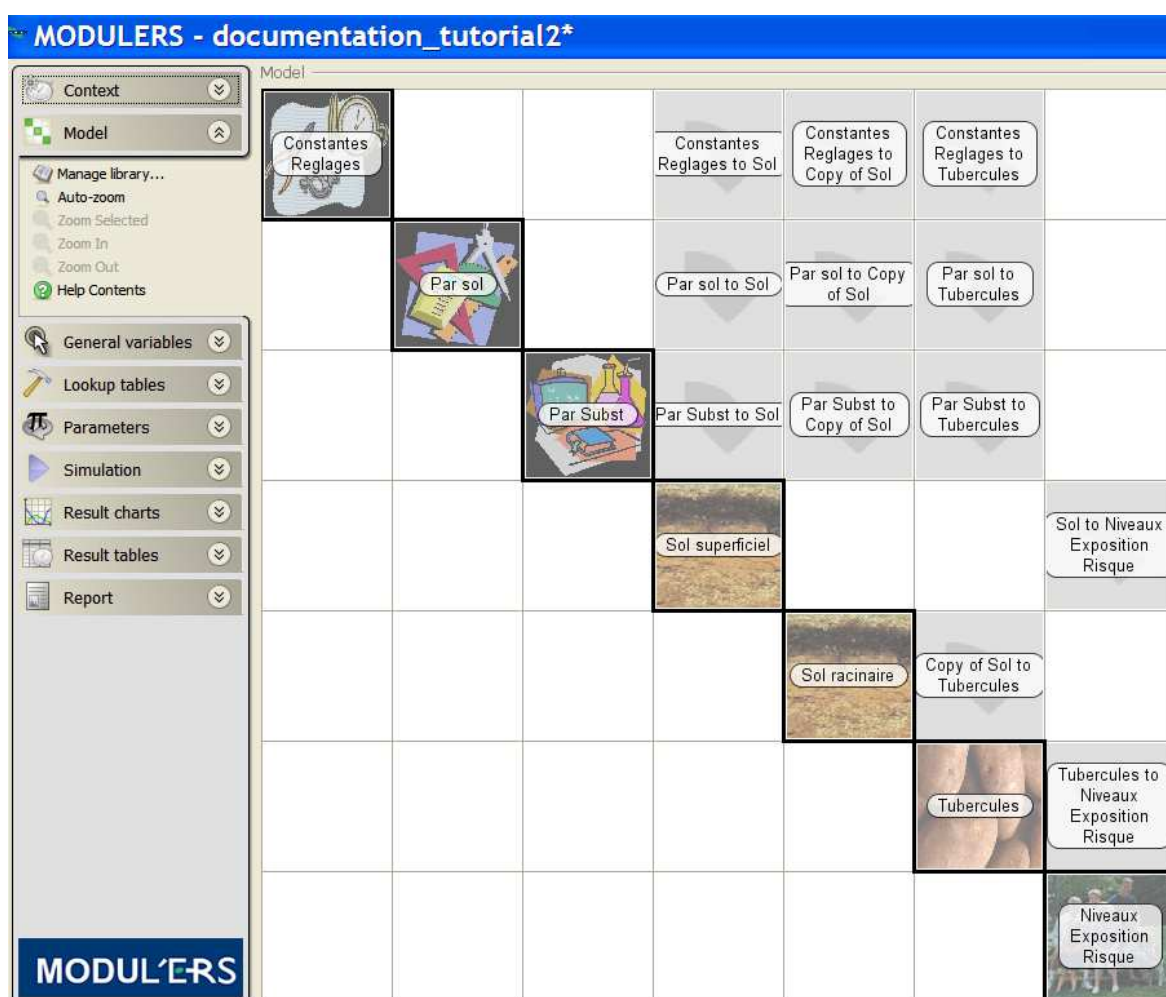


Figure 12 : Matrice du modèle du tutoriel 2 (méthode 1)

## Méthode 2 : Utiliser les fonctions *Export to Excel* et *Import from Excel*

Tableau 13 : Etapes de définition des données d'entrée en utilisant les fonctions *Export to Excel* et *Import from Excel*

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les options de calcul à l'exception de celles du module <i>Sol_racinaire</i>	<p>Attribuer la <i>valeur organique</i> à l'indénopyrène dans le module <i>Constantes_Reglages</i>.</p> <p>Pour le module <i>Tubercules</i>, sélectionner :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>valeur_calculée</i> pour <i>definition_Cp</i>,</li> <li>▪ <i>Br_prime_QSAR</i> pour <i>Facteur de bioconcentration du sol ou de l'eau du sol vers la plante</i> de l'indénopyrène.</li> </ul> <p>Dans le module <i>Sol_superficiel</i>, sélectionner :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>valeur_calculée</i> pour <i>definition_Cs_attrib</i>,</li> <li>▪ <i>non</i> pour <i>apport_atm</i> et <i>apport_irrig</i>,</li> <li>▪ <i>oui</i> pour <i>perte lixiviation</i>.</li> </ul> <p>Laisser les valeurs par défaut des autres <i>General Variables</i>.</p>	
Renseigner les options de calcul du module <i>Sol_racinaire</i>	<p>Sélectionner la liste des options de calcul du module <i>Sol_superficiel</i> (positionner la souris sur une donnée et sélectionner toute la liste en maintenant la touche <i>Shift</i> enfoncée).</p> <p>Cliquer sur <i>Export to Excel</i>.</p> <p>Attribuer un nom au fichier Excel.</p> <p>Ouvrir le fichier Excel.</p> <p>Dans les colonnes C et F portant les noms <i>Callname</i> et <i>Selected</i>, remplacer la première partie du nom des options de calcul : <i>Sol_superficiel</i> par <i>Sol_racinaire</i></p> <p>Enregistrer le fichier.</p> <p>Cliquer sur <i>Import from Excel</i>.</p> <p>Sélectionner le fichier précédemment enregistré.</p> <p>Cliquer sur <i>Ouvrir</i>.</p> <p>Vérifier que chaque ligne contient une flèche verte circulaire<sup>1</sup>.</p> <p>Cliquer sur <i>OK</i>.</p> <p>Sélectionner <i>Sol_racinaire</i> dans la liste déroulante <i>Sub_system</i> du panneau <i>General_Variables</i>.</p>	<p>Une fenêtre s'ouvre pour enregistrer les données dans un fichier Excel.</p> <p>Une fenêtre s'ouvre pour sélectionner le fichier d'importation.</p> <p>Une nouvelle fenêtre s'ouvre avec la liste des données d'entrée pouvant être importées.</p> <p>Les mêmes valeurs d'options de calcul que celles du module <i>Sol_superficiel</i> sont maintenant affectées au module <i>Sol_racinaire</i>.</p>

<sup>1</sup> : si à la place des flèches vertes circulaires, il y a des signes « + », vérifier que la première partie du nom des données dans les colonnes *Callname* et *Selected* du fichier Excel a été orthographiée de manière identique au module dans lequel l'utilisateur veut importer des données.

Tableau 13 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les données variables dans le temps	<p>Dans le panneau de commandes <i>Lookuptables</i>, sélectionner le module <i>Sol_superficiel</i> grâce à la liste déroulante <i>Sub_system</i> et renseigner selon les données de l'énoncé :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Recharge en eau</i>,</li> <li>▪ <i>Teneur en eau de sol</i>.</li> </ul> <p>Exporter ces deux données dans un fichier Excel (sélectionner les données avec la souris en maintenant la touche <i>Ctrl</i> enfoncée).</p> <p>Ouvrir ce fichier, remplacer <i>Sol_superficiel</i> par <i>Sol_racinaire</i> dans la colonne E intitulée <i>Callname</i>.</p> <p>Importer les données du fichier.</p> <p>Remplacer <i>Sol_racinaire</i> par <i>Tubercules</i> dans la colonne E du fichier Excel.</p> <p>Importer les données du fichier.</p> <p>Décocher la ligne relative à la <i>Recharge en eau</i> dans la fenêtre <i>Import parameters</i> (cf. Figure 13) et cliquer sur <i>OK</i></p>	<p>La fenêtre <i>Import parameters</i> montre une croix verte sur la ligne relative à <i>Recharge en eau</i>, car la recharge en eau n'est pas une donnée d'entrée du module <i>Tubercules</i>.</p>
Renseigner les données constantes dans le temps du module <i>Sol_superficiel</i>	<p>Dans le panneau de commandes <i>Parameters</i>, sélectionner le module <i>Sol_superficiel</i> grâce à la liste déroulante <i>Sub_system</i> et renseigner selon les données de l'énoncé :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <i>Concentration de bruit de fond dans le sol</i>,</li> <li>▪ <i>Concentration de polluant (hors bruit de fond) dans la couche considérée au temps <math>t=0</math></i>,</li> <li>▪ <i>Constante de Henry à température du sol de l'Indénopyrène</i>,</li> <li>▪ <i>Epaisseur de la couche de sol considérée</i>,</li> <li>▪ <i>Koc de l'indénopyrène</i>,</li> <li>▪ <i>logKd_E du plomb</i>,</li> <li>▪ <i>Porosité du sol</i>,</li> <li>▪ <i>Solubilité</i>,</li> <li>▪ <i>Teneur en carbone organique du sol</i>.</li> </ul>	

Tableau 13 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner les données constantes dans le temps du module <i>Sol_racinaire</i>	<p>Dans le module <i>Sol_superficiel</i>, sélectionner les données ci-dessus, à l'exception de <i>Concentration de polluant (hors bruit de fond) dans la couche considérée au temps t=0</i> et <i>Epaisseur de la couche de sol considérée</i>.</p> <p>Exporter les données sélectionnées dans un fichier Excel.</p> <p>Ouvrir ce fichier, remplacer <i>Sol_superficiel</i> par <i>Sol_racinaire</i> dans la colonne H intitulée <i>Callname</i>, enregistrer le fichier.</p> <p>Importer les données du fichier.</p> <p><i>Renseigner les paramètres : Concentration de polluant (hors bruit de fond) dans la couche considérée au temps t=0</i> et <i>Epaisseur de la couche de sol considérée</i> du module <i>Sol_racinaire</i> en fonction des données de l'énoncé.</p>	
Renseigner les données constantes dans le temps du module <i>Tubercules</i>	<p>Dans le fichier Excel précédent, remplacer, dans la colonne H, « <i>Sol_racinaire</i> » par « <i>Tubercules</i> ».</p> <p>Enregistrer cette nouvelle version du fichier.</p> <p>Importer les données de ce fichier en décochant la <i>Concentration de bruit de fond dans le sol (Cs_bf)</i> dans la fenêtre <i>Import parameters</i>.</p> <p>Renseigner les autres paramètres du module <i>Tubercules</i> en fonction des données de l'énoncé (<i>Br_E</i> du plomb, <i>logKow_E</i> de l'indénopyrène)</p>	

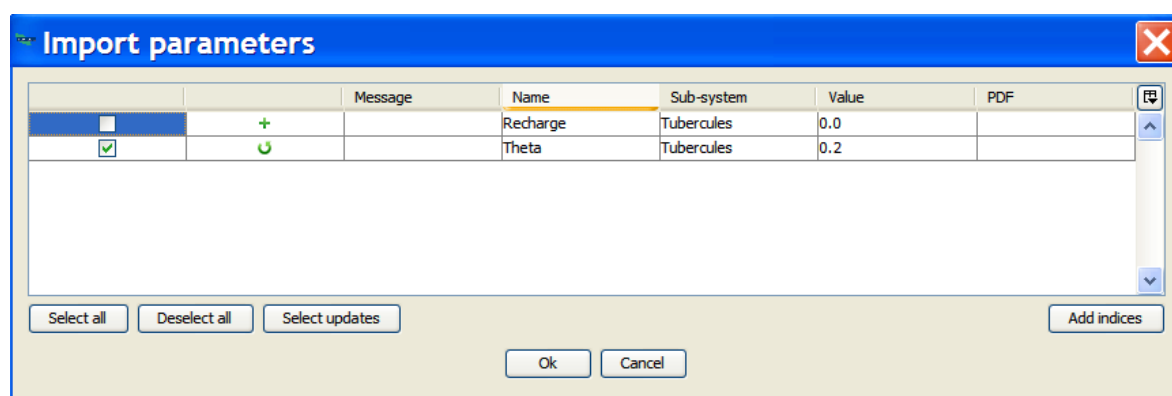


Figure 13 : Fenêtre *Import* des données du module *Sol\_superficiel* vers le module *Tubercules*

### 4.3 EXERCICE 3

#### Objectifs : Savoir

- ✓ Modifier les classes d'âge étudiées,
- ✓ Tester la sensibilité d'un paramètre en comparant les résultats obtenus avec plusieurs valeurs,
- ✓ Utiliser les fonctions *Export* et *Import* de la table de simulation multiple,
- ✓ Décliner un scénario d'exposition en x points d'une zone d'étude.

#### Questions

Dans le cadre du cas d'étude traité dans l'exercice 1 et en reprenant le fichier obtenu au terme de cet exercice,

1. calculer les niveaux de risque cancérigènes et non cancérigènes, quand les enfants de 1 à 2 ans ingèrent 40, 100 et 150 mg de sol par jour.
2. calculer le risque cancérigène en dix points de la zone d'étude, caractérisés par les dépôts totaux au sol suivants :

Tableau 14 : Dépôts totaux au sol de 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine en 11 points de la zone d'étude

Nom du point	Dépôt total au sol de 2,3,7,8 TCDD $\text{mg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
A	$5,50.10^{-13}$
B	$7,05.10^{-13}$
C	$9,16.10^{-13}$
D	$1,20.10^{-13}$
E	$1,58.10^{-13}$
F	$2,02.10^{-13}$
G	$2,45.10^{-13}$
H	$2,73.10^{-13}$
I	$2,75.10^{-13}$
J	$2,54.10^{-13}$
K	$2,19.10^{-13}$

### 4.3.1 CREATION D'UNE NOUVELLE CLASSE D'ÂGE

Par rapport aux données prédéfinies, il faut ici définir une classe d'âge supplémentaire. Le paramètre *Age minimal de chaque classe d'âge*, qui permet de définir jusqu'à 10 classes d'âge différentes, est en effet préfini pour 7 classes avec des enfants de 0-1 ans et de 1-3 ans. Il faut donc créer une classe des 1-2 ans et modifier la classe des 1-3 ans en classe des 2-3 ans. Les classes d'âge doivent être définies de manière croissante. L'introduction d'une classe d'âge supplémentaire nécessite donc de redéfinir les valeurs pour les classes allant de *classe\_2* à *classe\_8*.

Les autres paramètres d'exposition utilisés dans le modèle doivent aussi être redéfinis pour les 8 classes d'âge. Il s'agit de la :

- *Masse de particules de sol ingérée* dans le module *Sol*,
- *Masse de matières grasses correspondant au tissu 2 ingérée par jour par la cible* dans le module *Poule*,
- *Masse corporelle de la cible* dans le module *Sol*,
- *Masse corporelle de la cible* dans le module *Poule*.

Tous ces paramètres peuvent être modifiés manuellement ou en utilisant la fonction *Import from Excel*. Dans ce cas, il est préférable de créer d'abord, par la fonction *Export to*, un fichier Excel, dont la structure servira de modèle. Les valeurs du tableau seront utilisées pour renseigner les paramètres. Pour les autres classes d'âge, les valeurs prédéfinies seront réutilisées.

Tableau 15 : Valeurs des paramètres d'exposition à modifier

Classe d'âge	Masse corporelle (kg)	Masse de particules de sol ingérée (mg/j)	Masse de matières grasses correspondant au tissu 2 ingérée (kg/j)
1-2 ans	12,0	40	$1,31.10^{-3}$
2-3ans	14,0	40	$1,31.10^{-3}$

Le fichier Excel créé (cf. Tableau 16) sera ensuite réimporté dans le même module (les manipulations à effectuer sont détaillées dans le tutoriel 2).



Tableau 16 : Fichier Excel à importer pour modifier les paramètres d'exposition

Dependencies Classes_d'age	Properties Name	Value	Min	Max	Unit	Callname
Default	Age_min_classes	Infinity			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_1	Age_min_classes	0			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_10	Age_min_classes				year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_2	Age_min_classes	1			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_3	Age_min_classes	2			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_4	Age_min_classes	3			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_5	Age_min_classes	6			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_6	Age_min_classes	11			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_7	Age_min_classes	15			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_8	Age_min_classes	18			year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
classe_9	Age_min_classes				year	Constantes_Reglages.Age_min_classes
Default	Qs	0			mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_1	Qs	25		100	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_10	Qs				mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_2	Qs	40		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_3	Qs	40		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_4	Qs	40		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_5	Qs	40		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_6	Qs	0		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_7	Qs	0		150	mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_8	Qs				mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
classe_9	Qs				mg d <sup>-1</sup>	Sol.Qs
Default	Bw	0			kg	Sol.Bw
classe_1	Bw	7,6	5,22	8,67	kg	Sol.Bw
classe_10	Bw				kg	Sol.Bw
classe_2	Bw	12	9,28	14,7	kg	Sol.Bw
classe_3	Bw	14	12,9	20,8	kg	Sol.Bw
classe_4	Bw	17,8	19,6	34,5	kg	Sol.Bw
classe_5	Bw	28,7	32,1	58	kg	Sol.Bw
classe_6	Bw	47,2	43,6	71,8	kg	Sol.Bw
classe_7	Bw	60	46,7	99,5	kg	Sol.Bw
classe_8	Bw	69,8			kg	Sol.Bw
classe_9	Bw				kg	Sol.Bw
Default	Bw	0			kg	Poule.Bw
classe_1	Bw	7,6	5,22	8,67	kg	Poule.Bw
classe_10	Bw				kg	Poule.Bw
classe_2	Bw	12	9,28	14,7	kg	Poule.Bw
classe_3	Bw	14	12,9	20,8	kg	Poule.Bw
classe_4	Bw	17,8	19,6	34,5	kg	Poule.Bw
classe_5	Bw	28,7	32,1	58	kg	Poule.Bw
classe_6	Bw	47,2	43,6	71,8	kg	Poule.Bw
classe_7	Bw	60	46,7	99,5	kg	Poule.Bw
classe_8	Bw	69,8			kg	Poule.Bw
classe_9	Bw				kg	Poule.Bw
Default	Qanim2_mg	0			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_1	Qanim2_mg	0,000256			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_10	Qanim2_mg				kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_2	Qanim2_mg	0,00131			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_3	Qanim2_mg	0,00131			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_4	Qanim2_mg	0,0013			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_5	Qanim2_mg	0,0013			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_6	Qanim2_mg	0,00128			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_7	Qanim2_mg	0,00134			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_8	Qanim2_mg	0,00191			kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg
classe_9	Qanim2_mg				kg d <sup>-1</sup>	Poule.Qanim2_mg

### 4.3.2 COMPARER LES NIVEAUX DE RISQUE EN FAISANT VARIER LA VALEUR D'UN PARAMETRE LORS D'UNE SIMULATION MULTIPLE

Pour comparer dans une même simulation, l'impact des variations d'un paramètre, il faut effectuer une simulation multiple et définir une table de simulation multiple. **Seul l'impact des variations de données constantes dans le temps** (celles de la rubrique *Parameters*) **peut être testé dans ces simulations multiples.**

#### Cas de la quantité de sol ingérée par les enfants de 1 à 2 ans

Le tableau suivant décrit les étapes pour estimer l'impact sur les niveaux de risque chronique de différentes valeurs de quantités de sol ingérées par les enfants de 1 à 2 ans.

