

REFERENTIEL METHODOLOGIQUE POUR LA PRIORISATION DES MICROPOLLUANTS DES MILIEUX AQUATIQUES

ETABLI PAR LE COMITE D'EXPERTS NATIONAL
POUR LA PRIORISATION
DES MICROPOLLUANTS AQUATIQUES (CEP)

Valeria DULIO, Sandrine ANDRES

Programme scientifique et technique
Année 2012

Document final

Contexte de programmation et de réalisation

Ce rapport a été réalisé dans le cadre du programme d'activité AQUAREF pour l'année 2012.

Auteurs :

Valeria DULIO
INERIS
valeria.dulio@ineris.fr

Sandrine ANDRES
INERIS
sandrine.andres@ineris.fr

Vérification du document :

Anne Morin
INERIS
anne.morin@ineris.fr

Les correspondants

ONEMA : Pierre-François Staub, pierre-francois.staub@onema.fr

Référence du document : Valéria Dulio, Sandrine Andrés, référentiel méthodologique pour la priorisation des micropolluants des milieux aquatiques

| Approbation INERIS | Approbation ONEMA |
|---|---|
| M. Philippe HUBERT Direction des Risques Chroniques | M. Pierre-François STAUB Direction de l'Action Scientifique et Technique |

| | |
|---------------------------|--------------------------------|
| Droits d'usage : | <i>Accès libre</i> |
| Couverture géographique : | <i>International</i> |
| Niveau géographique : | <i>National</i> |
| Niveau de lecture : | <i>Professionnels, experts</i> |
| Nature de la ressource : | <i>Document</i> |

SOMMAIRE

| | |
|--|----|
| LISTE DES FIGURES..... | 6 |
| LISTE DES TABLEAUX | 7 |
| RÉSUMÉ | 9 |
| ABSTRACT | 10 |
| PREAMBULE | 11 |
| 1 CONTEXTE ET OBJECTIFS..... | 13 |
| 2 ÉVALUATION DES PRINCIPAUX OUTILS DE PRIORISATION EXISTANTS..... | 15 |
| 3 REFERENTIEL DE PRIORISATION | 16 |
| 3.1 Cadre du référentiel | 16 |
| 3.2 Catégories d'action..... | 17 |
| 3.3 Hiérarchisation des substances au sein de chaque catégories d'action..... | 17 |
| 3.4 Révision et mise à jour des listes | 18 |
| 4 DEFINITION DE LA LISTE DE SUBSTANCES DE DEPART - « UNIVERS DES SUBSTANCES » | 18 |
| 4.1 Identification des substances à inclure dans l'univers de départ | 18 |
| 4.2 Source de substances d'intérêt | 18 |
| 4.3 Mise à jour régulière de la liste des substances à soumettre à l'exercice de priorisation .. | 23 |
| 5 COLLECTE DES DONNEES, EVALUATION DE LEUR QUALITE ET DE LEUR PERTINENCE | 23 |
| 5.1 Évaluation de la qualité des données | 23 |
| 5.2 Evaluation de la pertinence des données et matrices environnementales à considérer | 24 |
| 5.2.1 Identification des indicateurs..... | 24 |
| 5.2.2 Disponibilité et qualité des données..... | 27 |
| 6 CATEGORISATION DES SUBSTANCES | 29 |
| 6.1 Critères et indicateurs pour la catégorisation des substances | 29 |
| 6.1.1 Évaluation du niveau d'information disponible sur l'exposition des milieux..... | 29 |
| 6.1.2 Évaluation du niveau d'information disponible sur les effets..... | 32 |
| 6.1.3 Identification d'un risque potentiel | 33 |
| 6.2 Arbre décisionnel | 38 |
| 7 HIERARCHISATION DES SUBSTANCES..... | 42 |
| 7.1 Score « risque » | 42 |
| 7.1.1 Degré de dépassement de la PNEC..... | 42 |
| 7.1.2 Fréquence de dépassement de la PNEC..... | 43 |
| 7.2 Score « propriétés » | 43 |
| 7.2.1 Indicateur d'exposition : typologie d'usage..... | 43 |
| 7.2.2 Indicateur d'effets sur les écosystèmes (indicateur d'écotoxicité)..... | 45 |
| 7.2.3 Indicateur d'effets sur la santé humaine (propriétés de Cancérogénicité, Mutagenicité et Reprotoxycité - CMR - de la substance)..... | 45 |
| 7.2.4 Indicateurs de « substances of very high concern » (facteurs aggravants) | 48 |
| 8 ABREVIATIONS, ACRONYMES | 51 |
| 9 BIBLIOGRAPHIE | 53 |
| 10 LISTE DES ANNEXES | 56 |

LISTE DES FIGURES

| | |
|--|----|
| Figure 1 : Démarche du référentiel de catégorisation et priorisation des substances chimiques adopté par le CEP..... | 16 |
| Figure 2 : Schéma explicatif de la procédure adoptée pour la définition de la « PNEC » pour une substance chimique donnée | 36 |
| Figure 3 : Arbre décisionnel pour la distribution des substances de la liste départ dans six catégories d'action, correspondantes aux objectifs de priorisation identifiés (Schéma de la méthodologie NORMAN adapté à la situation française)..... | 38 |
| Figure 4 : Arbre décisionnel pour la distribution des substances de la liste départ dans six catégories d'action, avec le détail sur le parcours correspondant à chaque sous-catégorie | 41 |

LISTE DES TABLEAUX

| | |
|--|----|
| Tableau 1 : Liste des catégories d'action identifiées sur la base des manques d'information / connaissances et des actions à mettre en œuvre | 17 |
| Tableau 2 : Exemples de listes connues de substances (réglementaires ou issues de conventions) et critères à l'origine de chacune de ces listes..... | 20 |
| Tableau 3 : Indicateurs et critères (valeurs seuil) à appliquer pour évaluer la pertinence de la substance pour le milieu aquatique | 25 |
| Tableau 4 : Règles pour vérifier si l'eau peut être considérée comme matrice pertinente pour une molécule donnée | 26 |
| Tableau 5 : Règles pour vérifier si le sédiment peut être considéré comme matrice pertinente pour une molécule donnée | 26 |
| Tableau 6 : Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer la pertinence de la substance pour le milieu aquatique | 27 |
| Tableau 7: Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer l'intensité de recherche de la substance dans les milieux aquatiques | 30 |
| Tableau 8 : Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer l'adéquation entre la performance des méthodes analytiques disponibles et le niveau de concentration sans effet sur l'homme et les écosystèmes | 31 |
| Tableau 9 : Indicateurs et critères à appliquer pour évaluer la disponibilité de données expérimentales de danger..... | 33 |
| Tableau 10 : Paramètres, sources et données d'entrée pour la détermination d'une PNEC..... | 33 |
| Tableau 11 : Liste des requêtes pour la de catégorisation des substances | 40 |
| Tableau 12 : Règles pour l'attribution d'un score selon la typologie d'« usage » de la substance | 43 |
| Tableau 13 : Eléments permettant de classer les substances come « Wide dispersive use » ou « Industrial use » | 45 |
| Tableau 14 : Règles pour l'attribution d'un score « effets écotoxiques »..... | 45 |
| Tableau 15 : Règles pour l'attribution d'un score « effets toxiques sur la santé humaine » | 46 |
| Tableau 16 : Règles pour l'attribution d'un score cancérogénicité | 47 |
| Tableau 17 : Règles pour l'attribution d'un score mutagénicité | 47 |
| Tableau 18 : Règles pour l'attribution d'un score reprotoxicité | 48 |
| Tableau 19 : Règles pour l'attribution du score correspondant aux propriétés PBT / vPvB des substances chimiques | 49 |
| Tableau 20 : Liste des indicateurs et des valeurs seuil à appliquer pour la classification des substances chimiques au titre de substances P, vP, B, vB, T, T+, PBT, vPvB | 49 |
| Tableau 21 : Indicateur d'effet perturbateur endocrinien | 50 |

PILOTAGE ET ANIMATION SCIENTIFIQUE

| NOM | AFFILIATION |
|-----------------------|-------------|
| Pierre-François Staub | ONEMA |
| Valéria Dulio | INERIS |

EXPERTS CONTRIBUTEURS

| NOM | AFFILIATION |
|---------------------|---------------------------------|
| Sandrine Andrès | INERIS |
| Alice James Casas | INERIS |
| François Lestremeau | INERIS |
| Christine Féray | INERIS |
| Laurence Amalric | BRGM |
| Benjamin Lopez | BRGM |
| Sara Karolak | Université Paris Sud 11 |
| Jeanne Garric | IRSTEA |
| Hélène Budzinski | Université de Bordeaux |
| Barbara Le Bot | LERES/EHESP/Inserm U1085, IRSET |
| Luis Castillo | VEOLIA Environnement |
| Armelle Hebert | VEOLIA Environnement |
| Anne Morin | AQUAREF |
| Gilles Boquené | IFREMER |
| Edwige Duclay | DEB |
| Lauriance Gréaud | DEB |
| Stéphanie Schaan | DEB |
| Nathalie Tchilian | DEB |
| Paulina Cervantes | ANSES |

REFERENTIEL METHODOLOGIQUE POUR LA PRIORISATION DES MICROPOLLUANTS DES MILIEUX AQUATIQUES

Valeria DULIO, Sandrine ANDRES

RÉSUMÉ

L'action n° 1 du Plan Micropolluants 2010-2013 (Plan National contre la pollution des milieux aquatiques par les micropolluants) piloté par le Ministère de l'Ecologie a pour objectif de définir un cadre commun pour l'identification et la mise à jour des listes de substances chimiques pour lesquelles des actions de réduction, de surveillance ou d'acquisition de données scientifiques ou techniques doivent être mises en œuvre prioritairement.

C'est pour répondre à cet objectif qu'en 2010 l'INERIS et l'ONEMA ont conclu la mise en œuvre d'une action spécifique, dans le cadre de leur convention partenariale, pour constituer une structure d'expertise nationale pour la hiérarchisation des enjeux liés aux micropolluants aquatiques.

Il s'agit d'une structure pérenne, désignée «Comité Experts Priorisation» ou CEP, dont le rôle central est le développement et la maintenance à long terme d'un référentiel méthodologique pour guider l'ensemble des exercices de priorisation des micropolluants aquatiques en France.

Le CEP travaille en collaboration avec le Working Group on Prioritisation of Emerging Substances du réseau européen NORMAN (www.norman-network.net).

Ce document présente en détail les différentes étapes du référentiel méthodologique adopté par le CEP pour répondre aux objectifs énoncés. Il comprend six différents objectifs de hiérarchisation :

1. Remise à jour et anticipation des listes des substances pour les futures programmes de surveillance ;
2. Identification des substances prioritaires à inscrire dans les études prospectives;
3. Sélection des substances pour lesquelles des données d'impact, d'effets (eco)toxicologiques sont manquantes ou pour lesquelles des études complémentaires sont nécessaires ;
4. Identification des substances pour lesquelles le développement ou l'amélioration des méthodes analytiques sont prioritaires ;
5. Identification des substances très peu fréquemment recherchées dans l'environnement ET pour lesquelles les données pour estimer le danger sont insuffisantes;
6. Identification des substances pour lesquelles il existe suffisamment d'information pour décider qu'elles ne sont pas prioritaires pour la surveillance et qui pourraient être éliminées des listes existantes de substances surveillées (ou être surveillées à une fréquence réduite).

Ces objectifs correspondent aux actions prioritaires à mettre en œuvre en ligne avec les recommandations du Plan Micropolluants ainsi qu'aux manques d'information ou de connaissances identifiés à ce jour.

La procédure globale de priorisation comprend deux étapes successives. La première étape est celle qui permet d'orienter les substances candidates vers six catégories d'action, chacune correspondant à un des six objectifs de priorisation identifiés.

La deuxième étape est celle qui consiste à hiérarchiser les substances au sein de chaque catégorie d'action sur la base des critères / indicateurs identifiés pour chaque catégorie.

Ce schéma méthodologique du CEP intègre de façon explicite dans le processus de priorisation les situations dans lesquelles un critère ne peut être rempli faute d'informations suffisantes.

Mots clés (thématique et géographique) : priorisation, méthodologie, polluants chimiques, directive cadre eau, milieu aquatique, surveillance, performances analytiques, objectifs de protection environnementaux, propriétés de substances, matrices pertinentes

Framework for prioritisation of contaminants in the aquatic compartment

Valeria DULIO, Sandrine ANDRES

ABSTRACT

Action No. 1 of the 2010-2013 Micropollutants Action Plan (National Plan for Action Against Water Pollution Caused by Micropollutants) led by the Ministry of Ecology aims to define a common framework for the creation and updating of a list of chemical substances for which actions to reduce, monitor or gather scientific or technical data are to be undertaken as a matter of priority.

It was with this objective in mind that in 2010 INERIS and ONEMA agreed to instigate a specific action under their partnership agreement to create a structure of national expertise in the ranking of the risks associated with micropollutants in water.

The main role of this permanent structure, known as CEP (“Prioritisation Experts Committee”), is the development and long-term maintenance of a methodological framework to guide and harmonise the exercises for prioritisation of aquatic pollutants in France.

CEP works alongside the Working Group on Prioritisation of Emerging Substances coordinated at the European level by the NORMAN Network (www.norman-network.net).

This document sets out in detail the different stages of the methodological framework adopted by CEP in pursuit of the stated objectives.

Unlike other prioritisation methods, which aim simply to rank all candidate substances against one single prioritisation objective, this method combines the ranking process with a prior allocation of the substances into action categories, which allows substances to be managed based on the level of available information and hence, avoids the exclusion of substances for which there are limited data.

The overall prioritisation procedure is carried out in two successive stages.

In the first stage, the prioritisation methodology uses a decision tree that classifies chemicals into six categories, which match the priority actions to be taken by the research community and public authorities to fill the information or knowledge gaps so far identified, in line with the objectives of the Micropollutants Action Plan.

The second stage entails the prioritisation of the substances within each action category, on the basis of the criteria / indicators identified for each category.

KEY WORDS (thematic and geographic) : prioritisation, methodology, chemical pollutants, Water Framework Directive (WFD), water compartment, monitoring, analytical performance, environmental protection objectives, substance properties, relevant matrices

PREAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalents qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

1 CONTEXTE ET OBJECTIFS

L'action n° 1 du Plan Micropolluants 2010-2013 (Plan National contre la pollution des milieux aquatiques par les micropolluants) piloté par le MEDDE/DEB a pour objectif de définir un cadre commun pour l'identification et la mise à jour des listes de substances chimiques pour lesquelles des actions de réduction, de surveillance ou d'acquisition de données scientifiques ou techniques doivent être mises en œuvre prioritairement.

C'est pour répondre à cet objectif une structure permanente d'expertise nationale, désignée «Comité Experts Priorisation» ou CEP, a été créée en 2010 par l'INERIS et l'ONEMA dans le cadre de leur convention partenariale.

Son rôle central est le développement et la maintenance à long terme d'un référentiel méthodologique pour guider l'ensemble des exercices de priorisation des micropolluants aquatiques en France.

Selon les objectifs du Plan Micropolluants ce référentiel doit être pertinent au regard des spécificités des divers milieux aquatiques concernés (transfert des contaminants, écologie des milieux, réglementations spécifiques) tout en couvrant une gamme très large d'actions (acquisition de données de surveillance, amélioration des techniques de mesure, mise en œuvre d'objectifs de réduction, etc.).

Plus spécifiquement ce référentiel dans l'état actuel s'adresse aux eaux de surface et répond aux six objectifs suivants (mais qui pourront évoluer dans le temps):

1. Remise à jour et anticipation des listes des substances qui doivent faire partie des programmes de surveillance régulière (*Action n° 16 du Plan*). A ce titre on peut distinguer :
 - a) la sélection des substances prioritaires à suivre dans les eaux de surface au titre de *polluants spécifiques de l'état écologique*¹ de la DCE ;
 - b) la priorisation des substances dites « *pertinentes* »² à intégrer dans les listes des *substances à surveiller* en vue de la mise à jour des programmes de surveillance. L'identification de ces substances s'appuie sur les données de surveillance existantes ainsi que sur les résultats d'*études prospectives* qui sont organisés de manière régulière au niveau national (cf. campagne exceptionnelle eaux de surface et eaux souterraines en métropole et dans les DOM, 2011-2012),
2. Identification des substances prioritaires à inscrire dans les études prospectives (mentionnées au point 1b), visant à acquérir plus d'information au niveau de l'occurrence dans les milieux aquatiques de substances d'intérêt, mais actuellement recherchées de manière insuffisante et /ou non satisfaisante³ ou jamais recherchées en France ;

¹ Il s'agit de polluants « recensés » comme étant déversés en quantités significatives dans la masse d'eau » selon la définition fournie dans l'annexe V, §1.1 de la DCE. Il faut également ajouter que la notion de « polluants spécifiques de l'état écologique » concerne des substances ayant préalablement fait l'objet d'une surveillance suffisante (i.e. les « substances de l'état écologique » doivent être identifiées à partir des substances régulièrement surveillées dans les réseaux RCS / RCO).

