



Version

1.0

TOOLS4ENV

AiiDA : Aquatic Impact Indicators DAtabase



–Usermanual–

TOOLS 4 ENV

AiiDA User Manual Version 1.1

© Tools for Environment
4, Rue de la Châtelennie
1635 La Tour-de-Trême
SUISSE

Dr. Jérôme Payet
Email: jerome.payet@cycleco.eu
Ing Odilon Hugonnot
Email: odilon.hugonnot@cycleco.eu

Date: May 2013
Language: Français
Availability: PDF file

Avant-propos

Le manque et la difficulté d'accès aux données écotoxicologiques ainsi que la complexité de mise en œuvre des calculs et des méthodes rendent l'utilisation et la représentativité écologique des indicateurs d'écotoxicité aquatique difficilement exploitable.

Pour remédier à cette problématique l'outil en ligne AiiDA met à disposition plus de 500 000 tests uniques et sourcés sur plus de 3600 espèces et 30 phyla. Cette base de données globale est utilisée pour calculer automatiquement les différents indicateurs d'écotoxicité aquatique ainsi que leurs incertitudes en suivant les TGD officiels (*Technical Guidance Document*). AiiDA permet de couvrir 7500 molécules dont 5400 avec une représentativité écologique de 3 phyla ou plus.

Les indicateurs mis à disposition dans AiiDA sont :

- **HC₅₀ Chronic et Acute** (*hazardous concentration 50%*) : calculé à l'aide de la Méthode AMI issue de la thèse du docteur Jérôme Payet (Payet, 2004). Cet indicateur est utilisé par des modèles comme USEtox pour déterminer les facteurs de caractérisation d'écotoxicité aquatique en eau douce dans le cadre de l'Analyse du Cycle de Vie.
- **HC₅** et **HC_{5,95%}** (*Hazardous Concentration 5 %*) : calculées à l'aide de la méthode proposée par Aldenberg (Aldenberg, 2000) et grâce à la méthode d'extrapolation SSD de l'EPA (EPA, 2005).
- **PNEC** (*Predicted no effect concentration*): déterminé à l'aide du *Technical Guidance Document on Risk Assessment* (EU, 2003). Cet indicateur est utilisé dans les approches analyse de risque et dans le cadre législatif.

Les valeurs ainsi obtenues sont mises à disposition à l'aide d'une plateforme interactive sur Internet qui permet de garder la traçabilité des calculs et de remonter jusqu'à l'ensemble des données sources utilisés. La plateforme permet également de tracer les courbes SSD (*Species Sensitivity Distribution*) et PSD (*Phyla Sensitivity Distribution*) de différentes molécules et de comparer leurs toxicités entre elles.

Pour en savoir plus sur la méthodologie de calcul des différents indicateurs et de leurs incertitudes nous vous invitons à lire le guide méthodologique de l'outil AiiDA, mis à disposition sur la plateforme internet, listant les étapes successives de création des données.

AiiDA propose délibérément une simplification des méthodes de calcul afin de faciliter l'intégration statistiques des données. En ce sens, AiiDA n'a pas pour but de produire des valeurs réglementaires aux utilisateurs, mais simplement de fournir un accès facilité aux données qui permettent le calcul des valeurs réglementaires et d'illustrer ce calcul avec des exemples pratiques. Les résultats d'indicateurs produits par AiiDA sont strictement illustratifs et n'engagent en aucun cas la responsabilité du concepteur de la base de données. Il appartient aux utilisateurs de se référer à la réglementation les concernant pour calculer eux-mêmes les indicateurs d'impact ou de risque sur leur propre responsabilité.

Acronymes

- ACV** : Analyse du Cycle de Vie
- AiiDA** : Aquatic impact indicators database
- AMI** : Assessment of the mean impact
- CAS** : Chemical Abstracts Service
- EC₅₀** : Concentration efficace médiane
- EPA** : *Environmental Protection Agency*
- HC₅** : Hazardous concentration 5 %
- HC₅₀** : Hazardous concentration 50%
- ITIS** : *Integrated Taxonomic Information System*
- PNEC** : *Predicted no effect concentration*
- PSD** : *Phyla Sensitivity Distribution*
- QSAR** : Quantitative structure–activity relationship
- SSD** : *Species Sensitivity Distribution*
- TGD** : *Technical Guidance Document*

Table des matières

| | |
|--|----|
| Contexte et Objectifs | |
| Contexte | 1 |
| Objectifs | 2 |
| Accès au logiciel | |
| Connexion | 4 |
| Home page | 4 |
| Les fonctions de recherche | |
| Data Search | 6 |
| Les fonctionnalités de la recherche de substance | 6 |
| La fonction de comparaison des substances | 6 |
| Tableau de résultats : recherche avancée | 6 |
| Le mode Batch | 7 |
| La base de données substances | 8 |
| Les indicateurs d'écotoxicité aquatique | |
| Description de la substance | 9 |
| HC₅₀ | 10 |
| HC _{50 ALL} : le tableau récapitulatif | 11 |
| HC ₅₀ « Acute », « Chronic », « Acute + Chronic » | 12 |
| HC₅ et HC_{5-95%} | 14 |
| PNEC | 15 |
| Courbes SSD et Graphiques | |
| Les Courbes PSD et SSD | 17 |
| Graphique de comparaison | 19 |
| Comparaison de substances | |
| Comparaison de substances choisies | 20 |
| Les graphiques de comparaison SSD et PSD | 21 |
| Les graphiques de positionnement de toxicité | 22 |
| Comparaison par groupe | 23 |
| Graphique de positionnement de toxicité de groupe | 23 |
| Mise à jour à venir | |
| Les futures évolutions de AiiDA | 24 |

Contexte et objectifs

Ce guide à destination des utilisateurs de la plateforme AïïDA réunit les informations nécessaires à l'obtention des différents indicateurs d'écotoxicité aquatique.

Contexte

Une situation alarmante de l'état des cours d'eau

Selon une étude internationale publiée par la revue *Nature* en 2010 près de 80 % de la population mondiale - soit près de 5 milliards de personnes - vivraient à proximité d'un cours d'eau dégradé ou pollué. Cette situation met en danger l'accès à l'eau et la biodiversité. L'ensemble des études scientifiques mondiales qui découlent des prélèvements aquatiques mettent en évidence la présence de centaines de micropolluants dans la quasi-totalité des cours d'eau des pays industrialisés.

L'écotoxicologie aquatique : un début de réponse

Depuis l'utilisation massive des produits chimiques, de nombreuses conséquences néfastes ont été observées sur l'Homme et son environnement. Dès lors, les scientifiques ont tenté de déterminer et de quantifier la toxicité des substances émises dans le milieu aquatique. On peut définir l'écotoxicologie comme étant l'extension du terme toxicologie, science étudiant les effets d'un polluant sur un organisme, à l'étude de ces effets sur un écosystème. De manière simple on peut dire qu'il s'agit « du domaine qui intègre les effets écologiques et toxicologiques des pollutions chimiques sur les populations, les communautés et les écosystèmes avec le devenir (transport, transformation et dégradation) de ces polluants dans l'environnement » (Forbes *et al.* 1997)

Les tests écotoxicologiques font partie des outils qui ont été mis au point pour évaluer l'impact des substances sur l'environnement. Concrètement un test écotoxicologique est « un essai (ou bioessai) expérimental déterminant l'effet d'un ou de plusieurs produits sur un groupe d'organismes sélectionnés, dans des conditions bien définies » (Keddy *et al.* 1994). Ces tests écotoxicologiques sont des variables primaires qu'il est possible de traiter statistiquement pour aboutir à des indicateurs utilisables dans diverses méthodologies scientifiques et réglementations (Analyse du Risque écotoxicologique, Analyse du Cycle de Vie, étude d'impact, etc...).

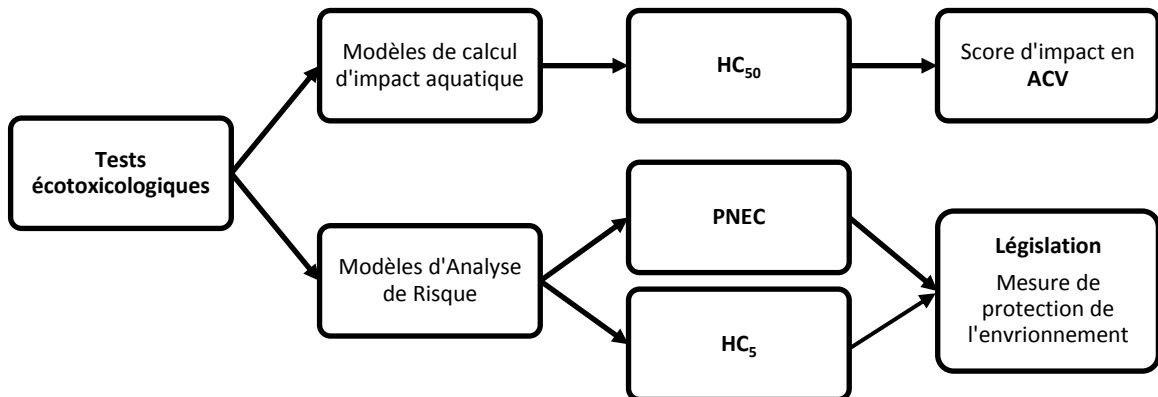


Figure 1.1 : Importance des tests écotoxicologiques en ACV et en Analyse de Risque.

Les difficultés rencontrées en écotoxicologie aquatique

Bien que la réalité et l'importance des impacts écotoxiques que provoquent les substances chimiques industrielles sur les cours d'eau aient été prouvées, ces impacts sont rarement pris en considération dans le cadre de l'éco-conception. Les méthodes pour déterminer ces impacts existent et sont reconnues au niveau international et pourtant elles sont souvent négligées, et ceux à cause de trois principaux points bloquants :

- La manque de données écotoxicologiques dans les bases de données mondiales
- La difficulté d'accès aux données et leur manque de traçabilité
- La complexité des calculs et de la mise en œuvre des méthodes

Dans ce contexte, Tools for environment a pris l'initiative de créer une base de données regroupant l'ensemble des tests écotoxicologiques disponibles afin d'obtenir une base de données écotoxicologique mondiale sourcée la plus exhaustive possible.

Objectifs de AiiDA

Le calcul automatique des différents indicateurs d'impact écotoxicologique

La plateforme AiiDA permet le calcul automatique des différents indicateurs d'écotoxicité aquatique ainsi que leurs incertitudes en suivant les TGD officiels (*Technical Guidance Document*). L'objectif de ce projet et de créer une source de tests écotoxicologiques régulièrement mise à jour, dynamiquement reliée aux calculs des différents indicateurs aquatiques permettant ainsi d'améliorer leur représentativité écologique et d'abaisser leurs incertitudes.

Traçabilité des indicateurs d'écotoxicologie aquatique

La plateforme AiiDA permet de garder la traçabilité des calculs et de remonter jusqu'à l'ensemble des tests sources utilisés. Cette traçabilité, à l'heure actuelle complètement inexiste, est un atout majeur dans le cadre de l'éco-conception.