Tableau 17 : Etapes de réalisation d'une simulation multiple

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Renseigner la table de simulation multiple	<p>Cliquer sur <i>Simulation Table settings</i> dans le panneau de commandes <i>Simulation</i>.</p> <p>Cliquer sur <i>Add parameter</i>.</p> <p>Sélectionner <i>Qs[classe_2]_Sol (Masse de particules de sol ingérées par jour issues de ce sol pour la classe d'âge 2)</i> dans la liste déroulante.</p> <p>Cliquer sur <i>OK</i>.</p> <p>Mettre respectivement dans les lignes 0, 1 et 2 les différentes valeurs de quantité de sol ingérée par jour à tester.</p> <p>Cliquer sur <i>OK</i>.</p>	<p>Une fenêtre s'ouvre pour sélectionner les paramètres à faire varier, définir le nombre d'itérations de calcul et les valeurs des paramètres pour ces différentes itérations.</p> <p>Les paramètres apparaissent avec leur nom court*.</p> <p>Une colonne intitulée <i>Sol.Qs[classe_2]</i> se crée dans le tableau.</p>
Lancer la simulation multiple	<p>Sélectionner le bouton <i>Simulation Table</i> dans le panneau de commandes <i>Simulation</i>.</p> <p>Cliquer sur la flèche bleue ou sur le bouton <i>Run</i> du panneau <i>Simulation</i>.</p>	Les calculs démarrent
Consulter les tableaux de résultats	<p>Une fois, la simulation terminée, sélectionner les grandeurs <i>QD_ing</i> (Quotient de danger lié à l'ingestion) et <i>ERI_ing</i> (<i>ERI par ingestion lié aux différents vecteurs d'exposition</i>) relatives à la classe d'âge 2 (<i>[classe_2]</i>) dans la liste de résultats du panneau de commandes <i>Result tables</i>.</p> <p>Pour voir les résultats des 3 itérations, faire un clic droit sur le tableau et sélectionner <i>Create puis Raw data table</i>.</p> <p>Pour voir les résultats à une autre date, éditer la table (faire clic droit) et modifier la valeur de <i>Time-point</i> donné en années.</p>	<p>La fenêtre de droite affiche les résultats des deux grandeurs en fonction du temps. Il s'agit de la moyenne des 3 simulations réalisées.</p> <p>Un tableau avec les résultats des 3 itérations à 30 ans est créé (cf. Figure 15).</p>

Tableau 17 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Consulter les graphiques de résultats	<p>Sélectionner la grandeur <i>QD_ing</i> (Quotient de danger lié à l'ingestion) relative à la classe d'âge 2 (<i>[classe_2]</i>) dans la liste de résultats du panneau de commandes <i>Result tables</i>.</p> <p>Pour voir les résultats des 3 simulations, faire un clic droit sur le graphe, puis sélectionner <i>Edit</i>.</p> <p>Sélectionner l'onglet <i>Data</i>.</p> <p>Décocher la case <i>Mean</i> et cocher <i>Iteration</i> et <i>All</i>.</p> <p>Pour visualiser l'ERI, sélectionner la grandeur correspondante dans la liste de résultats et effectuer les mêmes manipulations.</p>	<p>La fenêtre de droite affiche le graphe du quotient de danger en fonction du temps. Il s'agit de la moyenne des 3 simulations réalisées.</p> <p>Une fenêtre d'édition s'ouvre.</p> <p>3 courbes apparaissent sur le graphe (cf. Figure 16).</p>

\*: les fenêtres d'information des paramètres donnent le nom court des données d'entrée dans la rubrique *Name* et le nom long dans la rubrique *Full Name*. En cliquant sur le bouton *Show glossary* du panneau de commandes *Context*, il est possible d'accéder à un fichier Excel référençant toutes les grandeurs de tous les modules, avec leur nom court, leur nom long, le module auquel elles appartiennent, leur description et leur symbole éventuel.

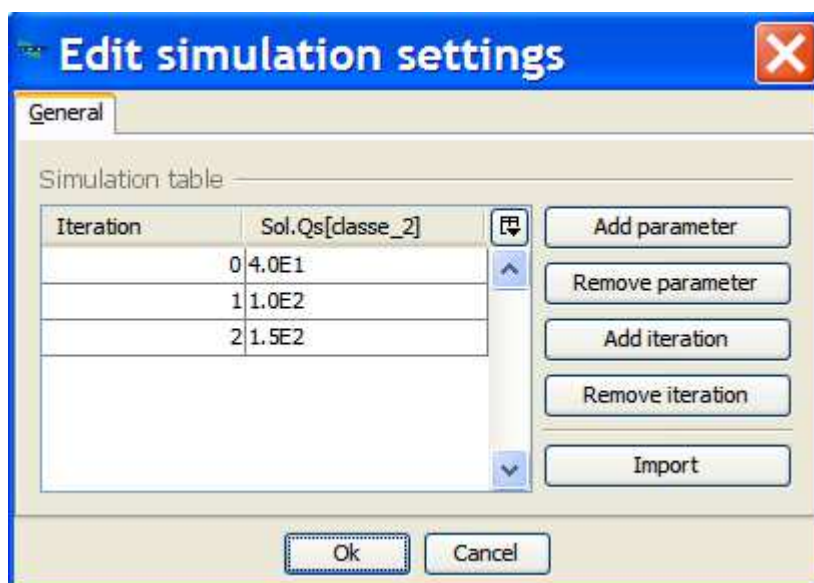


Figure 14 : Fenêtre de définition des paramètres à tester dans la simulation multiple

Remarque : Lorsqu'une simulation multiple (*Simulation Table*) est lancée, pour les paramètres ajoutés dans la table *Simulation Table Settings...*, seules les valeurs présentes dans la table sont prises en compte dans la simulation. Autrement dit, la valeur attribuée à ces paramètres et visible dans le panneau de commandes *Parameters* n'est pas utilisée.

Tables		
Quick View Raw data table		
Iteration	ERI_ing[2378_Tétrachlorodibenzodioxine] (unitless) at 30.0 year	QD_ing[2378_Tétrachlorodibenzodioxine][classe_2] (unitless) at 30.0 year
1	5,7487E-5	9,5506E-1
2	5,7513E-5	9,9017E-1
3	5,7534E-5	1,0194E0

Figure 15 : Tableau des niveaux de risque à 30 ans pour 3 quantités de sol différentes ingérées par les enfants de 1 à 2 ans

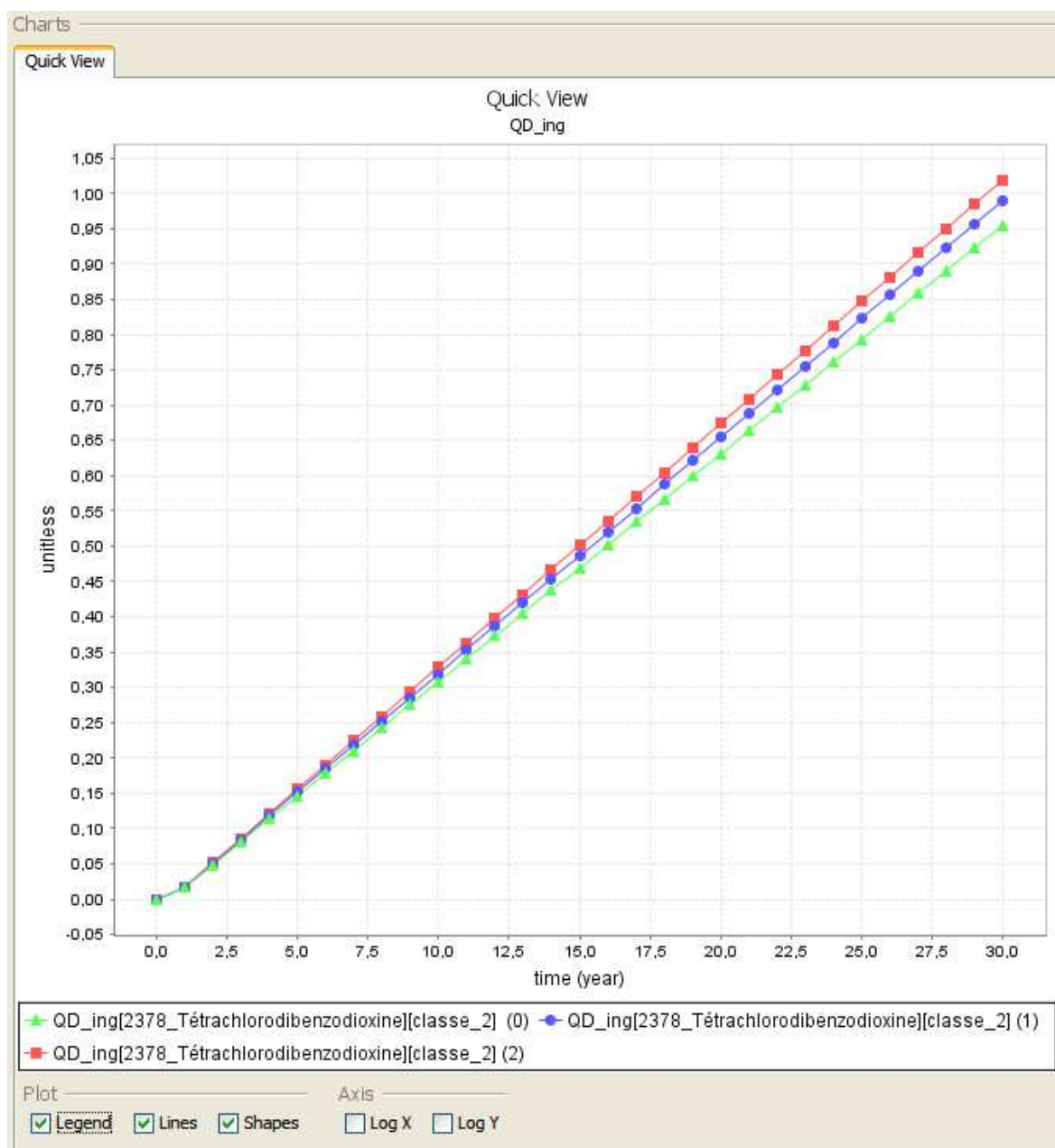


Figure 16 : Graphique du quotient de danger des enfants âgés de 1 à 2 ans pour 3 quantités de sol différentes ingérées par jour

## Cas du dépôt total au sol

Comme dans l'exemple précédent, il faut définir une table de simulation et effectuer une simulation multiple. Toutefois, la donnée d'entrée permettant de définir le dépôt total au sol (*Depot total sur le sol (hors bruit de fond)* dans le module *Sol*) est une donnée variable dans le temps (*Lookup tables*). Il n'est pas possible de définir directement une table de simulation pour cette donnée, puisque que seules les données constantes dans le temps (*Parameters*) peuvent être sélectionnées dans les tables de simulation multiple. On va donc faire appel à une donnée de type constant du module *Par\_Envir*: *Depot total (Parameter) (hors bruit de fond)* que l'on va connecter à la donnée variable *Depot total sur le sol (hors bruit de fond)* du module *Sol*. Le paramètre *Depot total (Parameter) (hors bruit de fond)* du module *Par\_Envir* sera ensuite ajouté à la table de simulation multiple avec les dix valeurs du Tableau 14.

Tableau 18 : Etapes pour la déclinaison d'un scénario en x points d'une zone d'étude caractérisés par des dépôts différents

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Connecter la variable <i>Dépôt total sur le sol (hors bruit de fond)</i> du module <i>Sol</i> à un paramètre auxiliaire	Introduire un module <i>Par_Envir</i> dans la matrice. Connecter le paramètre <i>Depot total (Parameter) (hors bruit de fond)</i> du module <i>Par_Envir</i> à la variable <i>Depot total sur le sol (hors bruit de fond)</i> du module <i>Sol</i> .	
Définir la table de simulation multiple	Cliquer sur <i>Simulation Table settings</i> dans le panneau de commandes <i>Simulation</i> . Dans la fenêtre d'édition, supprimer la colonne <i>Qs[classe_2]_Sol</i> en sélectionnant une des cases de la colonne et en cliquant sur <i>Remove parameter*</i> . Ajouter le paramètre <i>Depot_total_Parameter [2378_Tetrachlorodibenzodioxine]-Par_envir</i> , à la table de simulation.  Renseigner la ligne de la simulation 0 avec le dépôt au point A. Exporter la table de simulation dans un fichier Excel en cliquant sur le bouton <i>Export</i> . Dans le fichier Excel, ajouter des lignes pour les itérations supplémentaires et entrer les valeurs de dépôts totaux dans les lignes supplémentaires, telles que données dans l'énoncé. Enregistrer le fichier Excel modifié. Cliquer sur le bouton <i>Import de Simulation Table settings...</i> et sélectionner le fichier modifié.	Une colonne portant l'intitulé <i>Par_Envir.Depot_Parameter [2378_Tetrachlorodibenzo dioxine]</i> est créée.          La table de simulation comporte alors dix lignes avec des itérations numérotées de 0 à 9 et une valeur de dépôt correspondant à chaque itération.

\* On peut définir une table de simulation avec autant de paramètres que l'on veut, mais pour la clarté de l'exercice, la simulation multiple sera menée en ne faisant varier qu'un seul paramètre.

## 4.4 EXERCICE 4

**Objectifs :** Savoir

- ✓ Effectuer une simulation de type Monte-Carlo,
- ✓ Rechercher le profil d'individus le plus exposé.

### Question

En reprenant le fichier obtenu au terme de l'exercice 1, calculer l'excès de risque maximal pour ce cas d'étude.

#### 4.4.1 NOTION DE PROFIL D'INDIVIDUS

Le niveau de risque sans seuil d'effet est calculé pour un profil d'individus que l'utilisateur définit grâce aux paramètres *Age de l'individu au début de l'exposition* et *Date de début d'exposition de l'individu* du module *Constantes\_Reglages*. Les niveaux d'exposition calculés pour ce profil d'individus au temps  $t$  (variables dont le nom se terminent par *\_individu*) dépendent des concentrations dans les milieux au temps  $t$  et de la valeur des paramètres d'exposition, qui dépendent eux-mêmes de l'âge de l'individu au temps  $t$ .

Par défaut, la valeur de ces deux paramètres est égale à 0. Mais, ces valeurs ne correspondent pas nécessairement aux conditions d'exposition les plus défavorables. Par exemple, dans le cas d'une exposition de 30 ans, ce ne sont vraisemblablement pas les individus qui naissent au début du fonctionnement d'une installation industrielle émettant des polluants dans les milieux qui auront l'exposition cumulée sur la vie entière la plus élevée. La recherche des conditions d'exposition les plus défavorables pouvant parfois être difficile, MODUL'ERS permet de rechercher le profil d'individus (c'est-à-dire les valeurs des paramètres *Age de l'individu au début de l'exposition* et *Date de début d'exposition de l'individu* qui maximiseront l'excès de risque individuel (ERI)).

Cette recherche est basée sur l'utilisation de simulations probabilistes.

#### 4.4.2 DONNEES D'ENTREE PREDEFINIES PAR DES DISTRIBUTIONS STATISTIQUES

Seules les données d'entrée constantes dans le temps (Parameters) peuvent être définies par des distributions statistiques.

Des distributions statistiques ont été prédéfinies pour quelques-uns des paramètres des modules de la bibliothèque (*Age de l'individu au début de l'exposition*, *Date du début d'exposition de l'individu*, des coefficients de partage particules\_eau du sol des métaux (*log\_Kd\_E*) et quelques coefficients de transfert).

Les distributions statistiques sont visibles dans la colonne *PDF* des fenêtres d'informations des paramètres. Elles sont éditables en cliquant sur la case correspondante.

#### 4.4.3 PRINCIPE DE LA RECHERCHE DU PROFIL D'INDIVIDUS LE PLUS EXPOSE

Il s'agit d'explorer toutes les conditions d'exposition par une simulation de type probabiliste. Pour cela :

- une distribution uniforme discrète allant de 0 à 30 ans a été prédéfinie pour le paramètre *Date du début d'exposition de l'individu*, la durée de fonctionnement d'une installation prise en compte dans les études étant classiquement de 30 ans.

