

Sujet de thèse (2021-2024)

Caractérisation de la contamination des eaux de surface par le couplage d'analyses non-ciblées en spectrométrie de masse avec des analyses d'écotoxicologie

Contexte scientifique

De nombreux micropolluants émergents sont présents dans les eaux de surface soumises à des pressions anthropiques (rejets urbains, ruissellement sur les chaussées...) mais leur comportement et leurs transformations sont peu connus. L'analyse de micropolluants organiques est généralement réalisée en ciblant des molécules spécifiques, mais le développement de la spectrométrie de masse haute résolution (HRMS) permet d'analyser de manière non-ciblée les échantillons et d'identifier des produits inconnus ou des produits de transformation de molécules connues. L'identification de molécules d'intérêt parmi l'importante somme de signaux détectés reste cependant fastidieuse. Conjointement, les impacts des micropolluants sur les organismes aquatiques peuvent être évalués à l'aide de méthodes d'analyse en écotoxicologie. De nombreux tests peuvent être effectués selon les effets recherchés. Il s'agit de mesurer les conséquences sur le vivant (modèles biologiques) pour évaluer soit l'impact sur l'activité métabolique (mortalité, synthèse cellulaire, production énergie, alimentation); soit des dysfonctionnements physio-pathologiques (perturbation endocrinienne, activité hormonale en lien avec la reproduction, génotoxicité). Ces conséquences peuvent être observées sur des modèles biologiques allant de la cellule à l'organisme entier (algues, levures, bactéries, champignon, cellules humaines, amphibien, poisson, crustacées, etc.).

Le couplage des approches analytiques non-ciblées avec les approches d'écotoxicologie (ex. analyses dirigées par les effets) permettent d'envisager l'identification des molécules responsables de types d'effets observés. Ce type d'analyses croisées requiert de manipuler des volumes de données importants et d'utiliser des méthodes statistiques avancées.

Cadre et partenaires du projet

Cette thèse s'insère dans le cadre du programme MeSeine Innovation ([SIAAP : Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne - Innover au service de l'eau](#)). Faire évoluer le suivi des masses d'eau par la mesure des effets (bioessais) est un objectif central du réseau Meseine ([plaquette MeSeine - siaap.fr](#)). Depuis 2017, une action de recherche dédiée a été lancée afin de disposer d'un référentiel de bioessais adapté aux rivières soumises à forte pression anthropique, telle que la Seine francilienne ([Effectiveness of Disinfecting Wastewater Treatment Plant Discharges: Case of Chemical Disinfection Using Performic Acid - siaap.fr](#)). Des campagnes de prélèvements sur 4 à 7 sites répartis entre la Seine, la Marne et l'Oise ont été réalisées (figure 1).

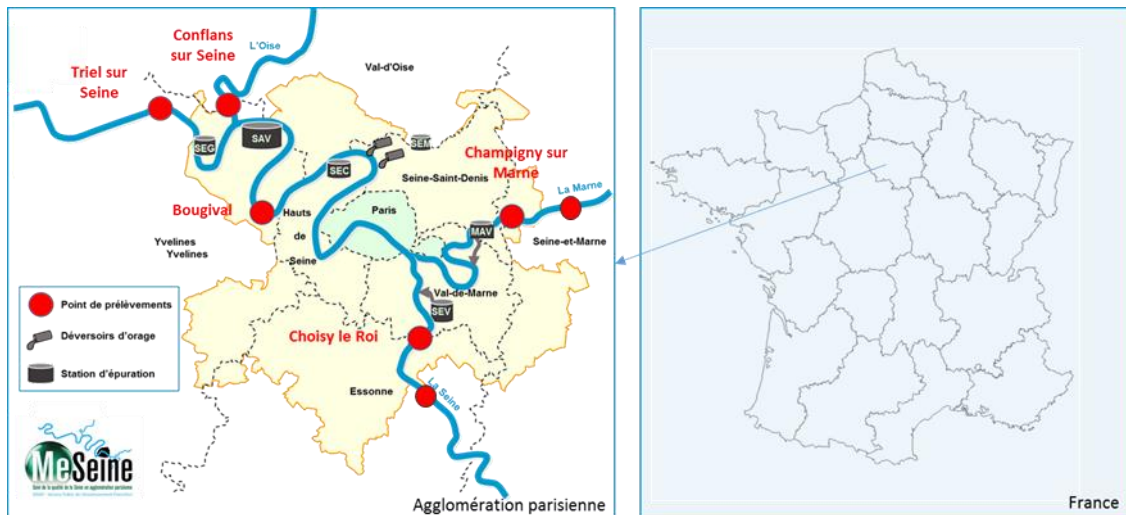


Figure 1 : cartographie des masses d'eaux superficielles suivies et situation des points de prélèvements

