



**HAL**  
open science

## TyPol - Typologie des Contaminants Organiques

Dominique Patureau, Pierre Benoit, Eric Latrille, Laure Mamy, Virginie  
Rossard, Fabienne Bessac, Rémi Servien

### ► To cite this version:

Dominique Patureau, Pierre Benoit, Eric Latrille, Laure Mamy, Virginie Rossard, et al.. TyPol - Typologie des Contaminants Organiques: Un outil opérationnel permettant de cartographier et de choisir des molécules “ modèles ” pour des études en écodynamique et en écotoxicologie. École thématique. Formation TyPol - public ciblé: OFB/ ANSES / INERIS / ADEME, France. 2022. hal-04559000

**HAL Id: hal-04559000**

**<https://hal.inrae.fr/hal-04559000>**

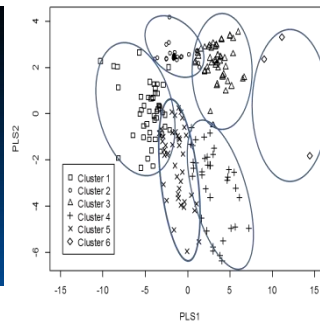
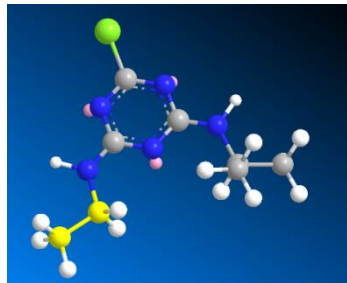
Submitted on 25 Apr 2024

**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.

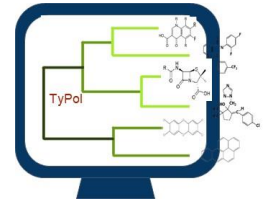
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# ➤ TyPol – Typologie des Contaminants Organiques

**Un outil opérationnel permettant de cartographier et de choisir des molécules « modèles » pour des études en écodynamique et en écotoxicologie**



**Biodégradation : DT50**



# ➤ TyPol – un consortium sur la durée

**2010-2022**

*BENOIT Pierre<sup>1</sup>, LATRILLE Eric<sup>2</sup>, MAMY Laure<sup>1</sup>, PATUREAU Dominique<sup>2</sup>, ROSSARD Virginie<sup>2</sup>,  
BESSAC Fabienne<sup>3</sup>, SERVIEN Rémi<sup>4</sup>, CROUZET Olivier<sup>1</sup>  
BARRIUSO Enrique<sup>1</sup>, BEDOS Carole<sup>1</sup>, LAURENT François<sup>5</sup>,  
LOUCHART Xavier<sup>6</sup>, MARTIN-LAURENT Fabrice<sup>7</sup>, MIEGE Cécile<sup>8</sup>*

<sup>1</sup> INRAE, UMR ECOSYS. Thiverval-Grignon ;

<sup>2</sup> INRAE, UR LBE, Narbonne ;

<sup>3</sup> Université de Toulouse - Ecole d'Ingénieurs de Purpan, Toulouse ;

<sup>4</sup> INRAE, UMR Intheres, Toulouse ; <sup>5</sup> INRAE, UMR ECOLAB, Toulouse ;

<sup>6</sup> INRAE, UMR LISAH, Montpellier ; <sup>7</sup> INRAE, UMR AgroEcologie, Dijon ;

<sup>8</sup> INRAE, UR Riverly, Lyon ;



**ADEME**



Agence de l'Environnement  
et de la Maîtrise de l'Energie

## > Contexte

- ❑ **Nombre et diversité des contaminants organiques potentiellement présents dans l'environnement**
  - 30000 à 100000 substances concernées par l'évaluation des risques environnementaux (Pesticides, REACH)
  - Impossibilité d'étudier au cas par cas (temps, coût)
  
- ❑ **Besoin de classer les contaminants organiques en fonction des propriétés jouant un rôle essentiel dans les mécanismes de devenir et d'impact**
  - Intérêt d'utiliser des propriétés moléculaires et des QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) pour ce genre d'approche
  - Idée de classer les contaminants organiques non pas par familles chimiques, mais selon des propriétés directement reliées aux processus d'intérêt
  
- ❑ **QSAR ou QSPR : relations structure activité**
  - Utilisées pour estimer une propriété comportementale (par ex : adsorption, biodégradation, bioconcentration, effets toxiques) à partir d'autres propriétés : structure moléculaire, solubilité dans l'eau, Kow ...


## ➤ Idées fondatrices

- ❑ **Concevoir un outil pour sélectionner des molécules « modèles » selon des critères phénoménologiques (comportements différents) et opérationnels (intensité des risques actuels ou futurs)**
- ❑ **Aboutir à un outil mutualisable (BDD) qui permettra d'argumenter les choix de contaminants modèles pour réaliser des études concernant la dispersion, les effets écotoxicologiques des contaminants organiques d'intérêt**
- ❑ **Tester de nouvelles molécules *in silico*, extrapoler (comportements et effets)**

# ➤ Principes de base

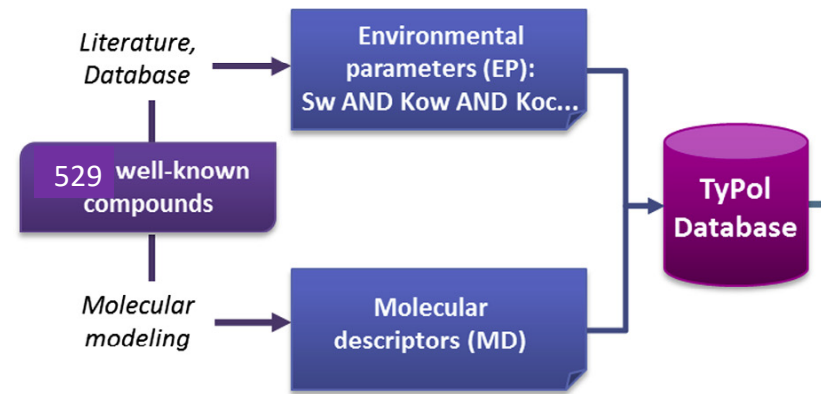
Combiner approches *in silico* et statistiques



TyPol – A new methodology for organic compounds clustering based on their molecular characteristics and environmental behavior 

Rémi Servien<sup>a,b,\*</sup>, Laure Mamy<sup>c</sup>, Ziang Li<sup>d</sup>, Virginie Rossard<sup>b</sup>, Eric Latrille<sup>b</sup>, Fabienne Bessac<sup>e,f,g</sup>,  
Dominique Patureau<sup>b</sup>, Pierre Benoit<sup>d</sup>

*Servien et al., 2014*




Problématiques	Processus
Dissémination atmosphère (Post application)	Volatilisation
Dissémination atmosphère (Site pollué)	Adsorption
Capacité épuration sol	Absorption (plantes)
Transfert vers organismes & plantes (Biodisponibilité)	Biodégradation
Effets biologiques	Dégradation abiotique
Persistence dans station épuration	Dissolution
Transfert eaux souterraines	Ecotoxicité
Transfert eaux de surface	

