Classification des pesticides à l'aide de cartes auto-organisatrices de Kohonen en vue du développement de normes de performance agro-environnementale atteignables (NPA) à l'échelle des bassins versants

Préparé par :

Alain N. Rousseau, Ph.D., ing.
Martine Grenier, M.Sc.
Pierre Lafrance, D. d'État Sc. Phys.
Renaud Quilbé, D.Sc.

Centre Eau Terre et Environnement
Institut national de la recherche scientifique (INRS-ETE)
490, rue de la Couronne, Québec (QC), G1K 9A9

Rapport N° R-932

31 janvier 2007

© Alain Rousseau, 2007
ISBN 978-2-89146-543-4
Dépôt légal Bibliothèque nationale du Québec
Dépôt légal Bibliothèque nationale du Canada

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES ..... **III**

LISTE DES TABLEAUX ..... **V**

LISTE DES FIGURES ..... **VII**

1 INTRODUCTION **1**

2 CLASSIFICATION DES DONNÉES SUR LES PESTICIDES **3**

2.1 MÉTHODE DE CLASSIFICATION : LES CARTES AUTO-ORGANISATRICES DE KOHONEN 3

2.2 APPLICATION À LA CLASSIFICATION DES PESTICIDES 4

2.2.1 Classification des pesticides 4

2.2.2 Détermination des groupes de pesticides 5

2.3 DISCUSSION SUR LES GROUPES OBTENUS DE PESTICIDES 14

2.3.1 Groupes obtenus (6) et classes chimiques des pesticides ainsi regroupés 14

2.3.2 Comparaison entre les six groupes obtenus (carte auto-organisatrice de Kohonen) et les six groupes proposés par la « méthode de l'expertise » (Rousseau *et al.*, 2006) 20

3 CONCLUSION **23**

4 RÉFÉRENCES **25**

ANNEXE A. ORDINATION ET MÉTHODES DE CLASSIFICATION **29**

ANNEXE B. LISTE DES 340 PESTICIDES (HORNSBY *ET AL.*, 1996) CLASSÉS SELON LA MÉTHODE DES CARTES DE KOHONEN **35**

ANNEXE C. CLASSIFICATION ANTÉRIEURE DES PESTICIDES PAR LA MÉTHODE DE L'EXPERTISE (ROUSSEAU *ET AL.*, 2006) **43**

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 : Statistiques descriptives des caractéristiques bio-physico-chimiques (sorption [ml/g]; solubilité [mg/l]; demi-vie [jour]) de chacun des six groupes de pesticides 10

Tableau 2.2 : Classification générale des pesticides en six groupes selon leurs caractéristiques bio-physico-chimiques 11

Tableau 2.3 : Comparaison des méthodes de classification basées sur les cartes auto-organisatrices de Kohonen avec la méthode de « l'expertise » 21

Tableau 4.1 : Liste des 340 pesticides avec les valeurs de leurs paramètres bio-physico-chimiques (sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour]) et leur classification selon la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen. Code des principaux organismes-cibles pricipaux de chaque pesticide : A = Algicide; B = biocide (au moins trois organismes-cibles, soit par exemple H+I+F); FO = fongicide; FU = fumigant pesticide (insecticide et/ou nématicide, *etc.*); H = herbicide; I = insecticide; RC = Régulateur de Croissance. 35

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 : Carte auto-organisatrice de Kohonen. 4

Figure 2.2 : Cartes de distribution issues de la carte auto-organisatrice de Kohonen. Les cellules foncées représentent des valeurs élevées, alors que les cellules pâles représentent des valeurs faibles. L'échelle *d* indique les valeurs transformées de sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour] par le logarithme. 5

Figure 2.3 : Arbre de classification des pesticides obtenu avec la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen. Les groupes N° 1 à 6 sont obtenus avec une distance de 0.4. 6

Figure 2.4 : Résultat pour les six groupes de pesticides formés à partir de la carte auto-organisatrice de Kohonen (résultats bruts de l'analyse). Les chiffres encadrés identifient les groupes de pesticides, tandis que les chiffres encerclés représentent les niveaux de différenciation des groupes établis par la *U-matrix*. Les nombres dans les cellules (*e.g.* P39) représentent les numéros d'identification des pesticides (voir ANNEXE B). 7

Figure 2.5 : Résultat pour les six groupes de pesticides formés à partir de la carte auto-organisatrice de Kohonen et après correction par l'analyste. Les chiffres encadrés identifient les groupes de pesticides, tandis que les chiffres encerclés représentent les niveaux de différenciation des groupes établis par la *U-matrix*. Les nombres dans les cellules (*e.g.* P39) représentent les numéros d'identification des pesticides (voir ANNEXE B). 9

Figure 2.6 : Box-plot représentant les statistiques descriptives des caractéristiques bio-physico-chimiques de chacun des six groupes de pesticides. Les valeurs de sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour] sont réparties de manière logarithmique sur l'axe des abscisses. 10

Figure 2.7 : Analyse en Composantes Principales (ACP) illustrant la position des pesticides et des groupes de pesticides en fonction des caractéristiques bio-physico-chimiques. Représentation des 340 pesticides (a) et des composés nominatifs comptant parmi les 10 pesticides « *Top ten* » d'EC, plus le *Métolachlor* et le *MCPB* (b). Les caractéristiques bio-physico-chimiques ont

subi une transformation logarithmique afin de réduire l'effet des valeurs extrêmes. Les valeurs propres des trois premiers axes sont les suivantes : λ_1 = 59 ; λ_2 = 30.5 et λ_3 = 10.5. 13

Figure A.1 : Représentation schématique d'une carte auto-organisatrice de Kohonen. 30

Figure A.2 : Exemple d'une carte auto-organisatrice de Kohonen. 33

Figure A.3 : Représentation schématique du diagramme hiérarchique de Ward issu de la *U-Matrix*. 33

Figure C. 1 : Classification (en 6 classes-groupes) des 340 pesticides (banque de données de Hornsby *et al.*, 1996). « *Top 28 pesticides* » représente les composés présents à la fois dans la banque de données et dans la liste des 50 pesticides « prioritaires » d'EC. Les composés nominatifs avec un symbole de couleur distinctive comptent parmi les 10 pesticides « *Top ten* » d'EC, excepté le *Métolachlor* et le *MCPB*. 43

1 INTRODUCTION

Dans le cadre de l'Initiative Nationale d'Élaboration des Normes Agro-environnementales (INÉNA) menée par Environnement Canada (EC), des normes de performances agro-environnementales idéales (NPI) et atteignables (NPA) doivent être définies pour servir de cadre de référence pour le secteur agricole. Ces normes permettront de jauger la performance environnementale de ce secteur et d'orienter les actions pour l'améliorer, notamment pour guider la mise en œuvre et le développement de pratiques de gestion bénéfiques (PGB[1]).

Dans le cadre de ce projet, EC et le Centre Saint-Laurent ont confié à l'INRS-ETE le mandat de : (1) réaliser une comparaison des modèles hydrologiques existants de transport des pesticides à l'échelle des bassins versants, puis (2) de proposer une démarche pour la détermination des NPA à l'aide d'un ou plusieurs de ces modèles sur le bassin versant de la rivière Chaudière. Ce travail a été réalisé et présenté en mars 2006 dans le Rapport *R-786F* (Rousseau *et al.*, 2006).

Une classification des pesticides en neuf et en six groupes (selon les besoins), basées sur leurs propriétés bio-physico-chimiques, avait été proposée dans le Rapport R-786F (Rousseau *et al.* 2006). Cette classification constituait une première approche de regroupement des pesticides basée sur des connaissances et une expertise des valeurs des paramètres généralement retrouvées dans la littérature pour les pesticides les plus couramment étudiés et/ou les plus couramment utilisés en grandes cultures. Cette classification antérieure reposait ainsi sur des ordres de grandeurs, pour les valeurs des propriétés, typiquement rencontrées pour des pesticides à risque (ou non) de contamination des eaux de surface. À titre d'exemple, un temps de demi-vie de 30 jours (valable pour l'atrazine et d'autres s-triazines utilisées en grandes cultures) avait été choisi comme l'une des bornes de classification permettant de différencier des pesticides à persistance modérée, tel qu'on le rencontre également pour plusieurs autres composés phytosanitaires présentant une fenêtre d'action typique contre certaines plantes adventices dans la culture intensive du maïs.

En ce sens, ce type de classification proposé en mars 2006 (Rapport *R-786F*) est très utile pour regrouper des pesticides présentant des utilisations et des valeurs de propriétés bio-physico-chimiques semblables ou du même ordre de grandeur. Cependant, la frontière que pouvait

[1] Les PGB sont les pratiques agricoles qui intègrent les connaissances et techniques agricoles les plus actuelles à propos de la conservation du sol, de la gestion des systèmes de cultures, des pesticides et de l'eau, sans compromettre la productivité économique au niveau de la ferme.

constituer un couple de valeurs de paramètres bio-physico-chimiques, et qui permettait alors de différencier deux groupes de pesticides, demeurait qualitative et laissée au jugement de l'expert.

Nous avons donc pris l'initiative de compléter cette première classification par une autre approche davantage quantitative, en réalisant une seconde et nouvelle classification des pesticides à l'aide d'une méthode de réseau de neurones (cartes auto-organisatrices de Kohonen). Cela a permis d'obtenir six (6) « nouveaux » groupes de pesticides, cette fois-ci basées sur des critères statistiques à la fois logiques et rigoureux. Ce chapitre présente la procédure utilisée ainsi que les résultats obtenus.

2 CLASSIFICATION DES DONNÉES SUR LES PESTICIDES

2.1 MÉTHODE DE CLASSIFICATION : LES CARTES AUTO-ORGANISATRICES DE KOHONEN

Les cartes auto-organisatrices de Kohonen (« Kohonen Self-Organising Maps », SOMs) sont des réseaux de neurones non-supervisés qui permettent d'ordonner et de classifier des échantillons en fonction de leur similarité. La méthode offre une alternative à la classification hiérarchique unidimensionnelle et aux méthodes d'ordination en réduisant les relations multidimensionnelles à deux dimensions (axes), ce qui facilite la classification et l'interprétation. Comme dans les méthodes d'ordination, les deux dimensions permettent de préserver la topologie (distance relative) et de visualiser la proximité entre les échantillons. En somme, elles ont en commun avec les méthodes conventionnelles d'ordination de représenter en deux dimensions des relations multidimensionnelles (Giraudel et Lek 2001, Foody 1999).

La carte auto-organisatrices de Kohonen présente divers avantages par rapport aux méthodes d'ordination linéaires et de classification habituellement utilisées pour extraire des groupes d'échantillons recueillis, dont l'Analyse en Composantes Principales (ACP), l'Analyse des Correspondances (AC) et la classification hiérarchique (cluster). Leurs limitations sont bien connues. Par exemple, pour chacune d'elle, une forte distorsion est observée lorsqu'il y a des relations non-linéaires entre les variables, ce qui produit un effet « fer à cheval » dans les ACP et un effet « d'arche » dans l'AC, *etc.* (Giraudel et Lek 2001). Afin de remédier aux problèmes causés par les relations non-linéaires, des méthodes basées sur des calculs de distance ont été créées, telles le Cadrage multidimensionnel non-métrique (NMDS), l'Ordination Polaire (OP) et les cartes auto-organisatrices de Kohonen (SOMs). Les méthodes basées sur des mesures de distances présentent d'autres avantages: (1) les données aberrantes n'affectent pas la position ou l'ordre des échantillons et (2) l'addition d'un échantillon n'affecte pas l'ordination (OP et SOMs). La méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen est décrite à l'ANNEXE A.

Dans cette étude, les cartes auto-organisatrices de Kohonen sont réalisées à partir du logiciel MATLAB avec un programme réalisé par Giraudel et Lek (2001) du Laboratoire Dynamique de la Biodiversité (Université Paul Sabatier, Toulouse, France). La fonction est également disponible au www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox. Des informations supplémentaires sur la

théorie des SOMs et ses applications en écologie peuvent être obtenus dans Kohonen (2001) et Park *et al.* (2003*c*).

2.2 APPLICATION À LA CLASSIFICATION DES PESTICIDES

2.2.1 Classification des pesticides

L'algorithme de la carte de Kohonen a permis en premier lieu de regrouper les 340 pesticides (Hornsby *et al.*, 1996) dans les 90 cellules de la carte auto-organisatrice de Kohonen prédéterminées à l'aide de la formule de Park (Figure 2.1).

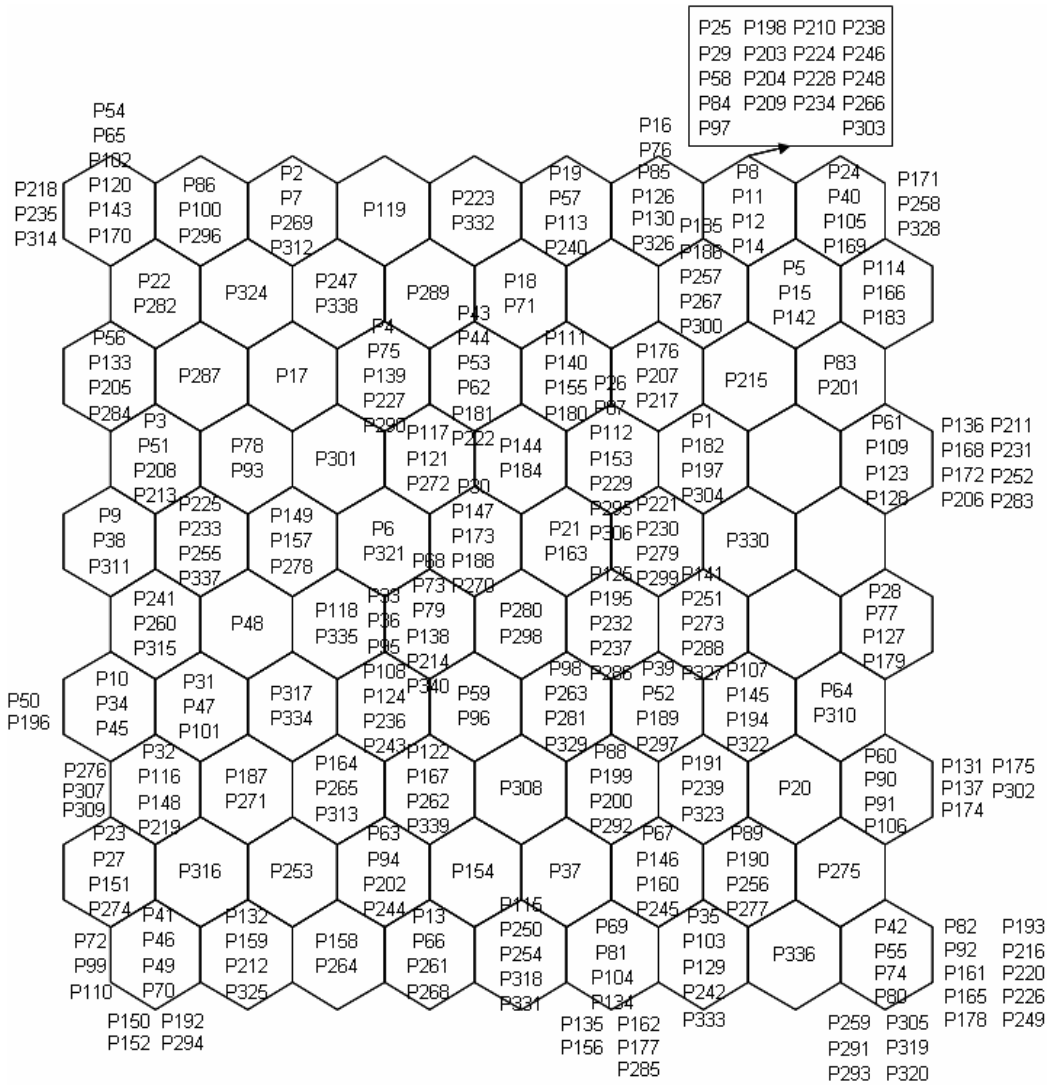

Figure 2.1 : Carte auto-organisatrice de Kohonen.