Au total, 20 campagnes de prélèvements ont été réalisées (2017-2021) avec 14-16 modèles biologiques différents. Les principaux modèles biologiques appliqués permettent d'évaluer la perturbation endocrinienne (gammare, poisson Médaka et cellule humaine), la toxicité générale (levure, bactérie, algue, champignon), et la génotoxicité (SOS chromotest sur E.Coli).

Aussi, ce projet s'inscrit dans la continuité du projet ANR JJC WaterOmics (2017-2021) dont le but était de développer au Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (Leesu) des méthodes d'analyse non-ciblée et de traitement de données pour la caractérisation des micropolluants dans les eaux urbaines (en particulier les eaux résiduaires urbaines). Ce projet a été mené en forte collaboration avec le SIAAP et a contribué à la mise en place d'un observatoire des micropolluants dans les eaux urbaines par spectrométrie de masse haute résolution, programme piloté par le SIAAP. Ces analyses s'appuient sur les instruments analytiques de la plateforme Prammics (OSU Efluve), en particulier les instruments de chromatographie en phase liquide (Waters Vion – UPLC-IMS-QTOF et Shimadzu HPLC Fraction collector). L'UPLC-IMS-QTOF est un instrument de HRMS équipé d'une séparation par mobilité ionique (IMS) permettant de séparer des composés habituellement co-élus et d'augmenter ainsi la résolution de l'instrument.

Objectifs

L'analyse en spectrométrie de masse haute résolution génère de larges sets de données en quatre dimensions. Une thèse en cours a déjà initié le développement de méthodes d'analyse des données et de caractérisation des micropolluants dans les eaux usées conjointement avec le développement d'une application (R/shiny) facilitant ces traitements des données.

Les objectifs de la thèse sont les suivants :

- Effectuer un suivi régulier de différents points d'échantillonnage du réseau MeSeine par des analyses non-ciblées en spectrométrie de masse haute résolution et des analyses d'écotoxicologie (citées ci-avant).
- Développer des méthodes de traitement des données en spectrométrie de masse et des méthodes statistiques pour l'identification de molécules/marqueurs d'intérêt en croisant les

données avec les résultats d'écotoxicité, en s'appuyant sur des méthodes et logiciels employés dans les domaines dit *omics* (ex. métabolomique)

- Poursuivre le développement d'applications de traitement des données
- Suivre le devenir spatio-temporel de molécules/marqueurs d'intérêt identifiés précédemment (suivi à différentes fréquences – saisonnières – hebdomadaires – journalières et le long des différents points de prélèvement en Seine)

Profil recherché

Formation de niveau M2 ou ingénieur en bioinformatique/biostatistiques, chimie analytique ou chimie de l'environnement :

- Compétences en statistiques (régressions, classification automatique discriminante, arbres de décision...) et analyse de données,
- Compétences en programmation, utilisation de langages de programmation pour le traitement de données (data science) (R, python...) appréciée
- Compétences en spectrométrie de masse, métabolomique et/ou chimie analytique
- Des connaissances en chimie de l'environnement (polluants, qualité des eaux et notions d'écotoxicologie) sont bienvenues
- Aisance dans la rédaction de rapport et bon niveau d'anglais souhaitable

Contacts pour candidater :

Julien Le Roux - julien.le-roux@u-pec.fr – 01 82 39 20 80

Stéphane Mottelet - stephane.mottelet@utc.fr

Sabrina Guérin - sabrina.guerin@siaap.fr

Lieu : LEESU, Université Paris-Est Créteil

Laboratoire eau, environnement, et systèmes urbains (LEESU)

61 avenue du Général de Gaulle
94010 CRETEIL Cédex