

Généralités sur les modèles de bioaccumulation
Quels outils Quelles utilisations

Chapitre 4: Généralités sur les modèles de bioaccumulation : Quels outils ? Quelles utilisations ?

Pendant des années, la description des organismes et des systèmes était la principale méthode appliquée par les biologistes et les naturalistes. Ainsi, après une série d'observations judicieuses, les organismes et leur comportement étaient décrits, résultats d'expériences après un éventuel filtrage statistique. Une autre voie d'approche est la méthode scientifique de critique rationaliste, à savoir la formulation d'hypothèses de telle manière qu'elles peuvent être désapprouvées si elles sont fausses et l'expérience adéquate pour refuser ces hypothèses. Dès que les systèmes marins sont approchés, les échelles d'espace et de temps associées aux processus sont tellement diverses et complexes que la modélisation s'est avérée un outil complémentaire indispensable. Un modèle mathématique est une formulation graphique, symbolique ou numérique d'une série d'hypothèses établies de telle façon qu'elles puissent être traitées par des opérations mathématiques.

Une fois validé, un modèle permet de réaliser des simulations pour établir l'importance relative de ces différents processus. Un modèle mathématique d'un écosystème peut être développé en quantifiant les interactions biogéochimiques en équations mathématiques et en mettant en relation ces équations par des programmes informatiques. Ce sont des outils importants pour formaliser les connaissances et pour valider des hypothèses incorporées dans celles-ci. Ils nous aident à comprendre un processus en testant des théories mécanistiques. Est-ce que notre théorie (traduite en équations mathématiques) est suffisante pour décrire le phénomène observé dans la réalité ? Le compromis entre la complexité et le réalisme du modèle est central pour tout exercice de modélisation. La plupart des modèles complexes peuvent être très réalistes, mais du fait de la considération de paramètres non-connus, il devient impossible de les valider. De tels modèles fournissent une légère compréhension du processus étudié mais ne permettent pas d'augmenter la confiance en une théorie. En effet, ils sont souvent confrontés à un manque de connaissances concernant les processus biologiques clés et leurs mécanismes qui ne peuvent pas être remplacés par des expertises mathématiques (Kuiper, 1984). Le dilemme en modélisation est de décrire le plus grand nombre de processus sans en sacrifier le réalisme et l'applicabilité.

Dans ce chapitre, une étude bibliographique sur les modèles de bioaccumulation est présentée afin de faire une synthèse des différentes approches de modélisation, d'en dégager les structures de base ainsi que les principaux processus considérés et de définir les questions auxquelles ils permettent de répondre. Les modèles cinétiques suivent les substances chimiques dans les organismes, les réseaux trophiques ou les écosystèmes (Veith *et al.*, 1979; Ernst, 1980; Zaranko *et al.*, 1997). Plusieurs modèles thermodynamiques ont été proposés pour évaluer la distribution des composés entre les compartiments de l'environnement: air, eau, sédiment et organisme (Gobas, 1993). Les modèles décrivant la cinétique

du contaminant peuvent être divisés en deux classes: les modèles cinétiques à compartiments, les modèles cinétiques à base physiologique ou énergétique (Landrum *et al.*, 1992).

1 Les modèles cinétiques à compartiments

1.1 Généralités

L'approche dominante de modélisation en écotoxicologie se fait *via* les modèles à compartiments. Mais leurs limitations et leur conditions d'usage ne sont pas toujours bien connues. Ce paragraphe tente d'expliquer la nature basique du modèle à un compartiment et de ses taux constants quelque soit la situation et explore ce qu'il se passe lorsque les hypothèses de régime stationnaire du milieu environnant ne sont pas respectées.

Beaucoup d'études en biologie ou écotoxicologie peuvent être réalisées en utilisant des modèles à compartiments. Au fond, l'analyse commence par l'identification des compartiments, qui peuvent être n'importe quelle entité traitée de façon homogène au regard d'une entité transportée à partir ou vers ce compartiment. Pour être plus explicite, la focalisation se fait sur un problème écotoxicologique où les compartiments peuvent être une part de l'environnement (comme un lac ou un site expérimental), ou un organisme (comme un poisson ou un bivalve) ou une partie spécifique d'un organisme (comme l'estomac ou le soma). L'entité transportée est dans ce cas le contaminant. Le choix du compartiment ne dépend pas seulement du système décrit mais surtout de l'échelle spatiale et/ou temporelle du problème étudié. Par exemple, pour décrire le transfert de contaminants à travers une chaîne trophique, le poisson pourra être décrit comme un compartiment unique. Quand il s'agit des cinétiques de contamination dans un organe spécifique, il est nécessaire d'ajouter plus de compartiments pour décrire le système.