Les cartes de distribution (« distribution maps » ou « component planes »), issues de la carte de Kohonen, sont représentées à la Figure 2.2. Elles permettent de visualiser la répartition des pesticides en fonction de leurs caractéristiques bio-physico-chimiques.

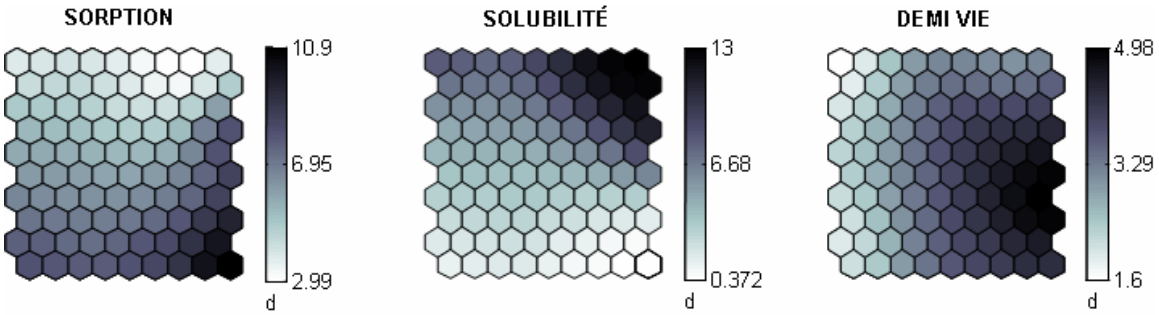

Figure 2.2 : Cartes de distribution issues de la carte auto-organisatrice de Kohonen. Les cellules foncées représentent des valeurs élevées, alors que les cellules pâles représentent des valeurs faibles. L'échelle *d* indique les valeurs transformées de sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour] par le logarithme.

2.2.2 Détermination des groupes de pesticides

La *U-matrix* et la classification descendante hiérarchique de Ward ont ensuite permis de regrouper les cellules en groupes de pesticides. L'arbre de classification est représenté à la Figure 2.3. Le nombre de groupes est alors déterminé en fonction de la distance euclidienne choisie. Ainsi, une distance de 0.2 aboutit à la distinction de 12 groupes, une distance de 0.4 aboutit à six groupes, et une distance de 0.6 permet de distinguer quatre groupes de pesticides.

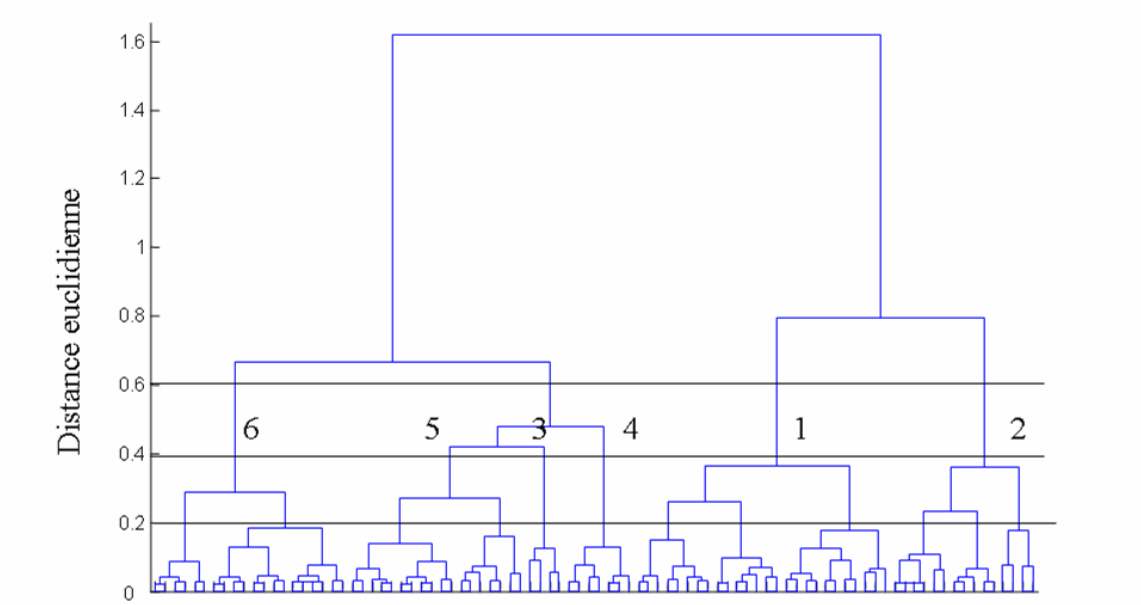

Figure 2.3 : Arbre de classification des pesticides obtenu avec la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen. Les groupes N° 1 à 6 sont obtenus avec une distance de 0.4.

Le nombre de groupes provenant de cette classification est laissé au choix de l'utilisateur : il doit donc être déterminé selon les objectifs de l'application et l'appréciation de l'analyste. Dans le cadre de ce travail, nous avons choisi de distinguer **six (6) groupes** de pesticides (coupure à la distance euclidienne de 0.4) car cela constituait un bon compromis entre un nombre de groupes restreint et une bonne représentativité des différences de propriétés entre les pesticides. Les six groupes ainsi obtenus sont représentés à la Figure 2.4.

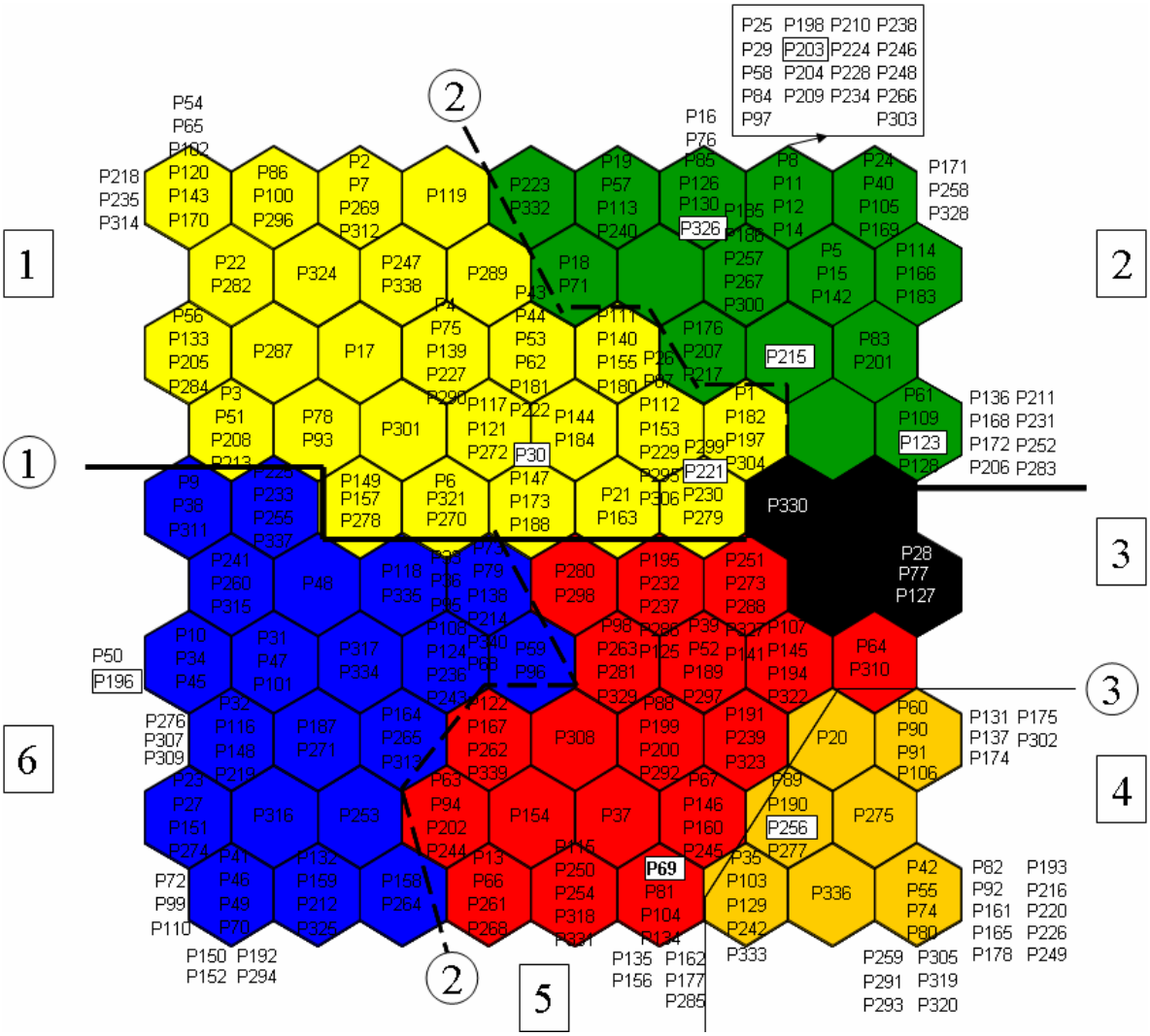

Figure 2.4 : Résultat pour les six groupes de pesticides formés à partir de la carte auto-organisatrice de Kohonen (résultats bruts de l'analyse). Les chiffres encadrés identifient les groupes de pesticides, tandis que les chiffres encerclés représentent les niveaux de différenciation des groupes établis par la *U-matrix*. Les nombres dans les cellules (*e.g.* P39) représentent les numéros d'identification des pesticides (voir ANNEXE B).

On constate sur cette figure que le groupe 3 est plus restreint que les autres groupes, ne comprenant que quatre pesticides qui se distinguent par des valeurs élevées pour chacun des trois paramètres bio-physico-chimiques (sorption, solubilité et demi-vie).

L'expertise de l'analyste est également nécessaire à ce stade pour valider ou corriger cette classification. Dans notre cas, sur la base des représentations graphiques, nous avons décidé d'inclure deux cellules du groupe 2 (en vert) dans le groupe 3 (en noir). En effet, les pesticides appartenant à ces deux cellules étaient relativement éloignés (différents) des autres pesticides

du groupe 2 et ont des propriétés semblables aux pesticides du groupe 3. On obtient, de cette façon, la classification finale représentée sur la Figure 2.5.

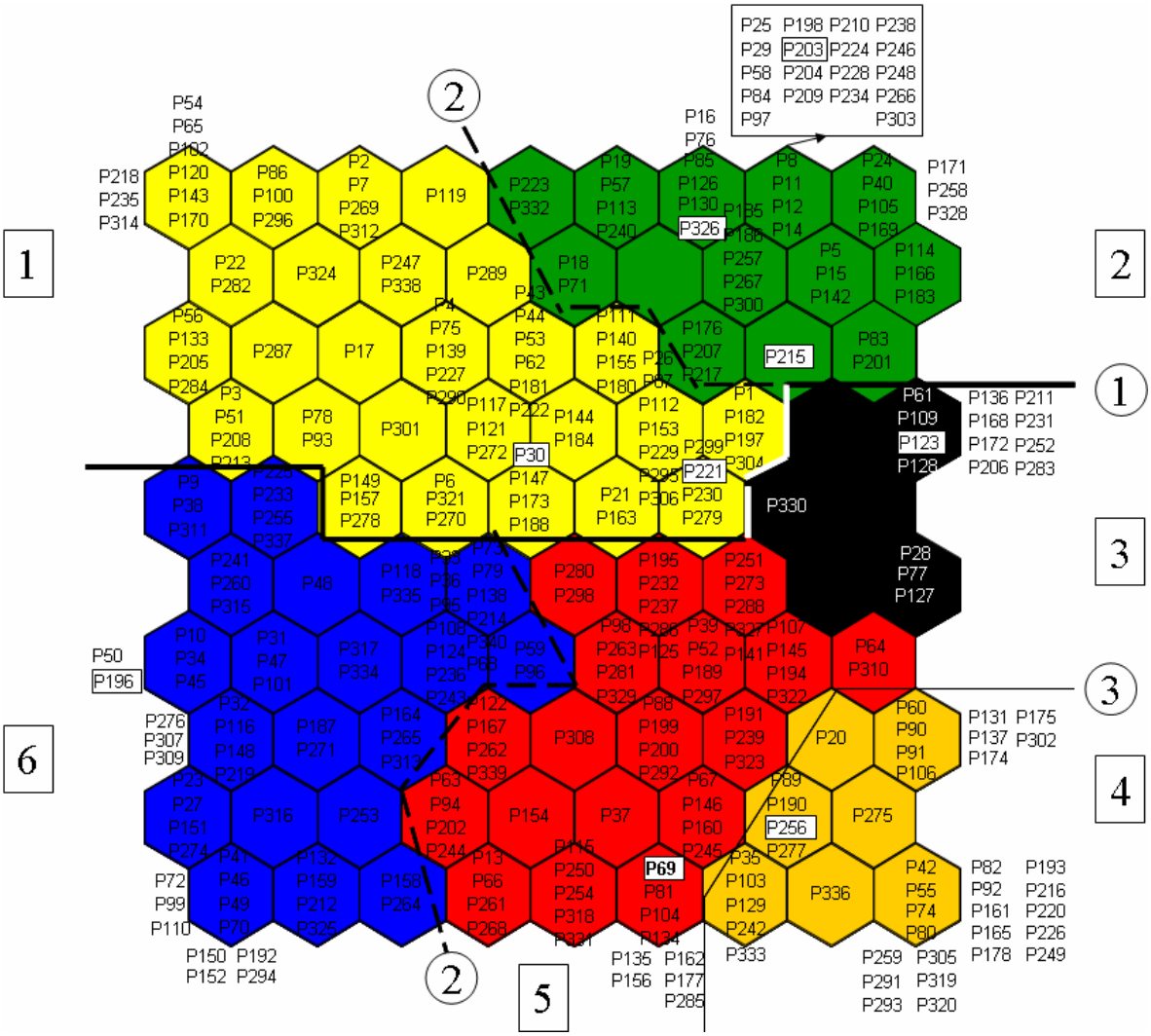

Figure 2.5 : Résultat pour les six groupes de pesticides formés à partir de la carte auto-organisatrice de Kohonen et après correction par l'analyste. Les chiffres encadrés identifient les groupes de pesticides, tandis que les chiffres encerclés représentent les niveaux de différenciation des groupes établis par la *U-matrix*. Les nombres dans les cellules (*e.g.* P39) représentent les numéros d'identification des pesticides (voir ANNEXE B).

