



HAL
open science

Capturer les interactions écologiques en microcosme sous pression chimique à travers le prisme de la modélisation

Dominique Lamonica

► **To cite this version:**

Dominique Lamonica. Capturer les interactions écologiques en microcosme sous pression chimique à travers le prisme de la modélisation. Ecologie, Environnement. Université de Lyon, 2016. Français. NNT : 2016LYSE1043 . tel-01397021

HAL Id: tel-01397021

<https://theses.hal.science/tel-01397021>

Submitted on 15 Nov 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



N° d'ordre NNT : 2016LYSE1043

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

opérée au sein de

l'Université Claude Bernard Lyon 1

École Doctorale ED341

Évolution Écosystèmes Microbiologie Modélisation

Spécialité de doctorat : Modélisation en Écologie

Soutenue publiquement le 08/04/2016, par :

Dominique Lamonica

Capturer les interactions écologiques en microcosme sous pression chimique à travers le prisme de la modélisation

Devant le jury composé de :

POGGIALE Jean-Christophe, Professeur des Universités, Université Aix-Marseille	Président
GAUTHIER Laury, Maître de Conférences HDR, Université Paul Sabatier Toulouse 3	Rapporteur
PARENT Eric, Ingénieur HDR, AgroParisTech	Rapporteur
GOUZÉ Jean-Luc, Directeur de Recherche, INRIA Sophia Antipolis	Examineur
MERLIN Gérard, Professeur des Universités, Université de Savoie	Examineur
CHARLES Sandrine, Professeure des Universités, Université Claude Bernard Lyon 1	Directrice de thèse
LOPES Christelle, Maître de Conférences, Université Claude Bernard Lyon 1	Co-directrice de thèse
CLÉMENT Bernard, Ingénieur HDR, ENTPE Vaulx-en-Velin	Co-directeur de thèse

UNIVERSITE CLAUDE BERNARD - LYON 1

Président de l'Université

M. François-Noël GILLY

Vice-président du Conseil d'Administration

M. le Professeur Hamda BEN HADID

Vice-président du Conseil des Etudes et de la Vie
Universitaire

M. le Professeur Philippe LALLE

Vice-président du Conseil Scientifique

M. le Professeur Germain GILLET

Directeur Général des Services

M. Alain HELLEU

COMPOSANTES SANTE

Faculté de Médecine Lyon Est - Claude Bernard

Directeur : M. le Professeur J. ETIENNE

Faculté de Médecine et de Maïeutique Lyon Sud -
Charles Mérieux

Directeur : Mme la Professeure C. BU-
RILLON

Faculté d'Odontologie

Directeur : M. le Professeur D. BOURGEOIS

Institut des Sciences Pharmaceutiques et Biolo-
giques

Directeur : Mme la Professeure C. VINCI-
GUERRA

Institut des Sciences et Techniques de la Réadapta-
tion

Directeur : M. le Professeur Y. MATILLON

Département de formation et Centre de Recherche
en Biologie Humaine

Directeur : Mme. la Professeure A-M.
SCHOTT

COMPOSANTES ET DEPARTEMENTS DE SCIENCES ET TECHNOLOGIE

Faculté des Sciences et Technologies

Directeur : M. le Professeur F. DE MARCHI

Département Biologie

Directeur : M. le Professeur F. FLEURY

Département Chimie Biochimie

Directeur : Mme C. FELIX

Département GEP

Directeur : M. H. HAMMOUR

Département Informatique

Directeur : M. le Professeur S. AKKOUCHE

Département Mathématiques

Directeur : M. le Professeur G. TOMANOV

Département Mécanique

Directeur : M. le Professeur H. BEN HADID

Département Physique

Directeur : Mme J-C. PLENET

UFR Sciences et Techniques des Activités Physiques
et Sportives

Directeur : M. Y. VANPOULLE

Département Sciences de la Terre

Directeur : Mme la Professeure I. DANIEL

Observatoire des Sciences de l'Univers de Lyon

Directeur : M. B. GUIDERDONI

Polytech Lyon

Directeur : M. P. FOURNIER

Ecole Supérieure de Chimie Physique Electronique

Directeur : M. G. PIGNAULT

Institut Universitaire de Technologie de Lyon 1

Directeur : M. C. VITON

Institut Universitaire de Formation des Maîtres

Directeur : M. A. MOUGNIOTTE

Institut de Science Financière et d'Assurances

Directeur : M. N. LEBOISNE

Résumé

L'évaluation du risque lié aux contaminants est généralement basée sur des données collectées au cours d'essais monospécifiques (à une seule espèce). Par conséquent, les interactions entre espèces, bien qu'elles structurent les écosystèmes, ne sont pas prises en compte. Pour explorer les effets des contaminants sur la dynamique des espèces en interaction, cette thèse vise à modéliser le fonctionnement d'un microcosme de laboratoire de deux litres incluant trois espèces, la daphnie *Daphnia magna*, la lentille d'eau *Lemna minor* et la microalgue *Pseudokirchneriella subcapitata*, exposées à une contamination par le cadmium. La dynamique des trois espèces ainsi que leurs interactions et les effets du cadmium ont été décrits par un modèle mécaniste basé sur des équations différentielles ordinaires couplées. Les principaux processus intervenant dans ce microcosme de trois espèces ont donc été formalisés, notamment la croissance et la survie des daphnies, la croissance et la sédimentation des algues, la croissance des lentilles, le broutage des algues par les daphnies, la compétition interspécifique entre algues et lentilles et les effets du cadmium sur ces différents processus. Les paramètres du modèle ont été estimés par inférence bayésienne, en utilisant simultanément toutes les données issues de différentes expérimentations en laboratoire, réalisées au cours de la thèse spécialement pour cette étude.

Le premier chapitre de ce manuscrit présente l'état de l'art des trois différentes approches développées au cours de cette thèse : l'utilisation de microcosme en écotoxicologie, la modélisation des effets d'un contaminant et du fonctionnement d'un écosystème, et les méthodes d'estimation des paramètres. Les deux chapitres suivants présentent le microcosme étudié et les expérimentations réalisées, puis le modèle, la méthode d'estimation des paramètres et les analyses effectuées sur les résultats. Pour faciliter la description, et donc la compréhension, du fonctionnement du microcosme, celui-ci a été décomposé en deux microcosmes partiels incluant deux espèces. Le chapitre 4 présente ainsi l'étude du premier microcosme partiel composé des daphnies et des algues, sans contaminant, en incluant un article publié dans *Ecological Modelling*. Le chapitre 5 présente l'étude du second microcosme partiel composé des lentilles et des algues, en présence du contaminant, en incluant un article publié dans *Ecotoxicology and Environmental Safety*. Le chapitre 6 présente enfin l'étude du microcosme complet (à trois espèces) en présence de contaminant ainsi qu'un retour sur les plans d'expérience adoptés. Une discussion générale et la présentation des perspectives soulevées par cette thèse clôturent le manuscrit.

Cette combinaison innovante de modélisation mécaniste et d'expérimentations guidées par le modèle a été tout à fait performante pour comprendre le fonctionnement du microcosme sans et avec contaminant. Cette approche apparaît prometteuse pour la prise en compte des interactions entre espèces dans l'étude des effets d'un contaminant sur le fonctionnement d'un écosystème.

Abstract

Contaminant risk assessment is generally based on data collected during single-species bioassays (including only one species). As a consequence, interactions between species that occur in ecosystems are not taken into account. To investigate the effects of contaminants on interacting species dynamics, this thesis aims at modelling the functioning of a 2-L laboratory microcosm with three species, the daphnid *Daphnia magna*, the duckweed *Lemna minor* and the microalgae *Pseudokirchneriella subcapitata*, exposed to cadmium contamination. We modelled the dynamics of the three species, their interactions and the effects of cadmium using a mechanistic model based on coupled ordinary differential equations. The main processes occurring in this three-species microcosm were thus formalized, including growth and survival of daphnids, growth and settling of algae, growth of duckweeds, grazing of algae by daphnids, interspecific competition between the algae and duckweeds, and the effects of cadmium on these processes. We estimated model parameters by Bayesian inference, using simultaneously all the data issued from multiple laboratory experiments specifically conducted for this study during the thesis.

The first chapter of this manuscript presents the state of the art of three different approaches developed during this thesis : the use of microcosm in ecotoxicology, the modelling of contaminant effects and ecosystem functioning, and the parameter estimation. The next two chapters present the studied microcosm and the conducted experiments, then the model, the parameter estimation method and the analysis performed on the results. In order to describe (and understand) more easily the microcosm functioning, we decomposed the microcosm in two partial microcosms involving two species. Chapter 4 thus presents the study of the first partial microcosms involving daphnids and algae, without contaminant, including an article published in *Ecological Modelling*. Chapter 5 presents the study of the second partial microcosm involving algae and duckweeds, with contaminant, including an article published in *Ecotoxicology and Environmental Safety*. Chapter 6 finally presents the complete study of the whole microcosm (involving three species) with contaminant and a feedback on the adopted experimental design. A general discussion and the perspectives raised by this thesis close the manuscript.

This innovative combination of mechanistic modelling and model-guided experiments was successful to understand the microcosm functioning without and with contaminant. This approach appears promising to include interactions between species when studying contaminant effects on ecosystem functioning.

Remerciements

Je remercie tout d'abord mes rapporteurs, Eric Parent et Laury Gauthier, et mes examinateurs, Jean-Christophe Poggiale, Jean-Luc Gouzé et Gérard Merlin, pour leurs analyses pertinentes de mon travail de thèse et l'intéressante discussion qui s'en est suivie à ma soutenance.

Je souhaite également remercier les membres de mes comités de pilotage, Agnès Richaume, Arnaud Chaumot, Jean-Christophe Poggiale, Laurent Lassabatère et Marie-Laure Delignette-Muller pour leurs conseils, leurs idées et leurs encouragements.

Merci également à Elise Billoir d'avoir accepté notre invitation à la soutenance.

Je remercie ma directrice de thèse, Sandrine Charles, pour son accueil au sein du LBBE, de l'équipe MEPS et du domaine de la modélisation en écotoxicologie, ainsi que pour ses relectures attentives et ses conseils divers et variés. Je remercie également mon directeur de thèse, Bernard Clément, pour m'avoir fait découvrir le monde des microcosmes, des expérimentations en labo et de l'écotoxicologie. Merci pour ta disponibilité, tes conseils et pour nos échanges enrichissants, reflets de l'interdisciplinarité de cette thèse. Un immense merci à ma co-encadrante, Christelle Lopes, pour son soutien, sa gentillesse et sa disponibilité. Travailler sous ta direction a été un réel plaisir, autant du côté scientifique qu'humain.

Je souhaite également remercier Yves Perrodin pour sa gentillesse et son accueil dans l'équipe IPE du LEHNA. Je suis très reconnaissante à toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin aux expérimentations : Bernard en premier lieu, les membres de l'équipe technique, en particulier Thérèse, Myriam et Marc, et tou·te·s les stagiaires, en particulier Pauline, Ludovik et Matthieu. J'ai une pensée particulière pour Alicia, pour ta gentillesse et ton efficacité qui simplifient tous les tracas administratifs. J'ai passé trois chouettes années à IPE grâce à Jean-Phi, Laurent, Laurence, Cécile, aux doctorant·e·s Morgane, Adriana, Guillaume, Antoine et Clémentine, et à toute l'équipe, merci à tou·te·s !

Merci aux doctorant·e·s du LEHNA à La Doua Clémentine, Mathilde, Jeremy, Julia pour les déjeuners et les apéros Toïtoï. Merci également à Laurent Simon pour son aide. J'adresse un très grand merci à Laurence pour ses conseils tout au long de ces trois ans (et trois mois), sa sympathie et son soutien précieux dans les moments difficiles.

Du côté du LBBE, je voudrais remercier tout d'abord les membres des pôles administratif et informatique pour leurs aides diverses et leur efficacité. Merci à l'ensemble du labo, en particulier à la fine équipe des coureurs et coureuses, aux personnes rencontrées un peu trop tardivement, comme Thomas, Hélène et Héloïse. Un très grand merci aux membres de l'équipe MEPS et assimilé-e-s : merci à Guillaume, Marie-Laure et Philippe Veber pour votre soutien, votre gentillesse (relative pour certain!), votre aide scientifique sur tout ce qui m'a dépassée pendant cette thèse et les bons moments passés en votre compagnie. Enfin, je remercie Philippe Ruiz pour l'immense soutien apporté pendant la thèse et surtout la période de rédaction. Merci pour les pauses cafés, les discussions diverses et variées et pour m'avoir gentiment écoutée me plaindre dès que quelque chose ne marchait pas (souvent, donc). Merci également à Marion pour les petits gâteaux et les bières de soutien à la rédaction.

Je voudrais remercier les Lyonnais-e Inès et Amaury pour leur aide à mon arrivée et tout au long de la thèse. Merci Inès pour ton accueil, l'hébergement et pour notre année de volley. Merci à Amaury pour ton accueil, ton soutien et les dîners à la colocation.

Un très grand merci aux docteurs et doctorantes d'un peu partout : Léa, Léa, Anaïs, Morgane, Stéphanie et en particulier Flo, Émilie et Cori. Votre soutien m'a été indispensable, merci pour tous vos conseils, humains et techniques (je pense à \LaTeX bien sûr, si ce manuscrit est un peu joli, c'est grâce à vous), les séances Skype de motivation et de soutenances. Je suis très heureuse de vous avoir rencontrées ! Cori, merci d'être venue et merci pour la relecture.

Je remercie Cédric, qui a achevé de me convaincre, à son insu, qu'une thèse, c'est chouette. Merci pour ton aide \LaTeX , ton aide tout court et nos kilomètres de conversation. J'espère qu'on se retrouvera prochainement pour quelques bières ou des sushis.

Je suis très reconnaissante à Christophe Laplanche pour m'avoir fait découvrir l'existence de la modélisation en écologie et pour m'avoir lancée dans l'aventure de la recherche. C'était une bien bonne idée, finalement.

Un grand merci à toute la famille Rault pour son soutien, sa gentillesse et les vacances à Lège.

Mille mercis (et c'est encore trop peu) à ma géniale bande d'ami-e-s Julie, Baron, Val, Prosper et Livio. Pour votre soutien, votre écoute, nos weekends, le pot (ce pot!), et j'en passe. Vous êtes au top et je suis très heureuse de vous avoir à mes côtés depuis tout ce temps. Merci également à Will et Nil.

Jordan, merci d'avoir si souvent pris le train, et tant facilité la réalisation de cette thèse par ta présence, ton aide, ton intérêt pour mon travail et ton soutien. Merci de m'encourager à faire des trucs, des voyages à la pêche à la palourde, en passant par la course à pied. Merci pour le temps précieux passé ensemble, et celui à venir.

Enfin, je remercie mes vieux, pour absolument tout : votre soutien, votre gentillesse, vos encouragements depuis toujours. Merci de vous être tant intéressé-e-s à mes histoires de modèles, de daphnies et de code R. Papa, merci d'avoir écouté le détail de ma rédaction jour après jour et Maman, d'avoir relu mon manuscrit. Vous êtes super, vraiment.

J'ai enfin une pensée pour mes grand-parents Juliette, Michèle et surtout René, qui m'a tant aidée tout au long de mes études.

Table des matières

Liste des Abréviations	v
Table des figures	vii
Liste des tableaux	xi
Introduction	1
Contexte	1
Problématique et approches utilisées	3
Organisation du manuscrit	4
1 Etat de l'art	7
1.1 Les microcosmes en écotoxicologie	8
1.1.1 Les approches expérimentales en écotoxicologie	10
1.1.2 Utilisation des microcosmes en évaluation du risque	13
1.1.3 Limites liées à l'utilisation des microcosmes	18
1.1.4 Le microcosme développé par Clément et Cadier	18
1.2 La modélisation en écotoxicologie	19
1.2.1 Modélisation des effets sur les traits d'histoire de vie individuels	20
1.2.2 Modèles multi-espèces	28
1.3 L'inférence des paramètres	30
1.3.1 Méthodes d'inférence : principes	31
1.3.2 Estimation de paramètres en écotoxicologie	32
1.3.3 Avantages de l'inférence bayésienne	34
1.3.4 Méthodes de simulation	36
1.4 Conclusion	37
2 Expérimentations en microcosme de laboratoire	39
2.1 Introduction	39
2.2 Le microcosme étudié	41

2.2.1	Version simplifiée utilisée	41
2.2.2	Processus identifiés	41
2.2.3	Les espèces utilisées	43
2.3	Le protocole expérimental	51
2.3.1	Préparation des microcosmes	51
2.3.2	Types d'expérimentations réalisées	54
2.3.3	Mesures, données collectées et notation	60
2.4	Conclusion	62
3	Modélisation mécaniste du fonctionnement du microcosme en présence de conta-	
	minant	65
3.1	Introduction	65
3.2	Le modèle dynamique	67
3.2.1	Variables et processus	67
3.2.2	Hypothèses générales sur le fonctionnement du microcosme	68
3.2.3	Modélisation des différents processus	69
3.2.4	Modélisation de l'effet du cadmium	78
3.2.5	Modèle complet	80
3.3	Estimation des paramètres	90
3.3.1	Information <i>a priori</i>	90
3.3.2	Simulations	90
3.3.3	Analyses des prédictions des modèles	93
3.4	Conclusion	98
4	L'interaction algues-daphnies en l'absence de contaminant	99
4.1	Contexte	99
4.1.1	Expérimentations et données utilisées	100
4.1.2	Modèle et équations	102
4.1.3	Distributions <i>a priori</i>	102
4.1.4	Simulation	102
4.1.5	Analyses du modèle	103
4.1.6	Annexes	103

4.2	Article publié dans <i>Ecological Modelling</i>	103
4.3	Compléments sur le processus de broutage	122
4.3.1	Protocole des essais de l'expérimentation 12	122
4.3.2	Simulations	124
4.3.3	Résultats complémentaires et interprétation	125
4.4	Bilan	128
4.4.1	Principaux résultats	128
4.4.2	Limites	129
5	L'interaction algues-lentilles en présence de contaminant	131
5.1	Contexte	131
5.1.1	Expérimentations et données utilisées	132
5.1.2	Modèle et équations	134
5.1.3	Distributions <i>a priori</i>	134
5.1.4	Analyse du modèle	134
5.1.5	Annexes	135
5.2	Article publié dans <i>Ecotoxicology and Environmental Safety</i>	135
5.3	Compléments à l'article	150
5.3.1	Détermination des distributions <i>a priori</i>	150
5.3.2	Cas particulier de l'expérimentation 8	153
5.3.3	Comparaison des différents modèles de compétition interspécifique	153
5.4	Bilan	156
5.4.1	Principaux résultats	156
5.4.2	Limites	157
6	Les interactions algues-daphnies-lentilles en présence de contaminant et retour sur le plan d'expérience	159
6.1	Introduction	160
6.2	Matériel et méthode	161
6.2.1	Expérimentations et données utilisées	161
6.2.2	Modèle et équations	163
6.2.3	Distributions <i>a priori</i>	168

6.2.4	Ajustements et analyses	168
6.2.5	Ajustements par inférence bayésienne	173
6.3	Résultats	175
6.3.1	Décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	175
6.3.2	Déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress	185
6.3.3	Evaluer l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	186
6.4	Discussion	191
6.4.1	Description du fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	191
6.4.2	Détermination des données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress	195
6.4.3	Evaluation de l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	198
6.5	Conclusion	199
	Discussion générale et Perspectives	201
	Bibliographie	211

Liste des Abréviations

EC_x *Effect Concentration at x%*

LC_x *Lethal Concentration at x%*

AFNOR *Association Française de Normalisation*

ASTM *American Society for Testing and Materials*

BUGS *Bayesian inference Using Gibbs Sampling*

CASM *Comprehensive Aquatic Systems Model*

CATS *Contaminants in Aquatic and Terrestrial ecoSystems*

DEB *Dynamic Energy Budget*

DIC *Deviance Information Criterion*

EDO *Équation Différentielle Ordinaire*

EDTA *Éthylène Diamine Tétra-Acétique*

ENTPE *École Nationale des Travaux Publics de l'État*

GUTS *General Unified Threshold model of Survival*

HAP *Hydrocarbure Aromatique Polycyclique*

HMC *Hamiltonian Monte Carlo*

IBM *Individual Based Model*

ISO *International Organization for Standardization*

JAGS *Just Another Gibbs Sampler*

LEHNA *Laboratoire d'Écologie des Hydrostystèmes Naturels et Anthropisés*

MCMC *Monte Carlo Markov Chain*

MIOM *Mâchefer d'Incinération des Ordures Ménagères*

NEC *No Effect Concentration*

NUTS *No-U-Turn Sampler*

OCDE *Organisation de Coopération et de Développement Économiques*

ODD *Overview, Design concepts and Details*

PCB *Polychlorobiphényles*

PEC *Predicted Environmental Concentration*

PNEC *Predicted No Effect Concentration*

SAM *Standardized Aquatic Microcosm*

SSD *Species Sensitivity Distribution*

THV *Traits d'Histoire de Vie*

TK/TD *Toxicokinetic/Toxicodynamic*

Table des figures

1	Niveaux d'organisation biologique.	2
1.1	Réponse au stress lié à un contaminant en fonction du niveau biologique.	9
1.2	Classification des différents dispositifs expérimentaux utilisés en écotoxicologie.	10
1.3	Schéma du microcosme développé par Clément et coll., et des interactions potentielles entre espèces	20
1.4	Exemple de courbe concentration-réponse : partie déterministe log-logistique (THV : Trait d'Histoire de Vie).	21
1.5	Exemple de courbe concentration-réponse : parties déterministe log-logistique et stochastique normale.	23
1.6	Schéma de la théorie DEB.	24
1.7	Exemple de fonction de stress avec NEC.	25
1.8	Principe de l'inférence bayésienne.	33
2.1	Schéma du microcosme utilisé et processus impliqués.	42
2.2	<i>P. subcapitata</i>	44
2.3	<i>L. minor</i>	44
2.4	Mesure d'une daphnie au microscope.	45
2.5	Schéma du cycle de vie de <i>D. magna</i>	46
2.6	Microcosmes en conditions standard, avec et sans sédiment.	52
2.7	Disposition des béciers dans la salle d'exposition.	53
2.8	Schéma du plan d'expérience pour les expérimentations en conditions standard, ici avec deux espèces et en condition contaminée.	56
3.1	Allure des courbes décrivant le taux de survie des daphnies au cours du temps en fonction de la concentration en contaminant.	72
3.2	Allure de la courbe de la fonction d'ingestion selon le modèle à seuil, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.	75
3.3	Allure de la courbe de la fonction d'ingestion selon le modèle de Holling type II, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.	76

3.4	Allure de la courbe décrivant le nombre de daphnies broutant dans la colonne d'eau, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.	77
3.5	Allure de la fonction de stress log-logistique.	79
3.6	Représentation graphique du modèle complet.	89
3.7	Comparaison du modèle intégré analytiquement, avec le package <i>lsoda</i> , avec la méthode d'Euler pas de temps de 1, avec la méthode d'Euler pas de temps de 0,1, avec la méthode d'Euler pas de temps de 0,01.	92
3.8	Exemple de comparaison des densités <i>a priori</i> (courbe pointillée) et <i>a posteriori</i> (courbe continue), en densités.	94
3.9	Exemple de comparaison entre densités <i>a posteriori via</i> les densités <i>a posteriori</i> normalisées.	95
3.10	Exemple de comparaison prior et posterior, en boxplot.	96
3.11	Exemple de représentation des corrélations entre les paramètres deux à deux.	96
3.12	Exemple de <i>posterior predictive check</i>	97
4.1	Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres du modèle du chapitre 4 (hors discussions et compléments).	101
4.2	Ajustement du modèle de Holling type II aux données de l'expérimentation 12.	126
4.3	Ajustement du modèle de Holling type II aux données de l'expérimentation 12, échelle \log_{10}	127
5.1	Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres des modèles du chapitre 5 (hors compléments).	133
5.2	Comparaison des densités <i>a priori</i> (pointillées) et <i>a posteriori</i> (continues) des paramètres d'intensité de la compétition estimés à partir des données de l'expérimentation 4.	150
5.3	Dynamique des algues (a) et des lentilles (b), seules et ensemble pour l'expérimentation 4.	151
5.4	Dynamique algale (en présence de lentilles) pour l'expérimentation 8.	154
6.1	Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres des modèles du chapitre 6.	162
6.2	Représentation graphique du modèle décrit en section 6.2.2.	167

6.3	Schéma de la méthode d'analyse utilisée pour déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress.	172
6.4	Schéma de la méthode d'analyse utilisée pour répondre à l'objectif 3.	174
6.5	Distributions <i>a priori</i> et <i>a posteriori</i> des paramètres des modèles complets (modèles I et II).	177
6.6	Dynamique des algues en présence de lentilles (a) et en présence de lentilles et de daphnies (b) pour l'expérimentation 8 (objectif 1).	179
6.7	Dynamique des lentilles seules (a), en présence d'algues (b) et en présence d'algues et de daphnies (c) pour l'expérimentation 8 (objectif 1).	180
6.8	Survie (a) et croissance (b) des daphnies pour l'expérimentation 8 (objectif 1). .	182
6.9	Boxplot des distributions <i>a posteriori</i> des paramètres des fonctions de stress pour chaque jeu de données testé (objectif 2).	184
6.10	Dynamique des algues en présence de lentilles (a) et en présence de lentilles et de daphnies (b) pour l'expérimentation 8 (objectif 3).	187
6.11	Dynamique des lentilles seules (a), en présence d'algues (b) et en présence d'algues et de daphnies (c) pour l'expérimentation 8 (objectif 3).	188
6.12	Survie (a) et croissance (b) des daphnies pour l'expérimentation 8 (objectif 3). .	190
7.1	Schéma du fonctionnement du microcosme complet.	203
7.2	Schéma des allers-retours entre la modélisation et les expérimentations au cours de la thèse.	206

Liste des tableaux

1.1	Exemples d'études écotoxicologiques utilisant des microcosmes de laboratoire : taille, organismes utilisées et contaminants testés.	16
2.1	Expérimentations réalisées	58
2.2	Données collectées par expérimentations	63
3.1	Modèle complet (sans les liens avec les données)	81
3.2	Liens stochastiques entre variables et données	85
3.3	Variables et paramètres du modèle	86
6.1	Variables et paramètres du modèle de référence.	164
6.2	Modèles utilisés.	169
6.3	Jeux de données utilisés pour l'estimation des paramètres du modèle complet (détermination des données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonc- tions de stress).	171

Introduction

Contexte

La majorité des écosystèmes, qu'ils soient terrestres, aquatiques ou aériens, subissent aujourd'hui des pressions chimiques issues des activités humaines. Pour évaluer le risque écotoxicologique lié à une pression chimique, il est nécessaire de connaître à la fois les quantités de contaminants présents, leur biodisponibilité et les effets toxiques de ces contaminants sur les organismes vivants dans ces écosystèmes. L'écotoxicologie est la science qui étudie ce second point **Léopold (1984)**. Les effets des contaminants peuvent être étudiés à différents niveaux d'organisation biologique, résumés sur la Figure 1, tels que l'échelle sub-individuelle, individuelle, de la population, de la communauté, etc. En écotoxicologie, une vision hiérarchique s'impose **Newman (2008)** : un processus observé à un niveau peut être expliqué par les mécanismes existants au niveau inférieur et a des conséquences sur le niveau supérieur. Néanmoins, il est difficile de prédire avec réalisme à un niveau supérieur les conséquences des effets observés au niveau inférieur (et vice-versa) **Forbes and Calow (2002)**. Dans la démarche d'évaluation du risque écotoxicologique, ces conséquences sont donc extrapolées.

L'évaluation du risque écotoxicologique pour les écosystèmes aquatiques, sur lesquels cette thèse se focalise, est basée sur la détermination de deux types de concentrations. La première, la concentration prédite dans l'environnement (PEC, *Predicted Environmental Concentration*), permet d'estimer l'exposition environnementale au contaminant. La seconde, la concentration prédite ne produisant aucun effet (PNEC, *Predicted No Effect Concentration*), représente la concentration critique en dessous de laquelle aucun effet n'est attendu, elle permet donc d'estimer la toxicité du contaminant pour l'environnement. Le rapport de ces deux concentrations (PEC/PNEC) est ensuite calculé, et on considère qu'il existe un risque pour l'environnement lorsqu'il est supérieur à 1 **ECB (2003)**.

Les effets toxiques des contaminants sont le plus souvent étudiés au niveau individuel, car c'est le plus simple à étudier. On peut en effet plus facilement évaluer sur un organisme isolé ses traits d'histoire de vie (tels que sa survie, son développement ou sa capacité à se reproduire) que ses processus au niveau sub-individuel (tels que l'activité d'enzymes impliquées dans le métabolisme ou la réparation de l'ADN). En revanche, les observations des

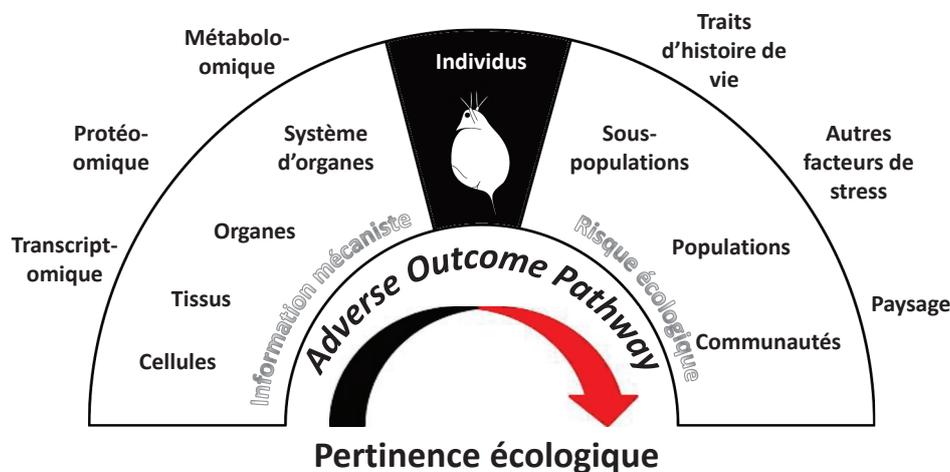


FIGURE 1 – Niveaux d'organisation biologique.

D'après [Kramer et al. \(2011\)](#).

niveaux supérieurs sont plus difficiles à réaliser au laboratoire et à interpréter, tandis que les observations aux niveaux inférieurs nécessitent des techniques et du matériel perfectionnés. Les données issues des tests standardisés de toxicité au niveau individuel fournissent des concentrations critiques d'effet sur les traits d'histoire de vie des espèces pour un contaminant donné. Des facteurs de sécurité sont ensuite appliqués sur les concentrations critiques d'effet obtenues pour calculer la PNEC ECB (2003). Ils ont pour but de prendre en compte les incertitudes liées aux différences de sensibilité interspécifiques, à l'extrapolation d'une durée d'exposition courte (toxicité aiguë) à une durée plus longue (toxicité chronique) et à l'extrapolation des données de laboratoire aux données de terrain.

Ce dernier point signifie que la dynamique des populations et des interactions biotiques (inter et intra-espèces) et abiotiques (avec le milieu) qui existent dans l'écosystème ne sont pas prises en compte dans la démarche d'évaluation du risque. L'importance des interactions biotiques dans le fonctionnement des écosystèmes est telle qu'il apparaît nécessaire d'intégrer ces interactions pour une meilleure évaluation du risque écotoxicologique en s'appuyant sur des observations [Cairns \(1984\)](#); [De Laender et al. \(2008\)](#); [Preston \(2002\)](#).

Des dispositifs expérimentaux appelés microcosmes de laboratoire sont utilisés pour étudier

les interactions biotiques. Ils rassemblent plusieurs espèces en interactions dans des systèmes de taille réduite. L'utilisation de données issues d'expérimentations en microcosmes présente cependant un inconvénient car la prise en compte de la complexité implique des difficultés d'interprétation des observations. Les effets observés résultent de la combinaison de multiples processus : la dynamique intrinsèque des espèces, les interactions biotiques et abiotiques, et les effets du contaminant sur ces deux types de processus. Des modèles mathématiques peuvent décrire ces différents phénomènes impliqués dans le fonctionnement d'un microcosme. La modélisation mathématique, par la formalisation des processus régissant le fonctionnement du microcosme avec et sans contaminant, apparaît donc comme un outil pertinent pour interpréter plus finement les observations.

Problématique et approches utilisées

L'objectif général de cette thèse est de proposer une méthode de modélisation du fonctionnement d'un microcosme sous pression chimique pour améliorer l'interprétation des effets observés des contaminants. Le travail effectué au cours de cette thèse s'articule autour de deux axes :

1. l'utilisation (et la standardisation) d'un microcosme de laboratoire pour la prise en compte des interactions entre espèces dans l'évaluation du risque lié aux contaminants,
2. l'apport de la modélisation pour l'interprétation des observations et donc la compréhension du fonctionnement d'un écosystème, notamment quand il est soumis à une pression chimique.

La démarche scientifique utilisée pour répondre à cet objectif s'appuie sur des allers-retours entre les expérimentations et la modélisation, dans l'objectif d'explorer et de valider les hypothèses faites sur le fonctionnement du microcosme étudié.

Des expérimentations ont donc été conduites avec un microcosme de laboratoire de trois espèces en interaction. En parallèle des expérimentations, un modèle dynamique décrivant le fonctionnement de ce microcosme a été développé. Les paramètres du modèle ont été estimés

par inférence bayésienne à partir des données collectées au cours des différentes expérimentations.

Le travail de cette thèse a été réalisé par étapes. Le microcosme complet a été subdivisé en sous-systèmes de deux espèces. Le fonctionnement de ces sous-systèmes a d'abord été étudié en condition non contaminée, *i.e.* en l'absence de contaminant, puis en condition contaminée, *i.e.* en présence de contaminant. Le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée a ensuite été décrit.

Organisation du manuscrit

Ce manuscrit est organisé en six chapitres. Un premier chapitre présente l'état de l'art des trois principales approches utilisées au cours de cette thèse, à savoir 1) les dispositifs expérimentaux classiquement utilisés pour l'évaluation des risques, et en particulier les microcosmes et mésocosmes ; 2) les méthodes de modélisation utilisées en écotoxicologie et en écologie pour les systèmes complexes : et 3) les méthodes d'estimation de paramètres en écotoxicologie, avec notamment l'inférence bayésienne.

Les deux chapitres suivants détaillent les approches expérimentales et méthodologiques utilisées : le chapitre 2 présente le microcosme d'étude et les expérimentations réalisées au cours de cette thèse, et le chapitre 3 présente le modèle développé ainsi que la méthode d'estimation des paramètres utilisée et l'analyse des résultats effectuée.

Les chapitres 4, 5 et 6 retracent les travaux réalisés au cours de cette thèse de manière chronologique, de l'étude d'un premier sous-système composé de deux espèces en condition témoin, *i.e.* sans contaminant (algues et daphnies, chapitre 4), à un second sous-système en condition contaminée (algues et lentilles, exposées au cadmium, chapitre 5), jusqu'au fonctionnement du microcosme complet à trois espèces en présence de contaminant (algues, daphnies et lentilles, exposées cadmium, chapitre 6). Ces chapitres décrivent le fonctionnement du système considéré (expérimentations, modèles et analyses) et traitent également d'une question méthodologique. Tout d'abord, dans le chapitre 4, la méthode d'estimation des paramètres utilisée a été validée. Ensuite, dans le chapitre 5, l'intérêt de la modélisation pour l'étude des interactions entre espèces en condition contaminée a été mis en valeur. Enfin, dans le chapitre 6, la question de l'optimisation des plans d'expérience pour les études multi-espèces a été

abordée.

Les chapitres 4 et 5 s'appuient sur deux articles, le premier publié dans *Ecological Modelling* (chapitre 4) et le second dans *Ecotoxicology and Environmental Safety* (chapitre 5), chacun complété d'une introduction, d'un résumé, de résultats complémentaires et d'une conclusion. Le chapitre 6 est rédigé de façon plus classique et présente la description des expérimentations et des données utilisées, le modèle, l'inférence et les analyses effectuées, puis les résultats et leur discussion.

Enfin, la conclusion générale et les perspectives reprennent les points de la problématique dans la dernière partie de ce manuscrit.

Etat de l'art

Sommaire

1.1 Les microcosmes en écotoxicologie	7
1.1.1 Les approches expérimentales en écotoxicologie	10
1.1.2 Utilisation des microcosmes en évaluation du risque	13
1.1.3 Limites liées à l'utilisation des microcosmes	18
1.1.4 Le microcosme développé par Clément et Cadier	19
1.2 La modélisation en écotoxicologie	20
1.2.1 Modélisation des effets sur les traits d'histoire de vie individuels .	21
1.2.2 Modèles multi-espèces	30
1.3 L'inférence des paramètres	33
1.3.1 Méthodes d'inférence : principes	34
1.3.2 Estimation de paramètres en écotoxicologie	37
1.3.3 Avantages de l'inférence bayésienne	38
1.3.4 Méthodes de simulation	40
1.4 Conclusion	42

Ce premier chapitre est une synthèse bibliographique des principaux éléments constitutifs de cette thèse. Dans un premier temps, les outils expérimentaux utilisés en écotoxicologie seront brièvement présentés puis l'utilisation des microcosmes sera développée. J'évoquerai ensuite l'utilisation de la modélisation en écotoxicologie et enfin celle de l'inférence bayésienne.

Le contexte global de cette étude bibliographique est l'écotoxicologie. Néanmoins, des éléments bibliographiques issus du domaine de l'écologie seront aussi présentés puisqu'une partie du travail réalisé au cours de cette thèse l'est en condition non contaminée.

1.1 Les microcosmes en écotoxicologie

Le stress lié à un contaminant engendre des réponses variables suivant le niveau d'organisation biologique étudié, comme schématisé sur la Figure 1.1. Il existe des dispositifs expérimentaux variés adaptés à la détermination des effets des contaminants pour un niveau d'organisation donné. Les caractéristiques de ces dispositifs (taille, durée des expérimentations conduites, espèces impliquées, compartiments abiotiques étudiés, etc.) déterminent le niveau d'organisation biologique étudié de l'organisme à l'écosystème Calow (1993). Les dispositifs expérimentaux peuvent être classés suivant leur représentativité des écosystèmes naturels et leur complexité, allant des tests monospécifiques en laboratoire aux études *in situ*, comme sur la Figure 1.2. Ainsi, plus les dispositifs utilisés sont complexes et représentatifs des milieux naturels, moins ils sont reproductibles et plus les observations sont difficiles à interpréter. On peut aussi distinguer les dispositifs expérimentaux selon leur utilisation en intérieur au laboratoire ou à l'extérieur : les premiers sont moins représentatifs que les seconds mais ils ont l'avantage de pouvoir être utilisés en conditions contrôlées. Ils sont donc plus reproductibles. Les bioessais monospécifiques se situent au niveau de l'organisme, tandis que les systèmes multi-espèces permettent d'étudier des niveaux d'organisation supérieurs, de la population à l'écosystème, en incluant la dynamique des populations et les interactions. Chaque dispositif expérimental présente donc des avantages et des inconvénients qui sont à prendre en considération en fonction des objectifs de l'étude à mener. Les différents dispositifs sont détaillés dans la suite de cette partie.

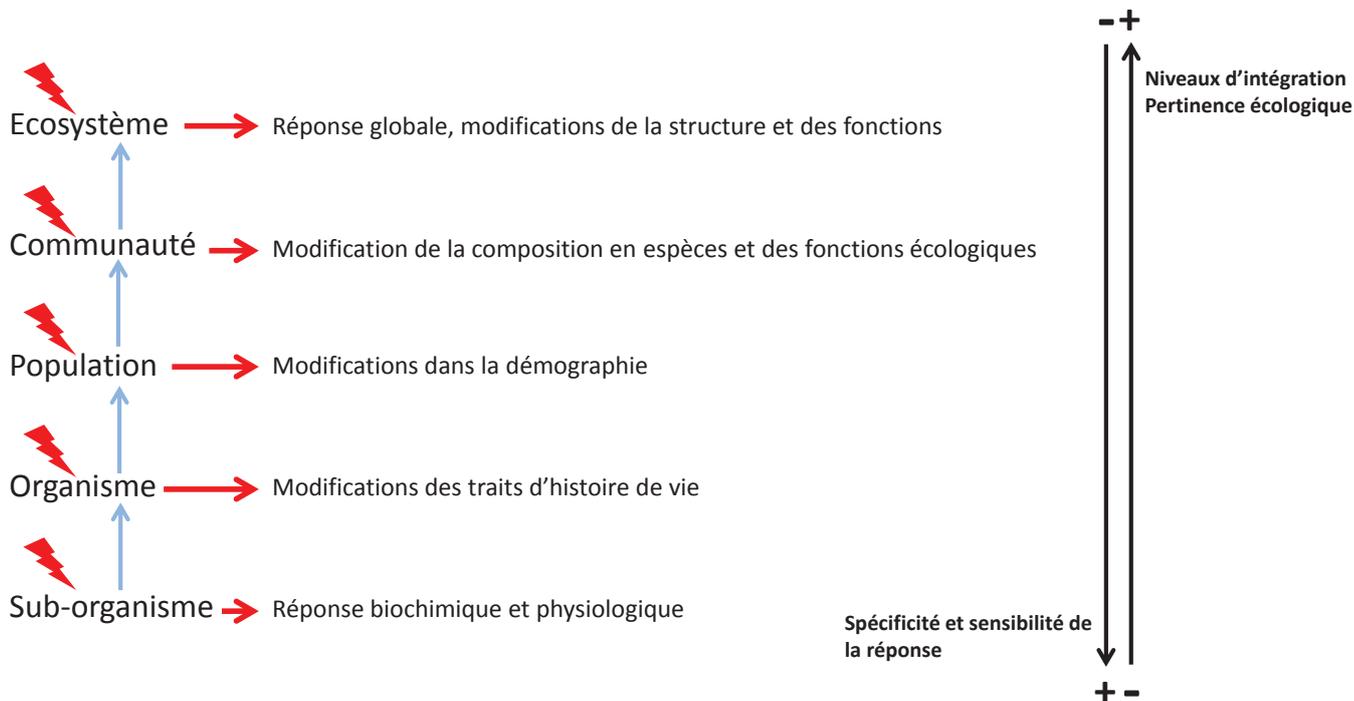


FIGURE 1.1 – Réponse au stress lié à un contaminant en fonction du niveau biologique. Les éclairs rouges symbolisent le stress lié au contaminant et les flèches rouges correspondent aux effets du contaminant pour un niveau d'organisation biologique donné.

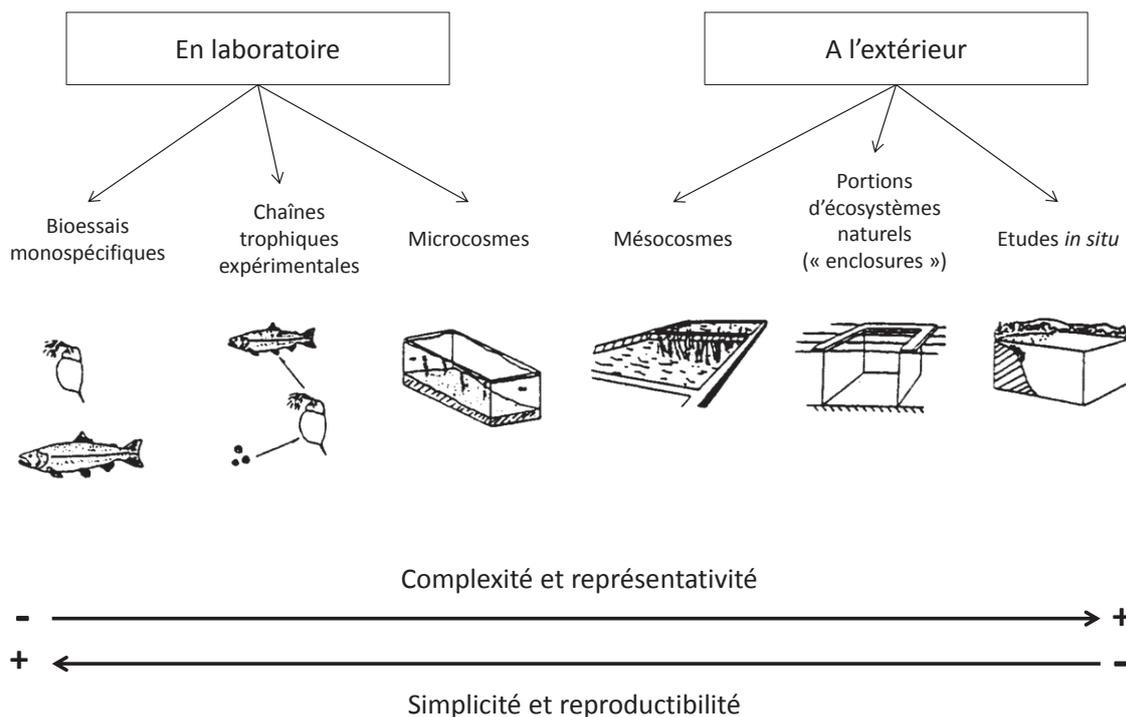


FIGURE 1.2 – Classification des différents dispositifs expérimentaux utilisés en écotoxicologie. D'après Caquet et al. (1996).

1.1.1 Les approches expérimentales en écotoxicologie

a. Les bioessais monospécifiques en laboratoire

Les bioessais monospécifiques sont les dispositifs les plus utilisés en évaluation du risque. Ce sont des expérimentations qui ne mettent en jeu qu'une seule espèce, représentative d'un type d'organisme et/ou d'un milieu, exposée pour une durée limitée à une gamme croissante de concentration en contaminant. Les bioessais présentent de nombreux avantages, dont la simplicité de mise en oeuvre, la répétabilité, la reproductibilité et un coût économique faible Calow (1993); Kimball and Levin (1985); Ramade (2002). Menés en laboratoire, les bioessais sont réalisés en conditions abiotiques (composition du milieu, température, photopériode, intensité de l'éclairage, durée d'exposition) et biotiques (conditions d'élevage, espèce, âge) contrôlées. Pour un grand nombre d'espèces traditionnellement utilisées dans ce contexte (daphnies, chironomes, limnées, algues, ...), il existe des tests standardisés selon des normes

(ISO, OCDE), ce qui permet de comparer les résultats d'un bioessai à l'autre, entre différents contaminants ou entre différents laboratoires.

Deux grands types de bioessais monospécifiques sont traditionnellement distingués :

- les tests de toxicité aiguë d'une durée courte, entre 24 et 96 heures. Ils simulent des pics de contamination intense et concernent donc des concentrations élevées qui permettent d'observer rapidement des effets sur les organismes même avec une durée d'exposition courte.
- les test de toxicité chronique, à l'inverse, sont réalisés sur un durée d'exposition plus longue, adaptée au cycle de vie de l'espèce étudiée. Ils simulent une contamination sur le long terme, avec des concentrations moins élevées, souvent un peu plus représentatives des contaminations observées *in situ*.

Selon les espèces étudiées, différents traits d'histoires de vie sont suivis lors des expérimentations en laboratoire. Sur les espèces animales (e.g., daphnies, limnées), la survie, la croissance et la reproduction sont généralement mesurées [OECD \(1984\)](#). Pour d'autres espèces, d'autres marqueurs peuvent être suivis, par exemple certaines activités enzymatiques (enzymes impliquées dans le métabolisme énergétique, par exemple [Machado et al. \(2015\)](#)), la quantité de chlorophylle produite (pour les espèces végétales) [Calow \(1993\)](#); [Forbes et al. \(1997\)](#) ou encore l'émergence (pour les chironomes) [Taenzler et al. \(2007\)](#), etc. Des tests génotoxiques peuvent également être menés pour évaluer les dommages à l'ADN causés par des contaminants [Lacaze et al. \(2010\)](#).

b. Les bioessais en microcosmes et mésocosmes

Les microcosmes et mésocosmes sont conçus pour étudier l'évolution de l'état d'un écosystème, reconstitué de façon simplifiée ou/et plus ou moins contrôlée. Ils sont constitués de compartiments abiotique et biotiques regroupant différentes espèces qui interagissent avec le milieu et entre elles. Les différents outils existant se différencient selon leur taille et la durée d'exposition, leur utilisation en laboratoire ou à l'extérieur. Les microcosmes de laboratoire sont de petite taille et sont réalisés en conditions contrôlées (contrôle de la température, de l'éclairage, de la photopériode). Les microcosmes d'extérieur sont caractérisés par un volume d'eau inférieur à 15 m³ ou une largeur de 15 m, tandis que les mésocosmes sont des dispositifs extérieurs de taille supérieure [Caquet et al. \(1996\)](#); [Crossland and La Point \(1992\)](#),

soumis aux conditions abiotiques extérieures donc non contrôlées.

c. Les études *in situ*

Les études de terrain permettent d'observer *in situ* la réponse d'une espèce donnée ou d'un écosystème à une contamination. Il est essentiel, dans la démarche d'évaluation du risque, de pouvoir comparer les réponses des organismes *in situ* aux résultats obtenus lors de bioessais en laboratoire Mance (1987). Les études de terrain sont cependant difficiles à conduire et à interpréter.

La méthode généralement utilisée pour étudier l'impact des contaminations consiste à comparer un écosystème contaminé à un écosystème sain, le plus semblable possible. Ces écosystèmes peuvent être des lacs ou rivières proches, des portions d'un même lac ou rivière à différentes distances de la source de contamination ou plus rarement des études "avant-après". Dans ce dernier cas, les études se concentrent alors plus sur la capacité de récupération des écosystèmes Mance (1987). Une première difficulté est ainsi mise en évidence puisque ces études nécessitent des similarités suffisantes en termes physiques et chimiques des milieux à étudier pour que leur comparaison soit valide. Entre autres caractéristiques, la vitesse du courant, le type de substrat, les niveaux d'oxygène et de nutriments, le pH, la dureté de l'eau et la composition chimique des milieux doivent être pris en compte.

L'échantillonnage des composantes biologiques soulève également des difficultés. Les variations saisonnières dans la composition et l'abondance des espèces sont liées aux cycles de vie. De plus, l'échantillonnage d'une espèce est plus ou moins facile suivant les stades de son cycle de vie. Il est donc important d'appréhender ces biais dans une comparaison "avant-après" par exemple. L'échantillonnage est également plus ou moins difficile suivant la profondeur, par exemple la stratification des lacs doit être prise en compte lorsque des organismes pélagiques (zooplancton par exemple) sont prélevés Mance (1987). Les indicateurs utilisés peuvent être la biomasse, qui renseigne sur la productivité du milieu, et la composition en espèces, qui donne une idée de la biodiversité.

Enfin, la quantification de la concentration en contaminant est également difficile puisque la composition chimique de l'eau, le sédiment présent et le débit influent sur la spéciation chimique, qui peut donc fortement varier d'un échantillonnage à l'autre Mance (1987).

1.1.2 Utilisation des microcosmes en évaluation du risque

a. Généralités

Par définition, les bioessais monospécifiques permettent d'étudier les effets des contaminants au niveau individuel, mais pas aux niveaux d'organisation biologique supérieurs Forbes et al. (1997); Kimball and Levin (1985); Sanchez and Tarazona (2002). Pour évaluer l'effet d'un contaminant sur un écosystème à partir des résultats des tests monospécifiques, des facteurs de sécurité sont utilisés. Cette méthode est source d'incertitudes liées principalement à l'extrapolation spatio-temporelle (du laboratoire au terrain et de la toxicité à court terme à une toxicité à long terme).

Les microcosmes et mésocosmes sont plus complexes et permettent de réaliser des études à un niveau d'organisation biologique supérieur à celui des essais monospécifiques Forbes et al. (1997); Kimball and Levin (1985); Ramade (2002). Les effets des contaminants sont évalués sur plusieurs espèces et sur plusieurs niveaux trophiques. On retrouve au sein des microcosmes et des mésocosmes les fonctions biologiques majeures caractéristiques d'un écosystème (respiration, photosynthèse, croissance, prédation, compétition, reproduction, etc.) Brockway et al. (1979); Calow (1993); Pratt et al. (1997). L'impact du milieu étudié sur les espèces, ainsi que sur le contaminant et son devenir, est nécessairement pris en compte (plus ou moins bien selon les caractéristiques du milieu reproduites) dans les observations. Les facteurs de sécurité à appliquer pour une évaluation du risque basée sur les résultats obtenus par des études en microcosmes ou en mésocosmes sont moins élevés qu'à partir d'un bioessai monospécifique, du fait de l'incertitude plus élevée pour ces derniers Crossland and La Point (1992). Etant donnée l'importance des interactions sur le fonctionnement des écosystèmes, il apparaît nécessaire d'évaluer les risques liés aux contaminations en tenant compte de ces interactions Cairns (1984); De Laender et al. (2008); Preston (2002).

Nous avons vu que les avantages majeurs des bioessais monospécifiques résident dans la standardisation des protocoles, ainsi que dans leur reproductibilité. Malheureusement, dans le cas des microcosmes et mésocosmes, la standardisation est difficile à appliquer puisque les possibilités de conception des outils sont très vastes, même si certains microcosmes ont fait l'objet d'une norme ASTM (*American Society for Testing and Materials, Standard Practice for Standardized Aquatic Microcosms* Taub (1989)). Les microcosmes sont donc mis en place au cas

par cas, selon l'objectif de l'étude Cairns and Cherry (1993); Crossland and La Point (1992). La plasticité des microcosmes et des mésocosmes est un atout intéressant pour la mise en oeuvre d'expérimentations variées.

b. Intérêts des microcosmes

Pour prendre en compte les interactions écologiques dans l'évaluation des effets d'un contaminant sur un écosystème, les dispositifs expérimentaux permettant d'étudier des interactions entre espèces tout en conservant les atouts des essais monospécifiques constituent un compromis intéressant. L'objectif portant principalement sur les effets du contaminant sur les interactions, il est nécessaire de limiter les autres sources de variabilité et d'incertitudes. Les microcosmes de laboratoire présentent une répliquabilité et une répétabilité supérieures à celles des mésocosmes Beyers and Odum (1993); Daam and Van den Brink (2007); Graham et al. (1999); Niederlehner and Cairns (1994), ce qui est nécessaire car de nombreuses expérimentations doivent être menées pour une étude optimale des interactions. Dans cette optique, les microcosmes de laboratoire constituent un outil adéquat.

c. Exemples d'utilisation

Le Tableau 1.1 présente tout un panel d'études utilisant divers microcosmes de laboratoire en écotoxicologie, illustrant ainsi la forte diversité inter-études. Les systèmes, dont la taille varie de 0,3 à 300 L, peuvent impliquer de deux à plusieurs dizaines d'espèces. Les réseaux trophiques et les communautés étudiés sont très variés. Les contaminants utilisés sont également variés; même si on trouve une majorité de métaux, des contaminants organiques et des nanoparticules sont également testés, *via* le milieu ou des sédiments contaminés. Cependant, cette variété d'études en microcosme présente un désavantage. Il est en effet difficile de comparer les résultats entre études, puisque les protocoles expérimentaux diffèrent fortement d'une expérimentation à l'autre.

Parmi les études en microcosme, certaines d'entre elles ont utilisé des microcosmes standardisés tels que les microcosmes SAM (*Standardized Aquatic Microcosm*) développés par Taub et al. Landis et al. (1993); Rai and Mallick (1993); Swartzman et al. (1989, 1990); Taub (1989) (Tableau 1.1). Ces systèmes de 3 L se composent d'une quinzaine d'espèces et permettent d'évaluer les effets des contaminants sur des organismes exposés pendant 63 jours, tout en

tenant compte des relations trophiques entre producteurs et consommateurs primaires, ainsi que de la dynamique des producteurs primaires. Malgré la standardisation, les essais impliquant ces microcosmes restent compliqués à mettre en oeuvre, du fait notamment du grand nombre d'espèces impliquées. Un travail de modélisation a été effectué en parallèle de ces essais pour aider à l'interprétation des données observées (section 1.3.1.a).

Tableau 1.1 – Exemples d'études écotoxicologiques utilisant des microcosmes de laboratoire : taille, organismes utilisées et contaminants testés.

Référence	Taille	Organismes	Contaminants
Bone et al. (2012)	600 mL	Macrophytes aquatiques (deux espèces)	Nanoparticules d'argent
Andres et al. (1998)	3 L	Larves, insectes, mollusques	Cadmium
Brandt et al. (2004)	300 mL	Communauté microbienne	Alkylbenzène sulfonate
Brockway et al. (1984)	7 L	Algues, protozoaires, nématodes	Atrazine
Cairns et al. (1990)	5 L	Communauté de macrophytes et de zooplanktons	Chlore et Ammoniac
Choung et al. (2013)	10 L	Cladocères, chironomides et phytoplancton	Atrazine
Clément and Ca-dier (1998); Clément et al. (2014)	2 L	Daphnies, microalgues, lentilles d'eau, chironomes, hyalleles, lymnées	Cuivre, Cadmium
Coutellec et al. (2008)	110 L	Elodées, lentilles d'eau, épinoche, limnées	Mélange d'herbicides
Daam and Van den Brink (2007)	8,5 L	Gastéropodes (deux espèces), zooplancton, phytoplancton	Pesticide
Faupel et al. (2012)	10 L	Protozoaires, nématodes, rotifères, cladocères, oligochètes	Cadmium
Fliedner and Klein (1996)	300 L	Communauté de zooplancton	Lindane
Gallucci et al. (2015)	500 mL	Phytoplanctonte et invertébrés benthiques	S Diuron
Hitchcock et al. (2003)	4 à 6 L	Rotifère, phytoplancton et myriophylle	Trinitrotoluene

Référence	Taille	Organismes	Contaminants
Merlin et al. (1992)	3.5 L	Elodée, lentilles d'eau, phytoplancton, physe	Dichlorométhane
Paule et al. (2013)	9,6 L	Communauté bactérienne et diatomées	Herbicide
Rai and Mallick (1993)	3 L	Algues (quatre espèces), arthropodes (deux espèces) et protozoaires (une espèce)	Cuivre, Nickel et Fer
Sanderson et al. (2002)	30 L	Communauté de zooplancton	Perturbateur endocrinien
Schmitt-Jansen and Altenburger (2005)	20 L	Communauté de phytoplancton	Herbicide
Seguin et al. (2001)	500 mL	Communauté de phytoplancton	Atrazine et Nicosulfuron
Sugiura (1996)	300 mL	Protozoaires (une espèce), rotifères (deux espèces) et microalgues (une espèce)	Cuivre et Lindane
Swartzman et al. (1989, 1990)	3 L	Communauté aquatique (quinze espèces)	Cuivre et Atrazine

1.1.3 Limites liées à l'utilisation des microcosmes

L'utilisation de microcosmes soulève un certain nombre de difficultés. Tout d'abord, les microcosmes ne sont pas des écosystèmes à proprement parler mais plutôt des portions d'écosystèmes dont certaines caractéristiques ont été sélectionnées pour une étude en particulier [Forbes et al. \(1997\)](#). Leur représentativité est donc moindre comparée à celle des mésocosmes.

De plus, les tailles réduites des microcosmes de laboratoire peuvent engendrer certaines modifications par rapport à un dispositif de taille plus élevée. Ainsi, la consommation et l'excrétion de carbone et d'azote peuvent entraîner des modifications significatives des niveaux de nutriments, et parfois leur épuisement rapide [Dudzic et al. \(1979\)](#), mettant ainsi en péril la survie des espèces présentes. Lorsque le milieu n'est pas renouvelé, la durée des essais ne peut donc pas être très longue.