Il convient de noter que si l'on veut étudier 30 années de fonctionnement de l'installation et prendre en compte une exposition de x années, la simulation devra être menée sur (30 + x) années ;

- une distribution uniforme discrète allant de 0 à 18 ans a été prédéfinie pour le paramètre *Age de l'individu au début de l'exposition*. Au cours du temps, le profil d'individus étudié est supposé « traverser les différentes classes d'âge » (définies par l'utilisateur dans le paramètre *Age minimal de chaque classe d'âge*) et emprunter les valeurs des paramètres d'exposition des différentes classes d'âge. La classe d'âge la plus élevée commençant à 18 ans d'après les valeurs prédéfinies, les valeurs des paramètres d'exposition du profil d'individu étudiés ne sont pas supposés évolués au-delà.

Si l'utilisateur modifie l'âge minimal de la dernière classe d'âge, la borne de cette distribution doit être réajustée pour rester égale à cette valeur.

##### 4.4.3.1 DEFINIR LES CONDITIONS DE LA SIMULATION PROBABILISTE

Avant de lancer une simulation probabiliste, il faut d'abord définir les conditions de simulation et en particulier sélectionner les paramètres à faire varier au cours des simulations et leurs éventuelles corrélations. Les deux paramètres dont les distributions ont été décrites ci-dessus sont les seuls paramètres à faire varier pour la recherche du profil d'exposition le plus défavorable. Aucune corrélation n'est à prendre en compte dans ce cas.

Pour rechercher la combinaison de valeurs des deux paramètres correspondant aux conditions d'exposition les plus défavorables, le nombre d'itérations nécessaire n'est pas forcément très élevé (une tendance sur les valeurs maximisant l'exposition peut parfois suffire). Ce nombre est à définir en fonction du temps de calcul nécessaire, donc de la complexité du modèle, combinée aux performances de l'ordinateur utilisé.

D'une manière générale, pour éviter les problèmes de mémoire lors de simulations probabilistes, le paramétrage des données de sortie à afficher peut être réduit (les dates d'affichage des variables et éventuellement, avec certaines précautions, le nombre de variables). **Avant de réduire le nombre d'éléments de sortie, il est important de s'assurer que le modèle fonctionne correctement** (c'est-à-dire que des valeurs adéquates ont été affectées aux données d'entrée) **et pour cela de lancer une simulation ponctuelle** (*Best-estimate*), au terme de laquelle le message *Simulation finished* doit être affiché.



Tableau 19 : Etapes de préparation de la simulation probabiliste

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Définir les conditions de la simulation probabiliste	<p>Cliquer sur le bouton <i>Probabilistic Settings...</i> dans le panneau <i>Simulation</i>.</p> <p>Entrer 500 dans la case <i>Number of simulations</i> de l'onglet <i>General</i>.</p> <p>Sélectionner l'onglet <i>Parameters</i>.</p> <p>Sélectionner <i>Age de l'individu au début de l'exposition</i> et <i>Date de début d'exposition de l'individu</i> dans la liste déroulante.</p> <p>Cliquer sur &gt;.</p> <p>Cliquer sur OK.</p> <p>Dans la fenêtre <i>Basic settings</i> du panneau <i>Simulation</i>, remplacer 30 par 60 dans la case <i>End time</i>, spécifiant la date de fin de simulation</p>	<p>Une fenêtre d'édition s'ouvre.</p> <p>Les deux paramètres sont transférés dans la colonne <i>Selected</i>.</p>
Réduire le nombre de données de sorties à afficher et la fréquence d'affichage	<p>Tester le bon fonctionnement du modèle en cliquant sur la flèche bleue dans le panneau <i>Simulation</i>.</p> <p>Cliquer sur le bouton <i>Simulation Settings...</i> dans le panneau <i>Simulation</i>.</p> <p>Sélectionner l'onglet <i>General</i>.</p> <p>Sélectionner <i>Linear Increment (start, end, 1.0)</i></p> <p>Cliquer sur <i>Remove</i>.</p> <p>Cliquer sur <i>Add</i>.</p> <p>Sélectionner <i>Custom</i> dans la ligne <i>Type</i> et entrer 60 dans la ligne <i>Time points</i>.</p> <p>Cliquer sur OK.</p>	<p>Les calculs sont lancés et la durée de la simulation s'affiche dans la fenêtre <i>Information</i> à la fin des calculs.</p> <p>Une fenêtre d'édition s'ouvre.</p> <p>La ligne <i>Linear Increment (start, end, 1.0)</i>, permettant d'obtenir les données de sortie par pas de temps de 1 an, disparaît.</p> <p>La ligne <i>Custom : 60.0</i> apparaît dans la fenêtre d'édition, signifiant que les données de sortie seront données uniquement à t=60 ans*.</p>

\*: l'excès de risque étant basé sur l'exposition cumulée des individus, il est donné par MODUL'ERS à la date de fin de simulation.

Tableau 19 (suite)

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Réduire le nombre de données de sorties à afficher et la fréquence d'affichage	<p>Sélectionner l'onglet <i>Outputs</i>.</p> <p>Dans la colonne de droite intitulée <i>Selected Outputs</i>, sélectionner tous les modules sauf <i>Constantes_Reglages</i><sup>\$</sup> (pour plus de facilité, « replier » éventuellement les modules en cliquant sur le signe – devant leurs noms).</p> <p>Cliquer &lt;.</p> <p>Dans la colonne de gauche intitulée <i>Available outputs</i>, « déplier » le module <i>Niveaux_Exposition_Risque</i> en cliquant sur le signe + devant le nom du module.</p> <p>Sélectionner <i>ERI lié à l'ingestion et à l'inhalation</i> ou <i>ERI lié à l'ingestion par les différents vecteurs d'exposition et Event_fin_simulation</i>.</p> <p>Cliquer sur &gt;.</p> <p>Cliquer sur OK.</p>	<p>Une fenêtre d'édition s'ouvre.</p> <p>Les modules sélectionnés passent dans la colonne de gauche.</p> <p>La donnée de sortie sélectionnée passe dans la colonne de droite.</p>
Lancer la simulation probabiliste	<p>Sélectionner le bouton <i>Probabilistic</i> du panneau de commandes <i>Simulation</i> ;</p> <p>Cliquer sur la flèche bleue ou sur le bouton <i>Run</i>.</p>	

**\$ : la présélection des données de sortie du module *Constantes\_Reglages* doit toujours être conservée, ainsi que tous les données de sortie commençant par *Event*.**

#### 4.4.3.2 EXPLOITER LES RESULTATS DE LA SIMULATION POUR TROUVER LE PROFIL D'INDIVIDUS AVEC L'ERI MAXIMAL

Il existe différentes manières de rechercher les valeurs des deux paramètres *Age minimal de chaque classe d'âge* et *Date du début d'exposition de l'individu* qui vont maximiser l'ERI. On peut utiliser par exemple la table de corrélation (*Correlation Table*) et le graphique de type Tornado (*Tornado chart*) avec l'indicateur de sensibilité adéquat. Mais l'approche la plus simple consiste à éditer un tableau donnant les valeurs d'ERI calculées en fonction de ces deux paramètres pour toutes les itérations de calcul.

Tableau 20 : Etapes d'édition du tableau de résultat

Liste des étapes	Actions de l'utilisateur	Evolution de l'interface
Créer le tableau des de résultats obtenus pour toutes les itérations	<p>Sélectionner <i>ERI_ing</i> (nom court du paramètre <i>ERI</i> lié à l'ingestion par les différents vecteurs d'exposition) ou <i>ERI_tot</i> (nom court du paramètre <i>ERI</i> lié à l'ingestion et à l'inhalation) dans la liste des résultats du panneau de commandes <i>Result tables</i>.</p> <p>Dans la fenêtre de droite, faire un clic droit et sélectionner <i>Create</i>, puis <i>Raw data table</i>.</p>	La fenêtre de droite affiche les ERI calculés lors de chaque itération.
Trouver l'ERI maximal et les valeurs correspondantes des paramètres dont les distributions statistiques ont été prises en compte dans la simulation	<p>Faire un clic droit sur la fenêtre de résultats et sélectionner <i>Edit</i>.</p> <p>Cliquer deux fois sur le bouton <i>Add column</i> pour ajouter deux colonnes au tableau.</p> <p>Cliquer sur une des deux colonnes.</p> <p>Sélectionner <i>Constantes_Reglages.Age_individu_debut_expo</i> dans la liste déroulante <i>Output</i>.</p> <p>Entrer 60 dans la case <i>Time_point</i>.</p> <p>Cliquer sur la colonne vide restante.</p> <p>Sélectionner <i>Constantes_Reglages.Date_debut_expo_in dividu</i> dans la liste déroulante <i>Output</i>.</p> <p>Entrer 60 dans la case <i>Time_point</i>.</p> <p>Cliquer sur <i>OK</i>.</p> <p>Pour visualiser l'ERI maximal et les valeurs correspondantes des paramètres, cliquer sur l'intitulé de la colonne de l'ERI du tableau <i>Raw data table</i>.</p>	<p>Une fenêtre d'édition se crée</p> <p>Deux colonnes vides apparaissent dans le tableau.</p> <p>Le tableau comporte maintenant 3 colonnes et donne pour chaque itération de calcul les valeurs tirées au sort des 2 paramètres et l'ERI calculé correspondant</p> <p>Les itérations sont triées par ordre croissant ou décroissant d'ERI.</p>

Tables			
Quick View Raw data table			
Iteration	ERI_tot[2378_Tétrachlorodibenzodioxine] (unitless) at 60.0 year	Date_debut_expo_individu (year)	Age_individu_debut_expo (year)
187	2,0856E-4	3,0000E1	0,0000E0
232	2,0856E-4	3,0000E1	0,0000E0
240	2,0856E-4	3,0000E1	0,0000E0
92	2,0583E-4	3,0000E1	1,0000E0
56	1,9492E-4	2,8000E1	1,0000E0
341	1,9438E-4	3,0000E1	2,0000E0
394	1,8878E-4	2,9000E1	2,0000E0
499	1,8754E-4	2,6000E1	0,0000E0
282	1,8496E-4	2,6000E1	1,0000E0
71	1,8414E-4	2,8000E1	2,0000E0
313	1,8414E-4	2,8000E1	2,0000E0
328	1,8414E-4	2,8000E1	2,0000E0
41	1,8327E-4	3,0000E1	3,0000E0
88	1,8327E-4	3,0000E1	3,0000E0
174	1,7999E-4	2,5000E1	1,0000E0
367	1,7999E-4	2,5000E1	1,0000E0
48	1,7800E-4	2,9000E1	3,0000E0
217	1,7656E-4	3,0000E1	4,0000E0
411	1,7656E-4	3,0000E1	4,0000E0
124	1,7485E-4	2,6000E1	2,0000E0

Figure 17 : Illustration du tableau de résultats obtenus

Dans cet exercice, les valeurs maximisant l'ERI sont bien « 0 » pour le paramètre *Age minimal de chaque classe d'âge* et « 30 » pour le paramètre *Date du début d'exposition de l'individu*. Ces résultats sont conformes à ce que l'on pouvait attendre pour ce cas d'étude, puisqu'en l'absence de la prise en compte de tous phénomènes d'atténuation, les concentrations dans les milieux augmentent du début jusqu'à la fin du fonctionnement de l'installation.

#### 4.5 SCHEMA DE PRINCIPE POUR L'UTILISATION DE MODUL'ERS

Le schéma suivant résume les principales étapes à dérouler pour mettre en œuvre MODUL'ERS dans le cadre d'une étude d'analyse des effets sur la santé d'une ICPE ou d'une Analyse de Risques Résiduels d'un site pollué. Il rappelle également les principaux conseils d'utilisation et les éléments d'aide directement disponibles dans l'outil.

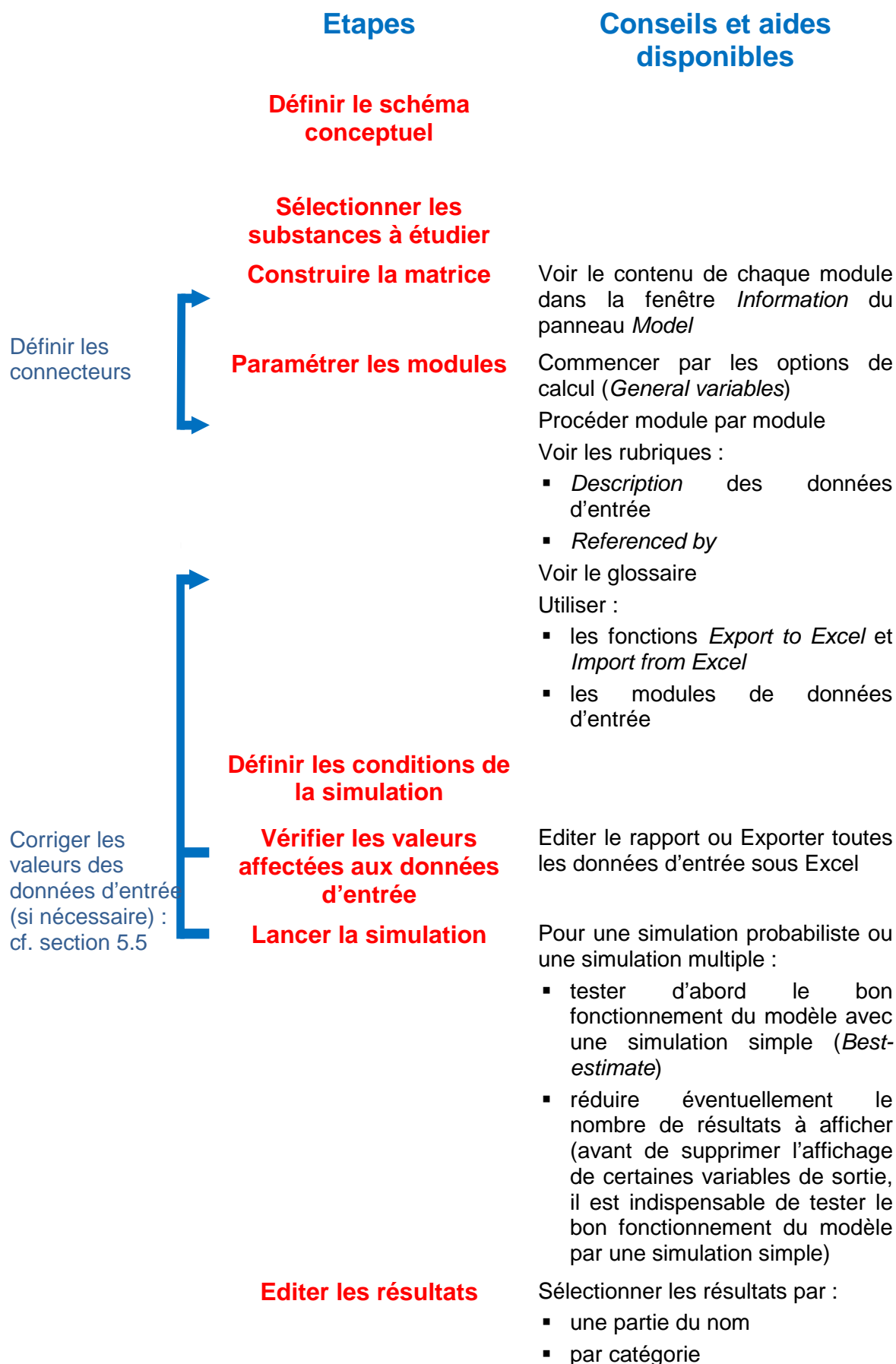


Figure 18 : Schéma de principe pour l'utilisation de MODUL'ERS

## 5. INFORMATIONS COMPLEMENTAIRES

### 5.1 PRESENTATION DETAILLEE DE L'INTERFACE

Les commandes et les informations disponibles dans chacun des petits panneaux présents à gauche de l'interface de MODUL'ERS sont présentées ci-dessous.

#### 5.1.1 *CONTEXT*

##### **Commandes**

- *New* : Création d'un nouveau modèle.
- *Open* : Ouverture d'un modèle existant.
- *Save* ou *Save as* : Sauvegarde d'un modèle.
- *Save assessment* : Sauvegarde d'un modèle et des résultats de la simulation.
- *Add* : ajout éventuel de nouvelles substances par l'utilisateur.
- *Preferences* : Définition des préférences d'affichage (exemples : délai avant l'apparition des bulles d'information, choix d'une échelle logarithmique pour les graphes,...).
- *Show glossary* : Ouverture d'un glossaire au format Excel regroupant toutes les grandeurs présentes dans la bibliothèque du logiciel, avec leurs noms et leur description.

##### **Fenêtres**

- *Info* : Nom de l'auteur de l'étude.  
Numéro de la version du modèle de base (correspondant au module Constantes\_Reglages).
- *Contaminants* : Liste des substances prédéfinies et sélection des substances à étudier.

## 5.1.2 MODEL

### Commandes

- *Manage library...* puis *Import* : Importation d'une nouvelle version de bibliothèque à partir d'un fichier fourni par l'INERIS, portant l'extension .inl.
- *Auto-zoom* puis *Zoom In* ou *Zoom Out* : Zoom avant ou arrière dans la matrice.
- *Help Contents* : Accès à une aide en ligne de la société Facilia relative à ce panneau de commandes.