L'ANNEXE B énumère les pesticides qui forment chaque groupe de pesticides ainsi que les valeurs de leurs caractéristiques bio-physico-chimiques. Les statistiques descriptives des caractéristiques bio-physico-chimiques de chacun des six groupes de pesticides sont également représentées sous forme de box-plot (Figure 2.6) et de tableaux (Tableau 2.1 et Tableau 2.2).

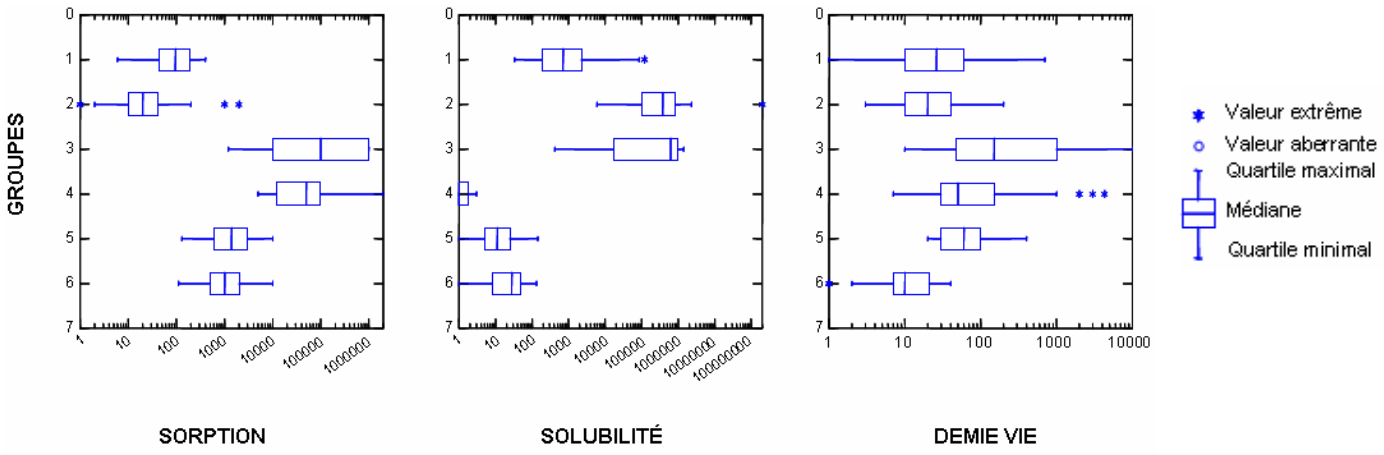

Figure 2.6 : **Box-plot représentant les statistiques descriptives des caractéristiques bio-physico-chimiques de chacun des six groupes de pesticides. Les valeurs de sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour] sont réparties de manière logarithmique sur l'axe des abscisses.**

Tableau 2.1 : Statistiques descriptives des caractéristiques bio-physico-chimiques (sorption [ml/g]; solubilité [mg/l]; demi-vie [jour]) de chacun des six groupes de pesticides

		Minimum	Maximum	Médiane	Moyenne	Écart type
Sorption	Groupe 1	6	400	95	120,57	95,40
	Groupe 2	0	2000	20	83,083333	283,395531
	Groupe 3	1200	1000000	100000	329864,71	447491,577
	Groupe 4	5000	2000000	50000	176570,73	378274,06
	Groupe 5	130	10000	1390	2098,39	1960,90
	Groupe 6	110	10000	1000	2237,66	3014,10
Solubilité	Groupe 1	33	120000	700	4078,86	16002,24
	Groupe 2	6000	200000000	380000	3828526,7	25760024,4
	Groupe 3	420	1400000	620000	586183,53	473942,176
	Groupe 4	0	3	0	0,15	0,53
	Groupe 5	0	142	6,5	16,95	26,36
	Groupe 6	0	130	23	31,68	34,81
Demi vie	Groupe 1	0	700	25	53,48	101,92
	Groupe 2	3	200	20	34,9	41,1408082
	Groupe 3	10	10000	150	1052,8235	2427,33798
	Groupe 4	7	4300	50	387,73	862,88
	Groupe 5	20	403	60	85,38	86,61
	Groupe 6	1	40	10	13,99	10,29

Tableau 2.2 : Classification générale des pesticides en six groupes selon leurs caractéristiques bio-physico-chimiques

	Sorption	Solubilité	Demi-vie
Groupe 1	faible	moyenne	faible/moyenne
Groupe 2	très faible	très élevée	moyenne
Groupe 3	élevée/très élevée	élevée	très élevée
Groupe 4	très élevée	très faible	élevée
Groupe 5	moyenne	faible	moyenne/élevée
Groupe 6	moyenne	faible	faible

La Figure 2.7 représente, à l'aide d'une Analyse en Composantes Principales (ACP), ces mêmes groupes des pesticides en relation avec les caractéristiques bio-physico-chimiques à l'origine de leur formation. L'ACP permet de valider les groupes formés par la carte de Kohonen. Elle représente la position des pesticides en fonction de gradients environnementaux formés à partir des caractéristiques à l'étude. De cette façon, les groupes plus ou moins homogènes, les pesticides ayant des valeurs extrêmes et davantage caractérisés par une ou plusieurs caractéristiques peuvent être distingués.

Les sept composés nominatifs comptant parmi les 10 pesticides « *Top ten* » d'EC (et qui sont présents dans la banque de Hornsby *et al.* 1996), plus le *Métolachlor* et le *MCPB,* sont représentés dans une deuxième ACP à la Figure 2.7. Cette méthode d'ordination est également décrite dans l'ANNEXE A. Les figures de droite ne sont pas commentées ici car elle n'apportent pas, globalement, beaucoup d'éléments supplémentaires et utiles dans le cas présent. De fait, les deux figures de gauche qui sont commentées ci-après expliquent presque totalement (à 89.5%) la variabilité des propriétés des pesticides.

L'ACP démontre que les groupes de pesticides varient principalement en fonction de la solubilité et de la sorption (axe 1: horizontal, expliquant 59% de la variabilité), ces deux propriétés étant reliées l'une à l'autre (relation inverse). Ainsi, les pesticides des groupes à la gauche du graphique sont solubles et peu adsorbés, alors que les pesticides à la droite ont un comportement inverse. Comme nous pouvons le voir sur les figures de gauche, les pesticides varient ensuite en fonction de leur demi-vie (axe 2: vertical, expliquant 30.5% de la variabilité). Les pesticides situés en haut du graphique sont donc persistants, contrairement à ceux situés en bas du graphique. Donc bien qu'il y ait trois variables, les pesticides varient principalement en fonction de deux grands comportements : solubilité-sorption et demi-vie. Chaque groupe est homogène au niveau de la solubilité-sorption (faible variabilité sur l'axe 1) mais présente des persistances plus variables (variabilité sur l'axe 2). La solubilité-sorption conditionne principalement le regroupement des pesticides des Groupes 1, 2 et 4 et l'on voit graphiquement (écart avec l'axe 2) que la demi-vie a peu d'influence sur le regroupement

(surtout les Groupes 1 et 4). La formation des Groupes 3, 5 et 6 est également influencée par la demi-vie. Les pesticides du Groupe 3 sont très persistants (demi-vie moyenne de 1053 jours), ceux du Groupe 5 moyennement persistants (demi-vie moyenne de 85 jours), alors que ceux du Groupe 6 le sont peu (demi-vie moyenne de 15 jours; voir Tableau 2.1 et Tableau 2.2).

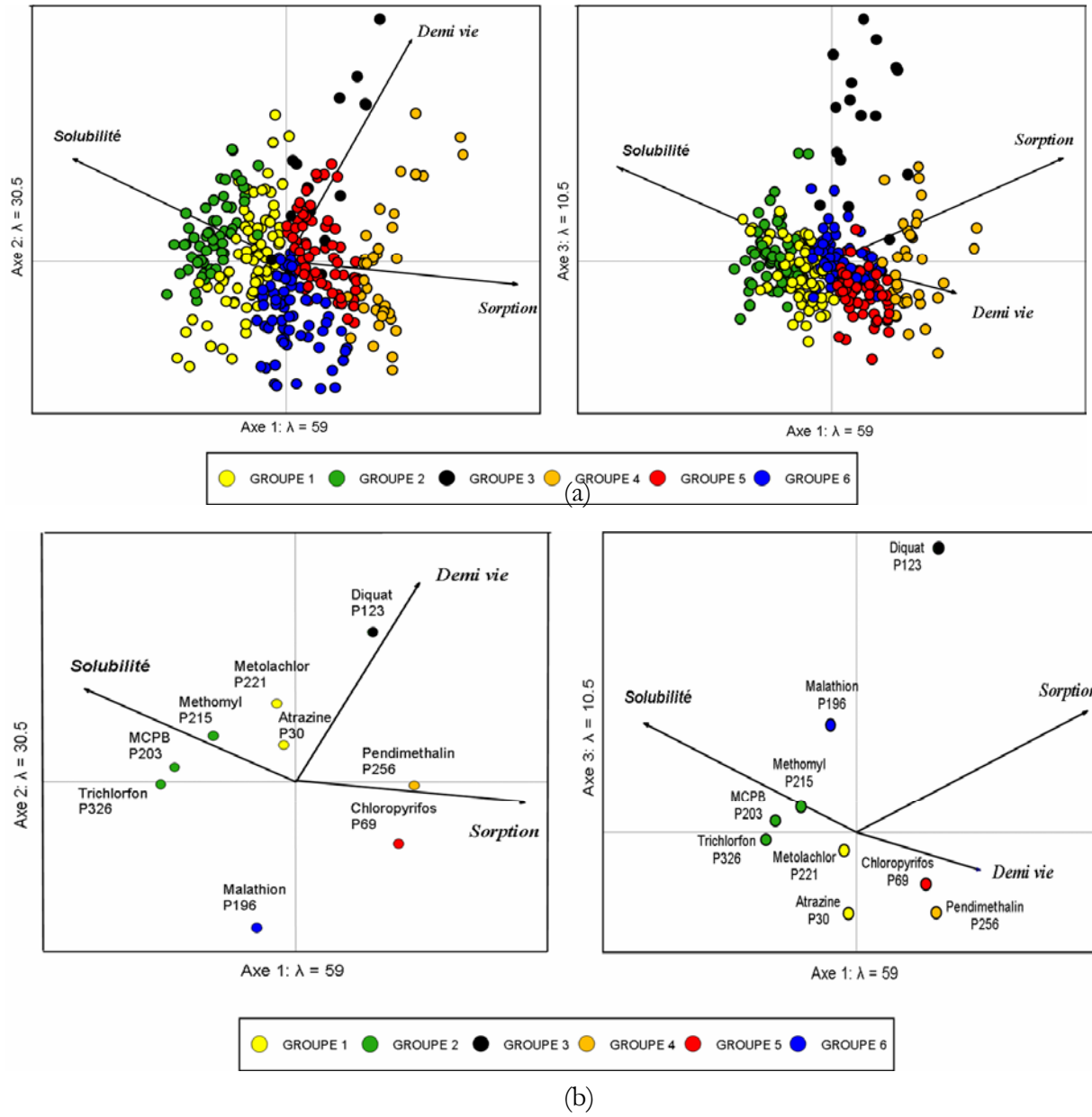

Figure 2.7 : **Analyse en Composantes Principales (ACP) illustrant la position des pesticides et des groupes de pesticides en fonction des caractéristiques bio-physico-chimiques. Représentation des 340 pesticides (a) et des composés nominatifs comptant parmi les 10 pesticides « *Top ten* » d'EC, plus le *Métolachlor* et le *MCPB* (b). Les caractéristiques bio-physico-chimiques ont subi une transformation logarithmique afin de réduire l'effet des valeurs extrêmes. Les valeurs propres des trois premiers axes sont les suivantes : $\lambda_1 = 59$; $\lambda_2 = 30.5$ et $\lambda_3 = 10.5$.**

2.3 DISCUSSION SUR LES GROUPES OBTENUS DE PESTICIDES

2.3.1 Groupes obtenus (6) et classes chimiques des pesticides ainsi regroupés

2.3.1.1 Identification de la classe chimique

Les six groupes de pesticides obtenus à partir de la méthode des cartes de Kohonen prennent en compte la totalité des 340 pesticides de la banque de Hornsby et al. (1996). Dans un premier temps, il est intéressant d'investiguer à quelles **classes chimiques**[1] de pesticides appartiennent les composés ainsi catégorisés en six groupes. En effet, chacun de ces six groupes résulte d'une classification rationnelle des composés basée sur leurs propriétés bio-physico-chimiques.

