

NOTE METHODOLOGIQUE

Collecte et échange des données relatives à la surveillance de milieux aquatiques au travers de la réalisation d'analyses non ciblées (non-target screening ou NTS)

Titre : Note Sandre – Collecte et échange des données relatives à la surveillance prospective de milieux aquatiques au travers de la réalisation d'analyses non ciblées (NTS)

Créateur : Système d'Information sur l'Eau - Office International de l'Eau / Sandre

Contributeurs : AQUAREF

Auteur : Secrétariat technique du Sandre

Date : 14/06/2019

Type : Texte

Version : 1.0

Format : PDF

Identifiant :

Langue : fra

Couverture spatiale : France métropolitaine

Couverture temporelle :

Droits d'usage : <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.0/fr>

Table des matières

1.. Introduction.....	2
2.. Cadre réglementaire.....	3
3.. Présentation du Sandre.....	3
4.. Objectif de la présente note méthodologique.....	3
5.. Principes techniques des analyses non ciblées dans le cadre de la surveillance prospective des milieux aquatiques.....	4
6.. Description des données métiers.....	4
6.1 Supports d'investigation.....	4
6.2 Prélèvements et échantillons.....	5
7.. Echange de données via le standard EDILABO, version 1.....	5

1. Introduction

Les systèmes aquatiques sont aujourd'hui contaminés par une diversité de composés organiques.

Aujourd'hui, la démarche utilisée pour mesurer l'état chimique des eaux consiste à cibler lors de prélèvements ponctuels une liste de substances réglementées, parmi les nombreux micropolluants à surveiller. Or, cette approche n'est pas suffisamment représentative de l'évolution de la contamination dans le temps, et elle ne permet pas de détecter les substances émergentes et les produits de dégradation présents à de très faibles concentrations.

Par ailleurs, les laboratoires en charge des analyses chimiques pour la surveillance de l'état chimique des milieux aquatiques ne disposent pas actuellement de méthodes suffisamment sensibles pour analyser ces composés. En effet, le niveau de concentration de ces composés dans l'environnement aquatique ainsi que leur effet à très faible dose ont conduit à la définition de norme de qualité environnementale très basse. Par conséquent, pour répondre à ces enjeux, le recours à d'autres méthodes, telles que les techniques d'analyses non ciblées, présente un intérêt dans un tel contexte réglementaire.

Le réseau AQUAREF s'inscrit dans cette mission dont un des objectifs est de proposer et valider de nouvelles méthodes pour la surveillance de la qualité chimique des milieux aquatiques, en appui à la Directive Cadre sur l'Eau.

Les analyses non ciblées constituent en effet de nouvelles techniques d'analyse chimique à large spectre pour aider l'identification de substances (y compris métabolites et produits de transformation) fréquemment présentes mais pas recherchées à ce jour de manière ciblée. Ces substances pourront, en raison de leurs niveaux d'occurrence et/ ou de leurs effets, intégrer les listes de substances candidates pour des travaux de priorisation.

D'autres applications des techniques d'analyses chimiques non ciblées sont possibles, comme la comparaison d'empreintes chimiques dans le temps ou entre différentes stations de mesure de la qualité des eaux superficielles continentales.

📌 2. Cadre réglementaire

Bien que la réglementation actuelle soit axée sur une méthode de surveillance classique basée sur un mode d'échantillonnage ponctuel dans le milieu aquatique, la directive n° 2013/39/UE du 12/08/13 modifiant les directives 2000/60/CE et 2008/105/CE en ce qui concerne les substances prioritaires pour la politique dans le domaine de l'eau, stipule que de nouvelles méthodes de surveillance semblent prometteuses et qu'il convient dès lors de les développer.

Les travaux en cours sur le NTS s'intègrent dans la perspective d'une intégration à moyen terme dans les stratégies de surveillance des milieux aquatiques.

📌 3. Présentation du Sandre

Le service d'administration nationale des données et des référentiels sur l'eau (Sandre) est un service déclaré d'utilité publique dont le secrétariat technique est placé sous la responsabilité de l'Office international de l'eau. Le Sandre a pour missions principales:

- d'élaborer un langage commun entre les acteurs de l'eau de manière à rendre leurs systèmes d'information interopérables
- d'élaborer des scénarii d'échanges de données constituant des recommandations techniques permettant une meilleure circulation des données sur l'eau entre les différentes parties prenantes
- d'administrer et de diffuser librement des jeux de données de référence qui constituent des codes alphanumériques permettant d'identifier des objets métiers du domaine de l'eau (exemples : paramètres, méthodes d'analyses, supports analysés,...), afin que ces codes facilitent par la suite le traitement des données sur l'eau.

📌 4. Objectif de la présente note méthodologique

Le secrétariat technique du Sandre a été sollicité par AQUAREF et l'Agence Française pour la Biodiversité (AFB) afin de leur apporter son expertise technique en matière de codification, de définition et d'échange informatisées de données qui découlent de la mise en application d'analyses NTS.

Le Sandre est chargé en particulier de s'assurer que le périmètre des données métiers collectées au travers de l'application de cette méthode est bien pris en compte au travers des dictionnaire de données relatives aux processus d'acquisition de données physico-chimiques des eaux superficielles continentales, des eaux souterraines, des eaux résiduaires et des eaux littorales.

L'objectif de la présente note est de mettre en œuvre la traçabilité de l'existence d'une empreinte NTS rattachée(s) au prélèvement. Le lien vers l'empreinte et la bancarisation des résultats de screening ne font pas l'objet de cette note.

