Synthèse à destination des gestionnaires nationaux de la surveillance des actions européennes sur les techniques de non-target screening

STRATEGIE D'INTERPRETATION ET EXPLOITATION DES DONNEES DE NON-TARGET SCREENING EN LIEN AVEC LE RESEAU NORMAN POUR PREPARER L'APPLICATION DE CES TECHNIQUES DANS LA FUTURE SURVEILLANCE

A. Togola, F. Lestremau, C. Margoum, V. Dulio

Janvier 2017

Note de synthèse

En partenariat avec

Avec le soutien de

Contexte de programmation et de réalisation

Ce rapport a été réalisé dans le cadre du programme scientifique et technique AQUAREF pour l'année 2016, thème F « Nouveaux outils et connaissances pour optimiser les stratégies de surveillance ».

Auteurs :

Anne Togola
BRGM
a.togola@brgm.fr

François Lestremau
INERIS
francois.lestremau@ineris.fr

Valéria Dulio
INERIS
valeria.dulio@ineris.fr

Christelle Margoum
IRSTEA
christelle.margoum@irstea.fr

Vérification du document :

Sophie Lardy-Fontan
LNE
sophie.lardy-fontan@lne.fr

Les correspondants

AFB : Pierre Francois Staub, pierre-francois.staub@onema.fr

BRGM : Jean-Philippe Ghestem, jp.ghestem@brgm.fr

Référence du document : Anne Togola, François Lestremau, Valéria Dulio et Christelle Margoum – Synthèse à destination des gestionnaires nationaux de la surveillances des actions européennes sur les techniques de non-target screening – Rapport AQUAREF 2016 – 7 p.

Droits d'usage :	*Accès libre*
Couverture géographique :	*International*
Niveau géographique :	*National*
Niveau de lecture :	*Professionnels, experts*
Nature de la ressource :	*Document*

1. INTRODUCTION

L'objectif de cette action est :

- d'informer les gestionnaires (DEB, AFB, AE, ODE…) de la surveillance nationale sur les actions en cours au niveau européen et sur les opportunités offertes par les nouveaux outils, afin de les intégrer au mieux dans les futurs schémas de surveillance,
- de renforcer, le partage d'informations et de pratiques entre les actions mises en œuvre dans le cadre du réseau NORMAN, les actions AQUAREF et les actions nationales de recherche sur le sujet,
- de faire remonter au niveau européen, les travaux nationaux afin d'enrichir les discussions sur la comparaison des méthodes, l'assurance qualité, la bancarisation des données… et de relayer une réflexion sur les aspects opérationnels de ces nouvelles techniques.

2. LES ACTIONS AUTOUR DU NTS DANS LE RESEAU NORMAN

Dans le cadre du réseau NORMAN (http://www.normandata.eu/), les actions autour du NTS (non-target screening) ont été identifiées comme transverses, c'est-à-dire en fortes interactions avec différentes activités du programme NORMAN. À ce titre, deux types d'actions coexistent :

- les actions « fondamentales » sur le développement des outils (développement de modèles, workflow de retraitement des données, échanges de listes de composés à rechercher, organisation d'essais inter-laboratoires, bancarisation des données…) et,
- les actions transverses, plus applicatives, sur l'utilisation de ces nouvelles données dans le processus de priorisation des données, les liens avec les approches écotoxicologiques (EDA), le couplage avec les échantillonneurs passifs…

L'Ifremer, l'INERIS, l'Irstea et le BRGM sont impliqués dans les actions NORMAN autour du NTS.
Différentes actions et réunions techniques se sont déroulées en 2016, auxquelles les acteurs AQUAREF ont participé.

2.1 Trends and advancements in the sampling and preservation of samples for the identification of contaminants of emerging concern, Mars 2016, NIVA Oslo

Participation C Miège (Irstea), A Togola (BRGM), V Dulio (Ineris).

Lors de ce meeting consacré à la bancarisation des échantillons sous différentes formes (échantillons biologiques, échantillons passifs et spectrothèques) différentes approches et verrous ont été présentés. Les discussions portent sur la mise en réseau d'une liste de composés suspects (NORMANEWS) : un composé retrouvé dans un laboratoire pourrait être « rapidement » recherché et donc évalué à l'échelle européenne grâce au retraitement rétrospectif d'analyses bancarisées. Le NILU (Norwegian Institute for Air Research) donne l'exemple d'une analyse rétrospective du sucralose sur des analyses bancarisées (issu d'une étude visant initialement les composés pharmaceutiques).

Concernant la bancarisation des analyses obtenues par les techniques de spectrométrie de masse haute résolution HRMS, différents verrous sont identifiés par plusieurs participants :

- la problématique des volumes de données à conserver,
- la gestion du format de stockage (sous licence constructeur ou open-data ?)
- la procédure d'extraction non optimale pour les molécules recherchées a postériori…

Mais les bénéfices sont aussi évoqués :

- suppression des questionnements sur la stabilité des échantillons, une potentielle dégradation pouvant entrainer l'apparition de nouveaux composés…,
- possibilité de réaliser des suivis en tendances de la matrice eau (pas de bancarisation d'échantillon d'eau à ce jour)
- la problématique stockage des données viendrait remplacer la problématique actuel du stockage volumineux des échantillons « réels » (biote, sédiments..).