Notons qu'il est possible de distinguer, parmi les pesticides agricoles, **45 classes chimiques** de composés (MENVIQ, 2002). Par ailleurs, nous identifierons ci-après les classes chimiques des pesticides de la liste de Hornsby et al. (1996) à partir de la base de données PAN (« Pesticide Action Network North America »). La base PAN « Pesticide database – Chemicals » est l'une des bases de données publiques identifiant la classe chimique (« chemical class ») de chaque pesticide, à l'adresse : http://www.pesticideinfo.org/Index.html

Nous pourrions ainsi anticiper qu'un groupe de pesticides serait susceptible de regrouper des composés appartenant à la même classe chimique ou à des classes chimiques peu dissemblables (en termes ou bien de propriétés, ou bien de structure chimique, ou bien d'organisme-cible, ou bien d'une combinaison de ces caractéristiques). Également, la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen pourrait aider à visualiser, parmi les six groupes obtenus, lesquels pourraient contenir plusieurs classes chimiques différentes d'insecticides, herbicides, fongicides ou autres biocides.

2.3.1.2 Groupes obtenus par les cartes de Kohonen et classes chimiques

La liste des composés présents dans chacun des six groupes de la carte auto-organisatrice de Kohonen ajustés par l'analyste est indiquée en ANNEXE B. Rappelons que les statistiques descriptives pour ces six groupes sont indiquées à la Figure 2.6 et au Tableau 2.1. Nous

[1] Le lecteur est prié de bien noter l'utilisation du mot **« classe » chimique** dans ce rapport, qui désigne bel et bien un « groupe » chimique de composés possédant une structure chimique semblable. Les 45 **« classes »** chimiques comprennent, par exemple, des composés organochlorés et pyréthrinoïdes (insecticides), des composés triazines (herbicides) et des composés carbamates (*e.g.* fongicides). Le terme **« groupe »** (parfois utilisé pour désigner une **« classe » chimique**, MENVIQ, 2002), sera réservé dans ce rapport uniquement pour désigner les « groupes » de pesticides regroupés selon la méthode de classification utilisée ici (cartes de Kohonen, méthode par expertise).

présentons ci-après l'identification des classes chimiques (non exhaustive) pour les pesticides (total : 340) compris à l'intérieur de chacun des six groupes obtenus par la carte auto-organisatrice de Kohonen. Ceci permettra d'avoir un aperçu de la nature et du nombre de classes chimiques pouvant se retrouver dans chacun des six groupes obtenus. De plus, nous positionnons ci-après les sept pesticides comptant parmi les « Top 10 pesticides » d'EC (Figure 2.7b) dans chacun de ces six groupes.

Groupe 1 : 83 composés. Sorption faible (solubilité moyenne); demi-vie faible/moyenne.

Pour les « Top 10 pesticides » d'EC, ce groupe comprend *l'**Atrazine*** qui se distingue principalement des autres composés par une faible solubilité (Figure 2.7b). Le *Métlolachlor*, composé d'intérêt environnemental mais ne faisant pas partie des « Top 10 pesticides » d'EC, est également inclus dans ce groupe.

Ce groupe est caractéristique de pesticides présentant des sorption et persistance faibles à modérées. On y retrouve des :

- herbicides (n = 41) :
  - *urée* + *uracil* (8);
  - *triazine* (7);
  - *sulfonylurée* (5);
  - *imidazolinone* (4);
  - autres classes (17);
- insecticides (n = 18) :
  - *organophosphoré* (9);
  - *carbamate* (7);
  - autres (2);
- fumigants (insecticides, nématicides…) (n = 8);
- fongicides (n = 9);
- régulateurs de croissance, surtout des herbicides (n = 7).

Ce groupe comprend un certain nombre de classes chimiques et quelques organismes-cibles. Les herbicides dominent dans ce groupe. En regard du nombre élevé de composés dans cette classe (total : 83), on constate que le nombre de classes chimiques est plutôt limité. La plupart de ces classes sont bien représentée en termes de nombre de composés par classe. La carte auto-organisatrice de Kohonen met ainsi en évidence, ici, un regroupement d'un ensemble limité mais « homogène » de classes chimiques bien identifiables.

Groupe 2 **:** 60 composés. Sorption très faible (solubilité très élevée); demi-vie moyenne.

Pour les « *Top 10 pesticides* » d'EC, ce groupe comprend le ***Methomyl*** et le ***Trichlorfon*** qui se distinguent des autres composés par une solubilité relativement faible (Figure 2.7b). Le *MCPB*, composé d'intérêt environnemental mais ne faisant pas partie des « *Top 10 pesticides* » d'EC, est également inclus dans ce groupe.

Ce groupe est caractéristique de pesticides peu adsorbables et de persistance modérée à élevée. On y retrouve des :

- herbicides (n = 36) :
  - *chlorophénoxy* (7);
  - *sulfonylurée* (3);
  - plusieurs autres classes (26);
- insecticides (n = 15) :
  - *organophosphoré* (9);
  - *carbamate* (4);
  - autres (2);
- divers :
  - biocides pour plusieurs organismes-cibles (n = 4);
  - régulateurs de croissance, fongicides et algicides et autres (n = 5).

Ce groupe, dominé par les herbicides, présente un nombre très limité de classes chimiques qui comprennent plusieurs composés par classe (*e.g.* chlorophénoxy, organophosphorés). Ces classes se démarquent ainsi assez bien. Par ailleurs, un grand nombre de composés se retrouve dans plusieurs autres classes différentes, ceci avec un faible nombre de composés par classe. Les cartes auto-organisatrices de Kohonen permettent ici : (i) de bien visualiser des classes chimiques représentatives (*e.g.* chlorophénoxy) et (ii) une très importante « dispersion » de nombreux composés (au total) à l'intérieur de plusieurs autres classes chimiques. Dans ce dernier cas, plusieurs composés présentent des combinaisons semblables de propriétés bien qu'ils ne fassent pas partie des mêmes classes chimiques et ne soient pas destinés aux mêmes organismes-cibles.

Groupe 3 **:** 17 composés. Sorption élevée/très élevée (solubilité élevée/très élevée); demi-vie très élevée.

Pour les « *Top 10 pesticides* » d'EC, ce groupe comprend le ***Diquat*** *(sel de dibromure)* qui se distingue principalement des autres composés par une demi-vie très élevée (Figure 2.7b).

Ce groupe est caractéristique de pesticides présentant une forte sorption et persistance. On y retrouve des :

- herbicides *bypyridillium*, *organoarsenic-métal lourd* et autre (n = 7);
- autres (n = 10) : insecticides et biocide (4), fongicides (4) et régulateurs de croissance (2) de diverses classes chimiques.

Ce groupe comprend une bonne diversité de classes chimiques et un minimum de quatre organismes-cibles. Ainsi, des composés utilisés pour une grande variété de modes d'action présentent un ensemble de propriétés communes. Également, les propriétés de ce petit nombre de composés se différencient nettement de celles des autres groupes de pesticides. La carte auto-organisatrice de Kohonen met ainsi en évidence, particulièrement pour ce groupe, la « similitude » d'un ensemble de propriétés pour un faible nombre de composés (total : 17) à utilisations diverses.

Groupe 4 **:** 41 composés. Sorption très élevée (solubilité très faible); demi-vie élevée.

Pour les « *Top 10 pesticides* » d'EC, ce groupe comprend le ***Pendimethalin*** qui se distingue principalement des autres composés par une sorption plus faible (Figure 2.7b).

Ce groupe est caractéristique des pesticides très hydrophobes, fortement adsorbés et retenus sur la matière organique du sol, et persistants. On y retrouve des :

- insecticides *organochlorés* (n = 13);
- insecticides *pyréthrinoïdes* (n = 9);
- herbicides *dinitroaniline* (n = 6);
- insecticides *organophosphorés* (n = 4);
- autres (n = 9) : insecticides (3), herbicides (5) et fongicide (1) de diverses classes chimiques.

Ce groupe montre une certaine diversité au niveau des classes chimiques et des organismes-cibles. Elle est cependant plutôt homogène en regard des propriétés et comprend notamment des composés bannis ou peu utilisés. Ce groupe comprend ainsi le « noyau » des pesticides considérés comme très peu mobiles et récalcitrants, souvent très toxiques et bioaccumulables.

Groupe 5 **:** 66 composés. Sorption moyenne (solubilité faible); demi-vie moyenne/élevée.

Pour les « *Top 10 pesticides* » d'EC, ce groupe comprend le ***Chlorpyrifos*** qui se distingue des autres composés par sa sorption importante et sa persistance modérée (Figure 2.7b).

Ce groupe est caractéristique de pesticides présentant des sorption et persistance modérées. On y retrouve des :

- herbicides (n = 30) incluant les régulateurs de croissance (3). Plusieurs classes chimiques sont présentes, dont : *dinitroaniline*; *urée*, *trazine*, *amide*, *chlorophénoxy*;
- fongicides (n = 18) de diverses classes chimiques (dithiocarbamate, azole, *etc.*);
- insecticides (n = 18) : organophosphoré (7); organochloré (3); autres (8).

Ce groupe est dominé par les herbicides et comprend un grand nombre de fongicides (autant que celui des insecticides). Il présente plusieurs classes chimiques (surtout pour les herbicides et fongicides) comprenant chacune un nombre limité de composés par classe. La carte auto-organisatrice de Kohonen met en relief une grande diversité d'organismes-cibles et de classes chimiques. Ceci signifie que de nombreux composés utilisés à diverses fins présentent une combinaison semblable de propriétés. Pour ce groupe, la classe chimique ne paraît pas constituer un outil fiable de classification pour appréhender le comportement environnemental des composés.

Groupe 6 **:** 73 composés. Sorption moyenne (solubilité faible); demi-vie faible.

Pour les « *Top 10 pesticides* » d'EC, ce groupe comprend le ***Malathion*** qui se distingue des autres composés par sa solubilité importante et sa très faible persistance (Figure 2.7b).

Ce groupe est caractéristique de pesticides modérément à peu adsorbables et peu persistants. On y retrouve des :

- herbicides (n = 31) :
  - incluant les régulateurs de croissance (3). Une dizaine de classes chimiques est représentée, chacune par un très petit nombre de composés;
- insecticides (n = 26) :
  - *organophosphoré* (15);
  - *carbamate* (6);
  - autres (5);
- fongicides (n = 14) de quelques classes chimiques (*dithiocarbamate*, *dinitrophénol*, *etc.*);
- biocides divers (n = 2).

Ce groupe comprend un nombre « important » d'herbicides, insecticides et fongicides. Il présente un nombre important de classes chimiques (surtout pour les herbicides) comprenant chacune un (très) petit nombre de composés. La carte auto-organisatrice de Kohonen indique ainsi que le comportement environnemental appréhendé pour les composés de ce groupe touchera de nombreuses classes chimiques (soit différents pesticides utilisés contre les plantes adventices et les ravageurs des diverses cultures).

Groupes obtenus (6) et classes chimiques : La méthode de classification des 340 pesticides par les cartes auto-organisatrices de Kohonen a permis de distinguer six groupes de composés, ceci sur la base de leurs propriétés bio-physico-chimiques (solubilité, sorption, demi-vie). À l'intérieur de chacun de ces six groupes obtenus, nous avons analysé la diversité et l'homogénéité des classes chimiques des différents composés se retrouvant dans un même groupe. Les résultats ont montré que les cartes auto-organisatrices de Kohonen peuvent conduire à regrouper des pesticides provenant principalement de quelques classes chimiques, pesticides qui présentent des propriétés peu dissemblables (ex. : Groupe 4). Dans ce cas, les cartes auto-organisatrices de Kohonen montrent à la fois l'homogénéité des propriétés des composés et la différence notable entre ces composés et les composés des autres classes chimiques (*e.g.* organochlorés très hydrophobes et très récalcitrants formant un « noyau » relativement homogène).

D'un autre côté, les cartes auto-organisatrices de Kohonen ont également montré que plusieurs groupes obtenus comprennent des composés appartenant à diverses et à de nombreuses classes chimiques différentes. La présence de pesticides appartenant à plusieurs classes chimiques différentes, à l'intérieur de l'un ou l'autre des groupes obtenus, mettrait ainsi en évidence la grande variabilité des propriétés pour des pesticides appartenant à la même classe chimique. Ceci signifie, comme exemple parmi plusieurs, que certains herbicides de la classe chimique des triazines peuvent être regroupés dans différents groupes (différent comportement environnemental anticipé sur la base de leurs propriétés). Il est déjà connu, par exemple, que les composés appartenant à une même classe chimique présentent souvent une très grande variabilité pour leurs valeurs de demi-vie (dégradation par voie chimique, biologique et dissipation physique au champ). En regroupant ensemble des composés de plusieurs et différentes classes chimiques, les cartes auto-organisatrices de Kohonen seraient ainsi susceptibles de mettre en évidence cette grande variabilité intra-classes des propriétés de ces composés (solubilité, sorption et demi-vie).

L'approche quantitative et d'optimisation des cartes auto-organisatrices de Kohonen, qui ne nécessite pas l'intervention directe et potentiellement biaisée de l'utilisateur, constitue à notre connaissance la première utilisation de cette méthode dans le but de **rationaliser** la classification de trois variables (propriétés), dont deux variables inter-reliées (sorption et

solubilité) conditionnant le devenir et le transport des pesticides. Cette utilisation des cartes auto-organisatrices de Kohonen, faite ici à l'initiative de l'INRS-ETE, demeure ainsi et à notre connaissance, une méthode fiable et inédite de regroupement des pesticides sur la base de leurs propriétés.

L'emploi du regroupement obtenu des pesticides en six groupes, pour des fins ultimes de modélisation hydrologique du transport et de développement ultérieur de NPA est, *a fortiori*, une approche inédite parfaitement bien adaptée à la gestion préventive de la contamination des eaux de surface en regard du nombre très élevé de pesticides agricoles à prendre en compte (ici 340 pesticides).