### Fenêtres

- *Model* : Représentation matricielle du modèle.
  - Clic droit sur une case vide de la diagonale, puis *Get from library...* pour insérer un nouveau module de la librairie.
  - Clic droit sur une case vide à l'intersection de la ligne du module A et de la colonne du module B pour insérer un connecteur allant de A à B.
  - Clic droit sur une case de la diagonale, puis *Insert Above* ou *Insert Below* pour créer des cases disponibles, supplémentaires dans la matrice.
  - Clic droit puis *Edit...* sur un élément de la matrice pour le consulter et/ou le modifier (permet de définir par exemple un connecteur créé par l'utilisateur ou de modifier un connecteur créé automatiquement).
  - Clic droit puis *Delete...* pour supprimer un élément de la matrice.
  - Clic droit puis *Auto-zoom* pour zoomer (*Zoom In*) ou dézoomer (*Zoom Out*) dans la matrice.
  - Clic sur le signe + d'un module pour « ouvrir » le module et voir une partie des grandeurs mathématiques qu'il contient.
- *Information* : Fournit toutes les informations disponibles sur l'élément sélectionné dans la matrice. Si l'élément sélectionné est :
  - un module, la fenêtre *Information* fournit la description du module, indique son contenu, les mécanismes de transfert pris en compte, les principaux résultats fournis, ainsi que toutes les grandeurs contenues par type.
  - un connecteur, la fenêtre *Information* indique le module source, le module de destination, les éléments connectés entre les deux modules.
  - une donnée d'un module, la fenêtre *Information* donne le nom court précédé du module d'appartenance, le nom long (*Full name*), le symbole éventuel correspondant (*Symbol*), la description (*Description*), le module d'appartenance (*Sub-system*), l'unité, la dimension (donnée adimensionnelle, donnée vectorielle dépendant des substances étudiées (*Materials*) et/ou des classes d'âge, donnée matricielle dépendant des substances étudiées et des classes d'âge), la liste des données dans le calcul desquelles elle intervient (*Referenced by*) et selon le type de donnée sélectionnée (donnée d'entrée ou donnée calculée), la ou les valeurs affectées à cette donnée, ou bien son expression mathématique et la liste des données qui interviennent dans cette expression mathématique.

Des liens hypertextes permettent d'accéder à toutes les données affichées dans cette fenêtre.



### 5.1.3 GENERAL VARIABLES

Ce panneau de commandes se rapporte aux options de calcul à définir par l'utilisateur.

#### Commandes

- *Export to Excel* : Exportation des données de type *General Variables* vers un fichier Excel (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).
- *Import from Excel* : Importation de données d'un fichier Excel vers MODUL'ERS (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).

#### Fenêtres

- *Options* : Liste des données d'entrée de type *General variables*.

La liste déroulante intitulée *Sub-system* permet de sélectionner les données par module.

- *Information* : Fournit les informations disponibles sur le premier élément de la colonne *Options* sélectionné. Pour cet élément, elle donne le nom court (*Name*), le symbole éventuellement utilisé dans les expressions mathématiques (*Symbol*), l'unité (*Unit*), le nom long (*Full name*), le module d'appartenance (*Sub-system*), la description (*Description*), les valeurs affectées à cette donnée.

Le bouton *Full* permet d'accéder à des informations complémentaires : la dimension (donnée adimensionnelle, donnée vectorielle dépendant des substances étudiées : *Materials* et/ou des classes d'âge, donnée matricielle dépendant des substances étudiées : *Materials* et classes d'âge), et la liste des données dans l'expression mathématique desquelles cet élément intervient (*Referenced by*).

Attention, si l'on sélectionne une des données listées sous *Referenced by*, les informations relatives à cette dernière donnée vont s'afficher dans la première partie de la fenêtre d'informations, grâce au lien hypertexte. En revanche, les valeurs affichées dans la seconde partie de la fenêtre d'informations restent celles de la donnée initialement sélectionnée dans la liste *Options*.

Le bouton *Brief* permet de revenir à la fenêtre d'informations initiale.

Pour chaque donnée de type *General variables*, l'utilisateur peut modifier la valeur dans la colonne intitulée *Expression* à l'aide de la liste déroulante.

La ligne *Default* apparaissant en bleu correspond à la valeur attribuée à toute substance pour laquelle aucune valeur particulière n'a été définie. En cas d'attribution d'une valeur particulière à une substance, la valeur apparaît alors en noir.

#### 5.1.4 LOOKUP TABLES

Ce panneau de commandes se rapporte aux données variables dans le temps à définir par l'utilisateur. Il ressemble à celui des *General variables*.

##### Commandes

- *Export to Excel* : Exportation des données de type *Lookup tables* vers un fichier Excel (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).
- *Import from Excel* : Importation de données d'un fichier Excel vers MODUL'ERS (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).

##### Fenêtres

- *Inputs* : Liste des données d'entrée de type *Lookup tables* (données d'entrée variables dans le temps).

La liste déroulante intitulée *Sub-system* permet de sélectionner les données par module.

- *Information* : Fournit les informations disponibles sur le premier élément de la colonne *Inputs* sélectionné. Pour cet élément, elle donne le nom court (*Name*), le symbole éventuellement utilisé dans les expressions mathématiques (*Symbol*), l'unité (*Unit*), le nom long (*Full name*), le module d'appartenance (*Sub-system*), la description (*Description*), le mode d'interpolation utilisé entre deux dates, la prise en compte ou non d'une approche cyclique, les valeurs affectées à cette donnée, un graphique représentant les valeurs prises par la donnée au cours du temps.

L'utilisateur a le choix entre cinq modes d'interpolation des données.

*Interpolation-Extrapolation* : entre deux dates définies par l'utilisateur, les valeurs de la donnée d'entrée sont estimées par interpolation linéaire. Les valeurs avant la première date et après la dernière date définies par l'utilisateur sont extrapolées de manière linéaire.

*Interpolation-Use End Values* : entre deux dates définies par l'utilisateur, les valeurs de la donnée d'entrée sont estimées par interpolation linéaire. La valeur de la dernière date définie par l'utilisateur est utilisée au-delà, jusqu'à la fin de la simulation.

*Use Input Nearest* : pour un temps  $t$ , la valeur définie par l'utilisateur à la date la plus proche de  $t$  est utilisée.

*Use Input Below* : les valeurs définies par l'utilisateur à une date sont utilisées à partir de cette date jusqu'à la date suivante.

*Use Input Above* : les valeurs définies par l'utilisateur à une date sont utilisées à partir de la date précédente jusqu'à cette date.

Comme pour le panneau *General variables*, le bouton *Full* permet d'accéder à des informations complémentaires : la dimension (donnée adimensionnelle, donnée vectorielle dépendant des substances étudiées : *Materials* et/ou des classes d'âge, donnée matricielle dépendant des substances étudiées et des classes d'âge), et la liste des données dans l'expression mathématique desquelles cet élément intervient (*Referenced by*).

Attention, si l'on sélectionne une des données listées sous *Referenced by*, les informations relatives à cette dernière donnée vont s'afficher dans la première partie de la fenêtre d'informations, grâce au lien hypertexte. En revanche, les valeurs affichées dans la seconde partie de la fenêtre d'informations restent celles de la donnée initialement sélectionnée dans la liste *Inputs*.

Le bouton *Brief* permet de revenir à la fenêtre d'informations initiale.

Les données de type *Lookup tables* dans les modules de la bibliothèque ne comportent qu'une valeur au temps  $t=0$ . L'utilisateur peut ajouter autant de lignes qu'il le souhaite (en entrant des données dans la colonne *Time (year)*), pour tenir compte des variations de la donnée au cours du temps. Certaines de ces données étant de type matriciel, la fenêtre affiche par défaut les valeurs relatives à la classe d'âge 1. Si des valeurs particulières doivent être attribuées aux autres classes d'âge, il convient d'utiliser la liste déroulante *Classes\_d'age* pour accéder aux données des autres classes d'âge. Les valeurs définies dans la colonne *-default-* s'applique à toutes les substances et toutes les classes d'âge pour lesquelles aucune valeur particulière n'a été définie par l'utilisateur.

### 5.1.5 PARAMETERS

Ce panneau se rapporte aux données constantes dans le temps, à définir par l'utilisateur.

#### Commandes

- *Export to Excel* : Exportation des données de type *Parameters* vers un fichier Excel (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).
- *Import from Excel* : Importation de données d'un fichier Excel vers MODUL'ERS (voir mode d'utilisation dans la section 4.2.2 – méthode 2).

#### Fenêtres

- *Parameters* : Liste des données d'entrée constantes dans le temps.  
La liste déroulante intitulée *Sub-system* permet de faire une sélection par module.
- *Information* : Fournit les informations disponibles sur le premier élément de la colonne *Parameters* sélectionné. Pour cet élément, elle donne le nom court (*Name*), le symbole éventuellement utilisé dans les expressions mathématiques (*Symbol*), l'unité (*Unit*), le nom long (*Full name*), le module d'appartenance (*Sub-system*), la description (*Description*), les valeurs (*Value*) et/ou distributions statistiques (*PDF*) affectées à cette donnée.

En cliquant sur une case de la colonne intitulée *PDF*, l'outil d'édition des distributions statistiques apparaît à l'écran. Il permet à l'utilisateur de définir une distribution statistique à l'aide de la liste déroulante *Distributions*.

Les boutons en haut à droite de la barre d'édition permettent de visualiser plusieurs types de représentations graphiques de cette distribution, d'obtenir des informations statistiques sur cette distribution, de calculer des valeurs et des percentiles relatifs à cette distribution et de lire la description du type de distribution sélectionnée.

La colonne *Probability Assessment* permet de sélectionner les données dont l'utilisateur veut prendre en compte les distributions statistiques dans une simulation probabiliste.

Les autres colonnes du tableau fournissent à l'utilisateur des informations sur les valeurs et distributions prédéfinies dans les modules (cf. section 5.2.2.2).

La ligne *Default* apparaissant en bleu correspond à la valeur et/ou distribution attribuée à toute substance ou classe d'âge pour laquelle aucune valeur ou distribution particulière n'a été définie. En cas d'attribution d'une valeur particulière à une substance, la valeur apparaît en noir.

## 5.1.6 SIMULATION

### Commandes

- *Run* : Lancement de la simulation.
- *Simulation Settings...*
  - Onglet *General* : Définition de la date de début et de fin de la simulation (*Start time* et *End time*), définition de la chronique des données de sortie. Par défaut, MODUL'ERS fournit des données de sortie uniquement aux temps indiqués dans la fenêtre *Times series* (option *Produce specified output only*), selon une chronique d'une fois par an, du début jusqu'à la fin de la simulation (sortie de type *Linear Increment*).

Les données de sortie peuvent être visualisées à des dates supplémentaires à l'aide du bouton *Add* ou à des dates différentes en sélectionnant *Linear Increment (start, end, 1.0)* et en cliquant sur *Edit* ou *Remove*.
  - Onglet *Outputs* : sélection des données de sortie à visualiser.

Remarque : accès au symbole, nom complet et description des données dans la colonne *Available outputs* en agrandissant la fenêtre ou en utilisant le curseur du bas de la fenêtre.
  - Onglet *Solver* : le solveur et les paramètres de calcul prédéfinis sont ceux qui sont apparus comme les plus polyvalents suite à une série de tests. **Ces éléments n'ont pas à être modifiés a priori<sup>6</sup>.**
- *Probabilistic settings...*
  - Onglet *General* : Définition du nombre d'itérations de calcul, initialisation du générateur de nombres aléatoires, définition du mode d'échantillonnage.
  - Onglet *Parameters* : Sélection des paramètres dont la distribution doit être utilisée pour la simulation probabiliste.
  - Onglet *Correlation* : définition des corrélations entre les paramètres retenus pour la simulation probabiliste.
- *Simulation table settings...* : Sélection des données de type *Parameters* pour lesquels l'utilisateur veut effectuer plusieurs itérations de calcul avec différentes valeurs, dans le cadre d'une simulation multiple.

Les boutons de la fenêtre d'édition permettent d'ajouter et d'enlever les paramètres à prendre en compte et d'ajouter ou d'enlever des itérations. Les valeurs peuvent alors être entrées manuellement dans la table ou bien être importées grâce au bouton *Import*, à partir d'un fichier Excel (cf. procédure dans la section 4.3.2).
- *Help Contents* : Accès à une aide en ligne de la société Facilia relative à ce panneau de commandes.

---

<sup>6</sup> Parfois, dans quelques cas (pouvant correspondre à un *Compartment* avec une valeur calculée inférieure à  $10^{-6}$ ), il peut néanmoins être intéressant d'augmenter la précision des calculs, en remplaçant le paramètre *Absolute tolerance* par une valeur inférieure à  $10^{-6}$  (telle que les valeurs calculées pour les *Compartments* ne soient pas inférieures à la valeur définie pour le paramètre *Absolute tolerance*).

Ce panneau de commandes comporte aussi un bouton *Sensitivity Analysis*. Différentes méthodes de calcul y sont proposées. Les résultats de la méthode probabiliste, la plus classiquement utilisée, peuvent également être obtenus en lançant une simulation probabiliste (bouton *Probabilistic settings...*).

### Fenêtres

A droite des onglets des panneaux de commandes, les dates de début (*Start time*) et fin (*End time*) de simulation, le type de simulation et le nombre d'itérations de calcul pour une simulation probabiliste peuvent être définis.

- *Information* : Fournit des informations sur la progression de la simulation et la durée des différentes étapes de calcul. Au terme de la simulation, le message *Simulation finished* apparaît, avec la durée totale de la simulation.

La simulation peut s'interrompre, car certaines données d'entrée ont des valeurs inappropriées. Cette fenêtre indique alors la donnée de sortie qui bloque le calcul. Il appartient alors à l'utilisateur de corriger les données d'entrée pour relancer et mener à son terme la simulation (cf. section 5.4).

- *Errors* : indique les données d'entrée pour lesquelles aucune valeur n'a été définie (case vide).

### 5.1.7 RESULT CHARTS

Pour une présentation détaillée des étapes de création des graphiques, voir les tutoriels des sections 4.1.4 et 4.3.2.

#### Commandes

- *Time Chart* : Création de graphiques représentant les variables de sortie sélectionnées en fonction du temps :
  - *Onglet Properties* : Edition du titre, du format et de l'échelle des coordonnées du graphique, inclusion d'une légende.
  - *Onglet Data* : Sélection des variables de sortie à représenter sur le graphique (*Outputs*) et du pas de temps des points de représentation sur le graphique.

La case à cocher *Include solver time vector* : permet d'obtenir les données de sortie sélectionnées selon la chronologie définie dans l'onglet *General* de la commande *Simulation settings* (panneau *Simulation*). Le bouton *Add* permet d'ajouter des points à des dates complémentaires sur le graphique.

Dans le cas d'une simulation multiple ou d'une simulation probabiliste, l'utilisateur peut choisir la représentation de la moyenne, de la médiane, des résultats d'une ou de plusieurs itérations de calcul ou bien celle de percentiles particuliers (simulation probabiliste).
- *Scatter Chart* : création de graphiques permettant de représenter une donnée de sortie en fonction d'une autre :
  - *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
  - *Onglet Data* : Sélection de la date et des variables de sortie à représenter sur le graphique.
- *Histogram* : création de graphiques permettant de représenter la fréquence de répartition des valeurs calculées pour les données de sortie sélectionnées, suite à une simulation probabiliste.
  - *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
  - *Onglet Data* : Sélection des variables de sortie et de la date à représenter sur le graphique, paramétrage de l'histogramme.
- *Tornado Chart* : représentation des résultats de l'analyse de sensibilité.
  - *Onglet Properties* : Edition du titre et inclusion d'une légende.
  - *Onglet Data* : Sélection de la variable de sortie dont la sensibilité est à analyser, des paramètres dont l'impact est à mesurer, de la date à laquelle la variable de sortie est à analyser et du type de coefficient à représenter.
- *Clone* : Création d'une copie du graphique sélectionné. Le nouveau graphique peut alors être édité et modifié. Cette commande permet de réaliser rapidement plusieurs graphiques sur le même modèle, pour différentes données de sortie.
- *Help Contents* : Accès à une aide en ligne de la société Facilia relative à ce panneau de commandes.



## Fenêtres

- *Results* : liste des données de sortie disponibles.
- *Search* :

La case *Name* permet de définir une suite de caractères et ainsi de sélectionner dans la liste des données de sortie, celles dont le nom court possède cette suite de caractères.

La liste déroulante *Index* permet de sélectionner les données de sortie de type scalaire (donnée à 0 dimension) ou un indice particulier d'une donnée de type vectorielle ou matricielle

La liste déroulante *Category* permet de sélectionner des résultats classiquement recherchés au terme d'une estimation des risques :

- ✓ concentrations dans les milieux (*Concentration*). Pour les concentrations variables dans le temps, il s'agit de la moyenne annuelle ;
- ✓ niveaux d'exposition (*Niveaux\_expo*). Il s'agit des niveaux d'exposition de chaque classe d'âge en moyenne annuelle (variable dont le nom se termine par *\_classe\_age\_moy\_an*), servant au calcul du quotient de danger et du niveau d'exposition intégré sur toute la durée de simulation et divisé par la durée d'exposition de l'individu (variable dont le nom se termine par *\_vie\_entiere*). Cette dernière variable sert au calcul de l'excès de risque individuel ;
- ✓ niveaux de risque (*Niveaux\_risque*). Il s'agit des quotients de danger par vecteur d'exposition, par voie d'exposition, par organe cible, donnés pour la classe d'âge la plus exposée (Variables dont le nom commence par *Max\_Age\_QD*), intégrant (variable avec le suffixe *\_cum*) ou non l'exposition hors site. Cette liste déroulante donne aussi les excès de risque individuel par vecteur et par voie d'exposition ;
- ✓ transfert (*Transfer*) : coefficients de transfert et transferts de masse des polluants (quantités de polluant transférées entre deux milieux ou compartiments par unité de temps).

La liste déroulante *Type* permet de sélectionner les données de sortie selon la nature de la fonction de calcul utilisée pour les obtenir.

- *Charts* : Par défaut, la fenêtre présente un graphique intitulé *Quick View*, permettant de représenter, en fonction du temps, les données de sortie sélectionnées dans la liste *Results*. Le graphique *Quick View* et ses copies ne sont pas intégrés dans le rapport défini par défaut.

En faisant un clic droit sur la fenêtre *Charts*, l'utilisateur retrouve les commandes pour créer, éditer et faire des copies des différents types de graphiques décrits ci-dessus.

Les commandes *clic droit + Export data...* ou *View data in Excel...* permettent d'exporter les données du graphique sous Excel, pour réaliser éventuellement d'autres traitements sur les données ou éditer des graphiques différents.