2.2 Conférence « non-Target screening of organic chemicals for a comprehensive environmental risk assesment» (Ascona (Suisse), 29 Mai -3 Juin 2016)

Participation F Lestremau (INERIS), C Margoum (Irstea)

La première conférence internationale spécifiquement dédiée à la méthodologie non-target screening appliquée au domaine environnemental s'est déroulée fin Mai/début Juin à Ascona (Suisse) sur 5 jours. Le programme était organisé en journées thématiques consacrées :

- aux évolutions d'instrumentation et de pratiques de développements de méthodes,
- aux traitements de données, à la prise en compte des produits de transformation,
- à l'application du NTS aux études Effect Directed Analysis et enfin
- à la mise en place de ces procédés dans la surveillance régulière. Un meeting entre les membres de Norman s'est également déroulé lors de cette conférence pour faire le point sur les actions en cours (Norman news, Massbank, prédiction temps de rétention, EIL dust,…).

2.3 Participation RHODES /HILIC

Pas de participation AQUAREF.
Un workshop a été organisé sur la thématique des composés problématiques à analyser avec un focus particulier sur les composés polaires. Les molécules très polaires ne sont généralement pas bien analysées par des méthodes génériques. Elles nécessitent ainsi l'emploi de méthodes (notamment chromatographiques) très spécifiques. La mise en place de méthodes à base de HILIC-HRMS a notamment été présentée au cours de ce workshop dans un but d'analyses en non-target screening. A l'issue de ce workshop, NORMAN a décidé d'organiser un EIL sur l'analyse de composés polaires. Cet EIL s'est déroulé en Octobre 2016 (participation de l'INERIS) les résultats seront disponibles courant 2017. Cela pourra permettre à AQUAREF de dégager des recommandations sur la prise en compte (ou pas) de ces approches dans une application en non-target screening.

2.4 Participation EIL DUST

Participation INERIS (F Lestremau)
NORMAN a organisé un EIL portant sur l'analyse non-ciblée de poussières d'air urbain. L'objectif de l'étude portait sur la comparaison des méthodologies en NTS pour l'analyse et le traitement de données de ce type d'échantillon. L'extraction des échantillons par dichlorométhane était imposée. Le reste du protocole analytique à mettre en œuvre était libre. Les échantillons ont été fournis en Mars 2016 pour analyse et rendu des résultats par les participants en Juin 2017. Les résultats seront présentés lors d'une réunion à Oslo en Juin 2017 (en même temps que le congrès ICCE 2017).

2.5 Participation aux travaux sur le RTI (Retention TIME INDEX)

Participation INERIS
Les membres de Norman ont été sollicités par l'Université d'Athènes pour contribuer aux travaux sur le développement d'un modèle pour la prédiction des temps de rétention. Dans ce cadre, une solution étalon a été envoyée à tous les participants de l'EIL DUST afin de pouvoir recueillir des données sur les conditions expérimentales et résultats obtenus par les participants à cet EIL.

2.6 Participation au Workshop TUM - Garching / Munich on 2-4 November

Participation V Dulio (INERIS)
Les techniques de non-target screening amènent à la production d'une très grande quantité de données qui représente une source très précieuse d'information mais qui détermine également des nouveaux défis en termes de workflow d'analyse pour leur exploitation.
L'objectif du workshop 'Non-Target Screening embedded in (Open Access) Platforms' (SWEMSA16) était de : 1) fournir une vision globale des différents outils et des plateformes (open access et open source) actuellement utilisés par les opérateurs pour l'interprétation des données issues d'analyses NTS et 2) explorer les possibles options de création d'une plateforme commune d'échange harmonisée.
Le workshop a permis d'échanger entre les experts de différentes disciplines / domaines d'utilisation des techniques de NTS (eau, air, alimentaire, human biomonitoring, analyse environnementale vs forensic, etc.). Les participants au workshop ont décidé de continuer dans cette démarche d'échanges et d'harmonisation entre les fournisseurs d'équipement et les développeurs d'outils open-access. Prochaines étapes : organisation d'une deuxième edition de SWEMSA à taille réduite en 2017, en parallèle d'un workshop NORMAN (Databases workshop).

2.7 Présentation des travaux Aquaref au niveau européen

Une information a été faite, lors de l'assemblée générale NORMAN de décembre 2016 sur l'essai inter-laboratoires organisé par AQUAREF (action G2c1 2016) avec des laboratoires français travaillant sur le NTS. Les travaux n'étant alors pas finalisés, une présentation des résultats sera organisée en 2017, ainsi que des propositions pour améliorer le niveau d'informations QA/QC autour des rendus de résultats.

3. AUTRES ACTIONS AUTOUR DU NTS AU NIVEAU EUROPEEN

Le CIPR (Commission Internationale pour la Protection du Rhin) organise, au préalable à son programme d'analyse spéciale de 2017, « une étude comparative sur l'analyse non ciblée » au sein du Groupe SANA (groupe des Experts analytiques). L'objectif de cet exercice est de pouvoir comparer les résultats analytiques en supprimant les effets préparation d'échantillon, choix analytiques, et procédés de retraitement. Les seules variables devraient être les performances des différents appareils et l'évaluation des données par l'expert.
Cette expérience a pour but de voir comment il est possible de faire intervenir différents laboratoires (en charge de la surveillance sur le Rhin) au sein d'une même étude en mutualisant les résultats.
L'utilisation d'un système de traitement de la donnée commun (logiciel gratuit ENVIMASS et homogénéisation des données en s'affranchissant des logiciels fournisseurs) serait un grand pas vers la possibilité d'utiliser des spectrothèques communes à tous les intervenants.
Le BRGM devrait être associé à cet exercice (courant 2017) et en fera retour au consortium AQUAREF en 2017.