2.3.2 Comparaison entre les six groupes obtenus (carte auto-organisatrice de Kohonen) et les six groupes proposés par la « méthode de l'expertise » (Rousseau *et al.*, 2006)

Le présent travail a permis d'obtenir six (6) groupes de pesticides à partir de cartes auto-organisatrices de Kohonen, suivie d'une représentation par une Analyse en Composantes Principales. Cette méthode et ces outils autorisent une ordination et une classification rigoureuses et optimales des variables étudiées (sorption, solubilité et demi-vie). La classification obtenue résulte d'une analyse quantitative. Elle ne dépend pas, ainsi, de critères subjectifs. En effet, l'intervention de l'utilisateur de ces méthodes et outils consiste principalement à définir le nombre de groupes souhaités ou souhaitables (dans ce cas-ci : six).

Une autre méthode de classification des 340 pesticides (Hornsby *et al.*, 1996) en six groupes, réalisée à partir de la **sorption** et de la **demi-vie**, avait été proposée dans le Rapport *R-786F* pour EC (Rousseau *et al.*, 2006). Nous présentons à nouveau, pour rappel et à l'ANNEXE C, cette classification antérieure obtenue par la méthode de « l'expertise ». Il est possible et intéressant de comparer maintenant les deux approches. La classification proposée antérieurement (ANNEXE C) était basée sur une expertise des valeurs des propriétés (et des comportements) généralement retrouvées dans la littérature pour les pesticides les plus couramment étudiés et/ou les plus couramment utilisés. Elle reposait ainsi sur des **ordres de grandeurs**, pour les valeurs de la **sorption** et de la **demi-vie**, typiquement rencontrées pour des pesticides à risque (ou non) de contamination des eaux de surface. Dans cette classification antérieure, la frontière qui permettait de différencier deux groupes de pesticides était laissée au jugement de l'expert. Il est utile de souligner, dans le tableau suivant, les principales différences entre les méthodes de classification en six groupes obtenues d'une part par les cartes auto-organisatrices de Kohonen (présent rapport), et d'autre part la méthode antérieure de « l'expertise » (Rapport *R-786F*).

Tableau 2.3 : Comparaison des méthodes de classification basées sur les cartes auto-organisatrices de Kohonen avec la méthode de « l'expertise »

Caractéristique de la méthode	**Cartes de Kohonen et ACP** (Présent rapport)	**Méthode de « l'expertise »** (Rapport précédent *R-786F*)
(1) Variables	Sorption, solubilité, demi-vie	Sorption, demi-vie
(2) Méthode	Cartes de Kohonen. *U-matrix* et classification et hiérachique de Ward. Analyse en Composantes Principales	Jugement de l'expert sur les valeurs des variables fréquemment rencontrées pour les pesticides à risque
(3) Approche	Quantitative	Qualitative
(4) Intervention de l'utilisateur dans la classification	Choix du nombre de groupes à partir de l'arbre hiérarchique et de la distance euclidienne souhaitée (Figure 2.3)	Choix par « expertise » des bornes de valeurs pour le regroupement des pesticides

(1) Variables :

La méthode de « l'expertise » (Rousseau *et al.*, 2006 ou Rapport *R-786F* pour EC) qui avait été proposée auparavant pour la définition de six groupes de pesticides (voir ANNEXE C) **ne prenait pas directement en compte la solubilité** du pesticide. En effet et tel qu'expliqué en détail dans le Rapport précédent *R-786F* pour EC, il existe généralement et pour la plupart des pesticides une relation inverse entre la solubilité (S_w) et la sorption (K_{oc}). Cependant et tel qu'expliqué abondamment dans le rapport précédent, cette relation inverse entre la sorption et la solubilité n'est pas très précise. Il existe ainsi des composés, tel que l'atrazine, qui « dévient » de la fonction de régression (linéaire inverse) obtenue en utilisant les valeurs de S_w et de K_{oc} pour les 340 pesticides.

La méthode par cartes de Kohonen **prend directement en compte la solubilité** du pesticide (en plus de la sorption et de la demi-vie). De ce fait, cette méthode accorde un poids important aux couples de valeurs représentant les deux variables « sorption » et « solubilité », ces deux variables étant inter-reliées. Puisque ces deux variables sont inter-reliées entre elles (relation linéaire inverse), les cartes de Kohonen accorderont dans un premier temps une plus grande importance (comparativement à la méthode de « l'expertise ») aux facteurs agissant sur la mobilité des pesticides, soit à la fois la solubilité et la sorption.

En ce sens, la méthode par cartes auto-organisatrices de Kohonen est plus complète que la méthode de « l'expertise » puisqu'elle évalue l'importance de trois variables (dont deux variables inter-reliées), comparativement à deux variables pour la méthode de « l'expertise ». Les cartes auto-organisatrices de Kohonen permettent ainsi un traitement optimal de l'importance de ces trois variables (S_w , K_{oc} et $t_{1/2}$), et ceci pour chacun des 340 pesticides considérés. Un tel traitement simultané des trois variables (représentation tridimensionnelle) était difficilement applicable et visualisable dans le cas de la méthode de « l'expertise » (voir Rousseau *et al.*, 2006 ou Rapport *R-786F* pour EC).

(2) à (4) Méthode, Approche et Intervention de l'utilisateur :

Tel que déjà mentionné, la méthode de « l'expertise » (ANNEXE C) utilise principalement des ordres de grandeur (logarithmiques) pour les variables de la sorption (*i.e.* $K_{oc} = 10^0$, 10^2, 10^4 et 10^6) et de la demi-vie (*e.g.* $t_{1/2} = 10^1$ et 10^3). Par définition, le jugement de l'expert a également été utilisé dans cette méthode pour fixer une borne de classification des pesticides à 30 jours pour la demi-vie (valeur correspondant, par exemple, à l'atrazine). La *méthode* par cartes auto-organisatrices de Kohonen, pour sa part, réalise l'ordination et la classification des pesticides selon une procédure statistique d'optimisation qui ne fait pas intervenir directement le jugement de l'expert du devenir des pesticides.

Il est intéressant de noter que le **nombre de groupes de pesticides** est, pour les **deux méthodes**, déterminé par l'utilisateur. Ainsi et selon le jugement scientifique et/ou la nature de l'application projetée, ce nombre de groupes peut être modulé selon les besoins. Le nombre de six groupes retenu ici répond à la fois aux souhaits d'EC, au jugement de l'expert et à l'analyse des résultats de l'arbre hiérarchique utilisée par la méthode de Kohonen.

3 CONCLUSION

Le présent travail de regroupement des pesticides par la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen (initiative de l'INRS-ETE) ajoute, en complémentarité avec les autres travaux, à l'objectif principal du projet qui est la détermination de NPA pour un nombre déterminé de pesticides. En effet, la méthode de classification par cartes auto-organisatrices de Kohonen présentée dans ce rapport est une initiative visant à proposer une seconde, nouvelle et rationnelle méthode de classification des 340 pesticides de la base de données de Hornsby et al. (1996) considérés dans cette étude (en surcroît de la méthode de « l'expertise » présentée dans le Rapport R-786F pour EC).

Nous avons ainsi présenté les approches et les résultats de **deux méthodes de classification** de 340 pesticides en six groupes, selon la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen (présent rapport) et celle de « l'expertise » (rapport précédent *R-786F* pour EC). Bien que la méthode de « l'expertise » permette de prendre en compte certaines observations expérimentales ou de la littérature (*e.g.* connaissances générales sur les propriétés pouvant potentiellement causer une contamination des eaux), elle demeure basée sur le jugement de l'expert (aspect qualitatif). Également, elle peut difficilement prendre en compte simultanément le poids des valeurs de trois variables (propriétés) pour regrouper de nombreux pesticides (*e.g.* 340) en un nombre important de groupes (*e.g.* six). De façon complémentaire, la méthode par cartes auto-organisatrices de Kohonen autorise, de façon quantitative et optimale, un tel regroupement à partir des trois variables (propriétés) des pesticides. Cette méthode de regroupement est donc plus quantitative et plus rationnelle, de par les outils d'analyse et de traitement des résultats qui sont employés.

Les résultats montrent que les groupes ainsi définis ne correspondent pas forcément ou entièrement à quelques classes chimiques bien définies de pesticides. En effet, certains groupes comprennent des pesticides d'un grand nombre de classes chimiques, et certaines classes chimiques sont réparties dans plusieurs groupes. Ainsi, en regroupant ensemble des composés de plusieurs et différentes classes chimiques, les cartes auto-organisatrices de Kohonen sont susceptibles de mettre en évidence la grande variabilité intra-classes des propriétés de ces composés (solubilité, sorption et demi-vie). De plus, cette classification démontre qu'il faut éviter de procéder à une classification (regroupement) des pesticides sur la seule base de leur classe chimique et de leur organisme-cible (insecticide, herbicide, fongicide, *etc.*).

Pour chacun de ces six groupes de composés, il pourra s'il y a lieu et si désiré être recommandé de développer un NPI, et donc potentiellement un NPA, caractéristique d'un ensemble de

propriétés bio-physico-chimiques pouvant constituer, ou non, un risque pour la qualité des eaux de surface.

4 RÉFÉRENCES

Aguilar-Ibarra, A., Lim, P. et Lek, S. 2005. Fish diversity conservation and river restoration in southwest France : a review. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 64-75.

Aguilera, P.A., Frenich, A.G., Torres, J.A., Castro, H., Vidal, J.L.M. et Canton, M. 2001. Application of the Kohonen neural network in coastal management: methodological development for the assessment and prediction of water quality. Water Research, 35: 4053-4062.

Aurelle, D., Lek, S., Giraudel, J.L. et Berrebi, P. 1999. Microsatellites and artificial neural networks: tools for the discrimination between natural and hatchery brown trout (Salmo trutta, L.) in Atlantic populations. Ecological Modelling, 120: 313–324.

Blasco, J.A., Fueyo, N., Dopazo, C. et Chen, J.-Y. 2000. A self-organizing-map approach to chemistry representation in combustion applications. Combustion Theory Modelling, 4: 61–76.

Compin, A., Park, Y.-S., Lek, S. et Céréghino, R. 2005. Species spatial distribution and richness of stream insects in south-western France using artificial neural networks with potential use of biosurveillance. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 221-238.

Coste, M., Tison, J. et Delmas, F. 2004. Flores diatomiques des cours d'eau : Proposition de valeurs limites du « Bon État » pour l'IPS et l'IBD. Document de travail-Unité de Recherche Qualité des Eaux-Cemagref Bordeaux, France.

Dufrêne, M. et Legendre, P. 1997. Species assesmblages and indicator species : The need for a flexible assymmetrical approach. Ecological Monographs, 67 (3): 345-366.

Foody, G.M. 1999. Application of self-organising feature map neural network in community data analysis. Ecological Modelling, 120: 97-107.

Foody, G.M. et Cutler, M.E.J. 2003. Tree biodiversity in protected and logged Bornean tropical rain forests and its measurement by satellite remote sensing. Journal of Biogeography, 30: 1046-1053.

Giraudel, J.L. et Lek, S. 2001. A comparison of self-organizing map algorithm and some conventional statistical methods for ecological community ordination. Ecological Modelling, 146: 329–339.

Gosselain, V., Campeau, S., Gevrey, M., Coste, M., Ector, L., Rimet, F., Tison, J., Delmas, F., Park, Y.-S., Lek, S. et Descy, J.P. 2005. Diatom typology of low-impacted conditions at a multi-regional scale: combined results of multivariate analyses and SOM. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 317-342.

Grenier, M. 2005. Détermination des communautés phytobenthiques de référence et des objectifs de restauration des rivières du Québec. Mémoire de maîtrise, Université du Québec à Trois-Rivières, 300 p.

Grenier, M., Campeau, S., Lavoie, I., Park, Y.-S. et Lek., S. 2006. Diatom reference communities and restoration goals for streams in Quebec (Canada), based on Kohonen Self-organizing maps and multivariate analyses. Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences, 63: 2087-2106.

Hornsby, A.G., Don Wauchope, R. et Herner, A.E. 1996. Pesticide properties in the environment. Springer-Verlag, New-York. 227 p.

Horrigan, N., Bobbin, J., Recknagel, F. et Metzeling, L. 2005. Patterning, predicting stream macroinvertebrate assemblages in Victoria (Australia) using artificial neural networks and genetic algorithms. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 252-260.

Kohonen, T. 1982. Self-organized formation of topologically correct feature maps. Biol. Cybern., 43: 59-69.

Kohonen, T. 1995. Self-Organizing Maps, third ed.. Springer, Berlin.

Kohonen, T. 2001. Self-Organizing Maps, third ed.. Springer, Berlin.

Kwak, I.S., Song, M.Y., Park, Y.-S., Liu, G., Kim, S.H., Cho, H.D., Cha, E.Y. et Chon, T.S. 2005. Patterning community changes in benthic macroinvertebrates in a polluted stream by using artificial neural networks. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 239-251.

McCormick, P.V. et Stevenson, R.J. 1998. Periphyton as a tool for ecological assessment and management in the Florida Everglades. Journal of Phycology, 34: 726-733.

MENVIQ (ministère de l'Environnement du Québec). 2002. Répertoire des principaux pesticides utilisés au Québec. Direction de la toxicologie humaine de l'Institut national de santé publique du Québec, Publications du Québec, Québec.

Nijboer, R.C., Park, Y.-S., Lek, S. et Versonschot, P.F.M. 2005. Comparison of clustering and ordination methods implemented to the full and partial data of benthic macroinvertabrate communities in streams and channels. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, p. 167-188.

Park, Y.-S., Gevrey, M., Lek, S. et Giraudel, J.-L. 2005a. Evaluation of relevant species in communities: development of structuring indices for the classification of communities using a self-organizing map. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, p. 369-380.

Park, Y.-S., Kwark, I.S., Lek, S. et Chon, T.S. 2005b. Hierarchical patterning of benthic macroinvertabrate communities using unsupervised artificial neural networks. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, p. 189-205.

Park, Y.-S., Oberdorff, T. et Lek, S. 2005c. Patterning riverine fish assemblages using an unsupervised neural network. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, p. 43-53.

Park, Y.-S., Céréghino, R., Comping, A. et Lek, S. 2003a. Applications of artificial neural networks for patterning and predicting aquatic insect species richness in running waters. Ecological Modelling, 146 : 165-280.

Park, Y.-S., Chang, J., Lek, S., Cao W. et Brosse, S. 2003b. Conservation strategies for endemic fish species threatened by the Three Gorges Dam. Conservation Biology, 17 (6) : 748-1758.