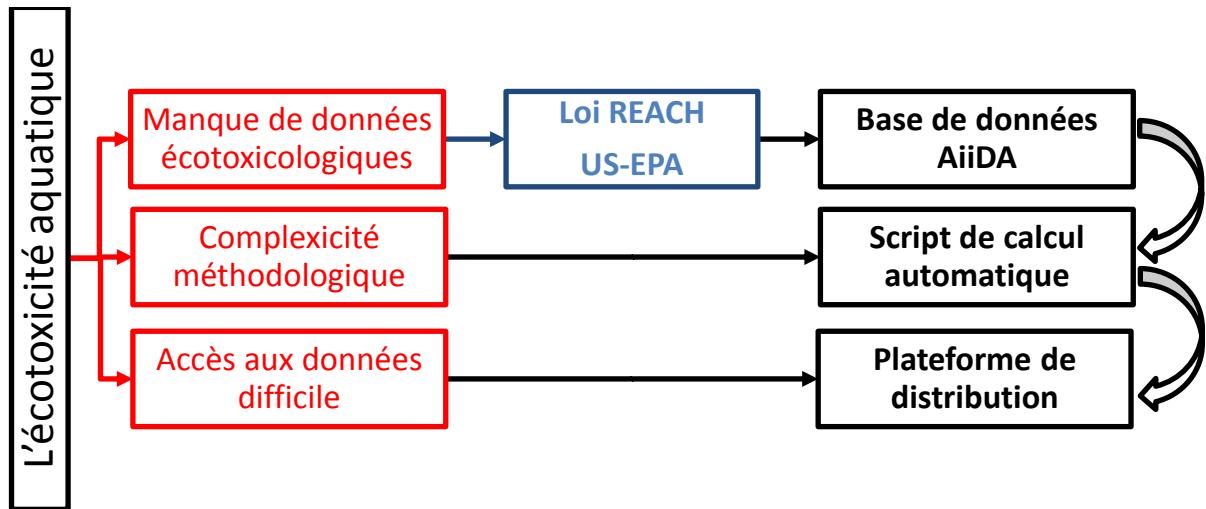


Figure 1.2 : Initiative de Tools4env pour résoudre les problèmes liés à l'écotoxicité aquatique

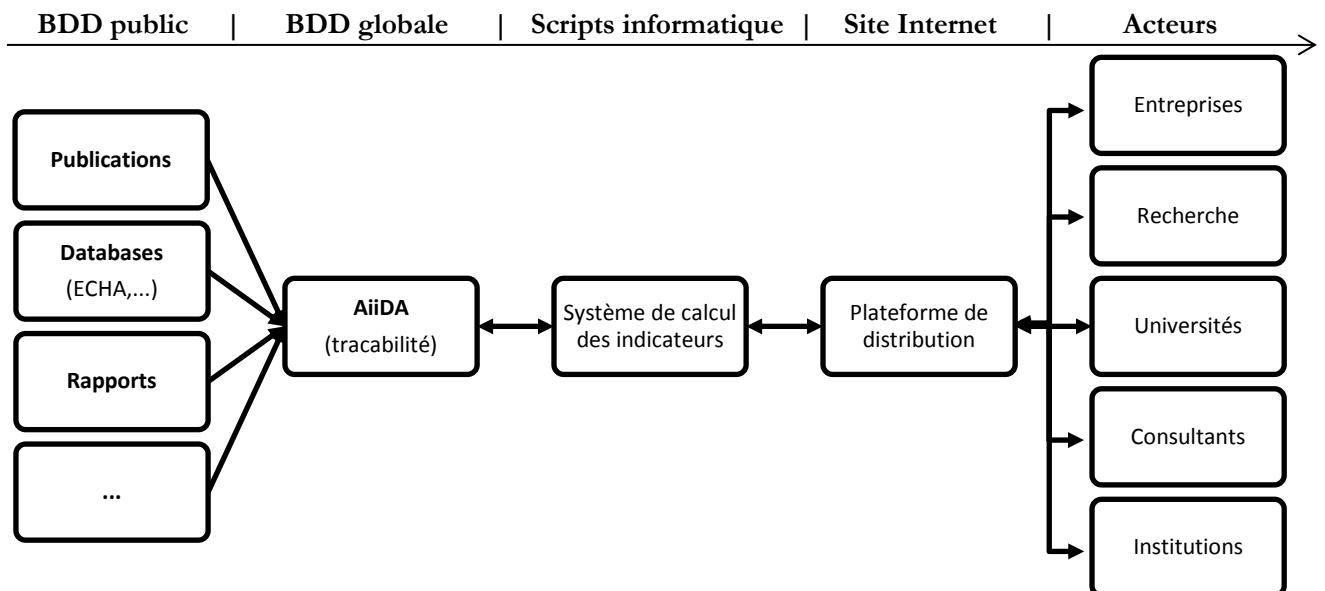


Figure 1.3 : Schéma de principe de la plateforme AiiDA

Accès au logiciel

La connexion et les premiers pas sur AiiDA, prise en main de l'outil.

Connexion

Accéder au logiciel AiiDA

Pour accéder à la plateforme AiiDA, vous devez vous connecter à l'adresse web suivante <http://aiida.tools4env.com>. Cliquer sur l'onglet Login en haut à droite de la page (voir Figure 2.1). Vous devez posséder une licence d'utilisation pour vous connecter. Si ce n'est pas le cas, contacter aiida@tools4env.com.

Figure 2.1 : Interface de connexion à l'outil AiiDA

Home page

Accéder au logiciel AiiDA

Dans le menu déroulant de gauche vous trouverez les différentes sections

- **Home** : la page d'accueil avec les actualités concernant AiiDA.
- **Data Search** : permet d'accéder à la recherche de substance ainsi qu'à la fonction de comparaison de la toxicité des substances entre elles.
- **AiiDA Database** : regroupe les différentes bases contenues dans AiiDA

- **Substances** : donne accès à la base de données des substances classable par nom, par type et par classe QSAR.
- **Species** : donne accès à la base de données des espèces présentent dans AiiDA classable par kingdom, par groupe, par phylum et par nom.
- **Sources Databases** : donne accès aux différentes bases de données écotoxicologiques dont les tests présents dans AiiDA sont issus.
- **All Indicateurs Table** : donne accès à un fichier Excel comprenant les valeurs des indicateurs et de leurs incertitudes pour l'ensemble des substances présentes dans AiiDA
- **AMI Database** : donne accès au pdf regroupant la base de données AMI

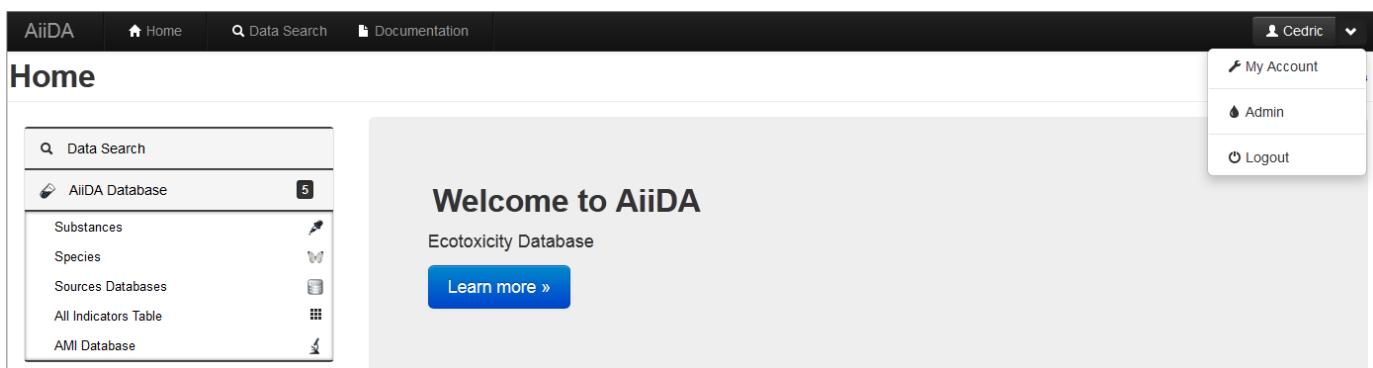


Figure 2.2 : Interface de la page d'accueil AiiDA

Le menu horizontal situé au-dessus de la page permet également d'accéder aux différentes sections de l'outil lorsqu'on ne se trouve plus dans la page d'accueil.

En haut à droite, l'onglet utilisateur, contenant le pseudonyme de l'utilisateur permet d'accéder aux informations du compte (*voir figure 2.3*), à l'aide et permet de se déconnecter de l'outil.

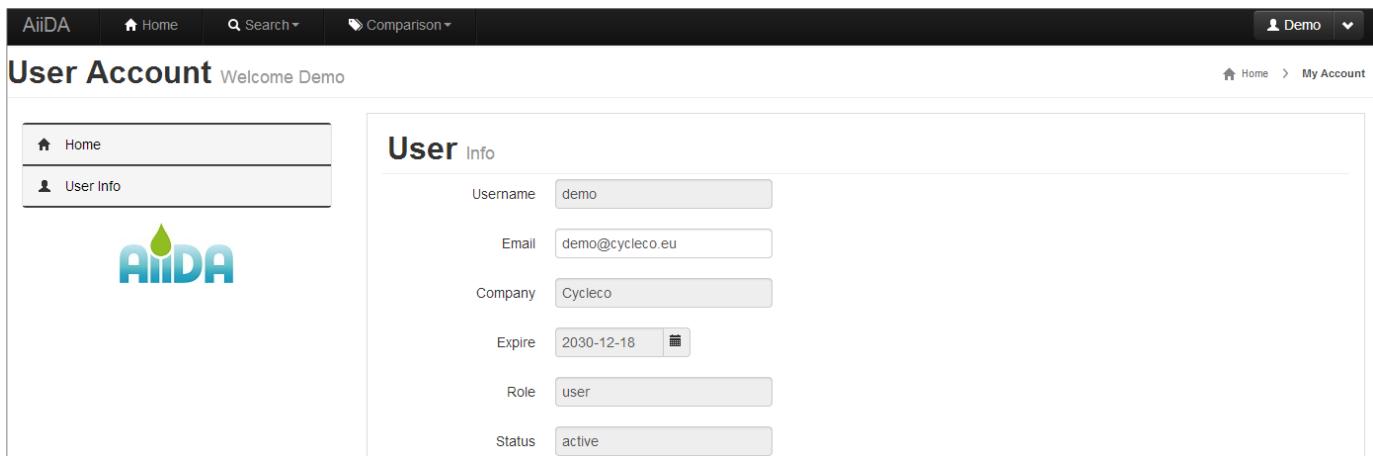


Figure 2.3 : Interface utilisateur de l'outil AiiDA

Les fonctions de recherche

Utilisation de la fonction recherche de substance et du mode Batch pour les requêtes sur plusieurs substances.