Enfin, la complexité des microcosmes reste importante, même si elle est réduite par rapport à d'autres dispositifs, notamment à cause du nombre d'espèces présentes et des interactions qui les lient. Les effets des contaminants peuvent ainsi être directs sur les traits d'histoire de vie d'une espèce (par exemple une survie plus faible pour un prédateur) ou indirects, c'est-à-dire qu'ils résultent d'un effet direct sur une espèce et d'une interaction entre les espèces (par exemple une population de proies qui augmente car elles sont consommées par des prédateurs qui sont eux-mêmes moins nombreux à cause de la survie diminuée). Cette somme de différents processus que sont les effets des contaminants et les interactions entre espèces entraînent des difficultés d'interprétation des résultats observés. L'utilisation de la modélisation est un bon moyen de distinguer ces effets et donc de mieux comprendre et interpréter les observations résultant de bioessais en microcosme.

1.1.4 Le microcosme développé par Clément et Cadier

Le microcosme mis en oeuvre par Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#) a été développé pour des bioessais de toxicité chronique et pour l'évaluation des risques selon divers scénarios : sédiments contaminés, résidus d'assainissement routier, percolats de MIOM (Mâchefer d'Incinération des Ordures Ménagères), etc. Ce micro-

cosme a ainsi été utilisé pour étudier différents types de toxicité, comme l'étude de la toxicité de sédiments contaminés (principalement par des métaux et des HAP (Hydrocarbure Aromatique Polycyclique)) [Triffault-Bouchet et al. \(2005\)](#); [Cauzzi \(2007\)](#), les effets du cuivre et du lindane sur le microcosme réduit à deux espèces [Clément and Zaid \(2004\)](#), du cadmium sur le microcosme complet [Clément et al. \(2014\)](#), ou les effets des HAP sur l'activité bactérienne de sédiments naturels introduits dans le microcosme [Verrhiest et al. \(2001\)](#).

Ce microcosme de deux litres est utilisé en conditions contrôlées en laboratoire sur des durées allant de 21 à 28 jours. Dans sa version originale, ce microcosme se compose de cinq espèces en interaction : deux producteurs primaires (des microalgues unicellulaires *Pseudokirchneriella subcapitata* et des lentilles d'eau *Lemna minor*) et trois espèces d'invertébrés (des daphnies *Daphnia magna* - crustacé cladocère ; des amphipodes *Hyallela azteca* - crustacé amphipode ; et des chironomes *Chironomus riparius* - larve de diptère enfouie dans le sédiment qui émerge à l'état adulte) dans deux compartiments abiotiques (eau et sédiment). Ce dispositif expérimental permet de prendre en compte les interactions entre espèces dans la réponse à un contaminant. Il est schématisé sur la Figure 1.3.

Une optimisation du protocole a également été menée dans le but de réduire la variabilité rencontrée au cours des bioessais [Delhaye \(2012\)](#). Les données collectées au cours de la thèse de H. Delhaye [Delhaye \(2012\)](#) ont également été utilisées lors d'une première phase de modélisation des effets du cadmium sur les daphnies [Billoir et al. \(2011, 2012\)](#).

1.2 La modélisation en écotoxicologie

Les processus qui régissent les effets d'un contaminant sur les organismes et les populations, et plus généralement sur le fonctionnement d'un écosystème, sont complexes, notamment lorsque le système étudié comporte plusieurs espèces en interaction. Pour décrire et comprendre ces processus, des outils tels que la modélisation sont nécessaires. La modélisation permet en effet d'introduire des hypothèses et un cadre conceptuel général pour faciliter l'interprétation des données obtenues et la

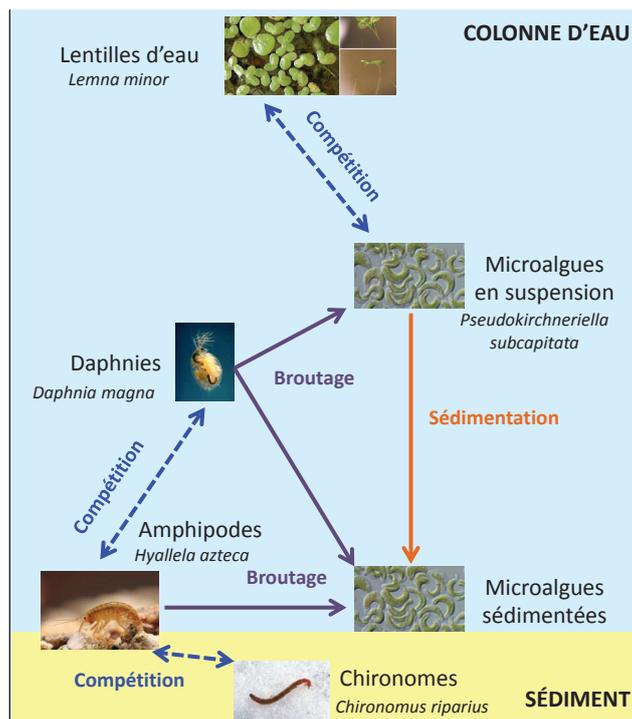


FIGURE 1.3 – Schéma du microcosme développé par Clément et coll., et des interactions potentielles entre espèces

comparaison entre résultats. Il est également possible d'utiliser les modèles pour la prédiction de l'état de l'écosystème considéré.

Dans cette partie, j'aborderai les différents types de modélisation utilisés au niveau individuel en écotoxicologie ainsi que les modèles d'écosystème les plus courants.

1.2.1 Modélisation des effets sur les traits d'histoire de vie individuels

Cette partie présente les trois grands types de modèles utilisés pour décrire l'effet d'un contaminant au niveau de l'organisme, c'est-à-dire sur les traits d'histoire de vie individuels.

a. Modèles concentration-réponse

Les modèles concentration-réponse décrivent la variation d'un trait d'histoire de vie (THV) en fonction de la concentration en contaminant. Un exemple est présenté sur la Figure 1.4. Ces modèles permettent de quantifier l'effet d'un contaminant sur la

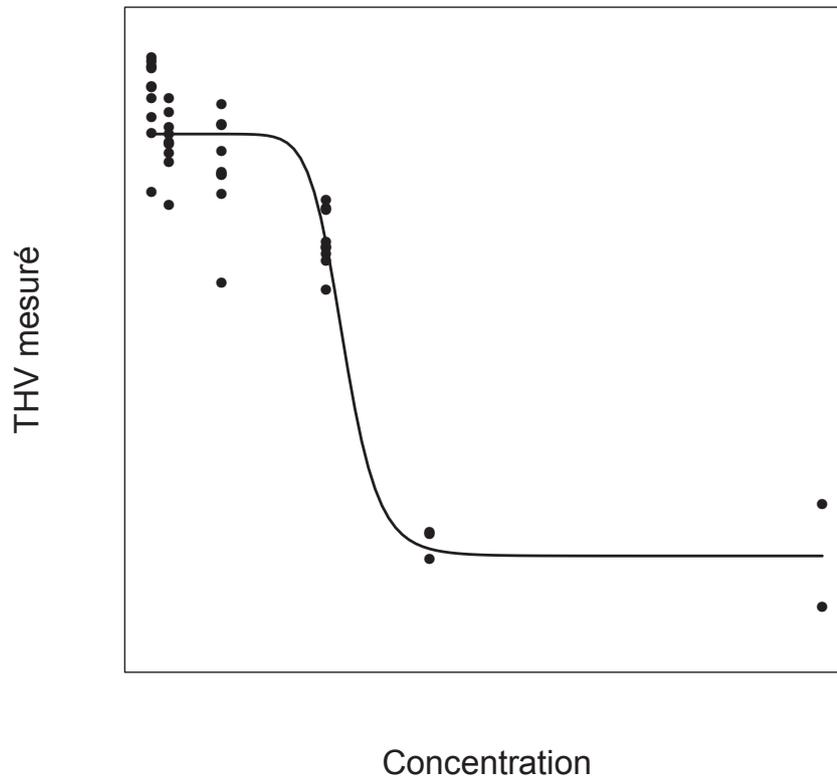


FIGURE 1.4 – Exemple de courbe concentration-réponse : partie déterministe log-logistique (THV : Trait d'Histoire de Vie).

réponse et ainsi d'estimer des EC_x , *Effect Concentration*, (ou LC_x , *Lethal Concentration*, pour la survie), qui sont les concentrations qui entraînent $x\%$ d'effets sur la réponse mesurée par rapport au témoin. Les valeurs de x sont généralement choisies entre 5 et 50, mais la valeur 50 est celle de référence ECB (2003). Ces EC_x sont estimées pour une durée d'exposition donnée.

Tout modèle mathématique décrivant une fonction d'une (des) autre(s) variable(s) est constitué de deux parties : la partie déterministe et la partie stochastique. La partie déterministe du modèle fournit la valeur ou la courbe moyenne décrivant l'évolution de la variable. La partie stochastique du modèle décrit quant à elle tout ce qu'on ne peut pas prévoir, notamment la façon dont les valeurs observées se répartissent autour de la valeur moyenne attendue.

Plusieurs modèles sont couramment utilisés avec comme partie déterministe le mo-

dèle log-logistique, le modèle log-normal ou le modèle de Weibull **Moore and Caux (1997); OECD (1984)**. Ces trois modèles s'écrivent tous sous une même forme générale : $f(y; b, c, d, e) = c + (d - c \times h(y; b, e))$, où f est la fonction de réponse à la concentration y , le paramètre c l'asymptote horizontale des courbes, le paramètre d la valeur de la réponse dans le témoin et où h prend une forme différente selon les modèles, avec le paramètre b correspondant à la pente de la courbe au point d'inflexion et le paramètre e à la concentration au point d'inflexion.

Le modèle log-logistique est le modèle le plus courant pour décrire les données concentration-réponse. Il s'écrit de la manière suivante **Ritz (2010)** :

$$f(y; b, c, d, e) = c + \frac{d - c}{1 + \exp(b \times (\log(y) - \log(e)))} = c + \frac{d - c}{1 + (\frac{y}{e})^b} \quad (1.1)$$

Lorsque le paramètre c est égal à 0 (c'est-à-dire que la réponse est nulle à une concentration infinie), ce modèle est appelé modèle de Hill.

Concernant le modèle log-normal, il s'écrit de la manière suivante **Ritz (2010)** :

$$f(y; b, c, d, e) = c + (d - c)\Phi \times (b \times (\log(y) - \log(e))) \quad (1.2)$$

avec Φ la fonction de répartition d'une loi normale centrée réduite. En fixant c et d à 0 et 1 respectivement, on obtient le modèle log-probit qui est couramment utilisé pour les données binaires **Ritz (2010)**.

Enfin, le modèle de Weibull s'écrit de la manière suivante **Ritz (2010)** :

$$f(y; b, c, d, e) = c + (d - c) \exp(-\exp((b \times (\log(y) - \log(e)))))) \quad (1.3)$$

La partie déterministe décrite par ces fonctions est représentée sur la Figure 1.4.

La partie stochastique, représentée sur la Figure 1.5, décrit quant à elle la répartition des valeurs observées autour de la moyenne attendue sous l'hypothèse de la partie déterministe. Elle dépend de la nature de la variable, donc des données, qui ne présentent pas la même répartition selon leur nature. Pour des variables continues telles que la taille d'un individu, on utilise une loi normale. Lorsque les variables sont discrètes, plusieurs lois peuvent être utilisées : pour les données de survie, le nombre d'individus survivants suit une loi binomiale ou binomiale conditionnelle si on prend en compte le temps. Dans le cas de données de reproduction, qui sont des données

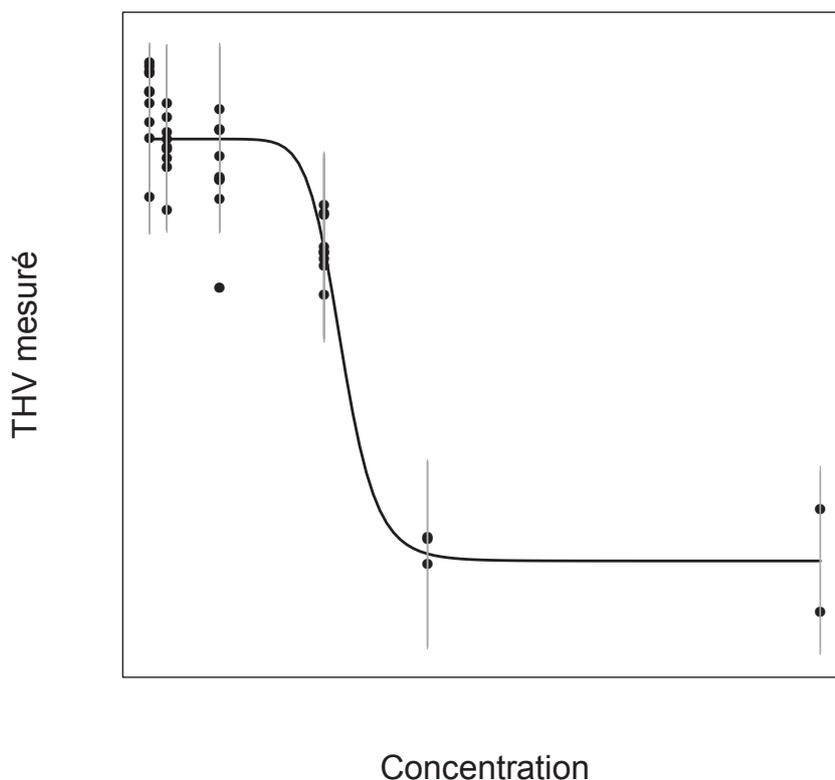


FIGURE 1.5 – Exemple de courbe concentration-réponse : parties déterministe log-logistique et stochastique normale.

de comptage, le modèle stochastique utilisé est une loi de Poisson ou encore Gamma-Poisson [Delignette-Muller et al. \(2014\)](#).

Un inconvénient de ces modèles concentration-réponse est qu'ils ne sont pas mécanistes et ne prennent pas en compte les processus biologiques sous-jacents à l'effet des contaminants [Jager and Zimmer \(2012\)](#). Ces modèles sont très utilisés et souvent résumés aux concentrations critiques qu'ils permettent d'estimer (EC_x notamment). Cependant, le plus souvent, ces modèles ne se concentrent que sur les données en fin de bioessais, rendant ces EC_x valables uniquement pour la durée d'exposition de l'expérimentation. Or, les processus biologiques de toxicité sous-jacents à ces variations de THV apparaissent progressivement au cours du temps.

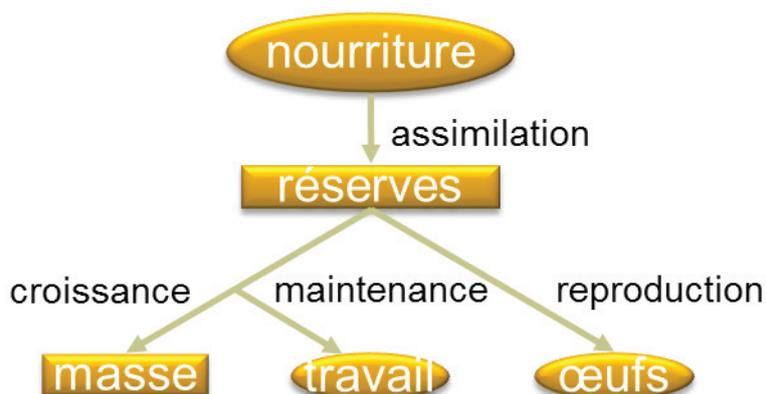


FIGURE 1.6 – Schéma de la théorie DEB.

D'après Kooijman et al. (2000)

b. Modèles DEBtox

La théorie DEB (*Dynamic Energy Budget*) est un cadre conceptuel proposant des lois générales pour décrire la manière dont un organisme va allouer l'énergie assimilée aux processus physiologiques fondamentaux que sont la survie, la croissance et la reproduction Nisbet et al. (2000). Ces processus sont reliés entre eux à travers l'énergie allouée, selon le schéma de la Figure 1.6, et cette théorie peut s'appliquer à tout type d'organisme.

Les modèles DEBtox proposent, dans le cadre de la théorie DEB, de décrire comment un contaminant modifie ce schéma d'allocation énergétique. Pour décrire les effets des contaminants sur les THV des organismes, des modèles à seuil, ou modèles NEC (*No Effect Concentration*), ont été proposés par Kooijmann et Bedaux dans le cadre de l'approche DEBtox Kooijman and Bedaux (1996). La NEC est la concentration critique interne en-dessous de laquelle aucun effet n'est observé pour un trait d'histoire de vie donné. Lorsque la concentration en contaminant est inférieure à la NEC, l'effet est nul, et lorsqu'elle est supérieure à la NEC, l'effet devient proportionnel à l'excès de contaminant, c'est-à-dire la différence entre la concentration d'exposition et la NEC. Cette fonction est représentée sur la Figure 1.7. L'approche DEBtox permet ainsi de décrire comment un contaminant affecte la physiologie d'un organisme et donc de tester différentes hypothèses selon le mode d'action des contaminants, ce qui se traduit par différentes fonctions de stress et différents processus physiologiques

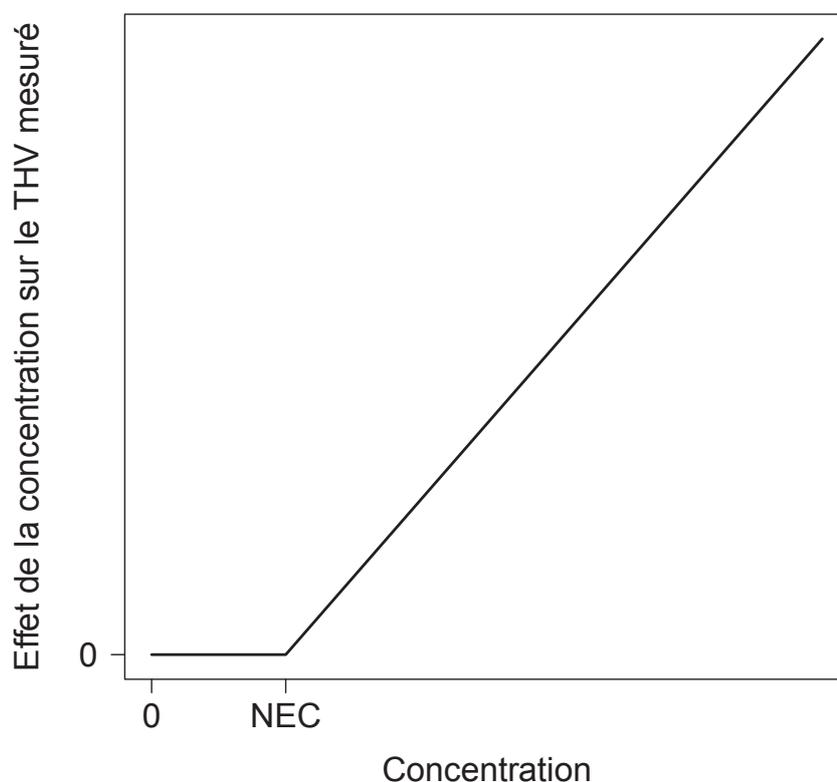


FIGURE 1.7 – Exemple de fonction de stress avec NEC.

affectés. Les parties stochastiques couramment utilisées sont des distributions multinomiales pour les données de survie et des distributions normales pour les autres données (taille, produits de la reproduction) [Jager et al. \(2004\)](#), même si d'autres distributions ont pu être utilisées [Billoir et al. \(2011\)](#).

L'approche DEBtox apporte de la pertinence biologique et toxicologique. C'est tout d'abord une approche intégrée, dans laquelle les THV sont modélisés par EDO (Equations Différentielles Ordinaires) couplées. Sous l'hypothèse des modèles DEBtox, l'organisme peut gérer des perturbations faibles au niveau cellulaire (aux concentrations inférieures à la NEC) sans que les fonctions physiologiques ne soient affectées [Kooijman et al. \(2000\)](#). De plus, contrairement à la EC_x , la NEC est indépendante du temps et commune à tous les traits d'histoire de vie étudiés [Billoir et al. \(2008\)](#); [Ducrot et al. \(2010\)](#); [Jager et al. \(2004\)](#). De nombreuses études impliquant divers contaminants et espèces ont utilisé l'approche DEBtox (e.g. daphnies et cadmium [Billoir et al. \(2012\)](#);

Heugens et al. (2003), daphnies et uranium Biron et al. (2012), daphnies et pesticides Pieters et al. (2006), chironomes et cuivre Péry et al. (2005), chironomes et pesticides Lopes et al. (2005), moules et zinc Muller et al. (2014), HAP et copépodes Klok et al. (2012), nanoparticules et phytoplancton Miller et al. (2010), merlu et PCB (Polychlorobiphényles) Bodiguel et al. (2009), gastropodes et zinc Ducrot et al. (2007)). Ces modèles peuvent être combinés à des modèles de dynamique de populations (section 1.2.2.c).

Néanmoins, les modèles DEBtox présentent également des inconvénients. Malgré des travaux portant sur la simplification des modèles Jager and Zimmer (2012), les modèles restent complexes avec beaucoup de paramètres qu'il est difficile d'estimer en utilisant les données classiques obtenues par les bioessais Billoir et al. (2008) ; certains paramètres sont donc fixés. En outre, l'utilisation des modèles à seuil est reconsidérée par certains écotoxicologues qui mettent en question l'existence réelle d'un tel seuil d'un point de vue physiologique, notamment à des niveaux d'organisation supérieurs à celui de l'organisme Van Straalen (1997).

c. Les modèles toxicocinétiques/toxicodynamiques

Les modèles toxicocinétiques/toxicodynamiques (TK/TD) décrivent les processus de toxicité au niveau de l'organisme. La toxicocinétique concerne l'absorption du contaminant, sa distribution interne, la biotransformation et l'élimination par l'organisme : elle relie la concentration externe à la concentration effective dans l'organisme. La toxicodynamique concerne l'action du contaminant au niveau de son site cible ainsi que les mécanismes de réparation mis en place par l'individu pour faire émerger l'effet du contaminant au niveau de l'organisme. Cette approche permet de formaliser et d'intégrer les connaissances sur la toxicité des contaminants, la sensibilité des organismes et leur capacité de récupération en un modèle global Ashauer and Escher (2010).

Les modèles TK/TD sont constitués d'EDO couplées. La construction d'un modèle TK/TD se fait en deux temps. Il est tout d'abord nécessaire de paramétrer les processus de la partie TK avec des taux d'absorption, d'élimination et de biotransformation constants (c'est-à-dire indépendants du temps) et qui sont spécifiques au contaminant

et à l'espèce étudiés. Ensuite, le modèle TD peut être ajusté à des données expérimentales, en simulant la concentration interne avec le modèle TK préalablement établi. La séparation des deux modèles permet d'identifier les propriétés des contaminants qui influencent la cinétique de celles qui influencent la dynamique de contamination [Begum and Sen \(2007\)](#). Les parties stochastiques couramment utilisées sont des distributions multinomiales pour les données de survie [Jager et al. \(2011\)](#).

Cette approche permet par ailleurs de prédire les effets d'un contaminant pour différents scénarios d'exposition, notamment des variations de concentration très fortes (pulses). Les délais pour l'apparition des effets au niveau de l'organisme peuvent être pris en compte dans un modèle TK/TD, ainsi que les effets cumulatifs lors d'expositions successives. La capacité de récupération des organismes est également intégrée au modèle. De plus, les modèles TK/TD permettent d'extrapoler les mécanismes de contamination pour d'autres espèces ou d'autres contaminants [Ashauer and Escher \(2010\)](#).

Plusieurs études utilisent cette approche pour des espèces variées, par exemple pour explorer au niveau des organismes les effets de la taille sur la variabilité de la sensibilité aux contaminants [Gergs et al. \(2015\)](#), ou au niveau cellulaire la régulation des mécanismes de réparation des cellules [Stamatelos et al. \(2013\)](#). Enfin, les modèles TK/TD peuvent être combinés à des modèles de dynamique de population pour évaluer les risques au niveau populationnel [Gabsi and Preuss \(2014\)](#); [Schmitt et al. \(2013\)](#).

L'un des inconvénients de l'approche TK/TD est son manque de bases mécanistes concernant les paramètres des modèles et leurs liens avec les processus cellulaires de toxicité [Ashauer and Escher \(2010\)](#). En conséquence, les paramètres de ces modèles sont souvent difficiles à estimer. De plus, différentes hypothèses peuvent sous-tendre les modèles TK/TD, ce qui occasionne des approches différentes suivant les études. Un cadre unificateur a cependant été proposé pour la modélisation des effets des contaminants sur la survie (GUTS, *General Unified Threshold model of Survival* [Jager et al. \(2011\)](#)), mais pour d'autres THV, ces modèles sont plus rares.

1.2.2 Modèles multi-espèces

a. Intérêts

Pour décrire l'effet d'une contamination sur le fonctionnement d'un microcosme, il est nécessaire de comprendre ce fonctionnement en condition non contaminée au préalable. Des effets indirects du contaminant peuvent être engendrés par les interactions existant entre les espèces. Ces effets indirects s'ajoutent aux effets directs du contaminant sur les traits d'histoire de vie des organismes. Les effets indirects ne sont pas pris en compte lors de l'extrapolation des résultats de bioessais monospécifiques, rendant cette extrapolation non conservative et les risques pouvant être ainsi sur ou sous-estimés [De Laender et al. \(2008\)](#). Cependant, les observations résultant de la combinaison de ces deux types d'effets sont difficiles à interpréter.

A titre d'exemple, [Swartzman et al. \(1990\)](#) ont montré des effets indirects dus à la présence de plusieurs espèces dans le milieu. Ils ont utilisé un microcosme composé de plusieurs groupes de phytoplanctons (classés en groupes fonctionnels) et de zooplanctons (classés par taille). Un modèle dynamique sans contaminant a d'abord été développé, puis les effets d'un contaminant (le cuivre) ont été modélisés à partir de résultats de tests monospécifiques. Un modèle simulant un effet du contaminant sur le zooplancton dû uniquement à la quantité de cuivre dissous a été comparé à un modèle dans lequel la toxicité diminuait en proportion de la biomasse algale. Le second modèle s'ajustant mieux aux données expérimentales, [Swartzman et coll. \(1989\)](#) ont conclu à un effet des algues sur la disponibilité du cuivre, diminuant ainsi indirectement la toxicité du cuivre sur le zooplancton. D'autres études de cette même équipe montrent des résultats similaires sur l'importance de la modélisation de systèmes multi-spécifiques pour évaluer les risques liés aux contaminants [Swartzman et al. \(1989\)](#); [Taub \(1989\)](#).

La description des interactions entre espèces constitue une base précieuse pour un objectif d'évaluation du risque lié à un contaminant intégrant les interactions ; les modèles d'écosystèmes sont donc une approche intéressante pour l'évaluation du risque écologique [Barnhouse \(1992\)](#); [Forbes and Calow \(2002\)](#).

b. Modèles dynamiques à variables d'état

De nombreux modèles à l'échelle de la communauté impliquent des modèles dynamiques à compartiments constitués d'espèces ou de groupes d'espèces. Les principaux processus modélisés sont, selon les espèces, la croissance, la photosynthèse, la respiration, l'excrétion, la mortalité, la sédimentation du phytoplancton, etc. Les interactions comprennent généralement le broutage, la prédation et la compétition. Lorsque les facteurs abiotiques (température, éclairage, niveaux de nutriments et d'oxygène, etc.) ne sont pas contrôlés, leur influence doit également être modélisée.

Différents modèles d'écosystèmes existent. On peut par exemple citer CASM (*Comprehensive Aquatic Systems Model* Bartell et al. (1999)), CATS (*Contaminants in Aquatic and Terrestrial ecoSystems* Traas et al. (1996)), EcoPath Christensen et al. (1992) ou encore AQUATOX Park et al. (2008). Ces modèles présentent une structure généralement complexe, constituée de sous-modèles relatifs aux différents processus qui régissent le fonctionnement de l'écosystème ; des sous-modèles d'effets de contaminants peuvent ensuite y être intégrés. Ces modèles regroupent un très grand nombre d'espèces, classées par groupes, de nombreux processus modélisés et donc un très grand nombre de paramètres. Ils sont souvent conçus pour modéliser des écosystèmes spécifiques (par exemple des lacs pour AQUATOX et CASM). En limitant le nombre d'espèces et la taille des écosystèmes (mésocosmes), on peut obtenir sur le même principe des modèles plus simples comme le modèle MELODY (modelling MEsocosm structure and functioning for representing LOtic Dynamic ecosystems) Ciric (2012).

La modélisation d'un écosystème encore plus réduit tel qu'un microcosme peut également être abordée par un modèle dynamique à compartiment Acevedo and Waller (2000); Bartleson et al. (2005); Wensem et al. (1997); Sugiura (1996). De nombreux modèles se concentrent quant à eux sur une interaction en particulier, telle que l'interaction proie-prédateur Axelsen et al. (1997); Fontaine and Gonzalez (2005); Fussmann (2000); Grasman et al. (2009). Dans le cas où les conditions sont contrôlées, le modèle peut être simplifié en considérant que les conditions abiotiques n'ont pas d'influence puisqu'équivalentes d'un bioessai à l'autre.

c. Les modèles individus centrés

Les modèles individus centrés ou agents centrés (*Individual-Based Models* en anglais, IBM) décrivent le fonctionnement d'une population composée d'entités autonomes qui possèdent des propriétés évoluant au cours de leur cycle de vie [Grimm \(1999\)](#). La modélisation IBM est une approche "bottom-up", c'est-à-dire que les caractéristiques de la population émergent des propriétés des individus et de leurs interactions.

Les modèles IBM possèdent plusieurs avantages. Ils prennent en compte la variabilité individuelle, ce qui est pertinent dans un contexte d'évaluation du risque. De plus, ils s'appuient généralement sur des hypothèses biologiques plus réalistes que celles sous-jacentes aux modèles à variables d'état. Les modèles individus centrés permettent de modéliser des interactions entre espèces : compétition pour des ressources (entre les arbres d'une forêt [Khadraoui \(2015\)](#), entre insectes [Louda et al. \(2011\)](#)) ou des interactions de type proie-prédateur (poissons [Hrabik et al. \(2014\)](#); [Kristiansen et al. \(2014\)](#)). Ils peuvent être utilisés pour prédire les effets des contaminants à l'échelle de la population, seuls [Focks et al. \(2014\)](#); [Hazlerigg et al. \(2014\)](#); [Kulakowska et al. \(2014\)](#) ou couplés à des modèles d'effets de contaminants (avec un modèle TK [Liu et al. \(2014\)](#), avec un modèle TK/TD [Gabsi and Preuss \(2014\)](#), avec la théorie DEB [Johnston et al. \(2014\)](#); [Martin et al. \(2013\)](#)).

Cependant, les modèles IBM sont très complexes et nécessitent beaucoup de données et une connaissance approfondie du système à étudier. Ils sont majoritairement utilisés avec des données provenant d'études *in situ*, donc spatialisées, généralement pour une espèce, ou deux lorsque l'effet d'une interaction sur une population est étudiée.

1.3 L'inférence des paramètres

L'inférence statistique consiste à estimer les paramètres de populations en utilisant des données observées sur un échantillon. Les caractéristiques de l'échantillon, une fois connues, reflètent, avec une certaine incertitude, celles de la population. Pour ce faire, un ensemble de méthodes existent, que je présenterai dans cette partie. Puis je développerai l'utilisation de la méthode choisie dans cette thèse.

1.3.1 Méthodes d'inférence : principes

Deux grands cadres probabilistes existent pour l'estimation des paramètres d'un modèle : le cadre fréquentiste et le cadre bayésien.

a. Notations

Etant donné un échantillon observé $Y = (y_1, \dots, y_n)$, des paramètres θ et une loi de probabilité P_θ , la vraisemblance $P(Y/\theta)$ quantifie la probabilité que les observations proviennent effectivement d'un échantillon de la loi P_θ . Si f_θ est la densité de la loi P_θ , alors la vraisemblance s'écrit de la manière suivante :

$$P(Y/\theta) = \prod_{i=1}^n f_\theta(y_i) \quad (1.4)$$

b. Inférence fréquentiste

Pour estimer les paramètres d'un modèle dans le cadre fréquentiste, la méthode du maximum de vraisemblance est couramment utilisée. Cette méthode consiste à maximiser la vraisemblance $P(Y/\theta)$ (ou la log-vraisemblance) pour que les probabilités des réalisations observées soient aussi maximum. C'est un problème d'optimisation qui se résout en écrivant que la dérivée première s'annule et la dérivée seconde est négative en $\theta = \hat{\theta}$. On obtient un estimateur $\hat{\theta}$ qui maximise la (log-)vraisemblance.

A partir de cet estimateur, on peut construire un intervalle de confiance à 95% pour chaque paramètre tel que "si on reproduisait un grand nombre de fois l'échantillonnage des données et que l'on estimait à chaque fois le paramètre et son intervalle de confiance, 95% des intervalles de confiance calculés contiendraient la vraie valeur du paramètre".

c. Inférence bayésienne

Contrairement au cadre fréquentiste, le cadre bayésien fournit une distribution *a posteriori* des paramètres du modèle à partir d'une distribution *a priori*, qui peut être plus ou moins informative, et des données.

Le théorème de Bayes, qui donne son nom à l'inférence bayésienne, s'écrit de la manière suivante :

$$P(\theta/Y) = \frac{P(\theta)P(Y/\theta)}{P(Y)} \quad (1.5)$$

avec $P(\theta/Y)$, la probabilité des paramètres sachant les données, *i.e.* la distribution de probabilité *a posteriori* des paramètres, que l'on souhaite maximiser. La distribution *a posteriori* des paramètres s'écrit donc proportionnellement au produit de la distribution *a priori* des paramètres et de la vraisemblance des données :

$$P(\theta/Y) \propto P(\theta)P(Y/\theta) \quad (1.6)$$

L'inférence bayésienne fournit *in fine* un échantillon de la distribution jointe de tous les paramètres. La distribution marginale *a posteriori* de chaque paramètre extraite de cette distribution jointe fournit un intervalle de crédibilité à 95% de chaque paramètre dont l'interprétation est la suivante : "il y a 95% de chance que le paramètre se trouve dans cet intervalle". Le principe de la méthode est résumé sur la Figure 1.8.

1.3.2 Estimation de paramètres en écotoxicologie

L'estimation des paramètres des modèles en écotoxicologie est généralement faite dans le cadre fréquentiste. L'inférence par maximum de vraisemblance nécessite parfois de fixer certains paramètres (les paramètres non relatifs à la toxicité dans les modèles DEBtox par exemple [Kooijman et al. \(2003\)](#)) lorsque tous ne peuvent pas être estimés simultanément. Cette pratique induit un biais puisqu'il n'est pas exclu que ces paramètres aient une influence sur l'estimation des autres paramètres, d'intérêt cette fois. Une analyse de sensibilité peut être menée pour déterminer la sensibilité du modèle à chaque paramètre et conclure sur la pertinence de fixer certains paramètres plutôt que d'autres [Billoir et al. \(2008\)](#).

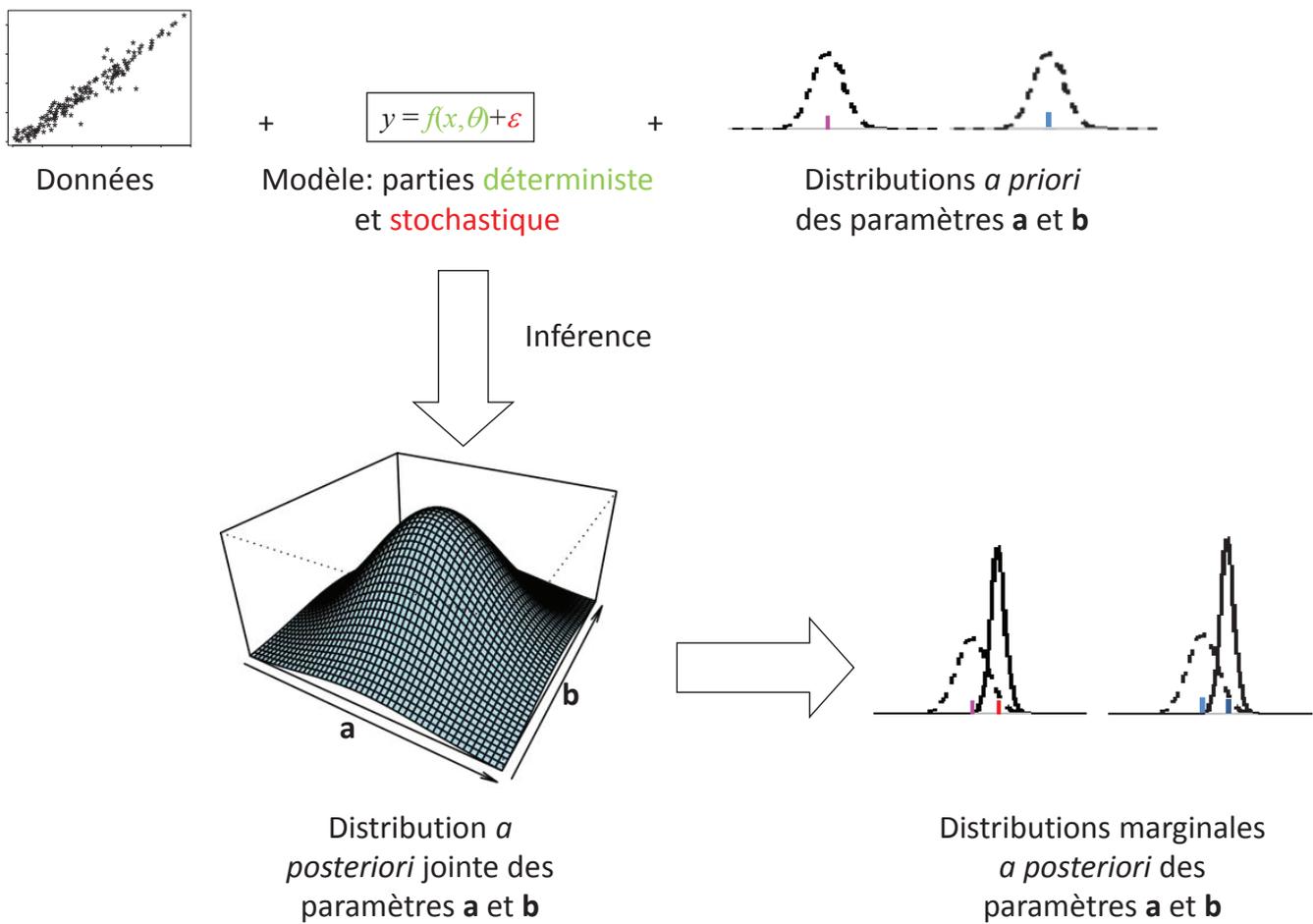


FIGURE 1.8 – Principe de l'inférence bayésienne.

De plus, pour certains modèles complexes, les paramètres sont souvent estimés séparément Chèvre et al. (2005); Hendriks et al. (2005), par exemple par type de données ou pour les témoins d'une part et les concentrations testées d'autre part, ce qui peut être problématique lorsqu'il existe des corrélations non identifiées entre certains de ces paramètres. Les intervalles de confiance doivent dans ce cas être considérés avec précaution puisque les régions de confiance jointes impliquant plusieurs paramètres et permettant de visualiser les corrélations globales ne sont pas prises en compte Billoir et al. (2008). Des ajustements simultanés ont par exemple été réalisés sur des modèles DEBtox Jager et al. (2004, 2006) dans le cadre fréquentiste. Ces ajustements sont effectués en combinant la vraisemblance multinomiale produite par l'analyse des données de survie et une vraisemblance issue de la méthode de la somme des carrés produite par l'analyse des autres types de données. Ces dernières doivent suivre une distribution normale pour que la méthode soit applicable, ce qui est un frein à l'utilisation de parties stochastiques non conventionnelles.

L'inférence bayésienne permet de pallier le problème d'estimation simultanée de tous les paramètres d'un modèle et fournit en plus des informations sur les corrélations entre paramètres à travers les distributions *a posteriori* jointes. Elle est donc bien adaptée à l'estimation des paramètres des modèles en écotoxicologie. Quelques études utilisent le cadre bayésien en écotoxicologie : avec des modèles concentration-réponse Delignette-Muller et al. (2014); Forfait-Dubuc et al. (2012); Fox (2010); Zhang et al. (2012), des modèles DEBtox Billoir et al. (2008, 2009); Ducrot et al. (2010), des modèles TK/TD Billoir et al. (2012); Kon Kam King et al. (2015), ou des modèles déterminant des SSD (*Species Sensitivity Distribution*) Kon Kam King et al. (2015); Oldenkamp et al. (2015).

1.3.3 Avantages de l'inférence bayésienne

L'inférence fréquentiste est couramment utilisée pour l'estimation des paramètres des modèles. L'utilisation de l'inférence bayésienne est plus récente et moins usitée alors qu'elle présente de nombreux avantages.

a. Utilisation simultanée de différents types de données

L'inférence bayésienne est une méthode très souple qui permet de prendre en compte facilement et simultanément les différents types de données (continues, de comptage, etc.) rencontrées en écologie. On peut citer quelques exemples d'études dans lesquelles des données de types différents ont été utilisées simultanément, engendrant des estimations plus précises des paramètres. Des densités de population [Gopalaswamy et al. \(2012\)](#) ou le degré de parenté entre individus [Hadfield et al. \(2006\)](#) ont été modélisés en utilisant des données comportementales, spatiales et génétiques. Les données d'abondance sont également plus simples à gérer dans un cadre bayésien hiérarchique [Moore and Barlow \(2011\)](#). En écotoxicologie, [Billoir et al. \(2011\)](#) ont utilisé de manière relativement simple toutes les données écotoxicologiques disponibles (reproduction, croissance et survie) pour estimer les paramètres d'un modèle DEBtox d'effet du cadmium sur la daphnie. Dans le cadre fréquentiste, comme mentionné précédemment, l'estimation de paramètres relatifs aux différents types de données est généralement faite séparément.

b. Parties stochastiques non conventionnelles

La prise en compte de données de types différents est nécessairement conjointe à l'utilisation de parties stochastiques différentes, parfois non conventionnelles. [Delignette-Muller et al. \(2014\)](#) ont montré qu'un modèle stochastique Gamma-Poisson permettait de mieux décrire certaines données de reproduction par rapport à un modèle Poisson couramment utilisé. De même, les données de survie au cours du temps en fonction de la concentration peuvent être décrites par un modèle binomial conditionnel [Forfait-Dubuc et al. \(2012\)](#), qui prend en compte la probabilité de survie ainsi que le nombre d'individus encore vivants au temps précédent. L'utilisation de tels modèles stochastiques ne soulève pas de problème dans le cadre bayésien alors qu'elle peut s'avérer difficile dans le cadre fréquentiste, notamment lorsque plusieurs types de données sont mis en jeu.

c. Distributions *a priori*

Un autre avantage majeur de l'inférence bayésienne est l'utilisation de distributions *a priori*. Ces distributions permettent de résumer l'information disponible sur les paramètres. Dans les modèles biologiques quels qu'ils soient, les paramètres ont souvent une signification biologique : les spécialistes du domaine ont donc très souvent de l'information *a priori* sur les valeurs attendues pour les paramètres, ou au moins pour une même espèce dans des conditions différentes, des espèces proches ou des contaminants ayant le même mode d'action. Par exemple, pour un contaminant donné, les experts choisissent leur gamme de concentrations en fonction de la valeur attendue de la EC_{50} . Certains modèles incluent des variables latentes (comme la concentration interne dans les modèles DEBtox), inaccessibles par l'expérimentation, mais reliées à certains paramètres (par exemple le taux d'élimination) sur lesquels des connaissances *a priori* sont disponibles. Lorsqu'on ne possède pas du tout d'information sur les paramètres, on utilise des distributions *a priori* vagues, comme par exemple des lois uniformes larges.

d. Distribution jointe *a posteriori*

L'inférence bayésienne fournit *in fine* un échantillon de la distribution jointe de tous les paramètres 1.8. Elle informe donc sur les corrélations entre paramètres. Cette distribution peut être utilisée pour extraire l'incertitude sur toutes fonctions des paramètres du modèle. La distribution marginale *a posteriori* de chaque paramètre est également extraite de cette distribution jointe.

1.3.4 Méthodes de simulation

Les méthodes *Monte Carlo Markov Chain* (MCMC) sont couramment utilisées pour inférer les paramètres d'un modèle à partir de données dans le cadre bayésien. Plusieurs logiciels existent pour effectuer les simulations de ces méthodes.

a. Principe des MCMC

Les méthodes MCMC permettent d'obtenir des tirages d'une variable aléatoire dont la loi de probabilité est connue à une constante près. Elles peuvent donc être appliquées pour donner des tirages de la distribution *a posteriori* de θ . Des tirages sont réalisés dans la distribution *a posteriori* puis on utilise cet échantillon pour estimer empiriquement les moyennes, variances et percentiles de θ . Des algorithmes implémentés dans des logiciels permettent de réaliser ces tirages.

Plusieurs chaînes MCMC (souvent trois) sont nécessaires pour vérifier la convergence de l'algorithme utilisé pour simuler les chaînes, qui ne possède généralement pas de critère d'arrêt : c'est à l'utilisateur de définir le nombre d'itérations à calculer. L'analyse visuelle des traces des chaînes ou le calcul de critères de convergence tels que le critère de Gelman et Rubin [Gelman and Rubin \(1992\)](#) permettent de vérifier la convergence des chaînes. Ces chaînes peuvent être réalisées en parallèle à l'aide de packages spécifiques, ce qui permet de gagner en temps de calcul.

b. Logiciels disponibles

Les logiciels BUGS (*Bayesian inference Using Gibbs Sampling*, WinBUGS et OpenBUGS [Lunn et al. \(2000\)](#); [Surhone et al. \(2010\)](#)) et JAGS (Just Another Gibbs Sampler, [Plummer \(2003\)](#)) utilisent comme algorithme l'échantillonneur de Gibbs pour réaliser les MCMC. On spécifie dans le logiciel le modèle sous forme de noeuds (variables, co-variables et paramètres), les données, les distributions *a priori* des paramètres et les valeurs initiales de chaque noeud. Les logiciels BUGS et JAGS sont interfacés avec le logiciel R [Team \(2013\)](#) *via* les packages r2WinBUGS ou r2OpenBUGS [Sturtz et al. \(2005\)](#) et rjags [Plummer \(2009\)](#), respectivement. Le logiciel Stan [sta \(2015\)](#) utilise les algorithmes NUTS (*No-U-Turn Sampler*) et HMC (*Hamiltonian Monte Carlo*) pour réaliser les MCMC. Il peut également être interfacé avec R *via* le package rStan [rst \(2015\)](#).

1.4 Conclusion

Cette synthèse bibliographique a permis de présenter les différentes approches concernant les outils utilisés durant cette thèse, c'est-à-dire les dispositifs expérimentaux en

écotoxicologie, les modèles d'effets de contaminant et les modèles multi-espèces, et enfin l'estimation de paramètres. Certaines de ces approches ont été choisies pour être appliquées à ce travail de thèse.

Parmi les dispositifs expérimentaux classiquement utilisés pour l'évaluation des risques permettant l'étude des interactions entre espèces, c'est un microcosme de laboratoire basé sur celui développé par Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#) qui a été utilisé. Ce microcosme est présenté au chapitre 2. Pour modéliser les effets du contaminant les modèles concentration-réponse ont été choisis, et le fonctionnement du microcosme a été décrit par un modèle dynamique à variables d'état. La modélisation des différents processus régissant le fonctionnement du microcosme, interactions entre espèces et effets du contaminant inclus, est présentée au chapitre 3. La méthode d'estimation des paramètres utilisée est l'inférence bayésienne et le logiciel choisi pour réaliser les différents calculs est le logiciel JAGS, interfacé avec le logiciel R. Ces éléments sont également présentés au chapitre 3.

Expérimentations en microcosme de laboratoire

Sommaire

2.1	Introduction	44
2.2	Le microcosme étudié	45
2.2.1	Version simplifiée utilisée	45
2.2.2	Processus identifiés	46
2.2.3	Les espèces utilisées	48
2.3	Le protocole expérimental	57
2.3.1	Préparation des microcosmes	57
2.3.2	Types d'expérimentations réalisées	61
2.3.3	Mesures, données collectées et notation	68
2.4	Conclusion	72

2.1 Introduction

L'étude et la description du fonctionnement d'un microcosme aquatique de laboratoire sous pression chimique constitue l'objectif central de la thèse. La méthode utilisée consiste en l'élaboration d'un modèle décrivant ce fonctionnement. Les hypothèses sous-jacentes au modèle ainsi que l'estimation des paramètres reposent sur des expérimentations en microcosme, menées en parallèle de la construction du modèle.

Le microcosme de laboratoire utilisé est un micro-écosystème reconstitué. Il est basé sur le microcosme développé par Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#) pré-

senté dans le premier chapitre (section 1.2.4). Cependant, ce microcosme original comporte de nombreuses espèces et interactions qui rendent difficile la modélisation de son fonctionnement. Il a donc été réduit à trois espèces pour simplifier l'étude : des microalgues (*Pseudokirchneriella subcapitata*, phytoplanctonte unicellulaire), des lentilles d'eau (*Lemna minor*, macrophytes flottantes) et des daphnies (*Daphnia magna*, zooplanctonte).

Le fonctionnement du microcosme a tout d'abord été analysé en condition non contaminée, puis les effets du cadmium ont été explorés. Pour aborder l'étude de la dynamique des espèces en prenant en compte les interactions, nous avons choisi d'isoler les espèces en interactions deux à deux avant d'étudier le microcosme complet à trois espèces. Les lentilles et les daphnies sont supposées ne pas être en interaction directe. Les daphnies ont besoin des algues comme source de nourriture, c'est pourquoi le microcosme partiel constitué de daphnies et de lentilles n'a pas été étudié. Par conséquent, les expérimentations ont en premier lieu été menées dans des microcosmes partiels composés de deux espèces : algues et daphnies d'une part ; algues et lentilles d'autre part.

Ce chapitre présente tout d'abord les simplifications faites par rapport au microcosme original. Je présenterai ensuite brièvement les espèces impliquées (biologie, écologie, sensibilité au cadmium) et enfin le protocole expérimental : la mise en place des microcosmes ainsi que leur suivi, les différentes expérimentations réalisées et les données collectées pour chacune.

Les Tableaux 2.1 et 2.2 résument les expérimentations et les données collectées, respectivement. Dans le reste du manuscrit, il sera fait référence en introduction de chaque chapitre à ces deux tableaux pour indiquer quelles expérimentations et quelles données ont été utilisées dans le chapitre concerné.

2.2 Le microcosme étudié

2.2.1 Version simplifiée utilisée

Le microcosme utilisé a été réduit par rapport au microcosme développé par Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#) dans le but d'alléger le protocole expérimental et de simplifier dans un premier temps la modélisation du fonctionnement du microcosme, à la fois en conditions non contaminée et contaminée. Les trois espèces (algues, daphnies et lentilles d'eau) du microcosme évoluent dans deux compartiments (colonne d'eau et sédiment) au sein d'un bécher de deux litres. Le microcosme est schématisé sur la Figure 2.1.

Les premières expérimentations menées sur le microcosme ont été réalisées en présence de sédiment. Malheureusement, des contaminations bactériennes se sont développées sur le sédiment lors de plusieurs expérimentations. Ces contaminations bactériennes ont très fortement affecté la survie des daphnies, rendant les données de certaines expérimentations inutilisables. Malgré la stérilisation du matériel (verrerie, sédiment, etc.), ces contaminations bactériennes n'ont pas pu être éradiquées. Il a donc finalement été décidé d'ôter le sédiment, en ne laissant dans le microcosme que la colonne d'eau. Cela fût possible de par la réduction du nombre d'espèces présentes par rapport au microcosme original, puisque les daphnies, les lentilles et les algues n'ont pas besoin de la présence de sédiment pour se développer.

Certaines données utilisées proviennent donc d'expérimentations menées avec du sédiment et d'autres sans (voir section 2.3.1 de ce chapitre, Tableau 2.1). Cette particularité sera mentionnée pour chacune des expérimentations, néanmoins l'expression "au fond du bécher" sera utilisée indifféremment pour désigner la surface du sédiment (lorsqu'il est présent) ou le fond du bécher (lorsqu'il n'y a pas de sédiment).

2.2.2 Processus identifiés

Au sein du microcosme, les trois espèces se développent et interagissent entre elles au cours des expérimentations. De nombreux processus régissent donc le fonctionnement du microcosme. Parmi ceux-ci, des processus majeurs ont été identifiés. Certains

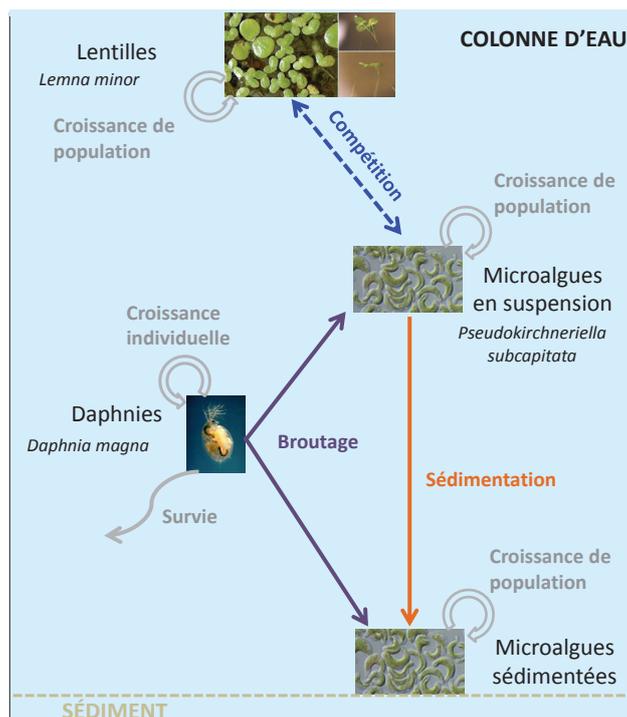


FIGURE 2.1 – Schéma du microcosme utilisé et processus impliqués.

sont intrinsèques à chaque espèce (croissance, survie, reproduction). D'autres apparaissent lorsque deux ou trois espèces sont présentes et constituent donc les processus d'interaction.

La réduction du microcosme à trois espèces conserve trois processus majeurs du micro-écosystème : la sédimentation algale, la compétition entre algues et lentilles et l'ingestion d'algues par les daphnies. Les algues en suspension dans la colonne d'eau sédimentent sous l'effet de la gravité pour passer dans le compartiment des algues sédimentées au fond du bécher. Ces deux types d'algues sont considérés séparément dans la thèse puisqu'elles ne sont pas dans le même milieu (la colonne d'eau et le fond du bécher) et peuvent donc potentiellement évoluer différemment. Elles sont donc comptées séparément (voir section 2.3.3 et Tableau 2.2) et constituent donc deux variables différentes (voir chapitre 3, section 3.2.1.a et Tableau 2.2). En ce qui concerne la compétition pour les nutriments entre algues et lentilles, nous avons fait l'hypothèse simplificatrice qu'elle ne concerne que les algues en suspension dans la colonne d'eau, les algues sédimentées étant spatialement éloignées des lentilles d'eau. Les processus identifiés et à étudier sont représentés sur la Figure 2.1. Les processus intrinsèques aux algues (en suspension et sédimentées) sont la croissance et la sédi-

mentation pour les algues en suspension, uniquement la croissance pour les lentilles. Les processus intrinsèques aux daphnies sont la survie et la croissance individuelle. La reproduction des daphnies n'est pas décrite, les jeunes daphnies étant retirées au fur et à mesure des pontes (voir section 2.3.3) et le prélèvement d'algues par les jeunes étant supposé négligeable devant celui des adultes. Quant aux processus d'interaction, ce sont la compétition entre algues et lentilles, et la consommation d'algues par les daphnies. Les effets du cadmium constituent les derniers processus étudiés. Selon son mode d'action, le contaminant peut avoir des effets sur différents processus. De plus, le contaminant peut avoir des effets sur une espèce *via* un effet direct sur un processus ou *via* un effet indirect qui résulte d'une interaction.

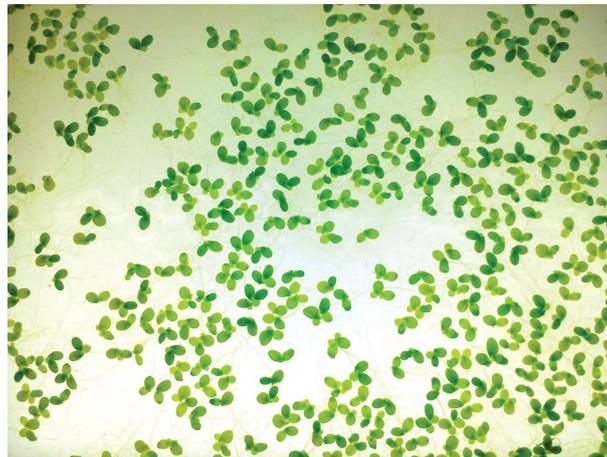
2.2.3 Les espèces utilisées

Cette partie présente des éléments de biologie et d'écologie pour chacune des trois espèces présentes dans le microcosme ainsi que leur sensibilité au contaminant considéré, le cadmium.

a. Éléments de biologie et d'écologie

Biologie des algues

Les algues *Pseudokirchneriella subcapitata* sont des algues vertes unicellulaires, de la famille des *Chlorophyceae*, en forme de croissant de lune d'un diamètre équivalent légèrement inférieur à $4\mu\text{m}$, comme le montre la Figure 2.2. La reproduction se fait par division cellulaire et le développement de la population est principalement limité par l'intensité lumineuse ainsi que par les teneurs en azote et en phosphore. L'intensité lumineuse reçue peut diminuer par auto-ombrage, mais en microcosme les parois transparentes limitent ce phénomène. Dans le microcosme, l'absence de mouvement de la colonne d'eau entraîne la sédimentation des cellules algales par gravité du fait d'une densité légèrement supérieure à celle de l'eau.

FIGURE 2.2 – *P. subcapitata*.FIGURE 2.3 – *L. minor*.

P. Le Quellec

Biologie des lentilles

Les lentilles d'eau *Lemna minor* sont des macrophytes flottant à la surface des plans d'eau, de la famille des *Lemnaceae* (Figure 2.3). Elles se présentent sous forme de colonies de deux à quatre frondes, une fronde ayant un diamètre inférieur à 5 mm et une racine immergée mesurant jusqu'à 15 cm. Les lentilles d'eau se reproduisent généralement par multiplication végétative, par bourgeonnements successifs latéraux. Leur croissance, comme celle des algues, est principalement limitée par les teneurs en azote et en phosphore, ainsi que par l'intensité lumineuse. Celle-ci ne varie pas pour les lentilles en microcosme (en dehors de l'alternance jour/nuit) du fait de leur position en surface du plan d'eau.



FIGURE 2.4 – Mesure d'une daphnie au microscope.

L. Hauduroy

Biologie des daphnies

Les microcrustacés de l'espèce *Daphnia magna* sont des organismes pélagiques appartenant à la famille des *Daphniidae* (ordre des Cladocères). Ces organismes sont des consommateurs primaires qui filtrent l'eau grâce à des appendices pour se nourrir de particules en suspension (algues, bactéries, matière organique, etc.). De grandes antennes permettent leur déplacement. Les daphnies mesurent jusqu'à 6 mm et sont recouvertes d'un exosquelette transparent renouvelé par mue (Figure 2.4).