5. Principes techniques des analyses non ciblées dans le cadre de la surveillance prospective des milieux aquatiques.

L'analyse dite « par screening » ou « analyses non ciblées » est de plus en plus utilisée dans le cadre de l'investigation des sites pollués et des déchets. Elle vise à détecter des composés organiques notamment ceux qui ne seraient pas recherchés par une analyse ciblée de substances spécifiques.

Le principe de cette technique consiste à partir d'un support quelconque (EAU, EIP, SEDIMENT, BIOTE...) à réaliser une combinaison de méthodes d'extraction et d'analyses, en appliquant par exemple une méthode d'analyse de spectrométrie de masse haute résolution, afin d'aboutir à une « empreinte » chimique.

6. Description des données métiers

6.1 Supports d'investigation

Les matrices environnementales ou supports pouvant faire l'objet d'analyses non ciblées sont listées ci-dessous de manière non exhaustive.

Code Sandre du support	Libellé du support	Définition
3	Eau	
6	Sédiment	
85	Echantillonneur intégratif passif	Un échantillonneur intégratif passif (EIP) est un outil généralement de petite dimension permettant d'obtenir une concentration en contaminants « intégrée » dans le temps, c'est à dire moyennée sur la durée d'exposition. Il est immergé dans le milieu à échantillonner de quelques jours à quelques mois avant d'être retiré pour être analysé en laboratoire. Il est qualifié communément de « passif » car l'échantillonnage se fait par diffusion chimique passive, sans apport d'énergie. Il existe différents types d'outils EIP (POCIS, DGT, SR...).

Pour rappel, conformément au langage commun défini par le Sandre, le support est ce sur quoi porte l'investigation.

La fraction analysée correspond à tout ou partie du support prélevé qui fait l'objet par la suite d'un processus analytique permettant d'extraire et de déterminer la valeur d'un ou plusieurs paramètres.

Code Sandre de la fraction analysée	Libellé de la fraction analysée	Définition
23	Eau brute	
31	Sédiments bruts	
317	Phase réceptrice de l'EIP	la phase réceptrice est la composante de l'EIP qui permet de piéger, selon leur affinité, des substances présentes dans le milieu aquatique à surveiller, ceci de manière passive

6.2 Prélèvements et échantillons

Une analyse non ciblée correspond à l'ensemble des actions consistant au final à extraire de manière la plus exhaustive possible des substances chimiques d'un échantillon issu d'un prélèvement, puis à réaliser une « empreinte » chimique selon une ou plusieurs méthodes d'analyse donnée. Par conséquent, la réalisation d'une analyse non ciblée sera codifiée sous la forme d'un paramètre Sandre de nature chimique et pourra prendre pour valeur « 0 » (analyse non ciblée réalisée) ou « 1 » (analyse non ciblée non réalisée).

A noter que conformément aux standards EDILABO, la notion d'ECHANTILLON est indépendante du flaconnage. Un ECHANTILLON ne s'adresse qu'à un seul destinataire si bien que dans un fichier XML EDILABO, il est possible d'avoir pour un prélèvement donné autant d'ECHANTILLON que de destinataire.

7. Echange de données via le standard EDILABO, version 1

Les données définies dans le standard EDILABO, version 1 sont décrites dans les documents suivants :

Message « EDILABO : Demande de prestations », version 1 :

http://sandre.eaufrance.fr/ftp/documents/fr/scn/com_lab0/1.0/scenario_DEM_EDILABO_v1.pdf

Message « EDILABO : Envoi de résultats », version 1 :

http://sandre.eaufrance.fr/ftp/documents/fr/scn/lab0_dest/1.0/scenario_RES_EDILABO_v1.pdf

Le tableau ci-dessous s'attache à mettre en correspondance les données à échanger et bancariser dans le cadre de l'usage des analyses non ciblées, avec les données métiers définies dans le standard EDILABO, version 1.

Pour rappel, la notion de COMMEMORATIF permet de « greffer » des données métiers supplémentaires au niveau d'un concept métier donné (DEMANDE, PRELEVEMENT, ECHANTILLON, ANALYSE). Un commémoratif dispose d'un code sandre, d'une définition et d'une éventuelle liste codifiées de valeurs possibles.

Données à échanger et bancariser dans le cadre analyses NTS	Données définies dans le standard EDILABO	Commentaires
Données relatives aux prélèvements		
Lieu de prélèvement	Code de la station de prélèvement	Il doit s'agir de stations de prélèvement de la qualité des eaux superficielles continentales ou bien de lieux de surveillance pour les eaux littorales
	Code la localisation de prélèvement	Code de points de prélèvement pour les eaux superficielles continentales
Date de prélèvement	Date de prélèvement	
Support prélevé	Code du support prélevé	Exemples : 3 : « EAU » 6 : « Sédiments » 85 : « EIP » ...
Données relatives aux analyses		
Méthode d'analyse	Méthode d'analyse	Code Sandre de la méthode d'analyse Exemple : 914 : GC/HRMS http://id.eaufrance.fr/met/914 ...
Paramètre	Paramètre	8513 : « Empreinte chimique » http://id.eaufrance.fr/par/8513 le nom de la méthode étant spécifié dans l'attribut méthode d'analyses
Résultat d'analyse	Résultat d'analyse	Valeurs possibles : « 0 » : Empreinte chimique non réalisée « 1 » : Empreinte chimique réalisée
Code remarque de l'analyse	Code remarque de l'analyse	Valeurs possibles : « 0 » : Analyse non réalisée « 1 » : Domaine de validité Lorsque le résultat d'analyse est « 0 », le code remarque doit prendre pour valeur « 0 »