⌚ Data Search

Les fonctionnalités de la recherche de substance

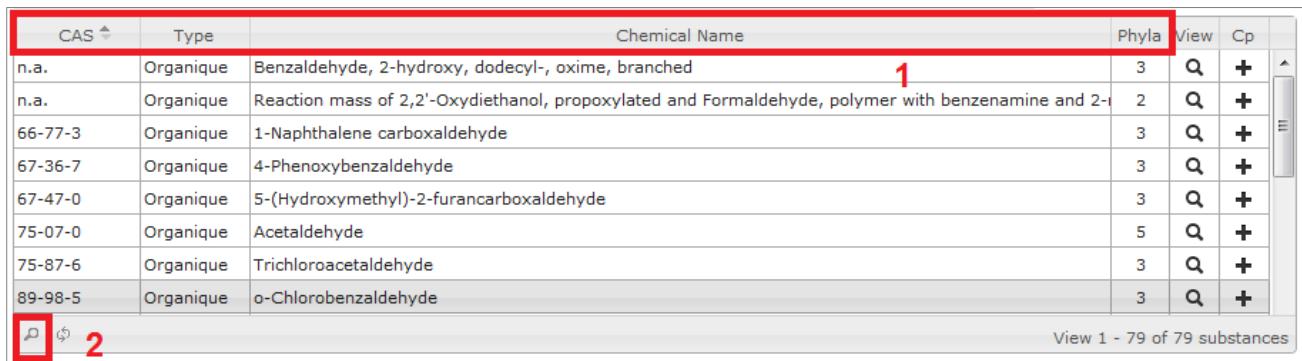
Il existe différents moyens de rechercher une substance dans AiiDA :

Par CAS : en entrant une partie ou l'intégralité du numéro CAS dans la fenêtre de recherche dédiée à cet effet (*voir 1 Figure 6.1*).

Par Nom : en entrant le nom de la molécule ou d'un synonyme. Il est possible d'entrer une partie seulement du nom de la substance. A partir de 3 caractères l'outil AiiDA vous proposera automatiquement une liste de noms potentiels pouvant correspondre à votre recherche dans le tableau de réponse (*voir 2 Figure 6.1*).

Tableau de résultats : recherche avancée

Lorsqu'une recherche renvoie plusieurs réponses, AiiDA dresse un tableau de résultats. Ce tableau de résultats peut être classé par ordre de numéro CAS croissant ou décroissant, par ordre alphabétique des noms de molécules ou par nombre de phyla représenté en cliquant sur les entêtes de colonnes (*voir 1 Figure 3.2*).



| CAS | Type | Chemical Name | Phyla | View | Cp |
|---------|-----------|--|-------|------|-----|
| n.a. | Organique | Benzaldehyde, 2-hydroxy, dodecyl-, oxime, branched | 1 | 3 | Q + |
| n.a. | Organique | Reaction mass of 2,2'-Oxydiethanol, propoxylated and Formaldehyde, polymer with benzenamine and 2- | 2 | 3 | Q + |
| 66-77-3 | Organique | 1-Naphthalene carboxaldehyde | 3 | Q | + |
| 67-36-7 | Organique | 4-Phenoxybenzaldehyde | 3 | Q | + |
| 67-47-0 | Organique | 5-(Hydroxymethyl)-2-furancarboxaldehyde | 3 | Q | + |
| 75-07-0 | Organique | Acetaldehyde | 5 | Q | + |
| 75-87-6 | Organique | Trichloroacetaldehyde | 3 | Q | + |
| 89-98-5 | Organique | o-Chlorobenzaldehyde | 3 | Q | + |

View 1 - 79 of 79 substances

Figure 3.2 : Interface du tableau de résultats

Il est également possible d'effectuer une recherche avancée dans la liste de résultats en utilisant la petite loupe située en bas à gauche du tableau (*voir 2 Figure 3.2*). Une nouvelle fenêtre s'exécute alors permettant de faire des recherches plus précises sur chaque paramètre (*voir Figure 3.3*). Cette fonction de recherche avancée permet de combiner plusieurs requêtes. Dans l'exemple de la figure 3.3, elle permet d'afficher uniquement les molécules n'ayant pas « Nitro » dans leur nom, appartenant aux organiques, représentées sur plus de 3 phyla et ayant un Chlore dans leur formule chimique.

The Advanced Search interface is a window titled 'Advanced Search'. It contains a search bar with the text 'Nitro' and a 'Find' button. The search bar is highlighted with a red box and labeled '2'. The search bar has a dropdown menu set to 'does not contain'. The search term 'Nitro' is highlighted with a red box and labeled '2'. Below the search bar are four search criteria: 'Chemical Name' (does not contain 'Nitro'), 'Type' (equal 'Organique'), 'Phyla' (greater or equal '3'), and 'Smyle' (contains 'cl'). The 'Smyle' criteria is highlighted with a red box and labeled '3'. At the bottom left is a 'Reset' button, and at the bottom right is a 'Find' button.

Figure 3.3 : Interface de la recherche avancée

Le mode Batch (*non disponible en version démo*)

Rechercher une liste de substances

AiiDA permet de rechercher automatiquement une liste de substance. Il suffit pour cela de sélectionner le mode Batch que l'on retrouve dans l'onglet « **Batch** », puis renseigner la liste de CAS en sautant une ligne après chaque valeur (*voir 1 Figure 3.4*). Pour lancer l'exécution du Batch cliquer sur « **Execute Batch** » (*voir 2 Figure 3.4*). Un fichier Excel contenant les résultats de votre requête vous sera alors proposé en téléchargement.

The Batch mode interface is a window titled 'Batch Substances Search'. It contains a 'List of CAS' input field with a red box around it and labeled '1'. The input field contains a list of CAS numbers: 50000, 50033, 50066, 50099, 50180, 50215, 50226, 50237, 50248, and 50271. Below the input field is a text placeholder 'CAS separated by a line break'. At the bottom right is a 'Execute Batch' button with a red box around it and labeled '2'.

Figure 3.4 : Interface du mode Batch

Ce fichier Excel téléchargeable est organisé en 3 feuillets, « HC50 » avec les résultats et les incertitudes de l'indicateur HC₅₀, « Not Found » avec l'éventuel rapport d'erreur et « Figure » avec les statistiques de votre recherche (voir Figure 3.5).

| 1 | CAS | Min | HC50 | Max | Phylum | Must Sensitive | Less Sensitive |
|---|-------|-------|------|------|-------------------|----------------|--------------------|
| 2 | 50000 | 9,48 | 25,3 | 67,4 | 7 Phaeophycophyta | : 2.77 | Ascomycota : 286 |
| 3 | 50033 | 0,67 | 2,63 | 10,3 | 3 Arthropoda | : 1.1 | Chlorophyta : 7.75 |
| 4 | 50066 | 0,186 | 13,3 | 947 | 3 Mollusca | : 0.526 | Chordata : 255 |
| 5 | 50099 | 0,129 | 1,05 | 8,57 | 3 Chordata | : 0.367 | Chlorophyta : 6.04 |

Figure 3.5 : Fichier Excel de réponse à la requête Batch

⌚ La base de données substances

Le tableau de toutes les substances présentes dans AiiDA

Il est également possible de lancer une recherche dans la base de données de substances AiiDA ou toutes les molécules sont répertoriées (voir Figure 3.5). Il suffit pour cela de renseigner les fenêtres de recherche « **CAS Number** » ou « **Chemical Name** » pour automatiquement filtrer le tableau de résultat (voir 1 Figure 3.5). Il est également possible d'affiner la recherche en sélectionnant un des filtres proposés dans la liste déroulant « **Molecule Type** » ou la « **QSAR Class** » (voir 2 Figure 3.5). Une fois la molécule identifiée, pour accéder aux indicateurs il suffit de cliquer sur la loupe située à droite du tableau (voir 3 Figure 3.5).

| CAS | Molecule Type | Chemical Name |
|---------|---------------|--|
| 50-29-3 | Pesticide | CHLOROPHENOXOXYACETAMIDE |
| 50-31-7 | Pesticide | 2,3,6-Trichlorobenzoic acid |
| 52-68-6 | Pesticide | P-(2,2,2-Trichloro-1-hydroxyethyl)phosphonic acid dimethyl ester |
| 56-72-4 | Pesticide | Phosphorothioic acid O-(3-chloro-4-methyl-2-oxo-2H-1-benzopyran-7-yl) O,O-diethyl ester |
| 56-95-1 | Pesticide | N,N'-Bis(4-chlorophenyl)-3,12-dimino-2,4,11,13-tetraazatetradecanoimide, Diacetate |
| 57-74-9 | Pesticide | 1,2,4,5,6,7,8,8-Octachloro-2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-4,7-methano-1H-indene |
| 58-89-9 | Pesticide | (1alpha,2alpha,3beta,4alpha,5alpha,6beta)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane |
| 59-50-7 | Pesticide | 4-Chloro-3-methylphenol |
| 60-57-1 | Pesticide | (1aR,2R,2aS,3S,6R,6aR,7S,7aS)-rel-3,4,5,6,9,9-Hexachloro-1a,2,2a,3,6,6a,7,7a-octahydro-2,7:3,6-dimethanonaphth[2,3-b]oxirene |
| 62-73-7 | Pesticide | Phosphoric acid 2,2-dichloroethyl dimethyl ester |
| 70-30-4 | Pesticide | 2,2'-Methylenebis[3,4,6-trichlorophenol] |
| 72-20-8 | Pesticide | 3,4,5,6,9,9-Hexachloro-1a,2,2a,3,6,6a,7,7a-octahydro-[2,7:3,6-dimethanonaphth[2,3-b]oxirene,[1a alpha,2 beta,2a beta,3 alpha,6 alp |

Figure 3.5 : La base de données substances de AiiDA

A noter qu'il est possible de faire de même dans la base de données Species pour retrouver une espèce particulière ou pour identifier un phylum. La base Species est directement reliée à la base ITIS (*Integrated Taxonomic Information System*).

Les indicateurs d'écotoxicité aquatique

Accéder aux différents indicateurs d'écotoxicité aquatique, aux incertitudes et aux tests sources après avoir sélectionné une substance.

📖 Description de la substance

Les informations clefs sur chaque substances

AiiDA Home Search Comparison

Description HC₅₀ HC₅ PNEC Figure

Substance Description

| | |
|--------------|--|
| Id : | 1039 |
| CAS : | 87865 |
| Name : | Pentachlorophenol |
| Smile : | Oc(c(c(c(c1Cl)Cl)Cl)Cl)c1Cl |
| QSAR : | Phenols |
| Weight : | 266.34 (g/mol) |
| Solubility : | 14 (mg/L) |
| Use : | Preservative\ANTIMICROBIAL AGENT\HERBICIDE |
| Type : | Pesticide |

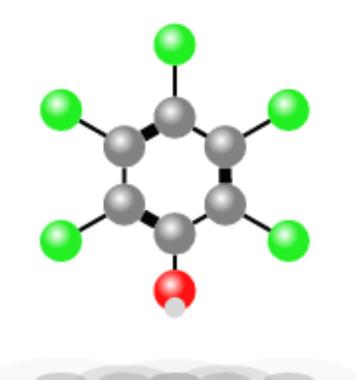


Figure 4.1 : Description de la substance

Après avoir sélectionné une molécule grâce à la fonction recherche, vous êtes automatiquement redirigé vers une interface de résultats possédant plusieurs onglets. Le premier de ces onglets (*voir figure 4.1*) intitulé « **Description** » résume les informations clés de la substance répertoriées dans la base AiiDA. Ces données ont permis de faire tourner le modèle A.M.I (*Assessment of the Mean Impact, cf le guide méthodologique de l'outil AiiDA*).

Une représentation en 3D de la molécule est également proposée. Il est possible de le faire pivoter avec un clic gauche de la souris et de zoomer à l'aide de la molette ou du clic droit (avertissement : la représentation en 3D n'est pas disponible sous Internet Explorer).

HC₅₀

Hazardous Concentration 50%

Le deuxième onglet intitulé « **HC₅₀** » permet d'accéder aux informations relatives à l'indicateur Hazardous Concentration 50%. Cet onglet est lui-même subdivisé en 4 sous-onglets (*voir figure 4.2*).

