



HAL
open science

Evolution de l'outil de classification in silico TyPol pour analyser et prédire les effets écotoxicologiques des pesticides

Harouna Traore, Olivier Crouzet, Laure Mamy, Christine Sireyjol, Virginie Rossard, Rémi Servien, Eric Latrille, Pierre Benoit

► To cite this version:

Harouna Traore, Olivier Crouzet, Laure Mamy, Christine Sireyjol, Virginie Rossard, et al.. Evolution de l'outil de classification in silico TyPol pour analyser et prédire les effets écotoxicologiques des pesticides. 46e congrès du GFP, Groupe Français des Pesticides, May 2016, Bordeaux, France. 1 p. hal-01608591

HAL Id: hal-01608591

<https://hal.science/hal-01608591>

Submitted on 5 Jun 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - ShareAlike 4.0 International License

Evolution de l'outil de classification *in silico* TyPol pour analyser et prédire les effets écotoxicologiques des pesticides

Traoré Harouna^(1,2), Cruzet Olivier⁽²⁾, Mamy Laure⁽¹⁾, Sireyjol Christine⁽²⁾, Rossard Virginie⁽³⁾, Servien Rémi⁽⁴⁾, Latrille Eric⁽³⁾, Benoit Pierre⁽¹⁾

⁽¹⁾ UMR ECOSYS, INRA, AgroParisTech, Université Paris-Saclay, 78850 Thiverval-Grignon – harouna.traore@agroparistech.fr

⁽²⁾ UMR ECOSYS, INRA, AgroParisTech, Université Paris-Saclay, 78206 Versailles

⁽³⁾ UR LBE, INRA, 11100 Narbonne

⁽⁴⁾ INRA, UMR Toxalim, 31300 Toulouse

Présentation par affiche X

Présentation orale □

La compréhension du devenir des pesticides dans l'environnement et de leurs effets repose en grande partie sur les propriétés de ces molécules. Nous avons développé un outil, TyPol, basé à la fois sur une approche «*in silico*» calculant des descripteurs moléculaires et sur des méthodes de classification combinant descripteurs moléculaires et paramètres comportementaux (Servien et al., 2014). Cet outil vise à extrapoler des connaissances (mobilité, persistance dans le sol...) au sein d'une classe de composés à partir des résultats obtenus sur quelques molécules. Une partie des connaissances disponibles en la matière provient d'études sur des relations structures activités (QSAR, Mamy et al., 2015). Dans la version actuelle de TyPol, aucun paramètre d'effet écotoxicologique n'est présent - le seul paramètre relié aux effets sur les organismes étant le facteur de bioconcentration plus relatif au transfert dans les réseaux trophiques. Une première analyse bibliométrique a montré qu'une grande majorité des publications référencées sur les QSAR qui concernent la toxicité des composés dérive de tests écotoxicologiques normatifs, réalisés dans des conditions très éloignées des conditions environnementales.

Ainsi, l'objectif de ce travail était d'implémenter la base de données de l'outil TyPol avec un jeu de données caractérisant les effets écotoxicologiques des pesticides sur différents groupes d'organismes vivants en milieux terrestre et aquatique. Un premier enjeu a été de recenser à partir d'une analyse détaillée des données écotoxicologiques disponibles (littérature, réglementation, bases de données) celles qui étaient les plus pertinentes pour obtenir, au travers d'approches statistiques, des relations comportements / effets des pesticides dans l'environnement. Cette analyse fait ressortir que les données écotoxicologiques pertinentes pour des organismes édaphiques sont relativement déficitaires par rapport aux organismes aquatiques. Cela est en particulier vrai pour les microorganismes du sol mais aussi pour des macroinvertébrés. Egalement, les données relatives à des bio-essais réalisés dans des matrices environnementales ou sur des processus écosystémiques, ne sont pas disponibles pour la majorité des produits phytosanitaires. Au final nous avons ajouté dans l'outil TyPol, sept nouveaux paramètres (EC₅₀, NOEC) relatifs aux effets écotoxicologiques aigus et chroniques pour les organismes suivants : Daphnie, Algues, Lentille d'eau et Ver de terre. Des premiers résultats de classification ont été obtenus pour une quarantaine de molécules. L'analyse a été réalisée pour distinguer si les classes d'écotoxicité sont associées ou non à des molécules présentant des structures moléculaires proches et si elles correspondent à des classes de comportements environnementaux similaires ou différentes.

Références :

Servien R., Mamy L., Li Z., Rossard V., Latrille E., Bessac F., Patureau D., Benoit P., 2014. TyPol – A new methodology for organic compounds clustering based on their molecular characteristics and environmental behavior. *Chemosphere*, 111, 613-622.

Mamy L., Patureau D., Barriuso E., Bedos C., Bessac F., Louchart X., Martin-Laurent F., Miegé C., Benoit P., 2015. Prediction of the fate of organic compounds in the environment from their molecular properties: A review. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 45, 12, 1277-1377 (Open access).

Remerciements : Labex BASC / réseau ECOTOX de l'INRA / Projet IMPEC soutenu par le programme Evaluation et réduction des risques liés à l'utilisation des Pesticides du MEDDE – APR 2011

Mots-clés : pesticides, toxicité, QSAR, classification, régression PLS