La commande *clic droit + Enregistrer sous...* permet d'enregistrer le graphique sélectionné sous format png. La commande *clic droit + Print* permet d'imprimer le graphique sélectionné

Les commandes *clic droit + Zoom avant...*, *Zoom arrière* ou *Echelle automatique* permettent de modifier l'échelle du graphique.

La commande *clic droit + Delete* permet de supprimer le graphique sélectionné.

Enfin, la présentation du graphique peut être modifiée à l'aide des cases à cocher sous le graphique. Elles permettent d'ajouter une légende, de faire apparaître ou disparaître les points correspondant aux dates d'affichage, de relier ou non ces points et d'utiliser une échelle logarithmique ou non.

### 5.1.8 RESULT TABLES

Pour une présentation détaillée des étapes de création des tableaux de résultats, voir les tutoriels des sections 4.1.4 et 4.3.2.

#### Commandes

- *Time Table* : Création de tableaux donnant les valeurs des variables de sortie sélectionnées en fonction du temps :
  - *Onglet Properties* : Edition du titre et de commentaires.
  - *Onglet Data* : Edition du titre des colonnes, ajout (*Add column*) et suppression de colonnes (*Remove column*), choix du format des valeurs (*Format*), choix du nombre de décimales (case *Digits*), sélection de la variable à incorporer dans la colonne sélectionnée (liste déroulante *Output*).  
La case à cocher *Include solver time vector* : permet d'obtenir les données de sortie sélectionnées selon la chronologie définie dans l'onglet *General* de la commande *Simulation settings* (panneau *Simulation*).  
Le bouton *Add* permet d'ajouter des dates d'affichage complémentaires.
- *Index Table* : création de tableau permettant d'afficher des valeurs particulières des données de sortie sélectionnées.
  - *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
  - *Onglet Data* : Edition du titre des colonnes, ajout (*Add column*) et suppression de colonnes (*Remove column*), choix du format des valeurs (*Format*), choix du nombre de décimales (case *Digits*), sélection de la variable à incorporer dans la colonne sélectionnée (liste déroulante *Output*).  
Affichage possible de la valeur des variables sélectionnées à une date donnée, de la valeur minimale ou maximale, de la date à laquelle la valeur minimale ou maximale est atteinte, de la moyenne, de l'écart-type ou de la valeur correspondant à un percentile spécifique.
- *Statistics* : création de tableaux de données statistiques relatives aux données de sortie sélectionnées lors d'une simulation multiple ou probabiliste :
  - *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
  - *Onglet Data* : Edition du titre des colonnes, ajout (*Add column*) et suppression de colonnes (*Remove column*), choix du format des valeurs (*Format*), choix du nombre de décimales (case *Digits*), sélection de la variable à incorporer dans la colonne sélectionnée (liste déroulante *Output*).
- *Raw Data table* : Création de tableaux donnant les valeurs prises par les données de sortie sélectionnées pour toutes les itérations de calcul lors d'une simulation multiple ou d'une simulation probabiliste :

- *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
- *Onglet Data* : Edition du titre des colonnes, ajout (*Add column*) et suppression de colonnes (*Remove column*), choix du format des valeurs (*Format*), choix du nombre de décimales (case *Digits*), sélection de la variable à incorporer dans la colonne sélectionnée (liste déroulante *Output*), date à laquelle les valeurs de la variable sélectionnée doivent être données.
- *Correlation Table* : Tableau donnant les résultats de l'analyse de sensibilité.
  - *Onglet Properties* : idem ci-dessus.
  - *Onglet Data* : Edition du titre des colonnes, sélection de la variable dont la sensibilité est à étudier (liste déroulante *Output*), sélection de la date à laquelle les résultats doivent être donnés (*Time-point*), type de coefficient à afficher (*Correlation*), transformation à effectuer sur les données (*Transformation*), sélection des paramètres dont l'impact est à mesurer, calcul du  $R^2$ , ajout (*Add column*) et suppression de colonnes (*Remove column*).
- *View in Excel...* : Exportation des données des tableaux sélectionnés dans un fichier Excel. Cette fonction permet de réaliser éventuellement d'autres traitements sur les données.
- *Clone* : Création d'une copie du tableau sélectionné. Le nouveau tableau peut alors être édité et modifié afin de réaliser rapidement plusieurs tableaux sur le même modèle, pour différentes données de sortie.
- *Help Contents* : Accès à une aide en ligne de la société Facilia relative à ce panneau de commandes.

## Fenêtres

- *Results* : liste des données de sortie disponibles.
- *Search*

La case *Name* permet de définir une suite de caractères et ainsi de sélectionner dans la liste des données de sortie, celles dont le nom court possède cette suite de caractères.

La liste déroulante *Index* permet de sélectionner les données de sortie de type scalaire (donnée à 0 dimension) ou un indice particulier d'une donnée de type vectorielle ou matricielle.

La liste déroulante *Category* permet de sélectionner des résultats classiquement recherchés au terme d'une estimation des risques :

- ✓ concentrations dans les milieux (*Concentration*). Pour les concentrations variables dans le temps, il s'agit d'une concentration calculée sur une moyenne annuelle ;
- ✓ niveaux d'exposition (*Niveaux\_expo*). Il s'agit des niveaux d'exposition de chaque classe d'âge en moyenne annuelle (variable dont le nom se termine par *\_classe\_age\_moy\_an*), servant au calcul du quotient de danger et du niveau d'exposition intégré sur toute la durée de simulation et divisé par la durée d'exposition de l'individu (variable dont le nom se termine par *\_vie\_entiere*). Cette dernière variable sert au calcul de l'excès de risque individuel ;

- ✓ niveaux de risque (*Niveaux\_risque*). Il s'agit des quotients de danger par vecteur d'exposition par voie d'exposition, par organe cible, donnés pour la classe d'âge la plus exposée (Variables dont le nom commence par *Max\_Age\_QD*), intégrant (variable avec le suffixe *\_cum*) ou non l'exposition hors site. Cette liste déroulante donne aussi les excès de risque individuel par vecteur et par voie d'exposition ;
- ✓ transfert (*Transfer*) : coefficient de transfert et transfert de masse des polluants (quantités de polluant transférées entre deux milieux ou compartiments par unité de temps).

La liste déroulante *Type* permet de sélectionner les données de sortie selon la nature de la fonction de calcul utilisée pour les obtenir.

- *Tables* : Par défaut, la fenêtre présente un tableau intitulé *Quick View*, permettant de représenter en fonction du temps les données de sortie sélectionnées dans la liste *Results*. Le tableau *Quick view* et ses copies ne sont pas intégrés dans le rapport défini par défaut.

En faisant un clic droit sur la fenêtre *Tables*, l'utilisateur retrouve les commandes pour créer, éditer, faire des copies des différents types de tableaux décrits ci-dessus et exporter les données de ces tableaux dans des fichiers Excel.

La commande *clic droit + Delete* permettent de supprimer les tableaux sélectionnés.

Les cases à cocher sous le graphique permettent de choisir le format d'affichage des valeurs du tableau, de définir le nombre de décimales et de mettre en évidence dans le tableau (surlignage des valeurs) les valeurs minimales (case *Lowest*), maximales (case *Highest*), et les valeurs comprises entre deux limites à définir par l'utilisateur (case *Condition*).

Enfin, les valeurs du tableau peuvent être triées selon l'ordre croissant ou décroissant de l'une ou l'autre des colonnes en cliquant sur l'intitulé de la colonne voulue.

## 5.1.9 REPORT

### Commandes

- *Refresh* : Mise à jour du rapport.
- *Back* : retour à l'endroit précédemment sélectionné dans le rapport.
- *Home* : retour à la table des matières du rapport suite à une navigation entre les différentes sections, *via* les liens hypertextes.
- *Save* : Enregistrement du rapport sous format html.
- *Generate and open PDF* : création et ouverture du rapport sous format .pdf.
- *Print* : Impression du rapport.
- *Settings* : Paramétrage du rapport. Par défaut, le rapport contient le nom du projet, le nom de l'auteur, la date, la liste des substances étudiées, les données d'entrée de chaque module, les tableaux et les graphiques formatés (cf. section 4.1.4). Le contenu du rapport peut être complété en modifiant les options dans *Settings*. Par exemple, il est possible de faire apparaître tous les éléments du rapport, y compris toutes les variables intermédiaires calculées avec leurs expressions mathématiques (modifier la valeur du bouton *Include in chapter* dans *Settings>Report chapters>Model description>Details*).

Si l'utilisateur a modifié la valeur prédéfinie pour une donnée, la valeur prédéfinie apparaît dans le rapport, dans la colonne éponyme, à côté de la valeur prise en compte par l'utilisateur. Les distributions statistiques modifiées apparaissent dans le rapport de la même manière.

- *Help Contents* : Accès à une aide en ligne de la société Facilia relative à ce panneau de commandes.

### Fenêtre

La fenêtre à droite du panneau de commandes présente le rapport lorsqu'il a été généré à l'aide du bouton *Refresh*. Tous les éléments apparaissant en bleu correspondent à des liens hypertextes.

## 5.2 RENSEIGNER LES DONNEES D'ENTREE

### 5.2.1 L'APPARITION DES DONNEES EN FONCTION DES OPTIONS DE CALCUL

Selon les options de calcul retenues par l'utilisateur, la liste des données d'entrée nécessaires au calcul est plus ou moins importante. Ainsi, en fonction des valeurs sélectionnées dans les *General variables* d'un module de calcul, de nouvelles données d'entrée pouvant correspondre aux trois types de données d'entrée existants (*General variables*, *Lookup tables*, *Parameters*) dans ce module peuvent apparaître ou disparaître. Afin d'avoir la liste à jour des données d'entrée à renseigner, **il est donc important**, comme indiqué dans la Figure 18, **de renseigner les *General variables* d'un module, avant les autres types de données d'entrée.**

Néanmoins, **la liste des données affichées peut contenir des éléments que l'utilisateur n'a pas nécessairement besoin de renseigner.** Cette situation correspond aux cas suivants :

- L'utilisateur a le choix de renseigner un paramètre parmi plusieurs. Dans ce cas, les différents paramètres apparaissent dans la liste à renseigner, mais l'utilisateur choisit celui qu'il souhaite renseigner. Par exemple, le coefficient de partition particules du sol-eau du sol ( $K_d$ ) peut être estimé pour des substances organiques à partir des paramètres  $K_d\_E$ ,  $\log K_d\_E$  (coefficient ou logarithme du coefficient de partition définis directement par l'utilisateur), ou bien à partir de la teneur en carbone organique du sol et de  $K_{oc}$  ou  $\log K_{oc}$  (coefficient ou logarithme du coefficient de partition carbone organique-eau). Dans ce type de situation, la rubrique *Description* des paramètres rappelle à l'utilisateur qu'un seul de ces paramètres est à renseigner.
- Des expressions différentes ont été sélectionnées pour les options de calcul selon les substances étudiées. Dans ce cas, certaines données d'entrée doivent être renseignées pour certaines substances et cela est inutile pour d'autres, car les valeurs correspondantes ne seront pas utilisées.

Exemple : un utilisateur étudie les risques liés au plomb et au benzo(a)pyrène. Dans le module *Sol*, il affecte l'expression *valeur\_entree* à *definition\_Cs\_attrib* pour le plomb et l'expression *valeur\_calculée* au benzo(a)pyrène. La donnée *Cs\_attrib\_E* (Concentration dans la couche de sol, hors bruit de fond, définie par l'utilisateur) doit alors être renseignée pour le plomb, tandis qu'elle est inutile pour le benzo(a)pyrène. A l'inverse, le paramètre *Cs\_attrib\_0* (concentration de polluant (hors bruit de fond dans la couche de sol considérée au temps  $t=0$ )) doit être renseigné pour le benzo(a)pyrène, mais est inutile pour le plomb.

Pour guider l'utilisateur, quand une donnée d'entrée n'est pas toujours nécessaire, la rubrique *Description* rappelle pour quelles valeurs d'options, elle doit être renseignée. Par ailleurs, en cliquant sur le bouton *Full*, l'utilisateur a accès à la rubrique *Referenced by*, qui liste les variables dans lesquelles une donnée est utilisée et le lien hypertexte permet de visualiser l'expression mathématique de cette variable.

- Les données des modules de données d'entrée (*Par\_Subst*, *Par\_Expo*, *Par\_Sol*, *Par\_Envir*, *Par\_Emission\_Air*) apparaissent quand la donnée d'entrée à laquelle elles sont connectées est utilisée dans le calcul (il faut alors les renseigner), mais elles sont aussi présentes dans la liste des données si elles ne sont pas connectées. Dans ce cas, il est inutile de les renseigner, puisqu'elles ne sont pas utilisées (absence de la rubrique *Referenced by* dans la fenêtre *Information*).

## 5.2.2 LES VALEURS PREDEFINIES

### 5.2.2.1 LES VALEURS NON-SENS

**Toutes les données doivent être affectées d'une valeur.** En effet, une case vide bloque le lancement des simulations.

Toutes les données d'entrée des modules ont donc été renseignées. **Certaines de ces données correspondant à des choix ou à des informations spécifiques aux cas d'étude traités ont été renseignées par des données « non sens ».**

Il peut s'agir de valeurs « 0 », « -1 » ou « NaN » (Not a Number) pour des données variables (*Lookup tables*) ou constantes (*Parameters*) dans le temps. Par exemple, dans le module *Sol* pour la porosité du sol, la valeur prédéfinie est « 0 » et pour le dépôt total de polluant sur le sol (*Depot\_total*), elle est égale à « -1 ». Pour les choix de calcul (*General variables*), les expressions « non sens » utilisées sont « aucun » ou « non\_defini ». Dans le module *Sol*, la valeur prédéfinie pour le mode de définition de la concentration dans le sol attribuable à la source de contamination étudiée (*definition\_Cs\_attrib*) est ainsi « non\_defini ».

Ces valeurs sont en fait utilisées dans des expressions mathématiques, qui servent de test et qui bloquent la simulation, si l'utilisateur a oublié de les modifier, alors qu'elles étaient utiles au calcul (cf. section 5.5).

### 5.2.2.2 LES VALEURS DE LA BIBLIOTHEQUE DE MODULES

**Pour les autres données, des valeurs** (valeurs les plus probables), **intervalles de valeurs** (colonnes *Min* et *Max* des *Parameters*) **ou distributions de valeurs** (colonne *PDF* des *Parameters*) **ont été définies.** Elles peuvent être visualisées dans la fenêtre d'informations de chaque donnée d'entrée ou en les exportant sous Excel.

**Ces valeurs sont accompagnées d'informations situées dans la colonne *Reference* et *Comment*.**

La colonne *Reference* liste les sources bibliographiques utilisées pour définir la ou les valeurs retenues. Les références complètes des sources bibliographiques peuvent être consultées dans le fichier Word : *Bibliographie\_donnees\_entrees.doc*, disponible dans le répertoire de documentation du logiciel<sup>7</sup>, créé à l'installation.

**La colonne *Comment* donne le statut des valeurs proposées.** Ce statut a pour but de qualifier le degré d'analyse effectué pour définir les valeurs proposées. Il peut correspondre aux énoncés suivants :

- *Non vérifié* : les valeurs retenues correspondent à celles fournies dans une ou plusieurs sources d'informations sans élément contextuel, permettant de

<sup>7</sup> Chemin d'accès : Mes documents\MODULERS\Deliverables\Donnees\_entrees



connaître leur pertinence (exemple : valeurs reprises du document Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities (HHRAP) de l'USEPA<sup>8</sup>) ;

- *Vérifié* : les valeurs retenues ont été sélectionnées après confrontation de différentes sources bibliographiques. Des éléments contextuels ont pu être obtenus, sans pour autant être exhaustifs.
- *Validé* : les valeurs retenues ont été sélectionnées après collecte et analyse de différentes sources bibliographiques. Les choix ont été réalisés en tenant compte de l'ensemble des éléments contextuels disponibles. Les sources bibliographiques utilisées sont le plus souvent des sources primaires.

**Ce statut indique, à l'utilisateur, le niveau d'analyse effectué pour attribuer des valeurs aux données. Il ne représente pas nécessairement le niveau d'incertitude attachée à la donnée.** Ainsi, un intervalle de valeurs très large peut être défini pour certaines données pour lesquelles un travail approfondi a été fait.

**La colonne *Comment* donne aussi des précisions complémentaires,** quand une valeur ponctuelle n'a pas pu être définie et qu'un intervalle de valeurs est fourni à la place. Ce cas correspond à deux situations :

- les données collectées ne permettaient pas de privilégier une valeur ponctuelle. La moyenne géométrique est fournie dans la colonne *Comment* si elle a pu être calculée ;
- l'intervalle de valeurs couvre différentes conditions qui sont précisées dans la colonne *Comment*. Par exemple, pour la porosité d'un sol, les valeurs données dans les colonnes *Min* et *Max* correspondent à tous les types de sol et la colonne *Comment* propose des valeurs par défaut ou des intervalles plus restreints pour des sols, respectivement, sableux, limoneux et argileux.

A l'avenir, ces éléments d'information seront complétés par des documents qui présenteront l'ensemble des sources consultées, les données collectées et leur contexte d'obtention, ainsi que les raisons ayant orienté la sélection de valeurs. Le premier document de ce type relatif aux paramètres d'exposition des animaux (référence INERIS-DRC-12-125927-09778A) est disponible dans le dossier de documentation de MODUL'ERS<sup>9</sup>.

Ce dossier comporte aussi un fichier Excel (référéncé INERIS DRC-13-133180-13116A) permettant d'estimer pour un sol de surface cultivé, la recharge en eau annuelle et la teneur en eau moyenne dans le sol, par un bilan hydrique décadaire.