1.2 Concept et formulation du modèle

Les modèles cinétiques compartimentaux décrivent les flux des contaminants entre les compartiments. Un compartiment est un milieu homogène contenant un composé qui transite à travers ses limites avec simplement un taux d'entrée (k_u) et un taux d'élimination (k_e) (Lake *et al.*, 1987; Walker, 1990; Landrum *et al.*, 1992; Péry *et al.*, 2001; Péry *et al.*, 2002).

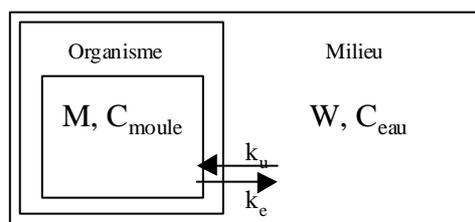


Figure 4.1.: Schéma conceptuel type d'un modèle de bioaccumulation d'un organisme représenté par un seul compartiment.

La moule est donc représentée par un unique compartiment où l'accumulation et les pertes sont liées à la concentration en contaminant présent dans le milieu, indépendamment de l'état physiologique de cet organisme bioindicateur (Figure 4.1). Ainsi, l'équation d'évolution temporelle de la concentration en contaminant est:

$$\frac{dC_{moule}}{dt} = k_u C_{eau} - k_e C_{moule}$$

avec C_{moule} : concentration en contaminant dans l'organisme ($\mu\text{g.g}^{-1}$);
 C_{eau} : concentration en contaminant dans l'eau ($\mu\text{g.mL}^{-1}$);
 k_u : taux d'entrée du contaminant *via* l'eau (h^{-1});
 k_e : taux de sortie du contaminant (h^{-1}).

La concentration en contaminant dans l'organisme (C_{moule}) résulte de la balance nette de la capture de contaminant *via* l'eau ($k_u C_{eau}$) et de l'élimination à partir de l'organisme ($k_e C_{moule}$). L'organisme est ainsi vu comme un compartiment unique homogène. A l'entrée sous forme dissoute peut être ajoutée une entrée du contaminant sous forme particulaire ($k_p C_{nourriture}$) (avec k_p : taux d'entrée du contaminant *via* les particules, et $C_{nourriture}$: concentration en contaminant sur les particules).

$$\frac{dC_{moule}}{dt} = k_u C_{eau} + k_p C_{nourriture} - k_e C_{moule}$$

1.3 Hypothèses d'application

La résolution de cette équation différentielle implique un certain nombre d'hypothèses pour être appliquée:

- Le compartiment est supposé homogène au vu de la concentration en contaminant, dont la répartition au sein de l'organisme est instantanée.
- La capture et l'élimination sont le résultat d'un processus passif; les flux sont proportionnels à la concentration en contaminant du milieu donneur.
- La concentration d'exposition est constante et non influencée par la capture au sein de l'organisme.
- Le compartiment récepteur a un volume constant, donc l'organisme ne grandit pas et ne maigrit pas.
- Les taux sont constants en temps et en concentration.

1.4 Etat d'équilibre

Lorsque l'exposition, les facteurs environnementaux et physiologiques affectant la capture et la perte de contaminants, les maintiennent constants pour un temps suffisamment long, les organismes peuvent atteindre un état d'équilibre. Ces conditions d'état d'équilibre reflètent les limites du modèle cinétique quand l'accumulation est exactement balancée par les pertes. L'approche traditionnelle de concentration (modèle de partition d'équilibre) évalue la concentration en éléments traces dans

l'organisme sur la base de ceux dans l'environnement extérieur, utilisant le ratio de la concentration de l'élément dans l'animal sur celle dans l'eau et/ou la nourriture. Cette méthode suppose un équilibre dans le partitionnement du métal au sein des compartiments variés (eau et nourriture). Elle fournit des informations sur l'enrichissement des métaux dans l'organisme avec le respect de l'environnement ambiant mais ne permet pas de définir les conditions environnementales et physiologiques (Reinfelder *et al.*, 1998). Sous ces conditions simplifiées, l'état d'équilibre des tissus a été décrit par un facteur de bioconcentration pour des expositions aqueuses:

$$FBC = \frac{C_{moule}}{C_{eau}}$$

avec FBC : facteur de bioconcentration (mL.g^{-1});
 C_{moule} : concentration en contaminant dans l'organisme ($\mu\text{g.g}^{-1}$);
 C_{eau} : concentration en contaminant dans l'eau environnante ($\mu\text{g.mL}^{-1}$).