# ➤ Principes de base

Combiner approches *in silico* et statistiques

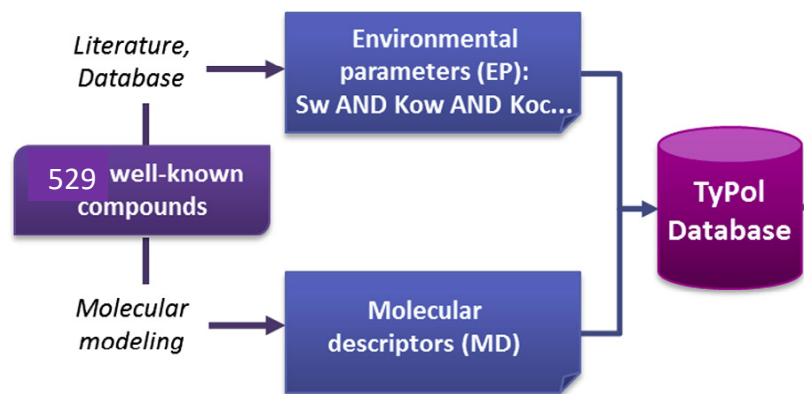
TyPol

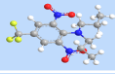

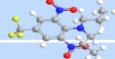
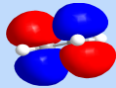


TyPol – A new methodology for organic compounds clustering based on their molecular characteristics and environmental behavior 

Rémi Servien<sup>a,b,\*</sup>, Laure Mamy<sup>c</sup>, Ziang Li<sup>d</sup>, Virginie Rossard<sup>b</sup>, Eric Latrille<sup>b</sup>, Fabienne Bessac<sup>e,f,g</sup>, Dominique Patureau<sup>b</sup>, Pierre Benoit<sup>d</sup>

*Servien et al., 2014*

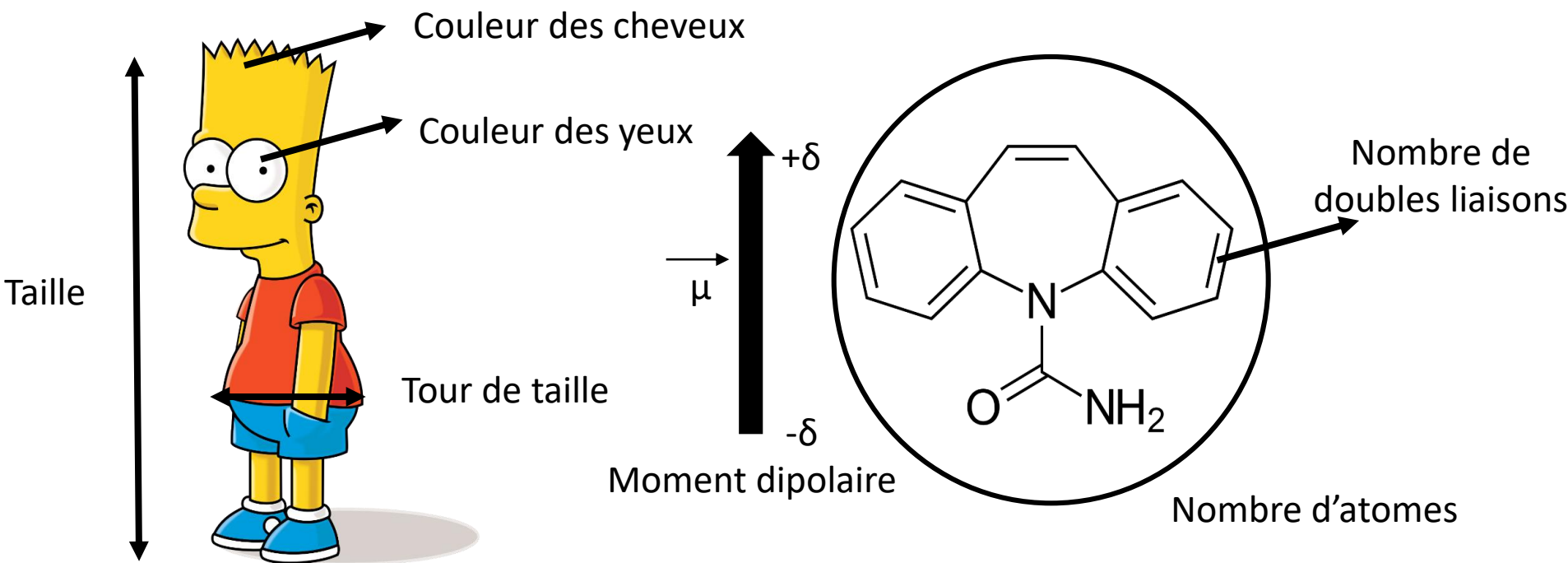


Type de descripteur	Descripteurs moléculaires
Constitution	Nombre et types atomes et liaisons Masse moléculaire 
Géométrie	Surface 
Topologie	Index de connectivité 
Quantique	Polarisabilité Moment dipolaire Energies des orbitales (homo, lumo)  Energie totale