Les femelles atteignent leur maturité à l'âge de six à sept jours. Deux types d'oeufs sont produits suivant les conditions environnementales. Le cycle de vie de la daphnie est représenté sur la Figure 2.5. En conditions favorables, la reproduction est asexuée (parthénogénétique) et les oeufs donnent naissance à des clones femelles (de 10 à 40 oeufs par ponte et par femelle, avec 1 ponte tous les 2 ou 3 jours) (partie A du cycle). En conditions défavorables, les oeufs donnent des mâles et des femelles qui se reproduisent ensuite par reproduction sexuée. Les oeufs produits par reproduction sexuée, appelés éphippies, sont contenus dans une poche incubatrice qui se détache lors de la mue et restent viables pendant plusieurs mois. Ils éclosent en donnant des

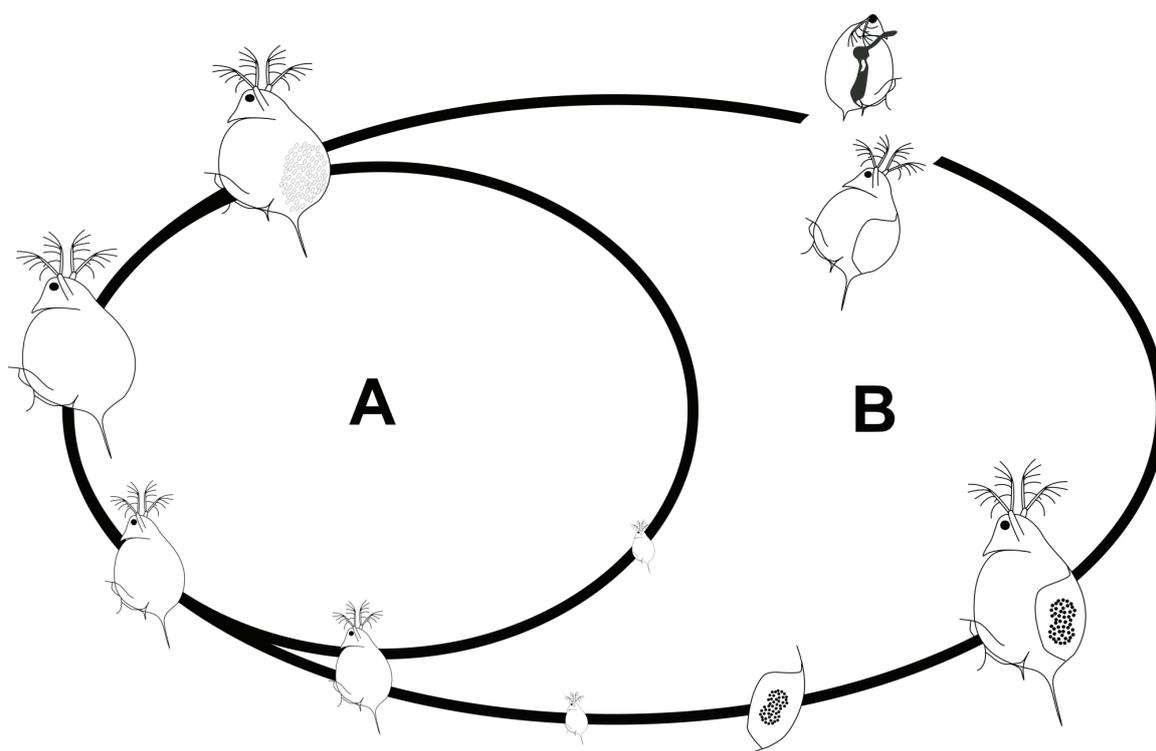


FIGURE 2.5 – Schéma du cycle de vie de *D. magna*.

L. Humblot

femelles lorsque les conditions redeviennent plus favorables et conduisent à la reprise du cycle parthénogénétique (partie B du cycle).

b. Utilisations de ces espèces en écotoxicologie

Les trois espèces choisies sont fréquemment utilisées en écotoxicologie et sont l'objet de tests standardisés. Elles sont en effet faciles à cultiver, à élever et à tester en laboratoire. Elles sont également sensibles à de nombreux contaminants. Cette partie fournit quelques éléments sur l'utilisation courante de chacune de ces espèces.

Les algues en écotoxicologie

P. subcapitata est couramment utilisée en écotoxicologie, pour des tests standardisés (AFNOR, ISO, OCDE) généralement sur la croissance. Un test standardisé OCDE sur la croissance a été mis en place en 1984 (OCDE guidelines). Ce test dure 72h et permet

donc généralement de tester les effets sur plusieurs générations. La croissance est quantifiée par la mesure de la biomasse (densité cellulaire) et une EC_x (généralement une EC_{50}) est déterminée. L'activité photosynthétique peut également être utilisée comme critère d'effet [Koukal et al. \(2003\)](#).

Les lentilles en écotoxicologie

Les lentilles sont aussi souvent utilisées pour l'évaluation de la toxicité d'un contaminant. Elles sont faciles à cultiver et à tester, et se reproduisent par multiplication végétative en donnant naissance à des clones. *L. minor* fait également l'objet de tests standardisés (OCDE) sur la croissance. Ce test dure 7 jours. La croissance est quantifiée par le comptage des frondes et des colonies. D'autres paramètres peuvent également être mesurés, tels que la surface totale des frondes, les poids sec ou frais.

Les lentilles constituent un bon complément des algues pour l'évaluation de la phytotoxicité d'un contaminant puisque les lentilles et les algues représentent des degrés de complexité différents dans le domaine des plantes du fait de leur constitution (algues unicellulaires et macrophytes) [Cleavers and Ratte \(2002\)](#); [Wang \(1990\)](#).

Les daphnies en écotoxicologie

D. magna est couramment utilisée pour l'évaluation des risques écotoxicologiques, notamment pour les avantages que fournit sa reproduction parthénogénétique. En effet, la sensibilité liée au sexe est absente et les organismes produits sont génétiquement identiques. De plus, la daphnie est représentative des organismes zooplanctoniques [Adema \(1978\)](#). Les daphnies jouent également un rôle majeur dans l'équilibre des écosystèmes dans lesquels elles sont présentes puisqu'elles épurent l'eau par filtration. Elles sont enfin présentes sur toute la planète. Des tests standardisés sont basés sur la daphnie (AFNOR, ISO, OCDE). Les critères d'effet généralement étudiés sont la mobilité, la survie, la reproduction et la croissance.

c. Exposition et effets du cadmium

Utilisation et présence dans l'environnement

Le cadmium est utilisé entre autres pour la production d'accumulateurs, de pigments, de barres de contrôle dans les réacteurs nucléaires et comme stabilisant du PVC. Il est également employé pour le cadmiage, qui consiste à déposer par électrolyse une couche de cadmium à la surface d'un matériau pour le protéger de la corrosion, le cadmium ne s'altérant pas au contact de l'air et se comportant bien en milieu marin.

Le cadmium est naturellement présent dans la croûte terrestre, qui contient en moyenne $0,18 \mu\text{g/g}$ de cadmium EPA (2001). On en trouve dans les minerais de zinc ou de plomb. Dans les sols, les niveaux de cadmium se situent entre $0,01$ et $1,8 \mu\text{g/g}$ EPA (2001) tandis qu'il sont compris entre $0,60$ et $74 \mu\text{g/g}$ dans les sédiments des fleuves et des cours d'eau Maloney (2007).

Sensibilité au cadmium

La sensibilité au cadmium est très variable (d'un facteur 10 à 100 Kottelat (2008)) suivant les espèces, les expérimentations réalisées (durée, critères d'effet mesurés, etc.) et les conditions du milieu qui peuvent modifier la spéciation chimique et/ou l'absorption de cadmium par les organismes. Parmi ces conditions on trouve la dureté de l'eau (qui peut diminuer la toxicité Mance (1987)), le pH (qui peut modifier l'absorption du cadmium Lavoie et al. (2012)), la présence d'EDTA (Éthylène Diamine Tétra-Acétique, un chélateur formant des complexes avec les métaux qui diminue l'effet du cadmium Källqvist (2009)), de sédiment, de substances humiques (qui diminuent l'effet du cadmium Koukal et al. (2003); Vigneault and Campbell (2005)), etc. C'est pourquoi des expérimentations préliminaires pour définir les gammes de concentrations effectives ont été réalisées sur les algues et les lentilles d'eau. En ce qui concerne les daphnies, des expérimentations antérieures sur le microcosme ont fourni des indications sur les gammes à tester. La littérature présente également de nombreuses études des effets du cadmium sur ces espèces, qui peuvent orienter le choix des gammes de concentrations à tester.

Algues et effets du cadmium

Les algues d'eau douce ont une affinité pour les cations métalliques due à leur charge nette négative. Elles adsorbent donc physiquement le cadmium, puis celui-ci est transporté activement à l'intérieur de la cellule *via* des canaux de transport de cation [Campbell et al. \(2002\)](#). Les valeurs de EC_{50} pour la croissance algale peuvent varier de 10 à 200 $\mu\text{g/L}$ [Källqvist \(2009\)](#). Au sein du microcosme original, aucun effet n'a été observé sur la croissance algale pour des concentrations en cadmium testées allant jusqu'à 6 $\mu\text{g/L}$ environ [Clément et al. \(2014\)](#).

Des études récentes portent sur la réponse des algues au cadmium, avec d'autres critères d'effets que la croissance. Par exemple, l'effet du cadmium peut ainsi être évalué sur la quantité de chlorophylle [Čypaitė et al. \(2014\)](#), l'intégrité des membranes et certaines activités enzymatiques [Machado et al. \(2015\)](#); l'effet des exudats métalliques et de l'acclimatation [Paquet et al. \(2015\)](#), du pH et des substances humiques sur l'absorption [Boullemant et al. \(2011\)](#); [Lavoie et al. \(2012\)](#) sont également explorés.

Lentilles et effets du cadmium

Les lentilles peuvent accumuler d'importantes quantités de cadmium dans leurs tissus. Elles constituent ainsi de bons candidats à la phytoremédiation (dépollution des sols et des eaux par les plantes) [Hou et al. \(2007\)](#). Néanmoins, les lentilles subissent un stress oxydatif en présence de cadmium qui peut conduire à une réduction de la croissance [Tkalec et al. \(2008\)](#). Suivant les conditions d'exposition (composition du milieu, durée d'exposition, ...), les valeurs de EC_{50} pour la croissance des lentilles varient de 50 à 400 $\mu\text{g/L}$ [Drost et al. \(2007\)](#); [Taraldsen and Norberg-King \(1990\)](#). Dans les expérimentations menées sur le microcosme original avec des concentrations en cadmium testées jusqu'à 6 $\mu\text{g/L}$ environ, aucun effet sur le nombre de frondes de lentille n'a été observé alors que d'autres critères tels que la biomasse et la surface des frondes, ont été impactés dès les plus faibles concentrations testées (1,5 $\mu\text{g/L}$) [Clément et al. \(2014\)](#).

De nombreuses études portent sur les effets du cadmium sur les lentilles d'eau : sur l'accumulation [Basile et al. \(2012\)](#); [Prasad et al. \(2001\)](#), la croissance et le stress oxy-

datif Horemans et al. (2015); Razinger et al. (2008); Varga et al. (2013), lorsqu'il est couplé à d'autres métaux Balen et al. (2011); Horvat et al. (2007), sur la quantité de chlorophylle et certaines activités enzymatiques Radić et al. (2010).

Daphnies et effets du cadmium

Les daphnies sont exposées au cadmium *via* l'eau par voie dissoute et *via* les algues par voie trophique Kottelat (2008); Nriagu and Sprague (1987). Le cadmium s'adsorbe en particulier sur leur cuticule et sur les appendices filtreurs et diffuse ensuite dans l'organisme Robinson et al. (2003). Le cadmium peut avoir, à de faibles concentrations, un effet sur la survie des daphnies, ainsi que des effets sublétaux sur la reproduction et la consommation de nourriture. Au sein du microcosme original, on trouvait des valeurs de NEC d'environ 0,15 $\mu\text{g/L}$ pour la croissance et la reproduction et d'environ 1,8 $\mu\text{g/L}$ pour la survie en présence de sédiment Billoir et al. (2012). Parmi les nombreuses études des effets du cadmium sur la daphnie, on trouve pour la survie des LC_{50} à 14 jours de 8,6 $\mu\text{g/L}$ Nebeker et al. (1986), pour la croissance à 17 jours une EC_{10} de 7,3 $\mu\text{g/L}$ Knops et al. (2001) et pour la reproduction à 17 jours une EC_{10} de 3,1 $\mu\text{g/L}$ Knops et al. (2001), à 21 jours une EC_{50} de 6,1 $\mu\text{g/L}$ Guilhermino et al. (1999).

La présence de plusieurs espèces soulève des difficultés quant au choix de la gamme de concentrations à tester. Etant données les différences de sensibilité au cadmium des espèces étudiées, trouver une gamme "compromis" pour observer des effets sur toutes les espèces peut se révéler compliqué. En effet, une gamme de concentrations peut engendrer des effets très forts sur une espèce dès les concentrations testées les plus faibles (pas de survie ou de croissance) tandis qu'une autre espèce ne sera pas ou très peu affectée même aux plus fortes concentrations. Dans ce cas, il sera difficile d'observer les effets du cadmium de manière pertinente sur les espèces et leurs interaction, et *a fortiori* d'estimer les paramètres des modèles concentration-réponse.

2.3 Le protocole expérimental

Cette partie présente les expérimentations qui ont permis de collecter les données utilisées pour l'estimation des paramètres des modèles. Certaines données sont issues d'expérimentations réalisées avant cette thèse. Elles sont également détaillées ci-après et la "source" (cette thèse ou non) de chaque expérimentation est précisée.

Toutes les expérimentations ont été réalisées à l'ENTPE (Ecole Nationale des Travaux Publics de l'Etat, Vaulx-en-Verin, France). Le protocole expérimental est basé sur celui développé pour le microcosme original par Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#), utilisé dans les études impliquant le microcosme [Clément and Zaid \(2004\)](#); [Cauzzi \(2007\)](#); [Triffault-Bouchet et al. \(2005\)](#); [Verrhiest et al. \(2001\)](#) et optimisé par Delhaye [Clément et al. \(2014\)](#); [Delhaye \(2012\)](#). Il a été adapté pour les expérimentations menées au cours de cette thèse.

2.3.1 Préparation des microcosmes

a. Conditions abiotiques

Deux litres d'eau synthétique (pour la composition voir [Delhaye \(2012\)](#)) sont versés dans les béchers après introduction du sédiment le cas échéant (Figure 2.6). Lorsque du sédiment est présent, les microcosmes sont conditionnés pendant 7 jours dans le noir avant l'introduction des organismes, et ce dans le but de stabiliser l'activité microbienne. Dans les expérimentations sans sédiment, les organismes sont inoculés directement après l'introduction du milieu.

Les microcosmes sont aérés à l'aide de pipettes Pasteur stériles en verre connectées à une pompe à air pour assurer une concentration en oxygène supérieure à 80% de saturation. Les microcosmes sont maintenus à température constante de $20 \pm 2^\circ\text{C}$. Ils sont placés sur des étagères sous un éclairage périodique de 2200 ± 200 lux à la surface de chaque bécher avec des tubes "lumière du jour" 36 W (Mazda), 16 heures par jour. Les béchers sont régulièrement permutés (deux fois par semaine) au cours de la durée de l'expérimentation pour que l'éclairage reçu soit équivalent pour chacun des béchers. La Figure 2.7 présente la disposition des béchers dans la salle

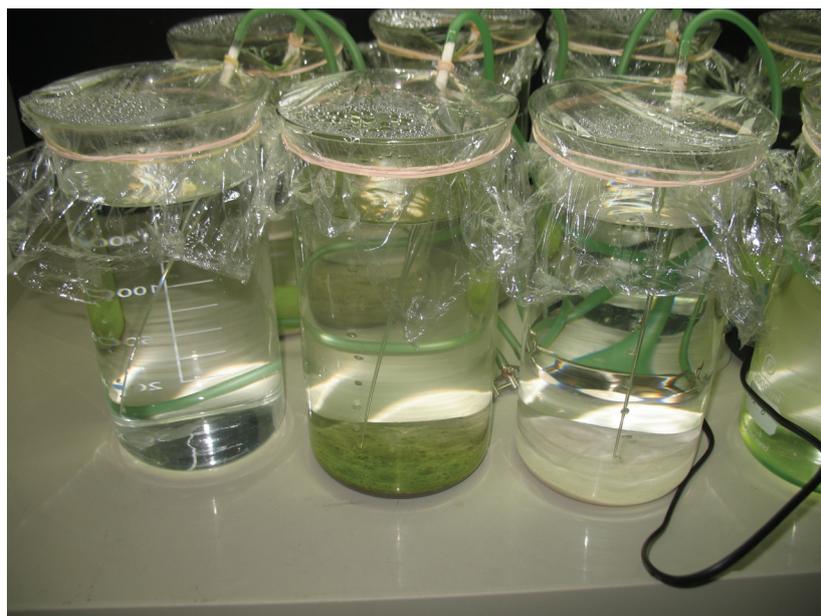


FIGURE 2.6 – Microcosmes en conditions standard, avec et sans sédiment.

d'exposition.

b. Contamination par le cadmium

Les microcosmes sont contaminés par le cadmium avec une solution à 100 mg/L préparée à partir de $Cd(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$. Les volumes correspondant aux concentrations voulues dans les microcosmes sont introduits dans la colonne d'eau avant l'inoculation des organismes puis la colonne d'eau est homogénéisée.

c. Conditions d'élevage des organismes et inoculation

Les organismes utilisés pour les expérimentations sont issus des élevages du laboratoire de l'ENTPE en conditions contrôlées pour limiter la variabilité inter-expérimentations liée à l'état des organismes au moment de l'inoculation. Les élevages sont maintenus à une température comprise entre 20 et 23°C, avec une photopériode de 16 h par jour. Les conditions d'élevage et d'inoculation sont spécifiques à chaque espèce.

Culture et inoculation des algues

Les algues sont cultivées dans un milieu AFNOR comportant les éléments essentiels à leur développement (nutriments et oligo-éléments) sous un éclairage de 3000 à 4000



FIGURE 2.7 – Disposition des béchers dans la salle d'exposition.

lux, dans des erlenmeyers placés sur une plaque agitatrice. Les algues sont repiquées une fois par semaine en conditions stériles, à partir des cultures déjà présentes (1 mL d'inoculum pour 100 mL de milieu par erlenmeyer). Les erlenmeyers contenant le milieu de culture sont préalablement stérilisés à l'autoclave (110°C, 20 min, 2 bars). Pour s'assurer que les algues sont en période de croissance exponentielle au début des expérimentations, l'inoculation est réalisée avec des cultures datant de moins de 8 jours après repiquage.

Pour l'inoculation, des cultures algales sont centrifugées à 4000 tours/min pendant 15 min et lavées à l'eau déminéralisée. Elles sont ensuite resuspendues dans 5 mL d'eau ultra-pure afin d'éviter l'incorporation de milieu de culture dans les microcosmes. De ce fait, un faible volume de suspension algale ne modifiant pas de façon significative la teneur en cadmium est introduit dans les béchers. Environ $4 \cdot 10^7$ cellules (20 000 cell/mL) sont introduites dans chaque microcosme (la densité algale de l'inoculum étant évaluée au compteur de particules), puis la colonne d'eau est homogénéisée.

Culture et inoculation des lentilles

Les lentilles sont cultivées dans un milieu spécifique comportant les éléments essentiels à leur développement (nutriments et oligo-éléments) sous un éclairage de 3000 à 4000 lux, dans des erlenmeyers. Les lentilles sont repiquées une fois par mois en

conditions stériles, à partir des cultures déjà présentes (10 frondes pour 150 mL de milieu par erlenmeyer). Les erlenmeyers contenant le milieu de culture sont préalablement stérilisés à l'autoclave (110°C, 20 min, 2 bars). Pour favoriser l'adaptation des lentilles au milieu du microcosme, celui-ci étant bien moins riche et moins adapté au développement des lentilles que leur milieu de culture, les lentilles sélectionnées sont placées dans des bacs contenant du milieu microcosme environ une semaine avant le début des expérimentations.

Pour l'inoculation, des colonies homogènes similaires pour chaque système sont sélectionnées au sein de la culture de lentilles et 3 ou 4 colonies de 2 frondes (donc 6 ou 8 frondes) sont introduites à la surface de chacun des microcosmes.

Elevage et inoculation des daphnies

Les daphnies sont élevées au laboratoire dans des béciers de 2 L, sous un éclairage de 500 à 1000 lux, dans du milieu microcosme ne contenant pas de solution nutritive, dans le but de limiter la prolifération algale. Elles sont nourries trois fois par semaine avec des algues *P. subcapitata*. Les élevages sont limités à 25 daphnies par bécier, les néonates étant éliminés trois fois par semaine par un double tamisage. Une fois par semaine, le milieu de l'élevage initial est renouvelé de moitié. Les élevages ne sont pas conservés plus de 5 semaines consécutives. Pour l'inoculation, de jeunes daphnies de moins de 24 h sont sélectionnées au sein des élevages et transférées dans du milieu microcosme. Dix daphnies sont ensuite introduites dans chaque microcosme.

2.3.2 Types d'expérimentations réalisées

Deux grands types d'expérimentations ont été menées : en conditions appelées "standard" et en conditions appelées "particulières". Les conditions standard qualifient les expérimentations, en condition contaminée ou non, menées en bécier de deux litres, avec un éclairage constant de 16 heures par jour et aucune modification de l'état de la colonne d'eau au cours de l'expérimentation. Les conditions particulières qualifient les expérimentations pour lesquels une des conditions précédentes est altérée (taille des béciers, luminosité absente, colonne d'eau homogénéisée au cours de l'expéri-

mentation), en condition contaminée ou non. Cette terminologie est conservée tout au long de ce manuscrit.

Les différentes expérimentations menées sont résumées dans le Tableau 2.1.

a. Expérimentations en conditions standard

Les expérimentations en conditions standard constituent le coeur de la partie expérimentale réalisée durant cette thèse. Elles sont en effet destinées à collecter des données concernant le fonctionnement global du microcosme et la dynamique des espèces présentes, en conditions contaminées ou non. Avant l'étude du microcosme complet à trois espèces, les microcosmes partiels algues-daphnies et algues-lentilles ont été étudiés. Pour mettre en évidence les processus relatifs à chaque espèce et les interactions entre elles, le principe choisi est de réaliser des expérimentations dans lesquels certains microcosmes contiennent uniquement les espèces seules tandis que les autres contiennent les deux espèces ensemble. La comparaison de ces deux situations a permis d'identifier les interactions entre les espèces, tout en décrivant les processus intrinsèques aux espèces, qui eux sont présents dans les deux situations. Un exemple de ce type de plan d'expérience est schématisé sur la Figure 2.8.

La préparation et la composition des microcosmes, l'inoculation des espèces et la conduite de l'expérimentation sont similaires pour toutes les expérimentations de ce type. Les expérimentations durent entre 14 et 21 jours à partir de l'inoculation des organismes et sont conduites en béccher de deux litres. L'éclairage, l'aération, la composition du milieu et les conditions biotiques initiales ne varient pas d'une expérimentation à l'autre. La préparation des microcosmes, la conduite de l'expérimentation et les données fournies par ces expérimentations sont détaillées dans les sections suivantes de ce chapitre.

Neuf expérimentations ont été effectuées en conditions standard. Les deux premières expérimentations ont été réalisées par Frédéric Orias au cours de son stage de Master au LEHNA (Laboratoire d'Ecologie des Hydrostystèmes Naturels et Anthropisés) sous la direction de Bernard Clément Orias (2012). Les expérimentations 3 à 8 ont été réalisées au cours de cette thèse, tandis que la neuvième expérimentation a été réalisée par Marie Gennesseaux au cours de son stage de Master au LEHNA sous la direction

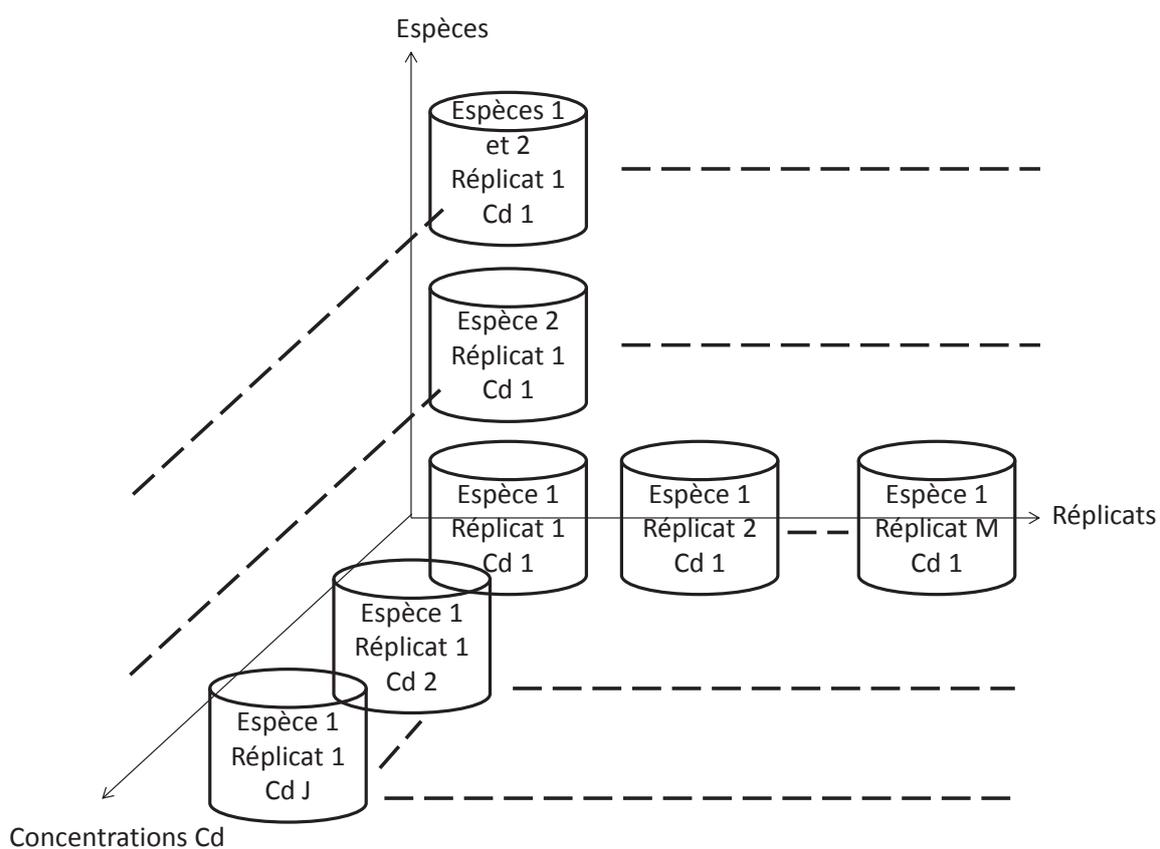


FIGURE 2.8 – Schéma du plan d'expérience pour les expérimentations en conditions standard, ici avec deux espèces et en condition contaminée.

de Bernard Clément [Genesseaux \(2015\)](#). Les objectifs, les espèces présentes, ainsi que les principales caractéristiques de chacune des expérimentations sont détaillés ci-après.

Les expérimentations 1 à 3 ont été conduites afin d'étudier le microcosme partiel algues-daphnies en condition non contaminée. Les algues et les daphnies ont été suivies sur 21 jours. L'expérimentation 1 comportait du sédiment constitué de sable de Fontainebleau, l'expérimentation 2 du sédiment d'Aiguebelette tandis que l'expérimentation 3 a été réalisée sans sédiment.

L'objectif des expérimentations 4 et 5 était l'étude du microcosme partiel algues-lentilles en condition non contaminée. Les algues et les lentilles ont également été suivies sur 21 jours. L'expérimentation 4 a été réalisée avec du sédiment d'Aiguebelette et le milieu, comportant initialement 100 $\mu\text{g/L}$ de phosphore, a été enrichi en phosphore pour atteindre 400 $\mu\text{g/L}$. En revanche, l'expérimentation 5 a été conduite sans sédiment.

Les expérimentations 6 et 7 ont eu pour objectif l'étude du microcosme partiel algues-lentilles en condition contaminée. Ces deux expérimentations ont duré 14 jours et ne comportaient pas de sédiment. Les gammes de cadmium étaient comprises entre 0 et 1000 $\mu\text{g/L}$ et 0 et 50 $\mu\text{g/L}$ pour les expérimentations 6 et 7, respectivement.

L'objectif de l'expérimentation 8 a été l'étude du microcosme complet algues-daphnies-lentilles en condition contaminée, sans sédiment. Les espèces ont été suivies pendant 21 jours. La gamme de cadmium utilisée était comprise entre 0 et 10 $\mu\text{g/L}$.

L'expérimentation 9 a eu pour objectif de compléter l'étude en condition contaminée avec des algues uniquement. L'expérimentation a duré 21 jours et a été conduite sans sédiment. La gamme de cadmium était comprise entre 0 et 40 $\mu\text{g/L}$.

Tableau 2.1 – Expérimentations réalisées

N°	Cadmium	Espèces	Caractéristiques	Source
1	Non	Algues et daphnies	Avec sable de Fontainebleau	Orias (2012)
2	Non	Algues et daphnies	Avec sédiment d'Aiguebelette	Orias (2012)
3	Non	Algues et daphnies	Sans sédiment	Cette thèse
4	Non	Algues et lentilles	Avec sédiment d'Aiguebelette, milieu enrichi en P	Cette thèse
5	Non	Algues et lentilles	Sans sédiment	Cette thèse
6	Oui	Lentilles	Sans sédiment, gamme Cd : 0-1000 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Cette thèse
7	Oui	Algues et lentilles	Sans sédiment, gamme Cd : 0-50 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Cette thèse
8	Oui	Algues, lentilles et daphnies	Sans sédiment, gamme Cd : 0-10 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Cette thèse
9	Oui	Algues	Sans sédiment, gamme Cd : 0-40 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Gennesseaux (2015)
10	Non	Algues	Avec sable de Fontainebleau, à l'obscurité	Gaucci (2011)
11	Non	Algues	Sans sédiment, remise en suspension des algues par homogénéisation de la colonne d'eau	Cette thèse
12	Oui	Daphnies (et algues)	Sans sédiment, étude du broutage, en bécher de 100 mL	Cette thèse
13	Oui	Algues	Sans sédiment, test de gamme Cd (0-100 $\mu\text{g.L}^{-1}$), en bécher de 100 mL	Cette thèse
14	Non	Algues et daphnies	Sans sédiment, densité algale initiale introduite multipliée par 10	Cette thèse

b. Expérimentations en conditions particulières

Cinq expérimentations en conditions particulières ont été réalisées afin d'étudier un processus particulier impliqué dans le fonctionnement global du microcosme. A l'exception de l'expérimentation 10 qui a été effectuée par Xavier Gaucci au cours de son stage de Master au LEHNA sous la direction de Bernard Clément [Gaucci \(2011\)](#), toutes ces expérimentations ont été réalisées pendant cette thèse.

Trois de ces expérimentations (expérimentations 10 à 12) ont donc été conduites de manière à isoler un processus considéré pour produire des données non "bruitées" destinées à améliorer la compréhension et la description de ce processus. L'expérimentation 10 a été réalisée dans le but d'étudier la sédimentation algale seule (en l'absence de croissance algale et sans les autres espèces). Pour cela, les béchers n'ont pas été éclairés et ont été enveloppés de papier d'aluminium. Ainsi, la photosynthèse n'ayant pas lieu, le processus de sédimentation a été isolé. La densité algale dans la colonne d'eau a été mesurée tout au long de l'expérimentation. L'expérimentation a duré 10 jours, en condition non contaminée, en bécher de deux litres avec du sédiment sous forme de sable de Fontainebleau.

L'expérimentation 11 a été réalisée afin d'étudier la croissance algale seule (en l'absence de sédimentation algale et sans les autres espèces). Pour cela, la colonne d'eau des béchers a été homogénéisée tout au long de l'expérimentation et la densité algale totale a été suivie pendant 19 jours. L'expérimentation a été conduite en bécher de deux litres, en condition non contaminée et sans sédiment.

L'expérimentation 12 a été effectuée afin de mesurer le broutage d'algues par les daphnies. Elle a duré 24 heures, en condition non contaminée, en bécher de 100 mL et sans sédiment.

Une autre expérimentation (expérimentation 13) a été effectuée pour déterminer la gamme adéquate de cadmium à utiliser vis-à-vis de la sensibilité des algues seules. Elle a duré 5 jours, en condition contaminée, en béchers de 100 mL et sans sédiment. La gamme de cadmium utilisée était comprise entre 0 et 100 $\mu\text{g/L}$.

Enfin, une dernière expérimentation (expérimentation 14) a été réalisée en conditions standard, mais avec une densité algale initiale différente de celle utilisée pour toutes les autres expérimentations. Cette expérimentation avait pour but de produire des

données pour permettre une meilleure estimation des paramètres utilisés dans la modélisation du processus de broutage. Pour cela, le nombre d'algues inoculées au début de l'expérimentation était 10 fois supérieur à celui inoculé dans les expérimentations standard ($4 \cdot 10^8$ algues au lieu de $4 \cdot 10^7$). L'expérimentation a duré 16 jours, en condition non contaminée et sans sédiment.

2.3.3 Mesures, données collectées et notation

Selon les expérimentations et les espèces, différents types de données ont été récoltées. Les données relatives au cadmium, aux algues, aux daphnies et enfin aux lentilles sont détaillées dans cette section. Les différents types de données récoltées, ainsi que les notations correspondantes utilisées dans la suite du manuscrit pour la modélisation sont résumées dans le Tableau 2.2.

a. Dosage du cadmium

Les concentrations en cadmium total (milieu non filtré) et dissous (milieu filtré à $0.45 \mu\text{m}$) ont été suivies au cours des expérimentations. Cela a permis de vérifier que la concentration en cadmium dans les microcosmes restait stable tout au long des expérimentations. Dans cette étude la concentration en cadmium dissous, qui correspond au cadmium présent dans la solution uniquement (le cadmium total comprenant en plus le cadmium adsorbé et absorbé par les organismes) sera utilisée. La mesure de la concentration en cadmium dissous est réalisée sur des échantillons de 10 mL à l'inoculation, puis une fois par semaine environ. Les échantillons sont acidifiés à pH 2.0 avec de l'acide nitrique ultra pur et stockés à 4°C en attendant l'analyse. Le cadmium est dosé par spectrophotométrie d'absorption atomique (Perkin Elmer - PinAAcle 90T, four graphite) à l'ENTPE.

La moyenne arithmétique de la totalité des mesures a été calculée et ensuite utilisée comme valeur de concentration pour la modélisation. Pour chaque expérimentation, une gamme de J valeurs (pour J concentrations testées, témoin inclus) ordonnées et croissantes a ainsi été obtenue. Les concentrations testées sont notées $C_j, j \in [0, J]$. La concentration dans le témoin (égale à 0) est notée C_0 et correspond à l'index $j = 0$, tandis que la concentration C_J (indice $j = J$) correspond à la plus forte concentration

testée. Ainsi, les concentrations en cadmium utilisées sont les suivantes, en $\mu\text{g/L}$: 0,00 ; 11,09 ; 20,21 ; 35,54 et 51,06 (expérimentation 7), 0,00 ; 2,25 ; 4,50 ; 6,88 et 9,09 (expérimentation 8) et 0,00 ; 26,17 ; 36,44 ; 40,79 et 43,56 (expérimentation 9).

b. Suivi des algues

La densité algale dans la colonne d'eau est mesurée tous les deux ou trois jours, en prélevant de façon intégrative 20 mL de milieu. Après homogénéisation, 1 mL de l'échantillon est utilisé pour mesurer la densité algale à l'aide d'un compteur de particules (Coulter®). Les 19 mL restant sont reversés délicatement dans le microcosme. Pour déterminer le nombre de cellules algales au fond du bécher (ou sur le sédiment), la colonne d'eau est homogénéisée et la densité algale totale est mesurée à l'aide du compteur de particules comme décrit précédemment (ou à l'aide d'une cellule hématocytométrique Thoma en présence de sédiment, afin de distinguer les cellules algales des particules sédimentaires remises en suspension). Le nombre de cellules algales au fond du bécher (ou sur le sédiment) est ensuite déduit par soustraction du nombre de cellules dans la colonne d'eau au nombre de cellules algales total. Cette mesure requiert le sacrifice des microcosmes, c'est pourquoi elle n'est effectuée qu'une fois par semaine, ou uniquement en fin d'expérimentation, suivant les objectifs de l'expérimentation.

Les nombres de cellules algales par bécher dans la colonne d'eau et au fond du bécher au temps t et à la concentration C_j sont notés $Y_1(t, C_j)$ et $Y_2(t, C_j)$, respectivement. En présence de lentilles, ils sont notés $YF_1(t, C_j)$ et $YF_2(t, C_j)$, en présence de daphnies $YD_1(t, C_j)$ et $YD_2(t, C_j)$, et en présence de lentilles et de daphnies $YFD_1(t, C_j)$ et $YFD_2(t, C_j)$. A l'obscurité, le nombre de cellules algales par bécher dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j est noté $Y_{dark_1}(t, C_j)$ et lorsque la colonne d'eau est homogénéisée, il est noté $Y_{mix_1}(t, C_j)$ (Tableau 2.2).

c. Suivi des lentilles

Les frondes de lentilles sont comptées deux à trois fois par semaine.

Le nombre de frondes de lentilles par bécher au temps t et à la concentration C_j est noté $F(t, C_j)$. En présence d'algues, il est noté $FY(t, C_j)$ et en présence d'algues et de

daphnies $FYD(t, C_j)$ (Tableau 2.2).

d. Suivi des daphnies

Les daphnies sont comptées (après retrait des néonates si nécessaire) et leur taille mesurée (du sommet de la capsule céphalique à la base de l'épine caudale) deux à trois fois par semaine (Figure 2.4). Les néonates sont ôtés des microcosmes tous les deux jours pour ne pas atteindre des densités trop importantes, puis comptés.

Le nombre de daphnies vivantes par béccher au temps t et à la concentration C_j est noté $W(t, C_j)$. La taille des daphnies au temps t et à la concentration C_j est notée $Z(t, C_j)$ (Tableau 2.2).

2.4 Conclusion

Le microcosme original de Clément et Cadier [Clément and Cadier \(1998\)](#) a été réduit en termes de nombre d'espèces dans le but de simplifier à la fois les expérimentations et la modélisation. Le microcosme composé de trois espèces a été étudié de manière fragmentée, d'abord avec des sous-systèmes composés de deux espèces uniquement, puis avec les trois espèces. Le microcosme a également été d'abord étudié en condition non contaminée puis en présence de cadmium.

De nombreuses expérimentations, de différents types, ont été menées durant cette thèse (Tableau 2.1) mais des données issues d'expérimentations réalisées précédemment ont également pu être utilisées. Le point clé a été d'étudier les microcosmes partiels à deux espèces en conditions standard en utilisant, dans une même expérimentation, des bécchers comportant les espèces isolées et des bécchers comportant les espèces ensemble. Cela a permis la mise en évidence des interactions et des processus intrinsèques à chacune des espèces. Des expérimentations en conditions particulières ayant pour but d'isoler les processus clés ont également fourni des informations complémentaires.

Tableau 2.2 – Données collectées par expérimentations

Expérimentations	Données produites	Notation : observa- tions	Notations : variables
1,2,3,4,5,9,13,14	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, sans daphnies, sans lentilles	Y_1	N_1
1,2,3,4,5,9,14	Nombre d'algues au fond du bécher, sans daphnies, sans lentilles	Y_2	N_2
1,2,3,14	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, avec daphnies, sans lentilles	YD_1	N_1
1,2,3,14	Nombre d'algues au fond du bécher, avec daphnies, sans lentilles	YD_2	N_2
4,5,7,8	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, sans daphnies, avec lentilles	YF_1	N_1
4,5,7,8	Nombre d'algues au fond du bécher, sans daphnies, avec lentilles	YF_2	N_2
8	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, avec daphnies, avec lentilles	YFD_1	N_1
8	Nombre d'algues au fond du bécher, avec daphnies, avec lentilles	YFD_2	N_2
10	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, sans daphnies, sans lentilles, à l'obscurité	Y_{dark_1}	N_1
11	Nombre d'algues dans la colonne d'eau, avec daphnies, sans lentilles, colonne d'eau homogénéisée	Y_{mix_1}	N_1
4,5,6,7,8	Nombre de frondes de lentilles, sans daphnies, sans algues	F	N_d
4,5,7,8	Nombre de frondes de lentilles, sans daphnies, avec algues	FY	N_d
8	Nombre de frondes de lentilles, avec daphnies, avec algues	FYD	N_d
1,2,3,8,14	Nombre de daphnies vivantes	W	D_s
1,2,3,8,14	Taille des daphnies	Z	L

Modélisation mécaniste du fonctionnement du microcosme en présence de contaminant

Sommaire

3.1	Introduction	73
3.2	Le modèle dynamique	75
3.2.1	Variables et processus	75
3.2.2	Hypothèses générales sur le fonctionnement du microcosme	76
3.2.3	Modélisation des différents processus	78
3.2.4	Modélisation de l'effet du cadmium	89
3.2.5	Modèle complet	91
3.3	Estimation des paramètres	103
3.3.1	Information <i>a priori</i>	103
3.3.2	Simulations	103
3.3.3	Analyses des prédictions des modèles	106
3.4	Conclusion	112

3.1 Introduction

Le modèle développé pour décrire le fonctionnement du microcosme est un modèle mécaniste basé sur un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) couplées. Le développement du modèle s'est fait en parallèle de la conduite des expérimentations ; il a été décomposé en sous-modèles correspondants aux microcosmes partiels

présentés dans le chapitre précédent. Le principe général consiste à comparer la dynamique des espèces lorsqu'elles sont isolées et ensemble pour mettre en évidence leurs interactions, en conditions non contaminée puis contaminée. Les hypothèses sous-jacentes au modèle se basent sur la dynamique supposée des espèces et sur le protocole expérimental.

Le cadre bayésien a été choisi pour l'estimation des paramètres car il permet 1) de prendre en compte en une seule fois des données de nature différente (nombres de cellules algales ou de frondes par béccher, taille des daphnies, données de survie) et 2) d'introduire de l'information *a priori* sur les différents paramètres qui est très souvent disponible lorsque l'on modélise des processus biologiques de manière mécaniste.

La première partie de ce chapitre présente la description du modèle. Elle suit le protocole "*Overview, Design concepts and Details*" (ODD), qui a été développé pour décrire les modèles individus-centrés [Grimm et al. \(2010\)](#). Notre modèle ne comportant pas tous les éléments du protocole, celui-ci a été simplifié. Ainsi, je présente, selon ce protocole, les variables et les processus du modèle, les hypothèses générales qui sous-tendent le fonctionnement du microcosme, l'initialisation et enfin les modèles qui correspondent aux trois espèces, à leurs interactions et aux effets du cadmium sur les différents processus. La seconde partie du chapitre présente la méthode de discrétisation du modèle et la méthode d'estimation des paramètres commune à tous les chapitres. Plusieurs outils d'analyse statistique ont été utilisés dans notre étude ; ils seront brièvement présentés dans ce chapitre puis seront développés dans les chapitres correspondants.

Les Tableaux 3.1, 3.2 et 3.3 résument les équations du modèle, les liens stochastiques entre variables et données, et les variables et paramètres, respectivement. Dans les chapitres suivants (4 à 7), il sera fait référence dans l'introduction aux Tableaux 3.1 et 3.2 pour indiquer quels sous-modèles sont utilisés.

3.2 Le modèle dynamique

3.2.1 Variables et processus

a. Variables

Si la dynamique des algues et des lentilles a effectivement été modélisée, pour les daphnies, seuls deux traits d'histoire de vie (la croissance et la survie), qui sont impliqués dans l'interaction entre algues et daphnies, ont été modélisés. La dynamique de population des daphnies n'est donc pas prise en compte à proprement parler, puisque les jeunes daphnies sont comptées mais ôtées des systèmes au fur et à mesure des expérimentations. Toutefois, la reproduction ainsi mesurée a été prise en compte pour caractériser les effets du cadmium sur les daphnies.

Le modèle complet comprend cinq variables d'état (la notation des variables est résumée dans le Tableau 2.2). Les deux premières sont les nombres d'algues par béccher dans les deux compartiments du microcosme (colonne d'eau et fond du béccher) au temps t et à la concentration C_j : les algues en suspension dans la colonne d'eau (compartiment 1), notée $N_1(t, C_j)$, et les algues sédimentées au fond du béccher ou sur le sédiment (compartiment 2), notée $N_2(t, C_j)$ (note : on utilisera tout au long de ce chapitre l'expression "au fond du béccher" indifféremment pour "au fond du béccher" et "sur le sédiment" puisqu'on suppose le même découpage du microcosme dans les deux cas). Les deux variables d'état suivantes se réfèrent aux daphnies : le nombre de daphnies vivantes dans le microcosme, résumé par le taux de survie au temps t et à la concentration C_j , noté $S(t, C_j)$, et la taille des daphnies au temps t et à la concentration C_j , notée $L(t, C_j)$. La dernière variable d'état est le nombre de frondes par béccher au temps t et à la concentration C_j , notée $N_d(t, C_j)$.

b. Processus

Les processus régissant le fonctionnement du microcosme ont été modélisés en temps continu, à l'aide d'équations différentielles ordinaires. Deux de ces processus concernent la dynamique algale intrinsèque : la sédimentation des algues en suspension et la croissance des algues en suspension et sédimentées. Deux processus sont relatifs aux

traits d'histoire de vie des daphnies, la survie et la croissance. La croissance des lentilles est le seul processus relatif à la dynamique intrinsèque des lentilles d'eau. Pour les interactions entre espèces, trois processus majeurs ont été identifiés. Le broutage des algues par les daphnies se décompose en deux processus : l'ingestion des algues par les daphnies et la localisation des daphnies pour le broutage. Le processus d'interaction entre algues et lentilles se résume à la compétition interspécifique. Enfin, les effets du cadmium sur les différents paramètres affectés constituent un dernier processus.

3.2.2 Hypothèses générales sur le fonctionnement du microcosme

Les hypothèses générales sous-jacentes au modèle reposent sur les contraintes liées aux expérimentations décrites dans le chapitre 2. On suppose que les cellules algales sont uniformément réparties dans chacun des compartiments du microcosme et que leur vitesse de sédimentation est constante le long de la colonne d'eau et au cours du temps. Par conséquent, le volume d'eau occupé par les algues en suspension diminue à la même vitesse que les algues sédimentent.

Les daphnies sont supposées être nourries *ad libitum*, notamment dans le but d'éviter les facteurs confondants lors de l'étude des effets du cadmium sur le microcosme. On suppose également qu'elles broutent dans toute la colonne d'eau, ainsi qu'au fond du bécher. Etant donné le faible nombre de daphnies dans le microcosme, on suppose que leur impact sur l'enrichissement en nutriments de la colonne d'eau, ainsi que sur la resuspension des algues sédimentées est négligeable ; on fait donc l'hypothèse que la présence des daphnies n'a pas d'influence sur les processus intrinsèques aux algues, c'est-à-dire sur la croissance et la sédimentation algales. Ces hypothèses seront testées et discutées dans le chapitre 4.

Les daphnies néonates sont ôtées du microcosme régulièrement au cours des expérimentations, on suppose donc que leur consommation d'algues est négligeable devant celle des daphnies adultes. Le retrait des néonates permet également de considérer la reproduction des daphnies comme un processus indépendant du fonctionnement global du microcosme et comme un indicateur à part pour étudier l'impact du cadmium.

Etant donné que les parois des béciers laissent passer la lumière, on suppose que les algues et les lentilles ne sont en compétition que pour les nutriments du milieu. Les algues sédimentées étant relativement distantes des frondes de lentilles, on suppose que seules les algues en suspension sont en compétition avec les lentilles. On considère également que toutes les algues en suspension sont en compétition avec les lentilles. Le choix de cette dernière hypothèse est discuté en complément du chapitre 5.

Différents processus ont été identifiés comme pouvant être affectés par le cadmium : la croissance des algues et des lentilles à travers les taux de croissance, la compétition interspécifique entre algues et lentilles à travers les paramètres d'intensité de la compétition, la survie des daphnies à travers le taux de survie, la croissance des daphnies à travers le taux de croissance ainsi que le broutage des algues par les daphnies. On suppose que les autres processus et les autres paramètres du modèle ne sont pas affectés par le cadmium.

3.2.3 Modélisation des différents processus

Cette partie présentera la modélisation des différents processus. Les processus relatifs à chacune des espèces seront développés dans un premier temps, puis les processus d'interaction et les effets du cadmium seront ensuite détaillés. Pour chaque processus, la partie stochastique sera présentée à la suite de la partie déterministe.

a. Processus relatifs aux algues

Les différents processus relatifs aux algues sont décrits ci-dessous.

Sédimentation

On définit $V_1(t)$ (mL) comme le volume occupé par les algues en suspension au temps t . Comme les algues sédimentent, $V_1(t)$ est dépendant du temps et diminue au cours de l'expérimentation. On définit V_2 (mL) comme le volume occupé par les algues sédimentées. Le processus de sédimentation est représenté en ajoutant (respectivement soustrayant) au nombre de cellules algales sédimentées (respectivement en suspen-

sion) par b cher, le nombre de cellules algales par b cher qui passent du compartiment 1 (le volume d'eau occup  par les algues en suspension) au compartiment 2 (le fond du b cher). Le nombre de cellules algales par b cher qui passent dans le compartiment 2 est donc  gal au nombre de cellules algales qui quittent le compartiment 1 au temps t et la concentration en cadmium C_j :

$$\frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = -\frac{dN_2(t, C_j)}{dt} \quad (3.1)$$

On mod lise la d croissance du nombre de cellules algales par b cher dans la colonne d'eau par une d croissance exponentielle au cours du temps :

$$\frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = -s \times N_1(t, C_j) \quad (3.2)$$

avec s le taux de s dimentation (jour⁻¹).

Croissance des algues

Pour prendre en compte la comp tition intrasp cifique pour les nutriments, la croissance algale est d crite par un mod le logistique [Thornton et al. \(2010\)](#); [Vanoverbeke \(2008\)](#); [Yang et al. \(2011\)](#) dans chacun des compartiments :

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_1(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_1(t, C_j)}{K_1(t)}\right) \\ \frac{dN_2(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_2(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_2(t, C_j)}{K_2}\right) \end{cases} \quad (3.3)$$

avec $r_a(C_j)$ (jour⁻¹) le taux de croissance intrins que des algues   la concentration en cadmium C_j , $K_1(t)$ et K_2 (nombre de cellules algales par b cher) les capacit s limites pour les algues en suspension et s diment es, respectivement. Les taux de croissance des algues en suspension et s diment es sont suppos s identiques lorsqu'il n'y a pas de s diment et diff rents lorsqu'il y en a. On suppose que les quantit s de nutriments ne varient pas en pr sence de cadmium et donc que les capacit s limites sont ind pendantes de la concentration en cadmium.

La capacit  limite est d finie comme le nombre maximal de cellules algales par b cher dans chaque compartiment et d pend de la place et de la quantit  de nutriments disponible du milieu. On suppose donc que la capacit  limite est proportionnelle au

volume de chacun des compartiments, de sorte que K_1 est proportionnelle au volume V_1 et donc diminue au cours du temps à la vitesse de sédimentation des algues :

$$\frac{dK_1(t)}{dt} = -s \times K_1(t) \implies K_1(t) = K_1(0) \times \exp(-s \times t) \quad (3.4)$$

avec $K_1(0)$ (nombre de cellules algales par b cher) la capacit  limite de la colonne d'eau enti re   $t = 0$. Comme on a suppos  que V_2 ne varie pas au cours du temps, K_2 est constant.

Stochasticit  pour les nombres de cellules algales par b cher

On suppose que les logarithmes d cimaux du nombre de cellules algales par b cher dans la colonne d'eau et au fond du b cher suivent une loi normale **Roger and Reynaud (1978)** de moyenne $\log_{10}(N_1(t, C_j))$ et $\log_{10}(N_2(t, C_j))$ et de variance σ_{N_1} et σ_{N_2} , respectivement.

b. Processus relatifs aux daphnies

Survie

On d crit la probabilit  de survie des daphnies au temps t et   la concentration C_j , not e $S(t, C_j)$, par un mod le   seuil qui prend en compte la concentration ainsi que le temps d'exposition **Forfait-Dubuc et al. (2012)** :

$$S(t, C_j) = \exp(-(m_0 + k_s \times \max(0, C_j - NEC)) \times t) \quad (3.5)$$

avec m_0 (jour⁻¹) la mortalit  naturelle instantan e, k_s la pente de la fonction de stress lin aire (1/( g.L⁻¹)jour⁻¹) et la NEC ( g.L⁻¹) la concentration   partir de laquelle le contaminant a un effet sur la survie (Figure 1.7). Lorsque la concentration C_j est inf rieure   la NEC , la quantit  $\max(0, C_j - NEC)$ est  gale   0, il n'y a alors pas d'effet sur le taux de survie qui ne d pend que de la mortalit  naturelle m_0 et du temps t . En revanche, lorsque la concentration C_j est sup rieure   la NEC , la quantit  $\max(0, C_j - NEC)$ est  gale au surplus de concentration et la mortalit  due au cadmium s'ajoute   la mortalit  naturelle. L'allure des courbes d crivant la proportion de

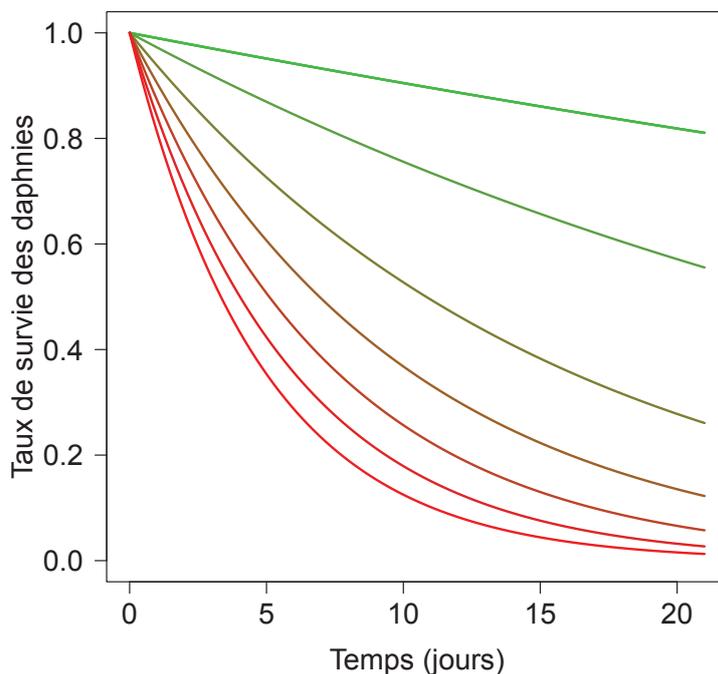


FIGURE 3.1 – Allure des courbes décrivant le taux de survie des daphnies au cours du temps en fonction de la concentration en contaminant.

Le temps est représenté en abscisse et la concentration croissante en contaminant est représenté du vert (concentration la plus basse) au rouge (concentration la plus élevée).

survivants au cours du temps en fonction de la concentration en contaminant obtenue avec ce modèle est représentée sur la Figure 3.1.

Stochasticité pour le nombre de daphnies vivantes

$D_s(t, C_j)$, le nombre de daphnies vivantes au temps t et à la concentration en cadmium C_j dans le microcosme, est décrit par un modèle stochastique binomial conditionnel considérant que le nombre de daphnies vivantes à un temps donné t dépend du nombre de daphnies encore vivantes au temps précédent $t - 1$ et de la probabilité de survie entre $t - 1$ et t Forfait-Dubuc et al. (2012) :

$$D_s(t, C_j) \sim \mathcal{B} \left(\frac{S(t, C_j)}{S(t-1, C_j)}, D_s(t-1, C_j) \right) \quad (3.6)$$

\mathcal{B} représentant la loi binomiale. L'hypothèse implicite faite ici, si on se place dans le cadre GUTS Jager et al. (2011), est que la toxicocinétique du contaminant est rapide, c'est-à-dire que la concentration interne dans l'organisme est considérée égale à la concentration externe dans l'eau C_j .

Croissance des daphnies

La croissance des daphnies est décrite par un modèle de croissance de Von Bertalanffy Von Bertalanffy (1938) :

$$L(t, C_j) = L_\infty - (L_\infty - L_0) \times \exp(-k(C_j) \times t) \quad (3.7)$$

avec L_∞ et L_0 (mm) la taille maximum et la taille à la naissance, respectivement. $k(C_j)$ (jour⁻¹) est le taux de croissance à la concentration en cadmium C_j .

Stochasticité pour la taille des daphnies

La taille des daphnies est quant à elle supposée suivre une loi normale de moyenne $L(t, C_j)$ et de variance σ_L .

c. Processus relatifs aux lentilles

Croissance des lentilles

Pour prendre en compte la compétition intraspécifique pour les nutriments, la croissance des lentilles est décrite par un modèle logistique :

$$\frac{dN_d(t, C_j)}{dt} = r_d(C_j) \times N_d(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_d(t, C_j)}{K_d}\right) \quad (3.8)$$

avec $r_d(C_j)$ (jour⁻¹) le taux de croissance intrinsèque des lentilles à la concentration en cadmium C_j , et K_d (nombre de frondes de lentilles par b cher) la capacit  limite pour les lentilles. On suppose que les quantit s de nutriments ne varient pas en pr sence de cadmium et donc que la capacit  limite est ind pendante de la concentration en cadmium.

Stochasticité pour le nombre de frondes de lentille par béccher

On suppose que le logarithme décimal du nombre de frondes de lentilles par béccher suit une loi normale de moyenne $\log_{10}(N_d(t, C_j))$ et de variance σ_{N_d} .

d. Processus relatifs aux interactions entre espèces

Ingestion des algues par les daphnies

Le taux d'ingestion d'une daphnie, c'est-à-dire le nombre de cellules algales par béccher que chaque daphnie consomme par jour, noté $g_1(t, C_j)$ dans la colonne d'eau et $g_2(t, C_j)$ au fond du béccher, est fonction de la densité algale dans le compartiment et de la taille des daphnies. Le taux d'ingestion a été décrit par différentes fonctions au cours de l'étude :

1. Modèle à seuil (représenté sur la Figure 3.2)

Dans le chapitre 4, le modèle utilisé pour décrire le taux d'ingestion est une fonction affine par morceaux Burns (1969); DeMott (1982); Egloff and Palmer (1971) du taux de filtration $f(t, C_j)$ et de la densité algale dans chacun des compartiments Lampert et al. (1986); Rigler (1961) :

$$g_1(t, C_j) = \begin{cases} f(t, C_j) \times \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} & \text{si } 0 < \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} \leq I_{lim} \\ f(t, C_j) \times I & \text{si } \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} > I_{lim} \end{cases} \quad (3.9)$$

et

$$g_2(t, C_j) = \begin{cases} f(t, C_j) \times \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} & \text{si } 0 < \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} \leq I_{lim} \\ f(t, C_j) \times I & \text{si } \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} > I_{lim} \end{cases} \quad (3.10)$$

où I_{lim} (cell.ml⁻¹) est la densité algale au-dessus de laquelle une daphnie ne peut pas ingérer de cellules algales supplémentaires (*Incipient Limiting Level* en anglais). Le paramètre b (sans dimension) est introduit en présence de sédiment ; en effet, dans ce cas, les algues s'enfoncent dans le sédiment et seule une proportion b d'algues sédimentées est disponible pour le broutage des daphnies.

