

Note relative aux Polluants Non Normés (PNN) déjà présents dans S-RISK® WAL et à l'encodage d'un nouveau PNN dans ce logiciel

1. PNN déjà présents dans S-RISK® WAL

Le logiciel S-Risk® reprend dans sa base de données 22 polluants qui ne sont pas repris dans le Décret Sols. Ces 22 polluants non normés sont listés dans le Tableau ci-dessous.

Polluants non normés repris dans S-Risk	N°CAS polluants repris dans S-Risk
1,1-Dichloroethane	75-34-3
1,2,3-Triméthylbenzène	526-73-8
1,2,4-Triméthylbenzène	95-63-6
1,2-Dichlorobenzène	95-50-1
1,3,5-Triméthylbenzène	108-67-8
1,3-Dichlorobenzène	541-73-1
1,4-Dichlorobenzène	106-46-7
2,3,4,6-Tétrachlorophénol	58-90-2
2,4,5-Trichlorophénol	95-95-4
2,4,6-Trichlorophénol	88-06-2
2,4-Dichlorophénol	102-83-2
2-Chlorophénol	95-57-8
Heptane	142-82-5
Hexachlorobenzène	118-74-1
Hexane	110-54-3
Mercury (Elemental)	7439-97-6
Monochlorobenzène	108-90-7
Octane	111-65-9
Pentachlorobenzène	608-93-5
Pentachlorophénol	87-86-5
1,2,3,4-Tétrachlorobenzène	634-66-2
1,2,4-Trichlorobenzène	120-82-1

Il a été décidé pour ces 22 PNN¹ de :

- Conserver les paramètres physico-chimiques proposés dans le logiciel S-Risk®.
- Utiliser les valeurs toxicologiques de référence pour la voie d'exposition par INHALATION (VTR_{INH}) proposées par l'AWAC. Si l'AWAC n'a pas proposé de VTR, la VTR_{INH} proposée dans la

¹ Cf comités technique de la subvention ISSEP-DAS du 17/10/2016 et du 08/12/2016 et du « GT VSH » du 05/12/2016.

BD PNN v.2 est utilisée (cas du 1,4-dichlorobenzène pour les effets à seuil). Pour l'hexachlorobenzène et le pentachlorophénol, aucune VTR_{INH} n'a été proposée pour les effets à seuil², ni par l'AWAC ni dans la BD PNNv.2. Dans ce cas, une VTR_{INH} est calculée à partir de la VTR_{OR} de la BD PNN.

- Utiliser des VTR pour l'exposition par voie ORALE (VTR_{OR}) proposées par les experts toxicologues pour la SPAQuE et reprises dans la BD PNNv.2. Si la BD PNNv.2 ne propose pas de VTR_{OR}, la VTR_{OR} proposée dans le logiciel S-Risk® FL/Bx est utilisée (ex : 1,3-dichlorobenzène).

L'ensemble de ces données sont reprises dans les fiches polluants disponibles sur <https://www.s-risk.be/documents> « documents applicable to Wallonia ».

Modalités pratiques pour utiliser S-Risk® WAL en cas de PNN déjà présents dans le logiciel

Créer un dossier en cliquant sur « Create a new simulation » (en bas dans la colonne de gauche).

Onglet « Chemical »

- Dans le menu déroulant, sélectionner la fiche polluant existant dans S-RISK® et presser le bouton « Add ».

Conserver l'ensemble des données proposées pour le polluant (propriétés physico-chimiques et VTR). Les données précisées ci-dessus sont déjà toutes encodées dans le logiciel S-Risk® WAL.

2. PNN qui ne sont pas présents dans S-RISK® WAL

Modalités pratiques pour utiliser S-Risk® WAL en cas de PNN non présents dans le logiciel

Attention à bien consulter au préalable le document « protocole PNN – données toxicologiques et physico-chimiques » reprenant toute une série de recommandations relatives à la sélection des paramètres à encoder dans S-Risk.

Créer un dossier en cliquant sur « Create a new simulation » (en bas dans la colonne de gauche).

Onglet « Chemical » - Sélectionner « Switch to tier 2 » pour pouvoir éditer les fiches polluants

- Dans l'**onglet « Chemical »**, dans le menu déroulant, sélectionner la fiche « Blank chemical » et presser le bouton « Add ».

Placer le curseur sur le nom de la substance (celle-ci s'affiche en bleu) et cliquer « switch to Tier 2 » et ensuite sur « Customize » (en bas à gauche). Modifier le nom de la substance afin de pouvoir l'éditer. Les valeurs des paramètres physico-chimiques doivent être encodées suivant les valeurs reprises dans la BD PNN.