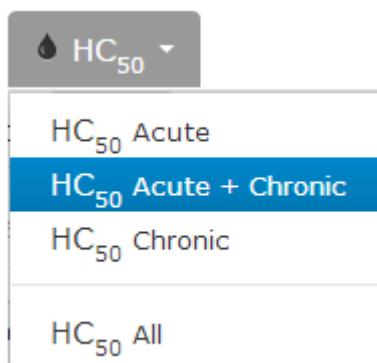


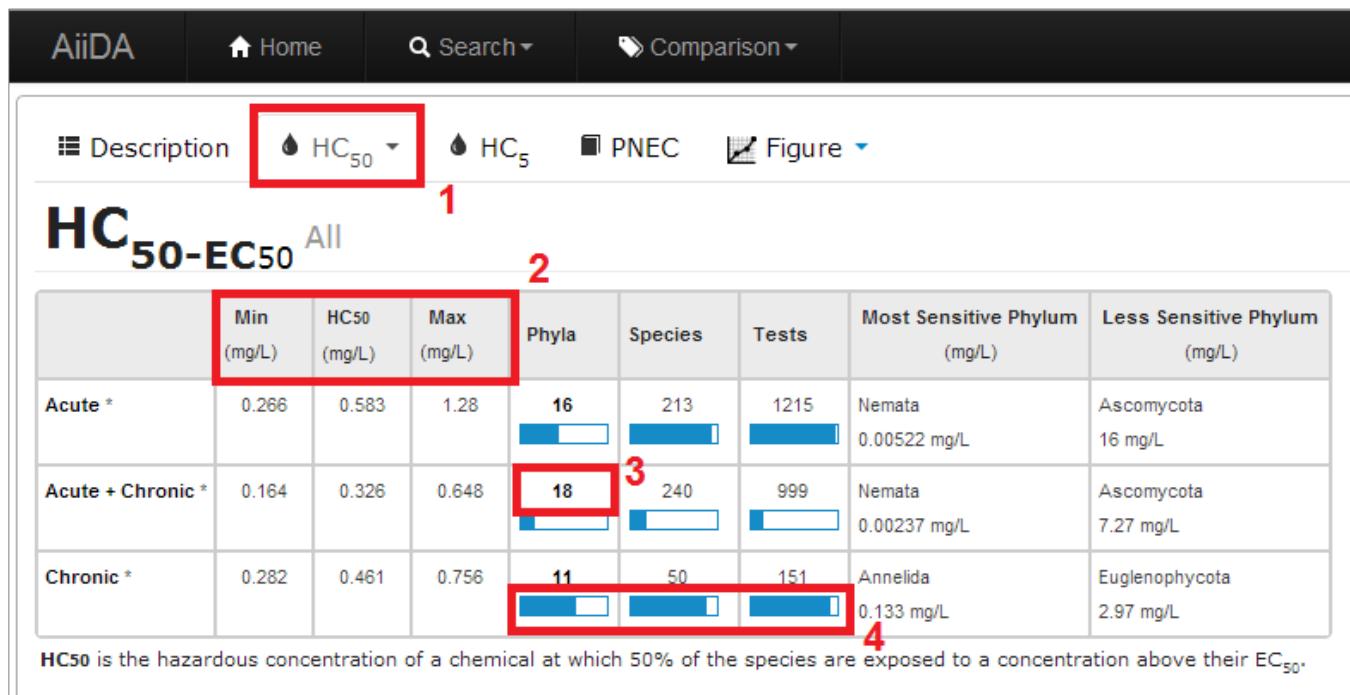
Figure 4.2 : Sous-catégories de l'indicateur HC₅₀

« **HC₅₀ Acute** » regroupe les informations relatives à la HC₅₀ Acute calculée à partir des tests d'écotoxicité aquatique aigus seulement.

« **HC₅₀ Acute + Chronic** » (*voir 3 figure 4.3*) regroupe les informations relatives à la HC₅₀ calculée à partir de l'ensemble des tests chroniques et aigus (*cf guide méthodologique AiiDA*).

« **HC₅₀ Chronic** » regroupe les informations relatives à la HC₅₀ Chronic calculée à partir des tests d'écotoxicité aquatique chroniques seulement.

« **HC₅₀ All** » (*voir 1 figure 4.3*) regroupe et synthétise sous forme de tableau l'ensemble des informations sur les différentes HC₅₀ calculées par AiiDA.

HC₅₀ ALL: le tableau récapitulatif**Figure 4.3 : Interface de l'onglet HC₅₀ All**

Ce tableau récapitulatif contient 3 lignes, une pour chaque indicateur. On y retrouve différents niveaux d'informations qu'il est possible de classer par ordre croissant ou décroissant en cliquant sur les entêtes de colonnes :

Les valeurs de HC₅₀ et leurs incertitudes : (voir 2 figure 4.3), « **Mean** » donne la valeur de HC₅₀ en mg/L et « **Min** », « **Max** » les valeurs d'encadrement respectivement minimum et maximum en prenant en compte les incertitudes.

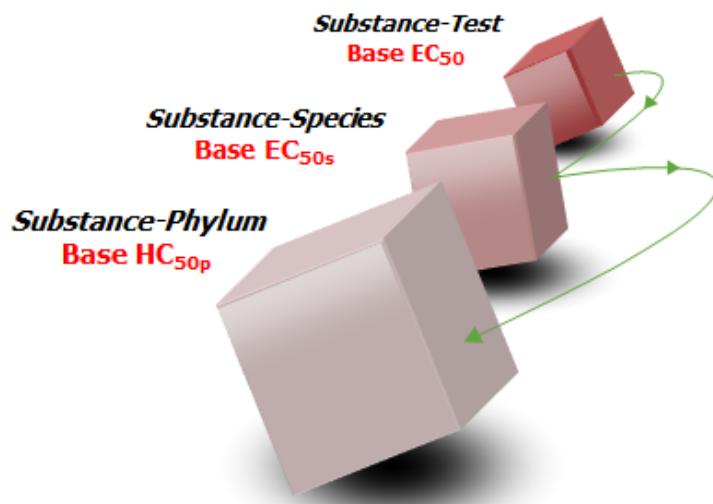
Les informations statistiques sur les tests : les colonnes « **Phyla** », « **Species** » et « **Tests** » indiquent respectivement le nombre de phyla, d'espèces et de tests qui ont été utilisés pour calculer l'indicateur ainsi que ses incertitudes. Les barres de couleur bleu (voir 4 figure 4.3) représentent le degré de pureté de l'indicateur, en faisant le rapport des tests dont les valeurs n'ont pas été extrapolées par rapport au nombre de tests totaux.

Le phylum le plus sensible et le moins sensible : les deux dernières colonnes « **Most Sensitive Phylum** » et « **Less Sensitive Phylum** » permettent d'identifier le phylum le plus sensible et le phylum le plus résistant à la substance concernée.

Pour obtenir des informations supplémentaires sur chaque indicateur il suffit de cliquer sur le nombre de phyla (voir 3 figure 4.3) pour être redirigé vers la liste des phyla utilisés pour le calcul de la HC₅₀.

HC₅₀ « Acute », « Chronic », « Acute + Chronic »

Ces 3 onglets donnent accès à l'ensemble des informations qui ont permis de calculer les différents indicateurs. Ces informations sont réparties sur trois niveaux, phyla, espèces et tests.



Chacun de ces 3 niveaux correspond à un onglet secondaire, les phyla utilisés sont répertoriés dans l'onglet « **Phyla** » (voir 1 figure 4.3). On retrouve le même tableau récapitulatif mais cette fois au niveau des phyla. Il suffit ensuite de cliquer sur l'un de ces phyla (voir 2 figure 4.3) pour avoir accès aux informations sur les espèces qui le composent dans l'onglet « **Species** » (voir 3 figure 4.3).

AiiDA

Home Search Comparison

Description HC₅₀ HC₅ PNEC Figure

Acute + Chronic 1 Phyla 2 Species 3 Tests

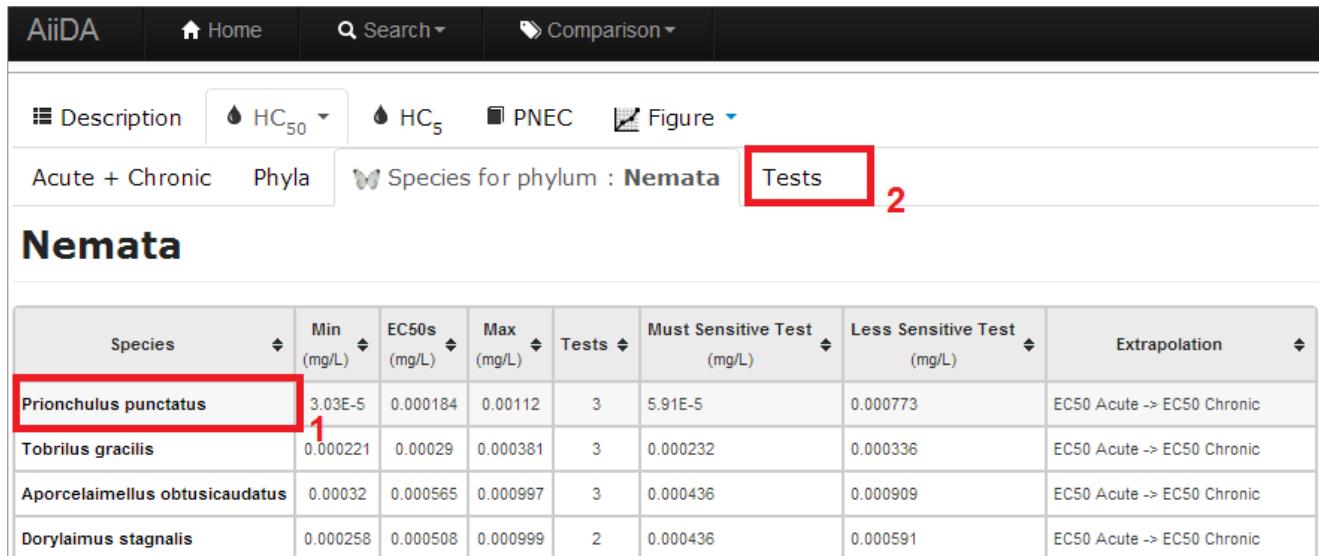
Phyla Acute + Chronic

| Phylum | Min (mg/L) | HC50p (mg/L) | Max (mg/L) | Species | Tests | Most Sensitive Species (mg/L) | Less Sensitive Species (mg/L) |
|----------|------------|--------------|------------|---------|-------|--|----------------------------------|
| Nemata | 0.0005 | 0.00237 | 0.0113 | 10 | 22 | 0.000184 <i>Prionchulus punctatus</i> | 1.44 <i>Monhystera disjuncta</i> |
| Arth | 2 0.441 | 0.668 | 1.01 | 67 | 236 | 0.0236 <i>Parastenocaris germanica</i> | 147 <i>Deleatidium</i> |
| Chordata | 0.0624 | 0.0779 | 0.0973 | 71 | 450 | 0.00455 <i>Oncorhynchus clarki</i> | 3.55 <i>Xenopus laevis</i> |

Figure 4.3 : Interface de l'indicateur HC₅₀ Acute + Chronic et tableau récapitulatif des phyla