² Il s'agit des *substances pertinentes à surveiller* en France en dehors de l'aspect rapportage de la DCE.

³ Substances recherchées de manière insatisfaisante en terme des performances analytiques et / ou de la pertinence des matrices mesurées.

3. Priorisation des substances pour lesquelles des données d'impact, d'effets (eco)toxicologiques sont manquantes ou pour lesquelles des études complémentaires sont nécessaires ;
4. Identification des substances pour lesquelles le développement ou l'amélioration des méthodes analytiques sont prioritaires ;
5. Identification des substances très peu fréquemment recherchées dans l'environnement ET pour lesquelles les données pour estimer le danger sont insuffisantes (peut être vu comme un sous objectif de la catégorie 2 ci-dessus);
6. Identification des substances pour lesquelles il existe suffisamment d'information pour décider qu'elles ne sont pas prioritaires pour la surveillance et qui pourraient être éliminées des listes existantes de substances surveillées (ou être surveillées à une fréquence réduite).

De manière générale il est important de souligner que ce référentiel méthodologique doit intégrer de façon explicite dans le processus de priorisation les situations dans lesquelles un critère ne peut être rempli faute d'informations suffisantes. Cette situation ne doit pas systématiquement conduire à une exclusion de la substance, et dans certains cas peut même favoriser sa sélection.

Dans ce but, un lien privilégié est assuré entre le CEP et le réseau NORMAN (www.norman-network.net) qui a parmi ses activités un groupe de travail dédié à la priorisation des substances dites « émergentes » et qui traite de la problématique des « carences » d'information inhérentes à ces substances émergentes.

Ce document présente en détail le référentiel méthodologique adopté par le CEP pour répondre aux objectifs énoncés.

2 ÉVALUATION DES PRINCIPAUX OUTILS DE PRIORISATION EXISTANTS

Un travail de recensement des plus récentes démarches de priorisation de substances, susceptibles d'apporter des éléments d'intérêt au regard des objectifs de priorisation identifiés, a été conduit par l'INERIS comme étape préliminaire avant de bâtir le référentiel de priorisation.

Pour ce travail de recensement, l'INERIS a pu bénéficier de l'étude conduite à l'occasion de la préparation du colloque NORMAN - JRC «River Basin Specific Pollutants : identification and monitoring» (Stresa, Italie - juin 2010) dans lequel l'INERIS a été impliqué comme coorganisateur au côté du JRC. A l'occasion de ce colloque, un questionnaire avait été envoyé à tous les représentants des états membres pour avoir des informations sur la procédure employée dans chaque pays pour l'identification (et la priorisation) des « polluants spécifiques de l'état écologique » (« River Basin Specific Pollutants »).

Les méthodes de priorisation sélectionnées comme méthodes d'intérêt pour le milieu aquatique sont listées en annexe 1.

Suite à cette analyse de l'état de l'art le CEP a exprimé son intérêt pour adopter l'approche proposée par NORMAN comme base de travail pour le référentiel de priorisation à développer au niveau national.

En effet, par rapport aux autres méthodes de priorisation qui visent seulement une hiérarchisation de toutes les substances candidates, la méthode de NORMAN couple l'exercice de hiérarchisation avec une distribution au préalable des substances candidates en catégories d'action, ce qui permet de gérer des niveaux d'information différents sur les substances et de ne pas laisser de côté les substances pauvres en données.

Cette caractéristique a été déterminante dans la décision du CEP car la prise en compte de substances pour lesquelles on constate des carences au niveau de connaissance de leurs propriétés, effets, occurrence et comportement dans l'environnement est un aspect central pour l'établissement de ce référentiel de priorisation selon les objectifs définis dans le Plan National Micropolluants.

3 REFERENTIEL DE PRIORISATION

3.1 CADRE DU REFERENTIEL

La première étape de tout exercice de priorisation consiste à définir la liste des substances à considérer (ou « liste de départ »). Les critères pour la définition de la liste de départ sont présentés dans la Section 4.

Ensuite, pour ce qui concerne la démarche de priorisation en elle-même, comme expliqué dans la Section 1, ce référentiel intègre les situations où les informations sur une molécule ne sont que partielles (manque de connaissances sur les niveaux d'occurrence, les effets sur les écosystèmes, etc.) en recommandant des actions pour combler les manques identifiés.

Pour cette raison le schéma (Figure 1) préconisé par le CEP pour la priorisation des substances chimiques dans le milieu aquatique est conçu comme un exercice en deux étapes successives :

La première étape - dite de catégorisation (cf. Section 5) - est celle qui permet de trier les substances de la liste de départ en catégories d'action selon les manques de connaissances actuelles et les objectifs de priorisation identifiés (cf. objectifs identifiés dans la Section 1 et leur déclinaison dans le Tableau 1).

La deuxième étape - dite de hiérarchisation (cf. Section 7) - consiste à hiérarchiser les substances au sein de chaque catégorie d'action sur la base de critères et indicateurs spécifiques pour chaque objectif de priorisation.

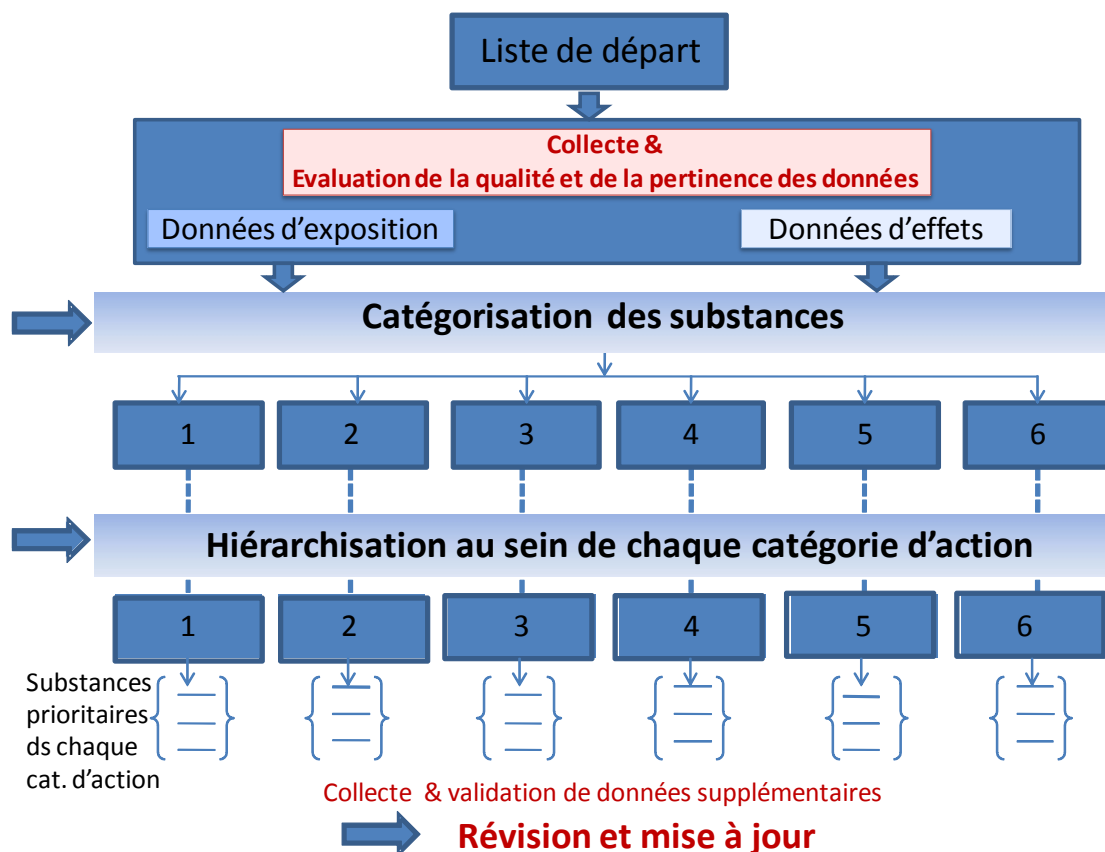


Figure 1 : Démarche du référentiel de catégorisation et de priorisation des substances chimiques adopté par le CEP

3.2 CATEGORIES D’ACTION

Pour la phase de catégorisation, six catégories d’action sont identifiées (voir Tableau 1), correspondant aux objectifs de priorisation énoncés dans la Section 1. Il s’agit des actions identifiées en matière de recherche et d’acquisition de connaissance ou en matière d’application de mesures de surveillance et de gestion.

Tableau 1 : Liste des catégories d’action identifiées sur la base des manques d’information / connaissances et des actions à mettre en œuvre

| Catégorie | Situation actuelle | Actions à mettre en œuvre |
|-----------|---|--|
| Cat. 1 | Substances pour lesquelles les niveaux d’exposition et les risques associés sont suffisamment connus | Substances candidates aux programmes de surveillance réguliers, ou plus spécifiquement, au statut de «substances pertinentes à surveiller dans le milieu aquatique» ou de «polluants spécifiques de l’état écologique» |
| Cat. 2 | Substances pour lesquelles les niveaux d’occurrence dans le milieu aquatique ne sont pas suffisamment connus | Campagnes de mesure dédiées à l’acquisition d’information sur les niveaux d’occurrence dans le milieu aquatique |
| Cat. 3 | Substances pour lesquelles manquent les données pour une évaluation rigoureuse des effets écotoxiques | Développement / amélioration de tests d’écotoxicité |
| Cat. 4 | Substances pour lesquelles les performances analytiques ne sont pas compatibles avec les objectifs de protection des écosystèmes | Développement / amélioration des méthodes analytiques plus performantes (capables de mesurer de valeurs de concentration plus faibles dans les milieux aquatiques) |
| Cat. 5 | Substances pour lesquelles manquent à la fois des données sur les niveaux d’occurrence et des données expérimentales sur les effets écotoxiques | Développement à la fois de tests d’écotoxicité et de méthodes analytiques Campagnes de mesure dédiées à l’acquisition d’information sur les niveaux d’occurrence dans le milieu aquatique |
| Cat. 6 | Substances pour lesquelles il n’y a pas des risques identifiés, au vu des résultats des programmes de surveillance et des tests d’écotoxicité | Substances qui pourraient être exclues des listes des programmes de surveillance régulière (ou recherchées avec une fréquence réduite) dans le milieu aquatique |

3.3 HIERARCHISATION DES SUBSTANCES AU SEIN DE CHAQUE CATEGORIES D’ACTION

Le nombre de substances incluses dans une catégorie peut être important et il y a donc lieu de prioriser les substances pour lesquelles une action spécifique est requise en priorité.

De façon générale, une approche fondée sur deux composantes principales, les «propriétés intrinsèques» de la substance et son « risque de dépassement » des seuils d’effets, est adoptée.

Cependant, l’algorithme de hiérarchisation à l’intérieur de chaque catégorie d’action est établi de manière spécifique en fonction de la catégorie d’action et de l’objectif associé.

Ainsi par exemple, pour les substances pour lesquelles les connaissances sur les niveaux d’occurrence sont insuffisantes, on privilégiera, pour une action de génération/acquisition de données, les plus dangereuses du point de vue de leurs propriétés intrinsèques. De la même façon, la mise en priorité des substances pour une action de gestion privilégiera celles pour lesquelles le dépassement des seuils d’effets est le plus important.

3.4 REVISION ET MISE A JOUR DES LISTES

Il est important de souligner que le processus de catégorisation et priorisation des substances est par définition un processus itératif (cf. arbre décisionnel Figure 3) qui prévoit une révision périodique des listes au fur et à mesure que de nouvelles informations / données de meilleure qualité sont générées ou que les mesures de gestion et / ou d'acquisition des données montrent des résultats.

4 DEFINITION DE LA LISTE DE SUBSTANCES DE DEPART - « UNIVERS DES SUBSTANCES »

4.1 IDENTIFICATION DES SUBSTANCES A INCLURE DANS L'UNIVERS DE DEPART

La liste de départ doit être suffisamment large pour éviter « d'oublier » des substances potentiellement pertinentes au regard des objectifs de l'exercice de priorisation.

Le référentiel en lui-même n'est pas contraignant dans la mesure où il est possible d'y entrer n'importe quelle substance, sous réserve que son identité chimique soit raisonnablement précisée.

En pratique, seules les molécules individuelles, et non les familles de molécules sont renseignées dans la liste de départ (les « mélanges commerciaux » devraient être exclus de la liste de départ).

Par ailleurs, il est utile de renseigner lors de l'établissement de cette liste de départ les identifiants suivants pour chaque molécule:

- Numéro CAS
- Code SANDRE
- Nom IUPAC / CAS / SANDRE
- Nom vernaculaire
- Code SMILE⁴

Il doit être souligné que chacun de ces identifiants n'est pas toujours disponible pour une molécule donnée ou bien qu'au contraire une molécule peut être couverte par plusieurs identifiants (par exemple, 2 numéros CAS). Inversement, certains identifiants peuvent couvrir plusieurs molécules, espèces ou forme chimiques ce qui peut être à l'origine d'une catégorisation erronée.

Il convient donc d'être vigilant lors de l'établissement de l'univers de départ et de préciser dans certains cas (outre les identifiants proposés ci-dessus) :

- La forme chimique à considérer : cela s'applique en particulier à toutes les substances ionisables
- La famille de référence (ex. « PCBs », « organo-étains », etc.).

4.2 SOURCE DE SUBSTANCES D'INTERET

On compte aujourd'hui plus de 65 millions de composés chimiques connus et enregistrés avec un N° CAS et plus de 30 000 substances chimiques sur le marché, produites en quantité > 1 tonne/an.

Il est irréaliste d'imaginer de traiter « l'Univers des substances » pour construire la liste de substances d'intérêt pour l'exercice de priorisation. Il faut donc partir d'une « liste gérable / réaliste »

⁴ Le Simplified Molecular Input Line Entry Specification ou SMILES est un langage symbolique de description de la structure des molécules chimiques sous forme de courtes chaînes de caractères ASCII.

Le recensement des plus récentes démarches de priorisation des substances (cf. par ex. INERIS-IOW 2009, COMMPS 1999, UK Environment Agency 2007) a montré que la démarche typiquement utilisée pour établir une liste de départ (« univers de substances ») est celle de partir d'une compilation de listes existantes (listes de substances réglementaires, listes issues des conventions, de résultats des projets de recherche, etc.) auxquelles peuvent s'ajouter des substances jugées pertinentes à dire d'expert.

C'est donc une compilation de listes existantes et de substances identifiées à dire d'expert qui est préconisée par ce référentiel. Cette compilation pourra inclure :

- Les listes réglementaires au niveau européen et national, pertinentes pour le territoire français et le milieu aquatique ;
- Les listes issues des conventions internationales d'intérêt pour le milieu aquatique (ex. OSPAR pour le milieu marin, convention de Stockholm pour les POPs, etc.) ;
- Les substances identifiées via l'analyse des pressions au niveau national ;
- Les substances listées dans les registres de production / vente des produits phytosanitaires, biocides, médicaments, etc. ;
- Les listes de molécules identifiées à partir de résultats de campagnes de mesure exploratoires ;
- Les substances émergentes identifiées par les projets de recherche au niveau national et international.

Les différentes listes citées ci-dessus ont cependant généralement été établies dans un contexte particulier et pour une utilisation différente de celle envisagée par l'exercice de priorisation.

Aussi, il est utile lors de la création de la liste de départ pour un exercice donné de préciser les règles d'inclusion. Des considérations peuvent ainsi être apportées sur la liste de départ concernant la présence sur le marché ou de possibles interdictions d'usage de certaines substances sur le territoire national, les substances historiques ou les substances industrielles utilisées exclusivement en système clos. Sur la base de ces considérations il est possible d'exclure de la liste de départ des substances qui n'auraient jamais été utilisées ou qui sont interdites d'usage sur le territoire national, exception faite pour :

- les substances qui ne sont plus utilisées (interdites) mais qui sont persistantes et devraient faire partie de la liste de départ ;
- les métabolites persistants de substances qui ne sont plus utilisées (interdites) (exemple de l'atrazine et son métabolite desethylatrazine).

