

Internship Subject - KREATiS 2019

Internship type: industrial placement

Activity: R&D

Period: 6 months

Assistance for developing predictive models in ecotoxicology

Scope: Under the REACH regulation ⁽¹⁾ aquatic ecotoxicity is generally measured using experimental methods following OECD guidelines (section 2) ⁽²⁾. However, these tests can be time-consuming and expensive to perform. To help the chemical industry limit experimentation in vertebrates according to the 3Rs principles (Replace – Reduce – Refine), KREATiS develops *in silico* alternatives to animal testing. The aim of KREATiS is to provide predictions from validated *in silico* models ⁽³⁾ which are as accurate as reliable laboratory studies.

Work execution: This internship aims to bring help for the developing of predictive models in ecotoxicology performed by KREATiS team. After getting acquainted with the subject, the intern will collect data in ecotoxicology and physicochemistry and will assess the reliability of the studies according to regulatory norms (OECD guidelines and Klimisch score system). Then, the data will be integrated into the internal database of the company. The intern will participate in (Q)SAR models development and statistical validation in order to implement them in iSafeRat® software. Finally, the intern will take part in an R&D internal project dedicated to exploring the predictability of a novel modelling strategy to predict endocrine disruption effects on aquatic organisms, notably fish.

Missions:

- data mining and reliability assessment of physicochemical and aquatic ecotoxicological data;
- internal database management;
- predictive model development in ecotoxicology (QSAR models training and statistical validation);
- bibliographic search for data about endocrine disruption effects of chemicals to fish.

Skills and knowledge required:



If you are interested, please send CV together with a cover letter to pascal.bichere@kreatis.eu.

(1) Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency.
 (2) OECD Guideline for testing of chemicals, section 2. Effects on Biotic Systems.
 (3) OECD (2004) Principles for the validation, for regulatory purposes, of (Quantitative) Structure Activity-Relationship Models
 (4) iSafeRat® – in Silico Algorithms For Environmental Risk And Toxicity (2019)

Sujet de stage KREATiS 2019

Type de stage : stage-métier

Activité : R&D

Durée : 6 mois

Aide au développement de modèles prédictifs en écotoxicologie

Contexte : Dans le cadre de la réglementation européenne REACH⁽¹⁾, la toxicité aquatique est généralement mesurée en procédant à des tests expérimentaux dont les méthodes suivent les lignes directrices de l'OCDE (section 2)⁽²⁾. Cependant, ces tests peuvent s'avérer longs et coûteux. Afin d'aider l'industrie chimique à limiter l'expérimentation chez les vertébrés selon le principe des 3R (Remplacer – Réduire – Raffiner, KREATiS propose des méthodes *in silico* qui sont des alternatives aux tests en laboratoire menés chez les animaux. L'objectif de KREATiS est de fournir des prédictions générées par des modèles QSAR validés⁽³⁾ dont les résultats sont au moins aussi précis que ceux issus d'études en laboratoire validées comme fiables.

Description : Ce stage-métier consiste à assister le travail de développement des modèles prédictifs en écotoxicologie mené par l'équipe de KREATiS. Une fois familiarisé avec le sujet, vous serez amené à collecter des données d'écotoxicologie et de physicochimie et à en évaluer leur fiabilité selon les normes réglementaires d'expertise (lignes directrices OCDE et système de score Klimisch). Ensuite, ces données seront intégrées dans une base de données interne à la société selon des critères bien définis. Vous participerez au développement de modèles (Q)SAR et à leur validation statistique en vue de leur intégration dans le logiciel iSafeRat®⁽⁴⁾. Enfin, vous prendrez également part à un projet de recherche interne ayant pour objectif d'étudier l'application d'une nouvelle approche de modélisation pour prédire les effets de perturbation endocrinienne sur les organismes aquatiques, notamment les poissons.

Missions :

- recherche et évaluation de données de physicochimie et d'écotoxicologie aquatique ;
- gestion d'une base de données interne ;
- développement de modèles prédictifs en écotoxicologie (entraînement de modèles QSAR et participation à la validation statistique) ;
- recherche bibliographique de données sur les effets de perturbations endocriniennes des substances chimiques sur le poisson.

Connaissances et compétences recherchées

Chimie Organique

Statistiques

Base de données

Réglementation

Ecotoxicologie

Anglais

Si vous êtes intéressé(e), merci de nous envoyer votre candidature (CV et lettre de motivation) à l'adresse suivante : pascal.bicherel@kreatis.eu

(1) Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency.

(2) OECD Guideline for testing of chemicals, section 2. Effects on Biotic Systems.

(3) OECD (2004) Principles for the validation, for regulatory purposes, of (Quantitative) Structure Activity-Relationship Models

(4) iSafeRat® – in Silico Algorithms For Environmental Risk And Toxicity (2019)