

Contamination des eaux de surface soumises à des pressions anthropiques : développement d'outils pour la caractérisation par analyses non-ciblées en spectrométrie de masse haute résolution avec mobilité ionique

Julien Sade

Résumé

Les micropolluants organiques dans les eaux de surface urbaines représentent un défi analytique en raison de leur diversité et de leurs faibles concentrations. Dans ce travail, une chaîne de traitement des données tridimensionnelles issues d'analyses par LC-IMS-HRMS a été développée. Elle a prouvé son efficacité en termes de conversion des données, de détection et d'identification automatique, ainsi que de semi-quantification de composés sans standards analytiques. Son application à des échantillons d'eaux de surface impactées par des rejets urbains de temps de pluie (RUTP) a permis de caractériser les distributions spatio-temporelles des contaminants, et d'estimer leur éventuelle toxicité. Enfin, un modèle statistique utilisant l'ensemble des signaux analytiques a été développé pour estimer de manière inédite la contamination des eaux de surface par les RUTP, sans nécessiter l'identification préalable des composés. Cette approche offre de nouvelles perspectives dans l'évaluation des impacts des RUTP sur les organismes aquatiques.

Mots clés : micropolluants, eau de surface, analyse, écotoxicologie, machine learning, rejets urbains de temps de pluie.

Abstract

Organic micropollutants in urban surface waters represent an analytical challenge due to their diversity and low concentrations. In this work, a processing chain for three-dimensional data from LC-IMS-HRMS analyses was developed. It has proven its efficiency in terms of data conversion, automatic detection and identification, and semi-quantification of compounds without analytical standards. Its application to surface water samples impacted by urban wet weather discharges (UWWD) enabled us to characterize the spatio-temporal distributions of contaminants, and to estimate their potential toxicity. Finally, a statistical model using all the analytical signals was developed to estimate surface water contamination by UWWD in a novel way, without requiring prior identification of the compounds. This approach opens up new prospects for assessing the impact of UWWD on aquatic organisms.

Keywords : micropollutants, surface water, analysis, ecotoxicology, machine learning, urban wet weather discharges.