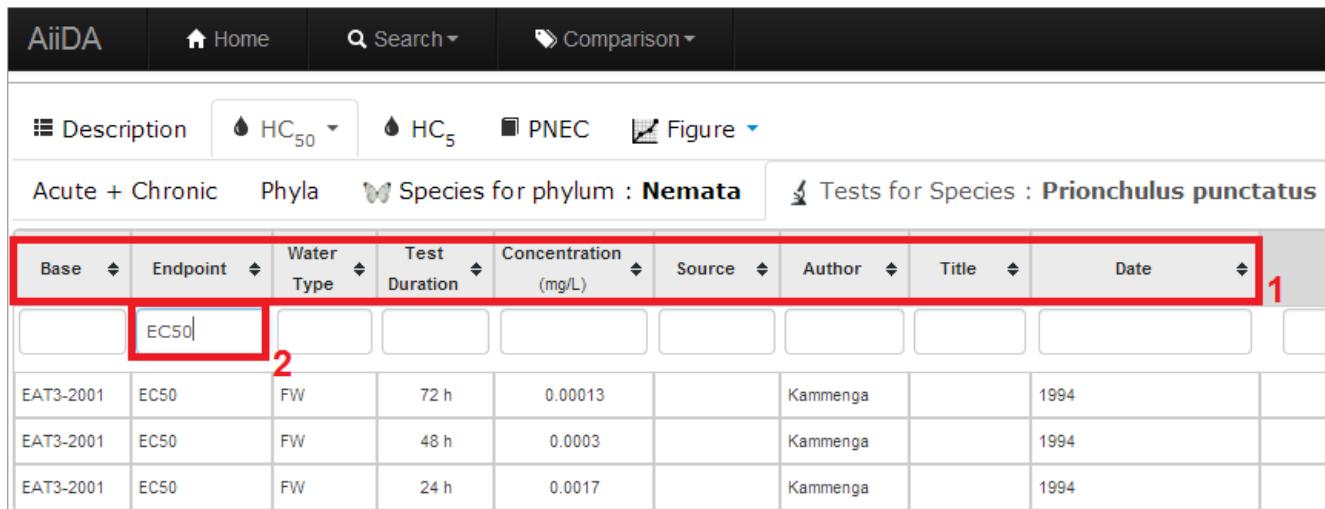
Dans l'onglet « **Species** » on retrouve le même tableau récapitulatif mais cette fois au niveau des espèces (figure 4.4). Il suffit ensuite de cliquer sur l'une de ces espèces (voir 1 figure 4.4) pour avoir accès aux tests sources qui la composent dans l'onglet « **Tests** » (voir 2 figure 4.4).

Dans l'onglet « **Tests** » on trouve un tableau de sources qui nous renseigne sur les tests écotoxicologiques qui ont servis au calcul (voir 1 figure 4.5). Il est possible de trier ou de filtrer les tests en utilisant la fenêtre de recherche située au-dessus de chaque colonne (voir 2 figure 4.5).



| Species | Min (mg/L) | EC50s (mg/L) | Max (mg/L) | Tests | Must Sensitive Test (mg/L) | Less Sensitive Test (mg/L) | Extrapolation |
|--------------------------------|------------|--------------|------------|-------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| Prionchulus punctatus | 3.03E-5 | 0.000184 | 0.00112 | 3 | 5.91E-5 | 0.000773 | EC50 Acute -> EC50 Chronic |
| Tobrilus gracilis | 0.000221 | 0.00029 | 0.000381 | 3 | 0.000232 | 0.000336 | EC50 Acute -> EC50 Chronic |
| Aporcelaimellus obtusicaudatus | 0.00032 | 0.000565 | 0.000997 | 3 | 0.000436 | 0.000909 | EC50 Acute -> EC50 Chronic |
| Dorylaimus stagnalis | 0.000258 | 0.000508 | 0.000999 | 2 | 0.000436 | 0.000591 | EC50 Acute -> EC50 Chronic |

Figure 4.4 : Tableau récapitulatif des espèces présentent dans le phylum Nemata



| Base | Endpoint | Water Type | Test Duration | Concentration (mg/L) | Source | Author | Title | Date |
|-----------|----------|------------|---------------|----------------------|--------|----------|-------|------|
| | EC50 | FW | 72 h | 0.00013 | | Kammenga | | 1994 |
| EAT3-2001 | EC50 | FW | 48 h | 0.0003 | | Kammenga | | 1994 |
| EAT3-2001 | EC50 | FW | 24 h | 0.0017 | | Kammenga | | 1994 |

Figure 4.5 : Tableau de sources pour l'espèce *Prionchulus punctatus*

HC₅ et HC_{5-95%}

Hazardous Concentration 5%

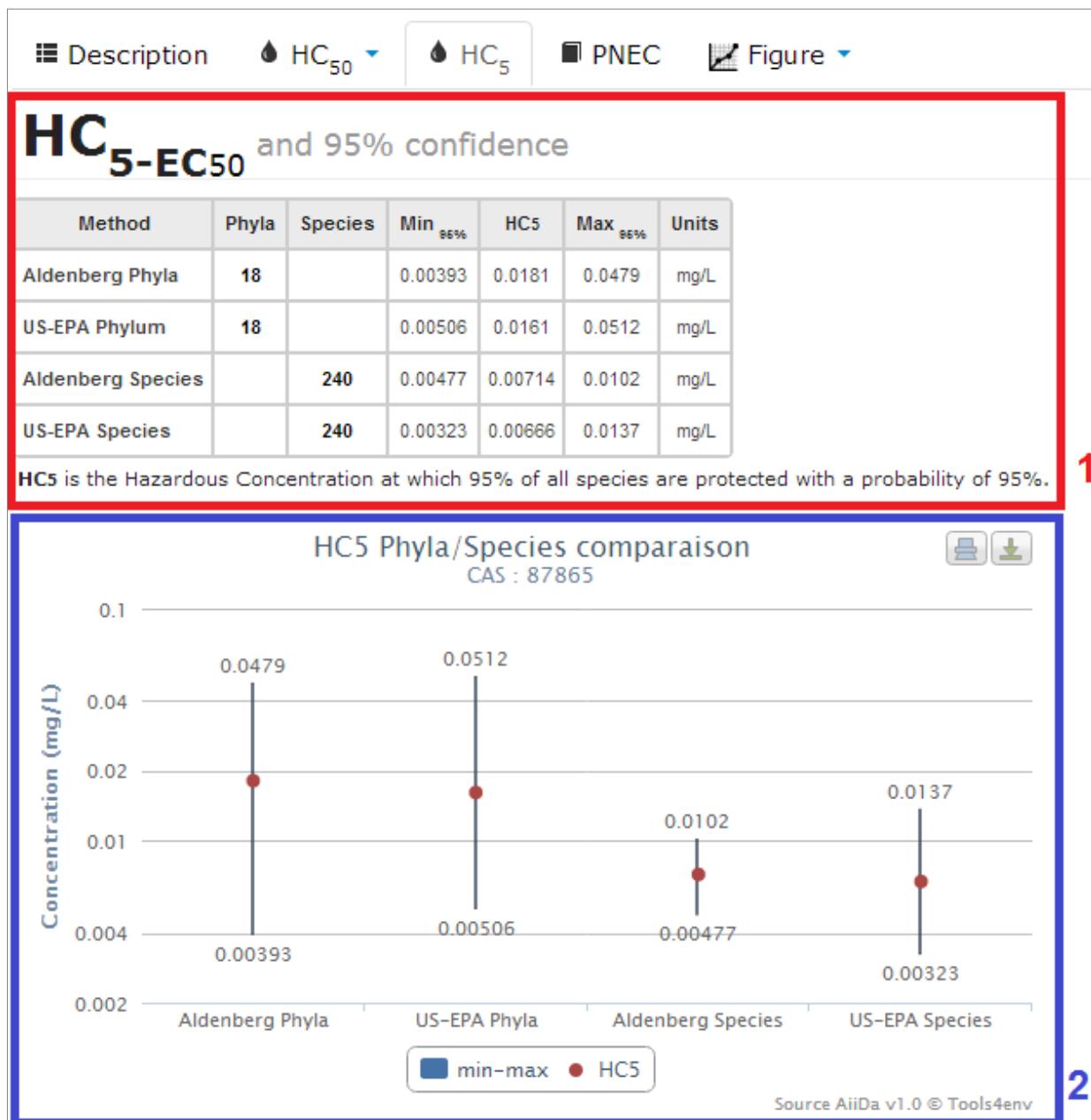


Figure 4.6 : Tableau récapitulatif et graphique interactif de l'indicateur HC₅

Le troisième onglet intitulé « HC₅ » permet d'accéder aux informations relatives à l'indicateur Hazardous Concentration 5%. AiiDA permet de calculer cet indicateur selon deux méthodes (cf guide méthodologique AiiDA):

- Méthode Aldenberg
- Méthode de l'US-EPA

Le tableau récapitulatif contient quatre lignes (*voir 1 figure 4.6*), deux pour chaque méthode. En effet, l'indicateur HC_5 peut être calculé pour les phyla et pour les espèces (*pour plus de détails voir le guide méthodologique de l'outil AiiDA*). On y retrouve le nombre total de phyla et d'espèces ayant servis au calcul ainsi que les intervalles de confiances à 95%. Pour obtenir plus d'informations sur les tests sources utilisés pour le calcul de l'indicateur il suffit de cliquer sur le nombre d'espèces ou de phyla pour être redirigé.

Afin de pouvoir interpréter plus facilement les différentes valeurs de l'indicateur HC_5 AiiDA met à disposition un graphique interactif comparant les différentes valeurs à l'échelle logarithmique. Il est possible d'afficher ou de cacher les intervalles de confiance pour faciliter la comparaison (*voir 2 figure 4.6*).

◆ PNEC

Predicted No-Effect Concentration

L'onglet intitulé « **PNEC** » permet d'accéder aux informations relatives à l'indicateur *Predicted No-Effect Concentration*. Cette concentration sans effet prévisible peut être utilisée pour évaluer les risques pour les organismes aquatiques, elle désigne une concentration pour laquelle il n'est pas attendu d'effet sur l'ensemble des organismes. Le tableau récapitulatif donne accès aux informations suivantes :

- La PNEC en mg/L
- Le facteur de sécurité (*AF*) : ce paramètre dépend du nombre de tests aigus et chroniques disponible dans la base pour le calcul de la PNEC. Il permet de prendre en compte la variabilité et les incertitudes. Il divise la concentration la plus faible observée afin de prévenir les risques éventuels d'une sous représentativité écologique (*pour plus de voir le guide méthodologique de AiiDA*).
- L'espèce retenue comme la plus sensible à la substance ainsi que son phylum.
- Le nombre de tests aigus et chroniques ainsi que leurs répartitions au sein des espèces et des phyla utilisés pour déterminer le facteur de sécurité. Ce niveau d'informations permet de juger de la pertinence de la PNEC.