Enfin, **les valeurs et les distributions prédéfinies modifiées par l'utilisateur directement ou par importation à partir d'un fichier Excel apparaissent en gras à l'écran. Dans le rapport,** en l'absence de modification, les valeurs et distributions prédéfinies sont présentées respectivement dans les colonnes *Value* et *PDF*. En cas de modifications, **les nouvelles valeurs prennent la place des éléments prédéfinis et ceux-ci apparaissent alors dans les colonnes *Predefined value* et *Predefined PDF*** (cf. Figure 19).

---

<sup>8</sup> US EPA (US Environmental Protection Agency), Office of Solid Waste, Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities (HHRAP), report EPA/530/R-05-006, 2005

<sup>9</sup> Chemin d'accès Mes documents\MODULERS\Deliverables\Donnees\_entrees

Full Name	Symbol	Unit		
logKd_E (Log du coefficient de partition du polluant entre les particules du sol et l'eau du sol)	logKd_E	l kg <sup>-1</sup>		
Description				
sert au calcul de la concentration dans l'eau du sol : à définir si definition_Cs_attrib=valeur_calculée et si un des phénomènes de perte par lixiviation, ruissellement ou volatilisation est pris en compte. Log du coefficient de partition du polluant entre les particules du sol et l'eau du sol : valeur définie par l'utilisateur. L'utilisateur doit définir pour chaque substance une valeur soit pour Kd_E, soit pour log Kd_E, soit pour Koc, soit pour log Koc (en l'absence de connexion pour ce paramètre à partir de modules amont). Valeur par défaut : -1				
Materials	Value	Predefined value	PDF	Predefined PDF
Plomb	3.7	-1.0	norm(4.0,1.2,0.7,5.0)	norm(3.7,1.2,0.7,5.0)

Figure 19 : Exemple d'un extrait de rapport mettant en évidence les modifications de valeurs apportées au paramètre *logKd\_E*

### 5.3 LES CONNEXIONS ENTRE MODULES ET LES DONNEES ENTREE/SORTIE DE CHAQUE MODULE

**Les connexions entre modules permettent d'affecter une donnée de sortie d'un module amont à une donnée d'entrée d'un module aval.**

**Chaque module contient une liste prédéfinie et limitée de grandeurs connectables.** Les données connectables à l'entrée d'un module sont regroupées dans la rubrique *Inputs* (cf. fenêtre *Information* du module sélectionné dans la matrice). Les données connectables en sortie d'un module sont regroupées dans la rubrique *Outputs* (cf. fenêtre *Information* du module sélectionné dans la matrice). La liste exhaustive des données connectables en entrée et en sortie de chaque module est fournie à l'annexe B.

Toutes les données des modules de données (*Par\_Subst*, *Par\_Expo*, *Par\_Sol*, *Par\_Envir*, *Par\_Emission\_Air*) sont connectables vers un module aval, puisque le rôle de ces modules est de renseigner de manière commune les mêmes données d'entrée de plusieurs modules.

**Les données d'entrée du module *Niveaux\_Exposition\_Risque* sont connectables aux données de sortie de plusieurs modules. Les différentes données de sortie connectées à la même donnée d'entrée sont en fait sommées dans cette donnée d'entrée.** Ainsi, les doses d'exposition par ingestion de légumes-racines, de légumes-feuilles et de fruits peuvent être sommées dans la donnée d'entrée correspondante du module *Niveaux\_Exposition\_Risque* (cf. Figure 20).

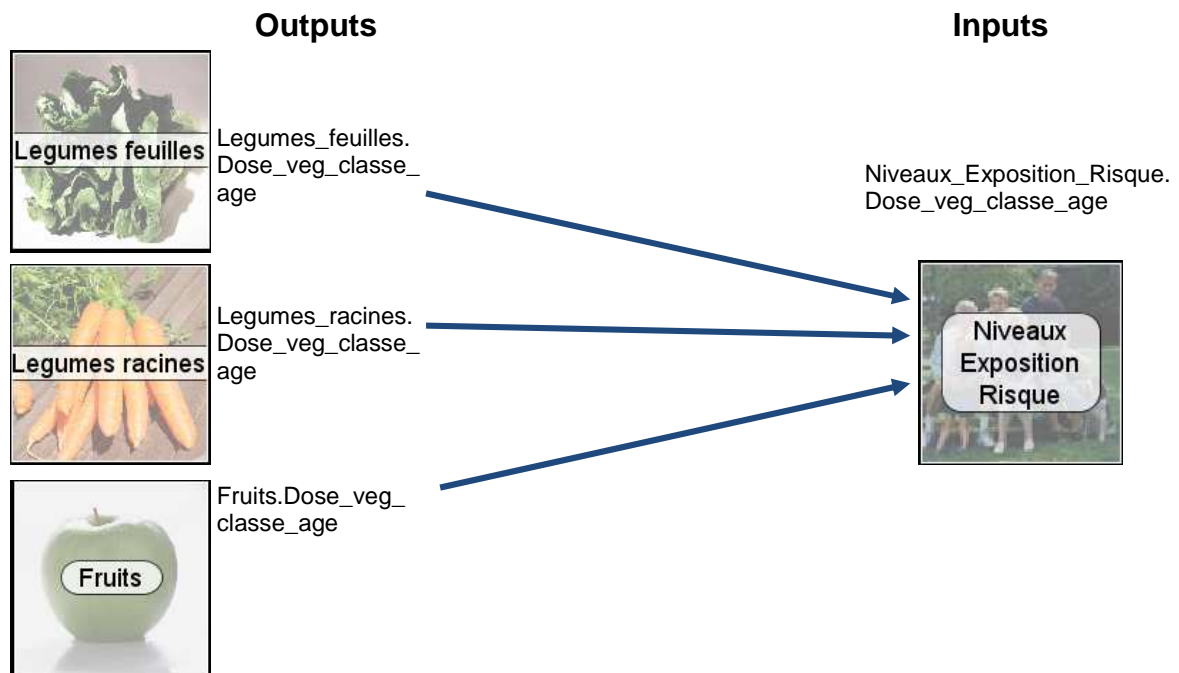


Figure 20 : Illustration d'une connexion multiple vers la même donnée d'entrée

Les données d'entrée des autres modules ne sont connectables qu'à une seule donnée. En revanche, **les données de sortie d'un module peuvent être connectées à plusieurs données d'entrée d'un même ou de plusieurs modules.** Il faut alors créer plusieurs connecteurs et dans chacun d'eux, la donnée de sortie sera connectée à une donnée d'entrée différente.

Lorsque des données de dimension différentes sont connectées entre elles, la ligne correspondante dans le connecteur apparaît en rose et un message d'erreur apparaît dans la fenêtre *Information* du connecteur (panneau *Model*) et dans la fenêtre *Errors* du panneau *Simulation*. En revanche, si une donnée correspondant à une concentration dans l'eau est connectée à une concentration dans le sol, aucun message d'erreur n'apparaîtra, car les deux données sont de même dimension.

## 5.4 LA SYNTAXE DES EXPRESSIONS DE CALCUL

La syntaxe des expressions de calcul dans MODUL'ERS est proche de celle d'Excel.

Toutefois, les expressions conditionnelles ne s'écrivent pas avec le terme « Si ». Elles sont remplacées par des expressions booléennes, qui sont égales à 0 si elles sont fausses et égales à 1, si elles sont vraies.

Les opérateurs suivants sont utilisés dans les expressions des variables :

- « == » : représente l'égalité,
- « ~= » : représente la différence,
- « && » : représente le terme « ET » entre deux conditions,
- « || » : représente le terme « OU » entre deux conditions,
- *Mod* : représente la fonction modulo. *Mod(a,b)* donne le reste de la division euclidienne de a par b,
- *UseInputBelow* : opérateur retournant la valeur v1, tant que la variable B est inférieure au critère b1, puis la valeur v2, tant que B est inférieure au critère b2, etc...), avec  $b1 < b2 < b3$ .

Syntaxe : *UseInputBelow*(B, b1, v1, b2, v2, b3, v3,...).

Exemple : syntaxe de l'expression mathématique de *Ces\_attrib\_C* (concentration dans l'eau du sol correspondant à la concentration de polluant attribuable à la source) dans le module *Sol*.

```
(definition_Cs_attrib==valeur_calculée)*(perte_Lixiviation==oui||perte_Ruissellement==oui||perte_Volatilisation~=non)*((Kd<0.0||S<0.0||H_Ts<0.0||Alpha<0.0)*(1.0/0.0)+min(xj_Cs_attrib*S,Cs_attrib_C/(Kd+Theta/MVs+Alpha*(H_Ts/Constantes_Reglages.R/Ts)/MVs)))
```

Cette expression signifie que, si pour une même substance, *definition\_Cs\_attrib* est égale à *valeur calculée* et si un des phénomènes de pertes est vrai, alors l'expression de calcul renverra :

- une valeur infinie (1/0) si *Kd*, *S*, *H\_Ts* ou *Alpha* est inférieur à 0,
- la valeur minimale donnée par « *xj\_Cs\_attrib\*S* » et « *Cs\_attrib\_C/(Kd+Theta/MVs+Alpha\*(H\_Ts/Constantes\_Reglages.R/Ts)/MVs)* », si *Kd*, *S*, *H\_Ts* et *Alpha* sont supérieurs à 0.

Par ailleurs, dans MODUL'ERS, on distingue différents types d'expression de calcul. Le type des expressions de calcul apparaît à côté du nom de la variable dans la fenêtre *Information*. On trouve les types suivants :

- *Expression* : expression mathématique de base,
- *Compartment* : servant à intégrer une quantité sur la durée de la simulation. Son expression mathématique est celle d'une équation différentielle de 1<sup>er</sup> ordre.

Les niveaux d'exposition sur la vie entière sont par exemple calculés grâce à ce type d'expression (cf. données de sortie dont le nom fini par *\_vie\_entiere\_interm*).

- *Transfer* : expression mathématique utilisée dans l'expression des *compartments* et permettant de représenter les quantités de matière entrant et sortant des *compartments* par unité de temps.

- *Recorder* : fonction permettant d'enregistrer la valeur de l'expression mathématique donnée dans la case *Target*.

La fonction *Recorder* utilisée avec l'opérateur *Snapshot* capture la valeur de l'expression donnée dans *Target*, dès que la condition donnée dans la case *Record condition* devient vraie. Elle conserve et retourne cette valeur jusqu'à ce que cette condition soit de nouveau vraie. A cet instant, elle prend alors la nouvelle valeur de l'expression donnée dans *Target*.

Cette fonction est utilisée avec cet opérateur pour calculer par exemple les moyennes annuelles (cf. données de sortie finissant par *\_moy\_an*).

La fonction *Recorder* utilisée avec l'opérateur *Mean* calcule la moyenne des valeurs prises par l'expression donnée dans la case *Target*, tant que la condition définie dans la case *Record condition* est vraie. La moyenne donnée par la fonction *Recorder* est remise à 0 à chaque fois que la condition donnée dans la case *Reset condition* devient vraie.

Cette fonction est utilisée avec cet opérateur, par exemple, dans le calcul intermédiaire des moyennes annuelles (cf. données de sortie finissant par *\_moy\_an\_interm*).

- *Delay* : fonction prenant la valeur du *compartment* spécifié dans *Target* avec un décalage dans le temps égal à la valeur donnée dans *Delay time*.

Par exemple, si la valeur du *compartment* A croît linéairement de la valeur 0 à la valeur 5 entre les dates  $t = 0$  et  $t = 5$  ans et si *Delay time* = 2, alors la fonction *Delay*, avec *Target* égale à A, sera égale à 3 à  $t = 5$  ans ;

- *Index Operation* : fonction permettant de :
  - faire la somme des éléments d'un vecteur ou des éléments d'une des deux dimensions d'une matrice, lorsque l'opérateur *Sum* est utilisé ;
  - de rechercher l'élément ayant la plus forte valeur dans un vecteur ou l'élément dans une dimension de la matrice ayant la plus forte valeur, quand l'opérateur *Max* est utilisé.

## 5.5 MODE OPERATOIRE POUR REDEMARRER UNE SIMULATION INTERROMPUE SUR UN MESSAGE D'ERREUR

Les modules de l'outil MODUL'ERS comporte de nombreuses expressions mathématiques de type conditionnel, ayant pour but d'interrompre la simulation lorsqu'une donnée d'entrée, prédéfinie avec une valeur « non sens » est utilisée dans un calcul, car elle n'a pas été renseignée de manière spécifique par l'utilisateur ou bien, lorsqu'elle a été mal renseignée par celui-ci.

Ainsi, la simulation s'arrête quand le logiciel est amené à calculer une valeur infinie ou lorsqu'il rencontre une valeur *NaN* (Not a Number). Dans ce cas, une ligne rouge avec le terme *error* apparaît dans la fenêtre *Simulation* du panneau *Simulation* et le logiciel renvoie un message indiquant la variable calculée ayant posé problème. L'examen de l'expression mathématique de cette variable permet d'identifier la donnée d'entrée de cette variable qui conduit à l'échec de la simulation. Il convient alors de modifier la valeur de cette donnée d'entrée et de relancer la simulation. Dans certains cas, la recherche de l'erreur peut être un peu plus compliquée : l'échec de la simulation pouvant être parfois lié à une expression incluse dans l'expression de la variable apparaissant dans le message d'erreur de la simulation.

### Exemple d'échec de simulation et de recherche d'une source d'erreur

Pour illustrer, la manière de rechercher la donnée d'entrée posant problème dans une simulation, le fichier du projet obtenu au terme du cas d'étude 1 (cf. section 4.1) est utilisé.

Dans ce fichier, on remplace la valeur du paramètre *Porosite\_sol* égale à 0,5 par 0 (valeur initiale, prédéfinie dans le module *Sol*). L'exemple simule le cas où l'utilisateur aurait oublié de modifier la valeur du paramètre *Porosite\_sol*. Après avoir cliquer sur la flèche bleue dans le panneau *Simulation*, la simulation démarre, puis s'arrête au bout de quelques instants avec le message suivant : « *Simulation failed. Sol.test\_porosite\_sol is infinite* ». Ce message indique que la simulation s'est arrêtée sur le calcul de la variable *test\_porosite\_sol* du module *Sol*, qui est apparue égale à l'infini.

Pour trouver l'origine du problème, il faut regarder l'expression mathématique de cette variable, accessible dans la fenêtre *Information* du panneau *Model*. En cliquant sur le module *Sol* de la matrice (en dehors du signe +), la liste des données présentes dans le module s'affiche. Les variables calculées par le modèle apparaissent dans la liste des *Expressions*, *Compartments*, *Transfers* ou *Other blocks*, selon leur type. *test\_porosite\_sol*, qui est une expression mathématique simple, se trouve dans la liste *Expressions*. En cliquant sur cette variable, son expression mathématique, ainsi que la liste des données dont elle dépend apparaît (cf. figure ci-dessous).

Information

test_porosite_sol (Expression)				
Id:	Sol.test_porosite_sol			
Symbol:	test <sub>porosite,sol</sub>			
Sub-system:	Sol			
Dimension:	Materials			
Expression				
(definition Cs attrib==valeur <sub>calculee</sub> ).(n==0.0).(1.0/0.0)				
where				
Symbol	Unit	Full name	Type	Sub-System
definition Cs attrib	unitless	definition_Cs_attrib	General Variable	Sol
valeur <sub>calculee</sub>	unitless	valeur_calculee	Parameter	Sol
n	unitless	Porosité du sol	Parameter	Sol

Figure 21 : Fenêtre d'informations de la donnée test\_porosite\_sol dans le panneau Sol

L'expression mathématique indique que, si *definition\_Cs\_attrib* est égale à *valeur\_calculee* et que *n* (symbole de la porosité du sol) est égale à 0 alors *test\_porosite\_sol* correspond à « 1/0 », c'est-à-dire à la valeur « infinie ». Dans l'exercice 1, la concentration dans le sol ayant été calculée, il apparaît clairement que la cause de l'arrêt de la simulation est liée au fait que le paramètre *Porosité du sol* soit affecté d'une valeur nulle.



## **LISTE DES ANNEXES**

<b>Repère</b>	<b>Désignation</b>	<b>Nombre de pages</b>
Annexe A	Compléments d'information sur les modèles de calcul utilisés	7
Annexe B	Les données connectables en entrée et en sortie des modules	13
Annexe C	Validation et processus qualité	7

## **ANNEXE A**

### **COMPLEMENTS D'INFORMATION SUR LES MODELES DE CALCUL UTILISES**



Les approches de calcul utilisées dans MODUL'ERS sont décrites dans le document intitulé « Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle » et disponible dans le classeur de documentation de MODUL'ERS sous la référence INERIS-DRC-08—94882-16675B. Néanmoins, pour implémenter ces équations dans l'outil, des choix de modélisation complémentaires ont dû être faits (âge des animaux au moment où les produits issus de ces animaux sont prélevés), des conditions particulières ont dû être considérées (modules de calcul des concentrations de polluants dans l'air sous forme gazeuse) et des adaptations ont parfois dû être faites. L'annexe A présente ces éléments de modélisation complémentaires.

## **1. MODE DE CALCUL DES CONCENTRATIONS DANS LES MATRICES ANIMALES SELON UNE APPROCHE DYNAMIQUE**

Pour le calcul des concentrations de polluants dans les matrices animales selon une approche dynamique, le choix a été fait de considérer, quelle que soit la date de simulation, que les produits sont issus d'animaux en fin de vie, c'est-à-dire juste avant la date d'abattage. Au cours du temps, les produits sont donc supposés venir d'individus différents. Ce choix a été fait pour tenir compte de produits issus d'animaux ayant subi l'exposition la plus longue possible aux conditions du milieu, même s'il est possible que des concentrations dans les matrices plus élevées puissent être obtenues avec d'autres hypothèses (exemple : concentration de polluant dans le lait d'une jeune vache, lors de la première période de lactation).

