	Aude – Ratier (2016-2019)
	Modélisation biodynamique de l'accumulation de composés organiques persistants chez les invertébrés benthiques d'eau douce.
	Encadrants : Marc Babut, Christelle Lopes (UMR 5558 LBBE), Olivier Geffard
	École Doctorale: E2M2, Lyon Partenariat : UMR LBBE CNRS-Lyon 1, UMR EPOC CNRS-Bordeaux

Un modèle toxicocinétique générique est développé pour les invertébrés benthiques. Les paramètres du modèle sont simultanément estimés par inférence bayésienne. Le processus de biotransformation est pris en compte dans le modèle générique.

Contexte

Les effets d'une contamination sur des organismes sont évalués dans un premier temps en étudiant la toxico-cinétique du composé d'intérêt, c'est-à-dire le lien entre la concentration d'exposition et la concentration bioaccumulée par l'organisme, qui va contrôler la phase toxicodynamique (i.e. les effets toxiques proprement dits). La bioaccumulation de contaminants métalliques ou organiques chez les espèces aquatiques est un phénomène variable, puisqu'il dépend à la fois des caractéristiques physico-chimiques du milieu, des propriétés des contaminants mais aussi de l'espèce considérée. Différents modèles toxicocinétiques (TK) ont été développés jusqu'à présent pour décrire l'accumulation de contaminants, où l'organisme est souvent considéré comme un compartiment unique ; la bioaccumulation est alors décrite comme la résultante de flux entrants (absorption – voie dissoute et/ou trophique) et sortants (élimination – excrétion, biotransformation, et/ou dilution par la croissance)^[1]. Les modèles existants pour les composés organiques persistants, comme par exemple les PCB, négligent généralement la biotransformation, bien qu'il s'agisse d'un processus clé, participant à la diminution de la résultante des flux entrants et sortants, au même titre que l'excrétion. Par ailleurs la cinétique du ou des métabolites, susceptibles eux-mêmes d'avoir des effets toxiques, n'est pas non plus prise en compte par la plupart des modèles existants. A ce jour, il n'existe pas de cadre générique de modélisation réunissant l'ensemble des processus en jeu dans la bioaccumulation des contaminants organiques persistants chez les invertébrés benthiques.

Objectifs, démarche

Ce projet a pour objectif de développer un cadre générique de modélisation biodynamique en s'appuyant sur des données expérimentales originales obtenues en laboratoire (cinétiques d'accumulation et d'élimination de composés organiques), par trois espèces d'invertébrés benthiques présentant des traits biologiques variés : *Gammarus fossarum*, *Chironomus riparius* et *Radix auricularia*, exposés à des sédiments ou à des feuilles contaminés par un polychlorobiphényle (PCB 153), un polybromodiphényléther (BDE-99), l'hexabromocyclododécane (HBCD) et le pyrène (hydrocarbure polycyclique aromatique, HAP). Un cadre bayésien est développé afin d'estimer les paramètres du modèle simultanément, et ainsi obtenir les prédictions autour des données observées.

Résultats

Pour chaque expérience, les distributions marginales de chacun des paramètres ont été obtenues à partir des distributions jointes *a posteriori* ; les prédictions du modèle générique s'ajustent généralement bien aux données observées, par exemple pour le PCB153 chez les trois espèces étudiées (**Figure 1**). Par ailleurs, le processus de biotransformation a pu être inséré dans le modèle, ce qui permet d'estimer simultanément les paramètres des composés parents et des métabolites. L'approche bayésienne est une réelle valeur ajoutée par rapport à la méthode

fréquentiste classiquement utilisée, puisqu'elle permet de considérer les connaissances préalables (distributions *a priori*), la corrélation de tous les paramètres du modèle (distribution jointe), et de prendre en compte des données de nature différente (e.g. données de bioaccumulation et croissance) ou différentes conditions expérimentales.

Vers des applications opérationnelles

En France, les HAP sont généralement analysés dans le sédiment dans le cadre des suivis annuels au titre de la directive-cadre sur l'eau (DCE). Cependant, la directive 2013/039 spécifie que la norme de qualité environnementale (NQE) doit concerner le biote. Afin de ne pas modifier le protocole de surveillance mis en place depuis plusieurs années, et ainsi éviter une perte de continuité des données, le modèle pourrait être utilisé comme outil de prédiction pour estimer la concentration dans le biote correspondant aux concentrations mesurées dans le sédiment (**Figure 2**).