*Review QSARs Mamy et al., 2015*

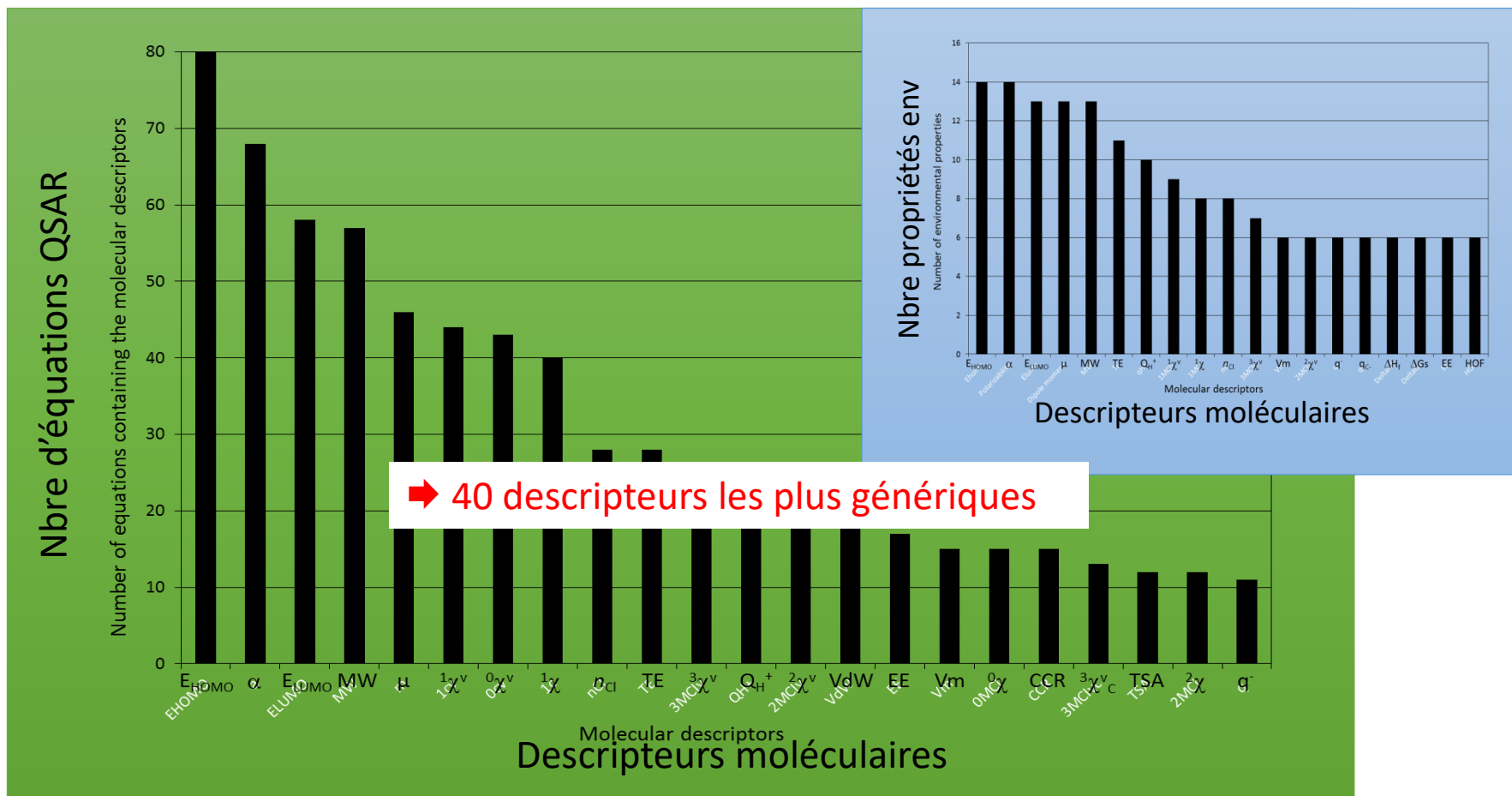
➡ 40 descripteurs les plus génériques

# ➤ Qu'est-ce qu'un descripteur moléculaire ?





# ➤ Quels descripteurs moléculaires ?



## Critère N°1 : généricité

Mamy L, Patureau D, Barriuso E, Bedos C, Bessac F, Louchart X, Martin-Laurent F, Miege 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

## > Quels composés ?

### ▪ 1964 composés (502 parents et 1462 produits de transformation - TPs)

➤ 122 Pesticides

➔ composés persistants + pharma + produits de soin PPCP 2017, puis 2019-2021 : **116 parents et 1371 TPs**

➤ 30 PCB (polychlorobiphényles)

+ *Traceurs colorés*

➤ 7 PCDD (polychlorodibenzo-p-dioxines)

+ *Composés biopesticides : juglone (19 TPs)*

➤ 10 PCDF (polychlorodibenzo-furanes)

➤ 13 HAP (Hydrocarbures aromatiques polycycliques)

➤ Plastifiants : 9 phthalates, bisphénol A

➤ Médicaments : Carbamazépine, Ciprofloxacine, Acide Nalidixique

➤ Hormones : Estradiol

➔ 2022-2023 PFAs

# Quels composés ?

147.99.69.199 / localhost / TyPol / Molecule | phpMyAdmin 3.3.7deb7

Non sécurisé | 147.99.69.199/phpmyadmin/index.php?db=TyPol&token=19df509f3d5b5c4e9324d9ac134cb849

localhost > TyPol > Molecule

Afficher Structure SQL Rechercher Suivi Insérer Exporter Importer Opérations Vider Supprimer

Affichage des lignes 0 - 29 (557 total, Traitement en 0.0008 sec.) [CAS: 100646-51-3 - 107534-96-3-INRA-16]

```
SELECT * FROM Molecule ORDER BY Molecule CAS ASC LIMIT 0, 30
```

Base de données TyPol (9)

Afficher: 30 ligne(s) à partir de la ligne n° 30  
en mode horizontal et répéter les en-têtes à chaque groupe de 100  
Trier sur l'index: aucune

Options	CAS	IUPACName	alias	molecularWeight	chemicalFormula	formula2D_cml	family	parentCAS	createdDate	userName
<input type="checkbox"/>	100846-51-3	ethyl (R)-2-[4-(6-chloroquinoxalin-2-yloxy)phenoxy...	quizalofop-p-ethyl	372.83	C19H17ClN2O4	NULL	aryloxyphenoxypropionate	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	101-20-2	1-(4-chlorophenyl)-3-(3,4-dichlorophenyl)urea	trilocorban	315.58	C13H9Cl3N2O	NULL	uree derivative	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	101-21-3	isopropyl 3-chlorocarbamate	chloropham	213.66	C10H12ClNO2	NULL	carbamate	NULL	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	101-42-8	1,1-dimethyl-3-phenylurea	fenuron	164.2	C9H12N2O	NULL	urea	NULL	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	101200-48-0	methyl 2-[4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl](me...	tribenuron-methyl	395.44	C15H17N5O6S	NULL	sulfonylurea	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	101205-02-1	(6RS)-2-[(EZ)-1-(ethoxymino)butyl]-3-hydroxy-5-[(...	cycloxydym	325.62	C17H27NO3S	NULL	cyclohexanedione	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	10199-99-0	4-Chloro-7-nitro-2,1,3-benzoxadiazole	4-chloro-7-nitro-2,1,3-benzoxadiazole	199.55	C6H2ClN3O3	NULL	fuio	NULL	0000-00-00	mamy
<input type="checkbox"/>	10199-91-4	7-Nitro-2,1,3-benzoxadiazol-4-amine	4-amino-7-nitrobenzofurazan	180.12	C8H4N4O3	NULL	fuio	NULL	0000-00-00	mamy
<input type="checkbox"/>	1024-57-3	heptachlor epoxide	heptachlor epoxide	389	C10H5Cl7O	NULL	unclassified	57-74-9; 76-44-8	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	102851-06-9	(RS)-7-cyano-3-phenoxybenzyl N-(2-chloro-7,7,7-tri...	tau-fluvalinate	502.95	C26H22ClF3N2O3	NULL	synthetic pyrethroid	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	103-90-2	N-(4-hydroxyphenyl)acetamide	acetaminophen/paracetamol	151.17	C8H9NO2	NULL	anilide derivative	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	1031-07-8	Endosulfan sulfate	endosulfan sulfate	422.92	C9H8Cl8O4S	NA	unclassified	116-29-7	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	103361-09-7	N-(7-fluoro-3,4-dihydro-3-oxo-4-prop-2-ynyl-2H-1,4...	flumioxazin	354.36	C19H15FN2O4	NULL	n-phenylphthalimides	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	104-40-5	4-nonylphenol	4-nonylphenol (np)	220.38	C15H24O	NULL	alkylphenol	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	104040-78-0	1-(4,6-dimethoxypyrimidin-2-yl)-3-(3-trifluorometh...	fazasulfuron	407.325	C13H12F3N5O5S	NULL	sulfonylurea	NULL	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	104208-82-8	2-(4-mesy-2-nitrobenzoyl)cyclohexane-1,3-dione	mesotrione	339.35	C14H13NO7S	NULL	triketone	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	10540-29-1	2-[4-[(Z)-1,2-diphenylbut-1-enyl]phenoxy]-N,N-dime...	tamoxifen	371.52	C26H29NO	NULL	ethylamine	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	105512-06-9	2-propynyl (2R)-2-[4-(5-chloro-3-fluoro-2-pyridin...	clodinafop propargyl	349.76	C17H13ClFN4O	NULL	aryloxyphenoxypropionate	NULL	2018-04-16	bonnot
<input type="checkbox"/>	106-44-5	4-methylphenol	para-cresol	108.14	C7H8O	NULL	methylphenol	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	108266-06-2	3-[2-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)]piperidin-1-...	risperidone	410.49	C23H27F4N4O2	NULL	fluoropyrimidine	NULL	2017-07-10	bonnot
<input type="checkbox"/>	1086-51-9	NA	aminomethylphosphonic acid	111	CH6NO3P	NULL	unclassified	1071-83-6	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	1071-83-6	N-(phosphonomethyl)glycine	glyphosate	168.07	C3H7NO5P	NULL	phosphonoglycine	NULL	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3	(RS)-1-p-chlorophenyl-4,4-dimethyl-3-(1H-1,2,4-tri...	tebuconazole	307.818	C16H22ClN3O	NULL	triazole	NULL	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-1	5-(4-chlorophenyl)-2,2-dimethyl-3-(1,2,4-triazol-1...	m1-tebuconazole	323.14	C16H22ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-10	1-[2-[2-(4-chlorophenyl)ethyl]-2-hydroxy-3,3-dimet...	m10-tebuconazole	339.14	C16H22ClN3O3	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-11	1-(4-chlorophenyl)-3-hydroxy-4,4-dimethyl-3-(1,2,4...	m11-tebuconazole	321.12	C16H20ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-12	(E)-1-(4-chlorophenyl)-4,4-dimethyl-3-(1,2,4-tria...	m12-tebuconazole	321.12	C16H20ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-13	1-(4-chlorophenyl)-3-hydroxy-4,4-dimethyl-3-(1,2,4...	m13-tebuconazole	321.12	C16H20ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-14	(Z)-1-(4-chlorophenyl)-4,4-dimethyl-3-(1,2,4-triaz...	m14-tebuconazole	321.12	C16H20ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL
<input type="checkbox"/>	107534-96-3-INRA-16	2-[2-(4-chlorophenyl)ethyl]-2-hydroxy-3,3-dimethyl...	m16-tebuconazole	321.12	C16H20ClN3O2	NA	triazole metabolite	107534-96-3	NULL	NULL