Le taux de filtration, noté $f(t, C_j)$, dépend de la taille des daphnies Burns (1969);

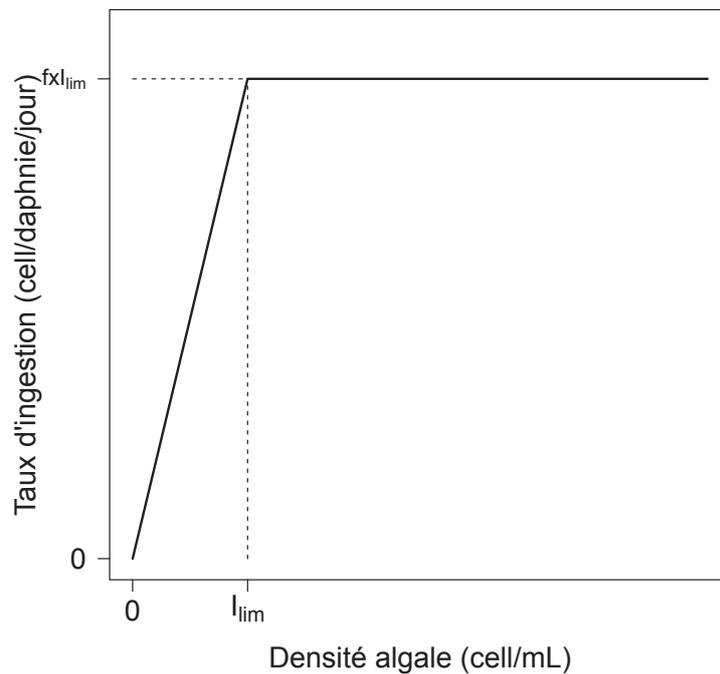


FIGURE 3.2 – Allure de la courbe de la fonction d'ingestion selon le modèle à seuil, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.

DeMott (1982); Egloff and Palmer (1971). Il est modélisé comme une fonction puissance de la taille :

$$f(t, C_j) = \alpha \times L(t, C_j)^\gamma \quad (3.11)$$

où α ($\text{mL.daphnie}^{-1}.\text{jour}^{-1}.\text{mm}^{-\gamma}$) et γ (sans dimension) sont des coefficients allométriques.

Le modèle à seuil a l'avantage d'utiliser des paramètres connus et couramment utilisés dans les études portant sur la consommation de nourriture par les daphnies. Cependant, l'utilisation d'un modèle à seuil peut poser des problèmes numériques lors de l'intégration des EDO et des difficultés d'estimation des paramètres si on se trouve toujours en-dessous ou au-dessus du seuil. Un second modèle sans seuil, le modèle de Holling type II a donc été testé :

2. Modèle Holling type II (représenté sur la Figure 3.3)

Dans le chapitre 6, le taux d'ingestion est modélisé par une fonction de Holling type II de la densité algale dans chacun des compartiments, pour une taille de

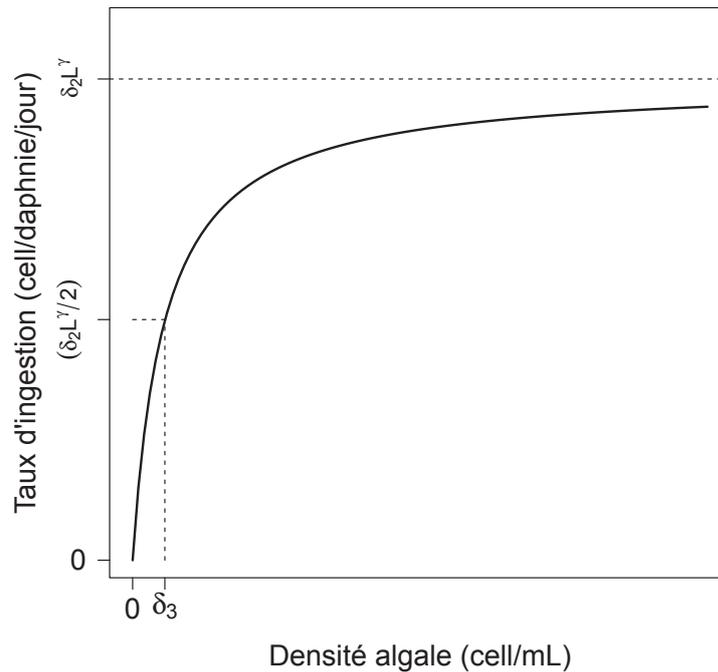


FIGURE 3.3 – Allure de la courbe de la fonction d’ingestion selon le modèle de Holling type II, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.

daphnie donnée :

$$g_1(t, C_j) = \frac{\delta_2 \times L(t, C_j)^\gamma \times \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)}}{\delta_3 + \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)}} \quad (3.12)$$

et

$$g_2(t, C_j) = \frac{\delta_2 \times L(t, C_j)^\gamma \times \frac{N_2(t, C_j)}{V_2}}{\delta_3 + \frac{N_2(t, C_j)}{V_2}} \quad (3.13)$$

avec δ_2 ($\text{cell.daphnie}^{-1} \cdot \text{jour}^{-1} \cdot \text{mm}^{-\gamma}$) le taux d’ingestion maximum et δ_3 (cell.mL^{-1}) la densité algale pour laquelle le taux d’ingestion maximum est divisé par deux.

Localisation du broutage des algues par les daphnies

Pour déterminer le nombre de daphnies qui broutent dans chacun des compartiments au cours du temps, on suppose que les daphnies, en tant qu’espèce pélagique, se nou-

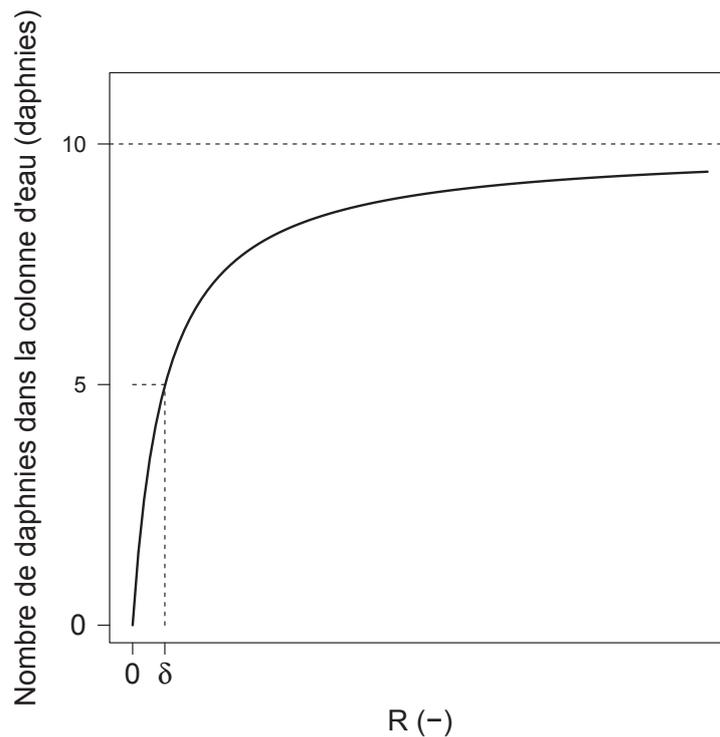


FIGURE 3.4 – Allure de la courbe décrivant le nombre de daphnies broutant dans la colonne d’eau, pour un temps et une concentration en contaminant donnés.

rissent préférentiellement dans la colonne d’eau [Siehoff et al. \(2009\)](#). On suppose également que les daphnies se déplacent vers le fond du b cher lorsque le ratio de densit  algale du compartiment 1 sur le compartiment 2 ($R(t, C_j)$) se trouve en-dessous d’une valeur sp cifique [Siehoff et al. \(2009\)](#). Le nombre de daphnies qui broutent dans la colonne d’eau au temps t et   la concentration C_j , not  $D_1(t, C_j)$, est donc fonction du ratio $R(t, C_j)$ et du nombre de daphnies vivantes par b cher $D_s(t, C_j)$, au temps t et   la concentration en cadmium C_j (repr sent  sur la Figure 3.4) :

$$D_1(t, C_j) = \frac{D_s(t, C_j) \times R(t, C_j)}{\delta + R(t, C_j)} \quad (3.14)$$

avec δ (sans dimension) le ratio de densit s algales pour lequel la moiti  des daphnies vivantes broutent dans la colonne d’eau.

Compétition interspécifique entre algues et lentilles

La compétition interspécifique entre algues et lentilles est décrite par un modèle de Lotka-Volterra de type I (ajoutée à la dynamique des algues et des lentilles décrites par les Equations (3.3) et (3.8)) :

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_1(t, C_j) \left(1 - \frac{N_1(t, C_j)}{K_1(0) \exp(-s \times t)}\right) - s \times N_1(t, C_j) - \\ \eta(C_j) \times N_1(t, C_j) \times N_d(t, C_j) \\ \frac{dN_d(t, C_j)}{dt} = r_d(C_j) \times N_d(t, C_j) \left(1 - \frac{N_d(t, C_j)}{K_d}\right) - \beta(C_j) \times N_d(t, C_j) \times N_1(t, C_j) \end{cases} \quad (3.15)$$

avec $\eta(C_j)$ et $\beta(C_j)$ ((nombre de lentilles par b cher)⁻¹.jour⁻¹ et (nombre d'algues par b cher)⁻¹.jour⁻¹, respectivement) les param tres d'intensit  de la comp tition des lentilles sur les algues et des algues sur les lentilles, respectivement. Les autres param tres sont d crits   la suite des Equations (3.3) et (3.8).

3.2.4 Mod lisation de l'effet du cadmium

On suppose que le processus de survie des daphnies est affect  par le cadmium. La mod lisation du taux de survie en fonction de la concentration en cadmium est d crite dans ce chapitre (section 3.2.3.b Survie, Eq.(3.5)).

On suppose  galement que le taux de croissance des algues, des lentilles et des daphnies, ainsi que les param tres d'intensit  de la comp tition sont affect s par le cadmium. L'effet de la concentration en cadmium sur ces param tres est mod lis  par une fonction log-logistique   trois param tres de la concentration en cadmium C_j :

$$q(C_j) = \frac{q_0}{1 + \left(\frac{C_j}{E_q}\right)^{b_q}} \quad (3.16)$$

avec q_0 la valeur du param tre dans le t moin, E_q ($\mu\text{g.L}^{-1}$) la concentration en cadmium pour laquelle $q(C_j) = \frac{q_0}{2}$, ce qui est  quivalent   une EC_{50} , et b_q (sans dimension) la courbure de la fonction log-logistique. Cette fonction est repr sent e sur la Figure 3.5.

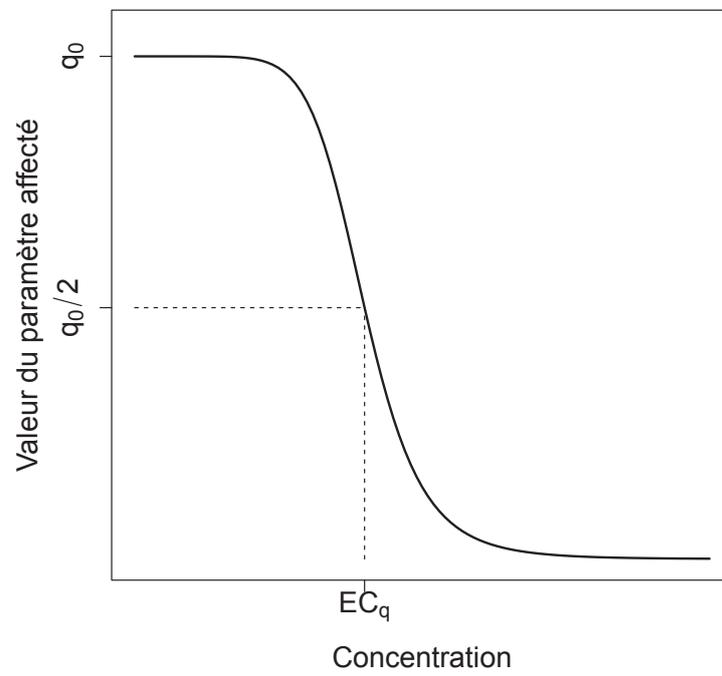


FIGURE 3.5 – Allure de la fonction de stress log-logistique.

3.2.5 Modèle complet

Le modèle complet sous forme d'EDO (intégrées dans le cas des variables $L(t, C_j)$ et $S(t, C_j)$) ainsi que les parties stochastiques sont présentées ci-dessous. Les équations discrétisées de la partie déterministe sont résumées dans le Tableau 3.1, les liens entre variables et données dans le Tableau 3.2 et les variables et paramètres du modèle complet dans le Tableau 3.3.

a. Parties déterministes

La partie déterministe du modèle décrivant le fonctionnement du microcosme avec les trois espèces s'écrit comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_1(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_1(t, C_j)}{K_1(0) \exp(-s \times t)}\right) - s \times N_1(t, C_j) \\ -\eta(C_j) \times N_1(t, C_j) \times N_d(t, C_j) - D_1(t, C_j) \times g_1(t, C_j) \\ \frac{dN_2(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_2(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_2(t, C_j)}{K_2}\right) + s \times N_1(t, C_j) \\ -(D_s(t, C_j) - D_1(t, C_j)) \times g_2(t, C_j) \\ \frac{dN_d(t, C_j)}{dt} = r_d(C_j) \times N_d(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_d(t, C_j)}{K_d}\right) - \beta(C_j) \times N_d(t, C_j) \times N_1(t, C_j) \\ L(t, C_j) = L_\infty - (L_\infty - L_0) \times \exp(-k(C_j) \times t) \\ S(t, C_j) = \exp(-(m_0 + k_s \times \max(0, C_j - NEC)) \times t) \end{array} \right. \quad (3.17)$$

Ce modèle est valable également lorsque les espèces sont seules ou à deux (lentilles et algues, algues et daphnies). Quand les lentilles ne sont pas présentes $N_d(t, C_j) = 0$. Quand les algues ne sont pas présentes $N_1(t, C_j) = 0$ et $N_2(t, C_j) = 0$. Quand les daphnies ne sont pas présentes $D_1(t, C_j) = 0$, et donc $D_s(t, C_j) = 0$, et les deux dernières équations doivent être ôtées.

Tableau 3.1 – Modèle complet (sans les liens avec les données)

Processus/Espèce	Noeud et Définition	N°
Survie des daphnies	$S(t, C_j) = \exp(-(m_0 + k_s \times \max(0, C_j - NEC)) \times t)$	3.5
Survie des daphnies	$D_s(t, C_j) \sim \mathcal{B}\left(\frac{S(t, C_j)}{S(t-1, C_j)}, D_s(t-1, C_j)\right)$	3.7
Croissance des daphnies	$L(t, C_j) = L_\infty - (L_\infty - L_0) \exp(-k(C_j) \times t)$	3.6
Broutage des daphnies (choix du compartiment)	$D_1(t, C_j) = \frac{D_s(t, C_j) \times R(t, C_j)}{\delta + R(t, C_j)}$	3.14
Broutage des daphnies dans la colonne d'eau (ingestion, modèle à seuil)	$g_1(t, C_j) = \begin{cases} f(t, C_j) \times \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} & \text{si } 0 < \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} \leq I_{lim} \\ f(t, C_j) \times I & \text{si } \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)} > I_{lim} \end{cases}$	3.9
Broutage des daphnies au fond du béccher (ingestion, modèle à seuil)	$g_2(t, C_j) = \begin{cases} f(t, C_j) \times \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} & \text{if } 0 < \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} \leq I_{lim} \\ f(t, C_j) \times I & \text{if } \frac{b \times N_2(t, C_j)}{V_2} > I_{lim} \end{cases}$	3.10
Broutage des daphnies (filtration, modèle à seuil)	$f(t, C_j) = \alpha \times L(t, C_j)^\gamma$	3.11
Broutage des daphnies dans la colonne d'eau (ingestion, Holling II)	$g_1(t, C_j) = \frac{\delta_2 \times L(t, C_j)^\gamma \times \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)}}{\delta_3 + \frac{N_1(t, C_j)}{V_1(0)}}$	3.12
Broutage des daphnies au fond du béccher (ingestion, Holling II)	$g_2(t, C_j) = \frac{\delta_2 \times L(t, C_j)^\gamma \times \frac{N_2(t, C_j)}{V_2}}{\delta_3 + \frac{N_2(t, C_j)}{V_2}}$	3.13
Dynamique algale dans la colonne d'eau	$N_1(t, C_j) = (N_1(t-1, C_j) + (r_a(C_j) \times N_1(t-1, C_j)(1 - \frac{N_1(t-1, C_j)}{K_1(0) \exp(-s(t-1))}) - s \times N_1(t-1, C_j) - D_1(t-1, C_j) \times g_1(t-1, C_j) - \eta(C_j) \times N_d(t-1, C_j) \times N_1(t-1, C_j)) \times p$	3.17a
Dynamique algale au fond du béccher	$N_2(t, C_j) = N_2(t-1, C_j) + (r_a(C_j) \times N_2(t-1, C_j)(1 - \frac{N_2(t-1, C_j)}{K_2}) + s \times N_1(t-1, C_j) - (D_s(t-1, C_j) - D_1(t-1, C_j)) \times g_2(t-1, C_j)) \times p$	3.17b
Dynamique des lentilles	$N_d(t, C_j) = (N_d(t-1, C_j) + (r_d(C_j) \times N_1(t-1, C_j)(1 - \frac{N_1(t-1, C_j)}{K_d}) - \beta(C_j) \times N_1(t-1, C_j) \times N_d(t-1, C_j)) \times p$	3.17c

Processus/Espèce	Noeud et Définition	N°
Effet du cadmium sur la croissance des algues	$r_a(C_j) = \frac{r_{a0} \left(\frac{C_j}{E_{r_a}}\right)^{b_{r_a}}}{1 + \left(\frac{C_j}{E_{r_a}}\right)^{b_{r_a}}}$	3.16a
Effet du cadmium sur la croissance des lentilles	$r_d(C_j) = \frac{r_{d0} \left(\frac{C_j}{E_{r_d}}\right)^{b_{r_d}}}{1 + \left(\frac{C_j}{E_{r_d}}\right)^{b_{r_d}}}$	3.16b
Effet du cadmium sur le paramètre de compétition des lentilles sur les algues	$\eta(C_j) = \frac{\eta_0 \left(\frac{C_j}{E_{r_\eta}}\right)^{b_{r_\eta}}}{1 + \left(\frac{C_j}{E_{r_\eta}}\right)^{b_{r_\eta}}}$	3.16c
Effet du cadmium sur le paramètre de compétition des algues sur les lentilles	$\beta(C_j) = \frac{\beta_0 \left(\frac{C_j}{E_{r_\beta}}\right)^{b_{r_\beta}}}{1 + \left(\frac{C_j}{E_{r_\beta}}\right)^{b_{r_\beta}}}$	3.16d
Effet du cadmium sur la croissance des daphnies	$k(C_j) = \frac{k_0 \left(\frac{C_j}{E_k}\right)^{b_k}}{1 + \left(\frac{C_j}{E_k}\right)^{b_k}}$	3.16e

t représente le temps (jours) et p le pas de temps (0,1 jour). C_j représente la j ème concentration en cadmium testée.

$$R(t, C_j) \text{ représente le ratio entre les densités algales dans chacun des compartiments : } R(t, C_j) = \frac{N_1(t, C_j)}{N_2(t, C_j)} \cdot \frac{V_1(0)}{V_2}$$

Les liens stochastiques entre variables et données sont détaillés dans le Tableau 3.2. Les variables et les paramètres sont détaillés dans le Tableau 3.3.

b. Parties stochastiques

Les parties stochastiques du modèle sont décrites ci-dessous. Elles correspondent aux liens stochastiques entre les variables du modèle et les données (Tableau 3.2).

Nombre d'algues par b cher

Les parties stochastiques relatives aux nombres d'algues par b cher sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \log_{10}(Y_{dark_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \text{ avec } N_d = 0, D_s = 0 \text{ et } s = 0 \\ \log_{10}(Y_{mix_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \text{ avec } N_d = 0, D_s = 0 \text{ et } r_a(C_j) = 0 \\ \log_{10}(Y_1(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \text{ avec } N_d = 0 \text{ et } D_s = 0 \\ \log_{10}(Y_{F_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \text{ avec } D_s = 0 \\ \log_{10}(Y_{D_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \text{ avec } N_d = 0 \\ \log_{10}(Y_{FD_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1}) \\ \log_{10}(Y_2(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2}) \text{ avec } N_d = 0 \text{ et } D_s = 0 \\ \log_{10}(Y_{F_2}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2}) \text{ avec } D_s = 0 \\ \log_{10}(Y_{D_2}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2}) \text{ avec } N_d = 0 \\ \log_{10}(Y_{FD_2}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2}) \end{array} \right. \quad (3.18)$$

Nombre de lentilles par b cher

La partie stochastique relative aux nombres de frondes de lentilles par b cher est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \log_{10}(F(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d}) \text{ avec } N_1 = 0 \text{ et } D_s = 0 \\ \log_{10}(FY(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d}) \text{ avec } D_s = 0 \\ \log_{10}(FYD(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d}) \end{array} \right. \quad (3.19)$$

avec $F(t_i, C_j)$, $FY(t_i, C_j)$ et $FYD(t_i, C_j)$ les nombres observ s de frondes de lentilles par b cher dans la colonne d'eau au temps t_i et   la concentration C_j sans algues et sans daphnies, avec algues et sans daphnies, avec algues et avec daphnies, respectivement.

Nombre de daphnies vivantes par b cher

Le nombre observ  de daphnies vivantes au temps t_i et   la concentration en cadmium C_j dans le microcosme, not  $W(t_i, C_j)$, est d crit par un mod le stochastique binomial conditionnel consid rant que le nombre de daphnies vivantes   un temps donn  t_i d pend du nombre de daphnies encore vivantes au temps pr c dent t_{i-1} et de la probabilit  de survie entre t_{i-1} et t_i **Forfait-Dubuc et al. (2012)** :

$$W(t_i, C_j) \sim \mathcal{B} \left(\frac{S(t_i, C_j)}{S(t_{i-1}, C_j)}, W(t_{i-1}, C_j) \right) \quad (3.20)$$

Taille des daphnies

La taille observ e des daphnies au temps t_i et   la concentration en cadmium C_j , not e $Z(t_i, C_j)$, suit une loi normale :

$$Z(t_i, C_j) \sim \mathcal{N} (L(t_i, C_j), \sigma_L) \quad (3.21)$$

c. Repr sentation graphique

La repr sentation graphique du mod le complet avec variables, param tres, donn es et liens est pr sent e sur la Figure 3.6. Les donn es sont d taill es dans le Tableau 2.2, les liens d terministes et stochastiques dans les Tableaux 3.1 et 3.2 et les variables et param tres dans le Tableau 3.3.

Tableau 3.2 – Liens stochastiques entre variables et données

$\log_{10}(Y_1(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1})$ avec $N_d = 0$ et $D_s = 0$	3.18a
$\log_{10}(Y_2(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2})$ avec $N_d = 0$ et $D_s = 0$	3.18b
$\log_{10}(Y_{dark_1}(t_i, C_0)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_0)), \sigma_{N_1})$ avec $N_d = 0$, $D_s = 0$ et $r_{a_0} = 0$	3.18c
$\log_{10}(Y_{mix_1}(t_i, C_0)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_0)), \sigma_{N_1})$ avec $N_d = 0$, $D_s = 0$ et $s = 0$	3.18d
$\log_{10}(Y_{F_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1})$ avec $D_s = 0$	3.18e
$\log_{10}(Y_{F_2}(t_i, C_0)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_0)), \sigma_{N_2})$ avec $D_s = 0$	3.18f
$\log_{10}(Y_{D_1}(t_i, C_0)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_0)), \sigma_{N_1})$ avec $N_d = 0$	3.18g
$\log_{10}(Y_{D_2}(t_i, C_0)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_0)), \sigma_{N_2})$ avec $N_d = 0$	3.18h
$\log_{10}(Y_{FD_1}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i, C_j)), \sigma_{N_1})$	3.18i
$\log_{10}(Y_{FD_2}(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i, C_j)), \sigma_{N_2})$	3.18j
$\log_{10}(F(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d})$ avec $N_1 = 0$ et $D_s = 0$	3.19a
$\log_{10}(FY(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d})$ avec $D_s = 0$	3.19b
$\log_{10}(FY(t_i, C_j)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_d(t_i, C_j)), \sigma_{N_d})$	3.19c
$W(t_i, C_j) \sim \mathcal{B}(\frac{S(t_i, C_j)}{S(t_{i-1}, C_j)}, W(t_{i-1}, C_j))$	3.20
$Z(t_i, C_j) \sim \mathcal{N}(L(t_i, C_j), \sigma_L)$	3.21

L'index i correspond aux temps de mesure, $t(i)$ correspond au $i^{\text{ème}}$ temps de mesure.

C_j représente la j ème concentration en cadmium testée. \mathcal{N} symbolise la loi normale, \mathcal{B} la loi binomiale.

Tableau 3.3 – Variables et paramètres du modèle

Symbole	Définition	Unité
t	Temps	jour
C_j	j ième concentration en cadmium testée	$\mu\text{g.L}^{-1}$
$N_1(t, C_j)$	Nombre de cellules algales par béccher dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# cellules par béccher
$N_2(t, C_j)$	Nombre de cellules algales par béccher au fond du béccher au temps t et à la concentration C_j	# cellules par béccher
$V_1(0)$	Volume de la colonne d'eau à $t = 0$	mL
V_2	Volume d'eau occupé par les algues sédimentées	mL
r_{a_0}	Taux de croissance intrinsèque des algues dans le témoin	jour ⁻¹
E_{r_a}	Concentration en cadmium pour laquelle r_{a_0} est réduit de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$
b_{r_a}	Courbure de la fonction de stress sur r_a	-
$K_1(0)$	Capacité limite dans la colonne d'eau pour les algues à $t = 0$	# cellules par béccher
K_2	Capacité limite au fond du béccher pour les algues	# cellules par béccher
s	Taux de sédimentation algale	jour ⁻¹
$g_1(t, C_j)$	Nombre de cellules algales consommées par daphnies et par jour dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# cellules.jour ⁻¹ .daphnie ⁻¹
$g_2(t, C_j)$	Nombre de cellules algales consommées par daphnies et par jour au fond du béccher au temps t et à la concentration C_j	# cellules.jour ⁻¹ .daphnie ⁻¹
I_{lim}	<i>Incipient Limiting Level</i>	cell.mL ⁻¹
α	Coefficient de régression	mL.daphnie ⁻¹ .jour ⁻¹ .mm ^{-γ}
γ	Coefficient de régression	-
b	Proportion de cellules algales sur le sédiment disponibles pour le broutage	-
δ_2	Taux d'ingestion maximum	cell.daphnie ⁻¹ .jour ⁻¹ .mm ^{-γ}

Symbole	Définition	Unité
δ_3	Densité algale pour laquelle le taux d'ingestion maximum est divisé par deux	cell.mL ⁻¹
$D_1(t, C_j)$	Nombre de daphnies vivantes dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# daphnies
δ	Ratio de densités algales pour lequel la moitié des daphnies vivantes broutent dans la colonne d'eau	-
$S(t, C_j)$	Probabilité de survie d'une daphnie au temps t et à la concentration C_j	-
$D_s(t, C_j)$	Nombre de daphnies vivantes dans le bécher au temps t et à la concentration C_j	# daphnies
m_0	Taux de mortalité des daphnies dans le témoin	daphnie.jour ⁻¹
k_S	Pente de la fonction de stress sur la survie	1/($\mu\text{g.L}^{-1}$)jour ⁻¹
NEC	Concentration sans effet sur la survie des daphnies	$\mu\text{g.L}^{-1}$
$L(t, C_j)$	Taille des daphnies au temps t et à la concentration C_j	mm
$L(0)$	Taille à la naissance des daphnies	mm
L_∞	Taille maximale des daphnies	mm
k_0	Taux de croissance des daphnies dans le témoin	jour ⁻¹
E_k	Concentration en cadmium pour laquelle k_0 est réduit de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$
b_k	Courbure de la fonction de stress sur k	-
$N_d(t, C_j)$	Nombre de frondes de lentilles par bécher au temps t et à la concentration C_j	# frondes par bécher
r_{d_0}	Taux de croissance intrinsèque des lentilles dans le témoin	jour ⁻¹
E_{r_d}	Concentration en cadmium pour laquelle r_{d_0} est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$
b_{r_d}	Courbure de la fonction de stress sur r_d	-
K_d	Capacité limite pour les lentilles	# frondes par bécher

Symbole	Définition	Unité
η_0	Intensité de la compétition des lentilles sur les algues dans le témoin	# frondes par bécher ⁻¹ .jour ⁻¹
β_0	Intensité de la compétition des algues sur les lentilles dans le témoin	# cellules par bécher ⁻¹ .jour ⁻¹
E_η	Concentration en cadmium pour laquelle η_0 est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$
b_η	Courbure de la fonction de stress sur η	-
E_β	Concentration en cadmium pour laquelle β_0 est réduit de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$
b_β	Courbure de la fonction de stress sur β	-
σ_{N_1}	Variance du \log_{10} (nombre de cellules algales dans la colonne d'eau)	# cellules par bécher
σ_{N_2}	Variance du \log_{10} (nombre de cellules algales au fond du bécher)	# cellules par bécher
σ_L	Variance de la taille des daphnies	mm
σ_{N_d}	Variance du \log_{10} (nombre de frondes de lentilles par bécher)	# frondes par bécher

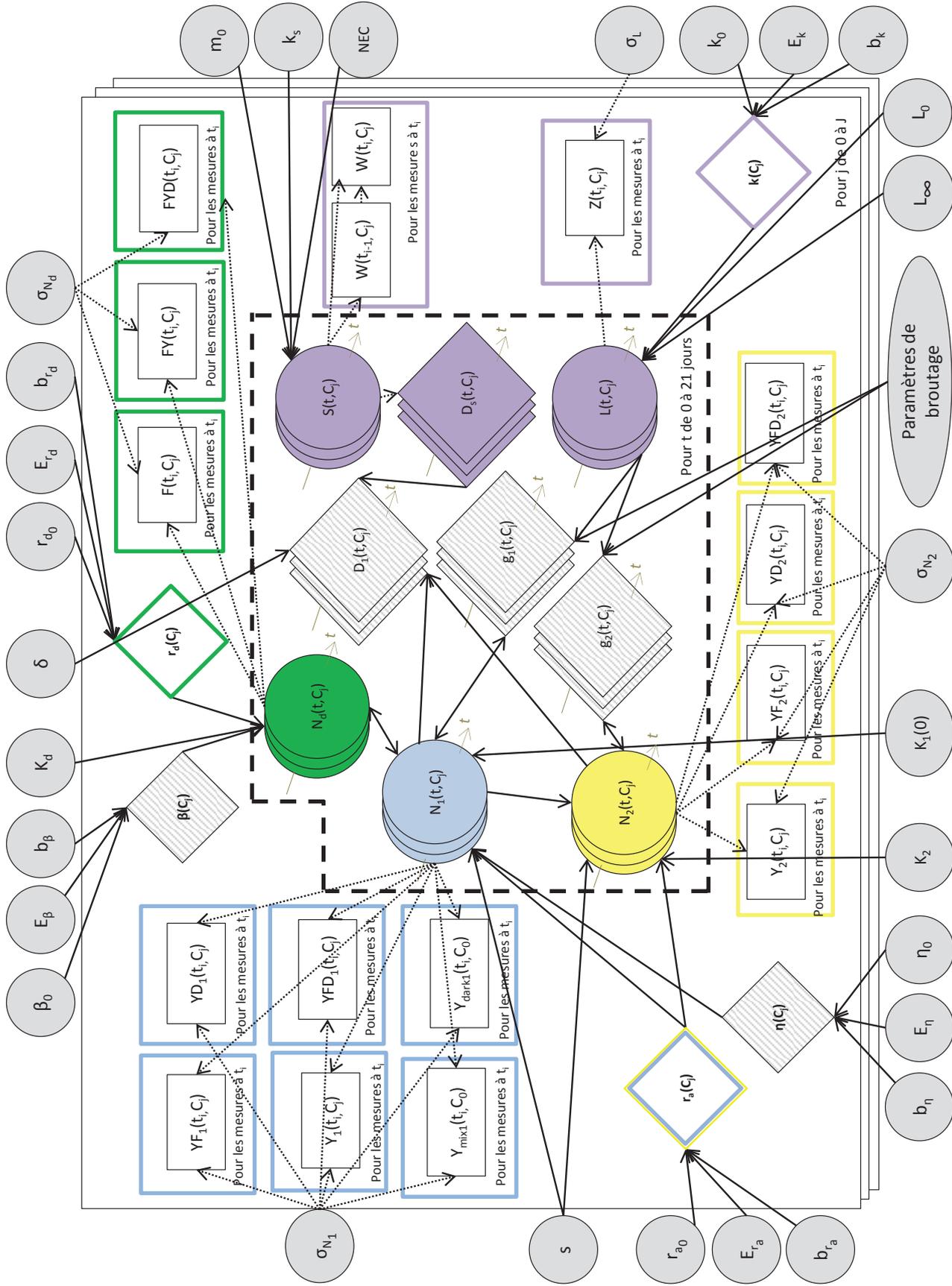


FIGURE 3.6 – Représentation graphique du modèle complet.

Les grands ronds colorés représentent les variables d'état, les rectangles les variables intermédiaires, les losanges les données et les petits ronds gris les paramètres. Le code couleur est le suivant : le bleu correspond aux algues dans la colonne d'eau, le jaune aux algues sur le fond du béccher, le vert aux lentilles et le violet aux daphnies. Les variables intermédiaires hachurées correspondent aux processus d'interactions (brotorage et compétition). Les flèches continues représentent les liens déterministes, les flèches pointillées les liens stochastiques. Les flèches fines grises symbolisent la dépendance au temps des variables. Le polygone pointillé indique la dépendance au temps des variables. Les feuillets indiquent la hiérarchie correspondant à la concentration en cadmium.

3.3 Estimation des paramètres

On a utilisé l'inférence bayésienne pour ajuster les modèles aux données expérimentales. Les liens statistiques qui relient les variables du modèle aux données expérimentales sont décrits ci-dessus (section 3.2.5.b).

3.3.1 Information *a priori*

Une des raisons qui motivent le choix de l'utilisation de l'inférence bayésienne est la possibilité d'incorporer de l'information *a priori* sur les paramètres du modèle. La signification biologique des paramètres du modèle permet d'exploiter cette propriété, puisqu'il existe généralement des connaissances sur les processus dans lesquels interviennent les paramètres. On utilise dans notre étude, suivant les paramètres, les résultats de certaines de nos expérimentations (dont les données ne sont pas utilisées pour l'inférence), l'information apportée par des expérimentations antérieures menées sur le microcosme ou des valeurs de la littérature. Des lois normales ou uniformes bornées ont généralement été utilisées. Lorsqu'aucune information *a priori* n'est disponible, une loi vague, uniforme généralement, est utilisée. Pour chaque processus d'inférence présenté dans les chapitres 4, 5, 6 et 7, l'information *a priori* et sa source sera détaillée pour chaque paramètre.

3.3.2 Simulations

Les simulations ont été réalisées avec le logiciel JAGS [Plummer \(2003\)](#) interfacé avec le logiciel R [Team \(2013\)](#) *via* le package [rjags Plummer \(2009\)](#), après discrétisation des EDO.

a. Discrétisation du modèle

Les EDO du modèle ne sont pas intégrables analytiquement et le logiciel choisi pour réaliser l'inférence n'inclut pas d'outil permettant de résoudre numériquement les équations différentielles. Les EDO ont donc été intégrées manuellement par discrétisation. La partie déterministe du modèle est discrétisée selon la méthode d'Euler,

avec un pas d'intégration égal à 0,1. La méthode d'Euler permet de résoudre par approximation des équations différentielles du premier ordre, pour une condition initiale donnée.

Pour choisir la valeur du pas d'intégration, nous avons comparé les résultats donnés par 1) l'intégration analytique d'une sous-partie intégrable des EDO, 2) l'intégration numérique utilisant la fonction *lsoda* du package R *deSolve* [Soetaert et al. \(2010\)](#) et 3) l'intégration par la méthode d'Euler avec trois pas de temps différents (1 ; 0,1 ; 0,01). La sous-partie intégrable des EDO choisie correspond à la croissance des algues en suspension, seules et en condition non contaminée :

$$\frac{dN_1(t, C_0)}{dt} = r_a(C_0) \times N_1(t, C_0) \times \left(1 - \frac{N_1(t, C_0)}{K_1(0) \exp(-s \times t)}\right) - s \times N_1(t, C_0) \quad (3.22)$$

qui donne, après intégration, l'expression suivante :

$$N_1(t, C_0) = \frac{\frac{N_1(0, C_0)}{K_1(0) \times N_1(0, C_0)} \times K_1(0) \times \exp(r_a(C_0) \times t) \times \exp(-s \times t)}{1 + \frac{N_1(0, C_0)}{K_1(0) \times N_1(0, C_0)} \times \exp(r_a(C_0) \times t)} \quad (3.23)$$

dont une approximation par la méthode d'Euler est :

$$N_1(t, C_0) = (N_1(t-1, C_0) + (r_a(C_0) \times N_1(t-1, C_0) \times (1 - \frac{N_1(t-1, C_0)}{K_1(0) \times \exp(-s \times (t-1))}) - s \times N_1(t-1, C_0)) \times p) \quad (3.24)$$

avec p le pas de temps en jour.

Les résultats sont présentés sur la Figure 3.7. L'intégration analytique, l'intégration avec *lsoda* et avec la méthode d'Euler à pas de temps 0,01 donnent des courbes parfaitement confondues et très proches de la courbe produite par l'intégration avec la méthode d'Euler au pas de temps 0,1. En revanche, l'intégration avec la méthode d'Euler au pas de temps 1 donne un résultat différent. Le temps de calcul avec la méthode d'Euler au pas de temps 0,01 est considérablement augmenté par rapport à celui de la méthode d'Euler au pas de temps 0,1. La valeur 0,1 pour le pas de temps constitue donc le meilleur compromis entre la précision de l'intégration et le temps de calcul nécessaire.

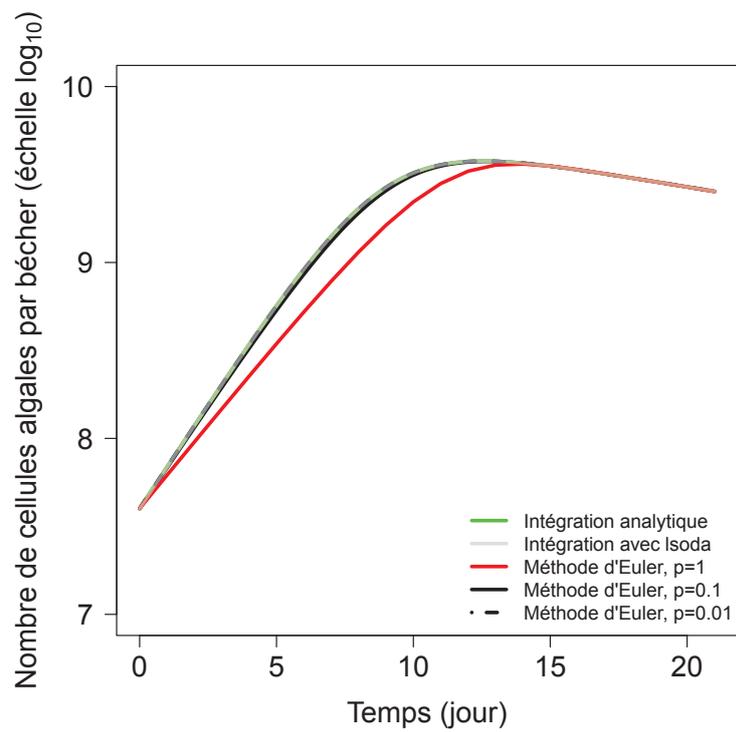


FIGURE 3.7 – Comparaison du modèle intégré analytiquement, avec le package Isoda, avec la méthode d’Euler pas de temps de 1, avec la méthode d’Euler pas de temps de 0,1, avec la méthode d’Euler pas de temps de 0,01.

b. MCMC avec rjags

Les distributions *a posteriori* des paramètres sont obtenues par simulation de chaînes de Markov Monte Carlo (MCMC). Pour cela, nous avons utilisé le logiciel JAGS [Plummer \(2009\)](#) interfacé avec le logiciel R [Team \(2013\)](#) via le package rjags [Plummer \(2009\)](#). Pour nous assurer de la convergence des chaînes, trois chaînes MCMC avec trois conditions initiales différentes ont été réalisées. La convergence est vérifiée à la fin du processus à l'aide du critère de Gelman et Rubin [Gelman and Rubin \(1992\)](#). Pour réduire les temps de calcul, les chaînes sont calculées en parallèle grâce aux packages R *declone* et *snow* [Sólymos \(2010\)](#); [Tierney et al. \(2013\)](#). Pour chaque modèle, une première phase de calcul constituée d'environ 10 000 itérations est utilisée pour déterminer le nombre d'itérations nécessaires pour la phase adaptative et pour la phase de calcul des chaînes proprement dites, grâce à la fonction *raftery* du package R *coda* [Plummer et al. \(2006\)](#). Le nombre d'itérations calculées se situe entre 20 000 et 400 000 selon le modèle considéré, ce qui correspond à des temps de calcul entre 1 minute et 5 jours, selon les modèles.

3.3.3 Analyses des prédictions des modèles

Différentes analyses sont effectuées dans le but de vérifier l'adéquation du modèle aux données, la structure des modèles ainsi que l'estimation des paramètres. Les analyses communes à tous les systèmes modélisés sont décrites ci-après, tandis que les analyses propres à chaque système sont brièvement présentées et détaillées dans le chapitre correspondant.

a. Comparaison des distributions *a priori* et *a posteriori*

Plusieurs modes de représentations ont été utilisés pour les distributions *a priori* et *a posteriori*. Le premier mode de représentation correspond aux densités *a priori* et *a posteriori* de chaque paramètre (Figure 3.8). Un second mode a été utilisé pour comparer les distributions *a posteriori* d'un même paramètre estimé à partir de différents jeux de données relativement à une estimation de référence : les distributions à comparer ont ainsi été divisées par la médiane de l'estimation de référence et les intervalles de

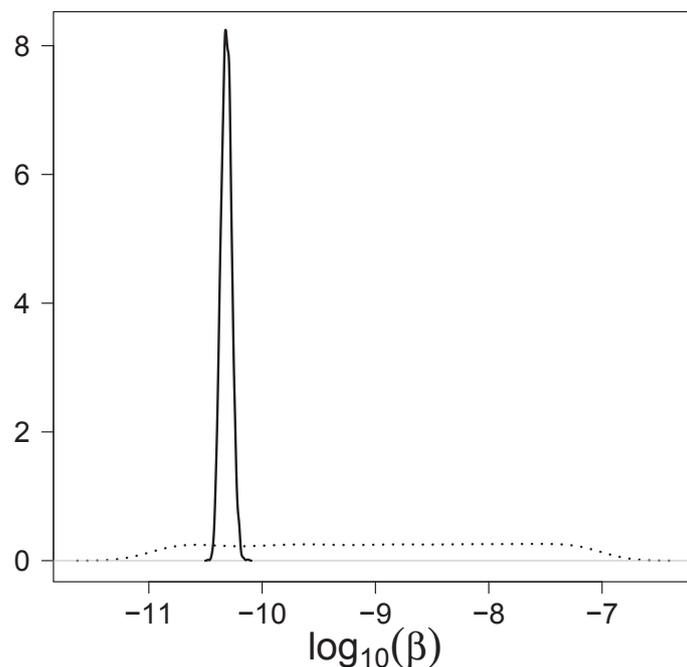


FIGURE 3.8 – Exemple de comparaison des densités *a priori* (courbe pointillée) et *a posteriori* (courbe continue), en densités.

crédibilité à 95% ont été représentés par des segments (Figure 3.9). Le troisième mode représente les distributions sous forme de boxplot, ce qui permet de bien mettre en évidence les quantiles (Figure 3.10). Les corrélations entre paramètres sont visualisées grâce à la projection de la distribution jointe *a posteriori* dans les plans des paramètres deux à deux (Figure 3.11).

b. *Posterior predictive check*

Pour valider les prédictions du modèle, nous utilisons le modèle simulé avec la médiane de la distribution *a posteriori* de chaque paramètre ainsi que les bandes de crédibilité à 95% des données prédites. La bande de crédibilité à 95% est obtenue en simulant des données prédites avec le modèle à chaque itération des MCMC (les paramètres variant selon leur distribution *a posteriori*) et le même modèle stochastique que celui utilisé pour les données observées. La Figure 3.12 est un exemple de ce type de représentation.

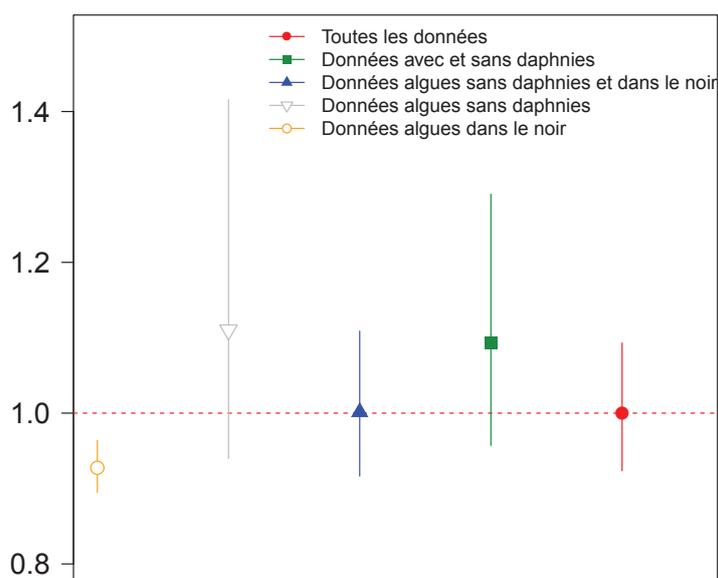


FIGURE 3.9 – Exemple de comparaison entre densités *a posteriori* via les densités *a posteriori* normalisées.

Pour un paramètre, les densités *a posteriori* obtenues avec chaque estimation sont normalisées par rapport à la médiane (droite pointillée rouge) de la distribution *a posteriori* de l'estimation de référence (ici, l'estimation avec toutes les données, en rouge). Les segments représentent les intervalles de crédibilité à 95%.

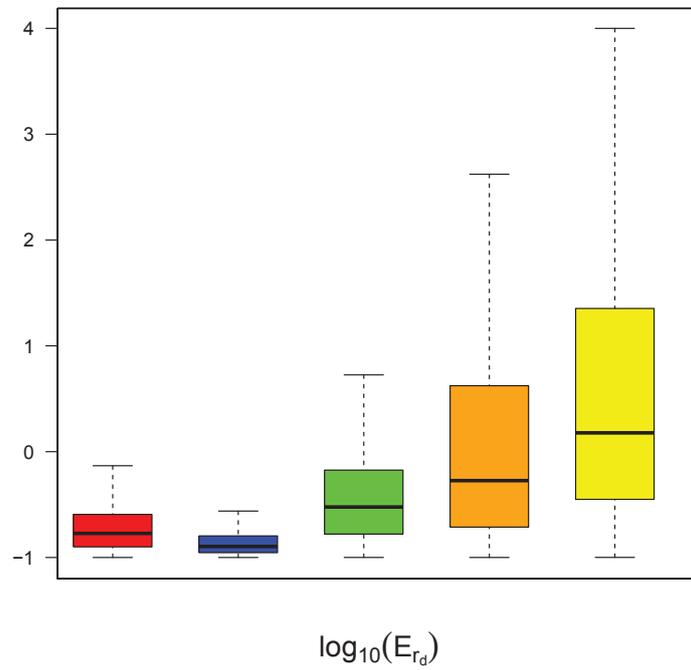


FIGURE 3.10 – Exemple de comparaison prior et posterior, en boxplot.

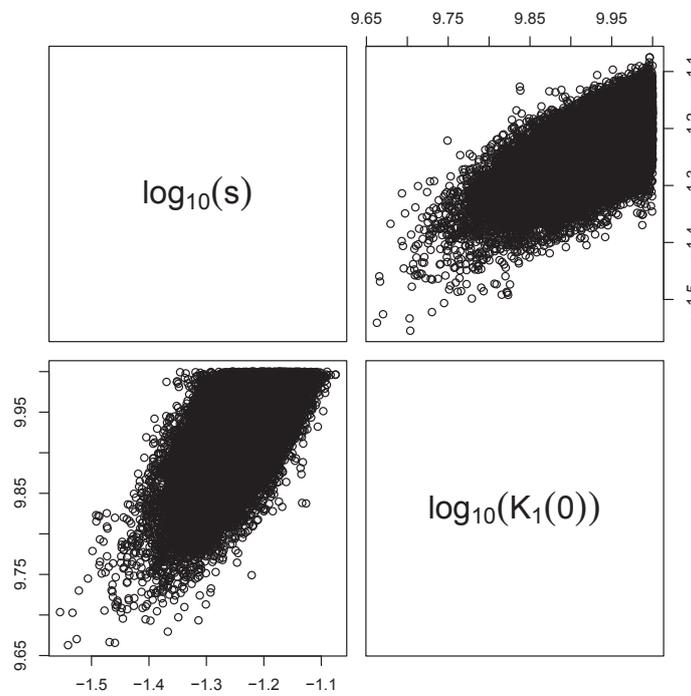


FIGURE 3.11 – Exemple de représentation des corrélations entre les paramètres deux à deux.

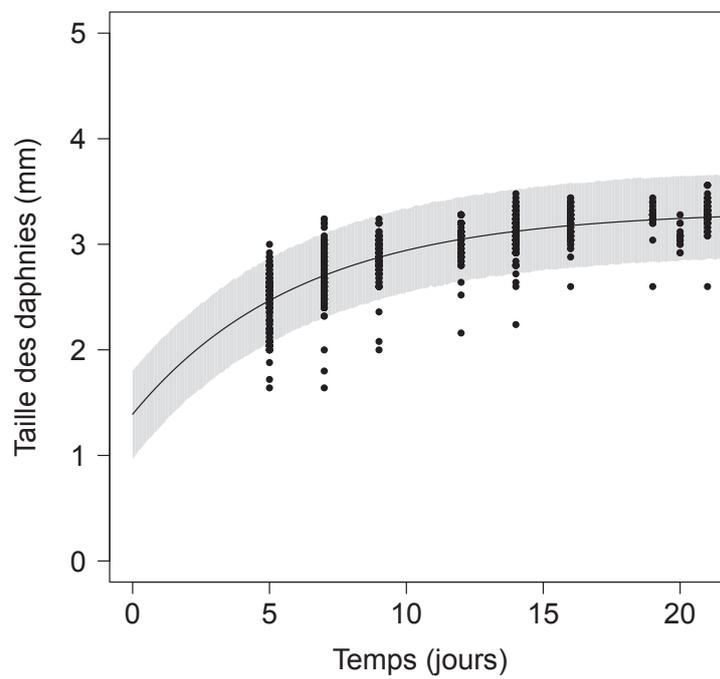


FIGURE 3.12 – Exemple de *posterior predictive check*.

Les points noirs représentent les données, la courbe noire est le modèle simulé avec la médiane des paramètres issue de la distribution *a posteriori* et la zone grise est la bande de crédibilité à 95%.

c. Autres analyses

Dans un premier temps, nous avons cherché à montrer l'intérêt d'estimer les paramètres en utilisant toutes les données disponibles simultanément. Pour cela, une vérification incluant plusieurs estimations des paramètres avec différents groupes de données a été réalisée. Elle est détaillée dans le chapitre 4. Dans ce même chapitre, nous avons évalué la capacité du modèle à décrire le fonctionnement du microcosme dans des conditions abiotiques (de sédiment) différentes.

Dans le but de tester des hypothèses sur les processus d'interaction et sur les effets du cadmium sur le fonctionnement du microcosme, nous avons comparé les DIC (*Deviance Information Criterion*) de différents modèles emboîtés traduisant ces hypothèses. La comparaison de ces différents modèles est détaillée dans le chapitre 5. Nous avons également effectué une vérification des fonctions de stress utilisées pour décrire l'effet du cadmium sur les différents paramètres ; ceci est également décrit dans le chapitre 5.

3.4 Conclusion

Le modèle complet, l'estimation des paramètres, ainsi que les analyses effectuées sur les résultats issus de l'inférence ont été présentés dans ce chapitre. Le modèle sera décomposé en sous-modèles dans le reste du manuscrit. Les détails techniques de l'estimation des paramètres seront également précisés et les analyses effectuées seront détaillées dans les chapitres correspondants.

Le chapitre 4 porte sur l'étude du microcosme partiel algues-daphnies en condition non contaminée, le modèle décrit dans ce chapitre ne comportera donc pas de lentilles et pas de cadmium. La fonction de broutage utilisée est la fonction à seuil. Le chapitre 5 porte sur l'étude du microcosme partiel algues-lentilles en condition contaminée, le modèle décrit dans ce chapitre ne comportera donc pas de daphnies. Enfin, le chapitre 6 porte sur l'étude du microcosme complet en condition contaminée, le modèle complet sera alors utilisé. Le broutage des daphnies y sera décrit par la fonction de Holling type II.

L'interaction algues-daphnies en l'absence de contaminant

Sommaire

4.1	Contexte	115
4.1.1	Expérimentations et données utilisées	116
4.1.2	Modèle et équations	118
4.1.3	Distributions <i>a priori</i>	118
4.1.4	Simulation	119
4.1.5	Analyses du modèle	119
4.1.6	Annexes	120
4.2	Article publié dans <i>Ecological Modelling</i>	120
4.3	Compléments sur le processus de broutage	139
4.3.1	Protocole des essais de l'expérimentation 12	139
4.3.2	Simulations	142
4.3.3	Résultats complémentaires et interprétation	142
4.4	Bilan	146
4.4.1	Principaux résultats	146
4.4.2	Limites	147

4.1 Contexte

La modélisation du fonctionnement du microcosme partiel constitué des algues et des daphnies, en conditions non contaminées, constitue la première étape de la thèse. Elle

a pour objectifs non seulement de valider la structure du modèle décrivant la dynamique du système algues-daphnies, mais aussi de valider la méthode d'estimation des paramètres, et notamment le fait d'estimer tous les paramètres simultanément en utilisant toutes les données disponibles.

Cette partie fait l'objet d'un article intitulé *Mechanistic modelling of daphnid-algae dynamics within a laboratory microcosm* publié dans *Ecological Modelling* [Lamonica et al. \(2016\)](#).

4.1.1 Expérimentations et données utilisées

Pour estimer les paramètres du modèle décrivant la dynamique du microcosme algues-daphnies et procéder aux vérifications de la méthode d'inférence et de la structure du modèle, des données issues de plusieurs types d'expérimentations ont été utilisées. Dans un premier temps, les données des expérimentations 1 et 10 (algues et daphnies, avec sable de Fontainebleau, algues à l'obscurité, Tableau 2.1) ont été utilisées pour estimer les paramètres du modèle. Pour effectuer notre première vérification sur la méthode d'estimation des paramètres, chaque jeu de données (voir Tableau 2.2, expérimentations 1 et 10) a été utilisé séparément pour estimer les paramètres relatifs à chaque processus. Dans un second temps, les données des expérimentations 2 d'une part et 3 d'autre part ont été utilisées pour vérifier la capacité du modèle à décrire les processus impliqués dans le fonctionnement du microcosme. Ces données sont schématisées sur la Figure 4.1, par un format simplifié de la représentation graphique du modèle présentée au chapitre 3 (3.6). Enfin, dans la discussion, nous avons utilisé les données de l'expérimentation 14 pour illustrer le fait qu'une modification du protocole peut améliorer l'estimation des paramètres relatifs à un processus particulier.

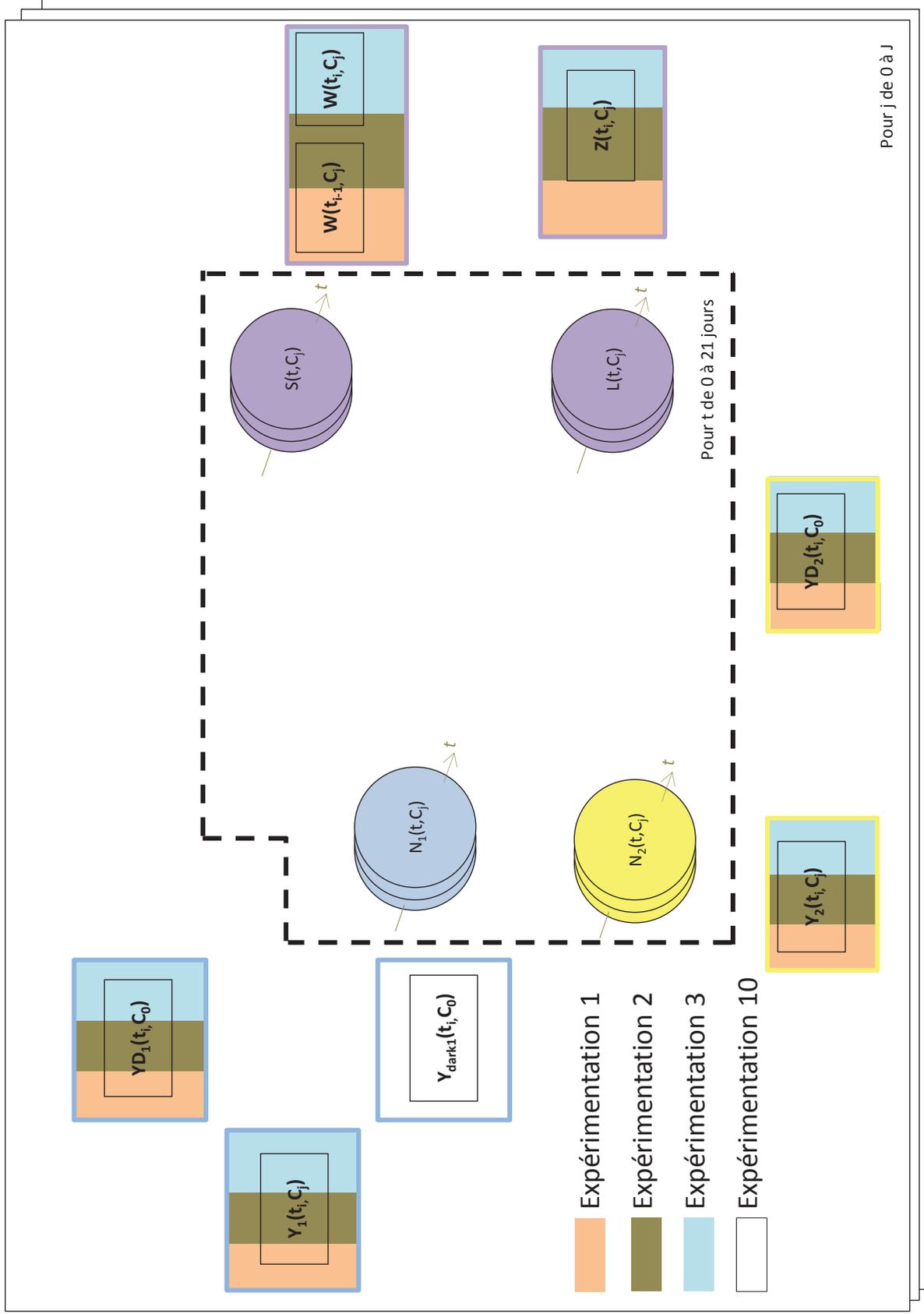


FIGURE 4.1 – Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres du modèle du chapitre 4 (hors discussions et compléments).