² Pour que le logiciel S-Risk® puisse calculer les risques pour un polluant présentant des effets systémiques, une VTR pour chaque voie d'exposition doit être encodée.

→ Dans l'**onglet « Plants »**,

○ **Pour les PNN organiques :**

- Si $\log Kow \geq 1$, cocher les 22 ronds « Calculation using chemical and plant properties » (calcul selon les équations de Trapp, 2002)
- Si $\log Kow < 1$ (hors du domaine d'application des équations de Trapp, 2002), cliquer sur le bouton « Add and adjust available BCFmodels » - « display formula for planttype » puis encoder ensuite manuellement les BCF calculés avec les équations de Briggs (1982, 1983), repris dans la BD PNN, par « planttype » selon :
Briggs « racines » → « potatoes » / « root and tuberous » / « bulbous plants »
Briggs « aériens » → « fruits vegetables » / « cabbages » / « leafy vegetables » / « leguminous vegetables » / « grain » / « grasses »

Cocher ensuite les 22 ronds « Calculation using plant type BCF ».

○ **Pour les PNN inorganiques :** Cliquer sur le bouton « add or adjust available BCF models » puis « display formula for planttype ». Encoder ensuite les BCF de Pollusol 2 (valeur ou équation « $\log(\text{BCF})$ » telle que reprise dans la BD PNN) pour les 4 sortes de légumes analysés & pommes-de-terres selon :

- Pomme de terre -> plant type « potatoes »
- Carotte -> plant types « root and tuberous » / « bulbous »
- Salade -> plant types « cabbages » / « leafy vegetables » / « grasses »
- Haricots -> plant types « fruit vegetables » / « leguminous vegetables » / « grain »

Une fois tous les BCF (valeurs ou équations) encodés, cliquer sur OK. Dans le tableau, cocher « calculation using plant type BCF ».

→ Dans l'**onglet « Animals »**,

- **Pour les PNN organiques :** cocher la case « use model » pour le calcul des BTF
- **Pour les PNN inorganiques :** Encoder les BTF repris dans la BD PNN en appliquant BTF beef = BTFmutton (= BTF meat) = BTF liver = BTFkidney, selon les données disponibles. En l'absence de donnée, introduire « 0 » mais ne pas oublier que cette voie d'exposition ne sera pas prise en compte.

A noter que le transfert vers les œufs (voie d'exposition proposée mais non prise en compte dans le scénario AGR standard) sera uniquement pris en compte si une valeur de « chicken-soil to egg BTF » et « chicken-feed to egg BTF » est encodée.

→ Dans l'**onglet « Exposure »** - « dermal exposure parameters » :

○ Pour K_p :

- **Pour les PNN organiques :** cocher la case « use model » si aucune donnée n'est reprise dans la BD PNN.
- **Pour les PNN inorganiques :** laisser la valeur par défaut de 10^{-3} cm/h

○ Pour ABS : La valeur reprise dans la BD PNN et, si aucune donnée n'est disponible, laisser la valeur par défaut (0.25)

○ Pour FA (« Fraction absorbed water ») : Laisser la valeur par défaut de « 1 » sauf si une autre valeur est disponible dans la BD PNN.

→ Dans l'**onglet « Risk »**, sélectionner la substance concernée (celle-ci s'affiche alors en bleu) et encoder les VTR_{INH} et les VTR_{OR} de la BD PNN dans les cases « Threshold effects » et « Non-

threshold effects » pour les effets locaux et/ou systémiques selon les données reprises dans la BD PNN. Le logiciel S-Risk® a besoin de VTR pour chaque catégorie d'âge et pour les 3 voies d'exposition (inhalation, orale et contact cutané) pour permettre le calcul des risques (ou excès de risque). Actuellement, pour les PNN, les VTR sont identiques pour chaque catégorie d'âge et la VTR_{OR} est également utilisée pour le contact cutané.