Le FBC représente l'équilibre dynamique entre l'organisme et les sources. Le formalisme du FBC est impraticable quand les concentrations des sources sont inconnues et variables ou encore quand les phases solides, les sédiments et la nourriture contribuent significativement à la capture. Dans ces cas, l'accumulation à l'état d'équilibre est toujours référencée à la source nourriture ou sédimentaire, plus qu'à la source aquatique:

$$FB = \frac{C_{moule}}{C_{nourriture}}$$

avec FB : facteur de bioaccumulation (mL.g^{-1});
 C_{moule} : concentration en contaminant dans l'organisme ($\mu\text{g.g}^{-1}$);
 $C_{nourriture}$: concentration en contaminant dans la nourriture ingérée ($\mu\text{g.mL}^{-1}$).

1.5 Extension du concept: les modèles cinétiques à plusieurs compartiments

L'interprétation de l'accumulation de contaminants dans les organismes biologiques peut être réalisée en utilisant des modèles à plusieurs compartiments (Tessier *et al.*, 1993). En effet, les contaminants, sous forme libre ou complexée, accèdent à différents compartiments internes de l'organisme. Les processus d'accumulation dans les tissus sont extrêmement complexes.

Les contaminants dispersés dans l'environnement pénètrent dans un compartiment récepteur au sein duquel ils vont entrer en contact avec des interphases et membranes de sous-compartiments (organes). La répartition du contaminant dans les différents organes (A, B), de poids respectifs α_1 et α_2 , peut alors être simulée (Ruzic, 1972). Bien évidemment, certains paramètres peuvent être négligés, simplifiant ainsi le modèle à deux compartiments (Figure 4.2).

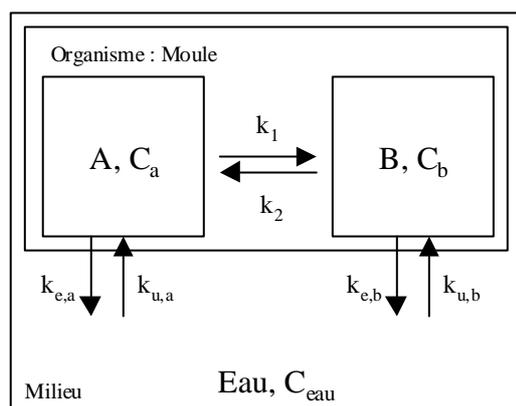


Figure 4.2.: Schéma conceptuel d'un modèle de croissance de la moule à deux compartiments: $k_{u,a}$ et $k_{u,b}$ taux d'entrée du contaminant pour chaque compartiment (A et B), $k_{e,a}$ et $k_{e,b}$ taux de sortie du contaminant pour chaque compartiment, et k_1 et k_2 taux d'échange entre les deux compartiments.

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{k_{u,a}C_{eau}}{\alpha_1} + \frac{k_2C_b}{\alpha_1} - (k_1 + k_{e,a}) \cdot C_a$$

$$\frac{dC_b}{dt} = \frac{k_{u,b}C_{eau}}{\alpha_2} + \frac{k_1C_a}{\alpha_2} - (k_2 + k_{e,b}) \cdot C_b$$

Le degré de complexité peut devenir très important pour suivre, par exemple, la dynamique des contaminants au sein de plusieurs organes d'un individu afin d'en expliquer l'organotropisme. Ainsi, la nature et l'étendue des processus de partition pour chaque contaminant sont variables selon le compartiment et l'organe et sont déterminées par un nombre important de propriétés physico-chimiques correspondantes à chaque sous-unité (Esser, 1986).

Par exemple, la production de gamètes par l'organisme peut former une voie d'élimination supplémentaire pour les contaminants. Les femelles vont perdre une fraction de leur poids à travers la ponte, dépendant de l'effort de reproduction de chaque espèce. En même temps, le poids des femelles diminue pendant la reproduction. En supposant que les œufs ou jeunes ont la même composition corporelle (à savoir quantité lipidique) et la même concentration chimique que leur parents, la balance nette est nulle. Dans ce cas, la reproduction peut alors être comparée à une dilution de croissance: c'est une production de nouvelle biomasse. Par contre, si la progéniture ou gamètes sont plus grasses que leurs parents, cette voie peut alors affecter les cinétiques. Si les contaminants se sont pas transférés, la reproduction affecte alors le poids de la femelle, en concentrant le contaminant restant. Le problème avec ce type de processus est que, pour beaucoup d'espèces, la reproduction n'est pas continue. De plus, ce processus est un procédé dépendant du temps et des conditions nutritives. L'effet de la reproduction sur la concentration corporelle nécessite donc un couplage avec un modèle de croissance et de développement de l'organisme.