Pour les substances listées dans les registres de production ou vente des produits phytosanitaires, biocides, médicaments, etc. à chaque fois que c'est possible (jugement d'expert au cas par cas) il est recommandé d'inclure la substance sous la forme sous laquelle elle est susceptible d'être présente (et donc de pouvoir être analysée) dans le milieu. En absence de cette information il est cependant préférable de conserver la substance - telle que renseignée dans les registres - dans la liste de départ.

Enfin, pour une utilisation du référentiel dans le contexte du plan « micropolluants » pour le milieu aquatique, il est recommandé que toute substance intégrée dans la liste de départ soit effectivement identifiée comme « micropolluant » pertinent pour le milieu aquatique, c'est-à-dire, un polluant présent en faible concentration dans le milieu aquatique et susceptible d'avoir un impact notable sur le fonctionnement des écosystèmes et leurs usages.

Le Tableau 2 présente des exemples de listes connues de substances (réglementaires ou issues de conventions) et les critères à l'origine de chacune de ces listes (ex. volume de production, toxicité, etc.). Tous les critères présentés dans le tableau sont pertinents pour les objectifs du présent référentiel.

Tableau 2 : Exemples de listes connues de substances (réglementaires ou issues de conventions) et critères à l'origine de chacune de ces listes

| Liste | Contexte | Type de réglementation | Tox / ecotox / POP / PBT | Effets PE | Volume | Utilisation | Interdiction |
|--|----------|------------------------|--------------------------|-----------|--------|-------------|--------------|
| Règlement 793/93 sur les substances chimiques existantes ⁵ | UE | Substances | X | | (X) | X | |
| REACH ⁶ (4000 substances) | UE | Substances | X | (X) | X | X | |
| REACH - SVHC | UE | Substances | X | (X) | X | X | (X) |
| HPVC (High Production Volume Chemicals) substances existantes (enregistrées dans EINECS et avec production > 1000 ton/a) | INT | Substances | | | X | | |
| Dir 67/464/EC (Liste I et II) | UE | Substances | X | | | X | |
| Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) | FR | Plan national | X | | | X | |
| Circulaire du 13 juillet 2006 (surveillance eaux de surface) | FR | Milieux | X | | | X | |
| Directive 2000/60/CE - Annexe X / Directive 2008/105/CE: substances prioritaires (SP) et substances dangereuses prioritaires (SDP) | UE | Milieux | X | (X) | X | X | (X) |
| Candidates DCE directive 2008/105/CE - Annexe III : substances | UE | Milieux | X | (X) | X | X | (X) |

⁵ Le règlement 793/93 sur les substances chimiques existantes procède en 4 étapes : I/ Data collection, II/ Step II - Priority setting, III/ Risk assessment, IV/ Risk reduction. Son article 8 prévoit que des listes de substances prioritaires qui nécessitent une attention immédiate en raison de leurs effets potentiels sur l'homme ou l'environnement soient établies. 4 listes ont été établies depuis 1994

⁶ Le règlement REACH 1907/2006 établit une priorité pour l'enregistrement des substances fondée sur la dangerosité des produits attendue et les quantités mises sur le marché. Ces critères conditionnent à la fois les priorités pour le dépôt des dossiers et la quantité de données à générer

| Liste | Contexte | Type de réglementation | Tox / ecotox / POP / PBT | Effets PE | Volume | Utilisation | Interdiction |
|---|----------|------------------------|--------------------------|-----------|--------|-------------|--------------|
| candidates annexe X DCE | | | | | | | |
| « Nouvelles » substances prioritaires DCE | UE | Milieux | X | (X) | X | X | (X) |
| Arrêté du 25 janvier 2010 - polluants spécifiques de l'état écologique | FR | Milieux | X | (X) | X | X | (X) |
| Liste substances PNSE2 - action 5 | FR | Plan national | X | | | | |
| Substances POP de la convention de Stockholm | INT | Substances | X | | | | |
| Substances POP du Protocole de Genève sur la pollution atmosphérique transfrontalière (LRTAP) | INT | Substances | X | | | | X |
| Convention OSPAR | INT | Substances | X | | | | |
| Liste PBT - JRC | EU | Substances | X | | | | |
| Liste PE (rapport DHI 2006 (194 substances en Cat 1)) | EU | Substances | | X | | | |
| Pesticides (substances actives notifiés - Dir 91/414/EC) ⁷ | EU | Substances | X | | | X | |
| Biocides (substances actives notifiées - Dir 98/8/EC) ⁸ | EU | Substances | X | | | X | |
| Pesticides - arrêtés - substances soumises à redevance pour pollution diffuse | FR | Substances | X | | | | |

⁷ La Directive 91/414 pour les produits phytopharmaceutiques qui établit un programme d'examen pour les substances existantes en 4 listes, la priorité étant notamment donnée aux substances les plus toxiques

⁸ La Directive 98/8 (art. 16) pour les produits biocides établit également par son règlement 2032/2003 un programme d'examen des substances actives existantes en 4 listes. Celui-ci est fondé sur la dangerosité des substances et le niveau de connaissance des différents types de produits biocides

| Liste | Contexte | Type de réglementation | Tox / ecotox / POP / PBT | Effets PE | Volume | Utilisation | Interdiction |
|---|----------|------------------------|--------------------------|-----------|--------|-------------|--------------|
| Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II - polluants avec seuil de rejet dans l'eau | FR | Milieux | X | | | X | |
| Circulaire 5 janvier 2009 (RSDE 2 ^{ème} phase ICPE) | FR | Milieux | X | | | X | |
| Circulaire DEB du 29 septembre 2010 (RSDE 2ème phase STEU) | FR | Milieux | X | | | X | |
| Liste substances émergentes identifiées par réseau NORMAN | INT | Milieux | X | X | | X | |
| Liste phytosanitaires ciblés dans la campagne de mesure eaux souterraines - FR métropole (2010-2011) | FR | Autres | (X) | (X) | X | X | X |
| Liste p. pharmaceutiques et vétérinaires ciblés dans la campagne de mesure eaux souterraines - FR métropole (2010-2011) | FR | Autres | (X) | (X) | X | X | |
| Substances identifiées suite aux résultats d'études de terrain en raison d'un impact écologique sur les écosystèmes | - | Autres | X | X | | | |
| Liste DG ENV - substances candidates pour l'exercice de priorisation au titre de l'art. 16 de la DCE | EU | Milieux | X | | | | |

4.3 MISE A JOUR REGULIERE DE LA LISTE DES SUBSTANCES A SOUMETTRE A L'EXERCICE DE PRIORISATION

Il faudra veiller à rendre possible la mise à jour régulière de la « liste de départ » à travers :

- ↳ une veille bibliographique pour identifier des nouvelles substances faisant l'objet de publications scientifiques, ou faisant l'objet de campagnes de mesure.
- ↳ une veille réglementaire pour identifier les substances d'intérêt.

5 COLLECTE DES DONNEES, EVALUATION DE LEUR QUALITE ET DE LEUR PERTINENCE

Une collecte de données (occurrence, effets, propriétés physico-chimiques, etc.) doit être conduite tout au long de l'exercice de catégorisation et de priorisation des substances de la liste de départ.

La collecte de données est un processus itératif qui doit permettre une révision des listes au fur et à mesure que des données de meilleure qualité sont disponibles.

Des questions se posent donc au niveau des données collectées, en particulier pour ce qui concerne l'évaluation :

- 1) de la qualité et
- 2) de la pertinence

des données disponibles et les règles à suivre pour leur utilisation.

Les règles générales adoptées dans ce référentiel à ce sujet sont illustrées dans les sections suivantes.

5.1 ÉVALUATION DE LA QUALITE DES DONNEES

De façon générale, compte tenu de la volonté d'identifier dès que possible les substances susceptibles de causer un risque pour l'environnement, aucune information n'est écartée *a priori*. La stratégie suivie privilégie ici le meilleur usage de toute l'information disponible avec l'objectif non pas de faire une évaluation des risques *per se*, mais d'identifier des séries de substances pour lesquelles des actions spécifiques devraient être mises en œuvre.

L'utilisation de données déjà bancarisées peut donc être privilégiée sans que la qualité de chaque donnée soit individuellement vérifiée. De plus, les données mesurées manquantes peuvent être complétées par des données modélisées.

Il est rappelé ici que le processus se veut itératif et concourir à l'amélioration des connaissances sur les substances.

Il est toutefois important de pouvoir qualifier la robustesse de la donnée pour pouvoir sélectionner, en fonction de chaque objectif de priorisation, le degré d'information suffisant sur la substance pour l'attribution à une catégorie.

La collecte et la préparation des données induit donc, en elle-même des décisions méthodologiques. Ces choix sont fonction de l'objectif de priorisation et sont illustrés dans les sections suivantes pour chaque item.

5.2 EVALUATION DE LA PERTINENCE DES DONNEES ET MATRICES ENVIRONNEMENTALES A CONSIDERER

Lors de la préparation des données pour le processus de priorisation, il est nécessaire d'évaluer la pertinence des informations disponibles pour une substance en fonction de ses propriétés physicochimiques connues.

L'objectif principal de cette étape est d'identifier le comportement environnemental d'une substance à travers des indicateurs informant sur son affinité pour les phases aqueuses ou particulaires et sa propension à s'accumuler dans les organismes vivants afin d'en déduire les matrices environnementales pertinentes pour un suivi analytique : respectivement, eau, sédiment et / ou biote.

5.2.1 IDENTIFICATION DES INDICATEURS

Les indicateurs utilisés pour vérifier la pertinence d'une substance donnée dans l'une des trois matrices environnementales (eau, sédiment, biote) sont définis à partir des propriétés physicochimiques des substances (tels que le K_{ow} , K_{oc} , l'hydrosolubilité) ainsi que les modèles de fugacité, qui permettent d'identifier pour chaque substance la ou les matrice(s) pertinente(s).

En première approche, l'utilisation d'indicateurs simples comme l'hydrosolubilité ou l'hydrophobicité permet de discriminer les substances qui possèdent plutôt une affinité pour les phases aqueuses ou particulaires. Le coefficient de partage entre l'eau et l'octanol ($\text{Log}K_{ow}$) est indicateur aussi bien d'une affinité attendue pour la phase particulaire (sédiment, matières en suspension) que pour les lipides (potentiel d'accumulation dans le biote). Aussi, le biote est considéré dans cette procédure au même titre que les sédiments, c'est-à-dire qu'on estime qu'une molécule pertinente dans les sédiments, est par défaut également pertinente dans la matrice biote.

Ces indicateurs sont souvent partiellement redondants. Cependant, afin de prendre en compte à la fois le manque de données et l'incertitude associée à certaines données, il est proposé de prendre en compte ces indicateurs simultanément lors des phases de screening. Le cas échéant, la pertinence de la matrice sera confortée par un jugement d'expert.

Le Tableau 3 présente les indicateurs sélectionnés pour évaluer la pertinence de rechercher une substance donnée dans l'une des trois matrices environnementales (eau, sédiment, biote) ainsi que les seuils à appliquer pour chaque indicateur.

Tableau 3 : Indicateurs et critères (valeurs seuil) à appliquer pour évaluer la pertinence de la substance pour le milieu aquatique

| Indicateurs | Paramètres / seuil |
|---|---|
| Modèles multimédias basés sur le principe de fugacité de (Mackay D., 1991) différents compartiments: air, eau, sol, sédiments | Condition de pertinence d'une matrice: 10% de la substance doit être présente dans la matrice |
| Coefficient de partage octanol-eau (Log K _{ow} ou Log P) | Condition de pertinence pour les matrices eau/ sed /biote LogK _{ow} ≤3: eau; 3 < LogK _{ow} ≤ 5: eau/séd; LogKow>5: sédiments |
| Coefficient d'adsorption (K _{oc}) | Condition de pertinence pour l'eau: Koc < 1000 L/kg |
| Hydrosolubilité (S) | Condition de pertinence pour l'eau: hydrosolubilité >1 mg/L |

La procédure complète pour définir la(les) matrice(s) pertinente(s) pour une molécule donnée est illustrée dans les tableaux suivants, où :

- Les trois premières colonnes indiquent les résultats obtenus pour les différents indicateurs, i.e. LogK_{ow}, modèles de fugacité, et solubilité dans l'eau (pour la matrice eau) ou Koc (pour la matrice sédiment). Il y a trois modalités «*nom de la matrice*» lorsque celle-ci est pertinente, «*not relevant*» lorsqu'elle ne l'est pas, «*not found*» lorsqu'aucune information n'a été trouvée.
- «*Conclusion*» (4^{ème} colonne) : il s'agit de la conclusion proposée pour la matrice considérée sur la base des 3 indicateurs précédents dans une approche de type «*weight of evidence*».
- «*Level of confidence*» (5^{ème} colonne): il s'agit du niveau de confiance estimé pour la «conclusion» proposée. En effet, il est fréquent de retrouver des conclusions discordantes pour les différents indicateurs considérés. Dans ce cas le résultat devrait être vérifié et est libellé comme «*to be checked*».
- «*Relevant matrix WATER / SEDIMENT*» : on peut retrouver dans cette colonne le résultat agrégé des deux précédentes :
 - o i) «*water / sediment*», quand la conclusion est la même pour tous les indicateurs considérés et le résultat est donc confirmé;
 - o ii) «*water? / sediment?*», quand la matrice peut être considérée comme pertinente, mais le résultat doit être confirmé ;
 - o iii) «*not relevant*», quand il est confirmé que la matrice en question n'est pas pertinente et
 - o iv) «*not found*»: quand l'information n'a pas été trouvée et on ne peut pas conclure par rapport à la pertinence de la matrice considérée.

Tableau 4 : Règles pour vérifier si l'eau peut être considérée comme matrice pertinente pour une molécule donnée

| LogKow / water | Fugacité / water | Solubility / water | Conclusion | Level of confidence | Relevant matrix WATER |
|----------------|------------------|--------------------|--------------|---------------------|-----------------------|
| Water | water | water | water | confirmed | water |
| | | not relevant | water | confirmed | water |
| | not applicable | water | water | to be checked | water ? |
| | | not relevant | water | to be checked | water ? |
| | not found | water | water | to be checked | water ? |
| | | not relevant | water | to be checked | water ? |
| | | not found | water | to be checked | water ? |
| Not relevant | water | not relevant | water | to be checked | water ? |
| | not relevant | not relevant | not relevant | confirmed | not relevant |
| | not applicable | not relevant | not relevant | to be checked | not relevant |
| | not found | water | water | to be checked | water ? |
| | | not relevant | not relevant | to be checked | not relevant |
| | | not found | not relevant | to be checked | not relevant |
| Not found | not found | not found | confirmed | not found | |

Tableau 5 : Règles pour vérifier si le sédiment peut être considéré comme matrice pertinente pour une molécule donnée

| LogKow / sediment | Fugacity / sediment | KoC / sediment | Conclusion | Level of confidence | Relevant Matrix SEDIMENT |
|-------------------|---------------------|----------------|--------------|---------------------|--------------------------|
| Sediment | sediment | sediment | sediment | confirmed | sediment |
| | | not relevant | sediment | confirmed | sediment |
| | not relevant | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | sediment | to be checked | sediment ? |
| | not applicable | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not found | sediment | to be checked | sediment ? |
| Not relevant | sediment | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | sediment | to be checked | sediment ? |
| | not relevant | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | not relevant | confirmed | not relevant |
| | not applicable | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | not relevant | to be checked | not relevant |
| not found | | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| Not found | not found | sediment | sediment | to be checked | sediment ? |
| | | not relevant | not relevant | to be checked | not relevant |
| | | not found | not found | confirmed | not found |

5.2.2 DISPONIBILITE ET QUALITE DES DONNEES

Les principales sources de données aujourd'hui disponibles pour renseigner les indicateurs sélectionnés sont listées dans le Tableau 6. Cependant, ce tableau n'est pas exhaustif et peut être complété par d'autres sources.