Tout cocher / Tout décocher Pour la sélection:

Afficher: 30 ligne(s) à partir de la ligne n° 30  
en mode horizontal et répéter les en-têtes à chaque groupe de 100

Opérations sur les résultats de la requête:  
Version imprimable Version imprimable (avec textes complets) Exporter CREATE VIEW

Conservé cette requête dans les signets:  
Intitulé:   Signet visible pour les autres utilisateurs

## ➤ Quels paramètres ?

Processus	Paramètres
Volatilisation	<u>Pvap, K<sub>H</sub></u>
Adsorption	<u>Koc</u>
Dégradation abiotique	<u>DT50<sub>a</sub></u>
Biodégradation	<u>DT50<sub>b</sub></u>
Absorption	Kow
Dissolution	<u>Sw, Kow</u>
Toxicité	<u>BCF, EC50, LC50, DL50 (différents organismes)</u> <u>DJA, AOEL</u>

K<sub>H</sub> : Constante de Henry  
DT50: Durée de demi-vie

BCF : Facteur de bioconcentration  
EC50 : Concentration produisant 50% d'effet

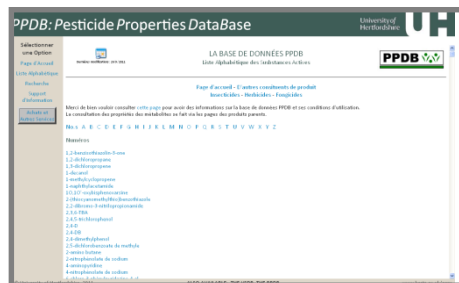
LC50 : Concentration létale  
DL50 : Dose létale 50

- ➔ 6 paramètres **comportementaux – écodynamique** + BCF
- ➔ + 7 paramètres **écotoxicité 2016**
- ➔ + 2 **paramètres toxicité pesticides 2018**

# ➤ Quels paramètres ?

## ▪ Pesticides : A partir de bases de données

### ➤ PPDB



### ➤ Agritox



## ▪ Autres composés organiques : Bibliographie + ChemSpider, Toxnet, VSDB

# ➤ Quels paramètres ?

147.99.69.199 / localhost / TyPol / EnvParameter | phpMyAdmin 3.3.7deb7

Non sécurisé | 147.99.69.199/phpmyadmin/index.php?db=TyPol&token=19df509f3d5b5c4e9324d9ac134cb849

localhost ▶ TyPol ▶ EnvParameter

Afficher Structure SQL Rechercher Suivi Insérer Exporter Importer Opérations Vider Supprimer

Affichage des lignes 0 - 20 (21 total, Traitement en 0.0006 sec.)

```
SELECT
FROM `EnvParameter`
WHERE `Molecule_CAS` LIKE '79-57-2'
AND `name` LIKE 'Koc'
LIMIT 0 - 30
```

Afficher : 30 ligne(s) à partir de la ligne n° 0  
en mode horizontal et répéter les en-têtes à chaque groupe de 100  
Trier sur l'index: aucune

	idEnvPara	Molecule_CAS	name	unitSI	value	method	operatorMail	listProcessus	idSource	createdDate
<input type="checkbox"/>	5023	79-57-2	Koc	L/Kg	27800	Min	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5024	79-57-2	Koc	L/Kg	93300	Max	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5025	79-57-2	Koc	L/Kg	195	pig manure	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	200	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5028	79-57-2	Koc	L/Kg	2870	Min; Nougaku S. 1989. Pesticide Data Book. Tokyo. ...	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	80	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5029	79-57-2	Koc	L/Kg	5.61e+07	Max; Nougaku S. 1989. Pesticide Data Book. Tokyo. ...	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	80	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5037	79-57-2	Koc	L/Kg	97.2	Estimated using PCKOCWIN	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	161	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5040	79-57-2	Koc	L/Kg	3.31	estimated from logKow	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	200	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5042	79-57-2	Koc	L/Kg	42500	sandy loam : Experimental	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5043	79-57-2	Koc	L/Kg	93300	sandy loam : Experimental	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5044	79-57-2	Koc	L/Kg	47900	sand soil : Experimental	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5045	79-57-2	Koc	L/Kg	27800	loamy sand : Experimental	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5050	79-57-2	Koc	L/Kg	195	pig manure	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	200	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5054	79-57-2	Koc	L/Kg	8160	sewage sludge	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	146	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5055	79-57-2	Koc	L/Kg	195	pig manure	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	200	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5056	79-57-2	Koc	L/Kg	42500	loamy sand	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5057	79-57-2	Koc	L/Kg	47900	sand	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5058	79-57-2	Koc	L/Kg	93300	sandy loam	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5059	79-57-2	Koc	L/Kg	27800	sand	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5061	79-57-2	Koc	L/Kg	93300	sandy loam	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5062	79-57-2	Koc	L/Kg	47900	sand soil	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	242	2017-07-10
<input type="checkbox"/>	5064	79-57-2	Koc	L/Kg	52900	Na	Slah-Eddine.Zayet@inra.fr	sorption	333	2017-07-10