2 Les modèles cinétiques à base physiologique

2.1 Généralités

Dans la représentation des processus apparaissent des paramètres. Ceux-ci sont souvent mal connus et leur détermination « in situ » est quasi impossible. C'est dans cette optique que s'est développée, parallèlement aux modèles à compartiments, une autre stratégie à base physiologique. En effet, seules des expériences menées en laboratoire permettent de donner des représentations approchées des lois et une évaluation des paramètres nécessaires, d'où leur utilisation dans les modèles. Cependant, ces lois biologiques sont déterminées pour des temps caractéristiques (jours, mois, saisons) souvent inférieurs à celui du modèle (années) et dans des conditions particulières. La transposition des résultats d'une expérience menée en laboratoire dans des modèles doit donc se faire avec une extrême prudence.

La bioaccumulation est fonction des flux entrants et sortants contenus dans les phases dissoutes et particulaires (Wang *et al.*, 1995 et 2000 ; Roditi & Fisher, 1999 ; Wang & Fisher, 1999). Les paramètres cinétiques d'accumulation (r_{da} , r_{pa} et r_{ad}) ont un rôle prédominant dans le processus de bioaccumulation. C'est sur ceux-ci qu'il faut se pencher afin de définir exactement leur signification tant biologique que chimique.

Les modèles cinétiques à base physiologique ont été développés pour évaluer la bioaccumulation des contaminants. En plus de traiter les transferts, ils tiennent compte de la physiologie de l'individu. Ils nécessitent des connaissances sur les efficacités de capture à partir de l'eau et de la nourriture (efficacité d'absorption et d'assimilation), sur les taux de filtration, d'ingestion, de croissance et d'élimination.

Ces modèles sont très flexibles et applicables à des environnements variés. Ils peuvent être utilisés dans l'interprétation de données de surveillance et pour prédire les niveaux de contamination des individus (Depledge et Rainbow, 1990; Roditi et Fisher, 1999). Ce sont les vitesses de ces mécanismes physiologiques qui déterminent la dynamique de la bioaccumulation dans le cas de la moule (Fisher *et al.*, 1996; Wang *et al.*, 1996; Wang et Fisher, 1997a; Roditi *et al.*, 2000), de la perche (Norstrom *et al.*, 1976) ou dans le cas de réseaux trophiques lacustres ou marins (Thomann et Connoly, 1984; Thomann, 1989; Connoly, 1991; Loizeau et Ménesguen, 1993; Loizeau et Cugier, 2002).

2.2 Concept et formulation du modèle

La bioaccumulation *via* plusieurs cheminements indépendants peut être décrite avec un modèle simple à un compartiment (Landrum *et al.*, 1992; Thomann *et al.*, 1992; Thomann *et al.*, 1995; Wang et Fisher, 1999).

Les bivalves marins sont exposés aux éléments traces par l'intermédiaire de la phase dissoute (filtration) et de la phase particulaire (ingestion):

$$\frac{dC_m}{dt} = [(\alpha_w FR \cdot C_w) + (EA \cdot IR \cdot C_p)] - [(k_e + g)C_m]$$

avec C_m : concentration en contaminant dans l'organisme ($\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$);
 C_w : concentration en contaminant dans l'eau ($\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$);
 C_p : concentration en contaminant dans la nourriture ($\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$);
 α_w : efficacité d'assimilation *via* l'eau (s.u);
FR : taux de filtration (h^{-1});
EA : efficacité d'assimilation *via* la nourriture;
IR : taux d'ingestion (h^{-1});
 K_e : taux d'élimination (h^{-1});
g : taux de croissance de l'organisme (h^{-1}).

2.3 Extension possible à différents types de nourriture

Par la suite, ce modèle peut prendre en compte différents types (k) de nourriture (Norstrom *et al.*, 1976; Thomann *et al.*, 1995):

$$\frac{dC_m}{dt} = \left[(\alpha_w FR \cdot C_w) + \left(\sum_{j=1}^k EA_j IR_j C_{fj} \right) \right] - [(k_e + g)C_m]$$

Les extensions peuvent avoir lieu sur les paramètres impliqués (EA et IR), chacun pouvant être hautement dépendants des conditions physiologiques et environnementales.

