

## 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 : 09/12/2019

Type : Texte

Version : 1

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.....	2
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.....	3
6.Description des données métiers.....	3
6.1 Supports d'investigation.....	3
6.2 Prélèvements et échantillons.....	4
7.Echange de données via le standard EDILABO, version 1.....	5

## 1.Introduction

---

Les systèmes aquatiques sont aujourd'hui potentiellement 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. Des substances chimiques peuvent également être présentes dans l'environnement mais dont on ne connaît pas encore leur impact environnemental.

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.

## 2.Cadre réglementaire

---

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

A ce jour, des discussions sont en cours pour voir comment ces outils peuvent intégrer les processus d'identification et de priorisation de substances d'intérêt.

### **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 informatisés 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 dictionnaires 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'empreintes 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. 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, SEDIMENT, BIOTE...), à réaliser une combinaison de méthodes d'extraction et d'analyses, en appliquant 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	
86	POCIS-HLB	Echantillonneur intégratif passif de type POCIS constitué de membranes en polyethersulfone (PES) de diamètre de pore 0,1 µm, d'une phase adsorbante de type Hydrophilic-Lipophilic Balance HLB (granulométrie 60 µm) et de rapport « surface de la membrane sur quantité de phase adsorbante » compris entre 220-230 cm <sup>2</sup> /g.
...	...	...

**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	
318	Phase réceptrice de l'EIP - POCIS-HLB	Phase réceptrice de l'échantillonneur intégratif passif de type POCIS-HLB
...	...	...

## 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 méthode 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 non réalisée) ou « 1 » (analyse non ciblée réalisée).

A noter que conformément aux standard 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\\_lab/1.0/scenario\\_DEM\\_EDILABO\\_v1.pdf](http://sandre.eaufrance.fr/ftp/documents/fr/scn/com_lab/1.0/scenario_DEM_EDILABO_v1.pdf)

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

[http://sandre.eaufrance.fr/ftp/documents/fr/scn/lab/dest/1.0/scenario\\_RES\\_EDILABO\\_v1.pdf](http://sandre.eaufrance.fr/ftp/documents/fr/scn/lab/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 de valeurs possibles.

<b>Données à échanger et bancariser obligatoirement dans le cadre d'analyses non ciblées</b>	<b>Données définies dans le standard EDILABO, version 1</b>	<b>Commentaires</b>
<b>Données relatives aux prélèvements</b>		
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, ou bien de qualitomètre pour les eaux souterraines
	Code la localisation de prélèvement	Code de points de prélèvement pour les eaux superficielles continentales
Date de prélèvement	Date de prélèvement	
Méthode de prélèvement	Méthode de prélèvement	
Support prélevé	Code du support prélevé	Exemples : 3 : « EAU » 6 : « Sédiments » 86 : « POCIS-HLB » ...
Référence de l'échantillon chez	Référence de l'échantillon	<b>La référence de l'échantillon chez</b>

le laboratoire	chez le laboratoire	<b>le laboratoire s'avère obligatoire</b> à échanger et bancariser en vue d'investigations ultérieures
<b>Données relatives aux analyses</b>		
Méthode d'extraction	Méthode d'extraction	Information obligatoire
Fraction analysée	Fraction analysée	En cohérence avec le support prélevé
Méthode d'analyse	Méthode d'analyse	Code Sandre de la méthode d'analyse Exemple : 1204: Couplage chromatographie en phase liquide-ionisation par électrospray mode positif-spectrométrie de masse haute résolution en mode full scan  <a href="http://id.eaufrance.fr/met/1204">http://id.eaufrance.fr/met/1204</a> <a href="http://id.eaufrance.fr/met/1205">http://id.eaufrance.fr/met/1205</a> <a href="http://id.eaufrance.fr/met/1206">http://id.eaufrance.fr/met/1206</a> <a href="http://id.eaufrance.fr/met/1207">http://id.eaufrance.fr/met/1207</a>  ...
Paramètre	Paramètre	8576 : «Empreinte chimique de type A » <a href="http://id.eaufrance.fr/par/8576">http://id.eaufrance.fr/par/8576</a>  8577: « Empreinte chimique de type B » <a href="http://id.eaufrance.fr/par/8577">http://id.eaufrance.fr/par/8577</a>  8578 : « Empreinte chimique de type C » <a href="http://id.eaufrance.fr/par/8578">http://id.eaufrance.fr/par/8578</a>  8579 : « Empreinte chimique de type D » <a href="http://id.eaufrance.fr/par/8579">http://id.eaufrance.fr/par/8579</a>  Attention, chaque paramètre DOIT être associée à la bonne méthode d'analyse (ex : 8576 associé à 1204 ;...)
Résultat d'analyse	Résultat d'analyse	Une empreinte non réalisée est désignée par un résultat « vide » associé au code remarque « 0 » Une empreinte réalisée est désignée par un résultat prenant comme valeur « 1 » associé au code remarque « 1 »
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 vide, le code remarque doit prendre pour valeur « 0 »