4.1.2 Modèle et équations

Les processus modélisés dans cette partie sont les suivants : la croissance et la sédimentation algale, la croissance et la survie des daphnies, ainsi que le broutage des algues par les daphnies.

Le modèle algues-daphnies se compose des Equations (3.5), (3.6), (3.7), (3.14), (3.9), (3.10), (3.11), (3.17a,b) et (3.16e) (Tableau 3.1) avec $j = 0$, c'est-à-dire $C_j = 0$, et $N_d(t, C_j) = 0$. Le processus de broutage dépend de la taille et du taux de filtration des daphnies et est décrit par la fonction affine par morceaux (Eqs(3.9), (3.10), (3.11)) du Tableau 3.1). La partie stochastique du modèle liant les variables aux données se compose des Equations (3.18a,b,c,g,h), (3.20) et (3.21) (Tableau 3.2) avec $j = 0$, c'est à dire $C_j = 0$. Le modèle compte au total 17 paramètres. Notons que dans l'article qui suit, h est utilisé pour désigner le taux de mortalité des daphnies, contrairement au chapitre 3 où elle était notée m_0 .

4.1.3 Distributions *a priori*

Grâce à l'utilisation de l'inférence bayésienne, on peut bénéficier des connaissances antérieures acquises sur les valeurs des paramètres, résumées par les distributions *a priori*. Dans ce chapitre, nous nous servons d'informations issues de diverses sources : littérature (notamment sur les processus relatifs aux daphnies) et expérimentations précédemment menées sur le microcosme (pour les processus relatifs aux algues). Des distributions non informatives ont également été utilisées pour les paramètres pour lesquels très peu d'information était disponible.

4.1.4 Simulation

Après discrétisation du modèle par la méthode d'Euler, avec un pas de temps égal à 0.1, trois chaînes MCMC ont été réalisées en parallèle. 370 000 itérations ont été nécessaires pour arriver à la convergence des chaînes pour le modèle.

4.1.5 Analyses du modèle

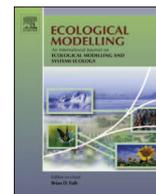
Plusieurs étapes de vérification de la méthode d'estimation des paramètres et de la structure du modèle ont été effectuées. La première étape, appelée vérification interne, est réalisée à l'aide du premier jeu de données (expérimentations 1 et 10, algues et daphnies, avec sable de Fontainebleau, algues à l'obscurité, Tableau 2.1). Elle consiste à utiliser les groupes de données correspondant à un ou des processus en particulier pour estimer les paramètres de ce ou ces processus. Par exemple, les paramètres relatifs à la croissance des daphnies sont estimés uniquement avec les données de croissance. Les distributions *a posteriori* obtenues sont ensuite comparées à celles issues de l'estimation utilisant toutes les données simultanément.

La seconde vérification exploite un jeu de données du même type (algues seules et algues et daphnies) mais dans des conditions abiotiques différentes : avec du sédiment d'Aiguebelette (expérimentation 2, Tableau 2.1) et sans sédiment (expérimentation 3, Tableau 2.1). Les paramètres du modèle sont ré-estimés avec ces deux jeux de données, dans le but de vérifier que la dynamique du microcosme partiel est correctement décrite, quelles que soient les conditions de sédiment.

4.1.6 Annexes

Dans l'article qui suit, il est fait référence à un *Appendix*. Ce matériel supplémentaire suit directement l'article.

4.2 Article publié dans *Ecological Modelling*



Mechanistic modelling of daphnid-algae dynamics within a laboratory microcosm



Dominique Lamonica^{a,b,*}, Ulysse Herbach^b, Frédéric Orias^a, Bernard Clément^{a,b}, Sandrine Charles^{b,c}, Christelle Lopes^b

^a Université de Lyon, F-69000, Lyon; Université Lyon 1; ENTPE, CNRS, UMR 5023, Laboratoire d'Ecologie des Hydrosystèmes Naturels et Anthropisés, 3, rue Maurice Audin, 69518 Vaulx-en-Velin, France

^b Université de Lyon, F-69000, Lyon; Université Lyon 1; CNRS, UMR 5558, Laboratoire de Biométrie et Biologie Evolutive, F-69622 Villeurbanne, France

^c Institut Universitaire de France, 103, bd Saint-Michel, 75005 Paris, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 13 February 2015

Received in revised form

14 September 2015

Accepted 22 September 2015

Keywords:

Bayesian inference

Species interactions

Model-guided experiments

Daphnia magna

Pseudokirchneriella subcapitata

ABSTRACT

Our study describes the functioning of a 2-L laboratory microcosm of two species, daphnids (*Daphnia magna*) and microalgae (*Pseudokirchneriella subcapitata*), in two abiotic phases (water column and sediment). We modelled the dynamics of both species and their interactions using a mechanistic model based on coupled ordinary differential equations. The main processes occurring in this two-species microcosm were thus formalised, including growth and settling of algae and growth, survival and grazing of daphnids. We estimated model parameters by Bayesian inference, using simultaneously all data from multiple experiments specifically conducted for this study. Two types of model verifications were performed: (1) internal verification to validate model structure and parameter estimation method using all data simultaneously; and (2) external verification to validate the ability of the model to be applied under new sediment conditions. For all parameters, we obtained biologically realistic values and reasonable uncertainties. The first verification step allowed us to confirm the modelled processes and the benefits of our parameter estimation method. The second one confirmed the ability of the model to describe microcosm functioning under different abiotic conditions. This innovative combination of mechanistic modelling and model-guided experiments revealed successful to understand the algae-daphnid microcosm functioning. This approach appears promising and can be applied to various issues in the ecological and ecotoxicological fields.

© 2015 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Interactions between species strongly influence ecosystem functioning and are therefore widely studied. For instance, species interactions can underlie processes such as spatial segregation (Costa et al., 2008) or exotic-native species dynamics (Söderbäck, 1994). Many studies have explored the impacts of several stress factors on trophic relationships: climatic variations (Sutherst et al., 2007), diet and temperature (Farjana et al., 2012), infection (Lin et al., 2014), chemical stress factor (Ham et al., 1995; Taylor et al., 1995; Turner et al., 2000) or habitat disturbance (Pathikonda et al., 2009).

Today, several experimental devices are commonly used to study ecosystem functioning and species interactions. Laboratory microcosms are both realistic and reproducible (Daam and Van den Brink, 2007). Moreover, many ecological and biochemical interactions and processes can occur within microcosms, that may involve multiple species and abiotic compartments, for example water and sediment. In addition, microcosms may be useful for predicting the states of real aquatic ecosystems (Benton et al., 2007; Cadotte et al., 2005). Microcosms allow to address various issues in aquatic ecology or ecotoxicology. For instance, several climate warming effects have been investigated (McKee et al., 2002). In ecotoxicology, microcosms have been used to examine the functional responses of communities to chemical stress factors (Bone et al., 2012; Brinke et al., 2010; Clément and Zaid, 2004; Clément et al., 2005; Faupel et al., 2012). However, the inherent complexity of microcosms, due to both biotic and abiotic interactions, leads to confounding factors that do not always ensure a good understanding of responses.

* Corresponding author at: Université Lyon 1, CNRS, UMR 5558, Laboratoire de Biométrie et Biologie Evolutive, F-69622 Villeurbanne, France. Tel.: +33 472448051; fax: +33 472431388.

E-mail address: dominique.lamonica@entpe.fr (D. Lamonica).

To address this issue, several mechanistic dynamic models have been developed to describe the ecological interactions and physiological processes occurring within such ecosystems. When the processes occurring in the functioning of a microcosm are modelled, parameters included in the model can be estimated using experimental data. Several types of data can be used (for example number of individuals, species biomass or reproduction data), each one representing different processes. The submodels related to each process can be parametrized independently of each other, if all types of data cannot be managed together. However this method may cause problems. First, potential correlations between parameters that are not estimated simultaneously are not taken into account. Secondly, information about a given process can be provided by data which are not directly related to this process. Thus, information may lack and parameter estimations can be less precise when all data are not used simultaneously for the statistical inference. Bayesian inference allows the use of multiple types of data, collected at different scales, as well as the estimation of all the parameters simultaneously (Billoir et al., 2008). This method provided benefits in several ecology fields. For instance, animal densities (Gopalaswamy et al., 2012) or parentage of individuals (Hadfield et al., 2006) were investigated with more precision by combining different types of behavioural, spatial and genetic data. In species abundance studies, Bayesian inference allowed handling the inherent difficulties of abundance data modelling in a hierarchical framework (Moore and Barlow, 2011).

We aim here at modelling in an integrated way the processes involved in a two-species microcosm using data from experiments specifically designed for this purpose. We also intend to verify the robustness of both our model and parameter estimation method that implies to use all data simultaneously within a Bayesian framework. For that, we used here a reduced version of an original microcosm (Clément and Cadier, 1998) with only two species interacting. We chose two model organisms, microalgae (*Pseudokirchneriella subcapitata*) and daphnids (*Daphnia magna*), linked by a trophic relationship.

We first describe how laboratory microcosm experiments of the daphnid-algae system were conducted. Then, we describe the development of the mechanistic model based on ordinary differential equations (ODE) using the Overview, Design concepts and Details (ODD) protocol (Grimm et al., 2010). We also present how parameters were estimated using Bayesian inference and the model verifications we performed using different datasets. Finally, we discuss our results and propose some model improvements and perspectives on the use of both model and method.

2. Experiments

2.1. Microcosm preparation

The microcosm design used in our study was based on that developed by Clément and Cadier (Clément and Cadier, 1998), which was first used in chronic toxicity bioassays and as a diagnostic of urban discharge (Cauzzi, 2007; Clément and Zaid, 2004; Clément et al., 2005, 2014; Triffault-Bouchet et al., 2005; Verrhiest et al., 2001). The originally developed microcosm was composed of five species. In this study, we reduced it to two species, algae and daphnids, but we preserved the original protocol.

Laboratory experiments were conducted at LEHNA (ENTPE, Vaulx-en-Velin, France). Microcosm preparation (with the exception of the sediment) was identical for all experiments. Two litres of synthetic water were poured into cylindrical glass beakers following the addition of the sediment (when present). Synthetic water (pH = 7.7, hardness = 60 mg CaCO₃/L, [P] = 0.1 mg/L, [N] = 1.31 mg/L) was prepared according to Clément et al. (2014). To achieve

microbiological stabilisation in the sediment, the microcosms were conditioned for seven days in the dark before the introduction of algae and daphnids (Verrhiest et al., 2002). At this point, the systems were gently aerated (using sterile glass Pasteur pipets connected to an aquarium air pump) to ensure an oxygen concentration above 80% of saturation. Microcosms were maintained at a constant temperature (20 ± 2 °C).

Four different experiments were conducted to collect data that would allow us to estimate our model parameters. Two additional experiments were subsequently conducted to verify our model. We describe each set of experiment below.

2.2. Experiments used for parameter estimation

In these experiments, artificial sediment (100 g of Fontainebleau sand, a simple silicate sand which is both a classic breeding sediment for benthic organisms and a classic control sediment for tests on contaminated sediment) was used.

2.2.1. Experiment 1: algae settling

Beakers were placed in the dark and wrapped in aluminium foil, so that algal growth was prevented and algal settling was enabled. At the start of the experiment (day 0), approximately $6 \cdot 10^9$ cells of *P. subcapitata* were introduced into each of 6 microcosms. The algal density in the water column was measured every two or three days for two weeks by sampling 30 mL from the beaker. After homogenisation of the 30 mL, only 1 mL was retained to measure algal density with a particle counter (Coulter®). The remaining 29 mL were returned to its original beaker. This first experiment allowed us to obtain the number of algal cells per beaker in the water column over time in each beaker (named afterwards Y_{dark_1} , index 1 refers to the water column compartment).

2.2.2. Experiments 2–4: algae-daphnid interaction

The following three experiments were conducted using a total of 17 beakers: 12 of them contained only algae and 9 of them contained algae and daphnids. The purpose of these experiments was to compare algal density with and without daphnids. Daphnids were supposed fed ad libitum with algal cells.

Beakers containing 2 L of synthetic water and artificial sediment were placed under periodic illumination (2200 ± 200 lux at the top of each beaker delivered by 36 W daylight tubes (Mazda), 16 h per day). At the start of the experiment (day 0), $4 \cdot 10^7$ cells of *P. subcapitata* were introduced into all beakers and 10 daphnids (*Daphnia magna* neonates aged 24 ± 12 h) were introduced into 9 of these beakers. All algae and daphnids had been bred in the laboratory following internal protocols (Clément et al., 2014). The duration of these experiments was 21 days. In all microcosms, algal density in the water column was measured every two to three days, as in the algae settling experiment. Total algal density was measured once a week: the water column of 6 beakers was thoroughly mixed and total algal density was measured using a hematocytometric (Thoma) cell, and therefore these measurements required sacrificing the corresponding beakers. Then, the algal density on the sediment was deduced by subtracting the algal density in the water column from the total algal density. The number of daphnids in each beaker was counted (after neonate removal if necessary) and their size measured (from the centre of the eye to the caudal base of spine) twice or thrice per week. Daphnids neonates were removed from the microcosm every two days, that is why reproduction was considered as an independent process in the microcosm functioning. From these experiments, we obtained four types of data: (i) the number of algal cells in the water column over time with (YD_1) and without daphnids (Y_1), (ii) the number of algal cells on the sediment over time with (YD_2) and without daphnids (Y_2), (iii) the number of surviving daphnids over time (W), and (iv) the

daphnid size over time (Z). Note that all along the manuscript index 1 refers to the water column compartment and index 2 refers to the sediment compartment.

2.3. Experiments used for external verification

To verify our inference method, we conducted two additional experiments under different abiotic conditions. We used the same experimental protocol described above for the daphnid–algae interaction experiments, but we altered the sediment conditions.

2.3.1. Experiment with Aiguebelette sediment

The first additional experiment was conducted in beakers with sediment composed of a mix of 90 g of Fontainebleau sand and 10 g of sediment from the Aiguebelette lake (Savoie, France), which is a mineral component added in order to enrich the grain size of the sediment (in a further perspective of introducing benthic species in the microcosm). Four beakers contained only algae and four beakers contained algae and daphnids. Beakers were sacrificed at the end of the experiment, and as a consequence algal cells on the sediment were counted only at day 21.

2.3.2. Experiment without sediment

The second additional experiment was conducted in beakers without sediment, because this abiotic condition simplifies both the system and the model, particularly within the perspective of modelling toxicant effects. For this experiment, beakers were not conditioned seven days in the dark before the introduction of algae and daphnids. Ten beakers contained only algae, and 10 beakers contained algae and daphnids.

3. Dynamic modelling

The description of the model follows the Overview, Design concepts and Details (ODD) protocol originally used for describing individual and agent-based models (Grimm et al., 2010), but adapted here for a dynamical model based on ODE. ODD protocol consists of seven elements. The first three elements provide an overview, the fourth element explains general concepts underlying the model's design and the remaining three elements provide further details.

3.1. Purpose

The model developed here describes the dynamics of daphnids and algae under the microcosm conditions described in Section 2. In particular, it aims at comparing the algal dynamics with and without daphnids in order to highlight the interactions between both species.

3.2. Entities, state variables, and scales

We model the algal population dynamics but we only model two daphnid life history traits (growth and survival) that are involved in the interaction between algae and daphnids. The model involves four state variables. The two first ones refer to the numbers of algal cells per beaker in the two compartments of the microcosm: the suspended algae in the water column (compartment 1), denoted by $N_1(t)$, and the settled algae on the sediment (compartment 2), denoted by $N_2(t)$. The two other state variables refer to the daphnids: the number of alive daphnids in the microcosm through survival rate $S(t)$ and the daphnid size, denoted by $L(t)$. The model is run for 21 days, corresponding to the duration of the experiments.

3.3. Process overview and scheduling

Seven processes are modelled with a continuous time scale, using ordinary differential equations. Two processes are related to intrinsic algal dynamics: settling of suspended algae and growth of both suspended and settled algae. Two processes are related to daphnid life history traits: survival and growth. The remaining three processes are related to algae–daphnid interaction: ingestion of algae by daphnids, water filtration by daphnids and location of daphnid for grazing. An overall graphical representation of the implemented model is given in Fig. 1.

3.4. Design concepts

3.4.1. Basic principles

The assumptions we make are based on the experimental design described in Section 2. We assume that algae are uniformly distributed in each compartment at each time step and that the settling speed of suspended algae is constant throughout the water column. Therefore, the water volume occupied by the suspended algae is supposed to decrease with the same speed as algal settling. We assume that daphnids are fed *ad libitum*, and thus that they are not impacted by algal density. Because algal cells sink into the highly porous sediment, we assume that daphnids have only access to the upper part of the settled algae. Because neonates are removed continuously from the beakers throughout the experiments (see Section 2.2.2), we assume that neonate grazing is negligible. Therefore, we consider daphnid reproduction as an independent process in the functioning of our microcosm and we thus ignore this process in the model.

Because the number of daphnids is low in our experiments (maximum 10 daphnids), we expect that daphnids cause only a negligible change in the nutrient enrichment of the water column and a negligible impact on the resuspension of algal cells. Therefore, we suppose that daphnids have no influence on the algal growth and settling processes. We also suppose that daphnids graze both in the entire water column and on the sediment.

3.4.2. Emergence

Algal dynamics emerges both from their intrinsic dynamics (growth and settling) and from the trophic relationship between algae and daphnids through the quantity of algal cells that are consumed by daphnids.

3.4.3. Sensing

In order to determine the number of daphnids grazing in each compartment over time, we assume that daphnids preferentially feed in the water column, as pelagic species (Siehoff et al., 2009). We also assume that daphnids move to the sediment when the ratio of algal density in compartment 1 over compartment 2 is below a threshold (Siehoff et al., 2009).

3.4.4. Interaction

Intraspecific competition between algal cells is taken into account in the logistic growth model. Algae and daphnids interact via a trophic relationship, namely grazing.

3.4.5. Stochasticity

We use stochasticity to describe variability on state variables, which sum up both uncertainties and variability sources within the processes. We suppose a normal distribution on the decimal logarithm of the number of algal cells per beaker in each compartment (in the water column and on the sediment) (Roger and Reynaud, 1978). We consider a conditional

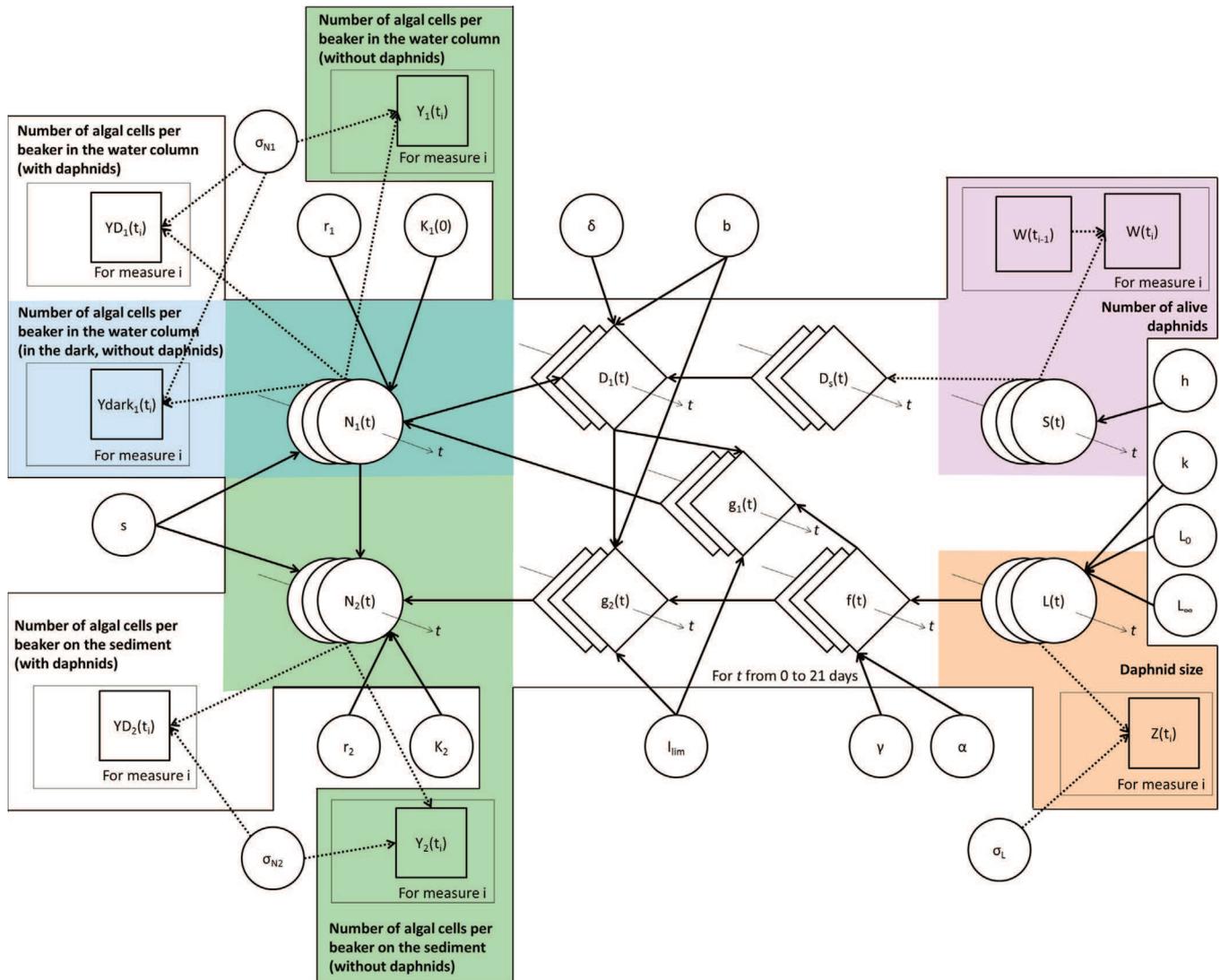


Fig. 1. Overall graphical representation of the model. Data are symbolised by rectangles, state variables by large circles, intermediate variables by diamond and parameters by little circles. Solid arrows indicate deterministic links, while dashed arrows indicate stochastic links. Thin arrows underline the time-dependencies due to the discretisation process. Data are detailed in the text (Section 2). All links are detailed in the text (Section 3). The blue area corresponds to the model with data in the dark only, the green area to the model with data without daphnids only, the purple area to the model with daphnid survival data only, the orange area to the model with daphnid growth data only. The overall model based on all data is framed by the solid black lines. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of the article.)

binomial distribution for the number of daphnid survivors (Forfait-Dubuc et al., 2012) and a normal distribution for the daphnid size.

3.5. Initialisation

The initial values of the state variables for the number of algal cells per beaker in the water column and on the sediment are 4×10^7 and 0, respectively, because algae are inoculated in the water column only. The initial number of daphnids is 10, the initial survival rate is assumed to be equal to 1 and the initial daphnid size is drawn from a normal distribution (see Section 4.1).

3.6. Input data

The model does not use input data to represent time-varying environmental processes. Laboratory conditions are controlled and supposed to be constant over time.

3.7. Submodels

All information on parameters and variables involved in the model are gathered together in Table 1. Details about parameter estimation are given in Section 4.

The deterministic part of algal dynamics in both compartments over time t (in days) is described with two coupled ODE. The deterministic part of daphnid survival and size are described with two other ODE that are presented in their integrated form.

3.7.1. Algal process

Settling. V_1 (in mL) stands for the water volume occupied by the suspended algae (named “water column” afterwards). As the algae settle, V_1 decreases over time. The water volume occupied by the settled algae is denoted by V_2 (in mL). We set V_2 as equal to the volume of the one-centimetre section of the beaker above the sediment. The settling process is modelled by adding to (respectively subtracting from) the number of settled algae (respectively suspended algae) per beaker, the number of algal cells per beaker

Table 1
Variables and parameters of the model.

Symbol	Definition	Unit	Prior distribution ^a or value	Sources ^b	2.5, 50, 97.5 % posterior quantiles
$N_1(t)$	Number of algal cells per beaker in the water column at time t	# of cells per beaker			
$N_2(t)$	Number of algal cells per beaker on the sediment at time t	# of cells per beaker			
$V_1(0)$	Volume of the water column at $t=0$	mL	2000		
V_2	Volume of water occupied by settled algae	mL	100		
r_1	Intrinsic algal growth rate in the water column	day ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	[1,2,3,4,5]	0.59 0.62 0.65
r_2	Intrinsic algal growth rate on the sediment	day ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	[1,2,3,4,5]	0.72 0.80 0.90
$K_1(0)$	Carrying capacity in the water column at $t=0$	# of cells per beaker	$\log_{10}(K_1(0))\sim\mathcal{U}(8,11)$	[6]	9.30 9.42 9.53
K_2	Carrying capacity on the sediment	# of cells per beaker	$\log_{10}(K_2)\sim\mathcal{U}(8,11)$	[6]	9.36 9.43 9.49
s	Settling rate	day ⁻¹	$\log_{10}(s)\sim\mathcal{U}(-2,0)$	[7]	-1.24 -1.13 -1.05
I_{lim}	Incipient limiting level	cell mL ⁻¹	$\log_{10}(I_{lim})\sim\mathcal{U}(4,7)$	[8,9,10,11]	5.32 5.99 6.95
α	Regression coefficient	mL daphnid ⁻¹ day ⁻¹ mm ^{-γ}	$\mathcal{N}(5.2,1)$	[8,12]	3.94 5.63 7.31
γ	Regression coefficient	-	$\mathcal{N}(2.7,0.50)$	[8,12]	2.91 3.27 3.75
$D_1(t)$	Number of alive daphnids in the water column at time t	# of daphnids			
δ	Ratio of algal densities for which half of living daphnids graze in the water column	-	$\log_{10}(\delta)\sim\mathcal{U}(-3,3)$	Vague	-2.33 -0.95 -0.43
b	Proportion of algal cells on the sediment available for grazing	-	$\log_{10}(b)\sim\mathcal{U}(-3,0)$	Vague	-2.00 -1.65 -0.31
$S(t)$	Daphnid survival rate at time t	-			
$D_s(t)$	Number of alive daphnids at time t	# of daphnids			
h	Daphnid natural instantaneous mortality rate	day ⁻¹	$\log_{10}(h)\sim\mathcal{U}(-4,0)$	Vague	-2.18 -1.92 -1.71
$L(t)$	Daphnid size at time t	mm			
$L(0)$	Daphnid size at birth	mm	$\mathcal{N}(1,0.10)$	[13]	0.88 1.05 1.21
L_∞	Daphnid maximum size	mm	$\mathcal{N}(4.8,0.59)$	[14]	3.28 3.32 3.36
k	Daphnid growth rate	day ⁻¹	$\mathcal{N}(0.11,0.030)$	[14]	0.15 0.16 0.18
σ_{N_1}	Standard deviation of \log_{10} -number of algal cells per beaker in the water column	# of cells per beaker	$\mathcal{U}(0,5)$	Vague	0.12 0.13 0.14
σ_{N_2}	Standard deviation of \log_{10} -number of algal cells per beaker on the sediment	# of cells per beaker	$\mathcal{U}(0,5)$	Vague	0.084 0.11 0.15
σ_L	Standard deviation of daphnid size	mm	$\mathcal{U}(0,2)$	Vague	0.19 0.20 0.21

^a Prior distribution: \mathcal{N} stands for the normal law, \mathcal{U} stands for the uniform law.

^b Sources: [1] Bossuyt and Jansen (2004), [2] Chen and Lin (2006), [3] Clément and Zaid (2004), [4] De Schampelaere et al. (2004), [5] Moreira-Santos et al. (2004), [6] Delhaye (2012), [7] Norberg and DeAngelis (1997), [8] DeMott (1982), [9] Grasman et al. (2009), [10] Preuss et al. (2009), [11] Villarreal et al. (1999), [12] Egloff and Palmer (1971), [13] Biron et al. (2012), [14] Billoir et al. (2008).

which pass from compartment 1 (water volume occupied by the suspended algae) to compartment 2 (sediment). The number of algal cells per beaker that pass to compartment 2 equals the number of algal cells per beaker that leave compartment 1 at each time step:

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -\frac{dN_2(t)}{dt} \quad (1)$$

We model the decreasing number of algal cells per beaker in the water column as an exponential decay over time:

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -sN_1(t) \quad (2)$$

where s is the settling rate (day⁻¹).

Growth. To account for the space and nutrient limitations in the microcosm and, thus, to consider potential intraspecific competition, algal growth is described with a logistic model (Thornton et al.,

2010; Vanoverbeke, 2008; Yang et al., 2011) with two parameters for each compartment:

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t)}{dt} = r_1 N_1(t) \left(1 - \frac{N_1(t)}{K_1(t)}\right) \\ \frac{dN_2(t)}{dt} = r_2 N_2(t) \left(1 - \frac{N_2(t)}{K_2}\right) \end{cases} \quad (3)$$

where r_1 and r_2 (day⁻¹) are the intrinsic growth rates, $K_1(t)$ and K_2 (number of algal cells per beaker) the carrying capacities for suspended algae and settled algae, respectively.

The carrying capacity is defined as the maximum number of algal cells per beaker in each compartment and depends on space and available nutrients. We therefore assume that, at each time step, carrying capacities are proportional to the volumes of each compartment, such that K_1 is proportional to volume V_1 and decreases over time at the rate of algal settling:

$$\frac{dK_1(t)}{dt} = -sK_1(t) \Rightarrow K_1(t) = K_1(0) \exp(-st) \quad (4)$$

where $K_1(0)$ (number of algal cells per beaker) is the carrying capacity of the whole water column at $t=0$. As V_2 is time-independent, K_2 is constant over time.

3.7.2. Daphnid processes

Survival. Survival rate at time t , $S(t)$, is described by an exponential decay with an instantaneous mortality rate, h (day^{-1}), which is assumed to be time-independent (Forfait-Dubuc et al., 2012):

$$S(t) = \exp(-ht) \quad (5)$$

We consider a conditional binomial stochastic model for $D_s(t)$, the number of alive daphnids at time t in the system (Forfait-Dubuc et al., 2012):

$$D_s(t) \sim \mathcal{B}\left(\frac{S(t)}{S(t-1)}, D_s(t-1)\right) \quad (6)$$

Growth. Daphnid growth is described using a Von Bertalanffy growth model (Von Bertalanffy, 1938):

$$L(t) = L_\infty - (L_\infty - L_0)\exp(-kt) \quad (7)$$

with L_∞ and L_0 (mm) the maximum size and the size at birth, respectively. Parameter k (day^{-1}) is the growth rate. In addition, the daphnid size was supposed to follow a normal distribution of mean $L(t)$ and variance σ_L .

3.7.3. Interaction processes

Ingestion. The ingestion rate of a daphnid, i.e., the number of cells per beaker each daphnid consumes per day (denoted as $g_1(t)$ in the water column and $g_2(t)$ on the sediment) is modelled as a piecewise linear function (Burns, 1969; DeMott, 1982; Egloff and Palmer, 1971) of filtration rate $f(t)$ and algal density in each compartment (Lampert, 1986; Rigler, 1961):

$$g_1(t) = \begin{cases} f(t) \times \frac{N_1(t)}{V_1(0)} & \text{if } 0 < \frac{N_1(t)}{V_1(0)} \leq I_{\text{lim}} \\ f(t) \times I & \text{if } \frac{N_1(t)}{V_1(0)} > I_{\text{lim}} \end{cases} \quad (8)$$

and

$$g_2(t) = \begin{cases} f(t) \times \frac{bN_2(t)}{V_2} & \text{if } 0 < \frac{bN_2(t)}{V_2} \leq I_{\text{lim}} \\ f(t) \times I & \text{if } \frac{bN_2(t)}{V_2} > I_{\text{lim}} \end{cases} \quad (9)$$

where I_{lim} (cell ml^{-1}) is the incipient limiting level, i.e. the algal density above which a daphnid cannot ingest more. Parameter b (dimensionless) stands for the proportion of settled algae that are available for daphnids.

Filtration. Filtration rate $f(t)$ is dependent on daphnid size (Burns, 1969; DeMott, 1982; Egloff and Palmer, 1971). We formalise it as a power function of size:

$$f(t) = \alpha L(t)^\gamma \quad (10)$$

where α ($\text{mL daphnid}^{-1} \text{day}^{-1} \text{mm}^{-\gamma}$) and γ (dimensionless) are regression coefficients.

Grazing location. The number of daphnids grazing in the water column at time t , $D_1(t)$, is modelled with respect to the ratio $R(t)$ of algal density in compartment 1 over compartment 2 and the number of alive daphnids per beaker $D_s(t)$:

$$D_1(t) = \frac{D_s(t)R(t)}{\delta + R(t)} \quad (11)$$

where δ (dimensionless) is the ratio of algal densities for which half of living daphnids graze in the water column. $D_s(t)$ is the number of living daphnids at time t .

Finally, the deterministic part of the model describing the microcosm functioning with daphnids is expressed as follows:

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t)}{dt} = r_1 N_1(t) \left(1 - \frac{N_1(t)}{K_1(0)\exp(-st)}\right) - sN_1(t) - D_1(t)g_1(t) \\ \frac{dN_2(t)}{dt} = r_2 N_2(t) \left(1 - \frac{N_2(t)}{K_2}\right) + sN_1(t) - (D_s(t) - D_1(t))g_2(t) \\ S(t) = \exp(-ht) \\ L(t) = L_\infty - (L_\infty - L_0)\exp(-kt) \end{cases} \quad (12)$$

The same model can be applied when daphnids are not present, by setting $D_s(t)=0$ and thus $D_1(t)=0$. The two last equations must also be removed. In other words, in the model without daphnids, the last terms of the equations (which describe daphnid grazing) disappear and only algal growth and settling are considered (see Eq. (3)). In the dark (where algae are supposed not to grow), intrinsic growth rates r_1 and r_2 are assumed to be null and the model writes according to Eq. (2).

At each time step, the number of algal cells per beaker in the water column follows a normal distribution of mean $N_1(t)$ and variance σ_{N_1} . The number of algal cells per beaker on the sediment follows a normal distribution of mean $N_2(t)$ and variance σ_{N_2} .

4. Statistical inference

We used Bayesian inference to simultaneously fit the model to all our experimental data obtained from experiments 1–4 (see Section 2).

4.1. Statistical links between variables and data

We used the same statistical links as described in ODD protocol (Section 3). **Daphnid survival data.** We considered a conditional binomial distribution for the observed number of survivors $W(t_i)$ at observed time point t_i (Forfait-Dubuc et al., 2012):

$$W(t_i) \sim \mathcal{B}\left(\frac{S(t_i)}{S(t_i-1)}, W(t_{i-1})\right) \quad (13)$$

Daphnid size data. We considered a normal distribution for the observed size $Z(t_i)$ at observed time point t_i :

$$Z(t_i) \sim \mathcal{N}(L(t_i), \sigma_L) \quad (14)$$

with $L(t_i)$ (mm) the predicted size (Eq. (7)) at observed time point t_i and σ_L (mm) the standard deviation of daphnid size.

Number of algal cells per beaker data. We considered a normal distribution on the decimal logarithm of the observed number of algal cells per beaker in each compartment (in the water column and on the sediment) (Roger and Reynaud, 1978):

$$\begin{cases} \log_{10}(Y_{\text{dark}1}(t_i)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i)), \sigma_{N_1}) \\ \quad \text{with } D_s = 0, D_1 = 0 \text{ and } r_1 = 0 \\ \log_{10}(Y_1(t_i)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i)), \sigma_{N_1}) \text{ with } D_s = 0 \text{ and } D_1 = 0 \\ \log_{10}(YD_1(t_i)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_1(t_i)), \sigma_{N_1}) \\ \log_{10}(Y_2(t_i)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i)), \sigma_{N_2}) \text{ with } D_s = 0 \text{ and } D_1 = 0 \\ \log_{10}(YD_2(t_i)) \sim \mathcal{N}(\log_{10}(N_2(t_i)), \sigma_{N_2}) \end{cases} \quad (15)$$

where $Y_{\text{dark}1}(t_i)$, $Y_1(t_i)$ and $YD_1(t_i)$ are the observed number of algal cells per beaker in the water column at observed time point t_i in the dark, without and with daphnids, respectively. $Y_2(t_i)$ and $YD_2(t_i)$ are the observed number of algal cells per beaker on the sediment at observed time point t_i without and with daphnids, respectively.

4.2. Parameter prior distributions

We defined prior distributions which summarised all available information for each parameter (Table 1). Some of the prior distributions described the decimal logarithm of the given parameter because of the parameters' large range of possible values (for instance δ or I (DeMott, 1982; Kersting and van der Leeuw, 1976; Pau et al., 2013; Villarroel et al., 1999)) or its extreme (*i.e.*, large ($K_1(0), K_2$) or small (s)) order of magnitude. Some of the prior distributions ($K_1(0), K_2, s$) were defined based on previous experiments that were conducted using the same protocol described here (Billoir et al., 2011, 2012; Delhaye, 2012), while others were based on values from the literature (Billoir et al., 2008; Biron et al., 2012). For several parameters we had very little information, their prior distributions were thus vague.

4.3. Computation

The first step consisted of numerically integrating our ODE model. For that purpose, we discretised the deterministic part of the model according to the Euler method with a time step equal to 0.1. This time step was considered as optimal after comparing the results of a numerical integration (using the *deSolve* R package (Soetaert et al., 2010)) of the ODEs, the results of the analytical integration of the integrable part of the ODE and the results given by the Euler method with different time steps (1, 0.1, 0.01). The chosen value (0.1) was the best compromise between integration accuracy and calculation speed. Based on this discretized version of our model, the second step consisted of performing Markov Chain Monte Carlo (MCMC) computations ensuring convergence to get posterior distributions of the parameters. Computations were performed using the *rjags* R package (Plummer, 2009; R Core Team, 2013).

Three independent MCMC chains with three different initial conditions were run in parallel using the *snow* and *declone* R packages (Tierney et al., 2013; Sólymos, 2010). A total of 20,000 iterations were performed as a burn-in phase and inference was based on 350,000 additional iterations for each chain. To check the convergence of the estimation process, we used the Gelman and Rubin (Gelman and Rubin, 1992) convergence diagnostic.

5. Model analysis

5.1. Posterior predictive check

To check posterior predictions of the model, we used the median of the posterior distribution for each parameter and the 95% credibility band of the predicted data taking into account parameter uncertainties and stochasticity. To obtain the 95% credibility band, the predicted data were simulated with the model at each MCMC iteration (the parameters varied according to their posterior distributions) and the same stochastic model as considered for observed data. For each experiment, we present the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution superimposed to the data, as well as the 95% credibility band of the predicted data.

5.2. Internal verification

We verified our parameter estimation approach that took into account all data simultaneously. For that purpose, we re-estimated the same parameters but using only parts of the data: with algae data in the dark only (blue area in Fig. 1), with algae data without daphnids only (green area in Fig. 1), with algae data in the dark and with daphnids, with algae data without and with daphnids, with daphnid size data only (orange area in Fig. 1), with daphnid

survival data only (purple area in Fig. 1). Then, we compared the results between these parameter estimations with those previously obtained using the entire dataset.

For each process, we verified that the parameter estimated exclusively using the data related to the given process produced comparable results as when using all of the data. For example, we compared mortality rate, h , estimates obtained using only survival data to the ones obtained with all data and with other partial datasets involving this process. We exclusively used data from the experiment performed in the dark to estimate the settling rate, s , then we compared the estimate to the ones obtained with all data and with other partial datasets involving this process. We exclusively used daphnid growth data to estimate the parameters relating to daphnid growth (length at birth, $L(0)$, maximum size, L_∞ and growth rate, k), then we compared the estimate to the ones obtained with all data and with other partial datasets involving this process. These tests aimed to verify that accounting for all the data simultaneously did not bias, even improve, parameter estimation.

For each parameter and each different set of data used to estimate the parameter, we divided the posterior distribution by the median of the posterior distribution obtained with all data. Thus, we present the results as the median and the 95% quantile of this normalised posterior distribution.

5.3. External verification

We verified our model's ability to describe microcosm functioning under different abiotic conditions. The objective of this step was to verify whether the structure of the model, *i.e.* the identified processes modelled with the chosen equations, allowed to describe the global functioning of the microcosm under different sediment conditions. Such an approach should allow us to verify our model's flexibility when applied to other datasets. According to the inference process described above, we also estimated model parameters from data collected from the experiments with different sediment conditions (*i.e.*, with Aiguebelette sediment and without sediment) (see Section 2.3). Then, for each condition, we compared the estimation results to the estimates obtained using all data of experiments with Fontainebleau sand under normal light conditions.

6. Results

For each estimation run, the MCMC algorithm consistently converged according to Gelman and Rubin convergence diagnostics.

6.1. Parameter estimates

Marginal posterior distributions of parameters estimated with all Fontainebleau sand data simultaneously are shown in Fig. 2 (red dots and segments) and Annex A, Fig. A.1. The 2.5%, 50% and 97.5% quantiles of the parameters are summarised in Table 1. We obtained narrow posterior distributions for all parameters, with the exception of grazing parameters (I_{lim} , b and δ). The narrowness of the posterior distributions suggests that sufficient information was available from our data to accurately estimate model parameters.

6.1.1. Algae settling

Under dark conditions, our exponential decay model appropriately described the observed dynamics of suspended algae. The 95% credibility band around the median prediction covered 100% of the observed data (Fig. 3, grey band), thus indicating a slight overestimation of uncertainty. Although the prior distribution of the settling rate was vague, our inference generated a very

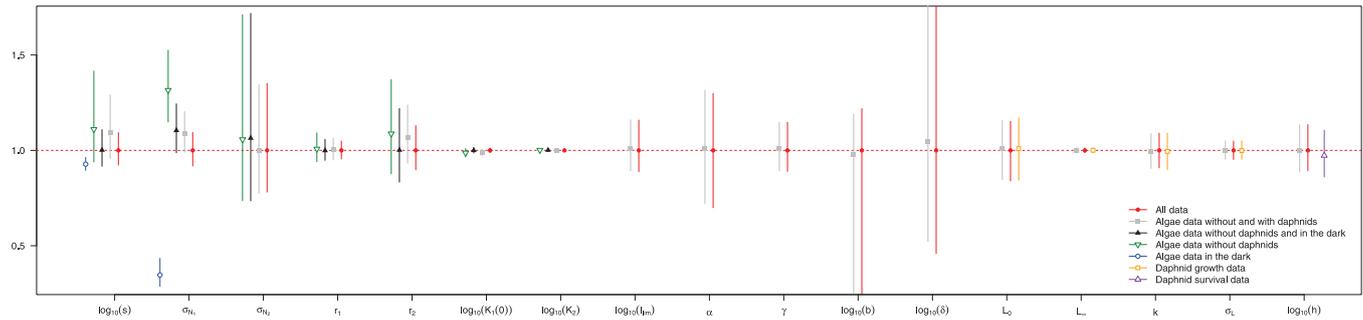


Fig. 2. Comparison between prior distributions and different posterior distributions, corresponding to the different partial datasets. For each parameter, the symbol and the segment represent the median and the 95% quantile of the posterior distribution divided by the median of the posterior distribution obtained from all data. Different colours and symbols correspond to the different partial datasets we considered. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of the article.)

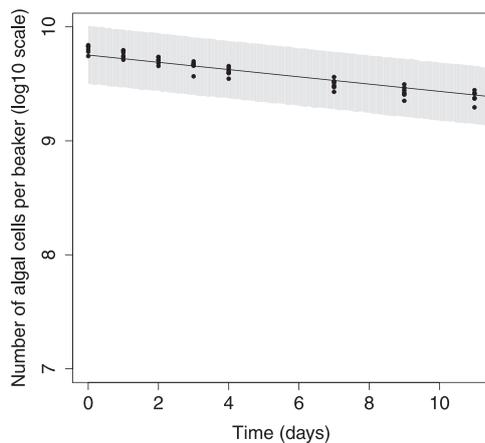


Fig. 3. Suspended algae dynamics in the dark with Fontainebleau sand. The black circles represent the observed number of algal cells per beaker in the water column, the plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The grey area is the 95% credibility band of the predicted data.

narrow posterior distribution (Table 1 and Fig. 2), giving an accurate estimate of the parameter $\log_{10}(s)$.

6.1.2. Algae–daphnid interaction

Observed and predicted algal dynamics under normal light conditions are presented in Fig. 4 and daphnid survival and growth in Fig. 5. All the data were appropriately described by the model.

Algae dynamics. Without daphnids (Fig. 4a), the number of algal cells per beaker in the water column increased during the first ten days and then decreased. The increase suggests that growth was greater than settling at the start of the experiment, while the decrease suggests that growth declined and settling continued. The number of algal cells per beaker on the sediment increased and then reached a plateau. With daphnids (Fig. 4b), similar trends were observed. However, when daphnids are present, the overall number of algal cells per beaker in the water column was lower, whereas the number of algal cells per beaker on the sediment did not differ. The difference in the numbers of algal cells per beaker in the water column was a consequence of daphnid presence and their consumption of algal cells.

A total of 94 out of 101 data points (93%) for algae in the water column without daphnids, 15 out of 15 data points (100%) for algae on the sediment without daphnids, 108 out of 113 data points (96%) for algae in the water column with daphnids and 16 out of 17 data points (94%) for algae on the sediment with daphnids were within the 95% credibility band of the predicted data.

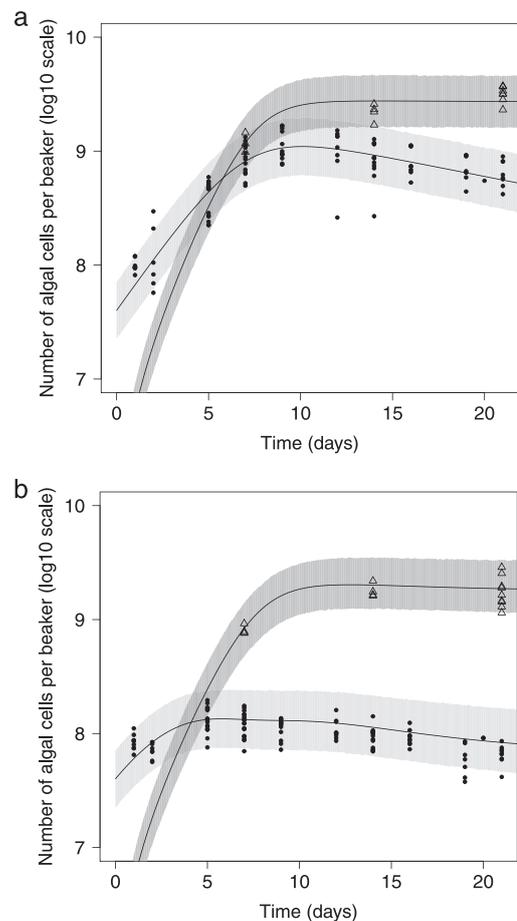


Fig. 4. Algae dynamics under normal light conditions without (a) and with daphnids (b) with Fontainebleau sand. The black circles represent the observed number of algal cells per beaker in the water column while the open triangles represent the observed number of algal cells per beaker on the sediment. The plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The light grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker in the water column, the dark grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker on the sediment.

Grazing. As said before, the posterior distributions of grazing parameters were generally wide (l_{lim} , b and δ) (Table 1 and Fig. 2), suggesting that our data were not sufficient to accurately estimate these parameters. The posterior distributions of standard deviations σ_{N_1} and σ_{N_2} were narrower than their prior distributions (Table 1 and Fig. 2) suggesting that the uncertainty on the number of algal cells per beaker data was smaller than expected.

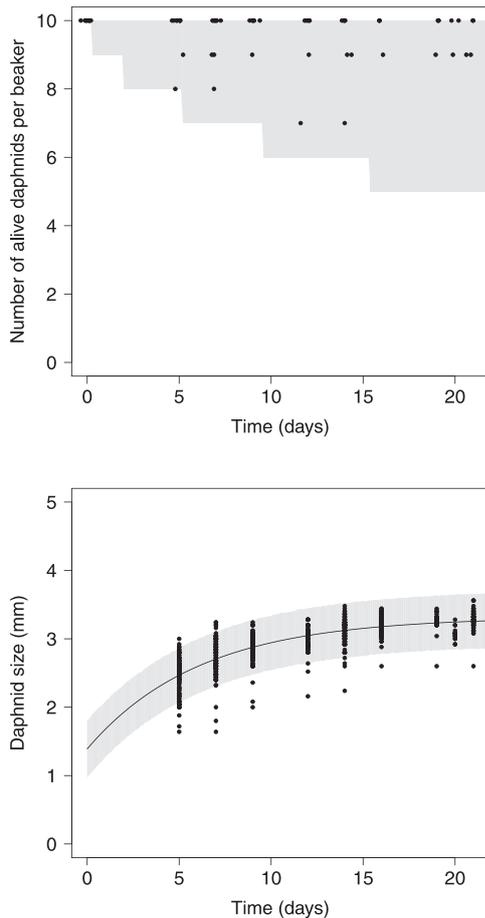


Fig. 5. Daphnid survival (a) and growth (b), with Fontainebleau sand. The black circles represent the observed number of daphnids per beaker (a) and the observed daphnid size (b). The plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The grey areas are the 95% credibility bands for each type of the predicted data.

Daphnid survival. The 95% credibility band of the predicted data appears as steps because of the discrete nature of the data (number of alive daphnids) (Fig. 5a). All data points (100%) were within the 95% credibility band of the predicted data, thus indicating a slight overestimation of the uncertainty.

Daphnid growth. A total of 811 out of 838 data points (97%) were within the 95% credibility band of the predicted data (Fig. 5b). The inference process led to narrow posterior distributions for the maximum size (L_{∞}) and the growth rate (k), whereas the posterior distribution of size at birth (L_0) was very similar to the prior one (Table 1 and Fig. 2). The posterior distribution of the standard deviation σ_L was narrower than the prior distribution (Table 1 and Fig. 2), indicating that the uncertainty on the size data was smaller than expected.

6.2. Model verification

6.2.1. Internal verification

Posterior distributions obtained from the various partial datasets are shown in Fig. 2 and Annex A, Fig. A.1. With the exception of settling rate s and standard deviation σ_{N_1} , the estimates obtained using different partial datasets were very similar to the estimates obtained using all data simultaneously. For settling rate s , the posterior distribution obtained from the experiment under dark conditions was estimated to be higher than that obtained from experiments under normal light conditions. The estimates obtained

using data without daphnids and under dark conditions were similar to the estimates obtained using all of the data (overlapping of the 95% credibility intervals). With the exception of the estimates obtained from the experiment in the dark, we obtained more precise estimates for the inference using all of the data, achieving narrower distributions and lower variances.

6.2.2. External verification

Our model appropriately described all datasets used for the external validation. The 95% credibility intervals encompassed between 97 and 100% of the data. They were relatively large due to the wide posterior distributions of some parameters. See Annex A for more detailed results: posterior distributions (obtained from the three abiotic conditions datasets) and the prior distribution for each parameter are shown in Fig. A.2, results of the experiments with Aiguebelette sediment and without sediment are shown in Figs. A.3 and A.4.

Overall, we found similar estimates for the parameters related to algal dynamics, with the exception of algal growth rates using Aiguebelette sediment, which were lower than for the two other sediment conditions. Grazing parameter estimates and mortality rate estimates were similar under all abiotic conditions, but they were also wide. For the parameters related to daphnid growth, we found a different estimate for growth rate using Aiguebelette sediment and different estimates for maximum size.

7. Discussion and perspectives

7.1. Inference method

To assess parameter values of a model that describes a biological functioning based on data, various methods can be used. Generally, some parameters are fixed while the other are estimated (Jager et al., 2013), calibrated (De Laender et al., 2008) or both (Kupisch et al., 2012). When data of different types and scales are concerned, parameters are usually estimated by group (Goussen et al., 2015; Jager and Zimmer, 2012) or, more rarely, all together (Rinaldi et al., 2014). Within the Bayesian framework, all types of data can be gathered in a unique model and thus all parameters can be estimated simultaneously. This method enables to identify correlation between parameters and allows using information contained in all data types to obtain more precise estimations of parameters. To illustrate the interest of this approach, we modelled in an integrated way the processes involved in a reduced microcosm (with daphnid and algae) using all the available data simultaneously, and verified the robustness of both our parameter estimation method and model structure using data obtained under different abiotic conditions.

Daphnid growth and survival parameters did not differ between the different estimation runs (using only size or survival data versus using all data) (Fig. 2). For settling rate s , the estimated median differed slightly when using data from beakers maintained in the dark (Fig. 2, red dots, black triangles, blue circles), compared to the estimates when using the other partial datasets (Fig. 2, grey squares, green reversed triangles). Nevertheless, the 95% quantiles estimated using only algae data in the dark was contained within the 95% quantiles estimated from all data. Generally, the medians estimated with algae data without and with daphnids (grey segments and squares, Fig. 2) differed very little from the medians estimated with all data (red segments and dots, Fig. 2). These results suggest that parameter estimation using all data simultaneously did not bias parameter estimates. Relevant information may also be obtained from data that are not directly related to a given process itself, which was illustrated by the fact that posterior distributions were overall more accurate when using the entire dataset. All these

results suggest that combining information from different datasets enabled a more precise estimation of the parameters.

In addition, estimating parameters using all data simultaneously allows to highlight correlations between parameters. Indeed, we could have estimated each parameter using only the corresponding data (for instance, estimate the algal settling rate using only algae in the dark data). Then, we could have used these estimates from only the corresponding data as prior distributions for the inference with the other types of data. However, this method would be problematic because potential correlations between parameters are not taken into account (specifically, a correlation of settling rate s and carrying capacity of the whole water column $K_1(0)$, data not shown). As a Bayesian framework allows using many types of model with different types of data simultaneously, it is finally easier and more accurate to perform the estimation with the entire dataset.

Overall, the estimates obtained from datasets that were created for external verification, *i.e.*, with Aiguebelette sediment and without sediment, were less precise than the estimates obtained from the Fontainebleau sand dataset (Annex A, Fig. A.2). This was expected due to the larger amount of data in the Fontainebleau sand dataset (which was the reference sediment). Despite the limited available data used for external validation in the two abiotic conditions, we obtained convergence and parameter estimations that led to reasonable fits. This finding reinforced our confidence that the modelled processes and the parameter estimation method appropriately described the microcosm functioning under various conditions.

7.2. Processes: modelling and biological implications

Coupling mechanistic modelling and model-guided experiments allows verifying hypotheses on organism or ecosystem functioning. Experiments can be conducted to study specific processes (for instance, in the dark experiment to study algal settling) in order to improve adequacy between observations and model outputs. Comings and goings between theory and practice allow us to test and, if necessary, modify the model and its underlying assumptions (Grimm et al., 2014). Here, we modelled a controlled ecosystem with assumptions based on the design of the conducted experiments. By investigating the parameter estimates derived from the different experimental datasets, we were able to discuss the model structure. Comparing parameter estimates from partial and full datasets, we confirmed some assumptions made in the model we developed. Moreover, beyond the model structure, the estimated values of parameters provided key information about some of the processes occurring within the microcosm. A more in-depth understanding of these processes is crucial for a further use of the microcosm.

7.2.1. Algae dynamics

Algae dynamics is commonly modelled by describing growth, for example with logistic growth, to take into account the intraspecific competition (Thornton et al., 2010; Vanoverbeke, 2008; Yang et al., 2011), and settling, which can be expressed in different ways. Because the number of daphnids was low in the microcosm, they were assumed not to alter intrinsic algal dynamics and in particular not to enrich the water column in nutrients. Indeed, according to Peters and Bernardi, the quantities of phosphorus and nitrogen excreted by daphnids are not high enough to sustain algal growth and stay negligible with respect to the nutrient quantity in the microcosm medium (Peters and De Bernardi, 1987). This assumption was confirmed by the fact that the parameter estimates for algal dynamics (*i.e.*, growth rates and carrying capacities) were similar, but less precise when we used data from beakers without daphnids than when we used the entire dataset (Fig. 2).

Algal settling. Generally, settling speed is used (Eppley et al., *in press*; Riebesell, 1989). It does not depend on water depth, which is adequate for modelling field data. Also, settling speed can be submitted to variations according to light intensity and nutrient density (Peperzak and Colijn, 2003; Reynolds et al., 2001). At the microcosm scale, depth is constant, so that settling rate can be used. In their model of a closed phytoplankton-zooplankton ecosystem, Norberg and DeAngelis (1997) used a settling rate value of 0.05 day^{-1} to parameter their settling model, with which our estimated value of s was in accordance. According to the estimated value of settling rate s ($0.074 [0.058, 0.089] \text{ day}^{-1}$ (Table 1)), 56% of the initial number of algal cells per beaker in the water column settled after 11 days in the dark. Assuming that the settling rate did not depend on algal density, the number of settled algae would reach 80% after 21 days. Although it was compensated by growth, the settling process appeared to have a significant impact on algae dynamics in the water column.

According to Peperzak et al. and Eppley et al. (Eppley et al., *in press*; Peperzak and Colijn, 2003), the settling rate of phytoplankton is influenced by the cell density, and particularly by cell aggregation. Our assumption that settling rate was constant over time for any initial algal cell density may have been simplistic. Nevertheless, we estimated the same settling rate with and without daphnids, even though algal cell densities differed under these two conditions. The constant settling rate assumption appeared to be adequate in the algal cell density range that we observed in our microcosm.

Algal growth. Algal growth rates observed in previous experiments varied from 0.45 to 0.70 day^{-1} in Clément and Zaid (Clément and Zaid, 2004). Our estimated values were within this range. The growth rates estimated for each compartment differed slightly ($r_2 > r_1$), suggesting that algae grew faster on the sediment than in the water column. The Fontainebleau sand is a simple silicate sand, and thus it does not provide nutrients that could accelerate algal growth. Nevertheless, algae form a biofilm on the surface of the sediment such that algal growth on the sediment might be modified.

7.2.2. Daphnid processes

Daphnid growth. Von Bertalanffy equation is usually used to describe daphnid growth (Rinke and Petzoldt, 2003; Kooijman et al., 2007). This model involves three parameters: growth rate, length at birth and maximum length. Generally, size data in bioassays focus on the end of the experiments, so that data are not sufficient to estimate length at birth and sometimes growth rate. Indeed, the five first days of the experiment are the period during which the size at birth has the greatest impact on the growth process, and consequently on the Von Bertalanffy growth curve. Within Bayesian framework, the problem can be solved with the possibility of using informative priors (Billoir et al., 2008; Jager et al., 2004, 2006). Our posterior distribution of size at birth (L_0) remained very similar to the prior one with Fontainebleau sand data. This suggests that our data were not sufficiently informative to estimate size at birth. Indeed, in our experiments, daphnid sizes were not measured before the fifth day. In the future, experimental effort should be focused on the first five days of the experiment to get a better estimate of size at birth.

Generally, the literature reports L_∞ values that are between 3 and 6 mm. Compared with previous experiments (Billoir et al., 2011, 2012) and other studies (Chopelet et al., 2008; Ebert, 1991; Ranta et al., 1993; Martínez-Jerónimo, 2011), our maximum size of daphnids (L_∞) was low (approximately 1.5 times lower). In contrast, the growth rate (k) was approximately 1.5 times higher than those estimated in previous bioassays or in Preuss et al. (Preuss et al., 2009).