Tout cocher / Tout décocher Pour la sélection :

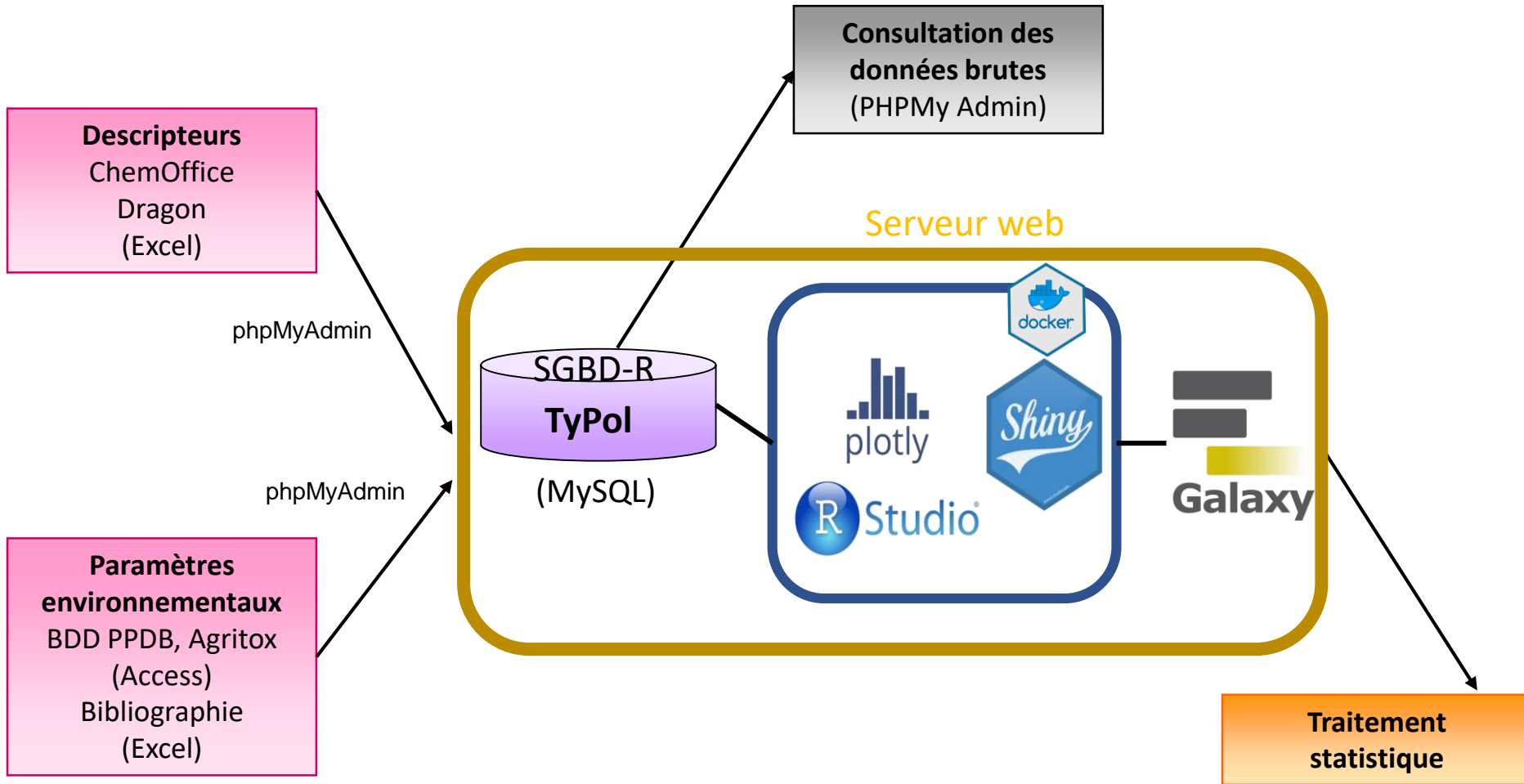
Afficher : 30 ligne(s) à partir de la ligne n° 0  
en mode horizontal et répéter les en-têtes à chaque groupe de 100

Opérations sur les résultats de la requête

➔ Calcul d'une valeur médiane par composé pour les Koc, DT50, DL50, BCF...

Oxytetracycline  
21 Koc  
Médiane

# ➤ Architecture du système d'information



- SGBD-R : Permet accès à distance multi-utilisateurs sans installation préalable (≠ Access) SGBD-R: Système de gestion de base de données relationnelles

# > Motivations

Données :

- Plus de 500 molécules
- 40 variables de descripteurs ( $X_i$ )
- 7 variables de paramètres environnementaux ( $Y_j$ )

Motivations :

- Etudier comportement des contaminants organiques
- Les classer dans des groupes selon la relation entre leurs descripteurs et leurs paramètres environnementaux
- Choix d'une molécule modèle par groupe pour des études plus poussées



## ■ Pourquoi

- Grand nombre de variables
- Variables corrélées
- **Information noyée**

## ■ Idée

- Construire de nouvelles variables à partir des premières
- Non corrélées
- Moins nombreuses
- Plus informatives
- Relation linéaire
- Gère les données manquantes (mais pas trop quand même)
- Interprétabilité
- Représentation graphique

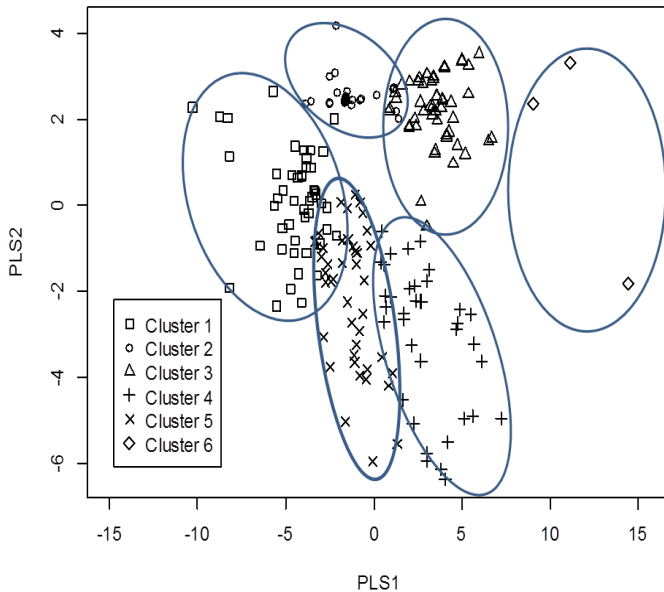
# > Classification

Objectifs d'une classification : créer des groupes d'individus tels que :