2.3.1 Les paramètres d'entrée: voies dissoute et particulaire

Les deux paramètres d'entrée du contaminant sous forme dissoute et particulaire (respectivement r_{da} et r_{pa}) résultent d'un couplage de paramètres biologiques (taux de filtration, taux d'ingestion) et chimiques (efficacité d'assimilation du contaminant sous forme dissoute, efficacité d'assimilation du contaminant à partir des particules ingérées) (Wang & Fisher, 1997 et 1999). Ils vont ainsi définir les deux voies

$$r_{da} = \alpha_w FR$$

$$r_{pa} = EA \cdot IR$$

d'entrée *via* l'eau et *via* la nourriture.

avec r_{da} : taux d'entrée du contaminant sous forme dissoute ($\text{L}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{jour}^{-1}$);
 r_{pa} : taux d'entrée du contaminant sous forme particulaire ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{jour}^{-1}$);
 α_w : efficacité d'assimilation du contaminant à partir de l'eau filtrée (%);
EA : efficacité d'assimilation du contaminant à partir des particules ingérées (%);
FR : taux de filtration (clearance rate) ($\text{L}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{jour}^{-1}$);
IR : taux d'ingestion ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{jour}^{-1}$).

Ainsi, les processus de nutrition interagissent avec les processus d'assimilation des contaminants (Arai *et al.*, 2002).

2.3.1.1 Taux de filtration

- Dépendance du poids

La filtration est la première réponse physiologique du mollusque face aux variations de son environnement. Celle-ci dépend de la surface des branchies (Vahl, 1973 ; Forster-Smith, 1975 ; Mohlenberg & Riisgard, 1979 ; Tran *et al.*, 2001) qui est elle-même liée à la taille de l'individu (Pessatti *et al.*, 2002). Il existe donc une très grande quantité de travaux concernant la relation entre le taux de filtration et le poids du corps chez les bivalves marins. Cette relation est généralement décrite comme une simple fonction allométrique (Bayne & Newell, 1983 ; Ren & Ross, 2001) avec une puissance variant entre 0,4 et 0,8 (Barillé, 1996 ; Morono *et al.*, 2001).

$$FR = aW^b$$

avec FR : taux de filtration (g.L^{-1}) ;

W : masse somatique (g).

En théorie, Kooijman et Metz (1984) argumentent le fait que la capture pourrait être proportionnelle à l'aire de surface de l'appareil nutritif. Assumant que le poids de structure est proportionnel au volume, et que le volume est proportionnel à la longueur. Le taux de filtration devient donc proportionnel à la longueur (L) (Ross & Nisbet, 1990).

- Dépendance de la matière organique particulaire (MOP)

Certains auteurs ne font varier la filtration qu'en fonction de la taille ou du volume de l'animal (V), indépendamment des conditions trophiques (Ross & Nisbet, 1990 ; van Haren & Kooijman, 1993). D'autres prennent en compte la quantité de matière organique particulaire totale (Smaal & Sholten, 1989 ; Bayne *et al.*, 1993). Le taux de filtration se traduit alors mathématiquement par une équation du type:

$$FR = a \cdot MOP^b V^c$$

- Dépendance de la température

Widdows et Bayne (1978) constatent que la filtration reste constante entre 5 et 20°C. Widdows (1978, 1979) enregistre une augmentation de la filtration entre 0 et 10°C, une nette diminution à 25°C et un arrêt complet à 28°C. Pour des températures extrêmes, un facteur de correction (TC) de la filtration en fonction de la température peut s'avérer nécessaire (ex. Q_{10}):

$$CR = a \cdot MOP^b V^c TC$$

2.3.1.2 Taux d'ingestion

L'ingestion réelle est égale à la consommation si celle-ci est plus petite que le seuil maximal d'ingestion. Si la ration fournie est trop importante, l'ingestion est réduite au seuil d'ingestion maximale et le surplus est évacué sous forme de pseudo-fèces.

$$IR = \text{MIN}(IR_{\text{max}}, \text{CONSO})$$

La consommation est donc égale à la filtration multipliée par la concentration particulaire. Elle s'exprime donc en fonction du taux de filtration, lui-même dépendant ou pas du poids de tissu somatique, du facteur de correction induit par la température et de la concentration en matière particulaire.

$$\text{CONSO} = \text{FR} \cdot \text{MPT}$$

avec CONSO : taux de consommation (g.h^{-1});
FR : taux de filtration (L.h^{-1});
MPT : matière particulaire totale (g.L^{-1}).