With the exception of studies that focus on feeding conditions, daphnids are generally fed *ad libitum* in bioassays, as well as in previous experiments with the same microcosm (Billoir et al., 2011, 2012) in order to prevent confounding factors. Several authors have studied daphnid dynamics under low food conditions, for instance focusing on the effects on reproduction (Gorbi et al., 2011) or on grazing (filtering rate or foraging) (Muck, 1980). Here, we assumed that daphnids were fed *ad libitum* with algal cells. Nevertheless, in previous experiments with the microcosm (Billoir et al., 2011, 2012), daphnids were regularly supplemented with organic matter (fish food flakes). Hence, daphnid survival rate and maximum size estimated by Billoir et al. (Billoir et al., 2011, 2012) were higher than in our experiments. This may be due to a lack of supplementary food in our experiment. In addition, Gorbi et al. (Gorbi et al., 2011) showed that maximum daphnid size was between 3 and 3.5 mm under conditions of low daphnid and food densities. Our estimate of L_{∞} ([3.26, 3.36] mm) was thus in this range, but we obtained a higher growth rate than in Gorbi et al. This finding suggests that daphnids grew more quickly at the beginning of the experiment but ceased their growth earlier. This may be because algal density was sufficient only when daphnids are small, *i.e.* prior to maturity, and have low food requirements.

Daphnid survival. According to the OECD directives, daphnid mortality in 21-day tests should not exceed 20% at day 21 for the bioassay to be valid (OECD, 2012). The microcosm conditions are different from standard bioassays (feeding, presence of sediment), and thus mortality rate variability has always been high (Delhaye, 2012). Indeed, high mortality rate is common under microcosm conditions (Cauzzi, 2007; Triffault-Bouchet et al., 2005) but in one of the previous experiment, mortality rate dropped to 9.4% (Billoir et al., 2011, 2012). The estimated mortality rate in that experiment was seven times lower than the one we estimated, but our value was in the commonly expected range. The estimation of daphnid mortality and thus of the other processes involved in the microcosm functioning may be biased because microcosms with high daphnid mortality were preferentially sacrificed. The number of daphnids present in the microcosms may have influenced the experimenter. It would have been better to sacrifice the microcosms randomly. Nevertheless, 78% of survival (calculated from model predictions) at the end of the experiment was compliant to the expectation of a bioassay. Our results therefore appeared valid.

Ingestion and filtration. The ingestion rate modelled as a function of filtration rate and food density is a common approach (Preuss et al., 2009; Porter et al., 1982; Rohrlack et al., 1999). The functional response can be described with a standard Michaelis–Menten function (McCauley et al., 1990) or a piecewise linear function (Burns, 1969; DeMott, 1982; Egloff and Palmer, 1971). The influence of daphnid size on ingestion rate can be included in two different ways: either in the incipient limiting level (McCauley et al., 1990), or in the filtration rate (Lampert, 1986; Rigler, 1961). Variations in daphnid growth according to food density can also be described with several models (Kooijman et al., 2008; Preuss et al., 2009). As daphnids were assumed to be fed *ad libitum* in our experiments, we chose to model only the dependency of ingestion to daphnid size and not the other way round. Nevertheless, as mentioned above, this assumption appeared incorrect, which was suggested by the low daphnid maximum size, but we overturned this assumption *a posteriori* and thus we did not modify the model in this work. Moreover, grazing parameter posterior distributions appeared wide, suggesting that data did not provide enough information to estimate these parameters. This reinforced the presumption that daphnids were not actually fed *ad libitum* in our experiments. It will thus be relevant to model daphnid size according to feeding for further studies (see Section 7.4).

Parameter estimation of a function describing an indirect process that includes several parameters may be difficult. The use

of a piecewise affine function can cause a problem (that is discussed hereafter), but it allowed us introducing the incipient limiting level (the algal density above which a daphnid cannot ingest more) as a parameter. Such a parameter has a strong biological significance compared to classical parameter used in the Michaelis–Menten function (food concentration corresponding to half of the maximum ingestion rate). According to Rigler (Rigler, 1961) and McMahon and Rigler (McMahon and Rigler, 1965), the incipient limiting level (I_{lim}) for mature daphnid is around $10^{5.5}$ cells mL⁻¹. Throughout our experiments, algal densities were below 10^5 cells mL⁻¹ in the water column, as well as on the sediment because of the very low available algal cells on the sediment. Thus, the incipient limiting level was not reached in our experiments, so that the equations used to calculate the ingestion rates (g_1 and g_2) corresponded to the first line of Eqs. (8) and (9). This may explain why the I_{lim} posterior distribution was bounded below by $10^{5.32}$ cells mL⁻¹ and had the same upper bound as the prior distribution. We thus conducted additional experiments with an initial quantity of $4 \cdot 10^8$ cells per beaker without sediment allowing the ingestion rates (g_1 and g_2) to be calculated through the second line of the equations. Thus, the estimation of I_{lim} has been improved (see Annex A, Fig. A.6).

Filtration rate values vary among authors. The filtration rate values predicted by our model were about twice those provided by these authors (Burns, 1969; DeMott, 1982; Egloff and Palmer, 1971) but, in contrast, they were in accordance with those reported by Preuss et al. (Preuss et al., 2009).

Grazing location. As pelagic species, daphnids preferentially feed in the water column, but they may forage on the sediment if the amount of food is too low on the water column (Burns, 1969; Siehoff et al., 2009). We tested this hypothesis with a model in which daphnids only grazed in the water column. However, this model did not adequately describe our data due to an overestimation of algal consumption in the water column (data not shown). In our model, the ratio of algal density in the water column to available algal density on the sediment should be 0.1 when half of daphnids are grazing on the sediment, according to the estimated median value of the parameter δ (Table 1). This shows that daphnids indeed tended to graze in the water column rather than on the sediment. According to the overall model, about half of the alive daphnids grazed on the sediment from day 10 to the end of the experiment (Annex A, Fig. A.5). Therefore, the consumption of algae on the sediment should not be considered negligible when compared with the total algal consumption by all the daphnids.

In an experiment performed by Burns (Burns, 1969), daphnids were observed to spend 70% of a 16-min experiment within 0.9 cm of the bottom of a four-centimetres high water column. This value was higher than in our experiment, in which daphnids spent less than 50% of their total time grazing on the sediment. However, our experiments differed from that of Burns (Burns, 1969) in its time and space scale, and therefore might not have provided a reasonable basis for conclusions about daphnid grazing location preferences. Nevertheless, this can be investigated by comparing algae consumption on the bottom of the beakers with Fontainebleau sand and without sediment. With Fontainebleau sand, the estimated value of b , *i.e.*, the proportion of algae on the sediment available for daphnid grazing, was 0.022 [0.010, 0.48] (Table 1). This estimate suggests that only a very small portion of the algae on the sediment was available for daphnid grazing. Indeed, algal cells have been observed to settle up to one centimetre into the sediment. At this depth they are not available for daphnids. Without sediment, b was fixed to 1 because the algal cells were all available at the bottom of the beaker. When daphnids were present, the number of algal cells at the bottom of each beaker strongly decreased during the experiment. Daphnids therefore fed more at the bottom of the beakers without sediment. This finding suggests

that daphnids tended to graze at the bottom of beakers but the sediments used in our experiments may have been too coarse to enable normal grazing, as algal cells sank into the sediment and the sediment particles might have been too heavy for the daphnids to re-suspend the algal cells.

7.3. External verification

Overall, the estimates obtained from datasets that were created for external verification, *i.e.*, with Aiguebelette sediment and without sediment, were more variable than the estimates generated from the Fontainebleau sand dataset (Annex A, Fig. A.2). This was expected due to the lower amount of data in the additional experiments.

A chemical factor may explain why algal growth rates with Aiguebelette sediment were lower than those estimated in the two other abiotic conditions. Aiguebelette sediment contains a large amount of carbonate that could have precipitated phosphates (Cao et al., 2007) and thus reduced algal growth.

The differences between our estimates of daphnid sizes at birth may be due to: (i) the larger number of measurement points at the start of the experiment without sediment, and (ii) the lower variability in the data for the Aiguebelette sediment dataset. These differences may explain why daphnid size at birth could have been more precisely estimated in some cases and thus resulted in lower posterior distribution than the prior distribution. The lower daphnid growth rate in the experiment with Aiguebelette sediment could be due to a lower number of algal cells per beaker available during the experiment, but the estimate was closer to the prior distribution.

Although the estimated maximum sizes of daphnid were different according to the sediment condition, maximum sizes remained lower than expected, *i.e.*, in the lower range of possible values (Chopelet et al., 2008; Ebert, 1991; Ranta et al., 1993; Martínez-Jerónimo, 2011). Daphnids had access to a larger amount of food without sediment than with Fontainebleau sand because algal cells were all available without sediment while they sank in the sediment composed of Fontainebleau sand. Daphnids had thus the opportunity to consume more algal cells without sediment and maximum size appeared higher without sediment than with Fontainebleau sand. This suggests that daphnids were not fed *ad libitum* in the experiments conducted with Fontainebleau sand.

Despite the limited available data used for external validation in the two abiotic conditions, we obtained convergence and parameter estimations that led to reasonable fits. This finding reinforced our confidence that the modelled processes and the parameter estimation method appropriately described the microcosm functioning under various conditions.

7.4. Perspectives

Our approach allowed us to describe the functioning of a partial microcosm considering algae and daphnid intrinsic dynamics and interactions by using simultaneously all data from experiments specifically designed for this purpose. Our model could be used to study algae-daphnids under various abiotic conditions: changes in physical factors (temperature, light intensity) or chemical factors (oxygen or nutrient levels). The same method could also be applied to describe other types of interactions that take place in the microcosm developed by Clément and Cadier (Clément and Cadier, 1998), for example, the interaction of algae and duckweeds that compete for nutrients.

Our model could be used to study the effects of stress factors on the dynamics of algae and daphnids. Indeed, by taking interactions into account, our model would allow us to discriminate between the direct and indirect effects of a stress factor on the microcosm functioning. In the future, our model could help to correctly interpret the experiments performed under disturbed conditions; and thus our understanding of stress factor effects on ecosystems could be improved. In particular, our model may be applied to the field of ecotoxicology by describing the response of the microcosm to different types of chemical disturbances, with or without sediment.

To use both the microcosm and the model in the perspective of studying the daphnid-algae interaction under disturbed conditions, several improvements can be suggested. First, as daphnids were supposed to be fed *ad libitum* in our experiments, we chose to model only the dependency of ingestion to daphnid size and not the other way round. However, this assumption appeared incorrect. To address this issue, it would be relevant, as suggested by Kooijman et al. (Kooijman et al., 2008), to model daphnid size according to food conditions. On the other hand, this issue could also be solved experimentally by using initial algal density higher than in our experiments in order to ensure that daphnids are fed *ad libitum*. This would prevent any confounding factors when the effects of a stress factor are tested. Secondly, as the model was used under undisturbed conditions, reproduction was considered as an independent process. But, with a stress factor, reproduction could be also modelled to provide an additional endpoint for the stress factor evaluation and thus increase the interest of a modelling approach to improve environmental risk assessment.

8. Conclusion

In this study, we proposed (1) an innovative modelling approach of algae-daphnid interaction in a 2-L laboratory microcosm under controlled conditions, (2) a robust estimation method of model parameters within a Bayesian framework by using simultaneously all data from experiments specifically designed for this purpose and (3) a validation process of both our model and our parameter estimation method on different datasets. Our model appeared to adequately describe the dynamics of the partial microcosm with only daphnids and microalgae. A whole dataset built from several laboratory experiments contained enough information to estimate all parameters and to provide a good understanding of the dynamics and the interactions between microalgae and daphnids. The Bayesian framework allowed us to include prior information and facilitated the handling of a complex model as well as several types of data simultaneously. The verifications we performed allowed us to confirm our model structure as well as the parameter estimation method.

Acknowledgements

Authors thank the IXXI institute (Institut Rhônealpin des Systèmes Complexes) for its financial support. Authors also thank Cécile Poix and American Journal Experts for copyediting the text, Laurence Volatier and Laurent Simon for revising the introduction and Volker Grimm for revising the ODD protocol writing.

Appendix A. Figures

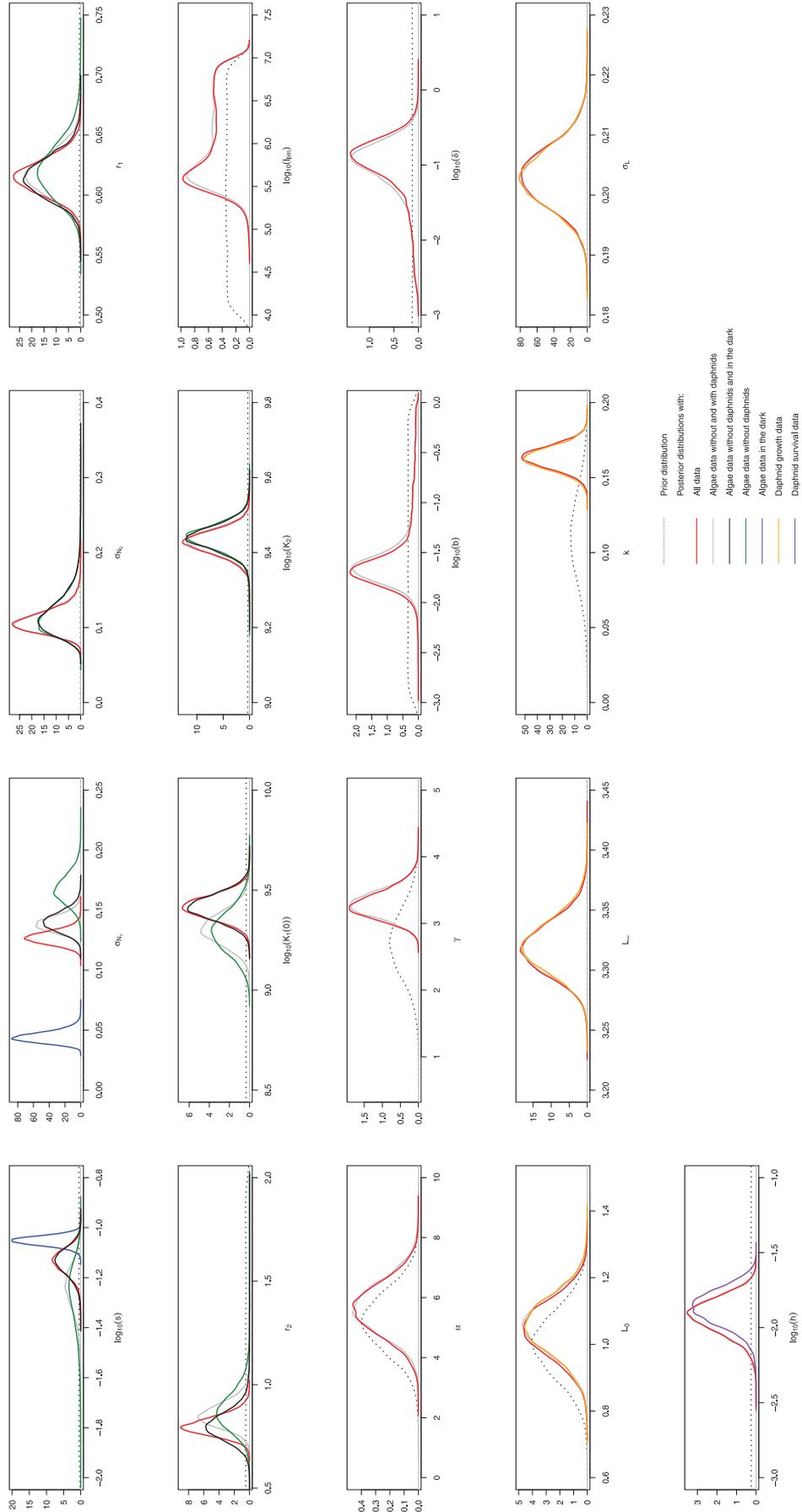


Fig. A.1. Comparison between prior distributions and different posterior distributions, corresponding to the different partial datasets.

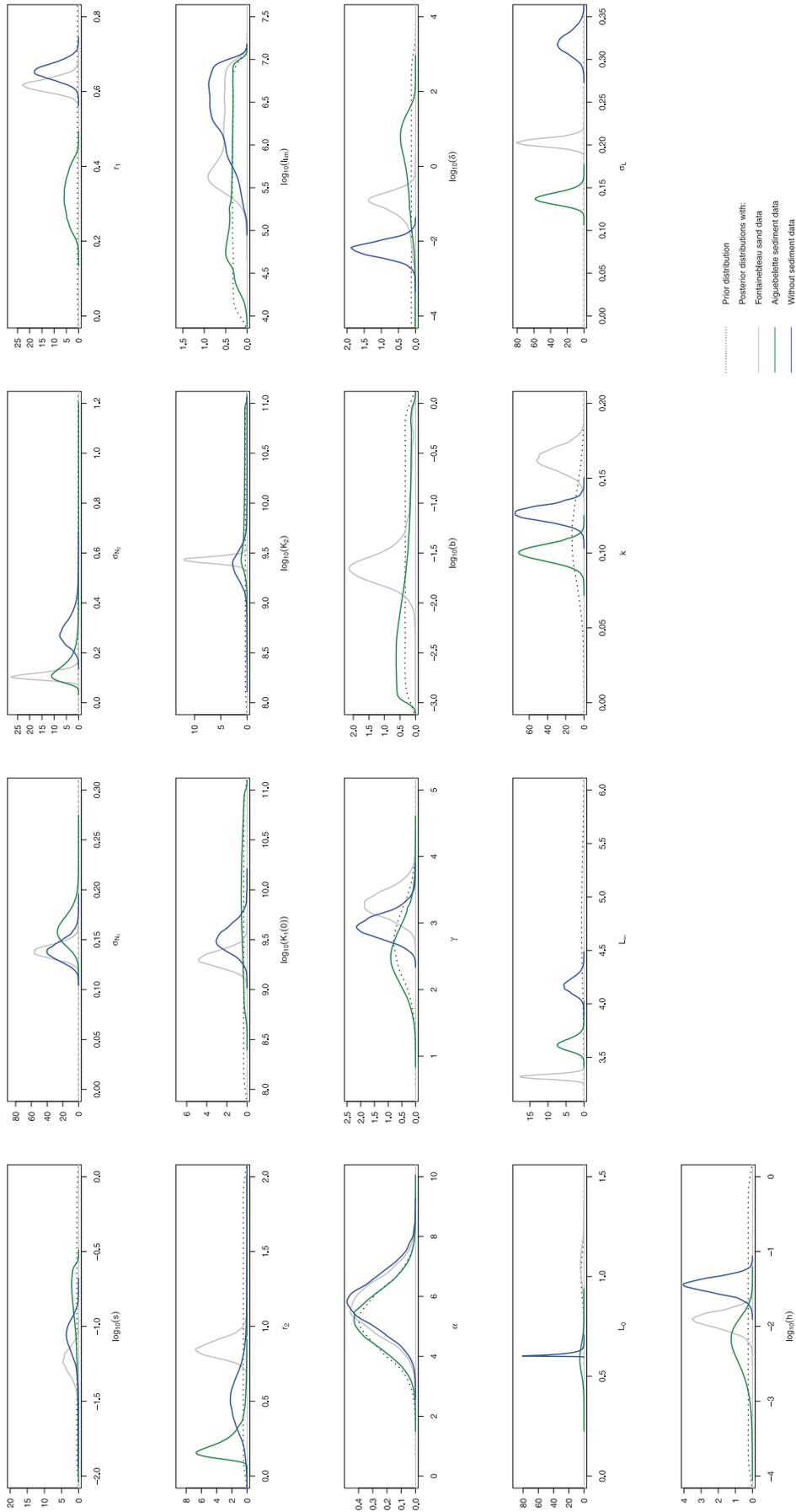


Fig. A.2. Comparison between prior distributions and different posterior distributions, with different types of sediment.

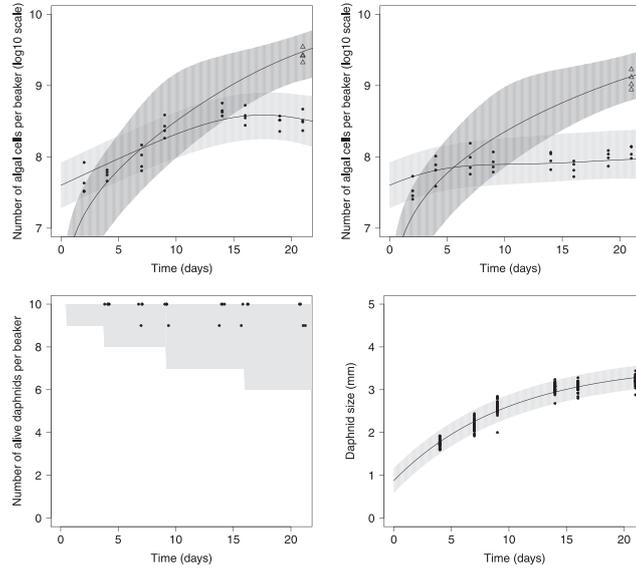


Fig. A.3. Algae dynamics under normal light conditions without (a) and with daphnids (b), daphnid survival (c) and daphnid growth (d) with Aiguebelette sediment. (a) and (b) The black circles represent the observed number of algal cells per beaker in the water column while the open triangles represent the observed number of algal cells per beaker on the sediment, the plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The light grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker in the water column, the dark grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker on the sediment. (c) The black circles represent the observed number of alive daphnids per beaker and (d) the observed daphnid size, the plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The grey areas are the 95% credibility bands for each type of the predicted data.

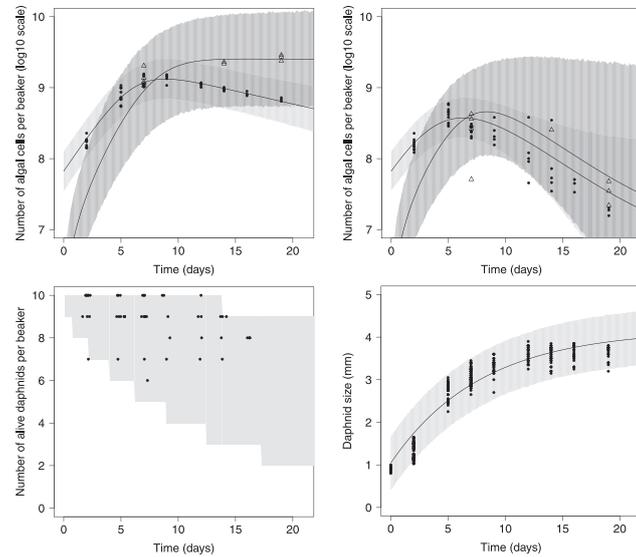


Fig. A.4. Algae dynamics under normal light conditions without (a) and with daphnids (b), daphnid survival (c) and daphnid growth (d) without sediment. (a) and (b) The black circles represent the observed number of algal cells per beaker in the water column while the open triangles represent the observed number of algal cells per beaker at the bottom of the beaker, the plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The light grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker in the water column, the dark grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker at the bottom of the beaker. (c) The black circles represent the observed number of alive daphnids per beaker and (d) the observed daphnid size, the plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution. The grey areas are the 95% credibility bands for each type of the predicted data.

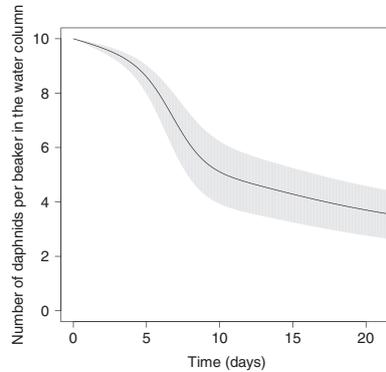


Fig. A.5. Number of alive daphnids per beaker in the water column over time with Fontainebleau sand. The plain line is the simulated model with each parameter equal to the median value of the posterior distribution and the grey area is the 95% credibility band of the predicted data.

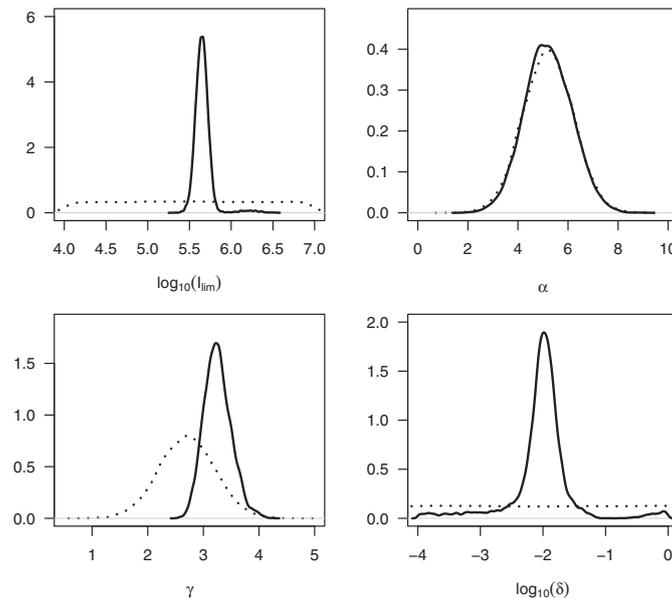


Fig. A.6. Comparison between prior distributions and posterior distributions for grazing parameters, from data with an initial quantity of $4 \cdot 10^8$ cells per beaker without sediment. The dotted lines are the prior distributions and the plain lines are the posterior distributions.

References

- Benton, T.G., Solan, M., Travis, J.M.J., Sait, S.M., 2007. Microcosm experiments can inform global ecological problems. *Trends Ecol. Evol.* 22 (October (10)), 516–521.
- Billoir, E., Delignette-Muller, M.L., Péry, A.R.R., Charles, S., 2008. A Bayesian approach to analyzing ecotoxicological data. *Environ. Sci. Technol.* 42 (23), 8978–8984.
- Billoir, E., Delhaye, H., Clément, B., Delignette-Muller, M.L., Charles, S., 2011. Bayesian modelling of daphnid responses to time-varying cadmium exposure in laboratory aquatic microcosms. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 74 (May (4)), 693–702.
- Billoir, E., Delhaye, H., Forfait, C., Clément, B., Triffault-Bouchet, G., Charles, S., Delignette-Muller, M.L., 2012. Comparison of bioassays with different exposure time patterns: the added value of dynamic modelling in predictive ecotoxicology. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 75 (January (1)), 80–86.
- Biron, P.A., Massarin, S., Alonzo, F., Garcia-Sanchez, L., Charles, S., Billoir, E., 2012. Population-level modeling to account for multigenerational effects of uranium in *Daphnia magna*. *Environ. Sci. Technol.* 46 (2), 1136–1143.
- Bone, A.J., Colman, B.P., Gondikas, A.P., Newton, K.M., Harrold, K.H., Cory, R.M., Unrine, J.M., Klaine, S.J., Matson, C.W., Di Giulio, R.T., 2012 July. Biotic and abiotic interactions in aquatic microcosms determine fate and toxicity of Ag nanoparticles: part 2—toxicity and Ag speciation. *Environ. Sci. Technol.* 46 (13), 6925–6933.
- Bossuyt, B.T.a., Janssen, C.R., 2004. Long-term acclimation of *Pseudokirchneriella subcapitata* (Korshikov) Hindak to different copper concentrations: changes in tolerance and physiology. *Aquat. Toxicol.* 68 (May (1)), 61–74.
- Brinke, M., Höss, S., Fink, G., Ternes, T.A., Heining, P., Traunspurger, W., 2010. Assessing effects of the pharmaceutical ivermectin on meiobenthic communities using freshwater microcosms. *Aquat. Toxicol.* (Amsterdam, Netherlands) 99 (August (2)), 126–137.
- Burns, C.W., 1969. Particle size and sedimentation in the feeding behavior of two species of *Daphnia*. *Limnol. Oceanogr.* 14 (3), 392–402.
- Cadotte, M.W., Drake, J.A., Fukami, T.I., 2005. Constructing nature: laboratory models as necessary tools for investigating complex ecological communities. *Adv. Ecol. Res.* 37 (04), 333–353.
- Cao, X., Harris, W.G., Josan, M.S., Nair, V.D., 2007. Inhibition of calcium phosphate precipitation under environmentally-relevant conditions. *Sci. Total Environ.* 383 (September (1–3)), 205–215.
- Cauzzi, N., 2007. Evaluation de l'éco-compatibilité de sédiments contaminés, traités ou non par un procédé physico-chimique, dans le cadre d'un scénario de dépôt

- en gravière Etude en microcosmes aquatiques. Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, PhD thesis.
- Chen, C.Y., Lin, J.H., 2006. Toxicity of chlorophenols to *Pseudokirchneriella subcapitata* under air-tight test environment. *Chemosphere* 62 (January (4)), 503–509.
- Chopelet, J., Blier, P.U., Dufresne, F., 2008. Plasticity of growth rate and metabolism in *Daphnia magna* populations from different thermal habitats. *J. Exp. Zool. A: Ecol. Genet. Physiol.* 309 (November (9)), 553–562.
- Clément, B., Cadier, C., 1998. Development of a new laboratory freshwater/sediment microcosm test. *Ecotoxicology* 7, 279–290.
- Clément, S., Zaid, B., 2004. A new protocol to measure the effects of toxicants on daphnid-algae interactions. *Chemosphere* 55 (June (10)), 1429–1438.
- Clément, B., Cauzzi, N., Godde, M., Crozet, K., Chevron, N., 2005. Pyrene toxicity to aquatic pelagic and benthic organisms in single-species and microcosm tests. *Polycycl. Aromat. Compd.* 25 (3), 271–298.
- Clément, B., Delhay, H., Triffault-Bouchet, G., 2014. Comparison of laboratory batch and flow-through microcosm bioassays. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 108C (July), 217–223.
- Costa, J.L., Domingos, I., Almeida, A.J., Feunteun, E., Costa, M.J., 2008. Interaction between *Halobatrachus didactylus* and *Anguilla anguilla*: what happens when these species occur in sympatry? *Cybio* 32 (2), 111–117.
- Daam, M.A., Van den Brink, P.J., 2007. Effects of chlorpyrifos, carbendazim, and linuron on the ecology of a small indoor aquatic microcosm. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 53 (July (1)), 22–35.
- De Laender, F., De Schampelaere, K.I.A.C., Vanrolleghem, P.A., Janssen, C.R., 2008. Validation of an ecosystem modelling approach as a tool for ecological effect assessments. *Chemosphere* 71 (March (3)), 529–545.
- De Schampelaere, K.I.A.C., Canli, M., Van Lierde, V., Forrez, I., Vanhaecke, F., Janssen, C.R., 2004. Reproductive toxicity of dietary zinc to *Daphnia magna*. *Aquat. Toxicol.* 70 (December (3)), 233–244.
- Delhay, H., 2012. Développement d'un bioessai de toxicité chronique en microcosme aquatique de laboratoire et évaluation de l'outil au travers de l'étude des effets du cadmium. Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, PhD thesis.
- DeMott, W.R., 1982. Feeding selectivities and relative ingestion rates of *Daphnia* and *Bosmina*. *Limnol. Oceanogr.* 27 (3), 518–527.
- Ebert, D., 1991. The effect of size at birth, maturation threshold and genetic differences on the life-history of *Daphnia magna*. *Oecologia* 86, 243–250.
- Egloff, D.A., Palmer, D.S., 1971. Size relations of the filtering area of two *Daphnia* species. *Limnol. Oceanogr.* 16 (November), 900–905.
- Eppley, R.W., Holmes, R.W., Strickland, J.D.H., 1967. Sinking rates of marine phytoplankton measured with a fluorometer. *J. Exp. Mar. Biol. Ecol.* 1, 191–208.
- Farjana, T., Tuno, N., Higa, Y., 2012. Effects of temperature and diet on development and interspecies competition in *Aedes aegypti* and *Aedes albopictus*. *Med. Vet. Entomol.* 26, 210–217.
- Faupel, M., Ristau, K., Trauspurger, W., 2012. The functional response of a freshwater benthic community to cadmium pollution. *Environ. Pollut.* 162 (March), 104–109.
- Forfait-Dubuc, C., Charles, S., Billoir, E., Delignette-Muller, M.L., 2012. Survival data analyses in ecotoxicology: critical effect concentrations, methods and models. What should we use? *Ecotoxicol. (London, England)* 21 (May (4)), 1072–1083.
- Gelman, A., Rubin, D.B., 1992. Inference from iterative simulation using multiple sequences. *Stat. Sci.* 7 (4), 457–511.
- Gopalaswamy, A.M., Royle, J.A., Delampady, M., Nichols, J.D., Karanth, K.U., Macdonald, D.W., 2012. Density estimation in tiger populations: combining information for strong inference. *Ecology* 93 (7), 1741–1751.
- Gorbi, G., Moroni, F., Sei, S., Rossi, V., 2011. Anticipatory maternal effects in two different clones of *Daphnia magna* in response to food shortage. *J. Limnol.* 70 (2), 222–230.
- Goussen, B., Beaudouin, R., Dutilleul, M., Buisset-Goussen, A., Bonzom, J.M., Péry, A.R.R., 2015. Chemosphere energy-based modelling to assess effects of chemicals on *Caenorhabditis elegans*: a case study on uranium. *Chemosphere* 120, 507–514.
- Grimm, V., Berger, U., DeAngelis, D.L., Polhill, J.G., Giske, J., Railsback, S.F., 2010. The ODD protocol: a review and first update. *Ecol. Model.* 221 (23), 2760–2768.
- Grimm, V., Augustiak, J., Focks, A., Frank, B.M., Gabsi, F., Johnston, A.S.A., Liu, C., Martin, B.T., Meli, M., Radchuk, V., Thorbek, P., Railsback, S.F., 2014. Towards better modelling and decision support: documenting model development, testing, and analysis using TRACE. *Ecol. Model.* 280, 129–139.
- Grasman, J., Van Nes, E.H., Kersting, K., 2009. Data-directed modelling of *Daphnia* dynamics in a long-term micro-ecosystem experiment. *Ecol. Model.* 220 (February (3)), 343–350.
- Hadfield, J.D., Richardson, D.S., Burke, T., 2006. Towards unbiased parentage assignment: combining genetic, behavioural and spatial data in a Bayesian framework. *Mol. Ecol.* 15, 3715–3730.
- Ham, L., Quinn, R., Pascoe, D., 1995. Effects of cadmium on the predator-prey interaction between the turbellarian *Dendrocoelum lacteum* (Müller, 1774) and the isopod crustacean *Asellus aquaticus* (L.). *Arch. Environ. Contam.* 29, 358–365.
- Jager, T., Crommentuijn, T., Van Gestel, C.A.M., Kooijman, S.A.L.M., 2004. Simultaneous modeling of multiple end points in life-cycle toxicity tests. *Environ. Sci. Technol.* 38 (10), 2894–2900.
- Jager, T., Heugens, E.H.W., Kooijman, S.A.L.M., 2006. Making sense of ecotoxicological test results: towards application of process-based models. *Ecotoxicology* 15, 305–314.
- Jager, T., Zimmer, E.J., 2012. Simplified dynamic energy budget model for analysing ecotoxicity data. *Ecol. Model.* 225 (January), 74–81.
- Jager, T., Martin, B.T., Zimmer, E.J., 2013. DEBkiss the quest for the simplest energy-budget model of animal life history. *J. Theor. Biol.* 328, 9–18.
- Kersting, K., van der Leeuw, W., 1976. The use of the Coulter Counter for measuring the feeding rates of *Daphnia magna*. *Hydrobiologia* 49 (3), 233–237.
- Kooijman, S.A.L.M., Baas, J., Bontje, D., Broerse, M., Jager, T., Van Gestel, C.A.M., Van Hattum, B., 2007. Scaling relationships based on partition coefficients and body sizes have similarities and interactions. *SAR QSAR Environ. Res.* 18 (3–4), 315–330.
- Kooijman, S.A.L.M., Sousa, T., Pecquerie, L., Van Der Meer, J., Jager, T., 2008. From food-dependent statistics to metabolic parameters, a practical guide to the use of dynamic energy budget theory. *Biol. Rev.* 83 (4), 533–552.
- Kupisch, M., Moenickes, S., Schlieff, J., Frassl, M., Richter, O., 2012. Temperature-dependent consumer-resource dynamics: a coupled structured model for *Gammarus pulex* (L.) and leaf litter. *Ecol. Model.* 247, 157–167.
- Lampert, W., 1986. Response of the respiratory rate of *Daphnia magna* to changing food conditions. *Oecologia* 70, 495–501.
- Lin, C., Lin, C., Wang, Y., Liu, F., Chien, Y., Chuang, Y., Lan, C., Hsieh, W., Chen, B., 2014. Robustness analysis on interspecies interaction network for iron and glucose competition between *Candida albicans* and zebrafish during infection. *BMC Syst. Biol.* 8 (Suppl. 5), 1–24.
- Martínez-Jerónimo, F., 2011. Description of the individual growth of *Daphnia magna* (Crustacea: Cladocera) through the von Bertalanffy growth equation. Effect of photoperiod and temperature. *Limnology* 13 (August (1)), 65–71.
- McCaughey, E., Murdoch, W.W., Nisbet, R.M., Gurney, W.S.C., 1990. The physiological ecology of daphnia: development of a model of growth and reproduction. *Ecology* 71 (2), 703–715.
- McKee, D., Atkinson, D., Collings, S., 2002. Macrozooplankton responses to simulated climate warming in experimental freshwater microcosms. *Freshw. Biol.* 47 (8), 1557–1570.
- McMahon, J.W., Rigler, F.H., 1965. Feeding rate of daphnia magna straus in different foods labeled with radioactive. *Limnol. Oceanogr.* 10 (1), 105–113.
- Moore, J.E., Barlow, J., 2011. Bayesian state-space model of fin whale abundance trends from a 1991–2008 time series of line-transect surveys in the California Current. *J. Appl. Ecol.* 48, 1195–1205.
- Moreira-Santos, M., Soares, A.M.V.M., Ribeiro, R., 2004. An in situ bioassay for freshwater environments with the microalgae *Pseudokirchneriella subcapitata*. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 59 (October (2)), 164–173.
- Muck, P., 1980. Feeding of freshwater filter-feeders at very low food concentrations: Poor evidence for “threshold feeding” and “optimal foraging” in *Daphnia longispina* and *Eudiaptomus gracilis*. *J. Plankton Res.* 2 (4), 367–379.
- Norberg, J., DeAngelis, D., 1997. Temperature effects on stocks and stability of a phytoplankton-zooplankton model and the dependence on light and nutrients. *Ecol. Model.* 95, 75–86.
- OECD Test no. 211: *Daphnia magna* reproduction test.
- Pathikonda, S., Ackleh, A.S., Hasenstein, K.H., Mopper, S., 2009. Invasion, disturbance, and competition: modeling the fate of coastal plant populations. *Conserv. Biol.* 23 (February (1)), 164–173.
- Pau, C., Serra, T., Colomer, J., Casamitjana, X., Sala, L., Kampf, R., 2013. Filtering capacity of *Daphnia magna* on sludge particles in treated wastewater. *Water Res.* 47 (January (1)), 181–186.
- Peperzak, L., Colijn, F., 2003. Phytoplankton sinking rates in the Rhine region of freshwater influence. *J. Plankton Res.* 25 (4), 365–383.
- Peters, R.H., De Bernardi, R., 1987. *Daphnia*. *Memorie Dell' Istituto Italiano di Idrobiologia*, pp. 219.
- Plummer rjags, M., 2009. Bayesian Graphical Models Using MCMC. Rpackage version 1.0., pp. 3–12.
- Porter, K.G., Gerritsen, J., Orcutt, J.D., 1982. The effect of food concentration on swimming patterns, feeding, behavior, ingestion, assimilation and respiration by *Daphnia*. *Limnol. Oceanogr.* 27 (5), 935–949.
- Preuss, T.G., Hammers-Wirtz, M., Hommen, U., Rubach, M.N., Ratte, H.T., 2009. Development and validation of an individual based *Daphnia magna* population model: the influence of crowding on population dynamics. *Ecol. Model.* 220 (February (3)), 310–329.
- R Core Team, 2013. R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.
- Ranta, E., Bengtsson, J., McManus, J., 1993. Growth, size and shape of *Daphnia longispina*, *D. magna* and *D. pulex*. *Ann. Zool. Fennici* 30, 299–311.
- Reynolds, C.S., Irish, A.E., Elliott, J.A., 2001. The ecological basis for simulating phytoplankton responses to environmental change (PROTECH). *Ecol. Model.* 140, 271–291.
- Riebesell, U., 1989. Comparison of sinking and sedimentation rate measurements in a diatom winter/spring bloom. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* 54, 109–119.
- Rigler, F.H., 1961. The relation between concentration of food and feeding rate of *daphnia magna straus*. *Can. J. Zool.* 39 (6), 857–868.
- Rinaldi, A., Montalto, V., Lika, K., Sanfilippo, M., Mangano, A., Sarà, G., 2014. Estimation of dynamic energy budget parameters for the Mediterranean toothcarp (*Aphanius fasciatus*). *J. Sea Res.* 94, 65–70.
- Rinke, K., Petzoldt, T., 2003. Modelling the effects of temperature and food on individual growth and reproduction of *Daphnia* and their consequences on the population level. *Limnologia* 33, 293–304.
- Roger, P.A., Reynaud, P.A., 1978. La numération des algues en sol submergé: Loi de distribution des organismes et densité d'échantillonnage. *Rev. Ecol. Biol. Sol.* 15 (2), 219–234.
- Rohrback, T., Henning, M., Kohl, J.G., 1999. Mechanisms of the inhibitory effect of the cyanobacterium *Microcystis aeruginosa* on *Daphnia galeata*'s ingestion rate. *J. Plankton Res.* 21 (8), 1489–1500.

- Siehoff, S., Hammers-Wirtz, M., Strauss, T., Ratte, H.T., 2009. Periphyton as alternative food source for the filter-feeding cladoceran *Daphnia magna*. *Freshw. Biol.* 54, 15–23.
- Söderbäck, B., 1994. Interactions among juveniles of two freshwater crayfish species and a predatory fish. *Oecologia* 100 (December (3)), 229–235.
- Soetaert, K., Petzoldt, T., Woodrow Setzer, R., 2010. Solving differential equations in R: Package desolve. *J. Stat. Softw.* 33 (9), 1–25.
- Sólymos, P., 2010. dclone: data cloning in R. *R.J.* 2 (2), 29–37.
- Sutherst, R.W., Maywald, G.F., Bourne, A.S., 2007. Including species interactions in risk assessments for global change. *Global Change Biol.* 13, 1–17.
- Taylor, E.J., Morrison, J.E., Blockwell, S.J., Tarr, A., Pascoe, D., 1995. Effects of lindane on the predator-prey interaction between *Hydra oligactis* Pallas and *Daphnia magna* Strauss. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 29 (October (3)), 291–296.
- Thornton, A., Weinhart, T., Bokhove, O., Zhang, B., van der Sar, D.M., Kumar, K., Pisarenco, M., Rudnaya, M., Savcenco, V., Rademacher, J., Zijlstra, J., Szabelska, A., Zyprych, J., van der Schans, M., Timperio, V., Veerman, F., 2010. Modeling and Optimization of Algae Growth.
- Tierney, L., Rossini, A.J., Li, N., Sevcikova, H., 2013. Snow: Simple Network of Workstations. R package version 0.3-13.
- Triffault-Bouchet, G., Clément, B., Blake, G., 2005. Assessment of contaminated sediments with an indoor freshwater/sediment microcosm assay. *Environ. Toxicol. Chem.* 24 (9), 2243–2253.
- Turner, Andrew M., Bernot, Randall J., Boes, Christina M., 2000. Chemical cues modify species interactions: the ecological consequences of predator avoidance by freshwater snails. *Oikos* 88 (January (1)), 148–158.
- Vanoverbeke, J., 2008. Modeling individual and population dynamics in a consumer-resource system: behavior under food limitation and crowding and the effect on population cycling in *Daphnia*. *Ecol. Model.* 216 (September (3–4)), 385–401.
- Verrhiest, G., Clément, B., Blake, G., 2001. Single and combined effects of sediment-associated PAHs on three species of freshwater macroinvertebrates. *Ecotoxicology* 10 (December (6)), 363–372.
- Verrhiest, G.J., Cortes, S., Clément, B., Montuelle, B., 2002. Chemical and bacterial changes during laboratory conditioning of formulated and natural sediments. *Chemosphere* 46 (February (7)), 961–974.
- Villarroel, M.J., Ferrando, M.D., Sancho, E., Andreu, E., 1999. *Daphnia magna* feeding behavior after exposure to tetradifon and recovery from intoxication. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 44 (September (1)), 40–46.
- Von Bertalanffy, L., 1938. A quantitative theory of organic growth. *Hum. Biol.* 10, 181–213.
- Yang, J.S.i., Rasa, E., Tantayotai, P., Scow, K.M., Yuan, H.L., Hristova, K.R., 2011. Mathematical model of *Chlorella minutissima* UTEX2341 growth and lipid production under photoheterotrophic fermentation conditions. *Bioresour. Technol.* 102 (February (3)), 3077–3082.

4.3 Compléments sur le processus de broutage

L'expérimentation 12 regroupe en réalité cinq essais ayant pour objectif de préciser le processus de broutage des daphnies, en condition non contaminée. On cherche donc à déterminer plus précisément les paramètres impliqués dans le processus de broutage. Pour cela, le taux d'ingestion de daphnies de différentes tailles a été évalué pour toute une gamme de densités algales.

4.3.1 Protocole des essais de l'expérimentation 12

Le processus de broutage ne peut pas être dissocié du processus de croissance algale, ce qui rend difficile la quantification de l'ingestion réelle de cellules algales par les daphnies. Néanmoins, le protocole de ces essais a été conçu de manière à limiter la croissance algale : le milieu utilisé est un milieu microcosme non nutritif, l'éclairage est faible et la durée d'expérimentation est faible (24 h). Des béchers de 100 mL sont utilisés.

Des algues sont inoculées dans tous les béchers à partir d'une solution algale concentrée pour obtenir une gamme de quatre densités algales différentes. Pour chaque densité algale de la gamme, trois réplicats sont inoculés uniquement avec des algues et trois réplicats sont inoculés avec des algues et 10 daphnies, âgées de 1 à 7 jours suivant les essais. La densité algale dans chaque bécher est mesurée au début et à la fin de l'essai (après 24 h).

Les cinq essais diffèrent par la taille des daphnies utilisées. La taille des daphnies est mesurée au début et à la fin de l'essai. Pour chacun des essais, la taille moyenne des daphnies entre le début et la fin de l'essai est calculée. On obtient ainsi cinq tailles moyennes de daphnies (une par essai) qui sont les suivantes 1,93 ; 2,24 ; 2,37 ; 2,52 ; 2,76 mm.

a. Modèles utilisés

b. Calcul du taux d'ingestion par la formule de Gauld

Le taux d'ingestion, noté g (cells.jour⁻¹.daphnie⁻¹), est calculé pour chaque réplicat contenant des daphnies par la formule de Gauld [Gauld \(1951\)](#), en fonction du taux de filtration f (mL.jour⁻¹.daphnie⁻¹) et de la densité algale (cell.mL⁻¹) au début de l'essai, notée d_0 , et à la fin, notée d_t . La densité algale dans les réplicats sans daphnies au début de l'essai, notée d'_0 , et à la fin, notée d'_t , est utilisée pour corriger le taux d'ingestion en tenant compte de la croissance algale :

$$\begin{cases} g = f \times \sqrt{d_0 \times d_t} \\ f = \frac{V}{n \times t} \times (\ln d_0 - \ln d_t - \ln d'_0 - \ln d'_t) \end{cases} \quad (4.1)$$

avec V le volume du bécher en mL, n le nombre de daphnies présentes et t le temps en jour (ici $t = 1$). Avec les données de chaque essai, 12 taux d'ingestion ont été obtenus par ce calcul pour une taille moyenne de daphnie.

c. Modèles du taux d'ingestion en fonction de la taille

Deux modèles décrivant le taux d'ingestion en fonction de la taille ont été étudiés. Le premier modèle correspond aux Equations (3.9) et (3.10) présentées au chapitre 3 (Tableau 3.1). Le taux d'ingestion g est décrit par une fonction affine par morceaux :

$$g_1(t) = \begin{cases} f(t) \times \frac{N_1(t)}{V_1(0)} & \text{si } 0 < \frac{N_1(t)}{V_1(0)} \leq I_{lim} \\ f(t) \times I & \text{si } \frac{N_1(t)}{V_1(0)} > I_{lim} \end{cases} \quad (4.2)$$

et

$$g_2(t) = \begin{cases} f(t) \times \frac{N_2(t)}{V_2} & \text{if } 0 < \frac{N_2(t)}{V_2} \leq I_{lim} \\ f(t) \times I & \text{if } \frac{N_2(t)}{V_2} > I_{lim} \end{cases} \quad (4.3)$$

où I_{lim} (cell.ml⁻¹) est la densité algale au-dessus de laquelle une daphnie ne peut pas ingérer de cellules algales supplémentaires (*Incipient Limiting Level* en anglais).

Le taux de filtration, noté $f(t)$, est modélisé par une fonction puissance de la taille des daphnies :

$$f(t) = \alpha \times L(t)^\gamma \quad (4.4)$$

où α ($\text{mL.daphnie}^{-1}.\text{jour}^{-1}.\text{mm}^{-\gamma}$) et γ (sans dimension) sont les coefficients de régression.

Le second modèle correspond aux Equations (3.12) et (3.13) présentées au chapitre 3 (Tableau 3.1). Le taux d'ingestion est décrit par une fonction de Holling type II :

$$g_1(t) = \frac{\delta_2 \times L(t)^\gamma \times \frac{N_1(t)}{V_1(0)}}{\delta_3 + \frac{N_1(t)}{V_1(0)}} \quad (4.5)$$

et

$$g_2(t) = \frac{\delta_2 \times L(t)^\gamma \times \frac{N_2(t)}{V_2}}{\delta_3 + \frac{N_2(t)}{V_2}} \quad (4.6)$$

avec δ_2 ($\text{cell.daphnie}^{-1}.\text{jour}^{-1}.\text{mm}^{-\gamma}$) le taux d'ingestion maximum et δ_3 (cell.mL^{-1}) la densité algale pour laquelle le taux d'ingestion maximum est divisé par deux.

On peut supposer en première approche que le taux de filtration est en fait proportionnel au volume L^3 [Egloff and Palmer \(1971\)](#). Les auteurs cités ont trouvé des valeurs de γ proches de 2,7. L'estimation de la médiane de la distribution *a posteriori* de ce paramètre (3,27 [2,91;3,75]) obtenue avec les données sans sédiment appuie donc l'hypothèse d'un taux de filtration proportionnel au volume. Pour la suite de l'étude, j'ai donc choisi de fixer le paramètre γ à 3. Ce choix peut être discuté, mais il a une signification biologique cohérente et permet de réduire le nombre de paramètres à estimer indirectement liés aux données.

4.3.2 Simulations

Les paramètres de chacun des modèles (avec $\gamma = 3$) ont été estimés par inférence bayésienne avec les données de l'expérimentation 12. Le modèle a été ajusté sur les

données de taux d'ingestion, de densités algales et de taille moyenne des 5 essais simultanément, avec JAGS et rjags. Trois chaînes MCMC ont été effectuées et la convergence a été vérifiée avec le critère de Gelman. Environ 20000 itérations ont été nécessaires pour atteindre la convergence pour les deux modèles. Les DIC des modèles ont ensuite été calculés.

4.3.3 Résultats complémentaires et interprétation

Les DIC obtenus pour le modèle à seuil et le modèle de Holling type II sont de -43,3 et -131, respectivement. Le modèle de Holling type II s'avère donc le modèle le plus approprié pour décrire les données. On peut noter que lorsque le paramètre γ est estimé et non fixé, on obtient des DIC similaires pour les deux modèles, mais avec des valeurs estimées pour γ qui sont très éloignées des résultats de la littérature.

Les médianes et intervalles de crédibilité des deux paramètres de ce modèle δ_2 et δ_3 sont, en \log_{10} , 5,81 [5,74;5.90] et 5,93 [5,78;6,08], respectivement. La Figure 4.2 montre les données, le modèle simulé avec la valeur médiane des paramètres pour des densités algales jusqu'à 10^7 cell/mL. La Figure 4.3 est un zoom sur la zone des données en échelle \log_{10} , pour la plus grande et la plus petite taille de daphnie. Les données, le modèle simulé avec la valeur médiane des paramètres et la bande de crédibilité à 95% avec des densités algales jusqu'à 2.10^6 cell/mL y sont représentées. 98% des données sont comprises dans la bande de crédibilité à 95%.

Les taux d'ingestion varient fortement pour une même densité algale, ce qui peut provenir de l'utilisation de la taille moyenne des daphnies. Cette expérimentation renseigne sur l'allure du taux d'ingestion en fonction de la densité algale et pour différentes tailles de daphnies, mais les résultats, en particulier les estimations des paramètres sont difficilement extrapolables aux conditions microcosmes, notamment à cause de la courte durée de l'expérimentation et de la différence dans la taille des béchers utilisés.

Les contraintes expérimentales étant importantes, les données obtenues ne peuvent pas balayer le spectre des valeurs possibles pour les tailles de daphnie et les densités algales testées. En effet, les tailles de daphnies testées ici s'arrêtent à 2,76 mm, qui n'est pas la taille maximale d'une daphnie adulte (estimé à 3,32 mm), puisque qu'au-

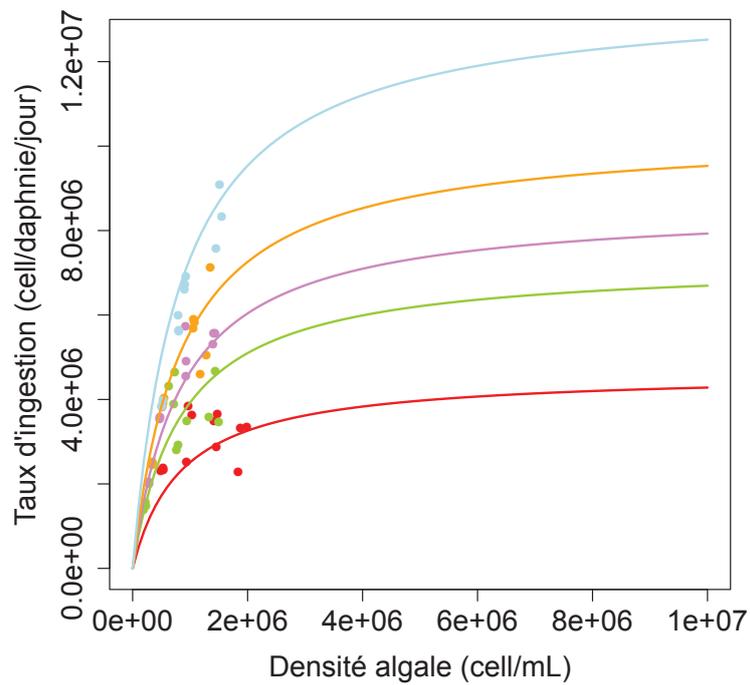


FIGURE 4.2 – Ajustement du modèle de Holling type II aux données de l'expérience 12. Les points représentent les données et les courbes continues le modèle simulé avec la valeur médiane des paramètres. Les couleurs correspondent aux différentes tailles moyennes de daphnies (en mm) : rouge :1,93 ; vert :2,24 ; orange :2,37 ; violet :2,52 ; bleu :2,76.

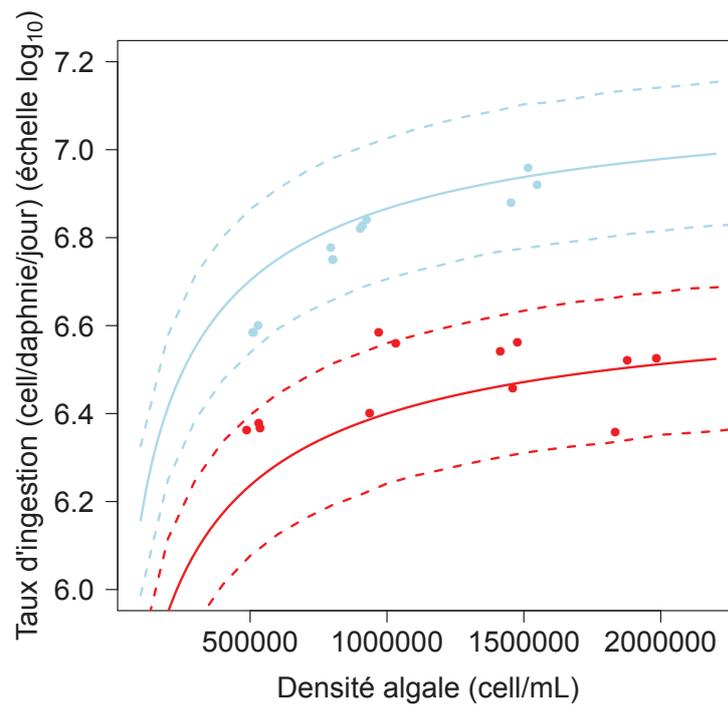


FIGURE 4.3 – Ajustement du modèle de Holling type II aux données de l'expérience 12, échelle \log_{10} .

Les points représentent les données, les courbes continues le modèle simulé avec la valeur médiane des paramètres et les courbes pointillées délimitent la bande de crédibilité à 95%. Les couleurs correspondent aux différentes tailles moyennes de daphnies (en mm) : rouge :1,93 et bleu :2,76.

delà les daphnies produisent des jeunes qui modifient les prélèvements d'algues. Les densités algales élevées n'ayant pas été testées, le plateau de la courbe de Holling type II n'est jamais atteint.

Ce type d'expérimentations reste essentiel pour appréhender certaines interactions qui sont indirectement liés aux données au sein du microcosme. Néanmoins, il semble difficile d'intégrer ces données dans un modèle plus large dont l'objectif serait de décrire le fonctionnement d'un système plus complexe et impliquant plus d'espèces, d'interactions et de processus, à une échelle de temps différente. On pourra en revanche comparer ces résultats à ceux obtenus avec les données en microcosme (voir chapitre 6).

4.4 Bilan

4.4.1 Principaux résultats

L'étude présentée dans ce chapitre montre d'une part la robustesse de la méthode d'estimation des paramètres et d'autre part la capacité du modèle à décrire le fonctionnement du microcosme partiel algues-daphnies dans diverses conditions abiotiques.

Le modèle permet de décrire la dynamique du système, interactions incluses. L'estimation des paramètres fournit des valeurs biologiquement réalistes, avec des intervalles de crédibilité relativement étroits pour la plupart des paramètres, suggérant que l'information contenue dans les données est suffisante et appropriée pour estimer ces paramètres.

La première étape de vérification (dite interne) montre l'intérêt de l'estimation des paramètres à l'aide de toutes les données disponibles prises simultanément. En effet, les estimations sont globalement comparables, mais plus précises, lorsque toutes les données sont utilisées par rapport à une estimation pour chaque processus. Le chapitre met ainsi en évidence l'intérêt de l'utilisation de l'inférence bayésienne pour l'estimation des paramètres avec des données de types différents (nombre de cellules algales par bécher, donnée de survie, données de croissance).

La seconde étape de vérification (dite externe) souligne la robustesse de la structure du modèle. Malgré l'augmentation de l'incertitude autour des paramètres et des données simulées due notamment à une quantité moindre de données expérimentales, le modèle reste capable de décrire la dynamique des deux espèces dans des conditions de sédiment différentes.