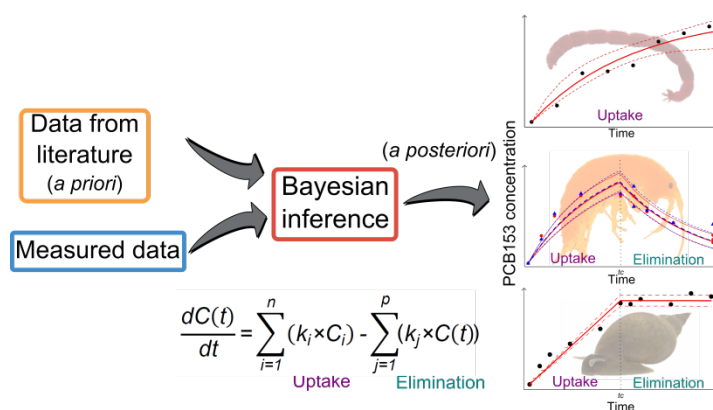


Figure 1. Concentrations observées (points ou triangles) et prédites (courbes) chez les trois espèces d'invertébrés en fonction du temps. Les courbes pleines représentent les prédictions médianes et les courbes en pointillées représentent les intervalles de crédibilité à 95%.

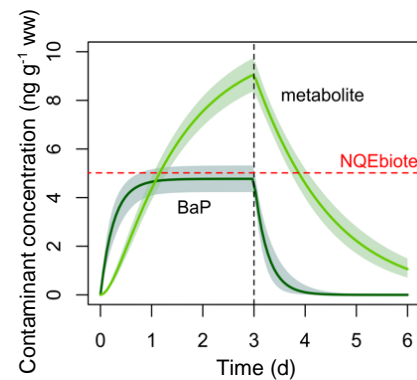


Figure 2. Prédictions médianes et intervalles de crédibilité à 95% des concentrations en Benzo(a)Pyrène (BaP) et son métabolite chez *Chironomus tentans* exposé à du sédiment contaminé à 25 ng g⁻¹ ps.

Thèse réalisée en partenariat avec le LPTC (UMR Université de Bordeaux-CNRS 5805 EPOC)

Références

[1] Luoma, S.N., and P.S. Rainbow. 2005. *Why Is Metal Bioaccumulation So Variable ? Biodynamics as a Unifying Concept*. Environmental Science and Technology 39: 1921-31.

Publications et communications :

- Ratier, A., Lopes, C., Labadie, P., Budzinski, H., Delorme, N., Quéau, H., Peluhet, L., Geffard, O., Babut, M. 2019. A Bayesian framework for estimating parameters of a generic toxicokinetic model for the bioaccumulation of organic chemicals by benthic invertebrates: proof of concept with PCB153 and two freshwater species. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. (in revision)
- Babut, M., Ratier, A., Delorme, N., Lopes, C., Labadie, P., Budzinski, H., 2019. Modélisation biodynamique de l'accumulation de substances persistantes par des invertébrés benthiques d'eau douce. p. 70. (convention Irstea-Agence Française de la Biodiversité, action n°47)
- Poster SEFA Lille, juin 2017. Modélisation biodynamique de l'accumulation de composés organiques persistants par des invertébrés benthiques d'eau douce.
- Poster SETAC Rome, mai 2018. Bioaccumulation and bioisomerization of Hexabromocyclododecane (HBCD) by the freshwater crustacean *Gammarus fossarum*.
- Poster SETAC Rome, mai 2018. A Bayesian approach to estimate biodynamic model parameters: bioaccumulation of PCB 153 by the freshwater crustacean *Gammarus fossarum*.
- Poster SETAC Helsinki, mai 2019. Bioaccumulation of brominated flame retardants (BFRs) by two freshwater invertebrates exposed to different routes.

- *Conférence* SEFA Montpellier, juin 2018. Approche bayésienne pour estimer les paramètres d'un modèle biodynamique chez les invertébrés benthiques d'eau douce.
- *Conférence* GDR écotoxicologie aquatique Antony, décembre 2018. Approche bayésienne pour estimer les paramètres d'un modèle toxico-cinétique chez les invertébrés benthiques d'eau douce.
- *Conférence* SETAC Helsinki, mai 2019. An attempt to account for biotransformation in bioaccumulation models for aquatic invertebrate species.