Pour accéder aux informations du test source qui a été retenu pour déterminer la valeur de la PNEC il suffit de cliquer sur la valeur de cette dernière (*voir 1 figure 4.7*). Un deuxième tableau apparaîtra (*voir 2 figure 4.7*) donnant accès aux détails du test comme par exemple la base d'origine, le endpoint, la durée, l'auteur, le titre, la source, la date de publication etc...

| Description | | HC ₅₀ | HC ₅ | PNEC | Figures | | | Search | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----------|------------------------|-----------------|--------------|---------------------------------|--|--|---------|-------|--|------------------|----------|------------------------|---------------|--------------|--------|--------|---------|----------|------|----|-------|---------|---------------------------------|--|--|-------|--------|----|-------------------|---------------|------|-----|----|-----|----|----|--|
| PNEC and Assessment Factor | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">PNEC : (mg/L)</th> <th rowspan="2">AF</th> <th rowspan="2">Most Sensitive Species</th> <th rowspan="2">Phylum</th> <th colspan="3">Acute</th> <th colspan="3">Chronic</th> <th rowspan="2"></th> </tr> <tr> <th>Tests</th> <th>Species</th> <th>Phyla</th> <th>Tests</th> <th>Species</th> <th>Phyla</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0.0004</td> <td>10</td> <td>Elodea canadensis</td> <td>Magnoliophyta</td> <td>1411</td> <td>214</td> <td>17</td> <td>170</td> <td>50</td> <td>12</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> | | | | | | | | | | | PNEC : (mg/L) | AF | Most Sensitive Species | Phylum | Acute | | | Chronic | | | | Tests | Species | Phyla | Tests | Species | Phyla | 0.0004 | 10 | Elodea canadensis | Magnoliophyta | 1411 | 214 | 17 | 170 | 50 | 12 | |
| PNEC : (mg/L) | AF | Most Sensitive Species | Phylum | Acute | | | Chronic | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | Tests | Species | Phyla | Tests | Species | Phyla | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 0.0004 | 10 | Elodea canadensis | Magnoliophyta | 1411 | 214 | 17 | 170 | 50 | 12 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Source PNEC: Predicted No-Effect Concentration is the concentration below which exposure to a substance is not expected to cause adverse effects. | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <p style="text-align: center;">1 Data Source PNEC 2</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Base</th> <th>Endpoint</th> <th>Water Type</th> <th>Test Duration</th> <th>Conc. (mg/L)</th> <th>Source</th> <th>Author</th> <th>Title</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Aquire_5</td> <td>EC50</td> <td>FW</td> <td>21 d</td> <td>0.004</td> <td>Environ. Pollut.153(1): 199-206</td> <td>Arts,G.H.P., J.D.M. Belgers, C.H. Hoekzema, and J.T.N.M. Thissen</td> <td>Sensitivity of Submersed Freshwater Macrophytes and Endpoints in Laboratory Toxicity Tests</td> </tr> </tbody> </table> | | | | | | | | | | | Base | Endpoint | Water Type | Test Duration | Conc. (mg/L) | Source | Author | Title | Aquire_5 | EC50 | FW | 21 d | 0.004 | Environ. Pollut.153(1): 199-206 | Arts,G.H.P., J.D.M. Belgers, C.H. Hoekzema, and J.T.N.M. Thissen | Sensitivity of Submersed Freshwater Macrophytes and Endpoints in Laboratory Toxicity Tests | | | | | | | | | | | | |
| Base | Endpoint | Water Type | Test Duration | Conc. (mg/L) | Source | Author | Title | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| Aquire_5 | EC50 | FW | 21 d | 0.004 | Environ. Pollut.153(1): 199-206 | Arts,G.H.P., J.D.M. Belgers, C.H. Hoekzema, and J.T.N.M. Thissen | Sensitivity of Submersed Freshwater Macrophytes and Endpoints in Laboratory Toxicity Tests | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

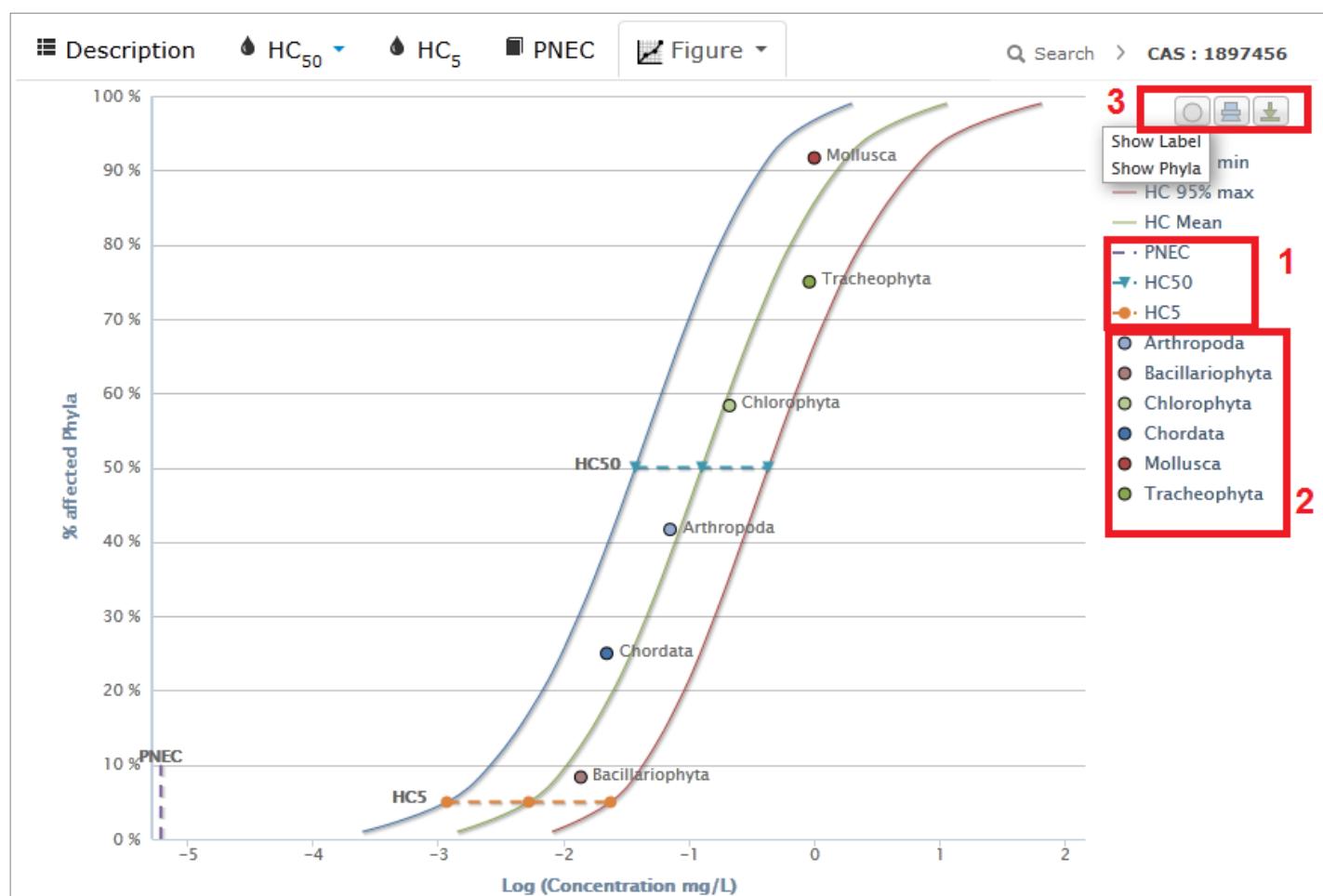
Figure 4.7: Tableau récapitulatif et source de la PNEC

Courbes SSD et Graphiques

Afin de faciliter l'interprétation des différents indicateurs d'écotoxicité aquatique AiiDA met à disposition une série de graphiques interactifs et intuitifs.

Les Courbes PSD et SSD

Phyla Sensitivity Distribution, Species Sensitivity Distribution



Les courbes SSD donnent une représentation du pourcentage d'espèces ou de phyla affectés en fonction du logarithme de la concentration d'un polluant. Dans le cas idéal cette relation effet-concentration suit une distribution log-normale, ce qui donne pour les SSD une courbe en S en représentation cumulée (*voir la figure 5.1*). Un intervalle de confiance peut également être déterminé. Celui-ci est d'autant plus étroit que la quantité et la qualité des données à disposition est bonne. Cet intervalle permet de calculer une valeur de sureté à 95%. La HC₅-95% par exemple, indique la concentration de pesticide pour laquelle 5% des espèces seront affectées avec une probabilité de 95%.

On retrouve également, sur le même graphique, les différents indicateurs d'écotoxicité aquatiques fournies par AiiDA, PNEC, HC₅ et HC₅₀ ainsi que leurs intervalles de confiance à 95% (*voir 1 figure 5.1*). Ceci permet de réunir rapidement l'intégralité des informations disponibles sur une même figure et de s'en servir pour analyser la toxicité de la substance. Il est possible d'afficher ou de cacher les phyla, ou les espèces en cliquant simplement sur leur nom dans la liste correspondante (*voir 2 figure 5.1*). A noter également que l'on peut, en pointant avec la souris les différents points du graphique, afficher une boîte d'information qui renseigne sur la concentration et le pourcentage d'espèces ou de phyla affectés. Les graphiques sont imprimables et téléchargeable sous forme d'image JPEG ou de fichier PDF et peuvent être customisés en affichant ou en cachant l'ensemble des labels ou des Phyla/Espèces (*voir 3 figure 5.1*).