4.4.2 Limites

Ce chapitre permet également de soulever des difficultés inhérentes à la modélisation de la dynamique d'espèces en interaction. Tout d'abord, les paramètres d'interaction sont difficiles à estimer, puisque l'information n'est pas directement accessible dans les données. Grâce à des protocoles expérimentaux particuliers, certains processus peuvent être étudiés isolément (par exemple, la sédimentation algale en réalisant l'expérimentation à l'obscurité). Cependant, ce n'est pas le cas pour les processus d'interaction, bien que certains protocoles permettent d'affiner la compréhension des interactions, comme le montrent les résultats d'inférence obtenus avec les données de l'expérimentation 9 (l'utilisation de ces données sera développée dans le chapitre 6). Les conditions sédimentaires du microcosme ont un impact non négligeable sur la dynamique des espèces, que ce soit par voie chimique (comme le montre l'effet du sédiment d'Aiguebelette sur la croissance algale) ou physique (la proportion d'algues disponibles pour le broutage des daphnies varie avec la granulométrie du sédiment). Ceci, ajouté au développement microbien observé à la surface du sédiment, nous a encouragé à opter pour des expérimentations sans sédiment dans la suite de l'étude.

Cette première étape pose ainsi les jalons de la méthode qui sera utilisée dans les chapitres suivants : 1) la structure globale du modèle sera conservée, 2) des expérimentations en conditions particulières seront menées pour affiner les connaissances pour certains processus et 3) les paramètres seront estimés simultanément en utilisant toutes les données disponibles, lorsqu'elles sont issues d'expérimentations en conditions similaires (sédiment et taille des béchers).

L'interaction algues-lentilles en présence de contaminant

Sommaire

5.1	Contexte	150
5.1.1	Expérimentations et données utilisées	150
5.1.2	Modèle et équations	153
5.1.3	Distributions <i>a priori</i>	153
5.1.4	Analyse du modèle	154
5.1.5	Annexes	154
5.2	Article soumis à <i>Ecotoxicology and Environmental Safety</i>	155
5.3	Compléments à l'article	183
5.3.1	Détermination des distributions <i>a priori</i>	183
5.3.2	Cas particulier de l'expérimentation 8	187
5.3.3	Comparaison des différents modèles de compétition interspécifique	189
5.4	Bilan	191
5.4.1	Principaux résultats	191
5.4.2	Limites	192

5.1 Contexte

Ce chapitre porte sur la modélisation du microcosme partiel constitué des algues et des lentilles. Comme l'interaction entre ces deux espèces s'est révélée plus simple à décrire que l'interaction algues-daphnies, le fonctionnement du microcosme partiel en condition contaminée a aussi été étudié. Ce chapitre a donc pour objectifs de décrire la dynamique du sous-système algues-lentilles ainsi que les effets du cadmium

sur le fonctionnement de ce microcosme partiel. Pour cela, plusieurs modèles emboîtés traduisant différentes hypothèses sur l'action du cadmium ont été comparés. Les hypothèses sous-jacentes au modèle retenu sont discutées.

Cette partie fait l'objet d'un article intitulé "*Modelling algae-duckweed interaction under chemical pressure within a laboratory microcosm*" publié dans *Ecotoxicology and Environmental Safety*.

5.1.1 Expérimentations et données utilisées

Pour estimer les paramètres des modèles décrivant la dynamique du microcosme algues-lentilles, des données issues de plusieurs types d'expérimentations ont été utilisées. Les données en condition non contaminée sont issues des expérimentations 3 (données algues seules uniquement), 5 (algues, lentilles, isolées et ensemble) et 11 (algues seules remises en suspension dans la colonne d'eau) (Tableau 2.1). Les données en condition contaminée sont issues des expérimentations 7 (algues, lentilles, isolées et ensemble, cadmium jusqu'à 50 $\mu\text{g/L}$) et 8 (algues, lentilles, isolées et ensemble, cadmium jusqu'à 10 $\mu\text{g/L}$) (Tableau 2.1). Ces données sont schématisées sur la Figure 5.1.

Les données de l'expérimentation 4 (algues et lentilles avec sédiment d'Aiguebelette) ont été utilisées pour définir les distributions *a priori* des paramètres de compétition interspécifique. Les données des expérimentations 13 (algues seules avec cadmium) et 6 (lentilles seules avec cadmium) ont été utilisées pour définir les distributions *a priori* des paramètres des fonctions de stress sur les taux de croissance des deux espèces. Ces données (expérimentations 4, 6 et 13) n'ont donc pas été utilisées pour réaliser l'inférence des paramètres du modèle (voir section 5.3.1).

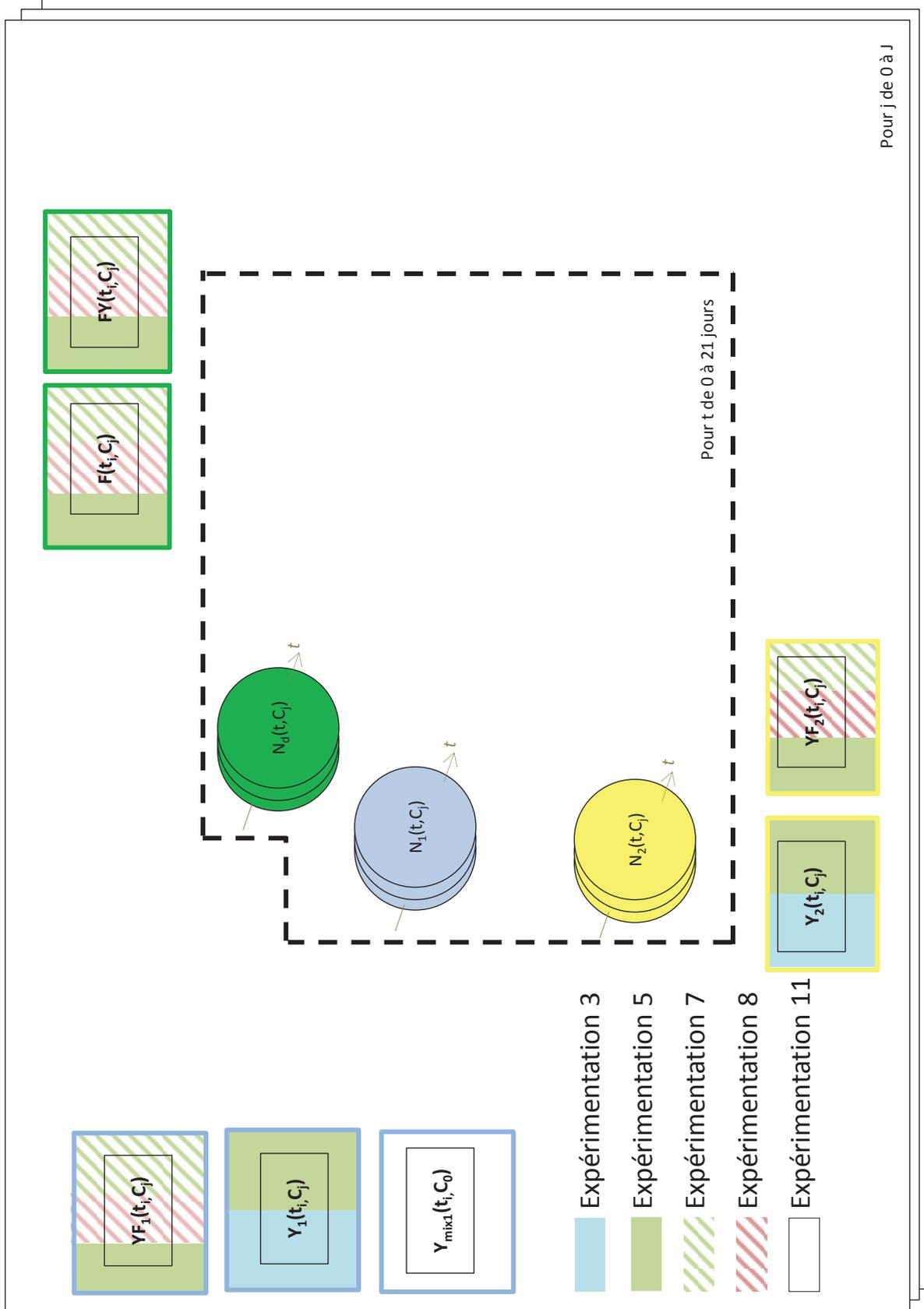


FIGURE 5.1 – Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres des modèles du chapitre 5 (hors compléments).

5.1.2 Modèle et équations

Les processus modélisés dans cette partie sont les suivants : la croissance et la sédimentation algale, la croissance des lentilles, la compétition interspécifique entre algues et lentilles et les effets du cadmium sur les différents paramètres affectés (taux de croissance intrinsèque des deux espèces et paramètre d'intensité de la compétition des deux espèces).

La partie déterministe du modèle se compose des Equations (3.17a,b,c) et (3.16a,b,c,d) (Tableau 3.1) avec $D_1(t, C_j) = 0$. La partie stochastique du modèle liant les variables aux données se compose des équations (3.18a,b,d,e,f) et (3.19a,b) (Tableau 3.2). Le modèle algues-lentilles comporte au total 18 paramètres à estimer. Notons que dans l'article qui suit, k est utilisé comme indice de la concentration en cadmium, contrairement au chapitre 3 où il était noté j .

5.1.3 Distributions *a priori*

Dans ce chapitre, les distributions *a priori* sur les paramètres relatifs à la croissance et à la sédimentation algales sont les mêmes que celles utilisées dans le chapitre 4. En ce qui concerne les paramètres d'effet du cadmium sur la croissance des deux espèces ainsi que les paramètres d'interaction, les résultats d'expérimentations préliminaires ont été utilisés pour déterminer les distributions *a priori*. Ces résultats sont détaillés en complément de l'article, section 5.3.1. Pour les autres paramètres d'effet du cadmium (sur les paramètres de compétition), les distributions *a priori* utilisées sont vagues puisque très peu d'information est disponible sur ces paramètres.

5.1.4 Analyse du modèle

Plusieurs analyses ont été effectuées dans ce chapitre. Tout d'abord, des hypothèses sur la compétition interspécifique (compétition bilatérale ou unilatérale) et sur les effets du cadmium sur cette compétition (présence ou absence d'effet du cadmium sur les paramètres de compétition) ont été testées. Pour cela, des modèles emboîtés traduisant les différentes hypothèses ont été comparés à l'aide du DIC. Les distributions *a posteriori* des paramètres obtenues avec chacun des modèles ont aussi été compa-

rées.

Les fonctions de stress log-logistique choisies ont été validées par une seconde analyse. Ainsi, le modèle a été réécrit sans fonction de stress. Les paramètres ont alors été estimés pour chacune des concentrations testées, indépendamment les unes des autres. Les valeurs estimées de chaque paramètre pour chaque concentration ont ensuite été comparées aux valeurs estimées *via* les fonctions de stress.

Pour évaluer l'impact de la compétition interspécifique sur la dynamique de population des espèces, des indicateurs basés sur le rapport entre le nombre d'individus seuls et en présence de l'autre espèce ont été calculés. De même, pour évaluer l'impact des effets du cadmium sur les deux espèces et sur leur interaction, d'autres indicateurs impliquant le nombre d'individus de chaque espèce en condition témoin ou en condition contaminée ont été calculés.

5.1.5 Annexes

Dans l'article qui suit, il est fait référence à un *Appendix*. Ce matériel supplémentaire suit directement l'article.

5.2 Article publié dans *Ecotoxicology and Environmental Safety*



Modelling algae–duckweed interaction under chemical pressure within a laboratory microcosm



Dominique Lamonica^{a,b}, Bernard Clément^a, Sandrine Charles^{b,c}, Christelle Lopes^{b,*}

^a Université de Lyon, F-69000, Lyon; Université Lyon 1; ENTPE; CNRS, UMR 5023, Laboratoire d'Ecologie des Hydrosystèmes Naturels et Anthropisés; 3, rue Maurice Audin, 69518 Vaulx-en-Velin, France

^b Université de Lyon, F-69000, Lyon; Université Lyon 1; CNRS, UMR 5558, Laboratoire de Biométrie et Biologie Evolutive, F-69622, Villeurbanne, France

^c Institut Universitaire de France, 103, bd Saint-Michel, 75005 Paris, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 4 November 2015

Received in revised form

3 February 2016

Accepted 4 February 2016

Available online 24 February 2016

Keywords:

Bayesian inference

Interspecific competition

Model-guided experiments

Lemna minor

Pseudokirchneriella subcapitata

Cadmium

ABSTRACT

Contaminant effects on species are generally assessed with single-species bioassays. As a consequence, interactions between species that occur in ecosystems are not taken into account. To investigate the effects of contaminants on interacting species dynamics, our study describes the functioning of a 2-L laboratory microcosm with two species, the duckweed *Lemna minor* and the microalgae *Pseudokirchneriella subcapitata*, exposed to cadmium contamination. We modelled the dynamics of both species and their interactions using a mechanistic model based on coupled ordinary differential equations. The main processes occurring in this two-species microcosm were thus formalised, including growth and settling of algae, growth of duckweeds, interspecific competition between the two species and cadmium effects. We estimated model parameters by Bayesian inference, using simultaneously all the data issued from multiple laboratory experiments specifically conducted for this study. Cadmium concentrations ranged between 0 and 50 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. For all parameters of our model, we obtained biologically realistic values and reasonable uncertainties. Only duckweed dynamics was affected by interspecific competition, while algal dynamics was not impaired. Growth rate of both species decreased with cadmium concentration, as well as competition intensity showing that the interspecific competition pressure on duckweed decreased with cadmium concentration. This innovative combination of mechanistic modelling and model-guided experiments was successful to understand the algae–duckweed microcosm functioning without and with contaminant. This approach appears promising to include interactions between species when studying contaminant effects on ecosystem functioning.

© 2016 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

Interspecies interactions structure ecosystems and condition their own functioning to provide ecosystemic services. Networks that connect species rely on different types of interspecies interactions, such as trophic relationship, competition or mutualism (Jonsson et al., 2006). Many studies have investigated competition between various types of species and within various freshwater ecosystem contexts: for instance competition between macrophytes under different nutrient conditions (Szabo et al., 2010), effects of habitat and season on competition between fish (Persson, 1987), allelopathic competition between microalgae (Fergola et al., 2007) or competition between freshwater turtles under low food conditions (Aresco, 2010).

Ecotoxicological studies generally focus on single-species tests where interactions are absent or limited. Considering the importance

of species interactions in ecosystem functioning, it appears necessary to assess ecotoxicological risks taking into account species interactions (Cairns, 1984; De Laender et al., 2008; Preston, 2002). Some studies have explored the impacts of chemical stress factors on trophic relationships, for example studies of effects of lindane (Taylor et al., 1995) or cadmium (Ham et al., 1995) on prey–predator interaction showed both direct and indirect effects, such as reduction in predation rate. By examining the effects of pesticides on interspecific competition, Foit et al. (2012) showed that competitive interactions impaired the recovery of the most sensitive species, suggesting that the recovery duration of the community structure might be increased compared with the recovery observed in monospecific bioassays. Likewise, Martinez et al. (2012) showed changes in the contramensal interaction between two nematode species exposed to cadmium and a higher population fitness of one of the species due to the interaction.

When studying ecosystems under disturbed conditions, impacts of stress factor on interactions have to be taken into account, as well as effects on species themselves. Indeed, due to the functional

* Corresponding author.

E-mail address: dominique.lamonica@entpe.fr (C. Lopes).

interactions occurring in ecosystems, the emerging observations may not necessarily be the expected consequences of a given stress factor. Species are subjected to two types of effects: direct effects on life history traits and indirect effects due to species interactions. These two types of effects should be differentiated to interpret correctly observations. Consequently, the first step in studying the functioning of an ecosystem is to describe and understand the underlying processes.

Laboratory microcosms are adequate experimental devices to study species interaction and contaminant effects. They are particularly useful to investigate and check hypotheses concerning indirect effects and their mechanisms (Fleeger et al., 2003). They allow prediction of the states of real aquatic ecosystems (Benton et al., 2007; Cadotte et al., 2005). They are also realistic and reproducible (Daam and Van den Brink, 2007). Moreover, many ecological and biochemical interactions and processes can occur within microcosms that may involve multiple species and abiotic compartments, as water and/or sediment. At least, microcosms allow addressing various issues in ecotoxicology. In particular, they have been used to examine the functional responses of communities to chemical stress factors (Bone et al., 2012; Brinke et al., 2010; Clément and Zaid, 2004; Clément et al., 2005; Faupel et al., 2012).

Today, modelling is recognised as the most useful tool to formalise processes, including interactions, that take place in ecosystem functioning. More specifically, modelling is the ideal way to test different assumptions on this functioning, avoiding heavy blind experiments. Modelling contaminant effects is commonly used to assess ecotoxicological risks on species at different levels, from individual (Jager and Zimmer, 2012) to population (Billoir et al., 2007; Lopes et al., 2005) and community (Park et al., 2008a; Swartzman et al., 1989).

We aimed here to interpret the effects of a given chemical on the population dynamics of two competing primary producers, taking into account the underlying interaction process. For that purpose, we modelled the functioning of a reduced version of the original microcosm developed by Clément and Cadier (1998), firstly in undisturbed conditions and secondly, under exposure to the contaminant. We chose to focus on two particular species, microalgae (*Pseudokirchneriella subcapitata*) and duckweeds (*Lemna minor*), linked by an interspecific competition for resources. Coupled with the model building, we also designed experiments specifically dedicated to our purpose.

We first describe how laboratory microcosm experiments of the duckweed–algae system were conducted. Then, we describe the development of the mechanistic model based on the one developed in Lamonica et al. (2016) using the Overview, Design concepts and Details (ODD) protocol (Grimm et al., 2010). We then present how parameters were estimated using Bayesian inference, the model comparison method we used and the verification of the effect model. Finally, we discuss our results and propose some interpretations of the model and perspectives.

2. Experiments

2.1. Microcosm preparation

Laboratory experiments were conducted at ENTPE (Vaulx-en-Velin, France). Microcosms were identically prepared for all experiments (Lamonica et al., 2016). Algae and duckweeds were cultured at the laboratory according to internal protocols (Clément et al., 2014). The algal density in the water column was measured every two to three days (Lamonica et al., 2016). The duckweed fronds were counted every two to three days.

Five different experiments were conducted specifically to collect data with the aim of estimating our model parameters. Three

different experiments were conducted without contaminant and two different experiments were conducted with contaminant.

2.2. Experiments without contaminant

The purpose of these three experiments was to study the interacting dynamics of algae and duckweeds without contaminant.

2.2.1. Experiments 1 and 2: algae alone

These two experiments aimed at studying algae dynamics without duckweeds. In Experiment 1, we studied algae dynamics with settling, by measuring over the course of time algal densities in the water column and at the bottom of the beaker. In Experiment 2, we studied algae dynamics without settling by stirring the water column in some of the beakers (so that settling did not occur in these beakers).

Experiment 1 involved 10 beakers and lasted 19 days. At the start of the experiment (day 0), $2 \cdot 10^4$ cells/mL of *P. subcapitata* were introduced into all the beakers. Algal density in the water column was measured as described in Section 2.1. Total algal density was measured once a week: the water column of five beakers on day 7 and of two beakers on day 14 was thoroughly mixed and total algal density was measured. Then, the algal density at the bottom of the beaker was deduced by subtracting the algal density in the water column from the total algal density. As a consequence of total algal density measurement, the corresponding beakers had to be sacrificed.

Experiment 2 involved 18 beakers and lasted 13 days. At the start of the experiment (day 0), $2 \cdot 10^4$ cells/mL of *P. subcapitata* were introduced into all the beakers. For the 18 beakers, the water column was mixed on different days (day 0 for three beakers, day 6 and day 8 for five beakers each time, day 10 for two beakers, because we chose to have more replicates at days 6 and 8 when the increase of algal cells is the highest; the last three beakers corresponded to the controls) and throughout the experiment in order to measure the total algal density without settling. Before the water column was mixed, algal density in the water column was measured as described in Section 2.1.

From Experiments 1 and 2, we obtained three types of data without contaminant: (1) the number of algal cells in the water column over time without duckweeds, (2) the number of algal cells at the bottom of the beaker over time without duckweeds, (3) the number of algal cells in the water column over time without duckweeds and without settling.

2.2.2. Experiment 3: algae and duckweeds

Experiment 3 aimed to study algae and duckweed interaction dynamics, involving algal settling. It involved 33 beakers and lasted 21 days. At the start of the experiment (day 0), eight fronds of duckweeds were introduced into 30 beakers and $2 \cdot 10^4$ cells/mL of *P. subcapitata* were introduced into half of these beakers, as well as in the three beakers that did not contain duckweeds. Total algal density of the 15 beakers that contained duckweeds and algae were measured at day 7 and day 14 as described above.

From Experiment 3, we obtained five types of data without contaminant: (1) the number of algal cells in the water column over time without duckweeds, (2) the number of algal cells in the water column over time with duckweeds, (3) the number of algal cells at the bottom of the beaker over time with duckweeds, (4) the number of duckweed fronds over time without algae and (5) the number of duckweed fronds over time with algae.

2.3. Experiments with contaminant

The purpose of these experiments was to study the effect a contaminant, the cadmium, on algae and duckweed dynamics.

Two different cadmium concentration ranges were used, one for each experiment. The cadmium solution that was introduced into the beakers for Experiments 4 and 5 was prepared from $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Cadmium was dissolved in the water as Cd^{2+} . The first concentration range (0, 10, 20, 35 and 50 $\mu\text{g/L}$) was chosen in order to observe effects on both species and the second concentration range (0, 2.5, 5, 7.5 and 10 $\mu\text{g/L}$) was chosen in the perspective of introducing a third species, *Daphnia magna*, which has a higher sensitivity to cadmium. Both experiments were conducted using a total of 30 beakers for each experiment: 15 of them contained only duckweeds and 15 of them contained algae and duckweeds.

2.3.1. Experiment 4

We tested five different cadmium concentrations (0, 10, 20, 35 and 50 $\mu\text{g/L}$) in triplicate. The duration of this experiment was 14 days. The duration of Experiment 4 was reduced of 14 days compared Experiments 1, 3 and 5, based on the results provided by Experiments 1–3 that did not show great variations in the species dynamics from day 14 to day 21. At the start of the experiment (day 0), $2 \cdot 10^4$ cells/mL of *P. subcapitata* were introduced into half of the beakers and eight fronds of duckweeds were introduced into all the beakers. Three additional control beakers were inoculated with algae alone.

2.3.2. Experiment 5

We tested five different cadmium concentrations (0, 2.5, 5, 7.5 and 10 $\mu\text{g/L}$) in triplicate. The duration of this experiment was 21 days. Conversely to Experiment 4, we preferred a duration of 21 days because we expected late variations in species dynamics due to reduced concentration range. At the start of the experiment (day 0), $2 \cdot 10^4$ cells/mL of *P. subcapitata* were introduced into half of the beakers and eight fronds of duckweed were introduced into all the beakers.

From Experiments 4 and 5, we obtained three types of data with cadmium: (1) the number of algal cells in the water column over time with duckweeds, (2) the number of duckweed fronds over time without algae and (3) the number of duckweed fronds over time with algae.

We used measured concentrations instead of nominal ones. We checked that cadmium concentration remained stable in the microcosm during all the experiments. For that purpose, we measured dissolved cadmium concentrations as described by Clément et al. (2014) at days 2, 7, 14 (and 21 for Experiment 5) in each microcosm. We then calculated the arithmetic mean of all the measurements to obtain the following values: 0, 11.1, 20.2, 35.5 and 51.1 $\mu\text{g/L}$ for Experiment 4 and 0, 2.25, 4.50, 6.88 and 9.09 $\mu\text{g/L}$ for Experiment 5. In total for Experiments 4 and 5, we thus obtained nine concentrations (0, 2.25, 4.50, 6.88, 9.09, 11.1, 20.2, 35.5 and 51.1 $\mu\text{g/L}$) denoted by C_k , $k \in [0, 8]$. The concentrations in Experiments 1–3 and in the controls of Experiments 4 and 5 (which is equal to 0) is denoted by C_0 and corresponds to index $k=0$.

3. Dynamic modelling

The description of the model follows the Overview, Design concepts and Details (ODD) protocol originally used for describing individual and agent-based models (Grimm et al., 2010) but adapted here for a dynamic model based on Ordinary Differential Equations (ODE). The ODD protocol consists of seven elements. The first three elements provide an overview; the fourth element explains general concepts underlying the model's design and the remaining three elements provide further details.

3.1. Purpose

The model developed here describes the dynamics of duckweeds and algae under the microcosm conditions described in Section 2. In particular, it aims at (i) comparing the species dynamics in isolation and together in order to highlight the interactions between the two species; and (ii) describing the effects of cadmium on the different processes involved in the microcosm functioning. We first present the model of both species' dynamics without contaminant, then we show how we integrate cadmium effects in the model.

3.2. Entities, state variables, and scales

We model both duckweed and algal population dynamics. The model involves three state variables. The two first ones refer to the numbers of algal cells per beaker in the two compartments of the microcosm at time t and cadmium concentration C_k : the suspended algae in the water column (Compartment 1), denoted by $N_1(t, C_k)$, and the settled algae at the bottom of the beaker (Compartment 2), denoted by $N_2(t, C_k)$. The other state variable is the number of duckweed fronds per beaker at time t and cadmium concentration C_k , denoted by $N_d(t, C_k)$. The model is run for 21 days, corresponding to the duration of the longest experiment.

3.3. Process overview and scheduling

Five processes are modelled with a continuous time scale, using ordinary differential equations. Two processes are related to intrinsic algal dynamics: settling of suspended algae and growth of both suspended and settled algae. One process, duckweed growth, is related to intrinsic duckweed dynamics. One process concerns the algae–duckweed interaction of interspecific competition. The last modelled process is related to the effects of cadmium on different parameters. An overall graphical representation of the implemented model is given in Fig. 1.

3.4. Design concepts

3.4.1. Basic principles

The assumptions we make are based on the experimental design described in Section 2. As mentioned in Lamonica et al. (2016), we assume that algae are uniformly distributed in the water column and at the bottom of the beaker at each time step and that the settling speed of suspended algae is constant throughout the water column. Therefore, the water volume occupied by the suspended algae is supposed to decrease at the same speed as algal settling. We assume that algae and duckweeds are competing only for nutrients in the medium. We assume that settled algae are too distant from duckweeds to interact with them, so the interspecific competition only involves suspended algae.

We assume that cadmium affects the growth rates of both species, as well as competition intensity parameters. It is supposed to affect neither the carrying capacities of both species nor the algal settling rate.

3.4.2. Emergence

Algal and duckweed dynamics emerge both from their intrinsic dynamics (growth and settling for algae, growth for duckweeds) and from the interspecific competition between the two species. With cadmium, both dynamics also emerge from the impact of cadmium on growth and on the interaction.

3.4.3. Interaction

Intraspecific competition between algal cells and between duckweed colonies are taken into account in their respective

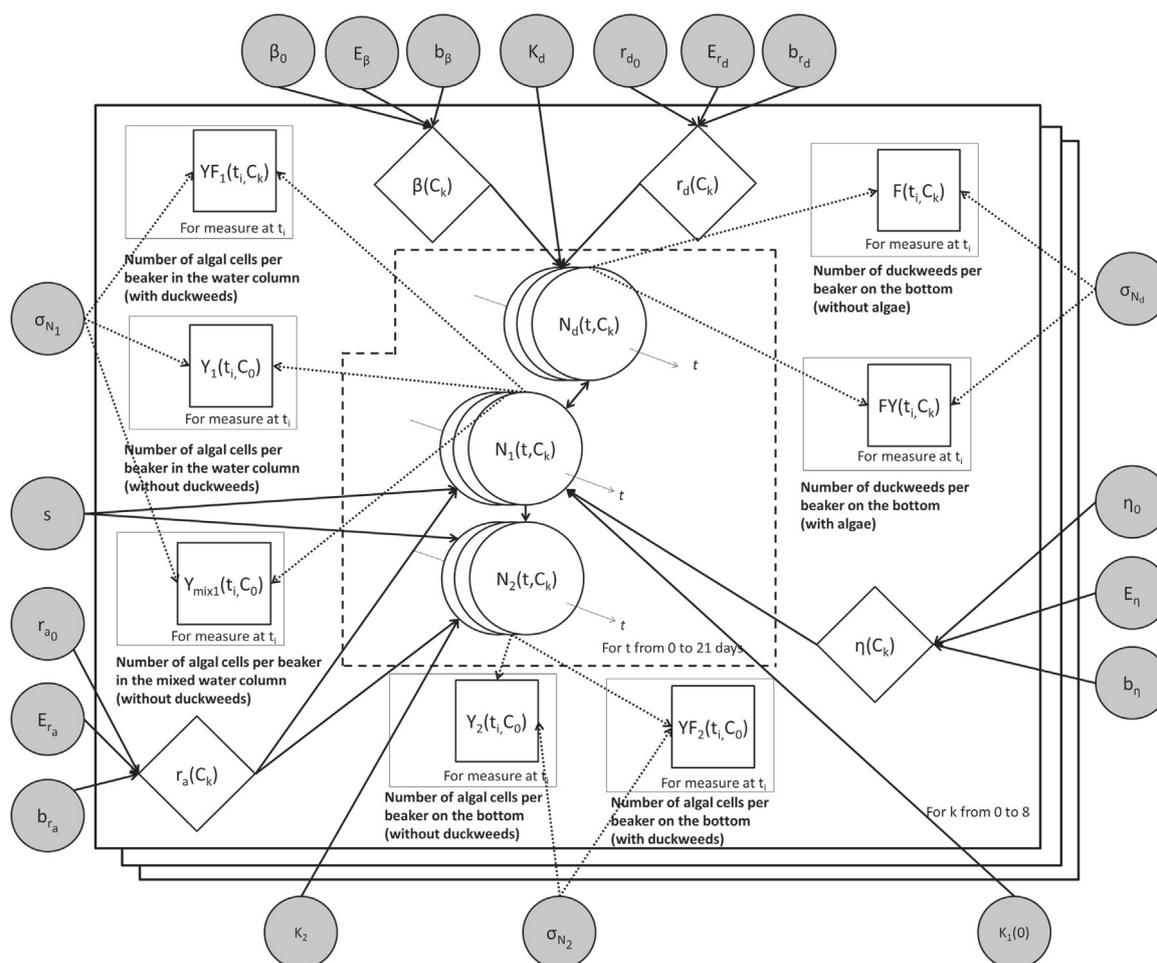


Fig. 1. Overall graphical representation of the model. Data are symbolised by rectangles, state variables by large circles, intermediate variables by diamonds and parameters by little grey circles. Solid arrows indicate deterministic links, while dashed arrows indicate stochastic links. Thin arrows underline the time-dependencies due to the discretisation process. The dashed square indicates the variable time dependency. Sheets indicate the cadmium concentration hierarchy. Data are detailed in the text (Section 2. Experiments). All links are detailed in the text (Section 3. Dynamic modelling).

logistic growth models. Algae and duckweeds interact via an interspecific competition process, described with a Lotka–Volterra type I model.

3.4.4. Stochasticity

We use stochasticity to describe variability on state variables, which sum up both uncertainties and variability sources within the processes. We suppose a normal distribution on the decimal logarithm of the number of algal cells per beaker in each compartment (in the water column and at the bottom of the beaker) (Roger and Reynaud, 1978) and on the decimal logarithm of the number of duckweed fronds.

3.5. Initialisation

The initial values of the state variables for the number of algal cells per beaker in the water column and at the bottom of the beaker are 4×10^7 and 0, respectively, because algae are inoculated in the water column only. To obtain the number of algal cells per beaker in the water column, we multiplied algal concentration by the beaker volume, which is 2×10^3 mL. The initial algal concentration of 2×10^4 cell/mL thus corresponded to an initial number of algal cells per beaker of 4×10^7 cells. The initial number of duckweed fronds is 8. We use measured cadmium concentrations 0, 2.25, 4.50, 6.88, 9.09, 11.1, 20.2, 35.5 and 51.1 $\mu\text{g/L}$.

3.6. Input data

The model does not use input data to represent time-varying environmental processes. Laboratory conditions are controlled and supposed to be constant over time.

3.7. Submodels

All information on parameters and variables involved in the model are gathered together in Table 1. Details about parameter estimation are given in Section 4.

The deterministic part of algal dynamics in both compartments and of duckweed dynamics over time t (in days) are described with three coupled ODE.

3.7.1. Algae processes

We modelled the algae dynamics as described in Lamonica et al. (2016), but as there is no sediment in the new experiments of this paper we assume that growth rates in the water column and at the bottom of the beaker are identical.

3.7.2. Duckweed process

Growth: To account for space and nutrient limitations in the microcosm and to consider intraspecific competition, duckweed growth was described by a logistic model.

Table 1
Variables and parameters of the model.

Symbol	Definition	Unit	Prior distribution* or value	Sources**	2.5, 50, 97.5% posterior quantiles
$N_1(t, C_k)$	Number of algal cells per beaker in the water column at time t and cadmium concentration C_k	# of cells per beaker			
$N_2(t, C_k)$	Number of algal cells per beaker at the bottom at time t and cadmium concentration C_k	# of cells per beaker			
$V_1(0)$	Volume of the water column at $t=0$	mL	2000		
r_{a0}	Intrinsic algal growth rate in the control	day ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	[1]	0.57 0.59 0.60
$K_1(0)$	Carrying capacity in the water column for algae at $t=0$	# of cells per beaker	$\log_{10}(K_1(0)) \sim \mathcal{U}(8,11)$	[1]	9.51 9.57 9.60
K_2	Carrying capacity at the bottom for algae	# of cells per beaker	$\log_{10}(K_2) \sim \mathcal{U}(8,11)$	[1]	9.16 9.26 9.36
s	Settling rate	day ⁻¹	$\log_{10}(s) \sim \mathcal{U}(-2,0)$	[1]	-1.25 -1.19 -1.13
$N_d(t, C_k)$	Number of duckweed fronds per beaker at time t and cadmium concentration C_k	# of fronds per beaker			
r_{d0}	Intrinsic duckweed growth rate in the control	day ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	[2]	0.238 0.245 0.252
K_d	Carrying capacity for duckweeds at $t=0$	# of fronds per beaker	$\log_{10}(K_d) \sim \mathcal{U}(0,3)$	[2]	2.35 2.39 2.43
η_0	Competition intensity of duckweeds on algae in the control	# of fronds per beaker ⁻¹ , day ⁻¹	$\log_{10}(\eta_0) \sim \mathcal{U}(-9,1)$	Vague	
β_0	Competition intensity of algae on duckweeds in the control	# of cells per beaker ⁻¹ , day ⁻¹	$\log_{10}(\beta_0) \sim \mathcal{U}(-11,-9)$	[2]	-9.99 -9.95 -9.92
E_{ra}	The cadmium concentration at which r_{a0} is reduced by 50%	μg.L ⁻¹	$\log_{10}(E_{ra}) \sim \mathcal{N}(1.78,0.1)$	[3]	1.57 1.60 1.62
b_{ra}	Curvature coefficient	-	$\log_{10}(b_{ra}) \sim \mathcal{N}(0.24,0.1)$	[3]	0.44 0.52 0.59
E_{rd}	The cadmium concentration at which r_{d0} is reduced by 50%	μg.L ⁻¹	$\log_{10}(E_{rd}) \sim \mathcal{N}(2.44,0.2)$	[4]	2.01 2.31 2.66
b_{rd}	Curvature coefficient	-	$\log_{10}(b_{rd}) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	Vague	-0.98 -0.86 -0.74
E_{η}	The cadmium concentration at which η_0 is reduced by 50%	μg.L ⁻¹	$\log_{10}(E_{\eta}) \sim \mathcal{U}(-1,4)$	Vague	
b_{η}	Curvature coefficient	-	$\log_{10}(b_{\eta}) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	Vague	
E_{β}	The cadmium concentration at which β_0 is reduced by 50 %	μg.L ⁻¹	$\log_{10}(E_{\beta}) \sim \mathcal{U}(-1,4)$	Vague	-0.96 -0.21 3.12
b_{β}	Curvature coefficient	-	$\log_{10}(b_{\beta}) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	Vague	-2.88 -1.21 -0.69
σ_{N_1}	Standard deviation of \log_{10} -number of algal cells per beaker in the water column	# of cells per beaker	$\mathcal{U}(0,5)$	Vague	0.16 0.17 0.18
σ_{N_2}	Standard deviation of \log_{10} -number of algal cells per beaker at the bottom	# of cells per beaker	$\mathcal{U}(0,5)$	Vague	0.15 0.20 0.27
σ_{N_d}	Standard deviation of \log_{10} -number of duckweeds fronds per beaker	# of fronds per beaker	$\mathcal{U}(0,2)$	Vague	0.081 0.086 0.092

* Prior distribution: N stands for the normal law, \mathcal{U} stands for the uniform law.

** Sources: [1] Lamonica et al. 2016, [2] Preliminary experiment with duckweeds, [3] Preliminary experiment with algae and cadmium, [4] Preliminary experiment with duckweeds and cadmium.

Table 2
Data.

Symbol	Definition	Stochastic links with variable
$Y_1(t_i, C_0)$	The observed number of algal cells in the water column without duckweeds at time t_i and cadmium concentration C_0	$\log_{10} Y_1(t_i, C_0) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_1(t_i, C_0), \sigma_{N_1})$ with $N_d = 0$
$Y_2(t_i, C_0)$	The observed number of algal cells at the bottom of the beaker over time without duckweeds at time t_i and cadmium concentration C_0	$\log_{10} Y_2(t_i, C_0) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_2(t_i, C_0), \sigma_{N_2})$ with $N_d = 0$
$YF_2(t_i, C_0)$	The observed number of algal cells at the bottom of the beaker over time with duckweeds at time t_i and cadmium concentration C_0	$\log_{10} Y F_2(t_i, C_0) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_2(t_i, C_0), \sigma_{N_2})$
$Y\text{ mix}_1(t_i, C_0)$	The observed number of algal cells in the water column without duckweeds and without settling at time t_i and cadmium concentration C_0	$\log_{10} Y\text{ mix}_1(t_i, C_0) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_1(t_i, C_0), \sigma_{N_1})$ with $N_d = 0, N_2 = 0$ and $s = 0$
$F(t_i, C_k)$	The observed number of duckweed fronds without algae per beaker at time t_i and cadmium concentration C_k	$\log_{10} F(t_i, C_k) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_d(t_i, C_k), \sigma_{N_d})$ with $N_1 = 0$ and $N_2 = 0$
$FY(t_i, C_k)$	The observed number of duckweed fronds with algae per beaker at time t_i and cadmium concentration C_k	$\log_{10} F Y(t_i, C_k) \sim \mathcal{N}(\log_{10} N_d(t_i, C_k), \sigma_{N_d})$

Index i refers to the measurement times, $t(i)$ corresponds to the i th measurement time. Index k refers to the tested cadmium concentrations. \mathcal{N} stands for the normal law.

3.7.3. Interspecific competition process

We equate the interspecific competition process with a Lotka–Volterra type I model between suspended algae and duckweeds.

3.7.4. Cadmium effects

We suppose that only growth rates and parameters of competition intensity are affected by cadmium. We choose a three-parameter log-logistic function to describe the effect of cadmium at concentration C_k on each affected parameter p :

$$p(C) = \frac{p_0}{1 + (\frac{C}{E_p})^{b_p}} \tag{1}$$

where p_0 is the value of parameter p in the control, E_p is the cadmium concentration at which $p(C) = \frac{p_0}{2}$, which is equivalent to an EC_{50} , and b_p is the curvature coefficient of the log-logistic function.

3.7.5. Complete model

Finally, the deterministic part of the model describing the functioning of the whole microcosm is expressed as follows:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1(t, C_k)}{dt} &= \frac{r_{a0}}{1 + (\frac{C_k}{E_{r_a}})^{b_{r_a}}} N_1(t, C_k) (1 - \frac{N_1(t, C_k)}{K_1(0) \exp(-st)}) \\ &\quad - sN_1(t, C_k) - \frac{\eta_0}{1 + (\frac{C_k}{E_\eta})^{b_\eta}} N_1(t, C_k) N_d(t, C_k) \\ \frac{dN_2(t, C_k)}{dt} &= \frac{r_{a0}}{1 + (\frac{C_k}{E_{r_a}})^{b_{r_a}}} N_2(t, C_k) (1 - \frac{N_2(t, C_k)}{K_2}) + sN_1(t, C_k) \\ \frac{dN_d(t, C_k)}{dt} &= \frac{r_{d0}}{1 + (\frac{C_k}{E_{r_d}})^{b_{r_d}}} N_d(t, C_k) (1 - \frac{N_d(t, C_k)}{K_d}) \\ &\quad - \frac{\beta_0}{1 + (\frac{C_k}{E_\beta})^{b_\beta}} N_d(t, C_k) N_1(t, C_k) \end{aligned} \tag{2}$$

The same model can be applied when duckweeds are not present by setting $N_d(t, C_k) = 0$ and removing the last equation. The same model can be applied when algae are not present by setting $N_1(t, C_k) = 0$ and removing the first two equations. When the water column is stirred (when algae are supposed not to settle and duckweeds are not present), the settling rate s is assumed to be zero and the two last equations must be removed.

At each time step, the decimal logarithm of the number of algal cells per beaker in the water column follows a normal distribution of mean $N_1(t, C_k)$ and variance σ_{N_1} . The decimal logarithm of the

number of algal cells per beaker on the sediment follows a normal distribution of mean $N_2(t, C_k)$ and variance σ_{N_2} . The decimal logarithm of the number of duckweed fronds per beaker follows a normal distribution of mean $N_d(t, C_k)$ and variance σ_{N_d} .

4. Statistical inference

We used Bayesian inference to fit the model simultaneously to all our experimental data obtained from the five experiments described in Section 2 (Lamonica et al., 2016). We used the same statistical links as described in ODD protocol (Section 3). They are summarised in Table 2.

4.1. Parameter prior distributions

We defined prior distributions, summarising all available information on each parameter (Table 1). Some of the prior distributions described the decimal logarithm of the parameter because of the large range of possible values (for instance, parameters r_{d0} , η_0 and β_0) or the extreme order of magnitude (e.g., large ($K_1(0)$, K_2) or small (s)). Some of the prior distributions were defined based on previous experiments that were conducted using the same protocol (Billoir et al., 2011, 2012; Delhaye, 2012) (parameters $K_1(0)$, K_2 , s , r_{a0}), other were based on additional experiments that were conducted in the laboratory (parameters E_{r_a} , b_{r_a} , r_{d0} , K_d , β_0).

4.2. Computation

Markov Chain Monte Carlo (MCMC) computations were performed using the *rjags* R package (Plummer, 2009; R Core Team, 2013), after the model was discretised using the Euler method with a time step equal to 0.1, as stated in Lamonica et al. (2016). A total of 20,000 iterations was performed as a burn-in phase and inference was based on 100,000 additional iterations for each of the three chains. To check the convergence of the estimation process, we used the Gelman and Rubin (1992) convergence diagnostic.

5. Model analysis

5.1. Model comparison

We tested the various hypotheses we made on the different processes involved in the functioning of the microcosm and on the cadmium effects in order to retain an adequate and parsimonious model.

For that purpose, we compared different nested models that expressed these hypotheses with the complete model, denoted by $M(\eta(C), \beta(C))$.

The first hypothesis we tested was whether duckweeds had an effect on algal dynamics and *vice versa*, through interspecific competition. We set parameter $\beta_0 = 0$, which means that algae had no influence on duckweed dynamics through interspecific competition. This model is denoted by $M(\eta(C), 0)$. We also set $\eta_0 = 0$, which means that duckweed had no influence on algae dynamics through interspecific competition. This model is denoted by $M(0, \beta(C))$.

The second hypothesis we tested was whether cadmium had an effect on interspecific competition process. We set $\eta(C) = \eta_0$ and $\beta(C) = \beta_0$, which means that cadmium concentration had no influence on interspecific competition parameters. This model is denoted by $M(\eta_0, \beta_0)$. We also set $\eta_0 = 0$ and $\beta(C) = \beta_0$, which means that duckweeds had no influence on algae dynamics through interspecific competition and that cadmium had no influence on interspecific competition parameter. This model is denoted by $M(0, \beta_0)$. We also set $\eta(C) = \eta_0$ and $\beta_0 = 0$, which means that algae had no influence on duckweed dynamics through interspecific competition and that cadmium had no influence on interspecific competition parameter. This model is denoted by $M(\eta_0, 0)$.

For each of the models, we estimated parameters as described in Section 2.3. We used all the data and the same prior distributions of parameters for each inference process.

In order to choose the most appropriate model, we compared each model using model fit, Deviance Information Criterion (DIC) and posterior distributions of parameters. DIC were compared between the different models fitted on the same data. Although there is no strict consensus on the subject, we considered that if the DIC for one given model was lower by 10 than the DIC for another model, its fit was considered better than the other one.

5.2. Posterior predictive check

To check posterior predictions of the model, we used the median of the posterior distribution for each parameter and the 95% credibility band of the predicted data taking into account parameter uncertainties and stochasticity (Lamonica et al., 2016).

5.3. Stress function verification

We verified the adequacy of our stress functions. For that purpose, we estimated the parameters supposedly affected by cadmium (growth rates and interspecific competition parameters) when they were not constrained by a stress function. In other words, we estimated each of these parameters for each cadmium concentration independently. For each parameter, we thus obtained a point estimate (and a credibility interval) at each cadmium concentration.

Then, for each of these parameters, we superimposed the point estimates (with their credibility intervals) to the stress function summarised by the median value and the 95% predictions.

5.4. Model predictions

In order to quantify the effects of cadmium on the global biomass of both species and to highlight the effects of both interspecific competition and cadmium, we used indicators calculated from the model state variables.

For each tested cadmium concentration different from the control C_k ($k \in [1, 8]$), we calculated $R_{Y_0}(t, C_k)$ as the loss in number

of algal cells compared with the number of algal cells in the control:

$$R_{Y_0}(t, C_k) = 100 - 100 \frac{N_1(t, C_k)}{N_1(t, C_0)} \quad (3)$$

We calculated the same indicators, $R_{F_0}(t, C_k)$ and $R_{FY_0}(t, C_k)$, for the number of duckweed fronds without and with algae, respectively. We also calculated for each tested cadmium concentration, including the control, $R_{FY_e}(t, C_k)$ ($k \in [0, 8]$) the loss in number of duckweed fronds when algae were present compared with the number of duckweed fronds without algae.

For each R index, we present its median value and 95% simulated for 60 days at each tested concentration, in order to illustrate the model behaviour over several weeks.

6. Results

Our MCMC algorithm always consistently converged according to Gelman and Rubin convergence diagnostics.

All the presented results were obtained with the best model ($M(0, \beta(C))$) and using all the data (see Section 3.2). Posterior distributions of parameters obtained with $M(0, \beta(C))$ are shown in Appendix A, Fig. A1. The 2.5%, 50% and 97.5% quantiles of the posteriors are summarised in Table 1. Model fits from $M(0, \beta(C))$ are shown in Fig. 2. For greater clarity in the results with cadmium (Figs. 2(b), (c) and (d)) we present only the data of Experiment 4 (measured cadmium concentrations of 0, 11.1, 20.2, 35.5, 51.1 $\mu\text{g/L}$) and the related model fits. Stress functions that are predicted by $M(0, \beta(C))$ are shown in Fig. 3.

6.1. Model comparison

DIC of the nested models are summarised in Table 3. Posterior distribution of η_0 estimated with $M(\eta_0, \beta_0)$ was $[-8.88, -4.12]$. Posterior distributions of η_0 and parameter involved in the stress function (E_η and b_η) estimated with $M(\eta(C), \beta(C))$ were $[-8.88, -3.84]$, $[-0.88, -3.88]$, $[-2.86, 2.86]$, respectively.

6.1.1. Interspecific competition

The DIC of $M(\eta(C), 0)$ was significantly higher than the DIC of all the other models. The DIC of $M(0, \beta(C))$ was equal to the DIC of $M(\eta(C), \beta(C))$. Moreover, posterior distribution of η_0 and parameter involved in the stress function (E_η and b_η) estimated with $M(\eta(C), \beta(C))$ were very large and close to the prior distribution, suggesting that our data were not sufficient to estimate these parameters accurately. Likewise, the DIC of $M(\eta_0, \beta_0)$ and $M(0, \beta_0)$ were identical while posterior distribution of η_0 estimated with $M(\eta_0, \beta_0)$ was very large and close to the prior distribution, suggesting again that our data were not sufficient to estimate accurately this parameter. On the contrary, the inference process generated narrow posterior distributions for parameter β_0 (Table 1 and Appendix A, Fig. A1), suggesting that our data were sufficient to estimate this parameter accurately.

Thus, a model that took into account the influence of algae on duckweed dynamics through interspecific competition but neglected the influence of duckweeds on algae appeared to be the best compromise between goodness-of-fit and parsimony.

6.1.2. Cadmium effects

The DIC of $M(\eta_0, \beta_0)$ was significantly higher than the DIC of $M(\eta(C), \beta(C))$. Likewise, the DIC of $M(0, \beta_0)$ was significantly higher

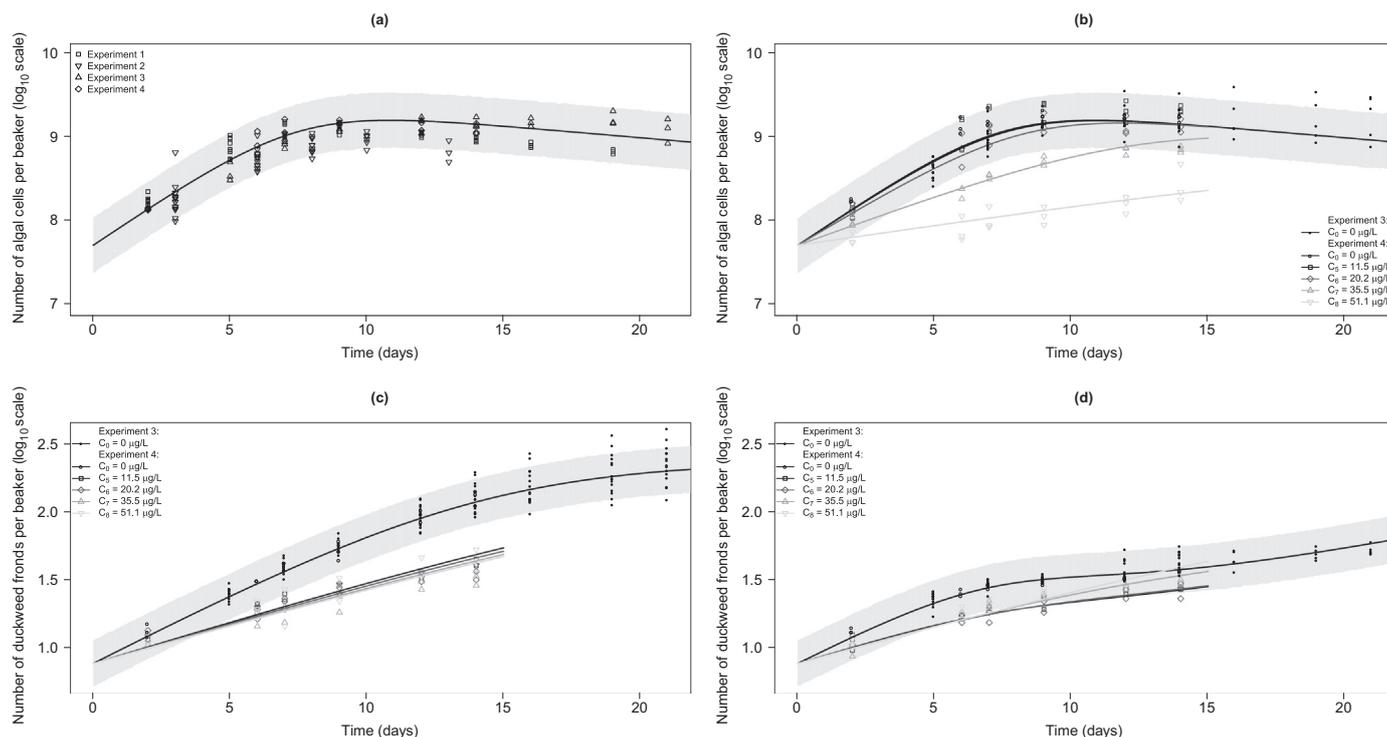


Fig. 2. Algal dynamics without cadmium (a) and with cadmium (experiment 4) (b) and duckweed dynamics (experiment 4) without algae (c) and with algae (d). (a) Symbols refer to different experiments 1–4 (see Section 2). The plain line is the fitted model with each parameter equal to the median value of its posterior distribution. The light grey area is the 95% credibility band of the predicted data for the number of algal cells per beaker in the water column. (b,c,d) Symbols refer to the different tested cadmium concentrations of experiment 4. The plain lines are the fitted model with each parameter equal to the median value of its posterior distribution for each concentrations C_i . The light grey area is the 95% credibility band of the predicted data in the control for the number of algal cells per beaker in the water column (b) and for the number of duckweed fronds per beaker, without (c) and with algae (d).

than the DIC of $M(0, \beta(C))$. This suggests that we should take into account the effects of cadmium on competition parameter in the final model.

Finally, the most appropriate model to describe the species dynamics and the effects of cadmium appeared to be $M(0, \beta(C))$. The assumptions underlying this model were that (1) algae had an influence on duckweed dynamics ($\beta_0 \neq 0$); (2) duckweeds had no influence on algal dynamics ($\eta_0 = 0$); and (3) both growth rates and competition parameters were affected by cadmium concentration.

6.2. Parameter estimation

Posterior distributions of parameters estimated from model 2 are shown in Appendix A, Fig. A1. The 2.5%, 50% and 97.5% quantiles of the parameter posterior distributions are summarised in Table 1. We obtained narrow posterior distributions for all parameters, with the exception of E_{rd} , the cadmium concentration at which r_{d0} is reduced by 50%. The narrowness of the posterior distributions suggested that sufficient information was available from our data to estimate model parameters accurately.

The inference process generated narrow posterior distributions for control parameters (growth rates r_{a0} and r_{d0} , competition parameter β_0) and for the parameters that were not affected by cadmium (carrying capacities $K_1(0)$ and K_d , settling rate s), despite the vague prior distributions (Table 1 and Appendix A, Fig. A1).

For parameters of the algal growth rate stress function E_{ra} and b_{ra} , the inference process led to narrower posterior distributions than the vague prior distribution (Table 1 and Appendix A, Fig. A1).

The posterior distribution of E_{ra} was shifted to lower values compared with the prior distribution, whereas the posterior distribution of b_{ra} was shifted to higher values.

Concerning parameters of the duckweed growth rate stress function, the inference process led to narrow posterior distribution for the curvature coefficient (b_{rd}), whereas the posterior distribution of the cadmium concentration at which r_{d0} is reduced by 50% (E_{rd}) was very similar to the prior distribution (Table 1 and Appendix A, Fig. A1).

For parameters of the competition parameter stress function, E_{β} and b_{β} , the inference process led to narrower posterior distributions than the vague prior distribution (Table 1 and Appendix A, Fig. A1). The posterior distribution of E_{β} was close to the lower bound of the prior distribution.

The posterior distribution of the standard deviations σ_1 and σ_d were narrower than the prior distributions (Table 1 and Appendix A, Fig. A1), indicating that the uncertainty of the data was smaller than expected.

6.3. Fit of model 2 to the data

We present the results of model $M(0, \beta(C))$ for algal dynamics without duckweeds in Fig. 2(a) and with duckweeds in Fig. 2(b), for duckweed dynamics without algae in Fig. 2(c) and with algae in Fig. 2(d).

6.3.1. Algal dynamics

Without contaminant (Figs. 2(a) and (b), control), algal dynamics were always identical, with or without duckweeds,

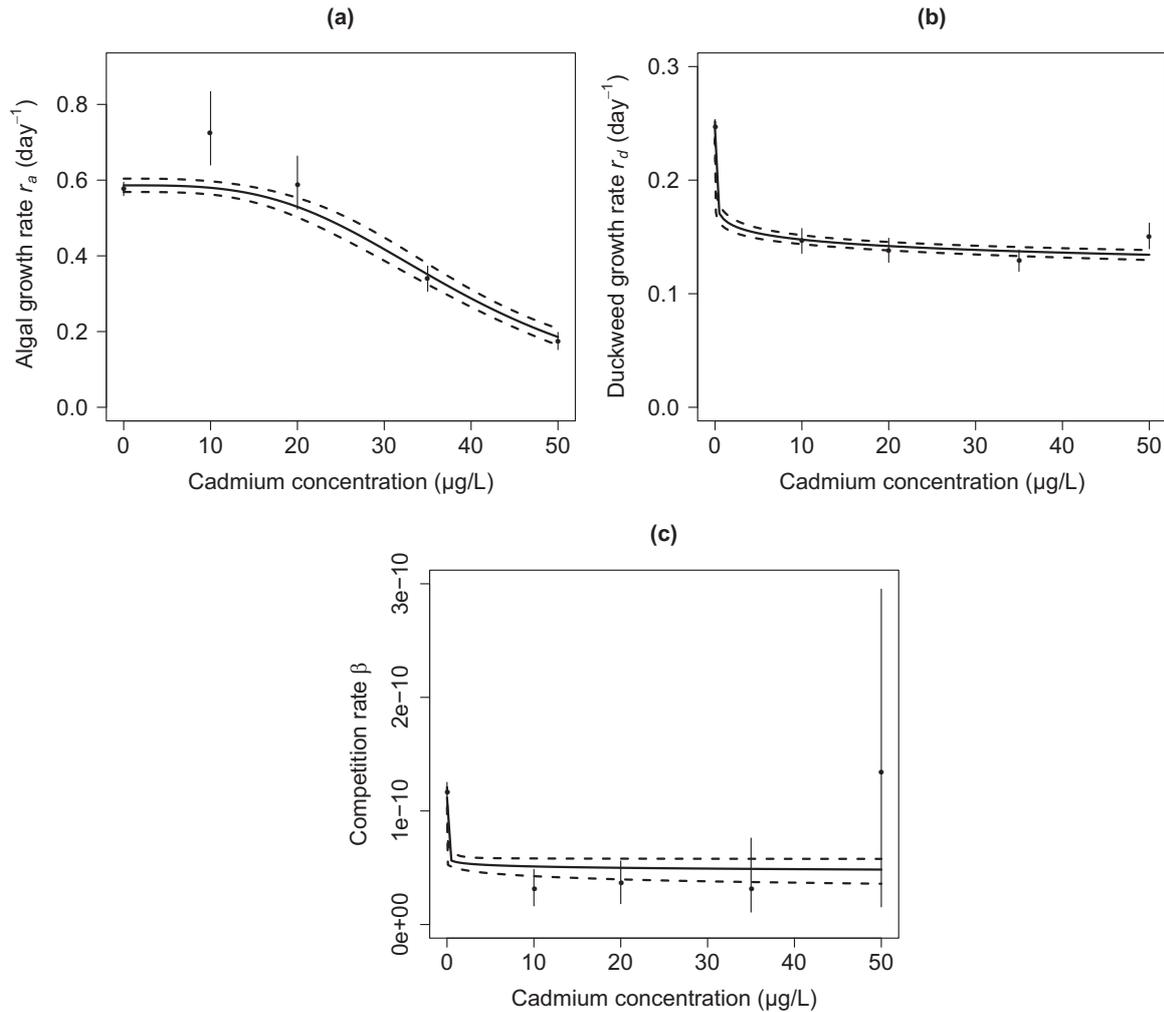


Fig. 3. Stress functions of algal growth rate (a), duckweed growth rate (b) and competition parameter of algae on duckweeds (c). Black circles represent parameters estimated per concentration for experiment 4 with their uncertainties (black vertical lines); plain lines are the simulated model with each parameter equal to the median value of its posterior distribution; dashed lines delimit the 95% credibility band of predicted parameter value according to cadmium concentration.