Tableau 6 : Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer la pertinence de la substance pour le milieu aquatique

| Indicateurs | Sources | Données d'entrée |
|---|---|--|
| Modèles multimédias | ex. modèles basés sur le principe de fugacité de (Mackay D., 1991) pour les différents compartiments: air, eau, sol, sédiments EPI Suite™ (US EPA, 2008, V 4.0) | CAS N° les autres paramètres sont déjà proposés par défaut par le logiciel (et ils peuvent être modifiés): S DT50 (émission) Koc |
| Coefficient de partage octanol-eau (Log K_{ow} ou Log P) | (Portail Substances, INERIS) (PPDB, Hertfordshire University) (SIRIS pesticides, INERIS) EPI Suite™ (US EPA, 2008, V 4.0) | CAS N° ou code SMILE |
| Coefficient d'adsorption (K_{oc}) | (Portail Substances, INERIS) (PPDB, Hertfordshire University) (SIRIS pesticides, INERIS) EPI Suite™ (US EPA, 2008, V 4.0) | CAS N° ou code SMILE |
| Hydrosolubilité (S) à partir des sources citées si dessus | (Portail Substances, INERIS) (PPDB, Hertfordshire University) (SIRIS pesticides, INERIS) EPI Suite™ (US EPA, 2007) | CAS N° ou code SMILE |

Qualité des données :

Les données collectées consistent à la fois en des données mesurées et en des données modélisées (les propriétés sont estimées à partir de la structure moléculaire de la substance, par exemple - QSAR). Ces données ont pu faire l'objet d'une évaluation pour leur qualité mais ce n'est pas toujours le cas.

Autant que possible les données mesurées et validées doivent être privilégiées aux données dont la validité n'est pas connue ou aux données modélisées.

En l'absence de données validées il est considéré comme acceptable de prendre la donnée pire-cas (maximum ou minimum selon le critère).

Applicabilité des critères :

Plusieurs points de vigilance ont été identifiés :

- Les indicateurs sélectionnés (modèles de fugacité, $\text{Log}K_{ow}$, K_{oc}) ne sont valables que pour des substances organiques. Les formes minérales nécessitent donc une attention particulière (jugement d'experts).
- Pour beaucoup de substances nous n'avons pas des données expérimentales disponibles, notamment pour les coefficients de distribution (K_{oc} , K_{ow} , etc.). Les valeurs sont donc par défaut estimées par les modèles en utilisant les QSAR. Cependant, il est à souligner que :
 - o Les modèles QSAR ne s'appliquent pas aux formes métalliques
 - o Le domaine d'applicabilité des modèles QSAR devrait être vérifié. Cette vérification nécessite un jugement d'expert qui est difficile à mettre en œuvre sur un grand nombre de substances.
- Lors de l'utilisation de ces critères, certaines réactions environnementales ne sont pas prises en compte : il s'agit notamment des réactions de dégradation abiotique (hydrolyse, photolyse) ou biotique ainsi que pour certaines substances ionisables du comportement en fonction, par exemple, du pH. Il convient donc d'appliquer un jugement d'expert afin de déterminer d'une part sur quelle forme chimique la propriété collectée a été déterminée, et d'autre part pour quelle forme chimique, en cohérence avec la priorisation et la mesure environnementale, elle doit être déterminée.
- Le comportement de certaines molécules (par exemple les surfactants) peut être mal évalué par certains indicateurs.
- Les modèles de fugacité prennent en compte la dégradation de la substance et renvoient une information intégrant les diverses propriétés physicochimiques. A ce titre, ils constituent néanmoins la meilleure estimation que nous pouvons avoir, facilement disponible. Toutefois, il existe une incertitude intrinsèquement associée à l'intégration des données dont il faut tenir compte. De plus, l'utilisation de données modélisées (QSAR) comme données d'entrée pour les modèles peut conduire à une propagation importante de l'incertitude.

Comme mentionné ci-dessus, la prise en compte simultanée de ces critères partiellement redondants et l'utilisation d'une approche pire-cas peuvent dans certains cas permettre de contrebalancer les incertitudes. Le cas échéant, la pertinence de la matrice doit être confortée par un jugement d'expert.

6 CATEGORISATION DES SUBSTANCES

6.1 CRITERES ET INDICATEURS POUR LA CATEGORISATION DES SUBSTANCES

La distribution des substances de la liste de départ dans les catégories d'action identifiées est effectuée sur la base des critères décrits dans les sections suivantes. Il s'agit d'évaluer pour chaque substance:

- le niveau d'information disponible sur l'exposition des milieux,
- le niveau d'information disponible sur les effets potentiels,
- le risque possible de dépassement des valeurs seuil de protection environnementale (cat1, cat. 6).

6.1.1 ÉVALUATION DU NIVEAU D'INFORMATION DISPONIBLE SUR L'EXPOSITION DES MILIEUX

Il s'agit ici d'évaluer si les données d'occurrence disponibles pour une substance donnée sont suffisantes pour estimer son niveau d'exposition dans la(les) matrice(s) reconnues comme pertinentes pour cette substance.

Cette évaluation est effectuée sur la base des critères suivants :

- Disponibilité de données d'occurrence mesurées dans la(les) matrice(s) reconnues comme pertinentes pour la substance en question (selon la méthodologie déjà exposée dans la Section 5.2)
- Degré / intensité de recherche de la substance et fréquence de quantification dans les milieux aquatiques dans la (les) matrice(s) pertinente(s) (Section 6.1.1.1);
- Adéquation des données de mesure disponibles pour la substance en question par rapport à l'objectif d'évaluation de son niveau d'exposition (i.e. adéquation entre les performances analytiques des méthodes disponibles et les valeurs seuil de protection environnementale) (Section 6.1.1.2).

6.1.1.1 Degré / intensité de recherche et fréquence de quantification de la substance dans les milieux aquatiques dans la (les) matrice(s) pertinente(s)

6.1.1.1.1 Identification des indicateurs

Les indicateurs utilisés pour évaluer l'intensité de recherche de la substance et son niveau de quantification dans les milieux aquatiques sont :

- Le pourcentage de *bassins* avec des analyses disponibles dans la (les) matrice(s) pertinente(s) ;
- Le pourcentage de *stations* avec des analyses disponibles dans la (les) matrice(s) pertinente(s) ;
- La fréquence de *quantification* dans la (les) matrice(s) pertinente(s).

Les indicateurs, les données d'entrée et les critères (valeurs seuil) à appliquer sont exposés dans le Tableau 7.

Tableau 7: Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer l'intensité de recherche de la substance dans les milieux aquatiques

| Indicateurs | Données d'entrée | Paramètres / seuil |
|---|--|---|
| <p>% de bassins avec analyses dans la matrice pertinente</p> <p>% de stations avec analyses dans la matrice pertinente</p> <p>Fréquence de quantification (i.e. Nb analyses >LOQ/ Nb total analyses) dans la matrice pertinente</p> | <ul style="list-style-type: none"> - Bases de données des Agences de l'Eau pour les eaux de surface (ADES, Eaufrance) pour les eaux souterraines - (Quadriga 2, IFREMER) pour les eaux marines - Données brutes issues de projets de recherche, campagnes exploratoires, etc. | <p>Les valeurs seuil pour identifier une substance comme «suffisamment recherchée » et comme «suffisamment quantifiée» peuvent être définies de façon empirique sur la base de l'information disponible dans les bases des données⁹.</p> |

6.1.1.1.2 Disponibilité et accessibilité des données

Les données d'occurrence pour les substances de la liste de départ seront en premier lieu celles qui sont fournies par les agences de l'eau (disponibles dans des bases de données publiques). Cependant ces données concernent presque essentiellement des produits phytosanitaires et les substances dites pertinentes (principalement des composés chimiques à usage industriel). Il manque totalement de l'information bancarisée (données brutes exploitables) et facilement accessible sur les substances dites émergentes.

Des campagnes de mesures et de nombreux projets de recherche ont été effectuées pour collecter des données sur quelques familles de substances émergentes, mais les données issues de ces projets ne sont en général pas disponibles sous forme exploitable (i.e. données brutes bancarisées).

Pour ces substances moins recherchées, ou jamais recherchées dans les programmes de surveillance réguliers, la base de données EMPODAT (EMPODAT, NORMAN) développée par le réseau européen NORMAN, est identifiée par le CEP comme une source importante de données facilement exploitables via des requêtes automatiques et il serait recommandé d'alimenter cette base de données internationale avec tout type de résultats de projets ou d'études exploratoires de manière à faciliter à terme les futures exercice de priorisation.

6.1.1.2 Adéquation des données de mesure pour l'évaluation du niveau d'exposition par rapport aux objectifs de protection environnementaux

6.1.1.2.1 Identification des indicateurs

Il s'agit de vérifier si la qualité des données de mesure disponibles pour la substance est suffisante pour permettre une évaluation de son niveau d'exposition dans le milieu aquatique. Si la substance n'est pas quantifiée et la valeur de la Limite de Quantification (LOQ) associée est supérieure à la concentration prédite sans effet (PNEC), il n'est pas possible d'exclure la possibilité que la substance soit présente dans le milieu aquatique à des doses suffisantes pour entraîner un effet.

⁹ Dans le cadre de l'exercice de priorisation effectué en 2012 pour la sélection des substances candidates au statut de « polluants spécifiques de l'état écologique », une substance est définie comme « suffisamment recherchée et quantifiée dans la matrice pertinente » si :

- elle est recherchée sur > 10% des stations (dans le bassin / DOM concerné)
- ET avec une fréquence de quantification > 15% sur le total d'analyses disponibles

Les indicateurs utilisés à ce propos sont :

- le ratio entre les valeurs de LOQ_{min} et LOQ_{max} associées aux données bancarisées disponibles pour la substance en question et la valeur de la PNEC (LOQ_{min} base de données et / ou LOQ_{max} base de données < PNEC ?),
- le ratio entre les valeurs de LOQ_{min} associées aux méthodes analytiques disponibles pour la substance en question dans la littérature scientifique et la valeur de la PNEC (LOQ_{min} biblio < PNEC ?).

Le premier indicateur est utilisé pour vérifier si les données non quantifiées (i.e. < LOQ) disponibles pour une substance donnée sont suffisantes pour conclure sur le niveau d'exposition pour cette substance.

Le deuxième indicateur est utilisé pour vérifier la faisabilité analytique pour une substance donnée (i.e. la disponibilité de méthodes qui permettent de quantifier la molécule à un niveau de concentration inférieure (ou égale) à la valeur de la PNEC).

Les indicateurs, les données d'entrée et les critères (valeurs seuil) à appliquer pour évaluer l'adéquation entre la performance des méthodes analytiques disponibles et le niveau de concentration prédite sans effets sont résumés dans le Tableau 8.

Tableau 8 : Indicateurs, données d'entrée et valeurs seuil à appliquer pour évaluer l'adéquation entre la performance des méthodes analytiques disponibles et le niveau de concentration sans effet sur l'homme et les écosystèmes

| Indicateur | Données d'entrée | Paramètres / seuil |
|--------------|--|---|
| LOQ < PNEC ? | <p>$LOQ_{base\ de\ données}$:</p> <p>LOQ_{min} / max à partir des données existantes (données brutes bancarisées)</p> <p>$LOQ_{bibliographie}$:</p> <p>LOQ_{min} trouvées dans la littérature scientifique pour la mesure de la substance en question</p> <p>PNEC:</p> <p>Selon la définition donnée dans la Section 6.1.3.2</p> | <p>La condition pour que les analyses non quantifiées disponibles dans la base de données puissent être considérées valides et exploitables est que la valeur Max de la LOQ (LOQ_{max}) associée aux données bancarisées soit inférieure à la « PNEC »</p> |

6.1.1.2.2 Disponibilité et qualité des données

Pour ce qui concerne les données d'effets disponibles et les aspects qualité à prendre en considération pour la définition des valeurs seuil de référence (PNECs), il faudra faire référence à la Section 6.1.3.2.

Pour ce qui concerne les limites de quantification, les $LOQ_{bases\ de\ données}$ ¹⁰ sont les limites de quantification associées aux données de mesure dans les bases de données disponibles, notamment les bases de données de surveillance des Agences de l'Eau, mais aussi les autres sources de données bancarisées mises à disposition pour la mise en œuvre du référentiel de priorisation.

¹⁰ Une limite de quantification (LOQ) représente la plus petite concentration validée qui peut être quantifiée et reportée par la méthode analytique de contrôle du ou des composés étudiés.

Les LOQ bibliographie sont les limites de quantification dérivées à partir de recherches bibliographiques. Ces informations peuvent être obtenues en utilisant les moteurs de recherches de publication scientifique de type « ISI web of knowledge » ou en consultant directement les journaux scientifiques appropriés de type « Journal of chromatography A » ou « Environmental Science & Technologies ».

La recherche peut être effectuée en indiquant le nom de la substance considérée associée aux mots « analysis » et « water », « sediment », « biota » ou « fish » selon la matrice considérée. Avec la base ISI, la recherche est effectuée dans le titre mais également dans le corps des textes ce qui garantit l'exhaustivité de ce protocole.

La liste des publications obtenues sont ensuite considérées suivant leur titre et éventuellement leur abstract. Les publications retenues sont ensuite consultées individuellement afin de vérifier :

- Si des valeurs de LOQ ont été déterminées
- Si les valeurs de LOQ correspondent aux critères fixés (validation en matrice par exemple)
- Quel type de matrice/échantillon a été analysé (eaux filtrées par exemple)

Pour certaines substances, plusieurs valeurs de LOQ provenant de différentes publications sont disponibles. Dans ces circonstances, les valeurs de LOQ les plus basses sont retenues pour définir la valeur de LOQ bibliographie à utiliser comme valeur de référence.

Dans certains cas, si plusieurs valeurs de LOQ sont disponibles, les moyens analytiques mis en œuvre peuvent être pris en considération pour choisir la valeur de référence. Ainsi les résultats obtenus avec des techniques répandues (et commercialement disponibles) sont privilégiées aux techniques moins accessibles (par exemple : technique de pré-concentration d'échantillon avec fibre SPME spécialement fabriquée pour une application).

6.1.2 ÉVALUATION DU NIVEAU D'INFORMATION DISPONIBLE SUR LES EFFETS

6.1.2.1 Identification des indicateurs

Dans le contexte de la Directive Cadre sur l'Eau, les objectifs de protection couvrent à la fois la santé humaine et la protection des écosystèmes. Toutefois, le Guide EQS EU (EU Commission, 2011) précise que si pour toutes les substances une norme de protection pour les organismes aquatiques doit être déterminée, les normes pour d'autres objectifs de protection ne seront déterminées que pour certaines substances en fonction de leurs propriétés (bioaccumulation notamment).

L'objectif est donc de vérifier *a minima* si les données d'écotoxicité disponibles sont suffisantes pour calculer une PNEC (« Concentration Prédite Sans Effet ») pour protéger le milieu aquatique. Cette condition est considérée respectée si au moins une donnée de toxicité à court terme (EC50 ou LC50) est disponible pour chacun des trois niveaux trophiques du milieu aquatique.

Le Tableau 9 présente les indicateurs et les critères à appliquer pour évaluer la disponibilité de données de danger.

Lorsque la norme de qualité environnementale (ou la valeur guide environnementale) est disponible, la condition est automatiquement respectée : en effet, une norme de qualité environnementale couvre un spectre plus large d'objectifs de protection et elle est donc plus protectrice.

Tableau 9 : Indicateurs et critères à appliquer pour évaluer la disponibilité de données expérimentales de danger

| Indicateur | Critères / seuil |
|--|--|
| NQE PNECeau PNECsed PNECbiota | Pour qu'on puisse conclure que les données (eco)tox disponibles sont suffisantes pour une substance données il faut qu'au moins trois tests de toxicité aigue soient disponibles, un pour chaque niveau trophique du milieu aquatique. |

6.1.2.2 Disponibilité et qualité des données

L'indicateur retenu est la PNEC ou la NQE qui retranscrit à la fois la complétude et la robustesse du jeu de données écotoxicologiques. Des sources de données pour cet indicateur sont données dans le Tableau 10.

Cet indicateur n'est toutefois pas disponible pour la majorité des substances chimiques et de façon alternative, des valeurs d'EC50 ou LC50 pour trois niveaux trophiques peuvent être collectées.