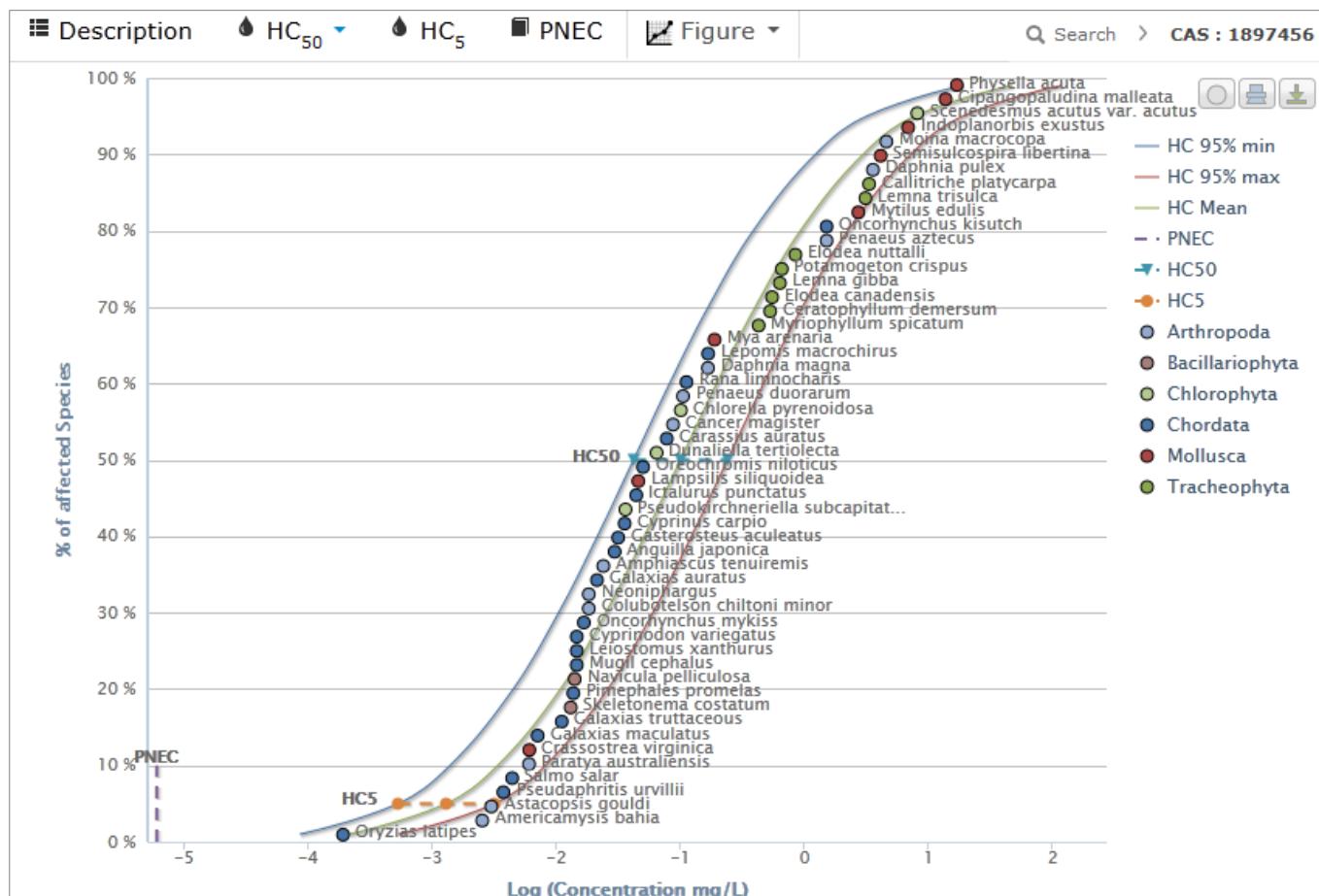


Figure 5.2: Courbe SSD, Species Sensitivity Distribution

Graphique de comparaison

Comparaison d'une substance aux autres de la base

L'onglet intitulé « **Substance comparison** » permet d'accéder au graphique classant les différentes molécules de la base de données AiiDA par ordre de toxicités croissantes. Le point coloré représente le $\log(\text{HC}_{50})$ de la molécule que vous êtes en train d'étudier et la courbe bleue l'ensemble des $\log(\text{HC}_{50})$ des molécules présentes dans la base de données (voir figure 5.3). D'un simple coup d'œil cette figure permet d'avoir un ordre d'idée de la toxicité de cette molécule comparer aux autres.

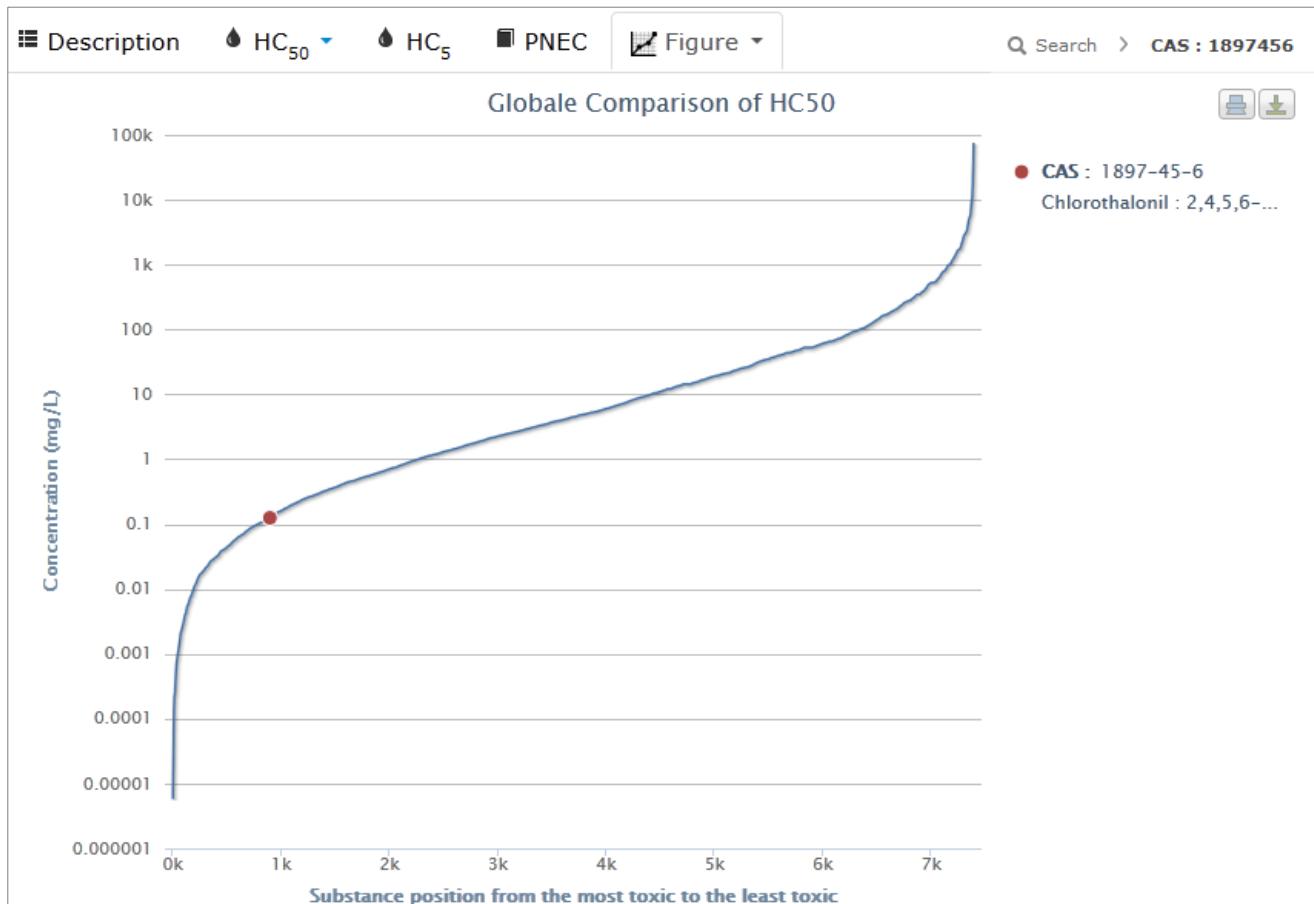


Figure 5.3: Courbe de répartition des substances de la base AiiDA par toxicité croissante

Tous les graphiques présents dans AiiDA offre également la possibilité de zoomer sur une zone particulière. Il suffit pour cela de garder le clic gauche de la souris enfoncé et de surligner la zone souhaitée. Pour dézoomer et revenir à une vision globale il suffit de cliquer sur le lien « **reset zoom** » qui s'affiche en haut à droite lors d'un zoom.

Comparer des substances

Le module de comparaison de substances et de groupe dans AiiDA

Comparaison de substances choisies

Comparer la toxicité de substances sélectionnées

Dans la rubrique « **Data Search** » à l'aide du signe « plus » située à droite du tableau (voir *Figure 6.1a*) il est possible de sélectionner jusqu'à 5 molécules afin de comparer leurs toxicités. Une fois sélectionnées les molécules apparaissent dans le tableau « **Selected Sustances** » (voir *Figure 6.1b*). Il suffit alors de cliquer sur le bouton « **Compare** » pour accéder aux différents graphiques de comparaison. A noter que le module de comparaison de substances ne permet de comparer que 5 substances au maximum. Pour comparer d'avantage de substances il est nécessaire d'effectuer une comparaison de groupe (ce référer au paragraphe suivant « Comparaison par groupe »).

The screenshot shows the AiiDA interface with the following elements:

- Header:** AiiDA, Home, Data Search, Documentation, Cedric.
- Search Bar:** Data Search and Substances Comparison. It includes a "Select Substance" button (highlighted with a red box labeled 1) and a "Comparison Graph" button.
- Search Results Table:** A table titled "Select substances 5 maximum" with columns: CAS, Type, Chemical Name, Phyla, View, Cp. The table lists various substances like Salicylaldehyde, Benzaldehyde, Acetaldehyde, etc. A "Selected" column contains icons for each row. A blue box labeled 3 highlights the "Selected" column header.
- Selected Substances Panel:** A panel titled "Selected substances" containing a list of substances with their CAS numbers and names. It includes a "Delete All" button and a "Compare" button. A green box labeled 4 highlights this panel.
- Selected Class Panel:** A panel titled "Selected Class" with a "Class Filter" search bar and a "Class compare" button. A green box labeled 5 highlights this panel.

Figure 6.1a : Interface de la fonction de recherche et de comparaison de substances

Pour optimiser la comparaison de molécules il est possible de filtrer les substances présentes dans la base AiiDA. Pour **filtrer par Type, par Classe ou par Database** il suffit d'utiliser les onglets de sélections (voir 3 Figure 6.1a). Il est également possible d'utiliser la fonction de recherche avancée en parallèles afin d'affiner au maximum votre requête (voir Chapitre 3 : Tableau de résultats et recherche avancée).

| Selected substances | |
|--|---------------------------------------|
| CAS : 1897-45-6 | 1 <input checked="" type="checkbox"/> |
| Name : 2,4,5,6-Tetrachloro-1,3-benzeneddicarbonitrile | <input type="checkbox"/> |
| CAS : 17804-35-2 | <input type="checkbox"/> |
| Name : N-[1-((Butylamino)carbonyl]-1H-benzimidazol-2-yl]carbamic ac... | <input type="checkbox"/> |
| CAS : 60207-90-1 | <input type="checkbox"/> |
| Name : 1-[[2-(2,4-Dichlorophenyl)-4-propyl-1,3-dioxolan-2-yl]methyl... | 2 <input type="checkbox"/> |
| Delete All Compare » | |

Figure 6.1b: Tableau de sélection de substances pour comparaison

Une fois le module de comparaison lancé vous aurez accès à une nouvelle page contenant 4 onglets (voir figure 6.2).



Figure 6.2: Module de comparaisons avec ses 4 onglets

Les graphiques de comparaison SSD et PSD

Les deux premiers onglets (voir 1 figure 6.2) permettent d'accéder aux graphiques de comparaison PSD et SSD (*Phyla/Species Sensitivity Distribution*).

Ces graphiques mettent à disposition les valeurs des différents indicateurs HC_{50} , HC_5 et PNEC (voir 2 et 3 figure 6.3) pour chacune des substances choisies ainsi que le nombre de phyla ou d'espèces représentées (voir 1 figure 6.3). Chaque valeur affichée sur le graphique est cliquable et renvoie directement aux détails de calculs et aux tests qui ont permis de la déterminer. Ces graphiques permettent d'identifier la substance la moins impactante pour l'environnement aquatique.