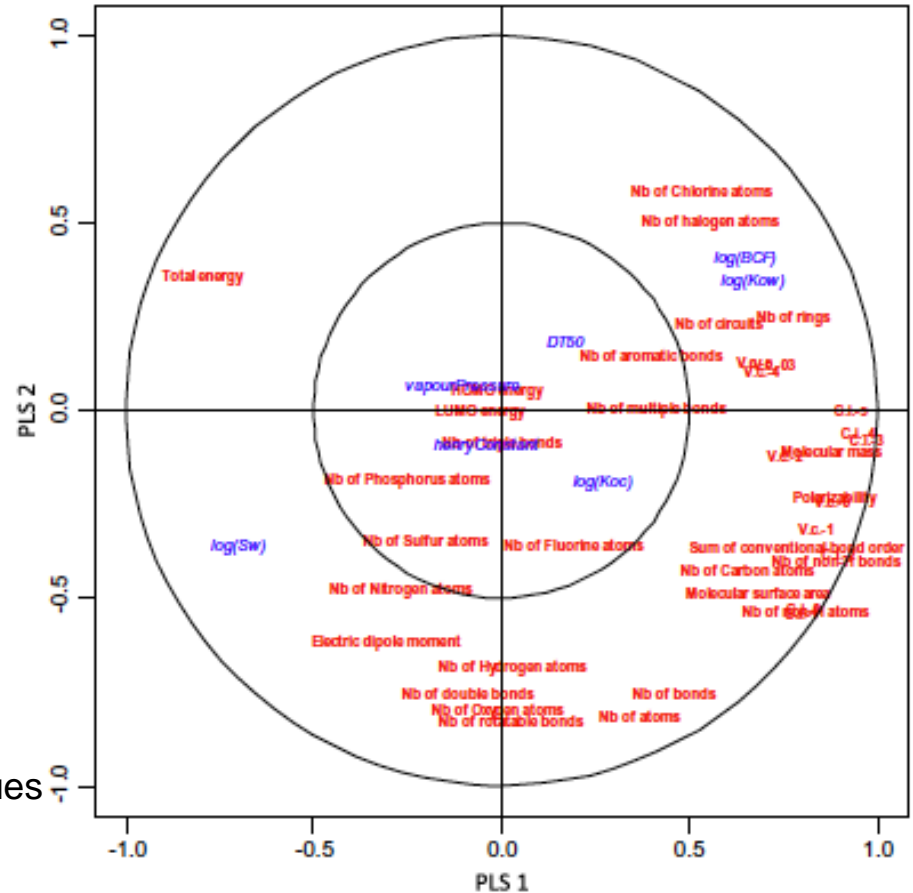
- au sein d'un même groupe les individus soient le plus semblables ;
- d'un groupe à l'autre ils soient le plus dissemblables.

# ➤ Premiers tests de la méthode

6 classes à partir des 215 molécules



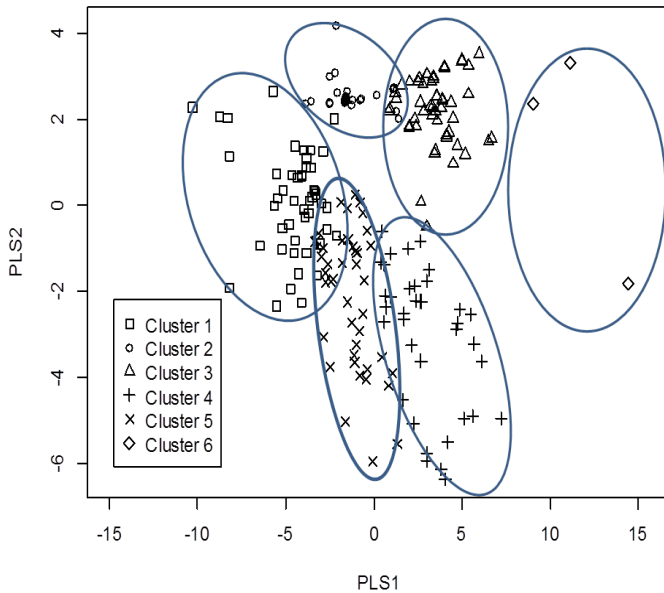
- Première composante PLS : 40% variance - poids important des descripteurs géométriques, topologiques et de constitution (nb atomes Cl)
- Seconde composante PLS : 16 % variance – nb et types de liaisons, nb total d'atomes



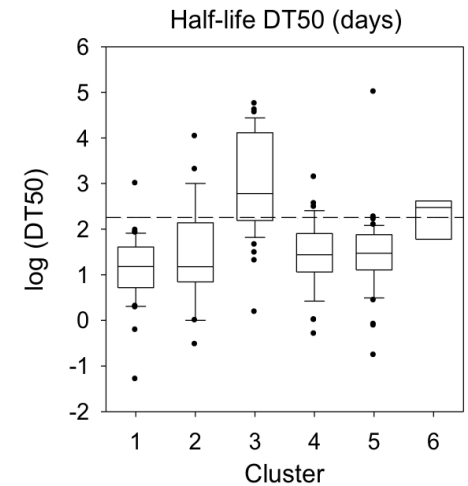
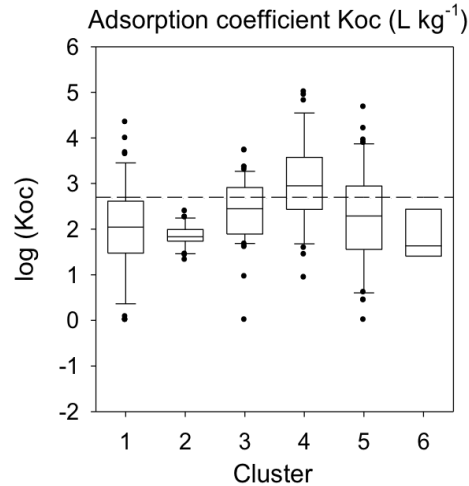
Servien R., Mamy L., Li Z., Rossard V., Latrille E., Bessac F., Patureau D., Benoit P. 2014..  
Chemosphere, 111, 613-622.

# ➤ Premiers tests de la méthode

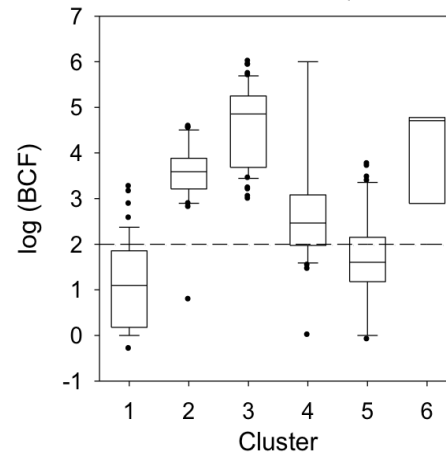
6 classes à partir des 215 molécules



- Des comportements environnementaux distincts au sein des 6 classes



Bioconcentration factor BCF (dimensionless)