Tableau 10 : Paramètres, sources et données d'entrée pour la détermination d'une PNEC

| Paramètre | Sources | Données d'entrée |
|--|---|--|
| NQE | Textes réglementaires | CAS N° Nom |
| VGE (valeurs guide environnementales) | (Portail Substances, INERIS) | CAS N° Nom <i>Ces valeurs sont construites comme des NQE mais ne sont pas réglementaires.</i> |
| PNEC | (Portail Substances, INERIS) Agritox, pesticides (ANSES) Autres bases de données | CAS N° Nom |
| EC ₅₀ / LC ₅₀ NOEC / EC ₁₀ | (Portail Substances, INERIS) Agritox, pesticides (ANSES) Autres bases de données Littérature | CAS N° Nom <i>Données (eco)tox déjà disponibles de toxicité aiguë et chronique (algues et plantes, micro-organismes, verres de terre, crustacés, insectes, poissons, oiseaux, mammifères).</i> |

6.1.3 IDENTIFICATION D'UN RISQUE POTENTIEL

Pour permettre de répondre aux critères de la Cat. 1 : « Substances pour lesquelles les niveaux d'exposition et les risques associées sont suffisamment connus » ou de la Cat. 6 « Substances pour lesquelles il n'y a pas des risques identifiés, au vu des résultats des programmes de surveillance et des tests d'écotoxicité » il est proposé de s'appuyer sur le paradigme classique d'évaluation des

risques, selon lequel un risque peut être exprimé par la comparaison entre une concentration dans l'environnement et une concentration prédite sans effets sur les écosystèmes et sur l'homme (PNEC). Lorsque les concentrations environnementales dépassent les concentrations pour lesquelles aucun effet n'est attendu, alors un risque pour l'environnement ou pour l'homme peut être identifié.

Il est rappelé ici que le référentiel de priorisation du CEP n'a pas pour objectif de faire une évaluation du risque réglementaire ou pré-réglementaire. Il s'agit plutôt de catégoriser les substances par rapport à des actions à mettre en œuvre, soit en fonction des risques identifiés, soit selon les manques de connaissances constatées.

L'indicateur utilisé pour l'identification ou non d'un risque potentiel de dépassement de la « PNEC », selon une logique de pire cas, est représenté par l'équation (1):

$$(1) \text{ MEC95} / \text{PNEC}$$

Les définitions de ces deux termes sont exposées ci-dessous.

6.1.3.1 MEC95

6.1.3.1.1 Identification des indicateurs

Les termes utilisés dans ce référentiel pour exprimer le niveau d'exposition pour une substance donnée sont:

- MEC: concentration environnementale mesurée pour une molécule donnée ;
- $\text{MEC}_{\text{max_site}}$: concentration environnementale mesurée maximale observée par site, pour une molécule donnée ;
- MEC95: 95^{ème} percentile des toutes les $\text{MEC}_{\text{max_site}}$ pour une molécule donnée¹¹.

6.1.3.1.2 Disponibilité et qualité des données

Les données utilisées dans cette phase du processus de catégorisation sont les données disponibles dans des bases de données des agences de l'eau ou des données issues de projets de recherche, campagnes exploratoires, etc.

Les données doivent être disponibles sous forme de données brutes pour permettre le calcul de ces indicateurs.

Il faut également rappeler que ce sont les valeurs de $\text{MEC}_{\text{max_site}}$ et de MEC95 obtenues à partir des données de surveillance plus récentes (six dernières années, selon les cycles de la DCE) qui devraient être utilisées dans la phase de catégorisation pour le calcul de MEC_{site} et MEC95 car l'identification d'un risque potentiel doit se baser sur des données récentes.

Pour ce qui concerne la qualité des données, il faut préciser que à ce stade de l'exercice de priorisation il n'est pas possible de vérifier la qualité de chaque donnée individuellement. Il est

¹¹ Il serait souhaitable de disposer d'au moins 20 sites avec des analyses pour permettre le calcul de la MEC95.

donné pour acquis que les données bancarisées ont été validées au préalable par les organismes responsables de la collecte de ces données avant la bancarisation.

L'utilisation des valeurs maximales de concentration pour l'évaluation de l'exposition à la station, par rapport à la moyenne, ainsi que le choix du 95^{ème} percentile des valeurs maximales pour chaque station, par rapport au 90^{ème} percentile, est recommandée ici pour les raisons suivantes :

- Elle permet d'éviter le traitement de données non quantifiées (i.e. <LOQ) ;
- Elle permet de définir une situation de « pire cas », ce qui est acceptable dans une logique de catégorisation des substances par rapport à des mesures à mettre en œuvre. En effet, il s'agit à ce stade d'éviter que la substance soit classée par « erreur » comme (« substances non prioritaires pour la surveillance » (catégorie 6 dans le Tableau 1). Ensuite dans la phase de priorisation il sera possible de recalculer le niveau de priorité d'une substance sur la base des autres indicateurs.

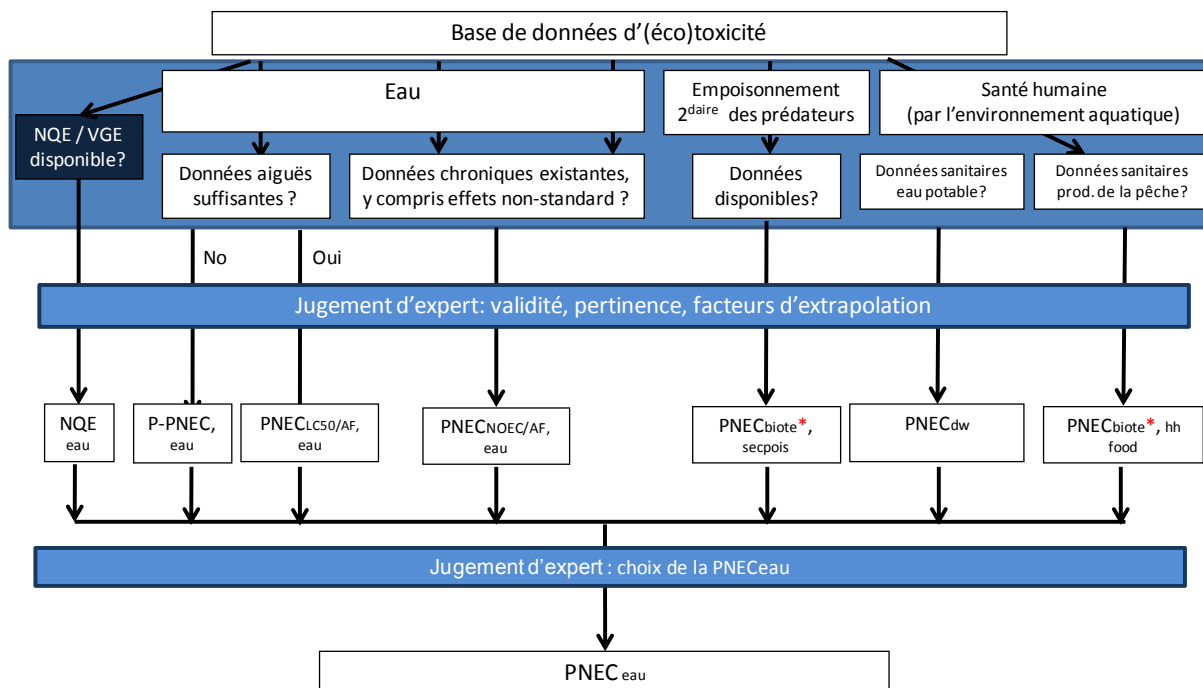
6.1.3.2 PNEC

6.1.3.2.1 Identification des indicateurs

La procédure préconisée dans ce référentiel pour dériver une valeur seuil de référence pour chacune des substances de la liste de départ est de prendre la valeur la plus faible, entre les valeurs suivantes:

- les normes de qualité environnementales (NQE) éventuellement déjà disponibles au niveau d'un ou de plusieurs états membres ;
- $PNEC_{EC50/AF}$ définie à partir de tests aigus (Lowest E(L)C50 /1000, i.e. au moins une valeur E(L)C50 pour chaque niveau trophique, plus un facteur de sécurité de 1000 appliqué à la valeur la plus faible)
- $PNEC_{NOEC/AF}$ définie à partir de tests chroniques (Lowest NOEC /100), selon les règles définies par le Guide EQS EU (EU Commission, 2011); la NOEC peut être issue de tests standard ou non-standard y compris ceux mesurant des effets tels que le comportement, certains effets de perturbation endocrine autres que ceux pris en compte habituellement, neurotoxicité, immunotoxicité etc. Les facteurs de sécurité pour ces critères non conventionnels sont fixés par jugement d'expert au cas par cas ;
- $PNEC_{biota\ sec_pois}$ définie à partir de tests d'effets portant sur l'empoisonnement secondaire des prédateurs (e.g. mammifères ou oiseaux) se nourrissant de proies contaminées ;
- $PNEC_{biota, hh\ food}$ définie à partir de tests d'effets sur la santé humaine par la consommation de produits de la pêche;
- $PNEC_{dw}$ définie à partir de tests d'effets sur la santé humaine par la consommation d'eau potable ;
- P-PNEC, valeur définie à partir de données modélisées quand les données expérimentales ne sont pas suffisantes pour calculer une PNEC. En effet, les données de toxicité aiguë manquantes sont dans cette procédure systématiquement estimées (calculées) à partir de modèles du type read-across basés sur la méthode kNN read-across développée par (Schürmann, 2011) ou EPI SuiteTM (US EPA, 2008). La valeur de la P-PNEC est calculée en prenant la valeur de toxicité la plus faible et appliquant un facteur de sécurité égal à 1000 par analogie avec les recommandations du Guide EQS EU pour les résultats d'essai de toxicité aiguë. Bien que les données soient issues de modèles, il n'est considéré comme nécessaire dans ce contexte d'y ajouter un facteur de sécurité supplémentaire.

La procédure générale pour la définition de la « PNEC » est illustrée dans le schéma ci-dessous.



* Retrocalcul pour exprimer en $\mu\text{g/L}$ les PNEC pour l’empoisonnement secondaire et la consommation de produits de la pêche

Figure 2 : Schéma explicatif de la procédure adoptée pour la définition de la « PNEC » pour une substance chimique donnée

Il faut également souligner que, selon l’objectif de priorisation ciblé, il est possible d’adopter une procédure différente pour la dérivation de la PNEC de référence / cible.

Par exemple, dans l’exercice de priorisation des substances chimiques pour la révision de la liste de « polluants spécifiques de l’état écologique », à la demande des agences et des offices de l’eau, seuls les enjeux environnementaux doivent être considérés.

Dans ce cas, des valeurs seuil pour l’état écologique (PNECs écologiques) prenant en compte la toxicité pour les organismes aquatiques et l’empoisonnement secondaire des prédateurs, mais pas la santé humaine, sont utilisées comme valeurs de référence pour identifier les substances avec un risque potentiel de dépassement de la PNEC et donc comme candidates au statut de « polluants spécifiques de l’état écologique ».

Spécificités pour la matrice sédiment :

Selon la(les) matrice(s) pertinente(s) différentes valeurs seuil peuvent devoir être déterminées pour une substance donnée, i.e. dans l’eau (PNEC_{eau}), dans les sédiments (PNEC_{sed}) et dans le biote ($\text{PNEC}_{\text{biota/poisson}}$ et $\text{PNEC}_{\text{biota/invertébré}}$).

La définition de valeurs seuil dans une matrice est indispensable pour pouvoir exploiter les données de suivi dans cette matrice.

Pour les substances les plus hydrophobes, se distribuant préférentiellement dans le compartiment sédimentaire des valeurs PNEC_{sed} sont définies et exprimées en concentration dans les sédiments ($\mu\text{g/kg}$ poids sec). Elles sont obtenues par une conversion reposant sur la méthode du coefficient de partage à l’équilibre à partir de la valeur de la PNEC dans l’eau (PNEC_{eau}) et du coefficient de partition entre l’eau et les solides (Koc), normalisé par rapport à la teneur en carbone organique.

La formule appliquée est la suivante :

$$(1) \text{ PNEC}_{\text{sed}} (\text{dry weight}) = \text{PNEC}_{\text{eau}} \times 2.6 \times (0.615 + 0.019 \times K_{\text{oc}}^{12})$$

Cette équation est le résultat de l'application des recommandations fournies par le TGD-EQS (pour le détail du calcul, voir aussi (Cauzzi & Andres, 2013)).

La méthode du coefficient de partage présente de nombreuses incertitudes, à commencer par l'hypothèse que le système est à l'équilibre, mais elle constitue aujourd'hui la meilleure approximation.

Il est important de rappeler que les valeurs seuils calculées dans ce contexte n'étant pas déduites de valeurs écotoxiques sur organismes benthiques, elles n'ont pas pour objectif la protection des populations des sédiments. Elles correspondent à des concentrations dans le sédiment équivalentes aux concentrations dans l'eau quand le système est à l'équilibre.

Une méthode équivalente pourrait être établie pour le biote, si nécessaire.

6.1.3.2.2 Disponibilité et qualité des données

Les méthodes traditionnelles utilisent des tests de toxicité aiguë (LC₅₀, EC₅₀) (basés sur la mortalité comme réponse primaire) ou des tests de toxicité chronique (NOEC, EC₁₀) et sub-chronique (basés sur la mesure de la survie, de la reproduction ou de l'inhibition de croissance) sur des organismes modèles représentatifs des différents niveaux trophiques.

Dans cette méthodologie, la plus faible des valeurs entre les PNEC fondées sur les données aiguës et les PNEC fondées sur les données chroniques est utilisée pour l'évaluation du danger, au lieu de préférer *a priori* les valeurs chroniques par rapport aux valeurs aiguës. Ceci permet de prendre en compte l'ensemble des informations disponibles de façon protectrice, notamment lorsque la qualité et la complétude des données n'ont pas pu être évaluées.

Par ailleurs, à côté de ces effets dont l'impact sur le fonctionnement des écosystèmes est reconnu, d'autres types d'effets observés en laboratoire commencent aujourd'hui à être considérés pour l'évaluation d'effets dans un contexte réglementaire, tels que, par exemple, la capacité à maintenir un nid, le rythme cardiaque, l'activité de nourrissage et le comportement. Pour nombre de ces effets (dits « nouveaux endpoints »), il est possible d'identifier un lien direct avec des importantes fonctions écologiques telles que la reproduction, la croissance et la prédation. Dans les cas où ces nouveaux effets sont observés à des niveaux de concentration comparables à ceux trouvés dans l'environnement, il est recommandé de prendre en compte ces données dans la dérivation des PNEC et d'approfondir les recherches expérimentales afin de mieux comprendre les implications pour l'état des écosystèmes.

Enfin, il est important de rappeler que pour la plupart des substances dites émergentes, les données actuellement disponibles ne sont pas suffisantes pour dériver une PNEC. Le présent référentiel prévoit donc qu'une PNEC estimée (i.e. P-PNEC, calculée via des modèles QSAR) soit utilisée pour toutes les molécules pour lesquelles il y a actuellement un manque de données expérimentales. Cela permet de faire un premier « screening » sur les molécules potentiellement les plus toxiques.

Ceci dit, il y a lieu de rappeler que cette valeur de PNEC est à considérer comme valeur cible représentative d'une condition de « pire cas » et non pas comme valeur réglementaire ou pré-réglementaire.

¹² Pour ce calcul il est préférable d'utiliser les K_{oc} les plus faibles, ce qui correspond au pire cas pour le calcul de la valeur seuil dans les sédiments.

6.2 ARBRE DECISIONNEL

La Figure 3 illustre la procédure pour la distribution des substances de la liste de départ dans six catégories d'action sur la base des critères et des indicateurs présentés dans les sections précédentes.

La première étape du processus de catégorisation consiste à définir la liste des substances qui représentent l' « univers de départ » de l'exercice de hiérarchisation. Ensuite le travail passe par un' évaluation de la masse des données de surveillance disponibles pour chaque substance, dans la(es) matrice(s) pertinente(s) associée(s), afin d'identifier, d'un coté les substances pour lesquelles les données de surveillance actuellement disponibles nous permettent de statuer sur les niveaux d'exposition, et de l'autre coté les substances pour lesquelles l'information disponible est aujourd'hui insuffisante.