Exemple illustratif (1,4-dichlorobenzène)

Model inputs & outputs

Scenario: 1,4-Dichlorobenzene

Switch to Tier 1

Threshold effects			
	1	2	3
1-<3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3-<6	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
6-<10	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
10-<15	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
>15	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
TDI/TCA			
inhalation	6.1E-2	6.1E-2	6.1E-2
oral	7.0E-2	7.0E-2	7.0E-2
dermal	7.0E-2	7.0E-2	7.0E-2

Units:
Oral TDI: mg/(kg bw.d)
Inhalation TCA: mg/m²
Dermal TDU: mg/(kg bw.d)

Non-threshold effects			
	1	2	3
1-<3	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
3-<6	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
6-<10	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
10-<15	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
>15	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>
SF/UR			
inhalation	1.1E-2	1.1E-2	1.1E-2
oral	4.0E-2	4.0E-2	4.0E-2
dermal	4.0E-2	4.0E-2	4.0E-2

Units:
Oral SF: 1 / (mg/(kg bw.d))
Inhalation UR: 1 / (mg/m²)
Dermal SF: 1 / (mg/(kg bw.d))

Pseudo-threshold effects			
	1	2	3
1-<3	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
3-<6	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
6-<10	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
10-<15	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>
>15	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>
pTDI/pTCA			
inhalation			
oral			
dermal			

Units:
Oral pTDI: mg/(kg bw.d)
Inhalation pTCA: mg/m²
Dermal pTDU: mg/(kg bw.d)

Cas particulier : Encodage dans S-Risk® WAL d'un PNN repris dans la BD PNN mais non mis à jour (Risc-Human®)

Certains PNN repris dans la BD PNN n'ont pas encore été mis à jour. Les VL_H de ces PNN ont été calculées avec Risc-Human®. Pour encoder ces PNN dans S-Risk® WAL, certains paramètres sont manquants (BCF, BTF, paramètres cutané). L'expert doit se référer à l'Annexe 1 (protocole pour la démarche d'élaboration des Valeurs Limites) pour établir des valeurs pour les paramètres manquants afin de pouvoir évaluer le risque à l'aide du logiciel S-Risk® WAL.

Pour les VTR (onglet « Risk »), il y a lieu de distinguer les VTR à seuil des sans seuil ainsi que les effets systémiques des effets locaux. Quand le polluant présente des effets systémiques, des VTR doivent être encodées pour chaque voie d'exposition pour que S-Risk® puisse calculer un risque (ce qui n'est pas le cas pour les effets locaux). Une (ou plusieurs) VTR est à encoder dans S-Risk® WAL pour les effets locaux **uniquement** lorsque cette information (effet local) est mentionnée dans la BD PNN. Dans le cas contraire, il ne faut rien encoder pour ce type d'effet.

Afin d'utiliser les VTR « unités Risc Human », les recommandations reprises ci-dessous doivent être suivies :

- Les **VTR à seuil** peuvent être encodées directement dans l'outil S-Risk® WAL (les unités sont identiques).
 - o Si aucune VTR pour le contact cutané n'est proposée, la VTR orale peut être utilisée.
 - o Si aucune VTR n'est disponible pour la voie d'exposition par inhalation, l'expert peut, en première approche, dériver une VTR_{inh} à partir de la VTR orale en appliquant la formule suivante :

$$TCA = (TDI \times 70) / 20$$

Avec TCA : Tolérable Concentration in Air (soit VTR_{inh}) en mg/m^3

TDI : Tolérable Daily Intake (soit VTR_{or}) en $mg/kg.j$

En considérant un adulte de 70kg qui respire $20m^3$ d'air par jour.

- Les **VTR sans seuil** sont exprimées en $mg/kg.j$ (VTR_{or}) et en mg/m^3 (VTR_{inh}) dans Risc Human®. Les VTR sans seuil sont exprimées avec d'autres unités dans S-Risk®. Elles sont exprimées en $[(mg/kg.p.c./jour)^{-1}]$ pour la voie orale et en $[(mg/m^3)^{-1}]$ pour la voie par inhalation. La conversion peut se faire en appliquant la formule suivante :

$$\frac{1.10^{-5}}{VTR \text{ exprimée en } (mg/m^3)^{-1}} = VTR \text{ exprimée en } mg/m^3$$

Les valeurs ainsi obtenues correspondent à un niveau de risque additionnel de cancer de 1.10^{-5} (soit un risque additionnel de cancer pour 100.000 personnes).

Si une VTR sans seuil est proposée pour une voie d'exposition mais est manquante pour l'autre voie d'exposition, en première approche, une VTR aberrante de $1.10^{-8} (mg/kg.p.c./jour)^{-1}$ ou $(mg/m^3)^{-1}$ doit être encodée dans le logiciel S-Risk® WAL pour la voie d'exposition manquante. La VTR_{orale} est également utilisée pour la voie d'exposition cutanée.

Recommandation : Dans S-Risk®, il est important de bien nommer ses simulations en indiquant le nom du PNN dans le nom de la simulation (« name ») afin de pouvoir le retrouver si d'autres simulations doivent être réalisées avec ce PNN. Cela évite de ré-encoder ce PNN.