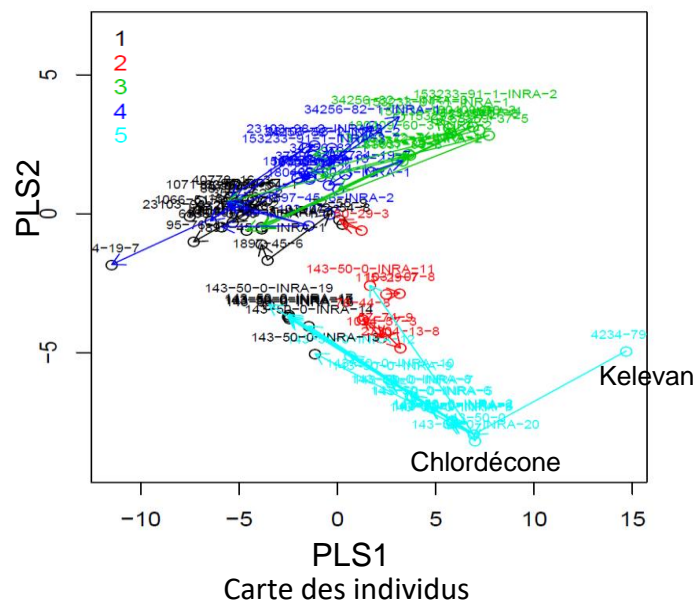
*Servien R., Mamy L., Li Z., Rossard V., Latrille E., Bessac F., Patureau D., Benoit P. 2014.. Chemosphere, 111, 613-622.*

# ➤ TyPol pour étudier la transformation

Recherche de la signature biologique de la dégradation de la chlordécone dans les sols des Antilles – Coord F. Martin Laurent INRA Dijon - **Projet Biodechlord – 2011- 2013**

- 6-hydrochlordecone
- 8-hydrochlordecone\*
- 9-hydrochlordecone
- 10-hydrochlordecone
- 3,7-dihydrochlordecone\*
- cis 8,10-dihydrochlordecone\*
- 3,7,10-trihydrochlordecone\*
- 8,10,10-trihydrochlordecone\*
- 3,7,10,10-tetrahydrochlordecone\*
- 2,3,7,8,10,10-hexahydrochlordecone
- 2,3,7,8,9,10,10-heptahydrochlordecone
- 1,2,3,7,8,9,10,10-octahydrochlordecone
- 1,2,3,4,6,7,8,9,10-nonahydrochlordecone
- 1,2,3,6,7,8,9,10,10-nonahydrochlordecone
- 1,3,4,6,7,8,9,10,10-nonahydrochlordecone\*
- 2,3,4,6,7,8,9,10,10-nonahydrochlordecone
- decahydrochlordecone

Produits de déhalogénéation de la chlordécone et congénères potentiels J. Dolfig et al., EST 2012



Visualisation de changement de classes pour certains métabolites  
Potentiels changements en terme de comportement et donc de risque

*Benoit P., Mamy L., Servien R., Li Z., Latrille E., Rossard V., Bessac F., Patureau D., Martin-Laurent F., 2017. Categorizing chlordecone potential degradation products to explore their environmental fate. Science of the Total Environment, 574, 781-795.*

# ➤ TyPol pour évaluer un potentiel d'émission dans l'air

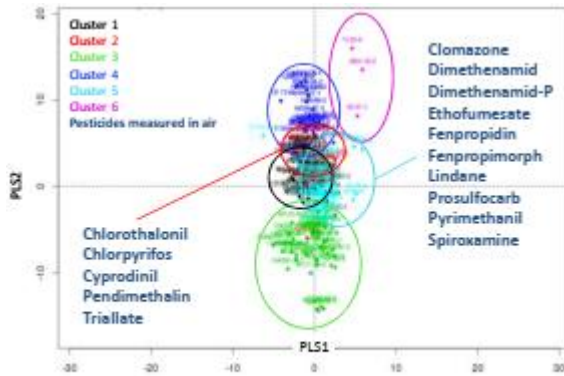
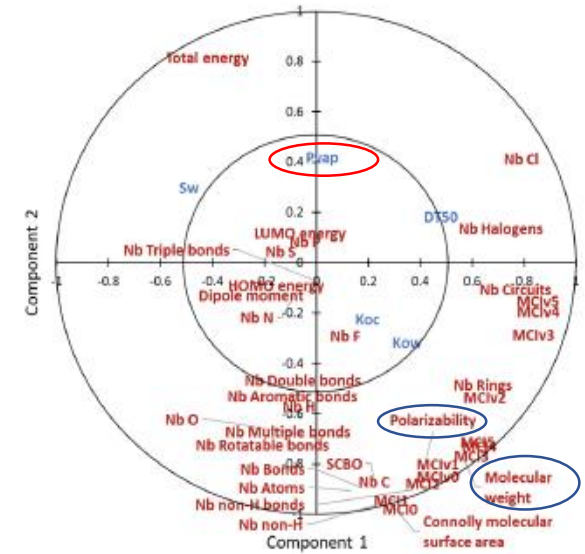
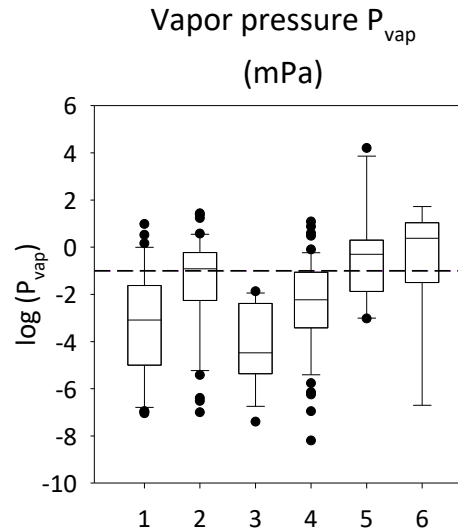


Figure 2 – Clustering with TyPol of the 178 pesticides in six clusters on the two main components of the PLS regression (PLS1 and PLS2)



Journal of Hazardous Materials 415 (2021) 125613



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Hazardous Materials

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/jhazmat](http://www.elsevier.com/locate/jhazmat)



Assessment of pesticides volatilization potential based on their molecular properties using the TyPol tool

Laure Mamy<sup>a,\*</sup>, Kevin Bonnot<sup>a</sup>, Pierre Benoit<sup>a</sup>, Christian Bockstaller<sup>b</sup>, Eric Latrille<sup>c</sup>, Virginie Rossard<sup>c</sup>, Rémi Servien<sup>c</sup>, Dominique Patureau<sup>c</sup>, Laëtitia Prevost<sup>d</sup>, Frédéric Pierlot<sup>b,d</sup>, Carole Bedos<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Université Paris-Saclay, INRAE, AgroParisTech, UMR BOOSYS, 78850 Thiverval-Origny, France

<sup>b</sup> Université de Lorraine, INRAE, LAR, 68000 Colmar, France

<sup>c</sup> INRAE, Univ. Montpellier, LBE, 102 Avenue des Baux, 11100 Narbonne, France

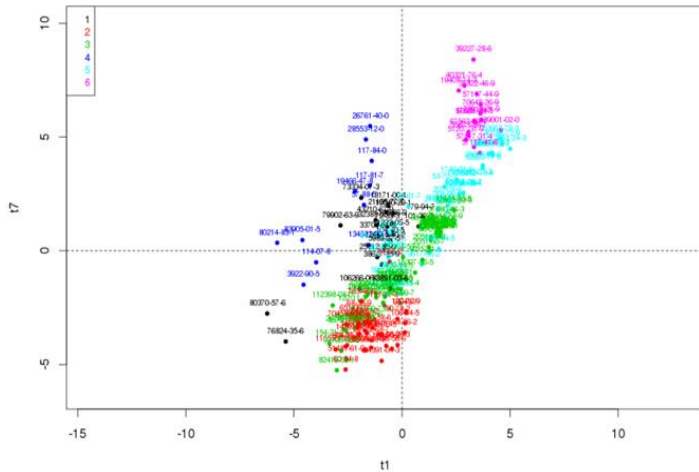
<sup>d</sup> Chambre régionale d'agriculture Grand Est, 54520 Laxou, France



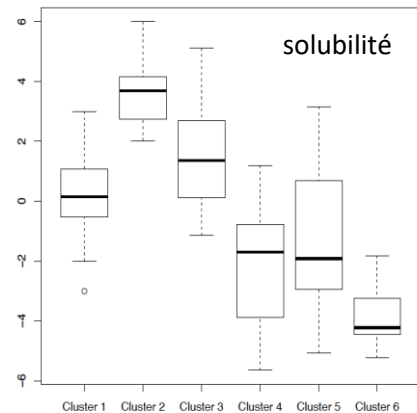
Projet Reppair – 2016-2019 – Bedos et al.