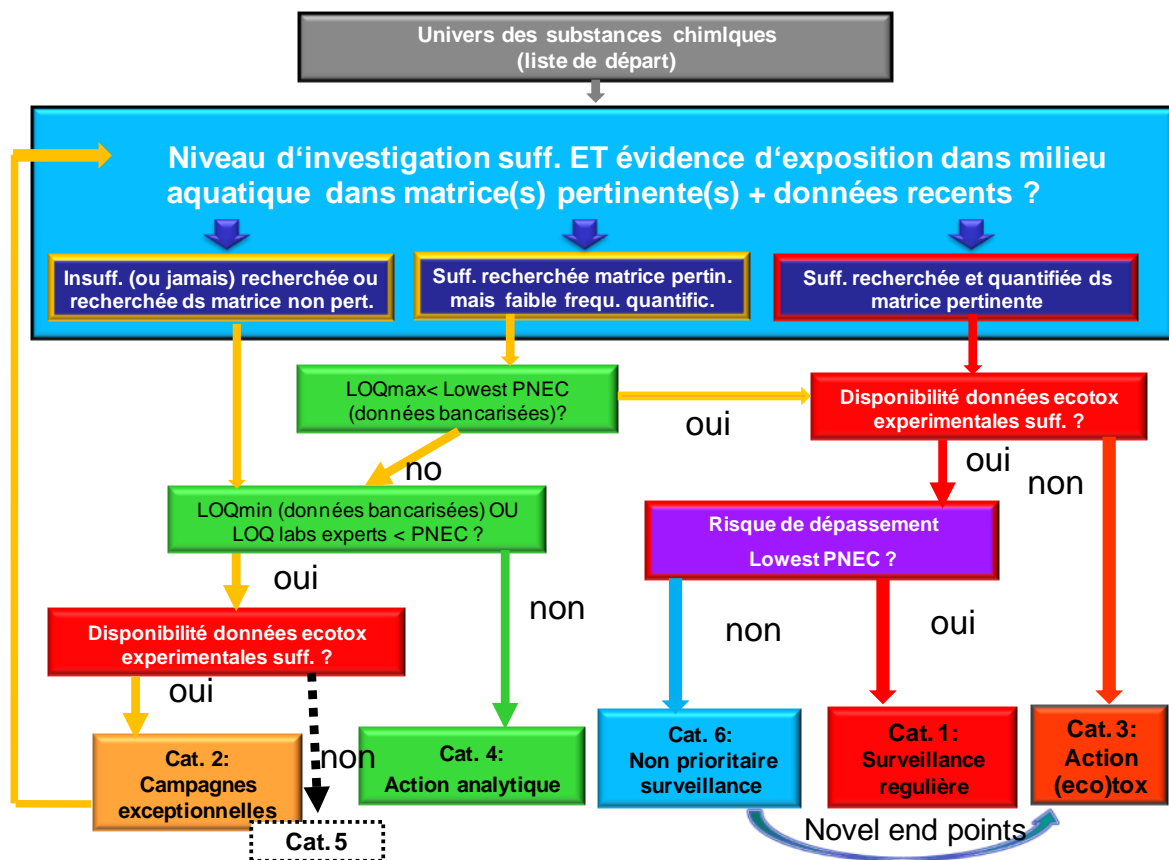


Figure 3 : Arbre décisionnel pour la distribution des substances de la liste de départ dans six catégories d'action, correspondantes aux objectifs de priorisation identifiés (Schéma de la méthodologie NORMAN adapté à la situation française)

Trois lots de molécules sont ainsi définis selon la disponibilité de données de surveillance sur le territoire français:

1. Molécules suffisamment recherchées et quantifiées dans matrice pertinente,
2. Molécules suffisamment recherchées dans la matrice pertinente mais peu fréquemment quantifiées,

3. Molécules insuffisamment (ou jamais¹³) recherchées ou recherchées dans une matrice non pertinente.

Pour le premier groupe de substances (*molécules suffisamment recherchées et quantifiées dans matrice pertinente*) la question suivante concerne la disponibilité de données d'écotoxicité basées sur des tests expérimentaux. Si la réponse est négative la substance sera automatiquement classée dans la catégorie 3 dédiée aux substances chimiques pour lesquelles il y a la nécessité de développer des tests d'écotoxicité avant de procéder aux étapes successives.

Si des données de tests d'écotoxicité sont disponibles une comparaison est faite entre le niveau d'occurrence de la substance dans la(es) matrice(s) pertinente(s) et la valeur de la PNEC correspondante. Cette comparaison permettra d'avoir une première évaluation du risque potentiel associé à l'occurrence de la substance dans le milieu aquatique et son attribution à la catégorie 1 (substances identifiées comme prioritaires pour une *surveillance régulière*) ou catégorie 6 (substances jugées comme « *non prioritaires* » pour une surveillance régulière, à l'état des connaissances actuelles).

Pour le deuxième groupe de substances (*molécules suffisamment recherchées dans la matrice pertinente mais peu fréquemment quantifiées*) il est nécessaire de vérifier les causes de cette faible fréquence de quantification. Sur la base des valeurs de la limite de quantification (LOQs) et de la PNEC il est possible de définir si les données d'analyses non quantifiées prouvent une réelle « absence » de la substance dans la matrice pertinente à des niveaux de concentration égales ou supérieures à la PNEC ou bien il s'agit de « faux négatifs ».

Dans le *premier cas* la substance doit être examinée afin de statuer si il s'agit d'un problème local (catégorie 1 - risque identifié, mais sur un nombre limité de stations) ou pas (catégorie 6) ; ceci à condition que le critère « Disponibilité de données expérimentales suffisantes » soit respectée.

Dans le *deuxième cas* la substance est susceptible d'être présente dans l'environnement et devient donc une candidate pour la catégorie 2 (*campagnes de mesure exploratoires pour l'acquisition de données d'exposition*) à condition que les valeurs de LOQ atteignables par les laboratoires d'analyse soient compatibles avec les valeurs définies pour la PNEC. Si cette condition n'est pas satisfaite la substance devra être attribuée à la catégorie 4 (dédiée aux *substances pour lesquelles une action de développement / validation de méthodes analytiques plus « performantes » est nécessaire*).

Enfin pour les substances « *peu fréquemment (ou jamais) recherchées dans les programmes de surveillance régulière* » pour lesquelles peu ou pas de données bancarisées exploitables sont disponibles il est nécessaire - comme pour les substances du groupe précédent - de vérifier la compatibilité des LOQs avec les valeurs définies pour la PNEC, pour pouvoir définir l'attribution de ces molécules à la catégorie 2 ou à la catégorie 4.

Enfin, au sein de la catégorie 2, la catégorie 5 regroupe les substances candidates pour des campagnes de mesure exploratoires, mais pour lesquelles les données d'écotoxicité utilisées pour dériver les PNECs sont basées uniquement sur des données modélisées. La catégorie 5 est inscrite au sein de la catégorie 2 afin de donner la possibilité à ces substances d'être recherchées à l'occasion d'une campagne de mesure exploratoire et leur donner ainsi une « chance » de rejoindre ensuite la catégorie 3 (lancement d'études écotoxicologiques plus poussées) si elles sont retrouvées dans le milieu aquatique.

Un résumé des critères appliqués dans la phase de catégorisation et la séquence des conditions à respecter pour chaque catégorie sont illustrés plus en détail dans le tableau suivant. A noter que, selon le parcours effectué, chaque catégorie peut être recoupée en deux sous-catégories (ex. Catégorie 1 en Cat. 1A et 1B, selon l'intensité de recherche et la fréquence de quantification pour

¹³ On entend par « molécule jamais recherchée » le fait que nous ne disposons pas pour cette substance de données de surveillance exploitables dans une base de données.

la substance considérée). Les détails des différentes sous-catégories sont présentés dans l'arbre décisionnel dans la Figure 4.

Tableau 11 : Liste des requêtes pour la de catégorisation des substances

| Catégorie | 1A | 1B | 2A | 2B | 3 | 4A | 4B | 5A | 5B | 6A | 6B |
|-----------------------------------|------------------------|-----|---------------------------|-----|--------|----------------------|---------------------|-------------------------|-----|------------------------------|-----|
| | Surveillance régulière | | Campagnes exceptionnelles | | Ecotox | Méthodes analytiques | | Camp. except. et ecotox | | Non priorit. surv. régulière | |
| Recherche sur >10% stations | Oui | Oui | Oui | Non | Oui | Oui | Non | Oui | Non | Oui | Oui |
| Fréquence quant >15% des analyses | Oui | Non | Non | - | - | Non | (Non) | Non | - | Oui | Non |
| LOQ _{max} <PNEC | - | Oui | Non | - | - | Non | (Non) | Non | - | - | Oui |
| LOQ _{min} <PNEC | - | Oui | Oui | Oui | - | Non | (Non) | Oui | Oui | - | Oui |
| LOQ _{min} biblio <PNEC | - | - | - | | - | Non ¹⁴ | (Non) ¹⁵ | - | | - | - |
| PNEC : données écotox suff. | Oui | Oui | Oui | Oui | Non | - | - | Non | Non | Oui | Oui |
| Risque dépassement PNEC | Oui | Oui | - | - | - | - | - | - | - | Non | Non |

¹⁴ Quand la valeur de LOQmin associée aux données bancarisées est supérieure à la Lowest PNEC, mais nous n'avons pas des références dans la littérature scientifique pour confirmer qu'un développement / validation de méthodes analytiques plus « performantes » est nécessaire, la substance est attribuée à la catégorie 4AF « flagged »

¹⁵ Quand la substance n'est pas suffisamment recherchée ou il n'y a pas de données bancarisées et nous n'avons pas des références dans la littérature scientifique pour la valeur de la LOQmin, la substance est attribuée à la catégorie 4BF « flagged »

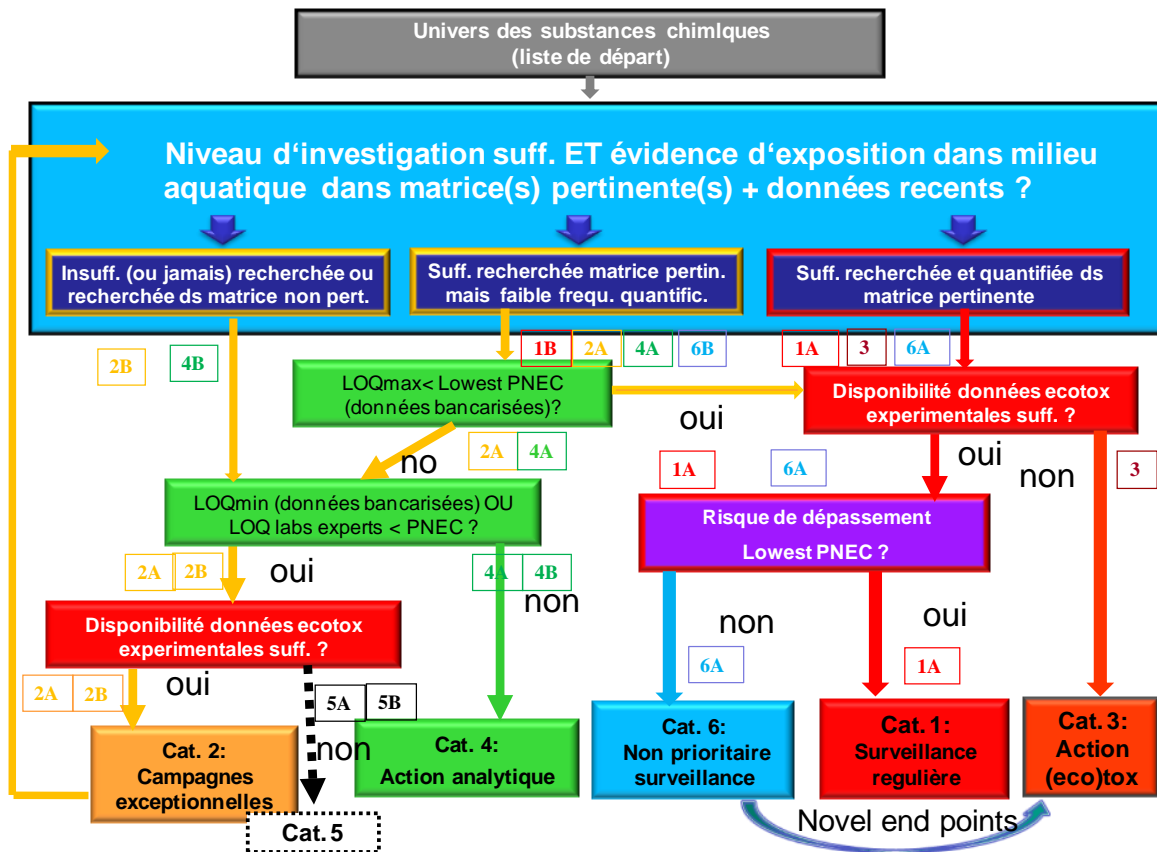


Figure 4 : Arbre décisionnel pour la distribution des substances de la liste départ dans six catégories d'action, avec le détail sur le parcours correspondant à chaque sous-catégorie

7 HIERARCHISATION DES SUBSTANCES

L'étape de catégorisation décrite ci-dessus permet d'orienter les actions à entreprendre pour une substance donnée. L'application des critères de catégorisation est de type veto (oui/non) et les substances envoyées dans une catégorie ne sont pas hiérarchisées. La phase suivante, décrite dans ce chapitre permet de trier, à l'intérieur d'une catégorie, les substances pour lesquelles la mise en œuvre de l'action en question est prioritaire. Ceci est fait en attribuant pour chaque paramètre sélectionné ci-après un score de façon à traiter de manière quantitative la position de chaque substance dans une catégorie donnée.

Les deux composantes possibles du score final sont le « risque » et les « propriétés intrinsèques » de la substance, définis selon les deux formules suivantes :

1. Score risque = [score (fréquence de dépassement. PNEC) + score (degré de dépassement. PNEC)]/2
2. Score propriétés = [score(usage) + score(écotox) + score (tox. humaine) + score (subst. « very high concern »)]/4

Le score final attribué à chaque substance est défini de manière indépendante selon la catégorie d'action et son objectif final, en prenant en compte l'un ou l'autre (ou les deux) scores ci-dessus.

Par exemple pour les catégories 1, 3 et 6 on dispose des données sur les propriétés des substances et de données sur leurs niveaux d'occurrence dans le milieu aquatique. On peut donc calculer un score « risque » et un score « propriétés » et baser la hiérarchisation sur la somme de ceux deux scores.

Par contre pour des substances en catégories 2, 4 et 5, par définition, les données d'occurrence ne sont pas toujours disponibles et donc il est recommandé de baser la hiérarchisation sur le score « propriétés » uniquement.

Les détails sur le calcul des deux composantes du score sont expliqués dans les points suivants.

7.1 SCORE « RISQUE »

Le score « risque » prend en compte la fréquence de dépassement de la PNEC et le degré de dépassement de la PNEC, comme expliqué ci-dessous.

7.1.1 DEGRE DE DEPASSEMENT DE LA PNEC

- MEC95 / PNEC

Le score est calculé selon le schéma suivant :

| Dégré de dépassement de la PNEC | Score |
|---------------------------------|-------|
| MEC95/PNEC \geq 1000 | 1 |
| 1000 > MEC95/PNEC \geq 100 | 0,5 |
| 100 > MEC95/PNEC \geq 10 | 0,25 |
| 10 > MEC95/PNEC \geq 1 | 0,1 |
| MEC95/PNEC < 1 | 0 |

7.1.2 FREQUENCE DE DEPASSEMENT DE LA PNEC

- n / N

Où :

n = Nb de sites avec $MEC_{max_site} / PNEC > 1$ pour une molécule donnée

N = Nb total de sites avec analyses pour une molécule donnée.

Cet indicateur (valeur entre 0 et 1) permet d'identifier les polluants associés à des « pressions significatives » sur le territoire, région ou bassin considéré : en effet une fréquence de dépassement élevée pourra être associée à la présence de sources de pollution suffisamment nombreuses (ou étendues s'agissant des pollutions diffuses), ainsi que suffisamment intenses (teneurs >PNEC) sur le bassin en question. Cela est cohérent avec la définition donnée par la DCE des « polluants spécifiques des bassins pour l'état écologique », qui sont associés à la notion de « pollution significative ».

Il est important de souligner que le score « risque » peut être calculé uniquement quand des données de suivi dans le milieu aquatique (et dans une matrice pertinente) ainsi que des données d'écotoxicité sont disponibles.

