

Approches pour répondre aux besoins en matière de données dans l'évaluation des risques

Série de fiches de renseignements : Sujets relatifs aux évaluations des risques des substances en vertu de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* (LCPE)

Sur cette page

- Introduction
- Génération de données expérimentales
- Outils de prévision
 - Utilisation d'analogues : Approches de lecture croisée et des catégories
 - Modélisation computationnelle, notamment des relations quantitatives structure-activité (RQSA)

Introduction

Le manque de données expérimentales disponibles sur les caractéristiques de la substance (par exemple, les propriétés physicochimiques, liées au devenir ou toxicologiques de la substance) est un problème fréquent lors de l'évaluation des risques. En l'absence de données expérimentales, les approches décrites ci-dessous peuvent être utilisées à des fins d'évaluation des risques. D'autres détails sur le processus de collecte de données se retrouvent sur la page sur la [collecte de renseignements](#).

Génération de données expérimentales

Dans certains cas, il peut être possible de mener des études pour générer les données expérimentales nécessaires à une évaluation.

Les intervenants peuvent contribuer à réduire l'incertitude dans une évaluation en partageant l'information sur une substance qui n'est pas accessible au public, ou en réalisant des essais sur une substance. Le gouvernement peut également exiger la génération de types précis de données expérimentales. La LCPE, en vertu de l'alinéa 71(1)c), permet au ministre de l'Environnement d'exiger des personnes qui se livrent à des activités de fabrication ou d'importation d'une substance soupçonnée d'être toxique de mener des essais et de lui envoyer les résultats. Avant l'introduction d'une nouvelle substance sur le marché canadien, l'alinéa 84(1)c) de la LCPE permet au ministre de

l'Environnement d'exiger d'obtenir les résultats des essais jugés nécessaires pour déterminer si une substance est effectivement ou potentiellement toxique. Cependant, une entreprise peut refuser la demande d'essai si elle décide de ne pas fabriquer ou importer la substance.

Les données expérimentales peuvent également être générées par des chercheurs à Environnement et Changement climatique Canada et Santé Canada. Les deux ministères ont des programmes de recherche visant à appuyer l'évaluation et la gestion des produits chimiques.

Outils de prévision

Il n'est pas toujours possible de générer de nouvelles données lorsque la nécessité d'une évaluation est établie. Des efforts continus sont également déployés pour remplacer, réduire et optimiser l'utilisation des essais de toxicité sur des animaux et pour favoriser la mise en œuvre d'autres approches scientifiques. L'utilisation d'outils de prévision pour combler les besoins en matière de données est une solution de rechange efficace.

Les outils de prévision utilisés dans l'évaluation des risques associés aux substances sont généralement conçus en partant de l'hypothèse que les substances qui sont semblables sur le plan structurel auront des propriétés physicochimiques similaires, se comporteront de la même façon chez les humains, chez d'autres organismes et dans l'environnement, et produiront des effets toxiques similaires. Ainsi, les données expérimentales relatives à des substances similaires peuvent être utilisées pour prévoir le comportement d'une substance pour laquelle il manque des données. Il existe plusieurs manières d'atteindre cet objectif.

Utilisation d'analogues : Approches de lecture croisée et des catégories

La fiche de renseignements sur [l'utilisation des analogues et de la lecture croisée dans l'évaluation des risques](#) fournit une description détaillée des approches de lecture croisée et des catégories. Une approche de lecture croisée tient compte des données expérimentales sur des analogues pour combler les lacunes en matière de données d'une substance cible. Les données d'une ou de plusieurs substances analogues ayant une structure chimique ou des propriétés similaires peuvent être utilisées pour estimer les données manquantes de la substance cible évaluée. Bien que semblable à l'approche de lecture croisée, l'approche des catégories peut être utilisée pour combler l'insuffisance de données d'un groupe de substances similaires (une catégorie).

Modélisation computationnelle, notamment des relations quantitatives structure-activité (RQSA)

La modélisation computationnelle peut être utilisée pour prévoir les principaux paramètres essentiels à l'évaluation des risques. Par exemple, la méthode des RQSA établit une relation entre les caractéristiques ou les propriétés structurales d'une substance et son comportement. De multiples substances sont utilisées sous forme d'ensembles d'apprentissage afin de définir et d'établir des relations entre certains descripteurs ou propriétés des substances et leur toxicité/activité. Des algorithmes (comme les méthodes statistiques) sont ensuite utilisés pour élaborer des modèles de RQSA qui établissent des prévisions sur la toxicité/l'activité des substances à l'extérieur de l'ensemble d'apprentissage. Les modèles peuvent baser leurs prévisions sur :

- les relations observées entre les propriétés physicochimiques et le comportement des substances, souvent fondées sur une simple équation de régression (par exemple, une augmentation de la toxicité avec un coefficient de partage octanol-eau accru)
- les relations observées entre divers fragments structuraux d'une substance et ses propriétés ou comportements (par exemple, chaque atome de carbone supplémentaire dans un alcane permet de prévoir l'augmentation du point d'ébullition)
- la façon dont certains types de substances se comportent, où les règles et les exceptions sont intégrées à un modèle visant à prévoir l'activité d'une substance (par exemple, si une substance présente un groupe fonctionnel connu pour se lier à l'ADN et ne possède pas d'autres caractéristiques qui entraînerait sa détoxification, elle serait alors considérée comme un agent mutagène potentiel)

L'utilisation de modèles de prévision pour générer des données peut être rapide et peu coûteuse, mais elle a également ses limites. Les modèles peuvent ne pas être en mesure d'établir des prévisions précises pour les substances qui se trouvent à l'extérieur du « domaine d'application ». Par exemple, lorsque les ensembles d'apprentissage, qui sont des substances chimiques utilisées pour créer le modèle, ne comprennent pas de substances similaires à la substance d'intérêt. Certains types de substances peuvent être particulièrement difficiles à « modéliser » relativement à certains paramètres, dans la mesure où le modèle n'établit pas facilement des relations entre les caractéristiques ou les propriétés structurales d'une substance et son comportement. Parmi les exemples de substances difficiles à modéliser, on retrouve les polymères, les surfactants, les substances ionisables, les pigments et les colorants, les substances présentant des coefficients de partage octanol eau élevés et les substances de composition inconnue ou variable, les produits de réaction complexes ou les matières biologiques (UVCB). La confiance à l'égard de la prévision du modèle pour une substance donnée est toujours prise en considération au moment de décider d'utiliser des données modélisées dans une évaluation des risques et quel poids lui accorder dans la prise de décision.

Dans une évaluation des risques, il est possible d'utiliser n'importe quelle combinaison de ces approches afin de répondre aux besoins en matière de données. Lorsque les

données sont disponibles au moyen de plusieurs approches, ces différentes sources de données sont prises en considération dans le cadre d'une approche basée sur le poids de la preuve.