Ainsi, Ross et Nisbet (1990) décrivent le taux de filtration en fonction de la concentration en seston total (Se , mg.L^{-1}) et de la concentration nutritive (X , mg.L^{-1}):

$$IR = \text{FR} \cdot \frac{\text{Se}}{(\text{Se}_{1/2} + \text{Se})} \cdot \frac{X}{\text{Se}}$$

Ces deux concentrations varient de façon temporelle, évolution pouvant être reproduite par une fonction trigonométrique temporelle (avec t : temps, a, b et t_x ou t_s paramètres non significatifs).

$$X = a_x - b_x \cos 2\pi(t - t_x)$$

$$\text{Se} = a_s - b_s \cos 2\pi(t - t_s)$$

D'autres expriment le taux de filtration en fonction de la concentration en carbone organique particulaire (Björk & Gilek, 1997) ou encore de la concentration en matière organique particulaire (Grant & Bacher, 1998).

2.3.2 Les efficacités d'assimilation

Deux types d'efficacité d'assimilation du métal sont distinguées: une à partir de la voie dissoute et une à partir de la voie particulaire.

- efficacité d'assimilation *via* la phase dissoute: elle correspond au pourcentage de métal ingéré à partir de l'eau filtrée.

- efficacité d'assimilation *via* la phase particulaire: elle correspond au pourcentage de métal ingéré à partir de la nourriture consommée. La physiologie de la digestion conditionne en grande partie les

efficacités d'assimilation. En effet, l'assimilation des particules nutritives résulte de l'absorption de nutriments à travers l'épithélium stomacal selon les processus digestifs. Elle représente un processus de premier ordre physiologique et peut être comparée selon les différents métaux et espèces à différentes conditions. De nombreuses études ont permis d'estimer quantitativement la biodisponibilité des métaux à partir de l'ingestion (Fisher *et al.*, 1995 ; Reinfelder & Fisher, 1991; Luoma *et al.*, 1992 ; Reinfelder *et al.*, 1997 et 1998) et les efficacités d'assimilation et de séparation des différentes phases digestives (Decho & Luoma, 1991 et 1994). Ces efficacités d'assimilation des métaux correspondent finalement au produit de l'efficacité d'assimilation de la matière organique et de l'efficacité de rétention du métal sur cette matière absorbée.

2.3.3 *Le paramètre de sortie: dissous et particulaire*

L'efficacité d'absorption correspond au pourcentage de matière organique ingérée qui est absorbée. La partie qui n'est pas absorbée est rejetée sous forme de fèces. L'assimilation est égale à l'absorption diminuée de l'excrétion. Ce paramètre r_{ad} correspond donc à un taux global (dissous + particulaire) d'élimination du contaminant.

2.4 Limites d'application et complexité croissante

Un inconvénient du modèle cinétique à base physiologique est qu'il exige une évaluation de nombreux paramètres qui sont hautement dépendants des conditions physiologiques des animaux et des conditions environnementales. Il n'y a pas de valeurs génériques (spécifiques) pour chaque combinaison métal - espèce.

De plus, lorsque l'organisme change de volume, par exemple pendant la croissance, sa surface change aussi. Par conséquent, les taux d'entrée et de sortie évoluent avec la taille de l'organisme. Le fait que le ratio surface/volume détermine le taux constant, implique qu'il devient difficile de comparer les taux constants entre différentes espèces (ou entre juvéniles et adultes de la même espèce), quoique cela peut être partiellement contourné en utilisant des relations allométriques (par l'intermédiaire des taux de filtration et d'ingestion).

Le changement de volume de l'organisme a un autre effet sur la concentration dans l'organisme. Comme la quantité est divisée par le volume, le contaminant est « dilué » quand l'organisme croît et « concentré » quand il maigrit. Ceci peut être inclus dans l'équation différentielle comme un terme affectant la concentration (terme g constant). Cette formulation ne fait alors aucune hypothèse sur la façon dont va croître l'animal. Dans la situation où l'organisme grandit de façon exponentielle, le taux relatif de croissance est un facteur constant qui a les mêmes dimensions et effets que le taux d'élimination. De ce fait, un taux d'élimination total ($g + r_{da}$) est mentionné dans certaines études écotoxicologiques, qui résulte de ces deux termes. Cependant, le fait que ce taux change avec le volume est rarement intégré dans ce type de modèle.

3 Les modèles cinétiques à base énergétique: couplage croissance bioaccumulation: les modèles DEB (Dynamic Energy Budget Model: modèle de budget énergétique dynamique)

3.1 Importance du couplage

Face aux avantages et limites des modèles cinétiques à compartiments et des modèles cinétiques à base physiologique, vient un troisième concept intermédiaire, plus récent et moins répandu, qu'est celui des modèles cinétiques à base énergétique.