Park, Y.-S., Verdonschot, P.F.M., Chon, T.S. et Lek, S. 2003c. Paterning and predicting aquatic macroinvertabrate diversities using artificial neural network. Water Research, 37: 1749-1758.

Penczak, T., Kruk, A., Park, Y.-S. et Lek, S. 2005. Patterning spatial variations in fish assemblage structures and diversity in the Pilica River system. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 100-113.

Rimet, F., Ector, L., Hoffmann, L., Gevrey, M., Giraudel, J.-L., Park, Y.-S. et Lek, S. 2005b. Prediction with aritificial neural networks of diatom assemblages in headwater streams of Luxembourg. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, pp. 343-354.

Rousseau, A.N., Lafrance, P., Quilbé, R., Savary, S., Sulis, M. et Caron, E. 2006. Évaluation de modèles de transport des pesticides pour le développement de normes de performances agro-environnementale atteignables (NPA) à l'échelle des bassins versants. Rapport N° R-786-f. INRS-ETE, Québec, Canada.

Tison, J., Giraudel, J.-L., Park, Y.-S., Coste, M. et Delmas, F. 2005. Classification of stream diatom communities using a self-organizing map. In S. Lek, M. Scardi, P. Verdonschot, J. Descy, Y.S. Park (eds). Modeling community structure in freshwater ecosystems, Springer, Berlin, p. 304-316.

Ultsch, A. 1993. Self-organizing neural networks for visualizing and classification. In: Information and classification. Edited by O. Opitz, B. Lausen and R. Klar. Springler-Verlag, Berlin, Germany. p. 307-313.

Walley, W.J., Martin, R.W. et O'Connor, M.A. 2000. Self-organising maps for classification of river quality from biological and environmental data. In: Denzer, R., Swayne, D.A., Purvis, M., Schimak, G. (eds) Environmental software systems: environmental information and decision support, IFIP Conference Series, Kluwer Academic Publishers, Amsterdam, p. 27-41.

ANNEXE A. ORDINATION ET MÉTHODES DE CLASSIFICATION

A.1 ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES (ACP)

L'Analyse en Composantes Principales (ACP) est une méthode d'ordination métrique qui résume en deux ou trois dimensions des relations multidimensionnelles. Elle permet d'analyser les relations entre les variables environnementales et les entités (pesticides dans cette étude) à l'étude. L'ACP permet d'expliquer, en quelques dimensions importantes (axes principaux), la plus grande partie de la variabilité d'une matrice de dispersion des paramètres originaux et de connaître ainsi la quantité de variation expliquée par chacun des axes principaux indépendants (en proportion sur 1 ou 100%). Le nombre d'axes à conserver, selon la règle de Kaiser, correspond au nombre de composantes dont la valeur propre est supérieure à 0,01 (ou 1%), c'est à dire qui explique davantage de variation que celle d'une variable unique.

Suite à une ACP, les entités sont positionnées sur l'ordination de façon optimale en tenant compte de leur valeur pour les variables à l'origine de chaque composante. Les variables sont illustrées par des vecteurs dont la direction indique le taux de variation maximal. Chaque vecteur est un gradient à partir duquel on peut déduire la valeur relative des différents sites. Un site situé près de l'extrémité vers laquelle pointe le vecteur d'une variable a donc une valeur élevée pour cette variable, en comparaison avec les autres entités de l'ordination produite par l'ACP. Les vecteurs contribuant le plus à un axe forment un angle réduit par rapport à cet axe et sont fortement corrélés à ce dernier.

A.2 CARTE AUTO-ORGANISATRICE DE KOHONEN (SELF-ORGANIZING MAP (SOM))

Il existe deux types de réseaux de neurones artificiels (« Artificial Neural Networks »; ANN). Les cartes auto-organisatrices de Kohonen (« Kohonen self-organising map »; SOM) constituent une méthode d'apprentissage non-supervisée permettant de résoudre des problèmes d'ordination et de classification. Les réseaux de neurones basés sur l'algorithme de rétro-propagation (« backpropagation network »; BPN) constituent une méthode d'apprentissage supervisée utilisée à titre de modèle prédictif. Le BPN est le plus souvent utilisé en écologie.

Les cartes auto-organisatrices de Kohonen (Kohonen 2001, 1982) ont fait l'objet d'intéressantes applications dans des domaines de recherche très variés, allant de l'ingénierie à la chimie (ex. Blasco *et al.* 2000), de la télédétection (ex. Foody et Cutler 2003, Aurelle *et al.* 1999) à l'économie et au suivi de la qualité de l'eau (Aguilera *et al.* 2001, Walley *et al.* 2000). En écologie, les SOM ont surtout été utilisées dans le cadre du projet PAEQANN pour la classification des communautés de diatomées benthiques (ex. Gosselain *et al.* 2005, Rimet *et al.* 2005*b*, Tison *et al.* 2005), de macroinvertébrés benthiques (Compin *et al.* 2005, Horrigan *et al.* 2005, Kwak *et al.* 2005, Nijboer *et al.* 2005, Park *et al.* 2005*b*, Park *et al.* 2003*a*,*b*) et de poissons (ex. Aguilar-Ibarra *et al.* 2005, Park *et al.* 2005*c*, Penczak *et al.* 2005).

A.2.1. La structure et le fonctionnement des SOM

Le réseau est composé de deux couches (Figure A.1). La couche d'entrée contient un nœud pour chaque variable (ex. abondance relative de chacun des taxa de l'échantillon) qui est connecté de façon non-linéaire aux cellules hexagonales de la couche de sortie. Chaque cellule hexagonale de la matrice est connectée aux autres cellules avec une pondération (poids) qui décroît en fonction de la distance relative entre celles-ci. L'ensemble de ces cellules forme la carte de Kohonen (couche de sortie). Les rangées et les colonnes de la carte de Kohonen peuvent être interprétées comme des axes et la position des différents échantillons comme des coordonnées.

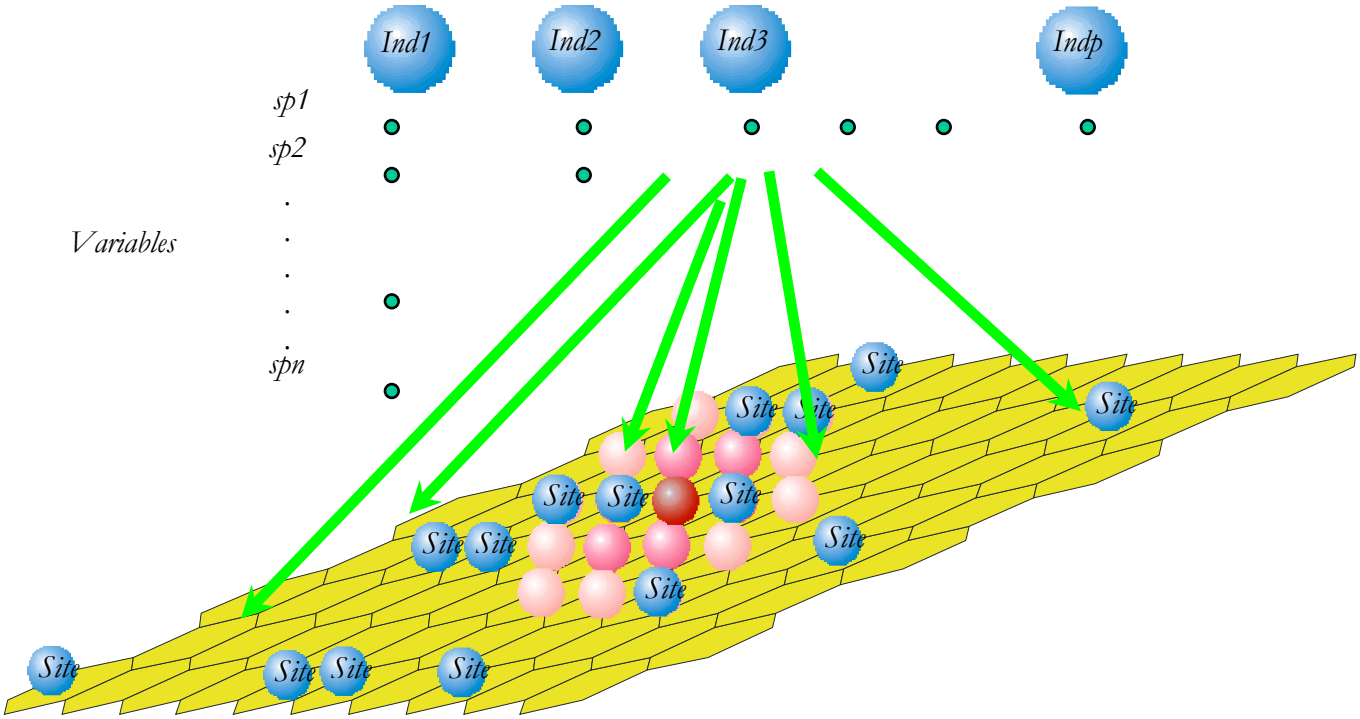

Figure A.1 : Représentation schématique d'une carte auto-organisatrice de Kohonen.

La base de données est présentée sous forme de matrice possédant *r* rangées et *c* colonnes. Les rangées représentent les variables (dans notre cas K_{oc}, $t_{1/2}$ et solubilité) et les colonnes représentent l'échantillon (les individus). Chaque individu peut être considéré comme un vecteur dans un espace à plusieurs dimensions.

Chaque hexagone de la carte contient, au départ, des valeurs aléatoires (VA) pour chaque variable. La modification des VA se fait par l'entremise d'un réseau neuronal possédant une capacité d'apprentissage. Les VA (w_{ik}) sont modifiées par des ajustements itératifs en fonction des valeurs des échantillons présentés dans la couche d'entrée (Giraudel et Lek 2001). Contrairement à un apprentissage supervisé, pour chaque échantillon, la sortie (output) désirée est inconnue. Le but du processus d'apprentissage est que les VA ressemblent aux valeurs des échantillons. Une fois la phase d'apprentissage terminée, les VA demeurent inchangées.

Chaque échantillon est comparé avec chaque VA. Cette comparaison s'effectue généralement à l'aide de la distance euclidienne. La distance euclidienne est moins recommandée pour les variables avec grand nombre de valeurs nulles. La distance de Bray & Curtis est, pour sa part, moins influencée par les valeurs extrêmes, ce qui peut être un avantage ou non. Cependant, le choix de la mesure de distance utilisée est souvent tributaire du résultat obtenu, c'est à dire que l'expert choisi celle qui procure une répartition uniforme des relevés d'échantillonnage (Sovan Lek, communication personnelle). Les formules des deux mesures de distance peuvent être consultées, entre autres, dans McCormick et Stevenson (1998).

Un échantillon sera associé à la VA ayant une distance minimale, c'est à dire dont la somme des différences entre les valeurs de chaque variable et celle de la VA est minimale. Une fois la VA sélectionnée, les valeurs de celle-ci sont modifiées de façon à ressembler davantage aux valeurs de l'échantillon. Les valeurs des unités voisines sont également modifiées à l'aide des connexions latérales entre les cellules hexagonales. Cette modification est effectuée à l'intérieur d'un voisinage défini par l'utilisateur, dont la taille est réduite durant la phase d'apprentissage. L'ampleur des modifications est fonction de la distance par rapport à l'unité d'origine. Les VA des hexagones situés près de la VA sélectionnée sont sujettes à une plus grande modification de leur abondance relative que celles des hexagones distants (Foody 1999). Ce procédé est répété pour chaque échantillon.

Les étapes d'apprentissage sont résumées par Giraudel et Lek (2001) de la façon suivante:

- Étape 1: À t=0, les valeurs aléatoires (VA) sont initialisées à partir des variables de la base de données;
- Étape 2: un échantillon est choisi aléatoirement comme unité d'entrée;

- Étape 3: les distances entre les échantillons et les VA sont calculées;
- Étape 4: la VA dont la distance avec l'échantillon est minimale est la VA sélectionnée;
- Étape 5: les VA sont reconstruites selon la formule suivante:

$$w_{ik}(t+1) = w_{ik} + h_{ck}(t)[x_{ij}(t) - w_{ik}(t)]$$

  w_{ik} : valeurs des variables de la VA;
  x_{ij}: valeurs des variables des échantillons;
  t : temps (itérations) ;
  h_{ck}: fonction de voisinage.

- Étape 6: $t = t + 1$. Si $t < t_{max}$ alors retourne à l'étape 2. Si non, on arrête l'entraînement.

La fonction $h_{ck}(t)$ est appelée *fonction de voisinage* (« *neighbourhood fonction* »). Plusieurs fonctions peuvent être utilisées (voir Kohonen 1995), mais la plus employée demeure la fonction Gaussienne:

$$h_{ck}(t) = \alpha(t) \exp(- ||r_k - r_c||^2 / 2\sigma^2(t))$$

où ;

- $||r_k - r_c||$ est la distance euclidienne entre la VA sélectionnée pour l'échantillon et chaque VA voisine;
- $\sigma(t)$ est une fonction décroissante du temps (itérations) qui défini la taille du voisinage de la CVS modifiée par le processus d'apprentissage;
- $\alpha(t)$ est le coefficient du degré d'apprentissage (« learning rate factor ») qui décroît avec le temps;
- σ et α convergent vers 0 lorsque t décroît.

Le processus d'apprentissage s'effectue en deux phases consécutives:

1. La phase d'ordination (« ordering phase »): les VA sont fortement modifiées dans un voisinage très large de la cellule sélectionnée pour de grandes valeurs de σ et α.

2. La phase d'accordement (« tuning phase »): seulement les VA des cellules adjacentes à la VA sélectionnée sont modifiées. Cette phase est plus longue que la première phrase car $\alpha(t)$ converge lentement vers 0.

Au terme du processus, des VA types sont créées pour chaque cellule à partir des échantillons associés à celle-ci. Les échantillons similaires sont associés à la même cellule ou à des cellules proximales sur la carte de Kohonen, alors que les échantillons différents sont associés à des cellules distales (Foody 1999) (Figure A.2).