7.2 SCORE « PROPRIETES »

Le score « propriétés » d'une substance chimique comprend les indicateurs suivants :

- Typologie d'usage (selon le secteur d'utilisation / typologie d'usage de la molécule le plus contraignant d'un point de vue de l'impact dans l'environnement),
- Effets sur les écosystèmes (indicateur d'écotoxicité, i.e. PNEC),
- Effets sur la santé humaine (indicateur de toxicité, i.e. propriétés CMR),
- identification de propriétés PBT/vPvB, et / ou perturbateur endocrinien comme facteurs aggravants (i.e. « subst. of very high concern »).

Score « propriétés » = [score(usage) + score(écotox) + score (tox. humaine) + score (subst. « very high concern »)]/4

Les règles utilisées pour chacun de ces indicateurs et les scores correspondants sont illustrées dans les sections suivantes.

7.2.1 INDICATEUR D'EXPOSITION : TYPOLOGIE D'USAGE

Le Tableau 12 présente les règles proposées pour l'attribution d'un score selon la typologie d'« usage » de la substance. Celles-ci ont été proposées en fonction des données accessibles. D'autres informations pourraient être utilisées comme les quantités de substances utilisées par exemple. Ces règles pourraient être modifiées si d'autres informations devenaient disponibles.

Tableau 12 : Règles pour l'attribution d'un score selon la typologie d'« usage » de la substance

| Critères sélectionnés | Score | Remarques |
|--|---|---|
| <p>Type d'usage (caractère dispersif ou confiné de l'usage)</p> <p>Sources : Base de données de l'ECHA (ECHA CHEM http://echa.europa.eu/information-on-chemicals) ;</p> <p>Portail Subst. Chimiques INERIS www.ineris.fr/substances/fr/</p> <p>A défaut : 10 min de recherche sur le web</p> | <p>Score entre : 0 et 1</p> <p>"Used in the environment": 1</p> <p>"Dispersive use / diffuse sources": 0,75</p> <p>"Industrial use" (controlled point sources): 0,5</p> <p>"Use in closed systems" (controlled system - isolated intermediate, no direct release to the environment) : 0</p> <p>Valeur par défaut (quand pas trouvé) = 0,25</p> | <p>"Used in the environment": ex. produits phytosanitaires</p> <p>"Dispersive use": ex. médicaments</p> <p>« Industrial use » : ex. produits industriels retrouvés principalement dans des rejets industriels contrôlés</p> <p>"Use in closed systems": ex. intermédiaires de production utilisés par l'industrie</p> |

Précisions concernant le Tableau 12 :

- Les molécules qui présentent différents types d'usage sont traitées par rapport à l'usage le plus critique d'un point de vue de l'impact sur l'environnement (logique de « pire cas »).
- Par défaut un score 1 est attribué à toutes les molécules présentes comme substances actives dans les produits phytosanitaires. Il faut noter que le même score est attribué aux auxiliaires contenus dans les formulations commerciales. C'est pour cette raison que des molécules comme par exemple, les paraffines ou l'acide oléique, qui sont cités dans la liste « SIRIS pesticides » comme auxiliaires dans les formulations des produits phytosanitaires, sont classées automatiquement comme « pesticides » (avec un score 1, correspondant aux substances chimiques utilisées directement dans l'environnement).
- Les molécules faisant partie de formulations à usage domestique (ex. tensioactifs utilisés dans les lessives, ingrédients présents dans les formulations des produits cosmétiques, médicaments, etc.) sont attribuées à la catégorie « Dispersive use / diffuse sources » avec un score 0,75.
- Pour les substances chimiques utilisées dans l'industrie, une distinction entre les catégories d'usage « Dispersive use / diffuse sources » (score 0,75, comme pour le cas précédent) et « Industrial use » (score 0,5, points d'émissions localisés et contrôlés) doit être effectuée sur la base de l'information sur les profils d'émissions des substances disponible sur le site ECHA CHEM (<http://apps.echa.europa.eu/registered/registered-sub.aspx>). Dans la section "Manufacture, Use & Exposure > Identified uses" il est possible de trouver pour une molécule donnée les codes :
 - o "ERC" (« Environmental Releases Category »). N.B. Cette information n'était pas obligatoire dans les premières versions de IUCLID, donc elle n'est pas toujours présente dans les dossiers.
 - o "PROC" (ce code fait référence aux procédés de production utilisés). Cette information est obligatoire pour tous les dossiers et même si elle est surtout pertinente pour l'évaluation de l'exposition des travailleurs, elle peut être utilisée comme « surrogate » dans les cas où l'information sur les ERC ne serait pas présente.
- Les éléments permettant de classer les substances comme « Wide dispersive use » ou « Industrial use » sur la base des codes ERC et PROC renseignés dans la base de données ECHA CHEM, sont présentés dans le tableau ci-dessous.

Tableau 13 : Eléments permettant de classer les substances come « Wide dispersive use » ou « Industrial use »

| Caractère dispersif de l'usage | Eléments de classement (section « Manufacture, Use and Exposure » - site ECHA CHEM) |
|--------------------------------|--|
| Wide dispersive use | ERC 2, ou ERC 5, ou ERC 8a, ou ERC 8c, ou ERC 8d, ou ERC 8f, ou ERC 10b, ou ERC 11b, ou ERC 12B |
| Industrial use | ERC 8b, ou ERC 8c, ou ERC 8 e, ou ERC 9a, ou ERC 9b, ou ERC 10a, ou ERC 11a PROC 10, ou PROC 11, ou PROC 13, ou PROC 15, ou PROC 17, ou PROC 18, ou PROC 19 |

7.2.2 INDICATEUR D'EFFETS SUR LES ECOSYSTEMES (INDICATEUR D'ECOTOXICITE)

Tableau 14 : Règles pour l'attribution d'un score « effets écotoxiques »

| Critères sélectionnés | Score |
|-----------------------|---|
| PNEC | Score compris entre 0 et 1: PNEC : ≤0,1 µg/l : 1 ≤1 µg/l : 0,75 ≤10 µg/l : 0,5 ≤100 µg/l : 0,25 >100 µg/l : 0 <i>Valeur par default (quand PNEC non disponible) = 0,25</i> |

7.2.3 INDICATEUR D'EFFETS SUR LA SANTE HUMAINE (PROPRIETES DE CANCEROGENICITE, MUTAGENICITE ET REPROTOXICITE - CMR - DE LA SUBSTANCE)

Le score associé aux effets sur la santé humaine est une valeur comprise entre 0 et 1, calculée comme valeur max entre les scores associés aux trois composantes : cancérrogénicité, mutagénicité, et reprotoxicité selon l'équation :

$$\text{Score tox. humaine} = \text{Max} [\text{« Cancérog.} \text{,} \text{ « Mutag.} \text{,} \text{ « Reprotox.} \text{.} \text{ »}]$$

Les règles pour l'attribution du score associé à chaque élément sont décrites dans le Tableau 15.

Tableau 15 : Règles pour l'attribution d'un score « effets toxiques sur la santé humaine »

| Indicateur | Score |
|-----------------|--|
| Cancérogénicité | <ul style="list-style-type: none"> • Catégorie 1 = 1 • Catégorie 2 = 0,75 • Catégorie 3 = 0,5 • Non examinée / examinée et information insuffisante = 0,25 • Examinée et non classée = 0 |
| Mutagénicité | <ul style="list-style-type: none"> • Catégorie 1 = 1 • Catégorie 2 = 0,75 • Catégorie 3 = 0,5 • Non examinée / examinée et information insuffisante = 0,25 • Examinée and non classée = 0 |
| Reprotoxicité | <ul style="list-style-type: none"> • Catégorie 1 = 1 • Catégorie 2 = 0,75 • Catégorie 3 = 0,5 • Non examinée / examinée et information insuffisante = 0,25 • Examinée et non classée =0 |

Les règles à appliquer pour la classification des substances selon leurs propriétés de cancérogénicité, mutagénicité et reprotoxicité (C, M et R) sont présentées dans les sous-sections suivantes et dans le Tableau 16, Tableau 17 et Tableau 18.

Cancérogénicité :

Le Tableau 16 présente les différents systèmes officiellement reconnus aujourd'hui pour la classification (UE, IARC, et USEPA) des substances pour les effets de cancérogénicité et le score correspondant attribué dans ce référentiel.

Tableau 16 : Règles pour l'attribution d'un score cancérogénicité

| Cancérogénicité : systèmes de classification | | | | Classification |
|--|------|------------|---|--|
| Weight of evidence | IARC | USEPA | UE | |
| Human carcinogen | 1 | CH** A* | 1A (known human carcinogens based on human evidence) | Catégorie 1 |
| Probable human carcinogen | 2A | LH**B1- B2 | 1B (presumed human carcinogens based on animal evidence) | Catégorie 2 |
| Possible human carcinogen | 2B | SE**C* | 2 (suspected human carcinogens based on the evidence obtained from human and/or animal studies, but which is not sufficiently convincing to place the substance in Category 1A or 1B) | Catégorie 3 |
| Not classifiable | 3 | InI** D* | | Examinée et information non suffisante |
| No available data | | | | Non examinée |
| Not likely to be carcinogenic to humans | 4 | E | | Examinée et non classée |

IARC : <http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/index.php>

USEPA : http://www.epa.gov/iris/search_human.htm (*classification 1986; ** classification 2005)

UE : <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2008:353:0001:1355:EN:PDF>

Mutagénicité :

Le Tableau 17 présente le système officiellement reconnu aujourd'hui par l'UE pour la classification des substances pour les effets de génotoxicité et le score correspondant attribué dans ce référentiel.

Tableau 17 : Règles pour l'attribution d'un score mutagénicité

| Mutagénicité : classification (UE) | Classification |
|---|-------------------------|
| 1A → based on positive evidence from human epidemiological studies → evidenced to induced heritable mutations in the germ cells of humans | Catégorie 1 |
| 1B → positive result(s) from in vivo heritable germ cell mutagenicity tests in mammals → positive result(s) from in vivo somatic cell mutagenicity tests in mammals → positive results from tests showing mutagenic effects in the germ cells of humans | Catégorie 2 |
| 2 → may induce heritable mutations in the germ cells of humans | Catégorie 3 |
| | Examinée et non classée |
| No available data | Non examinée |

Classification UE : <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2008:353:0001:1355:EN:PDF>

Reprotoxicité :

Le Tableau 18 présente le système officiellement reconnu aujourd'hui par l'UE pour la classification des substances pour les effets sur la reproduction et le score correspondant attribué dans ce référentiel. Le classement de l'Union européenne s'appuie sur le système du GHS (Global Harmonized System) des Nations Unies. Ce système a été adopté par de nombreux pays comme les États-Unis et les classifications établies en dehors de l'Union Européenne peuvent être intégrées.

Tableau 18 : Règles pour l'attribution d'un score reprotoxicité

| Reprotoxicité : classification UE | Classification |
|---|--------------------------|
| 1A → Known human reproductive toxicant, based on evidence from humans. | Catégorie 1 |
| 1B → Presumed human reproductive, based on data from animal studies. | Catégorie 2 |
| 2 → Suspected human reproductive toxicant, based on some evidence from humans or experimental animals, but not sufficiently convincing to place the substance in Category 1 | Catégorie 3 |
| No available data | Non examinée |
| | Examinée and non classée |

Classification UE : <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2008:353:0001:1355:EN:PDF>

7.2.4 INDICATEURS DE « SUBSTANCES OF VERY HIGH CONCERN » (FACTEURS AGGRAVANTS)

Cet indicateur prend en compte :

- 1) Propriétés PBT, vPvB,
- 2) Effets perturbateur endocrinien (PE).

Le score associé aux facteurs aggravants (subst. « very high concern ») est une valeur comprise entre 0 et 1, calculée comme valeur max entre le score associé aux propriétés PBT /vPvB et le score associé aux effets de la substance comme potentiel perturbateur endocrinien (PE).

$$\text{Score (subst. « very high concern »)} = \text{Max}[(\text{PBT et /ou vPvB}); (\text{PE})]$$

Les règles pour l'attribution du score associé à chaque élément sont décrites dans les tableaux suivants.

Il est important de noter que, contrairement aux autres indicateurs, dans les cas des propriétés PBT/vPvB et des effets PE il n'y a pas de *score par défaut* attribué aux substances pour lesquelles les données ne sont pas disponibles (i.e. le score attribué est 0 quand la substance n'a pas été examinée). Ce choix se justifie en considérant que les propriétés PBT/vPvB et PE des substances chimiques sont prises en compte ici comme des facteurs aggravants. En effet, la toxicité des substances est en principe prise en compte par les scores précédents. Pour les PBT, c'est la conjonction des 3 propriétés ensemble qui crée une inquiétude supplémentaires.

7.2.4.1 Propriétés PBT, vPvB

Tableau 19 : Règles pour l'attribution du score correspondant aux propriétés PBT / vPvB des substances chimiques

| Critères sélectionnés | Mesure des critères |
|------------------------|--|
| Propriétés PBT ou vPvB | Score compris entre 0 et 1: PBT:1 vPvB :1 Propriétés PBT, vPvB non avérées : 0 Si les données P, B et T ne sont pas toutes disponibles la substance ne pourra pas être classée comme « PBT » ou « vPvB » |

Les règles à appliquer pour la classification des substances selon leurs propriétés P, vP, B, vB, PBT, vPvB sont présentées dans le Tableau 20.

Tableau 20 : Liste des indicateurs et des valeurs seuil à appliquer pour la classification des substances chimiques au titre de substances P, vP, B, vB, T, T+, PBT, vPvB

| Critères sélectionnés | Mesure des critères |
|---|--|
| Persistence : DT50 (démie-vie) eau et sédiments Source : <ul style="list-style-type: none"> Portail Substances Chimiques INERIS Modèles EPI Suite | P : DT50 (eaux douces ou eaux marines) >40 jours OU DT50 (sédiments d'eaux douces ou d'eaux marines) >120 jours vP : DT50 (eaux douces ou eaux marines)>60 jours OU DT50 (sédiments d'eaux douces ou d'eaux marines) >180 jours |
| Bioaccumulation Valeur du BCF Source : <ul style="list-style-type: none"> Portail Substances Chimiques INERIS Modèle BIOWIN | B : BCF>2000 l/kg vB : BCF > 5000 l/kg |
| Toxicité Valeurs de la PNEC et du critère « T » selon l'Annexe XIII de REACH | NOEC <0,01 mg/L OU EC50 ou LC50 < 0.1 mg/L (critère de screening) OU « T » / T+ (selon Annexe XIII - REACH) |

7.2.4.2 Effet perturbateur endocrinien

Les règles pour l'attribution du score associé aux effets de la substance comme potentiel perturbateur endocrinien sont illustrées dans le Tableau 21.