- 178 pesticides - Liste ANSES
- Potentiels d'émission
  - Sol
  - Végétation
  - Sol + Végétation
- Comparaison mesures dans 5 régions françaises – AASQA (2017)

Individuals factor map (PLS Regression)



Lien avec le devenir au cours des procédés de traitement et lors du retour au sol des PROs



Cluster	Nombre de composés	Principale famille chimique	Caractéristique moléculaire	Devenir environnemental et effet écotoxicologique
Cluster 1	22	Divers PPCPs, Nonylphenol	<i>Energie totale faible, indices de connectivité élevés</i>	Fort Koc, BCF assez élevé DT50 assez élevée (médiane 75j)
Cluster 2	36	Phtalates Divers PPCPs Tétracyclines Fluoroquinolones, Sulfonamides	<i>Polarisabilité la plus faible, surface assez faible, énergie totale élevée</i>	Solubilité élevée, Koc faible à moyen (médiane Log 1.99), faible BCF, faible DT50
Cluster 3	56	Divers PPCPs Carbamazepine, fluoxetine, diclofenac PCB (2,3Cl)	<i>Moment dipolaire faible, polarisabilité faible</i>	BCF moyen, Koc moyen, DT50 faible
Cluster 4	12	Macrolides Phtalates, sterols	<i>Indices de connectivité élevés, masse molaire (+ surface) élevées, polarisabilité élevée</i>	Faible Koc, Faible BCF, faible Sw, DT50 moyenne (médiane 30j)
Cluster 5	36	PAHs Polychlorinated Biphenyls (5,6,7Cl)	<i>Moment dipolaire faible, polarisabilité faible, énergie totale élevée</i>	Bioaccumulation (BCF moyen), Koc peu élevé
Cluster 6	16	Polychlorinated dibenzodioxins, dibenzofurans	<i>Moment dipolaire, <math>E_{HOMO}</math> et <math>E_{LUMO}</math> les plus faibles, nombre d'halogènes le plus élevé</i>	Forte bioaccumulation (BCF élevé), faible dégradation (DT50 très élevée), faible Sw

## ➤ Perspectives d'applications

- ❖ Transfert et devenir résidus pharmas dans des sols amendés par des PRO – RISMEAU, AERMC (TELESPHORE) – **Coll. INSA Lyon**
- ❖ Produits de transformation pesticides – ECOPHYTO (TAPIOCA) – **Coll. UR Riverly Lyon, ISA Lyon**
- ❖ Devenir et impact environnemental des PFAs – ADEME Gesipol (IPANEMA) – **Coll. UMR EMMAH Avignon**
- ❖ Effets perturbateurs endocriniens (Typol-PE) – OFB-ADEME **Thèse début 2023**
- ❖ Liens avec USEtox : adaptation à d'autres compartiments : sol dans le cadre filière PRO – ADEME Impacts (ACVEcotoMix) – Coll. CIRAD, INERIS
- ❖ *Produits de Biocontrôle vers une prise en compte mode d'action et effets – Horizon EU Déposé – Coord Univ Ghent -*



## ➤ 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., Miege, 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*. [doi:10.1080/10643389.2014.955627](https://doi.org/10.1080/10643389.2014.955627)
- Storck V., Lucini L., Mamy L., Ferrari F., Papadopoulou E.S., Nikolaki S., Karas P.A., Servien R., Karpouzas D.G., Trevisan M., Benoit P., Martin-Laurent F., 2016. Identification and characterization of tebuconazole transformation products in soil by combining suspect screening and molecular typology. *Environmental Pollution*, 208, 537-545. [doi:10.1016/j.envpol.2015.10.027](https://doi.org/10.1016/j.envpol.2015.10.027)
- Benoit P., Mamy L., Servien R., Li Z., Latrille E., Rossard V., Bessac F., Patureau D., Martin-Laurent F. 2017. Categorizing chlordecone potential degradation products to explore their environmental fate. *Science of the Total Environment*, 574, 781-795. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.09.094>
- Traoré H, Crouzet O., Mamy L., Sireyjol C., Rossard V., Servien R., Latrille E., Martin-Laurent F., Patureau D., Benoit P. 2018. Clustering pesticides according to their molecular properties and their impacts by considering additional ecotoxicological parameters in the TyPol method. 2017. *Environmental Science and Pollution Research* 25:4728–4738. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-0758-8>
- Aemig, Q., Hélias, A., Patureau, D., 2021. Impact assessment of a large panel of organic and inorganic micropollutants released by wastewater treatment plants at the scale of France, *Water Research*, 188, 116524, <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116524>.
- Bonnot K. 2021. Approche in silico pour analyser et prédire la transformation de contaminants organiques émergents dans l'environnement. Thèse Montpellier SupAgro - Ademe-INRAE. Soutenue Décembre 2021. 232pp.
- Mamy L., Bonnot K., Benoit P., Bockstaller C., Latrille E., Rossard V., Servien R., Patureau D., Prevost L., Pierlot F., Bedos C. 2021 Assessment of pesticide emission potential to atmosphere from their molecular properties using the TyPol tool. *Journal of Hazardous Materials*, 415, 125613 <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.125613>
- Bonnot K., Benoit P., Mamy L., Patureau P. 2022. Transformation products of PPCPs in the environment: review of existing knowledge and classification of formation pathways according to parent molecule chemical structures. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, sous presse Jan 2022.
- Bonnot K., Benoit P., Hoyau S., Mamy L., Patureau D., Servien R., Rapacioli M., Bessac F. 2022. Accuracy of computational chemistry methods to calculate organic contaminant molecular properties. *Soumis à Journal of Computational Chemistry Janv 2022*
- Servien R, Latrille E, Patureau D, Hélias A (2021) Machine learning models based on molecular descriptors to predict human and environmental toxicological factors in continental freshwater. *bioRxiv*, 2021.07.20.453034, ver. 6 peer-reviewed and recommended by Peer Community in Ecotoxicology and Environmental Chemistry. <https://doi.org/10.1101/2021.07.20.453034>
- Servien, R., Leenknecht, C., Bonnot, K., Rossard, V., Latrille, E., Mamy, L., Benoit, P., Hélias, A., Patureau, D., 2022. Improved impact assessment of micropollutants release from WWTPs, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 100172. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2021.100172>.