La plupart des études concernant les cinétiques de capture et d'élimination suppose implicitement des conditions d'état d'équilibre pour les autres processus physiologiques de l'organisme. Les données expérimentales sont le plus souvent analysées avec un modèle de capture et d'élimination comprenant un seul compartiment. Ces modèles ne donnent pas toujours de résultats convenables, en particulier quand l'organisme voit ses conditions physiologiques varier (taille, cycle reproductif et réserves d'énergie) d'un ordre de grandeur comparable à celui des taux de capture et d'élimination du contaminant (van Haren *et al.*, 1994).

Le modèle de capture et d'élimination, proposé par Kooijman et van Haren (Kooijman et van Haren, 1990), a été conçu pour quantifier les changements de conditions physiologiques (nutrition, lipides) de l'organisme. Il repose sur un modèle de budget énergétique dynamique qui décrit la croissance, la dynamique d'énergie et la reproduction comme fonction de la taille de l'organisme (Kooijman, 1986a; Kooijman, 1986b; Kooijman, 1988; Kooijman, 1993). Ainsi, la capture de contaminant se fait *via* la nourriture et/ou directement à partir de l'environnement alors que l'élimination se fait *via* la reproduction (gamètes) et/ou directement dans l'environnement. Les taux de capture et d'élimination dépendent de la quantité lipidique qui change avec le temps. Ainsi, la charge corporelle de contaminant dans l'organisme peut changer dans le temps même si la concentration dans le milieu reste constante (Kooijman et van Haren, 1990).

3.2 Théorie des modèles DEB

Leur objectif est de formuler un modèle de bioénergie qui aide à connecter les différents niveaux d'organisation: de la molécule aux écosystèmes. Le cœur de la théorie est un modèle énergétique individuel qui évolue au cours du cycle de vie. Ceci implique que le modèle ne doit pas être spécifique à l'espèce et qu'il pèse les différents critères avec respect du réalisme et de la simplicité (Kooijman, 1993). L'organisation métabolique des organismes suit des lois quantitatives simples basées sur des principes chimiques et physiques. Les courbes de croissance des organismes aussi différents que les mollusques ou les oiseaux peuvent fortement se ressembler, alors que les différences dans leur systèmes de régulation hormonale sont connues. Ce type d'observations suggère que les systèmes de régulation sont une part des mécanismes utilisés par les organismes pour contrer des lois générales de bilan de masse et d'énergie. La théorie des modèles DEB a pour but d'identifier la série de lois

quantifiant la capture et l'utilisation de substrats que tous les organismes (micro-organismes, plantes et animaux) semblent avoir en commun (Kooijman, 2001). Elle intègre l'impressionnante biodiversité par la différence de valeurs des paramètres. Pour cela, les individus sont considérés comme des systèmes dynamiques qui suivent des modèles prévisibles durant leur cycle de vie.

Les modèles DEB ont été développés pour évaluer la croissance de l'organisme de façon beaucoup plus précise que les modèles simples de type von Bertalanffy. En plus de prédire l'évolution allométrique de l'organisme entier, ils tiennent compte de la biologie de l'individu en le compartimentant et suivent l'évolution énergétique de différentes composantes tels que le volume structural, les gonades ou les réserves. Ainsi, ils étudient les flux d'énergie entre les différents organes en proposant un bilan énergétique général. Les processus clés sont la nutrition, la digestion, le stockage, la maintenance, la croissance, le développement, la reproduction et la vieillesse.

Ces modèles de budget énergétique dynamique décrivent les taux auxquels un organisme individuel acquiert l'énergie et l'utilise pour des processus physiologiques de maintenance, de croissance et de reproduction. Ils sont basés sur des hypothèses concernant les taux d'acquisition de l'énergie à partir de l'environnement, et des lois qui décrivent comment l'énergie acquise est distribuée entre la maintenance, la croissance et la reproduction. L'hypothèse fondamentale du modèle DEB est qu'une série de variables d'état physiologique (âge, taille, réserves d'énergie) et de variables environnementales (densité nourriture, température) déterminent pleinement l'histoire de vie des individus (Kooijman, 1993).

