

Résumé

La présence de contaminants dans le milieu aquatique soulève la question de leur toxicité pour les organismes. Dans l'évaluation du risque environnemental, les effets d'une contamination sur des organismes sont évalués en deux temps. Tout d'abord, une étude de la toxico-cinétique (TK) du composé d'intérêt a lieu, c'est-à-dire établir le lien entre la concentration d'exposition et la concentration bioaccumulée par l'organisme. Par la suite, une étude toxico-dynamique (TD) est réalisée pour établir le lien entre la concentration du contaminant bioaccumulé dans l'organisme et sa toxicité.

La bioaccumulation est un phénomène variable, qui dépend des propriétés physico-chimiques des contaminants, de l'espèce considérée et des conditions environnementales. Des outils mathématiques, comme les modèles TK, ont été développés pour expliquer cette variabilité et paraissent de nature à pallier cette difficulté. Toutefois, l'implémentation de ces modèles impose de lever des verrous, comme l'estimation du taux de biotransformation et le devenir des métabolites, et d'estimer précisément l'incertitude sur les valeurs des paramètres toxico-cinétiques.

Ces travaux de thèse ont permis de développer un cadre générique de modélisation et d'inférence associée pour décrire et prédire la bioaccumulation de composés persistants (hexachlorobiphényle, hexabromocyclododécane, pentabromodiphényl-éther, pyrène) par différentes espèces d'invertébrés benthiques (insecte *Chironomus riparius*, crustacé amphipode *Gammarus fossarum*, mollusque gastéropode *Radix auricularia*).

La démarche adoptée au cours de cette thèse a consisté en la mise en œuvre d'essais de bioaccumulation au laboratoire, qui ont fournis les données expérimentales permettant de développer le cadre de modélisation et de tester différentes hypothèses sur les voies d'exposition des organismes. L'estimation des paramètres TK est réalisée par inférence Bayésienne, qui permet entre autres d'estimer simultanément tous les paramètres à partir de toutes les données disponibles, ce qui permet d'obtenir précisément l'incertitude autour de leur valeur et des prédictions du modèle.

Les différentes hypothèses testées à partir des données expérimentales correspondent à autant de modèles, dont on peut comparer les « performances ». Dans l'ensemble, ces modèles ont permis d'obtenir une estimation précise des paramètres et de leur incertitude. De plus, leurs prédictions s'ajustaient correctement aux données expérimentales, sauf dans le cas de l'HBCD. Une fonction de biotransformation a également été implémentée avec succès sur la base de données issues de la littérature (produits phytopharmaceutiques, médicaments, HAP). L'inférence bayésienne appliquée au modèle générique a permis d'obtenir une incertitude réduite concernant le taux de biotransformation par rapport à celle des modèles originaux reposant sur une inférence classique.

Ce cadre générique de modélisation et d'inférence associée, développé dans une approche bayésienne et pouvant s'adapter à chaque couple espèce-contaminant que l'on souhaite étudier, se révèle être un outil performant dans la description des toxico-cinétiques de contaminants ainsi que dans l'évaluation de l'incertitude sur les paramètres et les prédictions.

Mots clés : invertébrés benthiques – composés organiques – bioaccumulation – inférence Bayésienne – modèle toxico-cinétique – biotransformation