

Mise en place d'un workflow automatisé de traitement de données métabolomique pour l'évaluation du devenir et de l'impact environnemental de biopesticides

Mots clés : biopesticides, environnement, devenir, impact, bioinformatique, réglementation

Résumé :

Les biopesticides sont de plus en plus utilisés comme alternatives aux pesticides conventionnels. Jusqu'à présent, le temps de demi-vie ($t_{1/2}$) des pesticides était une variable majoritairement utilisée pour étudier le devenir de ces composés dans le sol. Cependant, ce paramètre comporte plusieurs limitations. Tout d'abord, il ne prend pas en compte la formation de sous-produits de dégradation et l'impact des pesticides sur la biodiversité. De plus, il ne peut pas être utilisé pour les biopesticides qui sont des mélanges très complexes (ex : extraits végétaux). L'utilisation de méthodes à haut-débit est donc nécessaire pour décrire leurs devenir et impacts. Parmi ces méthodes, l'utilisation de la **métabolomique non-ciblée**, méthode intégrative, est appropriée puisqu'elle offre la possibilité de suivre la dégradation de l'ensemble des substances contenues dans les biopesticides (xénométabolome : dissipation de composés parents et formation de produits de dégradation), ainsi que d'évaluer leur impact sur le sol (endométabolome : métabolites du sol impactés). **C'est dans ce contexte que laboratoire CRIODE a développé une approche de métabolomique environnementale basée sur l'utilisation de l'UHPLC-HRMS, l'Environmental Metabolic Footprinting (EMF)** [1-6]. Cette méthode est totalement adaptée à l'évaluation du devenir et de l'impact environnemental de biopesticides. Cependant, les données obtenues en métabolomique (UHPLC-HRMS) sont très complexes et nécessitent des traitements très pointus pour en tirer des informations fiables et les plus complètes possible.

L'objectif est donc de mettre en place un workflow de traitement de données automatisé, issues d'une approche en métabolomique non-ciblée, simple et rapide. Ce travail est essentiel puisque les réglementations poussent à l'utilisation des produits de biocontrôle mais que les méthodologies d'évaluation classiquement utilisées pour les pesticides conventionnels ne sont pas adaptées pour les substances complexes.

PROPOSITION DE STAGE DE MASTER 2 (6 mois février 2026 - juillet 2026)

Le stagiaire devra mettre au point des scripts automatisés pour traiter des données acquises en UHPLC-MS pour évaluer la dissipation des composés du biopesticide incluant les agents de formulation, de leurs produits de dégradation ainsi que leur impact environnemental. Le stage de M2 proposé fera suite aux travaux de thèse d'Anouar Mejait [6]. Pour cela, des données déjà acquises au laboratoire (cinétique avec différentes modalités de traitement) ainsi que les scripts mis au point au cours de la thèse précédente seront fournis au stagiaire pour qu'il développe ce workflow de traitement de données automatisé.

Le stagiaire sera également en charge de la rédaction d'une note explicative d'utilisation de son workflow de traitement.

Compétences :

Le stagiaire devra avoir les compétences suivantes :

- Traitements de données statistiques (univariées et multivariées type PCA, PLSDA),
- Ecriture de scripts (logiciel R par exemple), notamment pour filtrer, trier et classer les données,
- Aptitude à concevoir, développer et documenter des scripts pour le traitement bio-informatique de données métabolomiques, en toute autonomie et avec rigueur,
- Des connaissances des techniques chromatographiques seraient appréciées,
- Bonnes compétences organisationnelles,
- Volontaire et rigoureux,
- Bonne aptitude à travailler en équipe
- Autonome

Contact :

Les étudiants intéressés par cette proposition de stage pourront nous contacter par mail, et nous fixerons un rendez-vous pour discuter du sujet (cela peut-être en distanciel).

- **Dr. Marie-Virginie Salvia**, marievirginie.salvia@univ-perp.fr (laboratoire CRIODE)
- **Pr. Cédric Bertrand**, cedric.bertrand@univ-perp.fr (laboratoire CRIODE)
- **Dr. Annabel Levert**, annabel.levert@akinao-lab.com (SAS AKINAO)

Lieu du stage :

Laboratoire CRIODE, Université de Perpignan - 58, Avenue Paul Alduy, Perpignan,

Société AKINAO, MAS AKINAO, Chemin du Romani, 66300 Ponteilla

Période du Stage : Février à Juillet 2026 (6 mois)

Gratification stagiaire légale en vigueur à la date du recrutement.

[1]: C. Patil, C. Calvayrac, Y. Zhang, S. Romdhane, M.-V. Salvia, J.-F. Cooper, F. E. Dayan and C. Bertrand (2016) Environmental Metabolomic Footprinting: a novel application to study the impact of a natural and synthetic β -triketone herbicide in soil. *Science of the Total Environment* 566-567, pp. 552-558, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2016.05.071

[2]: M-V. Salvia, A. Ben Jrad, D. Raviglione, Y. Zhou, C. Bertrand (2018) Environmental Metabolic Footprinting (EMF) vs. half-life: a new and integrative proxy for the discrimination between control and pesticides exposed sediments in order to further characterize pesticides' environmental impact. *ESPR*, 25, pp. 29841-29847, DOI: 10.1007/s11356-017-9600-6

[3]: S. Romdhane, M. Devers-Lamrani, J. Beguet, C. Bertrand, C. Calvayrac, M.-V. Salvia, A. Ben Jrad, F.E. Dayan, A. Spor, L. Barthelmebs, F. Martin-Laurent (2019) Assessment of the ecotoxicological impact of natural and synthetic β -triketone herbicides on the diversity and activity of the soil bacterial community using omic approaches. *Science of the Total Environment*, 651, pp. 241-249, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.09.159>

[4]: M. Ramos, H. Ghosson, D. Raviglione, C. Bertrand, M.-V. Salvia (2021). Untargeted metabolomics as a tool to monitor biocontrol product residues' fate on field-treated *Prunus persica*. *Science of the Total Environment*, 807, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.150717

[5]: H. Ghosson, D. Raviglione, C. Bertrand, M.-V. Salvia (2024). LC-HRMS-driven computational toolbox to assess extraction protocols dedicated to untargeted analysis: How to ease analyzing pesticides-contaminated soils?, *Analytical Chemistry*, 96 (7), pp. 2810-2821, <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c03242>

[6]: A. Mejait, V.D.T. Tran, H. Ghosson, F. Mehl, M. Pagni, D. Raviglione, C. Bertrand, M.-V. Salvia (2025). Development of a tool based on untargeted metabolomics for the evaluation of the dissipation time of a complex biocontrol product in soil. *Environmental Advances*, <https://doi.org/10.1016/j.envadv.2025.100665>