Pour former des groupes de cellules, donc des groupes plus généralisés, il faut utiliser les similarités entre les cellules. Pour ce faire, la matrice de distances unifiées (« Unified distance matrix algorithm »; *U-matrix*; Ultsch 1993) calcule les distances entre les cellules avoisinantes de la carte. Ces distances peuvent être visualisées pour représenter les groupes en utilisant

une échelle de gris sur la carte. Le diagramme hiérarchique de Ward ou de type k-mean, issu des distances établies entre les cellules de la *U-matrix*, peut être utilisé en complémentarité (Figure A.3).

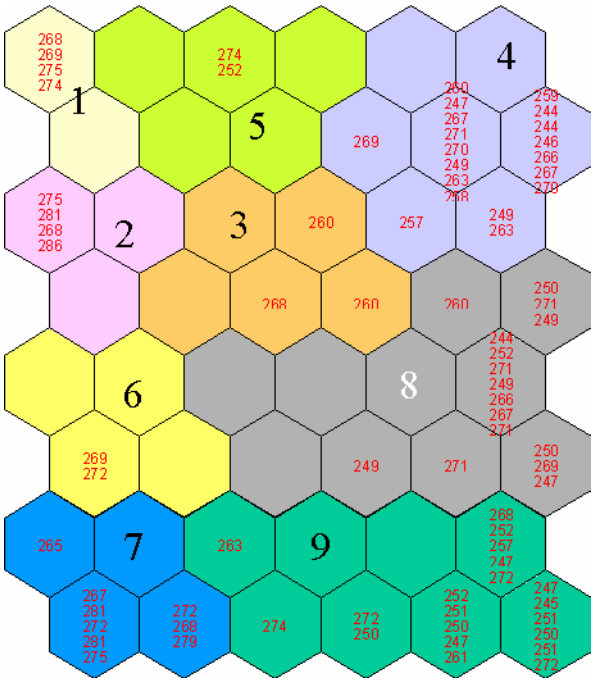

Figure A.2 : Exemple d'une carte auto-organisatrice de Kohonen.

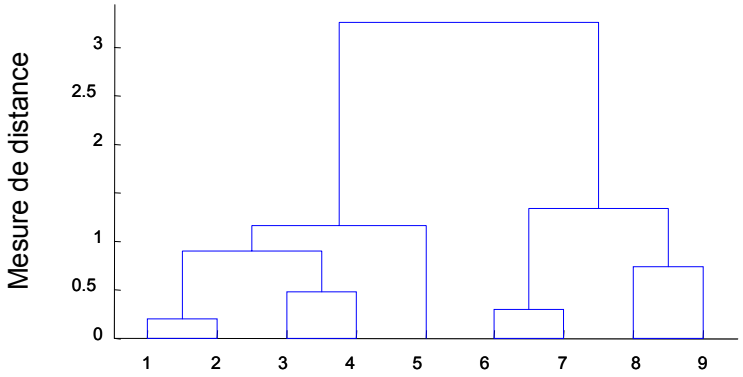

Figure A.3 : Représentation schématique du diagramme hiérarchique de Ward issu de la *U-Matrix*.

A.2.2. Contribution de chaque variable à l'explication des groupes

Les cartes de distribution (« distribution maps » ou « component planes ») issues des SOMs (ex. voir Grenier *et al.* 2006) représentent une façon efficace de visualiser et de suggérer quelles variables contribuent davantage dans la formation des groupes.

L'indice des valeurs indicatrices (Dufrêne et Legendre 1997) peut également être utilisé à cette fin. Cet indice tient compte de l'abondance et de la probabilité d'occurrence de chaque variable dans chacun des groupes (Coste *et al.* 2004). Une valeur indicatrice élevée d'une variable pour un groupe signifie qu'elle caractérise fortement celui-ci. Cet indice a notamment été utilisé par Gosselain *et al.* (2005) et Grenier (2005).

Park *et al.* (2005*a*) ont développé le *Global structuring index* (GSI) permettant également de quantifier l'importance de chaque variable dans la formation des groupes. Cette valeur quantifiée et son calcul s'apparentent à l'indice des valeurs indicatrices de Dufrêne et Legendre (1997).

Ces trois méthodes peuvent être utilisées pour sélectionner les variables « indicatrices » de conditions environnementales particulières.

ANNEXE B. LISTE DES 340 PESTICIDES (HORNSBY *ET AL.*, 1996) CLASSÉS SELON LA MÉTHODE DES CARTES DE KOHONEN

Tableau 4.1 : Liste des 340 pesticides avec les valeurs de leurs paramètres bio-physico-chimiques (sorption [ml/g], solubilité [mg/l] et demi-vie [jour]) et leur classification selon la méthode des cartes auto-organisatrices de Kohonen. Code des principaux organismes-cibles pricipaux de chaque pesticide : A = Algicide; B = biocide (au moins trois organismes-cibles, soit par exemple H+I+F); FO = fongicide; FU = fumigant pesticide (insecticide et/ou nématicide, *etc.*); H = herbicide; I = insecticide; RC = Régulateur de Croissance.

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
1	1	1,2-DICHLOROPROPANE	FU	2700	700	50
	2	1,3-DICHLOROPROPENE	FU	2250	10	32
	3	1-NAPHTHALENEACETAMIDE	RC	100	10	100
	4	2,4,5-T ACID	H	278	30	80
	6	2,4,5-T ESTERS	H	50	30	80
	7	2,4-D ACID	H	890	10	20
	17	ALACHLOR	H	240	15	170
	21	AMETRYN	H	185	60	300
	22	AMINOCARB	I	915	6	100
	26	ANCYMIDOL	RC	650	120	120
	30	ATRAZINE	H	33	60	100
	43	BROMACIL ACID	H	700	60	32
	44	BROMACIL LITHIUM SALT	H	700	60	32
	51	CARBARYL	I	120	10	300
	53	CARBOFURAN	I	351	50	22
	54	CARBON DISULFIDE	FU	2300	1,5	60
	56	CARBOXIN	FO	195	3	260
	62	CHLORIMURON ETHYL	H	1200	40	110
	65	CHLOROPICRIN	FU	2270	1	62
	75	CLOMAZONE (Dimethazone)	H	1100	24	300
	78	CYANAZINE	H	170	14	190
	86	DAZOMET	FU	3000	7	10
	87	DBCP	FU	1000	180	70
	93	DEMETON	I	60	15	70
	100	DICHLORMID	H	5000	7	40
	102	DICHLORVOS (DDVP)	I	10000	0,5	30
	111	DIMETHIPIN	RC	3000	120	10

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	112	DIMETHIRIMOL	FO	1200	120	90
	117	DINOSEB	H	52	30	30
	119	DINOSEB SALTS	H	2200	20	63
	120	DIOXACARB	I	6000	2	40
	121	DIPHENAMID	H	260	30	210
	133	EPTC	H	344	6	200
	139	ETHOPROP (Ethoprophos)	I	750	25	70
	140	ETHYLENE DIBROMIDE (EDB)	FU	4300	100	34
	143	FENAMINOSULF	FO	20000	2	15
	144	FENAMIPHOS	I	400	50	100
	147	FENFURAM	FO	100	42	300
	149	FENOPROP (2,4,5-TP)(SILVEX)	RC	140	21	300
	153	FENSULFOTHION	I	1540	30	300
	155	FENURON	H	3850	60	42
	157	FERBAM	FO	120	17	300
	163	FLUOMETURON	H	110	85	100
	170	FOSETYL-ALUMINUM	FO	120000	0,1	20
	173	HALOXYFOP-METHYL	H	43	55	75
	180	IMAZAMETHABENZ-METHYL (m-isomer)	H	1370	45	66
	181	IMAZAMETHABENZ-METHYL (p-isomer)	H	857	45	35
	182	IMAZAPYR ACID	H	11000	90	100
	184	IMAZAQUIN ACID	H	60	60	20
	188	ISAZOFOS	I	69	34	100
	197	MALEIC HYDRAZIDE ACID	RC	6000	30	250
	205	MEFLUIDIDE	RC	180	4	200
	208	METALDEHYDE	I	230	10	240
	213	METHIDATHION	I	220	7	400
	218	METHYL ISOTHIOCYANATE	FU	7600	7	6
	221	METOLACHLOR	H	530	90	200
	222	METRIBUZIN	H	1220	40	60
	227	MOLINATE	H	970	21	190
	229	MONOLINURON	H	735	60	200
	230	MONURON	H	230	170	150
	235	NALED	I	2000	1	180
	247	OXYCARBOXIN	FO	1000	20	95
	269	PIRIMICARB	I	2700	10	23
	270	PIRIMIPHOS-ETHYL	I	93	45	300
	272	PRIMISULFURON-METHYL	H	70	30	50
	278	PROMECARB	I	91	20	200
	279	PROMETON	H	720	500	150
	282	PROPACHLOR	H	613	6,3	80
	284	PROPANIL	H	200	1	149
	287	PROPHAM (IPC)	RC	250	10	200
	289	PROPOXUR	I	1800	30	30
	290	PYRAZON (Chloridazon)	H	400	21	120
	295	SECBUMETON	H	600	60	150

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	296	SETHOXYDIM	H	4390	5	100
	299	SIMETRYN	H	450	60	200
	301	SULFOMETURON-METHYL	H	70	20	78
	304	TEBUTHIURON	H	2500	360	80
	306	TERBACIL	H	710	120	55
	312	THIFENSULFURON-METHYL	H	2400	12	45
	314	THIOCYCLAM-HYDROGEN OXALATE	I	84000	1	20
	321	TRIADIMEFON	FO	71,5	26	300
	324	TRIBENURON METHYL	H	280	10	46
	338	VINCLOZOLIN	FO	1000	20	100
2	5	2,4,5-T AMINE SALTS	H	500000	24	80
	8	2,4-D DIMETHYLAMINE SALT	H	796000	10	20
	11	2,4-DB DIMETHYLAMINE SALT	H	709000	10	20
	12	3-CPA SODIUM SALT	H	200000	10	20
	14	ACEPHATE	I	818000	3	2
	15	ACIFLUORFEN SODIUM SALT	H	250000	14	113
	16	ACROLEIN	A	208000	14	0,5
	18	ALDICARB	I	6000	30	30
	19	ALDOXYCARB (Aldicarb sulfone)	I	10000	20	10
	24	AMITROLE (Aminotriazole)	H	360000	14	100
	25	AMS (Ammonium Sulfamate)	H	684000	14	3
	29	ASULAM SODIUM SALT	H	550000	7	40
	40	BENTAZON SODIUM SALT	H	2300000	20	34
	57	CDAA (Allidochlor)	H	20000	10	20
	58	CHLORAMBEN SALTS	H	900000	14	15
	71	CHLORSULFURON	H	7000	40	40
	76	CLOPYRALID AMINE SALT	H	300000	40	6
	83	CYROMAZINE	I	136000	150	200
	84	DALAPON SODIUM SALT	H	900000	30	1
	85	DAMINOZIDE	RC	100000	21	10
	97	DICAMBA SALT	H	400000	14	2
	105	DICROTOPHOS	I	1000000	20	75
	113	DIMETHOATE	I	39800	7	20
	114	DIMETHYLARSENIC ACID	I	200000000	50	1000
	126	DNOC SODIUM SALT	B	100000	20	20
	130	ENDOTHALL (Endothal) SALT	H	100000	7	20
	142	FENAC (Chlorfenac) SALT	H	500000	180	20
	166	FOMESAFEN SODIUM SALT	H	700000	100	60
	169	FOSAMINE AMMONIUM SALT	H	1790000	8	150
	171	GLUFOSINATE AMMONIUM SALT	H	1370000	7	100
	176	HEXAZINONE	H	33000	90	54
	183	IMAZAPYR ISOPROPYLAMINE SALT	H	500000	90	100
	185	IMAZAQUIN AMMONIUM SALT	H	160000	60	20
	186	IMAZETHAPYR (AC 263, 499)	H	200000	90	10
	198	MALEIC HYDRAZIDE POTASSIUM SALT	H	400000	30	20
	201	MCPA DIMETHYLAMINE SALT	H	866000	25	2000

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	203	MCPB SODIUM SALT	H	200000	14	20
	204	MECOPROP (MCPP) DIMETHYLAMINE SALT	H	660000	21	20
	207	METALAXYL	FO	8400	70	50
	209	METAM SODIUM SALT	B	963000	7	10
	210	METHAMIDOPHOS	I	1000000	6	5
	215	METHOMYL	I	58000	30	72
	217	METHYL BROMIDE	B	13400	55	22
	223	METSULFURON-METHYL	H	9500	30	35
	224	MEVINPHOS	I	600000	3	44
	228	MONOCROTOPHOS	I	1000000	30	1
	234	NAA SODIUM SALT	RC	419000	10	20
	238	NAPTALAM SODIUM SALT	H	231000	14	20
	240	NICOSULFURON	H	22000	21	30
	246	OXAMYL	I	282000	4	25
	248	OXYDEMETON-METHYL	I	1000000	10	10
	257	PENTACHLOROPHENOL	B	100000	48	30
	258	PERFLUIDONE	H	500000	30	30
	266	PHOSPHAMIDON	I	1000000	17	7
	267	PICLORAM SALT	H	200000	90	16
	300	SODIUM CHLORATE	H	100000	200	10
	303	TCA	H	1200000	21	3
	326	TRICHLORFON	I	120000	10	10
	328	TRICLOPYR AMINE SALT	H	2100000	46	20
	332	TRIFLUMIZOLE	FO	12500	14	40
3	28	ARSENIC ACID	B	17000	10000	100000
	61	CHLORDIMEFORM HYDROCHLORIDE	I	500000	60	100000
	77	CRYOLITE	I	420	3000	10000
	109	DIFENZOQUAT METHYLSULFATE SALT	H	817000	100	54500
	123	DIQUAT DIBROMIDE SALT	H	718000	1000	1000000
	127	DODINE ACETATE	FO	700	20	100000
	128	DSMA	H	250000	180	7000
	136	ETHEPHON	RC	1239000	10	100000
	168	FORMETANATE HYDROCHLORIDE SALT	I	500000	100	1000000
	172	GLYPHOSATE ISOPROPYLAMINE SALT	H	900000	47	24000
	179	IMAZALIL	FO	1400	150	4000
	206	MEPIQUAT CHLORIDE SALT	RC	1000000	1000	1000000
	211	METHANEARSONIC ACID SODIUM SAL	H	1400000	1000	100000
	231	MSMA	H	1000000	180	7000
	252	PARAQUAT DICHLORIDE SALT	H	620000	1000	1000000
	283	PROPAMOCARB HYDROCHLORIDE	FO	1000000	30	1000000
	330	TRICYLAZOLE	FO	1600	21	1200
4	20	ALDRIN	I	0,027	365	5000
	35	BENEFIN (Benfluralin)	H	0,1	40	9000
	42	BIFENTHRIN	I	0,1	26	240000
	55	CARBOPHENOTHION	I	0,34	30	50000
	60	CHLORDANE	I	0,06	350	20000