Les modèles DEB constituent une base pour développer des modèles physiologiques structurés (Metz et Dikmann, 1986; Tuljapurkar et Caswell, 1997) dont le but est de lier la physiologie de l'individu au niveau de la population par exemple. Ils sont aussi utilisés pour l'application en toxicologie (Norstrom *et al.*, 1976; Kooijman et van Haren, 1990; Landrum *et al.*, 1992; van Haren *et al.*, 1994; Kooijman et Bedaux, 1996) et en biotechnologie (Nisbet *et al.*, 2000; Péry *et al.*, 2002). Les modèles DEB sont appropriés à l'étude de la vie depuis que les organismes sont largement reconnus comme entité sur laquelle la sélection naturelle opère.

Une large variété de formulations des modèles DEB a été développée, variant de modèles génériques à des modèles incluant plus de détails biologiques et pouvant être spécifiques à un taxon. De tels détails dépendent de l'objectif de l'étude particulière. Par exemple, un modèle à paramétrisation générale est désirable lors de comparaisons inter-espèces (Cardoso *et al.*, 2001; van der Veer *et al.*, 2001; Velasco et Navarro, 2003). La plupart des modèles DEB trouvés dans la littérature font partie de deux familles: les modèles de production nette (Nisbet *et al.*, 1996; Gurney et Nisbet, 1998; Lika et Nisbet, 2000; Nisbet *et al.*, 2000) et les modèles d'assimilation nette (Kooijman, 1993; van Haren et Kooijman, 1993). Les deux groupes de modèles diffèrent principalement dans leurs hypothèses concernant l'allocation d'énergie à la reproduction (modèle de production nette quand l'acquisition d'énergie est directement minorée de l'énergie nécessaire à la maintenance ; modèle d'assimilation nette quand l'énergie nécessaire à la maintenance est issue de l'énergie stockée) (Lika et Nisbet, 2000).

3.3 Concept et hypothèses

Le concept du modèle cinétique à base énergétique repose sur l'application d'un modèle DEB à un problème toxicologique (Norstrom *et al.*, 1976; Kooijman et van Haren, 1990; Landrum *et al.*, 1992; van Haren *et al.*, 1994; Kooijman et Bedaux, 1996).

L'idée globale est présentée dans la figure 4.3. Les hypothèses sont les suivantes:

- L'organisme est considéré selon deux stades: un stade juvénile non reproductif et un stade adulte reproductif. Le corps est divisé en cinq parties: la fraction aqueuse (sang) et l'estomac qui sont les deux compartiments de transferts énergétiques ; la composante structurale du corps (soma), les réserves de stockage d'énergie et la composante reproductive.
- L'organisme est supposé être décomposé en biomasse structurale (i.e. une certaine combinaison de carbohydrates, de protéines et de lipides) et en biomasse de réserves (i.e. une autre combinaison de carbohydrates, de protéines et de lipides) principalement fonction des réserves d'énergie.
- Il est supposé avoir le contrôle de sa composition chimique, de telle façon que sa biomasse structurale et ses réserves ne changent pas en composition, une propriété connue sous le nom d'homéostasie.
- Le partitionnement du contaminant entre la fraction aqueuse, les carbohydrates, les protéines et les lipides est supposé rapide, comparé à l'échange de contaminant entre la fraction aqueuse et l'environnement. Ainsi, ces composés riches en énergie sont supposés être remplacés par de l'eau quand les conditions nutritives deviennent faibles. Ceci a été démontré pour les moules par Pieters *et al.*, (1979) et pour les escargots par Zonneveld & Kooijman (1989) (Pieters *et al.*, 1979; Zonneveld et Kooijman, 1989). Ainsi, l'animal reste en isomorphie pendant son développement, ce qui signifie que chaque organe occupe une fraction fixe de la structure.
- La capture *via* la nourriture et l'échange avec l'environnement sont censés être des processus linéaires de premier ordre, avec un taux proportionnel à l'aire.

Cette série d'hypothèses nous mène plutôt à des cinétiques simples pour le contaminant. Ces hypothèses doivent être complétées par d'autres concernant la dynamique d'énergie, applicables approximativement à une large variété d'espèces:

- Il y a trois stades de vie: les embryons qui ne se nourrissent pas, les juvéniles qui ne se reproduisent pas et les adultes.
- La capture de nourriture dépend hyperboliquement de la densité nutritive.
- La densité des réserves, *i.e.* le ratio entre la quantité des réserves et le volume corporel suit un processus linéaire de premier ordre avec un temps de relâchement proportionnel à la taille du corps.
- Une fraction fixée de l'énergie utilisée est allouée à la croissance et à la maintenance. Le reste est pour la reproduction et le développement.
- Les coûts de maintenance sont proportionnels au volume corporel.