L'équation 1.7.9 du document sur les jeux d'équation donnant la masse de polluant au temps  $t$  dans un organisme animal, après intégration à partir de l'instant 0,

$$m_{a,1}(t) = \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a)} \times \left(1 - e^{-(k_a + \lambda_a) \times \Delta T}\right) + m_{a,1}(t - \Delta T) \times e^{-(k_a + \lambda_a) \times \Delta T} \quad \text{Équation 1}$$

avec  $m_{a,1}$  : masse de polluant dans l'organisme animal,

$t_{abs,a}$  : taux d'absorption du polluant par l'animal,

$D_a$  : quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps,

$k_a$  : facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,...),

$\lambda_a$  : facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs,

$\Delta T$  : intervalle de temps.

la masse de polluant dans un animal à une date supérieure à celle de la durée de vie du type d'animal considéré est calculée en retranchant de  $m_{a,1}(t)$  la quantité de polluant due à l'exposition entre  $t=0$  et  $(t - \text{Duree\_vie\_a})$ , soit :

$$m_{a,1}(t - \Delta T) \times e^{-(k_a + \lambda_a) \times \Delta T} \quad \text{Équation 2}$$

Dans les modules relatifs aux animaux, la masse de polluant au temps  $t$  servant au calcul des concentrations dans les matrices consommées par les humains est dénommée :  $m_{anim\_1}$ . La variable  $m_{anim\_decalage}$  correspond à  $m_{a,1}(t - Duree\_vie\_a)$  et  $m_{anim\_1\_interm}$  est égale à la masse de polluant dans l'organisme animal, intégrée de l'instant 0 à l'instant  $t$ . On a donc :

$$m_{a\_min\_1}(t) = m_{a\_min\_1\_interm}(t) - m_{anim\_decalage}(t) \times e^{-(k_a + \lambda_a) \times Duree\_vie\_a}$$

Équation 3

## 2. MODE DE CALCUL DES FLUX D'EMISSION DE POLLUANTS GAZEUX A LA SURFACE DU SOL, DES CONCENTRATIONS DANS L'AIR DU SOL ET DES CONCENTRATIONS INHALEES DE POLLUANTS GAZEUX

Les expressions du flux d'émission à la surface du sol et de la concentration dans l'air du sol sont données dans les sections 1.2.2 et 1.3.1 du manuel sur les jeux d'équation. Mais, des expressions supplémentaires se rapportant à des conditions particulières ont été utilisées dans la bibliothèque de MODUL'ERS. Seuls les cas particuliers non traités dans le document cité ci-dessus sont présentés dans la suite de cette section.

### 2.1. Module Conc\_gaz\_air\_exterieur

#### Cas d'une source de polluant présente dans la nappe et d'un flux d'évaporation à partir de la nappe nul (Evaporation=0)

L'hypothèse d'un régime permanent et le principe de conservation de la masse permettent d'écrire :

$$J_{tot} = \frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}} \times (C_{as\_nap} - C_{as,0})$$

Équation 4

avec  $J_{tot}$  : Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source nappe),

$C_{as,0}$  : concentration de polluant dans l'air du sol en haut de la frange capillaire,

$C_{as,nap}$  : concentration de polluant dans l'air du sol à la surface de la nappe,

$DU_{eq\_cap}$  : coefficient de diffusion multiphasique moyen dans la frange capillaire (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

$L_{cap}$  : épaisseur de la frange capillaire.

En supposant le polluant plus volatil que l'eau, l'équation ci-dessus et l'équation 1.2.24 du manuel INERIS-DRC-08—94882-16675B donne :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}} \times C_{as,nap}}{\frac{1}{\frac{L}{DU_{a,eq}} + \frac{d_a}{D_a}} + \frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}}}$$

Équation 5

avec  $D_a$  : coefficient de diffusion du polluant dans l'air,

$d_a$  : hauteur de la couche limite d'air,

$DU_{a,eq}$  : coefficient de diffusion multiphasique moyen dans la zone insaturée du sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

L : longueur de la zone de diffusion entre le point de concentration  $C_{as,0}$  et la surface du sol.

### Cas d'une source sol considérée comme infinie

Dans la bibliothèque de MODUL'ERS, le flux d'émission à l'instant t est égal à la valeur minimale obtenue entre 1) l'équation 1.2.46 du manuel précédemment cité et 2) la quantité totale de polluant présente dans le sol divisée par t et la surface d'émission.

Cette seconde expression permet de borner le flux émis dans le cas d'une source très proche du sol, en vérifiant que la quantité émise de 0 à t, d'après le flux calculé, n'est pas supérieure à la quantité totale de polluant dans le sol à t=0. Pourtant, cette expression, qui varie de manière inversement proportionnelle au temps, ne donne pas une représentation réelle du flux émis et de la concentration d'air calculée à partir de ce flux, puisque cette expression revient à considérer qu'à un instant t donné, toute la quantité de polluant initialement présente dans le sol a été émise dans l'air entre 0 et t.

## 2.2. Conc\_gaz\_air\_interieur\_Volasoil

### 2.2.1. Cas d'une source de pollution dans la nappe en l'absence de remontées capillaires à la surface du sol

**Flux d'évaporation à partir de la nappe non nul (Evaporation≠0) et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection nul ( $F_{is}=0$ )**

Le flux d'émission  $J_{tot}$  et la concentration de polluant gazeux dans l'air en haut de la frange capillaire sont donnés respectivement par les équations 1.2.46 et 1.2.48 du manuel sur les jeux d'équations.

**Flux d'évaporation à partir de la nappe nul (Evaporation=0) et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection non nul ( $F_{is} \neq 0$ )**

Le flux d'émission est donné par  $J_{tot} = \frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}} \times (C_{as\_nap} - C_{as,0})$

Équation 4 avec les mêmes hypothèses de calcul.

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse conduit à l'égalité du flux traversant le sol ( $J_{tot}$ ) et du flux traversant la frange capillaire et permet de calculer  $C_{as,0}$  à partir de l'équation 4 et de l'équation 1.3.24 du manuel sur les jeux d'équations. En supposant que la concentration dans l'air du sol à la surface avec l'atmosphère est faible par rapport à celle en haut de la frange capillaire, on obtient :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}} \times C_{as\_nap}}{\frac{F_{is}}{(1 - \exp(-\frac{F_{is} \times L}{DU_{a,eq}}))} + \frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}}} \quad \text{Équation 6}$$

avec  $F_{is}$  : flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection

**Flux d'évaporation à partir de la nappe et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection nuls (Evaporation=0 et  $F_{is}=0$ )**

$$C_{as,0} = \frac{\frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}} \times C_{as,nap}}{\frac{1}{\frac{L}{DU_{a,eq}} + \frac{d_a}{D_a}} + \frac{DU_{eq\_cap}}{L_{cap}}}$$

On retrouve pour  $C_{as,0}$  l'expression donnée par l'Équation 5.

**2.2.2. Cas d'une source de pollution dans la nappe lorsque la frange capillaire affleure à la surface du sol**

**Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection non nul ( $F_{is} \neq 0$ )**

Pour tenir compte des remontées capillaires jusqu'à la surface (par exemple, cas d'une cave avec sol en terre battue), on remplace  $E_v/H'$  (avec  $E_v$  : flux d'évaporation et  $H'$  : constante de Henry) par  $(F_{is} + E_v/H')$  dans l'équation 1.3.48 du manuel sur les jeux d'équations.  $C_{as,0}$  qui est égale à la concentration à la surface du sol, est considérée comme faible par rapport à celle dans l'air du sol à la surface de la nappe, et est prise égale à 0.

**Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection nul ( $F_{is}=0$ )**

Les équations 1.2.46 et 1.2.50 du manuel sur les jeux d'équations sont appliquées pour définir  $J_{tot}$  et  $C_{as,0}$ .

**2.2.3. Cas d'une source de polluant dans le sol**

Comme dans le module *Conc\_gaz\_air\_exterieur*, le flux d'émission à l'instant  $t$  est pris égal à la valeur minimale obtenue par 1) l'équation 1.2.46 du manuel sur les jeux d'équation et 2) la quantité totale de polluant présente dans le sol divisée par  $t$  et par la surface du bâtiment.

**Absence de remontées capillaires à la surface et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection nul ( $F_{is}=0$ )**

Le flux d'émission à la surface du sol est alors donné par l'équation 1.2.25 du manuel sur les jeux d'équation.

**Présence de remontées capillaires jusqu'à la surface et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection non nul ( $F_{is} \neq 0$ )**

Le flux d'émission à la surface du sol  $J_{tot}$  est donné par l'équation 1.3.26 dans laquelle  $F_{is}$  est remplacé par  $(F_{is} + E_v/H')$ .

**Présence de remontées capillaires jusqu'à la surface et flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection nul ( $F_{is}=0$ )**

Le flux d'émission à la surface du sol  $J_{tot}$  est donné par l'équation 1.2.31 du manuel sur les jeux d'équation.

### 2.3. Conc\_gaz\_air\_interieur\_J\_E

Les équations du modèle de Johnson et Ettinger utilisées dans le module *Conc\_gaz\_air\_interieur\_J\_E* ne sont pas décrites dans le manuel sur les jeux d'équations, mais sont reprises de la publication de Johnson et al. (1991)<sup>10</sup> et du guide de l'utilisateur de l'US EPA de 2004<sup>11</sup>.

Par rapport aux équations décrites dans ces documents, quelques éléments complémentaires ont été apportés dans les expressions mathématiques du coefficient d'atténuation définie pour une source infinie (*Coef\_attenuation\_infinie*) et de la concentration gazeuse dans le lieu de vie, due à ou aux source(s) de contamination du site (*Cag\_i\_inh\_attrib\_C*).

La publication de Johnson et al. donne des expressions simplifiées du coefficient d'atténuation quand le nombre de Peclet (*Nb\_Peclet*) tend vers 0 ou vers l'infini.

Pour un bon fonctionnement de MODUL'ERS, les expressions données pour des valeurs élevées du nombre de Peclet (équation 22 de la publication et équation donnée pour  $L \rightarrow 0$ ) sont utilisées quand  $Nb\_Peclet \geq 650$ . L'expression correspondant à des valeurs faibles du nombre de Peclet (équation 23 de la publication) est utilisée pour  $Nb\_Peclet \leq 10^{-4}$ .

Par ailleurs, dans ce dernier cas, si la longueur de la zone de diffusion est nulle, l'expression suivante est utilisée :

$$Coef\_attenuation\_infinie = \frac{1}{1 + \frac{l_{dalle} \times Q_{bat}}{DU_{a,2} \times Surface_{fissures}}} \quad \text{Équation 7}$$

avec  $Q_{bat}$  : flux de ventilation dans le bâtiment,

$l_{dalle}$  : épaisseur de la dalle du bâtiment,

$DU_{a,2}$  : coefficient de diffusion multiphasique de la couche de sol 2,

$Surface_{fissures}$  : surface des fissures.

De plus, dans MODUL'ERS, pour une source infinie, si les valeurs de la concentration dans le sol et le volume de la source sont fournies par l'utilisateur, la concentration gazeuse à l'instant  $t$  dans le lieu de vie, due à la source de contamination du site (*Cag\_i\_inh\_attrib\_C*) est égale à la valeur minimale obtenue entre 1) le produit du coefficient d'atténuation et la concentration dans l'air du sol au niveau de la source et 2) la quantité de polluant dans le sol à l'instant 0 divisée par  $t$  et par le flux de ventilation du bâtiment. Comme dans l'approche basée sur la solution finie donnée par l'USEPA, cette dernière expression permet de borner la concentration dans le bâtiment en évitant que sur une durée  $T$ , la concentration calculée corresponde à une quantité totale de polluant émise dans l'air supérieure à la quantité de polluant présente initialement dans le sol.

---

<sup>10</sup> Johnson P., Ettinger R., Heuristic model for predicting the intrusion rate of contaminant vapors into building, Environmental science and technology, 25, pp1445-1452, 1991

<sup>11</sup> US EPA (US Environmental Protection Agency), User's guide for evaluating subsurface vapour intrusion into buildings, 2004



Il convient aussi de rappeler que les équations de Johnson et Ettinger fournies dans les deux documents de référence ne permettent pas de calculer un flux instantané et que le coefficient d'atténuation donné pour la solution finie correspond à la concentration gazeuse moyenne dans un bâtiment entre l'instant 0 et l'instant t.

Par conséquent les concentrations inhalées en moyenne annuelle ( $C_{inh\_fraction\_expo\_classe\_age\_moy\_an}$ ) et sur la vie entière ( $C_{inh\_fraction\_expo\_vie\_entiere}$ ) ont été estimées d'une manière différente par rapport aux autres modules.

Lorsque la concentration gazeuse inhalable à l'intérieur n'est pas définie par l'utilisateur, on a :

- pour chaque classe d'âge :

$$C_{inh\_fraction\_expo\_classe\_age\_moy\_an}(t) = C_{inh}(t) \times f_{annuelle\_temps\_int} \quad \text{Équation 8}$$

avec  $C_{inh}(t) = C_{ag\_i\_inh\_attrib\_C}$  (*concentration gazeuse inhalée calculée et attribuable au site*) ou  $C_{inh}(t) = C_{ag\_i\_inh\_attrib\_tot}$  (*concentration gazeuse inhalée calculée et intégrant le bruit de fond*),

et  $f_{annuelle\_temps\_int}$  : fraction de temps passé à l'intérieur, pour chaque classe d'âge.

$C_{inh}(t)$  telle que estimée dans le module *Conc\_gaz\_air\_interieur\_J\_E*, est en fait supérieure ou égale à la concentration réelle, moyenne sur une année.

- sur la vie entière :

$$C_{inh\_fraction\_expo\_vie\_entiere} = C_{inh}(date\_fin\_expo\_individu) \times \text{Max}_{i,classe\_age}(f_{annuelle\_temps\_int}, i) \quad \text{Équation 9}$$

avec  $C_{inh}(date\_fin\_expo\_individu)$  : concentration gazeuse à l'intérieur à la date de fin d'exposition de l'individu,

et  $\text{Max}_{i,classe\_age}(f_{annuelle\_temps\_int}, i)$  : valeur maximale des fractions de temps passées à l'intérieur, pour les classes d'âge traversées par l'individu entre le début et la fin de la période d'exposition considérée.

$C_{inh}(date\_fin\_expo\_individu)$  est en fait égale à la concentration moyenne sur la période d'exposition de l'individu, si son exposition commence à  $t=0$  et est supérieure à cette concentration, si son exposition commence quand  $t>0$ .

## **ANNEXE B**

### **LES DONNEES CONNECTABLES EN ENTREE ET EN SORTIE DES MODULES**



## Module Sol

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bs, Bw, Ce_irrig, Cs_attrib_amont, Cs_bf, Da, De, Demie_vie_sol, Depot_gaz_humide, Depot_gaz_sec, Depot_gaz_total, Depot_part_humide, Depot_part_sec, Depot_part_total, Depot_total, ER, F_erosabilite_sol, F_erosivite_pluies, foc, fs_pous, H_Ts, inorganique, Irrigation, Kd_E, Koc, logKd_E, logKoc, M, MVP_s, nb_jour_an_expo, organique, Porosite_sol, Qpous, Qs, Recharge, Ruissellement, S, SD_E, Theta, Ts, type_Polluant	Cs_attrib, Cs_attrib_moy_an, Cs_tot, Dose_ingsol_freq_expo_classe_age, Dose_ingsol_freq_expo_individu

## MODULE Eaux\_superficielles

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bw, Ce_sup_attrib_amont, Ce_sup_BF, Cs_attrib, Csed_BF, Da, De, Depot_gaz_humide_bv, Depot_gaz_humide_eaux, Depot_gaz_sec_bv, Depot_gaz_sec_eaux, Depot_gaz_total_bv, Depot_gaz_total_eaux, Depot_part_humide_bv, Depot_part_humide_eaux, Depot_part_sec_bv, Depot_part_sec_eaux, Depot_part_total_bv, Depot_part_total_eaux, Depot_total_bv, Depot_total_eaux, ER, F_erosabilite_sol, F_erosivite_pluies, foc, foc_MES, H_Ta, H_Ts, inorganique, Kd_E, Kd_MES_E, Koc, lambda_e_d, logKd_E, logKd_MES_E, logKoc, M, masse_vol_air, masse_vol_eau, MES, MVp_s, MVp_sed, organique, Porosite_sol, Qe_sup_amont, Qeau, Ruissellement, S, SD_E, SDsc_E, Ta, Theta, Theta_sed, Ts, type_Polluant, u, V_MES_E, V_sed_E, viscosite_air, viscosite_eau, z_0_cours_eau	Cd_e_sup_attrib, Cd_e_sup_tot, Ce_sup_attrib, Ce_sup_tot, Cp_sed_attrib, Cp_sed_tot, Csed_attrib, Csed_tot, Dose_ingeau_classe_age, Dose_ingeau_individu, Qe_sup_aval

## MODULE Eaux\_souterraines

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bw, Ce_nap_BF, Ces_attrib_bas_ZNS_E, Cs_attrib, De, foc, H_Ts, inorganique, Kd_E, Koc, logKd_E, logKoc, M, MVp_s, organique, Porosite_sol, Qeau, Recharge, S, Theta, Ts, type_Polluant	Ce_nap_attrib, Ce_nap_tot, Dose_ingeau_classe_age, Dose_ingeau_individu

## MODULE Conc\_gaz\_air\_exterieur

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Ca_e_autres_sources_site, Ca_e_BF, Cag_e_autres_sources_site_E, Cag_e_BF_E, Cag_e_E, Cas_source_nappe_E, Cas_source_sol_E, Ce_nap, Cs_source_sol, Da, De, Dim_source_sol, Epaisseur_couche1, Epaisseur_couche2, Epaisseur_couche_source, Evaporation, f_annuelle_temps_ext, foc_source_sol, H_Ts, Hauteur_couche_limite, Hauteur_resp, Hb, inorganique, J_E, Kd_source_sol_E, Koc, Lcap, Lnappe, logKd_source_sol_E, logKoc, M, MVp_s, organique, Porosite_aq, Porosite_cap, Porosite_couche_source, Porosite_sol1, Porosite_sol2, Pvap_Ta, Pvap_Ts, S, ST, Ta, Theta_cap, Theta_couche1, Theta_couche2, Theta_couche_source, Tm, Ts, type_Polluant, u_Hb, u_Hresp, Volume_source	Cag_e_Hb_attrib, Cag_e_Hb_tot, Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere

## MODULE Conc\_gaz\_air\_interieur\_Volasoil

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Ca_i_BF, Cag_e_Hb_attrib, Cag_i_BF_E, Cag_i_E, Cas_source_nappe_E, Cas_source_sol_E, Ce_nap, Cs_source_sol, Da, De, Delta_P, Epaisseur_couche1, Epaisseur_couche2, Epaisseur_dalle, Evaporation, f_annuelle_temps_int, foc_source_sol, H_Bat, H_Ts, Hauteur_couche_limite, inorganique, J_E, Kd_source_sol_E, Koc, Lcap, Lnappe, logKd_source_sol_E, logKoc, M, MVp_s, organique, Porosite_aq, Porosite_cap, Porosite_couche_source, Porosite_sol1, Porosite_sol2, Pvap_Ta_int, Pvap_Ts, ST, t_ra, Ta_int, Theta_cap, Theta_couche1, Theta_couche2, Theta_couche_source, Tm, Ts, type_Polluant, viscosite_air, Volume_source	Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere



## MODULE Conc\_gaz\_air\_interieur\_J\_E

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Ca_i_BF, Cag_i_BF_E, Cag_i_E, Cas_source_E, Ce_nap, Cs_source_sol, Da, De, Delta_P, Epaisseur_couche1, Epaisseur_couche2, Epaisseur_couche_source, Epaisseur_dalle, f_annuelle_temps_int, foc_source_sol, H_Bat, H_Ts, inorganique, Kd_source_sol_E, Koc, Lcap, Lnappe, logKd_source_sol_E, logKoc, M, MVp_s, organique, Porosite_aq, Porosite_cap, Porosite_couche_source, Porosite_sol1, Porosite_sol2, Pvap_Ta_int, Pvap_Ts, ST, t_ra, Ta_int, Theta_cap, Theta_couche1, Theta_couche2, Theta_couche_source, Tm, Ts, type_Polluant, viscosite_air, Volume_source	Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere

## MODULE Conc\_part\_air\_exterieur

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Ca_e_autres_sources_site, Ca_e_BF, Cap_e_inh_autres_sources_site_E, Cap_e_inh_BF_E, Cap_e_inh_E, Cap_e_inh_sol_E, Cs_part_susp, Dim_source_sol, f_annuelle_temps_ext, fp_inh, Hauteur_resp, Hb, inorganique, organique, Pvap_Ta, ST, Ta, Tm, type_Polluant, u, u_Hb, u_Hresp	Cap_e_inh_Hb_attrib, Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere

## MODULE Conc\_part\_air\_interieur

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Ca_i_BF, Cap_e_inh_attrib, Cap_i_inh_BF_E, Cap_i_inh_E, f_annuelle_temps_int, fext_int, fp_inh, inorganique, organique, Pvap_Ta_int, ST, Ta_int, Tm, type_Polluant	Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere

## MODULE Nouveau\_vegetal

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bw, Cag_e, Cair, Cap_e_sol_E, Ce_irrig, Ces_racinaire, Cs_part_susp, Cs_racinaire, Depot_part_humide, Depot_part_sec, Depot_part_total, Fh, foc, H_Ta, H_Ts, inorganique, Irrigation, Kd_E, Koc, Kow_E, logKd_E, logKoc, logKow_E, M, MVp_s, MVveg, organique, Porosite_sol, Pss, Pvap_Ta, S, ST, Ta, Theta, Tm, Ts, type_Polluant, Vd_psol	Cp, Dose_veg_classe_age, Dose_veg_individu

## MODULE Nouvel\_animal

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bs_1, Bs_2, Bs_3, Bw, Ce_1, Ce_2, Ce_3, Cp_1, Cp_2, Cp_3, Cp_4, Cp_5, Cs_1, Cs_2, Cs_3, Kow_E, logKow_E	Dose_anim1_classe_age, Dose_anim1_individu, Dose_anim2_classe_age, Dose_anim2_individu

## MODULE Animaux\_aquatiques

Données connectables en entrée	Données connectables en sortie
Bw, Ceau, Csediments	Dose_anim_aq_classe_age, Dose_anim_aq_individu

## MODULE Niveaux\_Exposition\_Risque

Données connectables en entrée
Cinh_fraction_expo_classe_age_moy_an, Cinh_fraction_expo_vie_entiere, Dose_anim1_classe_age, Dose_anim1_individu, Dose_anim2_classe_age, Dose_anim2_individu, Dose_anim_aq_classe_age, Dose_anim_aq_individu, Dose_ingeau_classe_age, Dose_ingeau_individu, Dose_ingsol_freq_expo_classe_age, Dose_ingsol_freq_expo_individu, Dose_veg_classe_age, Dose_veg_individu

## MODULE Par\_Subst

Données connectables en sortie
Da, De, Fh, H_Ta, Koc, Kow_E, logKoc, logKow_E, M, Pvap_Ta, S, Tm

## MODULE Par\_Expo

Données connectables en sortie
Bw, Hauteur_resp, Qeau, Qpous, Qs

## MODULE Par\_Sol

Données connectables en sortie
Bs, Cs_bf, Date_fin_apports, Demie_vie_sol, ER, F_erodabilite_sol, foc, H_Ts, Irrigation, Kd_E, logKd_E, MVP_s, nb_jour_an_expo, Porosite_sol, Pvap_Ts, Recharge, Ruissellement, SD_E, Theta, Ts

## MODULE Par\_Envir

Données connectables en sortie
Ca_e_BF, Ca_i_BF, Cag_e, Cag_e_BF_E, Cag_e_Parameter, Cag_i_BF_E, Cair, Cap_e_inh, Cap_e_inh_BF_E, Cap_e_inh_Parameter, Cap_e_sol_E, Cap_i_inh_BF_E, Ce_irrig, Ce_nap_BF, Ce_sup_BF, Csed_BF, Depot_gaz_humide, Depot_gaz_humide_Parameter, Depot_gaz_sec, Depot_gaz_sec_Parameter, Depot_gaz_total, Depot_gaz_total_Parameter, Depot_part_humide, Depot_part_humide_Parameter, Depot_part_sec, Depot_part_sec_Parameter, Depot_part_total, Depot_part_total_Parameter, Depot_total, Depot_total_Parameter, F_erosivite_pluies, fext_int, foc_MES, fp_inh, fs_pous, Hauteur_couche_limite, Kd_MES_E, lambda_e_d, logKd_MES_E, masse_vol_air, masse_vol_eau, MES, MVp_aq, MVp_sed, Pss, ST, Ta, Theta_sed, u, V_MES_E, V_sed_E, Vd_psol, viscosite_air, viscosite_eau, z_0_cours_eau

## MODULE Par\_Emission\_Air

Données connectables en sortie
Ca_e_autres_sources_site, Cap_e_inh_autres_sources_site_E, Cas_source_nappe_E, Cas_source_sol_E, Ce_nap, Cs_source_sol, Delta_P, Dim_source_sol, Epaisseur_couche1, Epaisseur_couche2, Epaisseur_dalle, Evaporation, f_annuelle_temps_ext, f_annuelle_temps_int, foc_source_sol, H_Bat, Hb, J_E, Kd_source_sol_E, Lcap, Lnappe, logKd_source_sol_E, Porosite_aq, Porosite_cap, Porosite_couche_source, Porosite_sol1, Porosite_sol2, Pvap-Ta_int, t_ra, Ta_int, Theta_cap, Theta_couche1, Theta_couche2, Theta_couche_source, u_Hb, u_Hresp, Volume_source

## **ANNEXE C**

### **VALIDATION ET PROCESSUS QUALITE**





MODUL'ERS a été développé en suivant les prescriptions du processus opérationnel 4 (Conception et développement de produits logiciels), élaboré dans le cadre de la démarche qualité ISO9001 mise en place à l'INERIS. Ce processus opérationnel décrit les modalités de préparation, conception/fabrication et utilisation d'un produit logiciel.

MODUL'ERS respecte également les modalités décrites dans la procédure INERIS sur la « Maîtrise des logiciels scientifiques », qui définit les règles d'identification et de validation des logiciels scientifiques.

Les opérations mises en place pour valider MODUL'ERS portent à la fois sur le contenu mathématique et sur l'opérationnalité de l'outil. Elles correspondent à :

- la relecture par quatre organismes (québécois et français) du manuel sur les jeux d'équations (référence INERIS DRC-08—94882-16675B) implémentées dans l'outil. Les réponses apportées par l'INERIS aux questions et aux commentaires des relecteurs ont fait l'objet d'un rapport référencé DRC-10-109450-02656A ;
- la revue de l'ensemble des données et équations des modules par une personne différente de celle les ayant implémentées ;
- la réalisation de tests boîtes blanches sur toutes les fonctions de calcul impliquant des options (vérification de l'obtention de la sortie adéquate en fonction de l'option choisie) ;
- la réalisation de tests boîtes noires, notamment pour les fonctions de calcul listées dans la fiche DRC-11-115717-02920A « Spécifications et mode d'évaluation de l'outil de modélisation et simulation pour les ERS » (cf. extrait ci-dessous). Ces tests ont consisté à comparer les résultats donnés par les équations implémentées dans MODUL'ERS, avec ceux du fichier EXCEL précédemment utilisé à l'INERIS pour les évaluations de risque, ou avec ceux des fichiers, dans lesquels les nouvelles fonctions de calcul ont été codées ;
- la comparaison des résultats du module *Eaux\_souterraines* avec ceux fournis par la solution analytique implémentée dans le logiciel BIOCLOR<sup>12</sup> ;
- la comparaison des résultats du module *Conc\_gaz\_air\_interieur\_J\_E* avec ceux fournis dans les fichiers Excel GW-AD, SG-ADV, SL-ADV version 3.1 de l'US EPA<sup>13</sup> ;
- la construction de différents cas d'étude (cas simples avec des données d'entrée variables dans le temps et cas complexe impliquant l'ensemble des modules) et la comparaison des résultats numériques fournis par ECOLEGO puis les versions successives de MODUL'ERS ;
- la comparaison des résultats obtenus pour le calcul de la concentration dans le sol, selon l'équation du module *Sol*, avec les solveurs NDF, DOPRI45 de MODUL'ERS, ODE15s de Matlab et selon la solution analytique (équation donnée dans le manuel sur les jeux d'équations) codée sous Excel. Cette opération a permis de tester la précision des solveurs utilisés dans MODUL'ERS ;

---

<sup>12</sup> US EPA (US Environmental Protection Agency), BIOCLOR, Natural Attenuation decision support system, User's manual addendum, version 2.2, Office of Research and Development, 2002

<sup>13</sup> Fichiers disponibles à l'adresse : [www.epa.gov/swerrims/riskassessment/airmodel/johnson\\_ettinger.htm](http://www.epa.gov/swerrims/riskassessment/airmodel/johnson_ettinger.htm)

- l'utilisation de MODUL'ERS pendant un an par différents ingénieurs de l'unité Impact Sanitaire et Exposition de l'INERIS ;
- la mise en place d'un groupe de travail externe, composé de dix bureaux d'étude, ayant utilisé et testé l'opérationnalité de MODUL'ERS (quatre réunions réparties sur une année).

Le retour d'expérience de ces différents utilisateurs a conduit, en particulier, à améliorer l'interface de MODUL'ERS, pour le rendre plus facile d'utilisation et à adapter le matériel de formation.

## Extrait de la fiche DRC-11-115717-02920A « Spécifications et mode d'évaluation de l'outil de modélisation et simulation pour les ERS »

### Milieu Sol

Calcul de la concentration dans le sol en fonction du temps attribuable à la source étudiée
Avec ou sans apport par irrigation
Avec ou sans apport dépôts atmosphériques
Avec ou sans érosion
Avec ou sans lixiviation
Avec ou sans ruissellement
Avec ou sans volatilisation
Avec ou sans dégradation
Calcul de la concentration totale dans le sol en fonction du temps
Concentration moyenne annuelle dans le sol
Dose d'exposition par ingestion de sol pour les différentes classes d'âge
Prise en compte de la solubilité pour le calcul de la concentration dans l'eau du sol
Prise en compte d'un mélange et d'une phase résiduelle éventuelle

### Milieu air extérieur

Calcul de la concentration gazeuse dans l'air extérieur attribuable à une source sol ou nappe
En prenant en compte ou non des remontées capillaires à la surface
A partir d'une source infinie, en tenant compte de la quantité de polluant initialement présente dans le sol (source sol)
A partir d'une source finie (source sol)
En tenant compte de la présence de substances en mélange et d'une phase résiduelle éventuelle
Calcul de la concentration gazeuse dans l'air extérieur attribuable à une source sol ou nappe et tenant compte du bruit de fond extérieur
Calcul de la concentration particulaire dans l'air extérieur attribuable à une source sol
A partir de la concentration de particules en suspension dans l'air extérieur issues du sol
A partir de l'expression de Cowherd (effet de l'érosion éolienne)
Calcul de la concentration particulaire dans l'air extérieur attribuable au sol et tenant compte du bruit de fond extérieur
Niveaux d'exposition liée à la concentration dans l'air inhalé à l'extérieur pour les différentes classes d'âge

## Milieu air intérieur

Calcul de la concentration gazeuse dans l'air du lieu de vie attribuable à une source sol ou nappe
En prenant en compte un flux de diffusion et un flux de convection lié à la dépression entre l'air intérieur et l'air du sol
En prenant en compte ou non des remontées capillaires à la surface
A partir d'une source infinie, en tenant compte de la quantité de polluant initialement présente dans le sol (source sol)
En tenant compte de la présence de substances en mélange et d'une phase résiduelle éventuelle
Dans le cas d'un aquifère parfaitement mélangé ou mal mélangé (source nappe)
Calcul de la concentration gazeuse dans l'air du lieu de vie attribuable à une source sol ou nappe et tenant compte du bruit de fond extérieur
Calcul de la concentration particulaire dans l'air intérieur due à la concentration de polluant sous forme particulaire dans l'air extérieur
Calcul de la concentration particulaire dans l'air intérieur et tenant compte du bruit de fond intérieur
Niveaux d'exposition liée à la concentration dans l'air inhalée à l'intérieur d'un bâtiment pour les différentes classes d'âge

## Milieus eaux souterraines

Calcul de la concentration dans l'eau de la nappe à partir de la solution de Domenico (équation 1.4.23) en un point x,y,z
Calcul de la concentration dans l'eau de la nappe en prenant en compte le bruit de fond
Calcul de l'apport à la nappe à partir d'une source sol
Dose d'exposition par ingestion d'eau de la nappe par les différentes classes d'âge

## Milieus eaux superficielles

Calcul de la concentration dans les eaux superficielles
En tenant compte d'un rejet canalisé et de rejets diffus liés aux dépôts atmosphériques et aux apports à partir du sol par érosion et ruissellement sur les zones imperméabilisées et non imperméabilisées du bassin versant
En tenant compte ou non des pertes par volatilisation
En tenant compte ou non des pertes par sédimentation
En tenant compte ou non des pertes par dégradation
Calcul de la concentration dans les eaux superficielles en tenant compte du bruit de fond
Calcul de la concentration dans les eaux superficielles sous forme dissoute
Calcul de la concentration adsorbée sur les particules sédimentaires des eaux superficielles
Calcul de la concentration dans la couche sédimentaire superficielle
Dose d'exposition par ingestion d'eau de la source superficielle par les différentes classes d'âge (forme dissoute)

## Produits végétaux

Calcul de la contamination dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol
Calcul de la contamination dans la plante liée au dépôt particulaire à partir de l'atmosphère
En tenant compte facteur d'interception I variable dans le temps ou non
Calcul de la contamination dans la plante liée à l'absorption de polluant sous forme gazeuse
Calcul de la contamination dans la plante liée au dépôt de particules à partir du sol
Calcul de la contamination dans la plante liée à l'apport par irrigation
Calcul de la concentration dans la plante liée aux différentes contributions
Dose d'exposition par ingestion de végétaux au niveau de contamination atteint au moment de la récolte pour les différentes classes d'âge

## Produits d'animaux terrestres

Calcul de la concentration dans la viande ou la matière grasse de la viande des animaux
A l'état stationnaire à partir d'un facteur de bioconcentration ou de biotransfert
Par une approche dynamique en fin de vie de l'animal
Calcul de la concentration dans les produits excrétés par les animaux (lait, viande) ou la matière grasse de ces produits
A l'état stationnaire à partir d'un facteur de bioconcentration ou de biotransfert
Par une approche dynamique en fin de vie de l'animal
Calcul de la concentration moyenne sur un an des produits animaux
Dose d'exposition par ingestion de produits animaux pour les différentes classes d'âge

## Produits d'animaux aquatiques

Calcul de la concentration des animaux
A l'état stationnaire à partir d'un facteur de bioconcentration
Par une approche dynamique
Calcul de la concentration moyenne sur un an des animaux
Dose d'exposition par ingestion de produits animaux pour les différentes classes d'âge

## Niveaux d'exposition et de risque

Calcul des niveaux d'exposition en moyenne annuelle pour chaque vecteur, chaque voie et chaque substance pour toutes les classes d'âge
Calcul des niveaux d'exposition en moyenne annuelle pour toutes les voies et toutes les classes d'âge
Calcul des niveaux de risque chronique pour les effets à seuil
Sur toute la période de simulation pour les différentes classes d'âge
Par substance, par voie, par vecteur et QD total
Calcul des niveaux de risque pour les effets sans seuil
Le calcul sera effectué pour l'individu le plus exposé pour une durée d'exposition donnée sur la période d'étude en tenant compte des variations de ses paramètres d'exposition
Par substance, par voie, par vecteur et ERI total