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	74	CLOFENTEZINE	I	0,1	40	45000
	80	CYFLUTHRIN	I	0,002	30	100000
	82	CYPERMETHRIN	I	0,004	30	100000
	89	DCPA (Chlorthal-dimethyl)	H	0,5	100	5000
	90	DDD (TDE)	I	0,02	1000	100000
	91	DDE	I	0,1	1000	50000
	92	DDT	I	0,0055	2000	2000000
	103	DICLOFOP-METHYL	H	0,8	30	16000
	106	DIELDRIN	I	0,2	1000	12000
	129	ENDOSULFAN	I	0,32	50	12400
	131	ENDRIN	I	0,23	4300	10000
	137	ETHION	I	1,1	150	10000
	161	FLUCYTHRINATE	I	0,06	21	100000
	165	FLUVALINATE	I	0,005	7	1000000
	174	HEPTACHLOR	I	0,056	250	24000
	175	HEXACHLOROBENZENE (HCB)	I	0,005	1000	50000
	178	HYDRAMETHYLNON (Amdro)	I	0,006	10	730000
	190	ISOPROPALIN	H	0,1	100	10000
	193	LAMBDA-CYHALOTHRIN	I	0,005	30	180000
	216	METHOXYCHLOR	I	0,1	120	80000
	220	METIRAM	FO	0,1	20	500000
	226	MIREX	I	0,00007	3000	1000000
	242	NITROFEN	H	1	30	10000
	249	OXYFLUORFEN	H	0,1	35	100000
	256	PENDIMETHALIN	H	0,275	90	5000
	259	PERMETHRIN	I	0,006	30	100000
	275	PRODIAMINE	H	0,013	120	13000
	277	PROFLURALIN	H	0,1	110	10000
	291	PYRETHRINS	I	0,001	12	100000
	293	RESMETHRIN	I	0,01	30	100000
	302	SULPROFOS	I	0,31	140	12000
	305	TEMEPHOS	I	0,001	30	100000
	319	TOXAPHENE	I	3	9	100000
	320	TRALOMETHRIN	I	0,001	27	100000
	333	TRIFLURALIN	H	0,3	60	8000
	336	TRIPHENYLTIN HYDROXIDE	H	1	75	23000
5	13	ABAMECTIN (Avermectin)	I	5	28	5000
	37	BENOMYL	FO	2	67	1900
	39	BENSULIDE	H	5,6	120	1000
	52	CARBENDAZIM (MBC)	FO	8	120	400
	63	CHLOROBENZILATE	I	13	20	2000
	64	CHLORONEB	FO	8	130	1650
	66	CHLOROTHALONIL	FO	0,6	30	1380
	67	CHLOROXURON	H	2,5	60	3000
	69	CHLORPYRIFOS	I	0,4	30	6070
	81	CYHEXATIN	I	1	50	4000

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	88	DCNA (Dicloran)	FO	7	60	1000
	94	DESMEDIPHAM	H	8	30	1500
	98	DICHLOBENIL	H	21,2	60	400
	104	DICOFOL	I	0,8	45	5000
	107	DIENOCHLOR	I	25	300	600
	115	DINITRAMINE	H	1,1	30	4000
	122	DIPROPETRYN	H	16	30	900
	125	DIURON	H	42	90	480
	134	ESFENVALERATE	I	0,002	35	5300
	135	ETHALFLURALIN	H	0,3	60	4000
	141	ETRIDIAZOLE	FO	50	103	1000
	145	FENARIMOL	FO	14	360	600
	146	FENBUTATIN OXIDE	I	0,0127	90	2300
	154	FENTHION	I	4,2	34	1500
	156	FENVALERATE	I	0,002	35	5300
	160	FLUCHLORALIN	H	0,9	60	3000
	162	FLUMETRALIN	RC	0,1	20	10000
	167	FONOFOS	I	16,9	40	870
	177	HEXYTHIAZOX	RC	0,5	30	6200
	189	ISOFENPHOS	I	24	150	600
	191	ISOXABEN	H	1	100	1400
	194	LINDANE	I	7	400	1100
	195	LINURON	H	75	60	400
	199	MANCOZEB	FO	6	70	2000
	200	MANEB	FO	6	70	2000
	202	MCPA ESTER	H	5	25	1000
	232	MYCLOBUTANIL	FO	142	66	500
	237	NAPROPAMIDE	H	74	70	700
	239	NEBURON	H	5	120	2500
	244	ORYZALIN	H	2,5	20	600
	245	OXADIAZON	H	0,7	60	3200
	250	OXYTHIOQUINOX (Quinomethionate)	I	1	30	2300
	251	PACLOBUTRAZOL	RC	35	200	400
	254	PCNB	FO	0,44	21	5000
	261	PHENMEDIPHAM	H	4,7	30	2400
	262	PHENTHOATE	I	11	35	1000
	263	PHORATE	I	22	60	1000
	268	PIPERALIN	FO	20	30	5000
	273	PROCHLORAZ	FO	34	120	500
	280	PROMETRYN	H	33	60	400
	281	PRONAMIDE (Propyzamide)	H	15	60	800
	285	PROPARGITE	I	0,5	56	4000
	286	PROPAZINE	H	8,6	135	154
	288	PROPICONAZOLE	FO	110	110	650
	292	QUIZALOFOP-ETHYL	H	0,31	60	510
	297	SIDURON	H	18	90	420

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	298	SIMAZINE	H	6,2	60	130
	308	TERBUTRYN	H	22	42	2000
	310	THIABENDAZOLE	FO	50	403	2500
	318	TOLCLOFOS-METHYL	FO	0,3	30	2000
	322	TRIADIMENOL	FO	47	300	800
	323	TRIALLATE	H	4	82	2400
	327	TRICHLORONAT	I	50	139	400
	329	TRICLOPYR ESTER	H	23	46	780
	331	TRIDIPHANE	H	1,8	28	5600
	339	ZINEB	FO	10	30	1000
6	9	2,4-DB ACID	H	46	5	440
	10	2,4-DB BUTOXYETHYL ESTER	H	8	7	500
	23	AMITRAZ	I	1	2	1000
	27	ANILAZINE	FO	8	1	1000
	31	AZINPHOS-METHYL	I	29	10	1000
	32	BARBAN	H	11	5	1000
	33	BENALAXYL	FO	37	30	1000
	34	BENDIOCARB	I	40	5	570
	36	BENODANIL	FO	20	25	700
	38	BENSULFURON METHYL	H	120	5	370
	41	BIFENOX	H	0,398	7	10000
	45	BROMOXYNIL BUTYRATE ESTER	H	27	7	1079
	46	BROMOXYNIL OCTANOATE ESTER	H	0,08	7	10000
	47	BUTACHLOR	H	23	12	700
	48	BUTYLATE	H	44	13	400
	49	CAPTAFOL	FO	1,4	7	3000
	50	CAPTAN	FO	5,1	2,5	200
	59	CHLORBROMURON	H	35	40	500
	68	CHLORPROPHAM (CIPC)	H	89	30	400
	70	CHLORPYRIFOS-METHYL	I	4	7	3000
	72	CHLOZOLINATE	FO	1	2	10000
	73	CINMETHYLIN	H	63	30	300
	79	CYCLOATE	H	95	30	430
	95	DI-ALLATE	H	14	30	500
	96	DIAZINON	I	60	40	1000
	99	DICHLONE	FO	0,1	10	10000
	101	DICHLORPROP (2,4-DP) ESTER	H	50	10	1000
	108	DIETHATYL-ETHYL	H	105	30	1400
	110	DIFLUBENZURON	I	0,08	10	10000
	116	DINOCAP	FO	4	5	550
	118	DINOSEB PHENOL	H	50	20	500
	124	DISULFOTON	I	25	30	600
	132	EPN	I	0,5	15	4000
	138	ETHOFUMESATE	H	50	30	340
	148	FENITROTHION	I	30	4	2000
	150	FENOXAPROP-ETHYL	H	0,8	9	9490

Groupe	# Pesticide	Pesticide	Organismes-cibles	Solubilité [mg/l]	Demi vie [jour]	Sorption [ml/g]
	151	FENOXYCARB	I	6	1	1000
	152	FENPROPATHRIN	I	0,33	5	5000
	158	FLUAZIFOP-BUTYL	H	2	21	3000
	159	FLUAZIFOP-P-BUTYL	H	2	15	5700
	164	FLURIDONE	H	10	21	1000
	187	IPRODIONE	FO	13,9	14	700
	192	LACTOFEN	H	0,1	3	10000
	196	MALATHION	I	130	1	1800
	212	METHAZOLE	H	1,5	14	3000
	214	METHIOCARB (Mercaptodimethur)	I	24	30	300
	219	METHYL PARATHION	I	60	5	5100
	225	MEXACARBATE	I	100	10	300
	233	NAA ETHYL ESTER	RC	105	10	300
	236	NAPHTHALENE	I	30	30	500
	241	NITRAPYRIN	B	40	10	570
	243	NORFLURAZON	H	28	30	700
	253	PARATHION (Ethyl parathion)	I	24	14	5000
	255	PEBULATE	H	100	14	430
	260	PETROLEUM OIL	B	100	10	1000
	264	PHOSALONE	I	3	21	1800
	265	PHOSMET	I	20	19	820
	271	PIRIMIPHOS-METHYL	I	9	10	1000
	274	PROCYMIDONE	FO	4,5	7	1500
	276	PROFENOFOS	I	28	8	2000
	294	ROTENONE	I	0,2	3	10000
	307	TERBUFOS	I	5	5	500
	309	TETRACHLORVINPHOS	I	11	2	900
	311	THIDIAZURON	RC	20	10	110
	313	THIOBENCARB	H	28	21	900
	315	THIODICARB	I	19,1	7	350
	316	THIOPHANATE-METHYL	FO	3,5	10	1830
	317	THIRAM	FO	30	15	670
	325	TRIBUFOS	RC	2,3	10	5000
	334	TRIFORINE	FO	30	21	540
	335	TRIMETHACARB	I	58	20	400
	337	VERNOLATE	H	108	12	260
	340	ZIRAM	FO	65	30	400

ANNEXE C. CLASSIFICATION ANTÉRIEURE DES PESTICIDES PAR LA MÉTHODE DE L'EXPERTISE (ROUSSEAU *ET AL.*, 2006)

Figure tirée du rapport précédent pour EC (Rapport *R-786F*) :

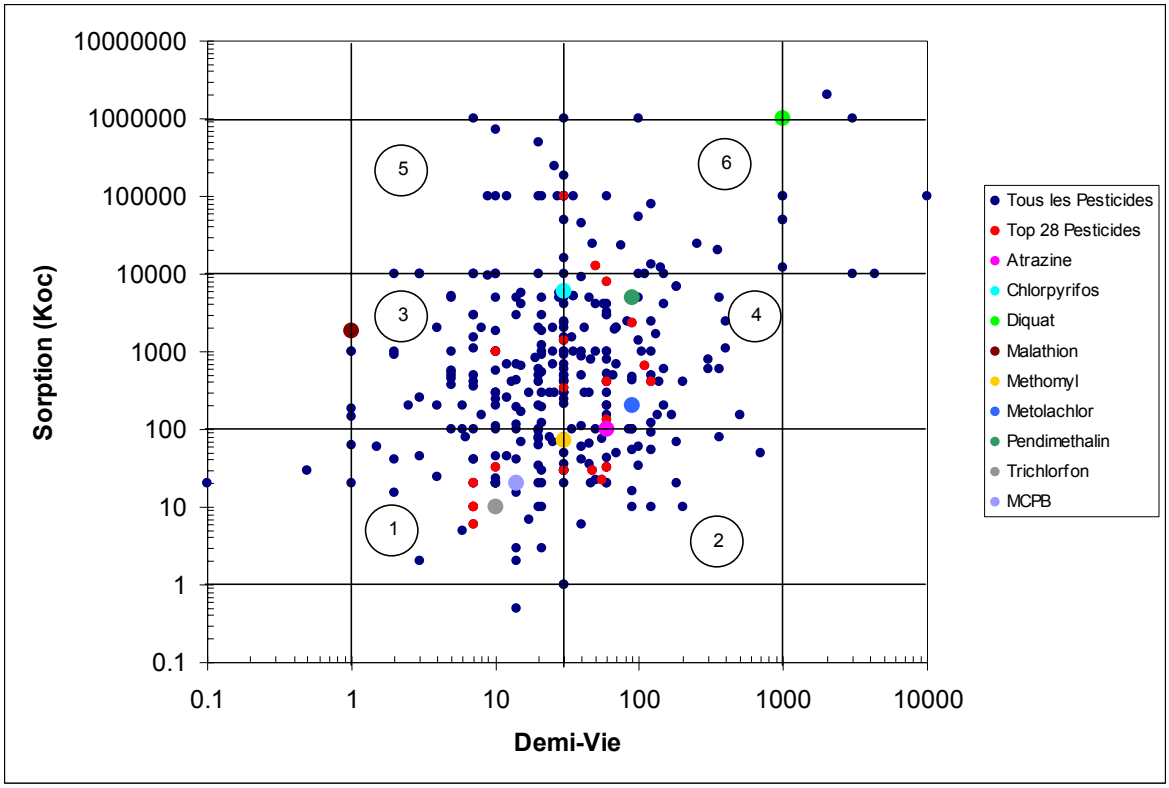

Figure C. 1 : **Classification (en 6 classes-groupes) des 340 pesticides (banque de données de Hornsby *et al.*, 1996). « *Top 28 pesticides* » représente les composés présents à la fois dans la banque de données et dans la liste des 50 pesticides « prioritaires » d'EC. Les composés nominatifs avec un symbole de couleur distinctive comptent parmi les 10 pesticides « *Top ten* » d'EC, excepté le *Métolachlor* et le *MCPB.***