Tableau 21 : Indicateur d'effet perturbateur endocrinien

| Critères sélectionnés | Mesure des critères |
|--|---|
| <p>Effet perturbateur endocrinien</p> <p>Sources :</p> <ul style="list-style-type: none">• Listes européennes :<ul style="list-style-type: none">- COM(2001) 262 final ;- UE/SEC(2004)1372 ;- SEC(2007)1635.• Liste "SIN (Substitute It Now!) database" http://www.sinlist.org/• A compilation of published lists. MRC Institute for Environment and Health, Leicester, UK, IEH Web Report W20 http://www.lec.ac.uk/ieh/• Autre littérature publiée | <p>Score compris entre 0 et 1:</p> <ul style="list-style-type: none">- Effet de perturbateur endocrinien avéré : 1- Effet de perturbateur endocrinien suspecté : 0,5- Effet de perturbateur endocrinien non avéré ou substance non examinée : 0 |

8 ABREVIATIONS, ACRONYMES

| | |
|-----------------|---|
| BCF | Facteur de bioconcentration |
| CEP | Comité Experts Priorisation des substances du milieu aquatique |
| CMR | Substances cancérigènes, mutagènes ou toxiques pour la reproduction en application de la directive 67/548/CEE. |
| DCE | Directive Cadre sur l'Eau (2000/60/CE) |
| DT50 | Temps de demi-vie |
| ECHA | European Chemical Agency http://echa.europa.eu |
| EC50 | Concentration efficace médiane |
| ICPE | Installations Classées pour la Protection de l'Environnement |
| JRC | Joint Research Centre (Centre Commun de Recherche de la Commission Européenne) http://ec.europa.eu |
| K _{oc} | Coefficient de partage carbone organique/eau |
| K _{ow} | Coefficient de partage octanol / eau |
| LC50 | Concentration létale médiane |
| LOD | Limit of Détection (Limite de détection) |
| LOQ | Limit of Quantification (Limite de quantification) |
| LRTAP | Long-range Transboundary Air Pollution (Convention) |
| MEDDE | Ministère de l'Ecologie, du Développement durable et de l'Energie |
| NOEC | No Observed Effect Concentration (concentration la plus élevée sans effet décelable) |
| NORMAN | Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances http://www.norman-network.net |
| NQE | Norme de Qualité Environnementale |
| PEC | Predicted Environmental Concentration (concentration prédite dans l'environnement) |
| PNAR | Plan National d'Actions et de Réductions |
| PNEC | Predicted No Effect Concentration (concentration prédite sans effets) |
| PNSE2 | Deuxième plan national Santé-environnement (2009-2013) |
| OSPAR | Oslo-Paris Convention (Convention pour la protection du milieu marin de l'Atlantique du Nord-Est) http://www.ospar.org/ |
| PBT | Persistent, Bioaccumulative and Toxic substances (Substances persistantes, bio-accumulatives et toxiques au sens de l'annexe XIII du règlement REACH) |
| PE | Perturbateur Endocrinien |
| POP | Persistent Organic Pollutants (Polluants organiques persistants) |
| QSAR | Quantitative Structure-Activity Relationship (relation quantitative structure à activité) |
| REACH | Règlement (CE) No 1907/2006 du Parlement Européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances |
| RCS | Réseau de Contrôles Surveillance |

| | |
|-------|--|
| RCO | Réseau de Contrôles Opérationnel |
| RSDE | Recherche de substances dangereuses dans l'eau (Action) |
| SDAGE | Schémas Directeurs d'Aménagement et de Gestion des Eaux |
| STEU | Stations de Traitement des Eaux Usées |
| SVHC | Substances of Very High Concern (au sens du règlement REACH) |
| UNECE | United Nation Economic Commission for Europe |
| vPvB | Very Persistent and very Bioaccumulative substances (Substances très persistantes et très bio-accumulatives au sens de l'annexe XIII du règlement REACH) |

9 BIBLIOGRAPHIE

ADES, Eaufrance. (s.d.). *Banque nationale d'Accès aux Données sur les Eaux Souterraines*. Consulté le jan 25, 2013, sur <http://www.ades.eaufrance.fr/>

AFSSA. (2008). *Hiérarchisation des résidus de médicaments d'intérêt*. AFSSA.

Agerstrand, M. et al. (2011). Reporting and evaluation criteria as means towards a transparent use of ecotoxicity data for environmental risk assessment of pharmaceuticals. , 159(10). *Environmental Pollution* , 159 (10), 2487-2492.

ANSES. (s.d.). *Agritox*. Consulté le February 22, 2013, sur Agritox: <http://www.dive.afssa.fr/agritox/index.php>

Besse, J., Garric, J. (2007). *Médicaments à usage humain: risque d'exposition et effets sur les milieux*.

Boxall, A. (2008). *Report on environmental impact and health effects of PPs - KNAPPE Project - Contract n° 036864, Deliverable D4.2*.

Cauzzi, N., & Andres, S. (2013). *Méthodologie appliquée pour le calcul des Normes de Qualité pour la protection des organismes benthiques (NQSEDIMENT) selon la méthode de l'équilibre de partage (INERIS, DRC-13-126836-01654A, www.ineris.fr/substances/*.

Chem Sec - SIN List 2.1. (n.d.). *SIN database - SIN List 2.1*. Retrieved February 21, 2013, from ChemSec - bridging the gap between regulators, business, investors, NGOs and science: <http://www.chemsec.org/what-we-do/sin-list/sin-database>

EMPODAT, NORMAN. (s.d.). *EMPODAT: database of geo-referenced monitoring and bio-monitoring data on emerging substances in air, water and soil*. Consulté le jan 25, 2013, sur http://www.normandata.eu/empodat_index.php

Environmental Protection Agency. (2009). *Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft Windows, v 4.00*. Washington, United States.

EU Commission. (2007). *Comm. Staff Work. Doc. on the implement. of the "Community Strat. for Endocrine Disruptors" - a range of subst. suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife (COM (1999) 706), (COM (2001) 262) and (SEC (2004) 1372) SEC 2007 1635*. Retrieved from http://ec.europa.eu/environment/endocrine/documents/sec_2007_1635_en.pdf

EU Commission. (2011). *WFD-CIS Guidance Document No. 27 Technical Guidance For Deriving Environmental Quality Standards*. Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities.

European Chemicals Agency. (2008). *Guidance on information requirements and chemical safety assessment - Chapter R.11: PBT Assessment*. ECHA.

European Chemicals Agency. (2012). *Guidance on information requirements and chemical safety assessment: Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation*. ECHA-10-G-06-EN.

European Commission. (2011). COMMISSION REGULATION (EU) No 253/2011 of 15 March 2011 amending Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council on the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH) as regards Annex XIII. Official Journal of the European Union.

European Commission. (1996). *Technical guidance document in support of the Commission regulation (EC) 1488/94 on risk assessment for existing chemicals, Part III*. Luxembourg (L): Office for Official Publications of the European Communities.

Fraunhofer Institute. (1999). *Revised proposal for a list of priority substances in the context of the Water Framework Directive (COMMPs procedure)*. Available at http://ec.europa.eu/environment/water/water-dangersub/pdf/commmps_report.pdf.

IEH Report. (2005). *IEH Report. Chemicals purported to be endocrine disruptors. A compilation of published lists. IEH Web Report W20*. Available at <http://www.lec.ac.uk/ieh/>. Leicester, UK: MRC Institute for Environment and Health.

IFREMER. (2010). *Adaptation de la surveillance chimique de la DCE au contexte des DOMs - Convention ONEMA Ifremer 2009-2010, fiche 21*.

INERIS, IOW. (2009). *Implementation of requirements on Priority substances within the context of the Water Framework Directive. Prioritization process: Monitoring-based ranking*. .

IPCS INCHEM. (n.d.). *OECD Screening Information DataSet (SIDS) High Production Volume Chemicals*. Retrieved Feb 4, 2013, from INCHEM, Chemical Safety Information from Intergovernmental Organizations: <http://www.inchem.org/pages/sids.html>

Klimisch, H., Andreae, M., & Tillmann, U. (1997). A Systematic Approach for Evaluating the Quality of Experimental Toxicological and Ecotoxicological Data. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 25 (1), 1-5.

Kühne R, Ebert R-U, Schüürmann G. . (2007). Estimation of compartmental half-lives of organic compounds - structural similarity versus EPI-Suite. *QSAR Comb. Sci.* (26), 542-549.

Kühne R, Ebert R-U, Schüürmann G. (2009). Chemical domain of QSAR models from atom-centered fragments. *J. Chem. Inf. Model.*, 96, 2660-2669.

Kühne R, Ebert R-U, Schüürmann G. (2006). Model selection based on structural similarity - method description and application to water solubility prediction. *J. Chem. Inf. Model.*, 46, 636-641.

Kühne, R., R.-U. Ebert, et al. (2013). Read-across prediction of the acute toxicity of organic compounds toward the water flea *Daphnia magna*. *Molecular Informatics*, 32, 108-120.

Küster, A. et al. (2009). Regulatory demands on data quality for the environmental risk assessment of pharmaceuticals. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 55 (3), 276-280.

Le Gall, A. C.-Y. (2007). *Mise à jour et amélioration de la méthode SIRIS et développement d'un outil informatique pour son application; Rapport de l'étape 1 du projet, Rep. No. DRC-07-73770-04644A, 122 p, INERIS Verneuil en Halatte, France*. <http://www.ineris.fr/siris-pesticides/>.

Liess, M., & von der Oher, P. C. (2005). Analyzing effects of pesticides on invertebrate communities in streams. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 24 (4), 954-965.

Mackay D., P. S. (1991). (1991) Evaluating the multimedia fate of organic chemicals: A level III fugacity model. *Environ Sci Technol*, 25: 427-436.

Moermond, C., Janssen, M., de Knecht, J., Montfort, M., Peijnenburg, W., Zweers, P., et al. (2011). PBT Assessment using revised Annex XIII of REACH: a comparison with other regulatory frameworks. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 8 (2), 359-371.

NORMAN Association. (2012). *NORMAN Association, NORMAN Prioritisation WG: The NORMAN approach for setting priorities among emerging contaminants in Europe: Working Group 1*. http://www.norman-network.net/index.php.php?module=public/workshops/outcomes_wg1&menu2=public/qa_qc/qa_qc, a.

OSPAR. (2006). *Dynamic Selection and Prioritisation Mechanism for Hazardous Substances - New Dynamec Manual*.

Portail Substances, INERIS. (s.d.). *Portail Substances Chimiques, INERIS*. Consulté le Jan 25, 2013, sur <http://www.ineris.fr/substances/fr/>

PPDB, Hertfordshire University. (n.d.). *PPDB - Pesticide Properties Database*. Retrieved Jan 25, 2013, from PPDB website: <http://sitem.herts.ac.uk/aeru/footprint/index2.htm>

Quadrige 2, IFREMER. (s.d.). *Base de données de la surveillance du littoral Quadrige 2*. Consulté le jan 25, 2013, sur <http://wwz.ifremer.fr/institut/Les-sciences-marines/Moyens-nationaux/Centres-de-donnees/Quadrige-2>

RIVM. (2011). *Identifying potential POP and PBT substances - Development of a new Persistence/Bioaccumulation-score*. National Institute for Public Health and the Environment - Report 601356001/2011.

Schafer, R. B., V. Pettigrove, et al. . (2011). Effects of Pesticides Monitored with Three Sampling Methods in 24 Sites on Macroinvertebrates and Microorganisms. *Environ Sci Technol.* , 45 (4), 1665-1672.

Schafer, R. B.; T. Caquet, et al. (2007). Effects of pesticides on community structure and ecosystem functions in agricultural streams of three biogeographical regions in Europe. *Science of the Total Environment* 382(2-3): , 382 (2-3), 272-285.

Schneider, K. et al. (2009). "ToxRTool", a new tool to assess the reliability of toxicological data. *Toxicology Letters* , 189 (2), 138-144.

Schürmann, G., R. U. Ebert, et al. (2011). Quantitative Read-Across for Predicting the Acute Fish Toxicity of Organic Compounds. *Environ Sci Technol* , 45(10): 4616-4622.

SIRIS Pesticides, INERIS. (s.d.). *SIRIS Pesticides*. Consulté le jan 25, 2013, sur <http://www.ineris.fr/siris-pesticides/accueil>
Stockholm Convention. (2011). Available from <http://chm.pops.int/Convention/ConventionText/tabid/2232/Default.aspx>. Geneva, Switzerland: UNECE.

UK Environment Agency. (2007). *Prioritising chemicals for standard derivation under Annex VIII of the Water Framework Directive*. Science Report -SC040038/SR.

UNECE. (1998). *Protocol to the 1979 Convention on Long-range transboundary air pollution on persistent organic pollutants*. Available at <http://www.unece.org/fileadmin/DAM/env/lrtap/full%20text/1998.POPs.e.pdf>. Geneva, Switzerland: United Nations Economic Commission for Europe.

USEPA. (2008). *ECOTOX 4.0 Ecotoxicology Database*. Retrieved Feb 4, 2013, from ECOTOX Database: <http://cfpub.epa.gov/ecotox>

von der Ohe, P. C., V. Dulio, et al. (2011). A new risk assessment approach for the prioritization of 500 classical and emerging organic microcontaminants as potential river basin specific pollutants under the European Water Framework Directive. *Science of the Total Environment* , 409(11): 2064-2077.

10 LISTE DES ANNEXES

| Annexe | Désignation | Nombre de pages |
|----------|---|-----------------|
| Annexe 1 | Méthodes de priorisation d'intérêt pour le milieu aquatique sélectionné pour la conception du référentiel méthodologique du CEP | 2 |

ANNEXE 1

Méthodes de priorisation d'intérêt
pour le milieu aquatique sélectionné
pour la conception du référentiel méthodologique du CEP

Douze méthodes de priorisation de substances chimiques d'intérêt pour le milieu aquatique ont été sélectionnées et analysées avec l'objectif de visualiser leurs caractéristiques principales (critères et indicateurs utilisés) en vue de la conception du référentiel méthodologique du CEP.

Il s'agit de :

- deux méthodes de sélection des substances prioritaires d'intérêt communautaire (plusieurs pays) :
 - ✓ *Méthode UE pour la sélection des substances prioritaires d'intérêt communautaire au sens de l'article 16 de DCE* (Fraunhofer Institute, 1999) ;
 - ✓ *Méthode UE pour la révision de la première liste des substances prioritaires au sens de l'article 16 de la DCE* (INERIS, IOW, 2009)
- deux exemples de méthodes de priorisation pour la définition des « polluants spécifiques de l'état écologique » par des états membres :
 - ✓ *Méthode nationale (Royaume-Uni) pour la sélection des « river basin specific pollutants » (polluants spécifiques pour la définition de l'état écologique au sens de la DCE)* (UK Environment Agency, 2007)
 - ✓ *Méthode nationale (Allemagne) pour la sélection des « river basin specific pollutants » (polluants spécifiques pour la définition de l'état écologique au sens de la DCE)* (LANUV NRW, 2010)
- quatre exemples de méthodes de sélection de substances à inclure comme « substances pertinentes » dans les réseaux de mesure ou à cibler dans des campagnes de mesure exploratoires au niveau national
 - ✓ *méthode BRGM de sélection des substances pour la campagne exceptionnelle d'analyse des substances présentes dans les eaux souterraines* (BRGM, 2011) ;
 - ✓ *méthode AFSSA pour la hiérarchisation des résidus de médicaments d'intérêt pour l'analyse des ressources et des eaux traitées* (AFSSA, 2008) ;
 - ✓ *méthode pour la proposition d'une liste de médicaments à usage humain à surveiller dans les eaux de surface continentales* (Besse, J., Garric, J., 2007) ;
 - ✓ *méthode relative au programme national d'action contre la pollution des milieux aquatiques par certaines substances dangereuses - Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR - Substances Pertinentes 2005)* ;
- deux exemples de méthode de sélection des substances d'intérêt prioritaire pour le milieu marin
 - ✓ *méthode Dynamec d'OSPAR* (OSPAR, 2006);
 - ✓ *rapport IFREMER - Adaptation de la surveillance chimique DCE au contexte des DOM* (IFREMER, 2010).
- autres méthodes :
 - ✓ *méthode SIRIS-pesticides pour la hiérarchisation des substances phytosanitaires en fonction de leur potentiel à atteindre les eaux de surface et les eaux souterraines* (Le Gall, 2007);
 - ✓ *méthode NORMAN pour la priorisation des « substances émergentes »* (NORMAN Association, 2012).

Dans le tableau suivant sont mises en évidence les principales caractéristiques de chaque méthode analysée, notamment pour ces qui concerne les objectifs de priorisation, les substances et les compartiments intéressés.

| | Objectif de la méthode | | | Substances intéressées | | | | Compartiment environnemental | | |
|---|---|---|--|------------------------|------------|---------------------------|-------------------------------|------------------------------|----------------------------|--------------|
| | Priorisation pour campagnes de mesure exploratoires | Sélection subst. « état chimique » ou « état écologique » DCE | Sélection pour actions de réduction / contrôle | Médicaments | Pesticides | Autres subst. dangereuses | Substances d'intérêt émergent | Eaux souterraines | Eaux surface continentales | Eaux marines |
| EC DG ENV Révision liste des Subst. Prioritaires et Dangereuses Prioritaires - Dir. Cadre Eau | | X | | (X) | X | X | (X) | | X | X |
| UK EA "River Basin specific pollutants" | | X | | X | X | X | | | X | X |
| Germany "River Basin specific pollutants" | | X | | X | X | X | | | X | X |
| Méthodes AFSSA Résidus médicamenteux | X | | | X | | | | | | |
| Méthode Cemagref Résidus médicamenteux | X | | X | X | | | | | X | X |
| OSPAR (Dynamec) | | | X | (X) | X | X | | | | X |
| Sélection des substances « pertinentes à surveiller » France national (PNAR) | X | | | | X | X | | | X | |
| Méthode BRGM - Eaux souterraines | X | | | | X | | | X | | |
| SIRIS - pesticides | | | X | | X | | | X | | |
| IFREMER - Adaptation surveillance chimique DCE au contexte DOM | | X | | | X | X | | | | X |
| Méthode NORMAN - substances émergentes | X | X | X | X | X | X | X | | X | X |