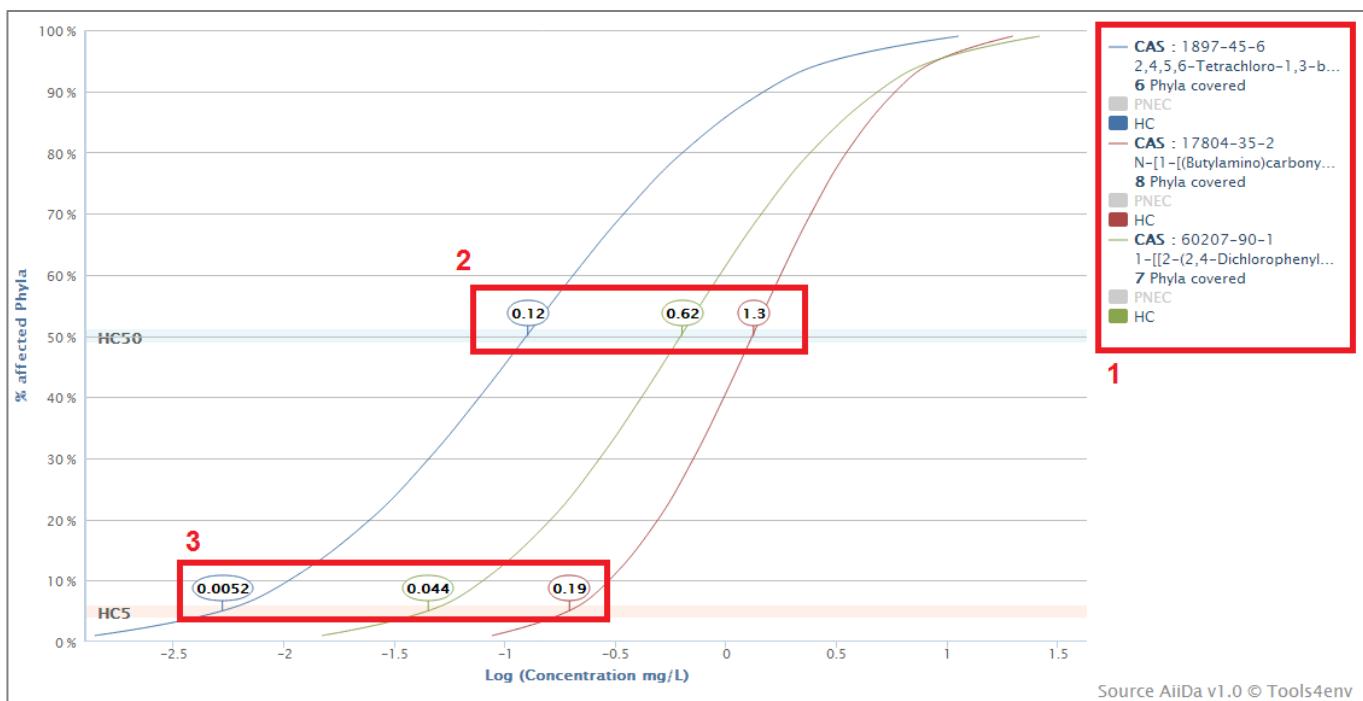


Figure 6.3: Graphique de comparaison PSD de 3 pesticides

Les graphiques de positionnement de toxicité

Les deux derniers onglets (*voir 2 figure 6.2*) permettent d'accéder aux graphiques de positionnement de la toxicité des molécules par rapport à l'ensemble des substances présentes dans AiiDA. Le positionnement est calculé soit par rapport aux phyla, soit par rapport aux espèces et permet d'avoir rapidement une vision de l'impact des substances.

Les courbes 1 et 2 de la figure 6.4 représentent respectivement l'ensemble des HC_{50} et des HC_5 classées par ordre de toxicité décroissante

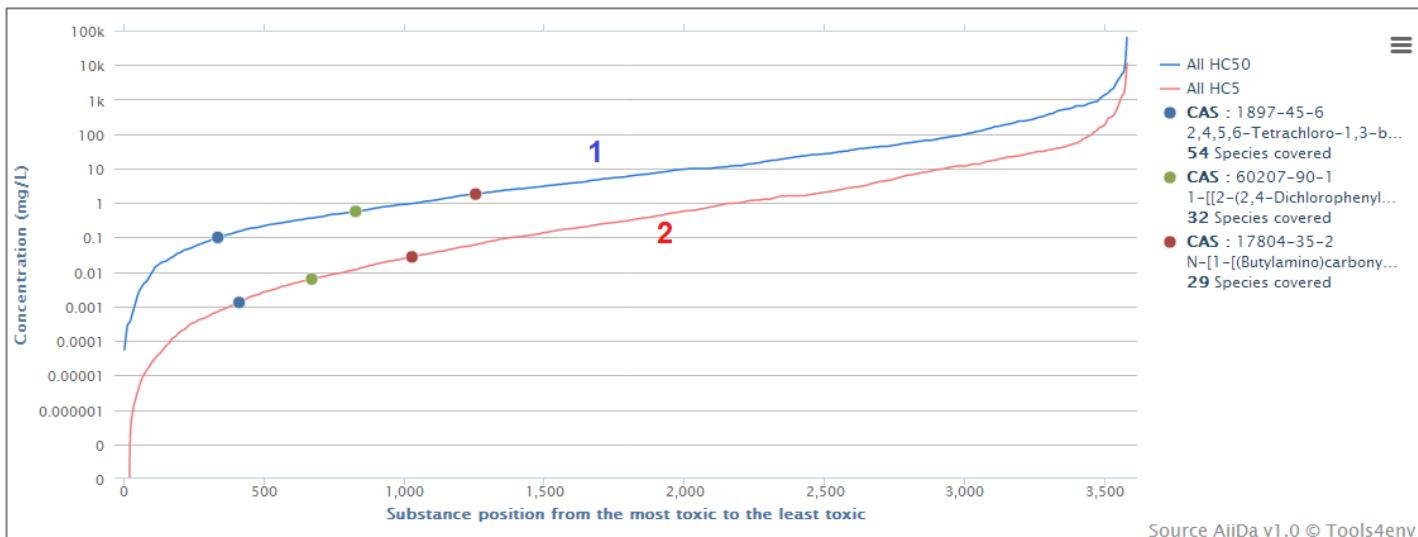


Figure 6.4: Graphique de positionnement de la toxicité calculé pour les espèces

Comparaison par groupe

Comparer la toxicité de substances aux propriétés voisines

Dans la rubrique « **DataSearch** » vous pouvez sélectionner un groupe de molécules grâce à la fenêtre de recherche « **Group Filter** » (voir 1,2 *figure 6.5*). Il suffit ensuite de cliquer sur le bouton « **Group Compare** » pour accéder aux différents graphiques de comparaison de groupe. A noter que le module de comparaison de groupes ne permet de comparer que 500 substances au maximum. Il est également possible d'affiner votre groupe de substances en utilisant la fonction de recherche avancée et en ajoutant des filtres sur les différents paramètres.

| CAS | Type | Chemical Name | Phyl | View | Comp |
|---------|-----------|---|------|------|------|
| n.a. | Organique | Benzaldehyde, 2-hydroxy, dodecyl-, oxime, branched | 3 | Q | + |
| n.a. | Organique | Reaction mass of 2,2'-Oxydiethanol, propoxylated and Formaldehyde, polymer with | 2 | Q | + |
| 66-77-3 | Organique | 1-Naphthalene carboxaldehyde | 3 | Q | + |
| 67-36-7 | Organique | 4-Phenoxybenzaldehyde | 3 | Q | + |
| 67-47-0 | Organique | 5-(Hydroxymethyl)-2-furancarboxaldehyde | 3 | Q | + |
| 75-07-0 | Organique | Acetaldehyde | 5 | Q | + |
| 75-87-6 | Organique | Trichloroacetaldehyde | 3 | Q | + |
| 89-98-5 | Organique | o-Chlorobenzaldehyde | 3 | Q | + |

Selected Group

Group Filter 1

Group compare » 2

Figure 6.5 : Sélection du groupe de substances « aldéhyde »

Graphique de positionnement de toxicité de groupe

Une fois votre groupe sélectionné et le module de comparaison exécuté, un graphique de positionnement par toxicité décroissante vous sera proposé. Ce graphique vous permettra d'identifier la toxicité d'un groupe caractéristique par rapport à l'ensemble de la base de données AiiDA et de déterminer sa dangerosité pour l'environnement aquatique.

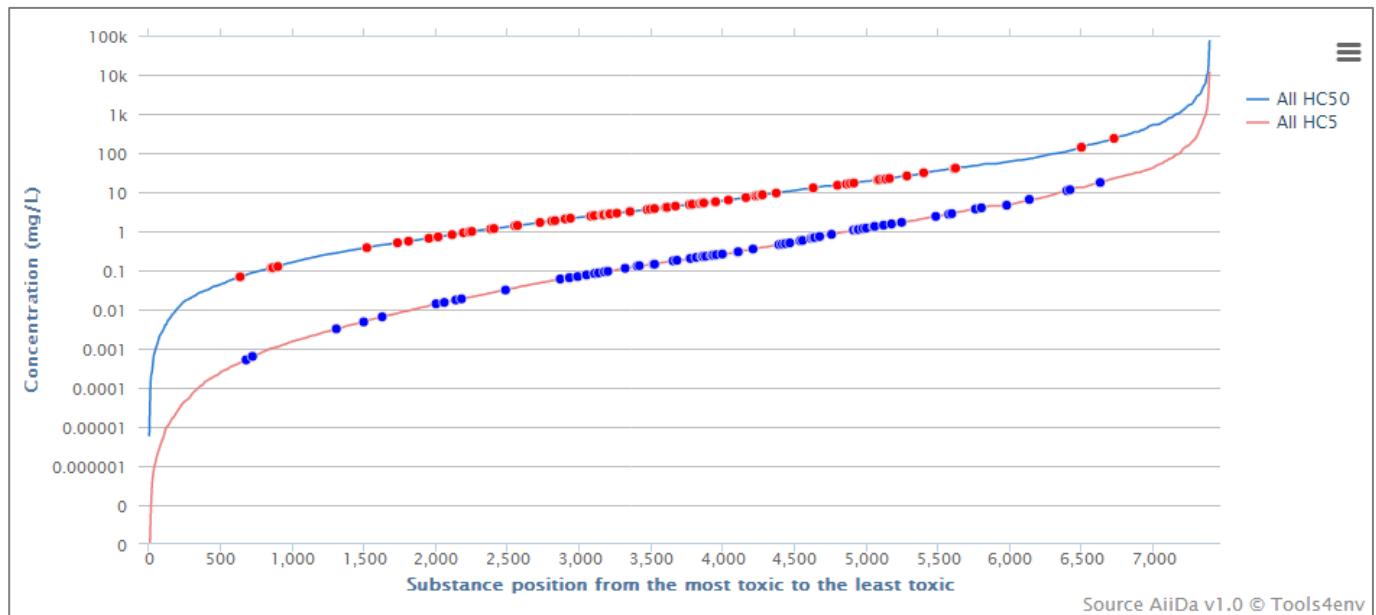


Figure 6.6 : Graphique de positionnement du groupe de substances « aldéhyde »

Mises à jour à venir

Les potentielles évolutions de l'outil AiiDA et les mises à jours à venir

⚠️ Les futures évolutions de AiiDA

Mise à jour des bases de données et amélioration des fonctionnalités de l'outil

L'ajout des nouveaux tests écotoxicologiques sera réalisé annuellement.

Les indicateurs d'écotoxicité aquatique seront mis à jour en cas d'éventuel changement de la réglementation ou des méthodes de calcul dans les guides techniques officiels.

A terme, dans une prochaine version, l'outil AiiDA pourra être enrichi par les différents acteurs eux-mêmes. Ils pourront créer leur propre compte et proposer directement leurs propres tests écotoxicologiques qui seront incorporés à la base après vérification et validation par l'administrateur. Ces différents acteurs seront autant de sources susceptibles de venir enrichir la base de données globale, ils permettront également de vérifier la cohérence des données.

Autres idées : si vous souhaitez voir apparaître des améliorations de AiiDA dans les futures versions écrivez-nous pour nous faire connaître vos attentes aiida@tools4env.com