Table 3
DIC of nested models.

Model	DIC
$M(\eta_0, 0)$	-681
$M(0, \beta_0)$	-1294
$M(\eta_0, \beta_0)$	-1293
$M(\eta(C), 0)$	-681
$M(0, \beta(C))$	-1474
$M(\eta(C), \beta(C))$	-1474

suggesting that duckweeds had no influence on algal dynamics, thus confirming our selection of $M(0, \beta(C))$ as the best model. The number of algal cells per beaker in the water column increased during the first ten days. This increase suggests that growth was greater than settling at the start of the experiment. The number of algal cells per beaker in the water column then decreased as growth declined and settling continued.

There was very little difference (if any) in the number of algal cells per beaker between the two first tested cadmium

concentrations (Fig. 2(b), C_5 and C_6) and the control (C_0). On the contrary, there was a strong decrease in the number of algal cells per beaker for the two other tested concentrations (Fig. 2(b), C_7 and C_8), particularly at the highest concentrations. The results are shown in decimal logarithm scale so the number of algal cells per beaker at 10 days was divided per 10 between the control and the highest tested concentration.

Finally, our data were satisfactorily described by model $M(0, \beta(C))$. A total of 281 out of 301 data points (93.4%) for algae in the water column were within the 95% credibility band of predicted data.

6.3.2. Duckweed dynamics

Without contaminant (Figs. 2(c) and (d), C_0), there was a great discrepancy between duckweed dynamics with and without algae: the number of duckweed fronds per beaker was globally lower with algae than without algae. The difference in the numbers of duckweed fronds per beaker was a consequence of the presence of algae and of interspecific competition effect, confirming our previous decision to consider $\beta_0 \neq 0$. With algae, the increase in the number of duckweed fronds per beaker slowed down between day

7 and day 11, corresponding to the maximum number of algal cells per beaker. Afterwards, the number of duckweed fronds per beaker increased again, when the number of algal cells per beaker decreased.

When cadmium was present, without algae, there was no difference between the four tested cadmium concentrations C_5 to C_8 (Fig. 2(c)), but there was a global decrease in the number of duckweed fronds per beaker compared with the control. With algae (Fig. 2(d)), the number of duckweed fronds per beaker in the control was higher than in the different tested concentrations at the start of the experiment, but from day 10, there were fewer differences between the control and the two highest tested concentrations (C_7 and C_8) than between the control and the two lowest tested concentrations (C_5 and C_6). This suggested that the effect of cadmium on duckweeds was compensated by the effect of cadmium on algae through a decrease in the pressure of the interspecific competition due to the decrease in the number of algal cells per beaker.

Again our data were satisfactorily described by the model. A total of 347 out of 361 data points (96.3%) for duckweeds were within the 95% credibility band of predicted data.

6.4. Stress function verification

The parameters estimated independently for each cadmium concentration as well as the median value and the 95% predictions of the stress function are shown in Figs. 3(a), (b) and (c) for algal growth rate, duckweed growth rate and competition parameter of algae on duckweeds, respectively.

For algal growth rate r_a , the stress function and the non-constrained parameter values globally showed a good adequacy. After a plateau up to 15 $\mu\text{g/L}$, algal growth rate decreased and reached 30% of the control value at 50 $\mu\text{g/L}$ of cadmium. For the first two tested concentrations (different from the control), estimated non-constrained parameter values were quite different from the stress function predictions, but there were also great uncertainties around these estimations.

For duckweed growth rate r_d , the stress function and the non-constrained parameter values globally showed a good adequacy. From the first tested concentration, duckweed growth rate decreased from 40% of the control value. Then, it remained at this value up to 50 $\mu\text{g/L}$.

For competition intensity parameter β , the stress function and the non-constrained parameter values globally showed a good adequacy. From the first tested concentration, duckweed growth rate decreased from 70% of the control value. Then, it stagnated at this value up to 50 $\mu\text{g/L}$. The uncertainty around the estimated non-constrained parameter values were large for the last two tested concentrations. In particular, for the last tested concentration, the value predicted by the stress function was lower than the estimated non-constrained parameter value, but the uncertainty around this value was very large.

These results tend to reinforce our choice for the stress functions that adequately described the effects of cadmium on algal growth rate, duckweed growth rate and competition parameter of algae on duckweeds.

6.5. Model predictions

The median value and the 95% predictions simulated for 60 days at each tested concentration of Experiment 4 (C_0 , C_5 , C_6 , C_7 , C_8) are shown in Figs. 4 (a), (b), (c) and (d) for the indicators $R_{F_0}(t, C_k)$, $R_{Y_0}(t, C_k)$, $R_{FY_0}(t, C_k)$ and $R_{FY_F}(t, C_k)$, respectively.

$R_{Y_0}(t, C_k)$ dynamics confirmed the gradual loss of the number of algal cells per beaker compared with the control according to

cadmium concentration, with a peak at almost 90% at the highest tested cadmium concentration. The indicator $R_{F_0}(t, C_k)$ showed that there was no difference in the effects of cadmium on duckweeds between tested concentrations, with a peak in the loss of the number of duckweed fronds at about 60 % compared with the control. The comparison of $R_{F_0}(t, C_k)$ and $R_{FY_0}(t, C_k)$ confirmed the influence of algae on duckweed dynamics with cadmium through competition: there were smaller losses (if not a gain) of the number of duckweed fronds as cadmium concentrations increased when algae were present. This was confirmed by the dynamics of $R_{FY_F}(t, C_k)$ that showed a decrease in the loss of the number of duckweed fronds with algae compared to the number of duckweed fronds without algae as cadmium concentrations increased.

7. Discussion

7.1. Modelling and model analysis

Dynamic modelling: A dynamic modelling framework taking all timepoints into account is adequate to model contaminant effects on species (Billoir et al., 2012). Indeed, in bioassays, measurements are performed throughout the experiment; it is thus beneficial to use all the available data by modelling the population dynamics instead of only the final response. Ecosystems involving interactions must be observed at several timepoints to infer interaction impacts on population dynamics. Thus, integration of data at all timepoints is even more appropriate in the case of modelling contaminant effects on species in interaction.

Stress function: The verification of stress functions we performed was worthwhile because it did not require a strong computational effort. It showed the robustness of the logistic function to describe the cadmium effects on species dynamics and interactions. However, estimation of EC_{50} (which corresponds in our study to parameters E_{r_a} , E_{r_d} and E_{β}) remains difficult when this concentration is not included in the tested concentration range of contaminant (Forfait-Dubuc et al., 2012). This limitation is also supposed to be a recurring problem in multispecies bioassays due to the various species sensitivities to contaminants.

Model comparison: Model comparison is a useful tool to test and verify hypotheses made on processes, in particular when models cannot be discriminated through their respective parameter values. In our study, we could not base our model choice for competition hypothesis on the fact that one of the two competition parameters η_0 and β_0 was negligible compared with the other. Indeed, the value ranges of the number of algal cells and duckweed fronds were extremely different: η_0 and β_0 were related to the number of duckweed fronds per beaker and to the number of algal cells per beaker, respectively, which differed from more than 10^4 . It was thus not possible to conclude about competition intensity based only on η_0 and β_0 estimates.

7.2. Cadmium effect

7.2.1. Growth

EC_{50} for growth (which correspond to our parameters E_{r_a} for algae and EC_{r_d} for duckweeds) appears very variable according to the tested medium. Indeed, for algae, effects of cadmium on growth depend strongly on medium composition: EDTA (Källqvist, 2009), water hardness (Källqvist, 2009), pH (Vigneault and Campbell, 2005), humic substances (Koukal et al., 2003; Vigneault and Campbell, 2005). For example, Källqvist found EC_{50} in various growth media ranging from 9.4 to 199 $\mu\text{g/L}$ (Källqvist, 2009). High variation in EC_{50} estimate can also be found ($59.24 \pm 17.53 \mu\text{g/L}$ in Čypaite et al., 2014). In our study, E_{r_a} (14 days) 95% credibility

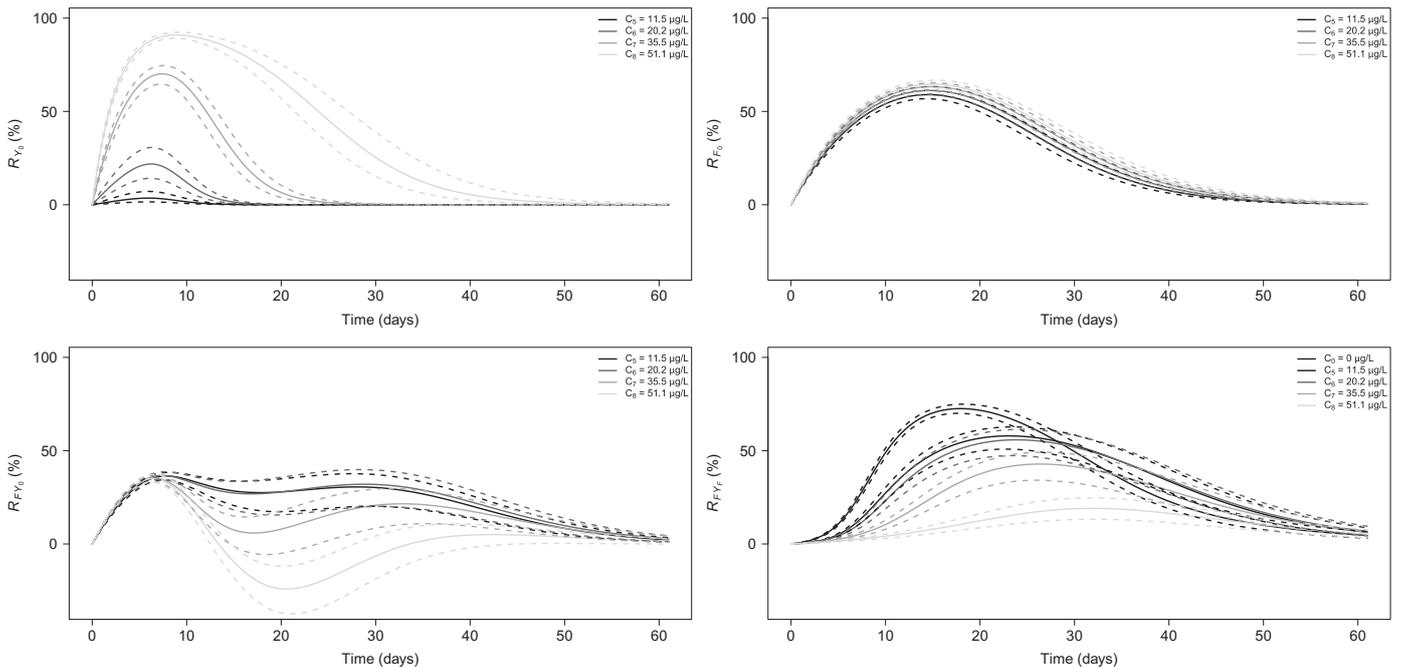


Fig. 4. Dynamics of R index: (a) $R_{Y_0}(t, C_k)$, (b) $R_{R_0}(t, C_k)$, (c) $R_{FY_0}(t, C_k)$, (d) $R_{FY_r}(t, C_k)$. Plain lines are the simulated model with each parameter equal to the median value of its posterior distribution, dashed lines delimit the 95% credibility band.

interval was 39.8[37.2, 41.7] $\mu\text{g/L}$, which is within the range of expected values.

For duckweeds, EC_{50} for growth are found between 54 and 393 $\mu\text{g/L}$ (Drost et al., 2007; Taraldsen and Norberg-King, 1990), with values such as 200 $\mu\text{g/L}$ (Wang, 1986), 191 $\mu\text{g/L}$ (Smith and Kwan, 1989) and 323 $\mu\text{g/L}$ (Naumann et al., 2007). In our study, E_{rd} (14 days) 95% credibility interval was 204[102, 457] $\mu\text{g/L}$ for duckweed growth rate, which is large but within the range of expected values.

Duckweed growth rate was impaired since the first tested cadmium concentration (Experiment 5, 2.25 $\mu\text{g/L}$) but there were no detectable differences between concentrations. Although duckweeds were affected at very low concentrations, they were not more affected at very high cadmium concentrations. They showed a constant growth rate at all the tested concentrations different from the control (Fig. 3(b)) and an identical loss of duckweed fronds at all concentrations with a maximum loss of duckweed fronds around 60% (Fig. 4(b)).

Conversely, algal growth was reduced above 20.2 $\mu\text{g/L}$ (Experiment 4, Fig. 3(a)) then the growth rate dropped from this concentration. Algae were thus less affected at low concentrations but they showed a maximum decrease in the number of algal cells between 70% and 85% at concentrations C_7 and C_8 (Fig. 4(b)).

These two patterns of decreasing growth rate are also expressed by curvature coefficients b_{ia} (3.31 [2.75, 3.89]) and b_{id} (0.14[0.10, 0.18]), the lower parameter b giving a stronger curvature coefficient and thus a higher effect of cadmium on growth rate.

7.2.2. Interspecific competition

Indirect effects of contaminants have been mentioned in 50 papers published since 1970 (Fleeger et al., 2003). Several studies have explored contaminant effects taking into account direct and indirect effects due to interactions since 2003, for instance in Gustafsson et al. (2010); Liebig et al. (2008). There are multiple types of indirect effects depending on whether grazers or predators are more sensitive than primary producers (top-down or

bottom-up effects). In particular, variations in competition intensity induced by contaminants are difficult to identify among other indirect effects (Fleeger et al., 2003).

In our study, we managed to discriminate different types of contaminant effects on competition, in addition to the direct effect of cadmium on growth of both species.

First, there was a positive indirect effect of cadmium on duckweed development through the decrease in algal growth. Without algae, at day 20, about 60% of duckweed fronds were lost at all concentrations compared with the control (Fig. 4(b)). However, with algae, at day 20, only around 10% of duckweed fronds were lost at concentration C_7 while around 20% were gained for concentration C_8 (when the number of algal cells highly decreased) compared with the control (Fig. 4(c)). This means that the loss of algal cells due to cadmium cancelled the negative effect of cadmium on growth rate through reduced competition. The negative impact of interspecific competition on duckweed development was stronger than the negative impact of cadmium. Thus, when competition decreased, the positive effect of this decrease was higher than the negative effect of cadmium. As the negative effect of cadmium was stronger on algae than on duckweeds, the more the cadmium concentration increased, the fewer duckweed fronds were lost in the microcosms with algae compared with the microcosms without algae (Fig. 4(d)). This is due to the decrease in interspecific competition pressure on duckweeds caused by the reduced number of algal cells.

Secondly, there was a negative direct effect of cadmium on the competition intensity, expressed by the decrease in $\beta(C)$ (Fig. 3(c)). Indeed, the loss of the number of duckweed fronds at concentrations C_5 and C_6 compared to the control without algae was higher than the loss with algae, though the number of algal cells remained quite stable between these two concentrations and the control (Figs. 4(b) and 4(c)). The competition pressure of algae on duckweeds thus decreased with the increase in cadmium concentration. Because it was not due to a decrease in the number of algal cells, this suggests that the cadmium had a negative direct effect on the competition intensity.

Competition intensity decreased with cadmium concentration increase, which reinforced the positive indirect effect of the decrease in the number of algal cells (due to the negative direct effect of cadmium on algal growth rate) in the way of a strong decrease in the competition pressure of algae on duckweeds. These combined effects explained the stronger development of duckweeds at high cadmium concentrations compared with control when algae were present.

Measured concentrations of dissolved cadmium were used in this study, rather than available cadmium fraction. Thus, interpretations of parameters related to cadmium effects should be slightly moderated, in that our results could be slightly modified if our model would account for cadmium bioavailability.

7.3. Biological interpretation of competition

Without contaminant: Competition pressure depends on the environmental conditions such as temperature (Dell et al., 2014; Griffiths et al., 2014), food availability and salinity (Griffiths et al., 2014) or nutrient concentration (Njambuya et al., 2011). The environmental conditions, including medium composition, can thus be more or less favourable to one of the interacting species. Unicellular green algae are known to reduce duckweed growth in indoor experiments (Szabó et al., 2005). In our microcosm, two elements were more favourable to the development of algae over duckweeds. Firstly, light was able to pass through the transparent beaker walls. Thus, there was no light competition due to duckweed fronds coverage of water surface. This kind of competition that can occur *in situ* is very unfavourable for algae development because algal cells are deprived of light energy and thus they cannot realise photosynthesis.

Secondly, the microcosm medium composition is more favourable to algae than to duckweeds. In similar experiments with the same microcosm medium with algae only in one experiment and with duckweeds only in another one, where nutrient levels and biomass were monitored, we observed a production of 30 and 90 mg dry weight respectively within 7 and 14 days for the algae, versus 6 and 10 mg dry weight for the duckweeds. The measurement of P consumption in these experiments show that in one week microalgae in control microcosms have consumed almost all P stock (94%), whereas duckweeds have consumed only 19%, and 44% in two weeks (Genesseaux, 2015). From these data we can understand why in experiments with algae and duckweeds together duckweed growth is inhibited by the presence of algae: the high consumption of P by algae does not allow duckweeds to use the quantity necessary for their own growth. This reinforces the idea of a nutrient, probably phosphorus, driven competition between the two species that is more favourable to algae under the microcosm conditions.

Because the Lotka–Volterra type I model makes no direct references to the resources shared by two competition species (Edelstein-Keshet, 1988), we assumed that competition was independent of nutrient levels, meaning that parameters of competition intensity were constant all along the experiments even if nitrogen and phosphorus concentrations varied. This choice intended to limit the use of parameters that were not directly linked to the data, since we did not follow nutrient levels during the experiments.

With contaminant: Cadmium is known to alter membrane permeability and nutrient uptake in macrophytes (Fodor, 2002; Seregin and Ivanov, 2001). In green algae, inhibition of nitrate uptake by cadmium has been shown (Awasthi and Rai, 2005). Because the interspecific competition we modelled was based on nutrient resources in the microcosm, the decrease in competition intensity might be explained by the alteration of these nutrient uptake functions in algal cells. In addition to the positive effect on

duckweed development due to the decrease in the number of algal cells per beaker (induced by cadmium action at cellular level which was expressed by the decrease in $r_a(C)$ with increasing cadmium concentration), there might have been a second positive effect on duckweed development due to the less efficient nutrient uptake of algal cells, which was expressed by the decrease in $\beta(C)$ with increasing cadmium concentration). In short, with cadmium, there were less algal cells and in addition they absorbed less nutrient.

Nevertheless, the inhibition has been shown for much higher cadmium concentrations than those we used and the limiting nutrient in the microcosm is phosphorous. Moreover, when algae and duckweeds were exposed to cadmium separately, they seemed to consume similar quantities of nutrients per cell or frond than when they were not exposed (Genesseaux, 2015). This would suggest that each species has similar nutrient needs whether exposed to cadmium or not. However nutrient levels have not been measured with species together, thus it would be risky to draw this conclusion.

Allelopathic influences of phytoplankton on macrophytes have been suggested by Jones et al. and Sharma (Jones et al. 1983 and Sharma 1985 in Gopal and Goal, 1993). Allelopathy could explain part of the competition with duckweeds. Furthermore, competition intensity was impacted even at low cadmium concentrations while algal growth rate was not significantly reduced. This could be explained by a reduction or suppression of allelopathic influence by cadmium, even at low concentration. Consequently, interspecific competition intensity might decrease while algal growth remained at the control level. This suggests that we could have gathered the effect of competition for nutrients and allelopathic influence in a single process (expressed by $\beta(C)$). Nevertheless, although allelochemic substances are produced by phytoplankton (*Pseudokirchneriella subcapitata* among them Debenest et al., 2011) and they likely influence macrophytes, such mechanisms remain unclear (Gopal and Goal, 1993).

7.4. Coupling experiments and modelling of interactions for ecotoxicological risk assessment

Interactions and differences in species sensitivity to pollutant may lead to counterintuitive results that point out the necessity of taking into account interactions by performing experiments both with only one species and with multi-species experiments. For example, by performing bioassays with two nematode species together and bioassays on each single species, Martinez et al. have shown changes in the way the two nematode species interact under cadmium pollution, as well as a higher population fitness of one species under increased pollution due to the interaction (Martinez et al., 2012). Competition may also amplify the response to contaminant observed in monospecific bioassays, for example if the most sensitive species appears to be the most impacted by the competition interaction, leading to a longer recovery for this species under multispecies conditions (Foit et al., 2012).

Thus, taking into account interactions between species in ecotoxicological risk assessment appears essential in our case. On the one hand, if only monospecific tests were conducted, the global impact of cadmium on duckweed development would have been overestimated. On the other hand, if a multispecific test was conducted without taking into account the competition process, observation interpretations would have led to the conclusion that duckweeds were not impacted by cadmium.

Our results support the interest of modelling to integrate and verify the effects of a contaminant (or a stress factor, more generally) on each process while describing the global impact of the contaminant on the functioning of a complex multispecific ecosystem. Nevertheless, the processes involved in the ecosystem

have to be first identified, described and verified without contaminant before any further studies with contaminant can be performed.

Some difficulties may occur in the choice of the contaminant concentration range. Indeed, the differences among species sensitivities can make it difficult to observe sublethal effects for all the species, which is typically the situation that provides the more information about contaminant effects on interactions.

8. Conclusion and perspectives

In this study, we proposed an innovative modelling approach of algae–duckweed interaction in a 2-L laboratory microcosm under controlled conditions. We modelled effects of cadmium on the functioning of the ecosystem taking into account the competition process that slowed down duckweed development without impairing algal growth. We estimated model parameters within a Bayesian framework accounting simultaneously for all data, from experiments specifically designed for this purpose. The estimation process provided values of EC_{50} for both species' growth rates, as well as for the competition intensity parameter. Our model appeared to describe adequately the dynamics of the partial microcosm with duckweed and microalgae. It also permitted cadmium's direct and indirect effects, involving the interaction between the two species, to be discriminated. This approach thus provided a better interpretation of experimental data and a more in-depth understanding of the functioning of the algae–duckweed microcosm and its response to cadmium contamination.

A first perspective would be using a model, for example Wham 7 (Tipping et al., 2011) or PhreeqC (Parkhurst and Appelo, 2013), to assess cadmium fraction available (instead of using measured concentrations). Such an approach would improve interpretations, especially of parameters related to cadmium effect. It would as well be valuable to follow nutrient levels in order to deepen

understanding of the underlying mechanisms of competition and cadmium effects. Moreover, nutrient level data would allow us to estimate parameters of a competition model that would link competition intensity to nutrient levels.

Another perspective for this work would be to add a third species, such as a primary consumer, in order to add another ecological process (predation): and model the functioning of a microcosm with three species interacting, without and with contaminant. We could also explore the competition interaction in a different medium more favourable for duckweed development, for example by using opaque beaker walls which would decrease algae growth without affecting duckweed growth.

More generally, this kind of approach, gathering together modelling and microcosm experiments, is a gateway to explore effects of a larger range of disturbances (biotic or abiotic) thanks to the controlled conditions that offer laboratory microcosms and thanks to the mechanistic modelling that provides a more in-depth understanding of the underlying processes of the functioning of the ecosystem.

Acknowledgements

Authors thank the IXXI institute (Institut Rhônalpin des Systèmes Complexes) for its financial support. Authors also thank Pauline Le Quellec et Ludovik Hauduroy for their contribution to the experiments, Paul Riordan (Write2Publish) for copyediting the text and the reviewers for their useful comments.

Appendix A

See Fig. A1.

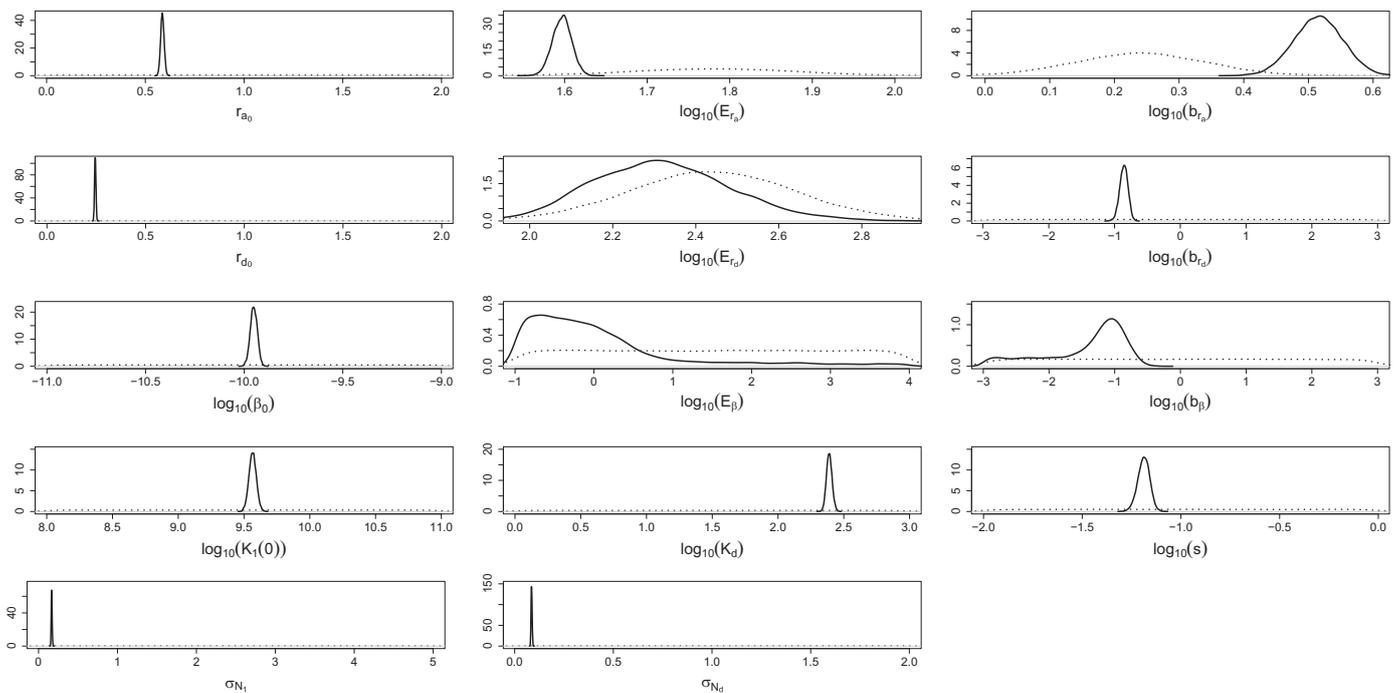


Fig. A1. Comparison between prior and posterior distributions. The dotted lines are the prior distributions and the plain lines are the posterior distributions.

References

- Aresco, M.J., 2010. Competitive interactions of two species of freshwater turtles, a generalist omnivore and an herbivore, under low resource conditions. *Herpetologica* 66 (3), 259–268.
- Awasthi, M., Rai, L.C., 2005. Toxicity of nickel, zinc, and cadmium to nitrate uptake in free and immobilized cells of *Scenedesmus quadricauda*. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 61 (2), 268–272.
- Benton, T.G., Solan, M., Travis, J.M.J., Sait, S.M., 2007. Microcosm experiments can inform global ecological problems. *Trends Ecol. Evol.* 22 (October (10)), 516–521.
- Billoir, E., Péry, A.R.R., Charles, S., 2007. Integrating the lethal and sublethal effects of toxic compounds into the population dynamics of *Daphnia magna*: a combination of the DEBtox and matrix population models. *Ecol. Model.* 203 (May (3–4)), 204–214.
- Billoir, E., Delhaye, H., Clément, B., Delignette-Muller, M.L., Charles, S., 2011. Bayesian modelling of daphnid responses to time-varying cadmium exposure in laboratory aquatic microcosms. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 74 (May (4)), 693–702.
- Billoir, E., Delhaye, H., Forfait, C., Clément, B., Triffault-Bouchet, G., Charles, S., Delignette-Muller, M.L., 2012. Comparison of bioassays with different exposure time patterns: the added value of dynamic modelling in predictive ecotoxicology. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 75 (January (1)), 80–86.
- Bone, A.J., Colman, B.P., Gondikas, A.P., Newton, K.M., Harrold, K.H., Cory, R.M., Unrine, J.M., Klaine, S.J., Matson, C.W., Di Giulio, R.T., 2012. Biotic and abiotic interactions in aquatic microcosms determine fate and toxicity of Ag nanoparticles: Part 2—toxicity and Ag speciation. *Environ. Sci. Technol.* 46 (July (13)), 6925–6933.
- Brinke, M., Höss, S., Fink, G., Ternes, T.a., Heininger, P., Traunspurger, W., 2010. Assessing effects of the pharmaceutical ivermectin on meiobenthic communities using freshwater microcosms. *Aquat. Toxicol.* 99 (August (2)), 126–137.
- Cadotte, M.W., Drake, J.A., Fukami, T.I., 2005. Constructing nature: laboratory models as necessary tools for investigating complex ecological communities. *Adv. Ecol. Res.* 37 (04), 333–353.
- Cairns, J., 1984. Are Single Species Toxicity Tests Alone Adequate For Estimating Environmental Hazard?
- Clément, B., Cadier, C., 1998. Development of a new laboratory freshwater/sediment microcosm test. *Ecotoxicology* 7, 279–290.
- Clément, S., Zaid, B., 2004. A new protocol to measure the effects of toxicants on daphnid–algae interactions. *Chemosphere* 55 (June (10)), 1429–1438.
- Clément, B., Cauzzi, N., Godde, M., Crozet, K., Chevron, N., 2005. Pyrene toxicity to aquatic pelagic and benthic organisms in single-species and microcosm tests. *Polycycl. Aromat. Compd.* 25 (3), 271–298.
- Clément, B., Delhaye, H., Triffault-Bouchet, G., 2014. Comparison of laboratory batch and flow-through microcosm bioassays. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 108C (July), 217–223.
- Daam, M.a., Van den Brink, P.J., 2007. Effects of chlorpyrifos, carbendazim, and linuron on the ecology of a small indoor aquatic microcosm. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 53 (July (1)), 22–35.
- Debenest, T., Petit, A.N., Gagné, F., Kohli, M., Nguyen, N., Blaise, C., 2011. Comparative toxicity of a brominated flame retardant (tetrabromobisphenol A) on microalgae with single and multi-species bioassays. *Chemosphere* 85 (1), 50–55.
- De Laender, F., De Schampelaere, K.I.A.C., Vanrolleghem, P.A., Janssen, C.R., 2008. Do we have to incorporate ecological interactions in the sensitivity assessment of ecosystems? An examination of a theoretical assumption underlying species sensitivity distribution models. *Environ. Int.* 34 (April (3)), 390–396.
- Delhaye, H., 2012. Développement d'un bioessai de toxicité chronique en microcosme aquatique de laboratoire et évaluation de l'outil au travers de l'étude des effets du cadmium [Ph.D. thesis]. Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.
- Dell, A.I., Pawar, S., Savage, V.M., 2014. Temperature dependence of trophic interactions are driven by asymmetry of species responses and foraging strategy. *J. Anim. Ecol.* 83 (January (1)), 70–84.
- Drost, W., Matzke, M., Backhaus, T., 2007. Heavy metal toxicity to *Lemna minor*: studies on the time dependence of growth inhibition and the recovery after exposure. *Chemosphere* 67 (1), 36–43.
- Edelstein-Keshet, L., 1988. *Mathematical Models in Biology* (Classics in Applied Mathematics). McGraw-Hill Inc, New York, p. 244.
- Faupel, M., Ristau, K., Traunspurger, W., 2012. The functional response of a freshwater benthic community to cadmium pollution. *Environ. Pollut.* 162 (March), 104–109.
- Fergola, P., Cerasuolo, M., Pollio, A., Pinto, G., DellaGrecia, M., 2007. Allelopathy and competition between *Chlorella vulgaris* and *Pseudokirchneriella subcapitata*: experiments and mathematical model. *Ecol. Model.* 208 (November (2–4)), 205–214.
- Fleeger, J.W., Carman, K.R., Nisbet, R.M., 2003. Indirect effects of contaminants in aquatic ecosystems. *Sci. Total Environ.* 317 (1–3), 207–233.
- Fodor, F., 2002. Physiological responses of vascular plants to heavy metals. In: Prasad, M.N.V., Strzalka, Kazimierz (Eds.), *Physiology and Biochemistry of Metal Toxicity and Tolerance in Plants*. Springer, Netherlands, pp. 149–177.
- Foit, K., Kaske, O., Liess, M., 2012. Competition increases toxicant sensitivity and delays the recovery of two interacting populations. *Aquat. Toxicol.* 106–107, 25–31.
- Forfait-Dubuc, C., Charles, S., Billoir, E., Delignette-Muller, M.L., 2012. Survival data analyses in ecotoxicology: critical effect concentrations, methods and models. What should we use? *Ecotoxicology* 21 (May (4)), 1072–1083.
- Gelman, A., Rubin, D.B., 1992. Inference from iterative simulation using multiple sequences. *Stat. Sci.* 7 (4), 457–511.
- Gennesseaux, M., 2015. Etude de la spAciation, des effets et de la rApartition du cadmium dans un microcosme de laboratoire [Master thesis].
- Gopal, B., Goal, U., 1993. Competition and allelopathy in aquatic plant communities. *Bot. Rev.* 59 (3), 155–210.
- Griffiths, J.L., Warren, P.H., Childs, D.Z., 2014. Multiple environmental changes interact to modify species dynamics and invasion rates. *Oikos* (July), 1–11.
- Grimm, V., Berger, U., DeAngelis, D.L., Polhill, J.G., Giske, J., Railsback, S.F., 2010. The ODD protocol: a review and first update. *Ecol. Model.* 221 (23), 2760–2768.
- Gustafsson, K., Blidberg, E., Elfgrén, I.K., Hellström, A., Kylin, H., Gorokhova, E., 2010. Direct and indirect effects of the fungicide azoxystrobin in outdoor brackish water microcosms. *Ecotoxicology* 19 (2), 431–444.
- Ham, L., Quinn, R., Pascoe, D., 1995. Effects of cadmium on the predator–prey interaction between the turbellarian *Dendrocoelum lacteum* (Müller, 1774) and the isopod crustacean *Asellus aquaticus* (L.). *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 29, 358–365.
- Jager, T., Zimmer, E.I., 2012. Simplified dynamic energy budget model for analysing ecotoxicity data. *Ecol. Model.* 225 (January), 74–81.
- Jonsson, T., Karlsson, P., Jonsson, A., 2006. Food web structure affects the extinction risk of species in ecological communities. *Ecol. Model.* 199, 93–106.
- Källqvist, T., 2009. Effect of water hardness on the toxicity of cadmium to the green alga *Pseudokirchneriella subcapitata* in an artificial growth medium and nutrient-spiked natural lake waters. *J. Toxicol. Environ. Health Part A* 72 (3–4), 277–283.
- Koukal, B., Guéguen, C., Pardos, M., Dominik, J., 2003. Influence of humic substances on the toxic effects of cadmium and zinc to the green alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. *Chemosphere* 53, 953–961.
- Lamonica, D., Herbach, U., Orias, F., Clément, B., Charles, S., Lopes, C., 2016. Mechanistic modelling of daphnid–algae dynamics within a laboratory microcosm. *Ecol. Model.* 320, 213–230.
- Liebig, M., Schmidt, G., Bontje, D., Kooi, B.W., Streck, G., Traunspurger, W., Knacker, T., 2008. Direct and indirect effects of pollutants on algae and algalivorous ciliates in an aquatic indoor microcosm. *Aquat. Toxicol.* 88 (June (2)), 102–110.
- Lopes, C., Péry, A.R.R., Chaumont, A., Charles, S., 2005. Ecotoxicology and population dynamics: using DEBtox models in a Leslie modeling approach. *Ecol. Model.* 188 (October (1)), 30–40.
- Martinez, J.G., Dos Santos, G., Derycke, S., Moens, T., 2012. Effects of cadmium on the fitness of, and interactions between, two bacterivorous nematode species. *Appl. Soil Ecol.* 56, 10–18.
- Naumann, B., Eberius, M., Appenroth, K.J., 2007. Growth rate based dose–response relationships and EC-values of ten heavy metals using the duckweed growth inhibition test (ISO 20079) with *Lemna minor* L. clone St. J. *Plant Physiol.* 164 (December (12)), 1656–1664.
- Njambuya, J., Stiers, I., Triest, L., 2011. Competition between *Lemna minuta* and *Lemna minor* at different nutrient concentrations. *Aquat. Bot.* 94 (May (4)), 158–164.
- Park, R.A., Clough, J.S., Wellman, M.C., 2008a. AQUATOX: modeling environmental fate and ecological effects in aquatic ecosystems. *Ecol. Model.* 213 (April (1)), 1–15.
- Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J., 2013. Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3—A Computer program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations.
- Persson, L., 1987. Effects of habitat and season on competitive interactions between roach (*Rutilus rutilus*) and perch (*Perca fluviatilis*). *Oecologia* 73, 170–177.
- Plummer, M., 2009. rjags: Bayesian graphical models using mcmc. Rpackage version 1.0.3-12.
- Preston, B.L., 2002. Indirect effects in aquatic ecotoxicology: implications for ecological risk assessment. *Environ. Manag.* 29 (3), 311–323.
- R Core Team. R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.
- Roger, P.A., Reynaud, P.A., 1978. La numération des algues en sol submergé: Loi de distribution des organismes et densité d'échantillonnage. *Rev. Ecol. Biol. Sol.* 15 (2), 219–234.
- Seregin, I.V., Ivanov, V.B., 2001. Physiological aspects of cadmium and lead toxic effects on higher plants. *Russ. J. Plant Physiol.* 48 (4), 523–544.
- Smith, S., Kwan, M.K.H., 1989. Toxicity, uptake kinetics and accumulated forms of trace metals. *Hydrobiologia* 188/189, 345–351.
- Swartzman, G., Rose, K., Kinding, A., Taub, F., 1989. Modeling the direct and indirect effects of streptomycin in aquatic microcosms. *Aquat. Toxicol.* 14, 109–130.
- Szabó, S., Rojjackers, R., Scheffer, M., Borics, G., 2005. The strength of limiting factors for duckweed during algal competition. *Arch. Hydrobiol.* 164 (1), 127–140.
- Szabo, S., Scheffer, M., Rojjackers, R., Waluto, B., Braun, M., Nagy, P.T., Borics, G., Zambrano, L., 2010. Strong growth limitation of a floating plant (*Lemna gibba*) by the submerged macrophyte (*Elodea nuttallii*) under laboratory conditions. *Freshwater Biol.* 55 (March (3)), 681–690.
- Taraldsen, J.E., Norberg-King, T.J., 1990. New method for determining effluent toxicity using duckweed (*Lemna minor*). *Environ. Toxicol. Chem.* 9 (6), 761–767.
- Taylor, E.J., Morrison, J.E., Blockwell, S.J., Tarr, A., Pascoe, D., 1995. Effects of lindane on the predator–prey interaction between *Hydra oligactis* Pallas and *Daphnia magna* Strauss. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 29 (October (3)), 291–296.
- Tipping, E., Lofts, S., Sonke, J.E., 2011. Humic ion-binding model VII: a revised parameterisation of cation-binding by humic substances. *Environ. Chem.* 8 (3), 225.
- Čypaite, A., Žaltauskaitė, J., Vencloviene, J., 2014. Assessment of chlorophyll-a, chlorophyll-b and growth rate in freshwater green algae *Pseudokirchneriella subcapitata* exposed to cadmium and copper. In: The 9th International Conference “ENVIRONMENTAL ENGINEERING”, number May.
- Vigneault, B., Campbell, P.G.C., 2005. Uptake of cadmium by freshwater green algae: effects of pH and aquatic humic substances. *J. Phycol.* 41 (1), 55–61.
- Wang, W., 1986. Toxicity tests of aquatic pollutants by using common duckweed. *Environ. Pollut. Ser. B Chem. Phys.* 11, 1–14.

5.3 Compléments à l'article

5.3.1 Détermination des distributions *a priori*

Les résultats de l'inférence à partir des données permettant de définir les distributions *a priori* sont présentés dans cette partie.

a. Compétition interspécifique

Les données utilisées pour définir des distributions *a priori* sur les paramètres de compétition interspécifique β et η sont issues de l'expérimentation 4. Dans cette expérimentation, du sédiment d'Aiguebelette a été utilisé. Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, la présence de sédiment d'Aiguebelette réduit la croissance algale et l'ajout de phosphore dans le milieu contribue à faire varier la croissance des deux espèces. C'est pourquoi ces données n'ont pas été utilisées avec toutes les autres mais uniquement pour déduire les distributions *a priori* des paramètres de compétition, sur lesquelles très peu d'information était disponible. Les comparaisons des densités *a priori* et *a posteriori* et les ajustements sont présentés sur les Figures 5.2 et 5.3.

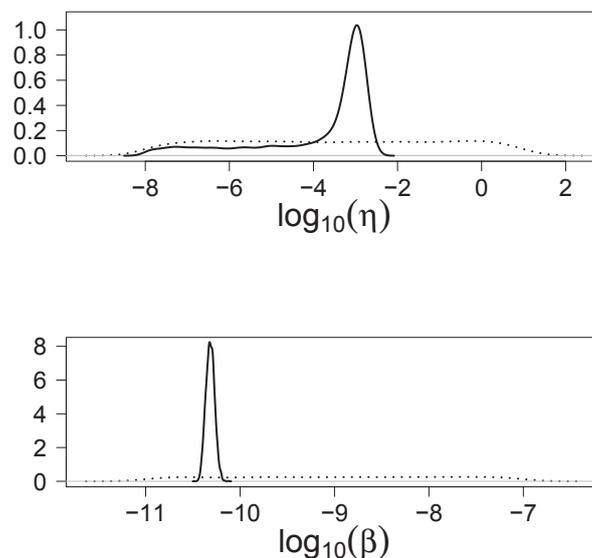


FIGURE 5.2 – Comparaison des densités *a priori* (pointillées) et *a posteriori* (continues) des paramètres d'intensité de la compétition estimés à partir des données de l'expérimentation 4.

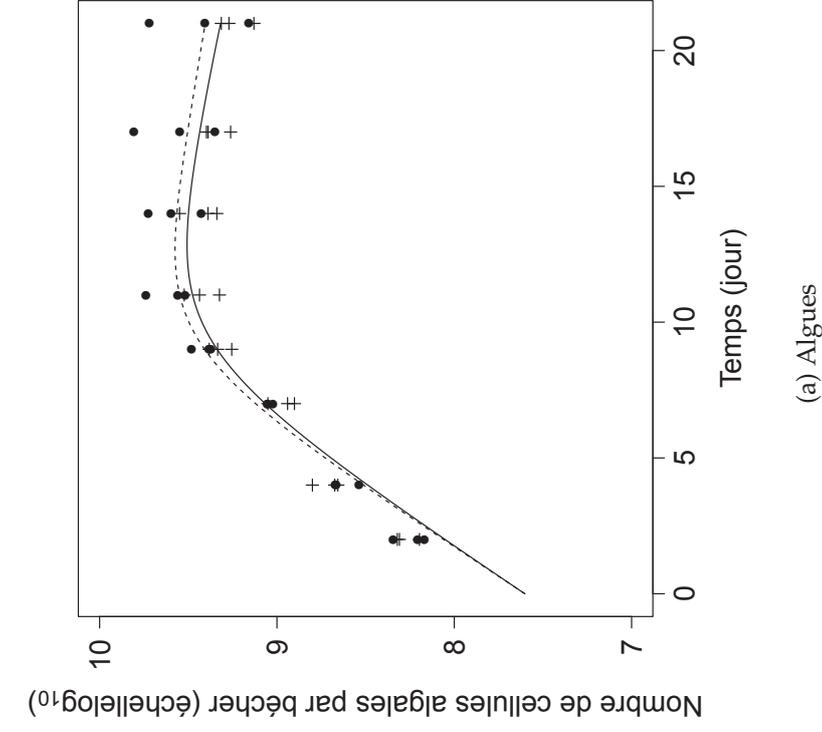
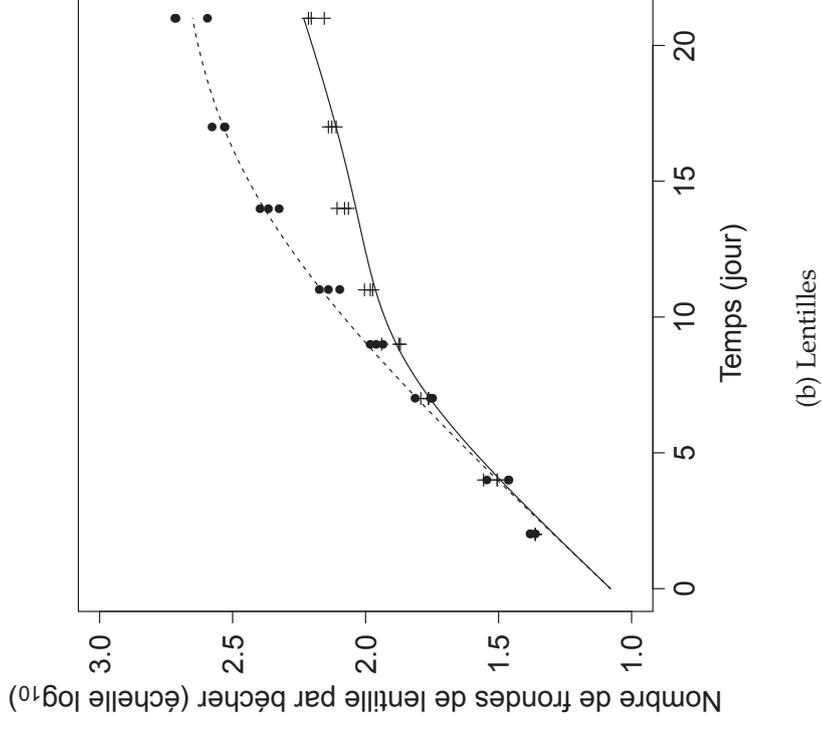


FIGURE 5.3 – Dynamique des algues (a) et des lentilles (b), seules et ensemble pour l'exp rimentation 4.

Les points et les croix repr sentent les donn es pour les esp ces seules et ensemble, respectivement. Les courbes noires pointill es et continues sont le mod le simul  avec les valeurs m dianes des param tres issues des distributions *a posteriori* pour les esp ces seules et ensemble, respectivement.

b. Effets du cadmium sur la croissance

Les effets des contaminants varient avec le milieu dans lequel ils se trouvent. Par exemple, les effets du cadmium sur la croissance dépendent de différents paramètres : EDTA (qui diminue l'effet du cadmium) Källqvist (2009), dureté de l'eau Källqvist (2009) (qui peut diminuer la toxicité Mance (1987)), pH Vigneault and Campbell (2005), substances humiques (qui diminuent l'effet du cadmium) Koukal et al. (2003); Vigneault and Campbell (2005). Il est donc préférable d'utiliser des informations issues d'expérimentations réalisées dans les mêmes conditions pour définir des distributions *a priori* sur les paramètres des fonctions de stress.

Algues

Les données utilisées pour définir les distributions *a priori* des paramètres de la fonction de stress sur le taux de croissance des algues proviennent de l'expérimentation 13, qui n'a pas été réalisée en conditions microcosmes. Cette expérimentation rapide avait pour but de préciser les distributions *a priori* des paramètres concernés. Les distributions *a posteriori* sont plus précises mais aussi différentes des distributions *a priori* (EC_{50} plus faible et pente de la fonction plus élevée) (Annexe A, Figure A1, paramètres Er_a et b_{r_a}), ce qui est probablement dû aux variations des conditions d'expérimentations (durée, taille des béchers, etc.).

Lentilles

Les données utilisées pour définir les distributions *a priori* des paramètres de la fonction de stress sur le taux de croissance des lentilles proviennent de l'expérimentation 6, qui a été réalisée en conditions microcosmes. À l'origine, cette expérimentation avait pour but d'étudier les effets du cadmium sur les deux espèces mais les concentrations en cadmium très élevées utilisées n'ont pas permis le développement des algues. Les données ont néanmoins pu être utilisées pour définir une densité *a priori* vaguement informative (avec une loi normale de grande variance) sur la EC_{50} du taux de croissance des lentilles (Table 1 de l'article, paramètre Er_d). L'inférence réalisée à partir de ces données n'a pas permis d'obtenir de l'information sur le paramètre de

penne de la fonction de stress, c'est pourquoi la distribution *a priori* a été choisie vague (Table 1 de l'article, paramètre br_d).

5.3.2 Cas particulier de l'expérimentation 8

Par souci de clarté, nous avons présenté dans l'article ci-dessus uniquement les résultats relatifs à l'expérimentation 7, bien que l'inférence ait été réalisée avec toutes les données disponibles, en particulier les données issues de l'expérimentation 8. Les données relatives aux algues de l'expérimentation 8 et l'ajustement correspondant sont présentés sur la Figure 5.4.

On constate que la dynamique algale de cet expérimentation diffère de celle observée dans les autres expérimentations présentées (voir dans l'article ci-dessus Figures 2 (a) et (b) et dans l'article du chapitre 4 Figure 4.a). Ces différences dans la dynamique algale peuvent être dues à la variabilité naturelle du système étudié. Cependant, toutes les autres expérimentations présentent des dynamiques algales similaires malgré la variabilité inter-expérimentations. Des paramètres différents ont donc été estimés pour les données de l'expérimentation 8 concernant le taux de croissance intrinsèque, le taux de sédimentation et le paramètre d'intensité de la compétition des algues sur les lentilles.

5.3.3 Comparaison des différents modèles de compétition interspécifique

Dans le modèle de Lotka Volterra type I, nous avons considéré que les algues sédimentées n'étaient pas en compétition avec les lentilles alors que toutes les algues qui se trouvent dans la colonne d'eau le sont. Or, d'après cette hypothèse, les algues de la colonne d'eau qui se trouvent vers le fond du bécber ne sont probablement plus en compétition avec les lentilles. Nous avons donc testé deux modèles supplémentaires qui prennent en compte le fait que seules les algues de la colonne d'eau présentes dans le haut du bécber sont en compétition avec les lentilles. Les deux modèles ont été testés en condition non contaminée, c'est pourquoi les variables ne dépendent que du temps t et que les paramètres sont tous constants.

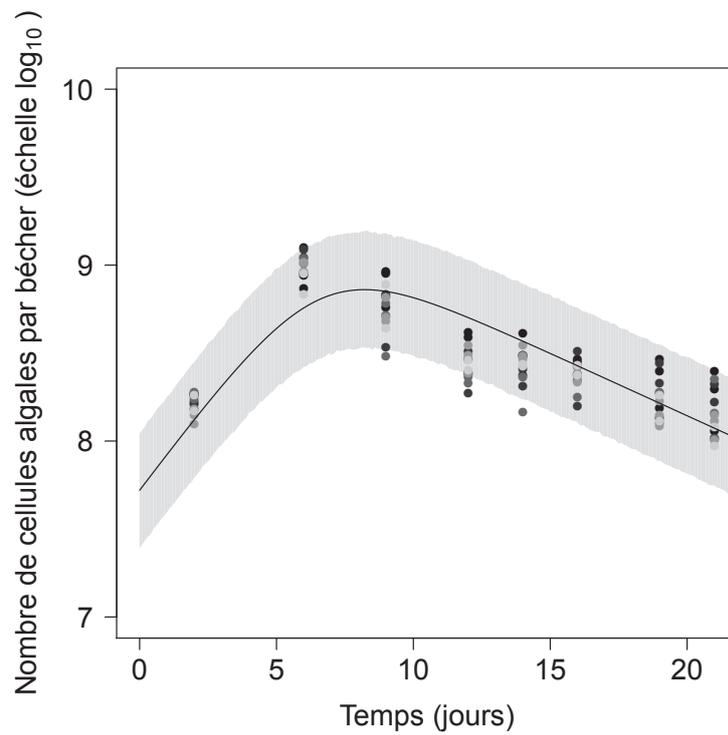


FIGURE 5.4 – Dynamique algale (en présence de lentilles) pour l'expérimentation 8. Les nuances de gris représentent les concentrations en cadmium (noir : témoin), la courbe représente le modèle simulé avec les valeurs médianes des paramètres issues des distributions *a posteriori*.

Modèle 1

On fait l'hypothèse que la compétition est localisée au niveau des racines des lentilles. Les algues en compétition sont donc les algues contenues dans le volume V_{sup} défini par les 10 premiers centimètres du bécher, qui correspondent donc à la zone dans laquelle sont les racines des lentilles :

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t)}{dt} = r_a \times N_1(t) \times \left(1 - \frac{N_1(t)}{K_1(0) \times \exp(-s \times t)}\right) - \eta \times N_1(t) \times N_d(t) - s \times N_1(t) \\ \frac{dN_d(t)}{dt} = r_d \times N_d(t) \times \left(1 - \frac{N_d(t)}{K_d}\right) - \beta \times N_d(t) \times N_{1_{sup}}(t) \\ N_{1_{sup}}(t) = \frac{V_{sup}}{V(0)} \times N_1(t) \end{cases} \quad (5.1)$$

Le paramètre β d'intensité de l'effet de la compétition des algues sur les lentilles est constant dans ce modèle.

Modèle 2

On fait l'hypothèse que l'intensité de l'effet de la compétition des algues sur les lentilles décroît avec la sédimentation algale, *i.e.* à la même vitesse (comme pour la capacité limite de la colonne d'eau $K_1(t)$), ce qui s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t)}{dt} = r_a \times N_1(t) \times \left(1 - \frac{N_1(t)}{K_1(0) \times \exp(-s \times t)}\right) - \eta \times N_1(t) \times N_d(t) - s \times N_1(t) \\ \frac{dN_d(t)}{dt} = r_d \times N_d(t) \times \left(1 - \frac{N_d(t)}{K_d}\right) - \beta(t) \times N_d(t) \times N_1(t) \\ \beta(t) = \beta_0 \times \exp(-s \times t) \end{cases} \quad (5.2)$$

Ces deux modèles n'augmentent pas le nombre total de paramètres du modèle global. Dans les deux cas, l'inférence a été réalisée avec les données de l'expérimentation 4. Les DIC obtenus sont les suivants : pour le modèle initial il est de -189, pour le modèle 1 il est de -191, et pour le modèle 2 il est de -170. Le modèle 2 présente donc un DIC supérieur aux deux autres modèles, c'est pourquoi il n'a pas été retenu. Le modèle initial et le modèle 1 présentent des DIC similaires. Cependant, le modèle 1 consiste finalement à appliquer un coefficient inférieur à 1 au paramètre d'intensité de la compétition des algues sur les lentilles (β) par rapport au modèle de départ. Etant donné

qu'aucune information n'est disponible sur ce paramètre, les deux modèles restent équivalents en terme de signification biologique des paramètres. Il a donc finalement été choisi de garder le modèle initial comme modèle final, puisqu'il est plus simple et nécessite un temps de calcul réduit par rapport au modèle 1.

5.4 Bilan

5.4.1 Principaux résultats

L'étude présentée dans ce chapitre met en évidence la compétition interspécifique existant entre les algues et les lentilles. Cette compétition est unilatérale dans les conditions du microcosme : seules les lentilles sont impactées par la présence des algues, sur lesquelles la présence des lentilles n'a pas d'impact. Les effets du cadmium sur les dynamiques des deux espèces ont également été modélisés, en prenant en compte l'effet du cadmium sur l'interaction. Les effets directs et indirects du cadmium ont pu être discriminés : trois effets directs ont été identifiés (effets sur le taux de croissance de chacune des espèces et effet sur l'intensité de la compétition) ainsi que l'effet indirect positif sur la population de lentilles dû à la baisse du nombre de cellules algales en compétition et lié à l'effet direct du cadmium sur la croissance algale.

Des intervalles de crédibilité des EC_{50} ont été obtenus pour les taux de croissance des deux espèces (pour les algues 39.8 [37.2, 41.7] $\mu\text{g/L}$ et pour les lentilles 204 [102, 457] $\mu\text{g/L}$). Pour l'intensité de la compétition des algues sur les lentilles, l'intervalle est très large (0.62 [0.11, 1318] $\mu\text{g/L}$) mais l'allure de la fonction de stress nous permet de supposer que l'intensité de l'effet de la compétition est en fait impactée dès les plus faibles concentrations testées.

En plus de ces EC_{50} , l'estimation des coefficients de courbure des fonctions de stress (b_{r_a} , b_{r_d} et b_{β}) permet de simuler les valeurs des paramètres affectés par le cadmium quelle que soit la concentration, en tenant compte de l'incertitude. La vérification sur les fonctions de stress a été effectuée en estimant les paramètres impactés par le cadmium indépendamment les uns des autres pour chacune des concentrations testées.

Ceci nous a permis de valider la forme des fonctions log-logistiques choisies.

5.4.2 Limites

La principale limite est la prise en compte de la variabilité entre expérimentations. En effet, nous avons choisi d'utiliser des paramètres relatifs aux algues différents pour les données de l'expérimentation discordante (expérimentation 8). Néanmoins, ce choix est discutable puisqu'il remet en question la généralité du modèle développé. De plus, le faible nombre d'expérimentations menées ne permet pas réellement de savoir si cette expérimentation diffère significativement des autres ou si on a affaire seulement à une importante variabilité inter-expérimentations.

Par ailleurs, cette limite confirme l'importance d'une connaissance approfondie du microcosme sans contaminant qui nécessite un nombre important de données. La conduite d'expérimentations uniquement en condition non contaminée est donc essentielle car le faible nombre de données témoins dans les expérimentations avec cadmium n'apparaît pas suffisant pour évaluer la variabilité et estimer avec précision les paramètres témoins.

La relative simplicité du modèle permet d'utiliser des paramètres différents pour décrire les données de l'expérimentation 8. Cependant, avec un niveau de complexité du système plus élevé, avec plus d'espèces et/ou des processus plus finement détaillés, il deviendrait difficile de conserver ce niveau de détail dans la modélisation et le choix des paramètres. Ce problème sera exploré plus avant dans le prochain chapitre.

Ce chapitre confirme également un problème de protocole expérimental mentionné dans le chapitre 2. En effet, la différence de sensibilité des espèces au cadmium semble exiger des gammes de concentrations spécifiques pour les différentes espèces ; par exemple la gamme de concentrations de l'expérimentation 8 ne permet pas d'estimer les paramètres de la fonction de stress puisque les algues ne sont pas impactées aux concentrations testées (inférieures à 10 $\mu\text{g/L}$). Pour pallier une estimation très peu précise des paramètres, il serait nécessaire d'augmenter le nombre d'essais à mener, avec plusieurs expérimentations impliquant des gammes de concentrations différentes.

Cette étape de la thèse a permis de mettre en évidence l'intérêt de la modélisation pour décrire les effets d'un contaminant sur une interaction entre espèces en discriminant les effets directs et indirects. En effet, des hypothèses ont pu être testées grâce aux données acquises, sans qu'il soit nécessaire de réaliser des expérimentations spécifiques autres que celles menées en microcosmes. Cependant, nous avons constaté que malgré le nombre minimum d'espèces en interaction, l'acquisition de ces résultats reste compliquée : plusieurs expérimentations impliquant beaucoup de béchers ont été conduites, les temps de calcul (de l'ordre de 4 heures) semblent déjà longs au regard de la simplicité du modèle et l'estimation de certains paramètres n'est pas très précise malgré une quantité de données assez importante (en condition non contaminée et avec deux gammes de concentrations différentes en condition contaminée).

Les interactions algues-daphnies-lentilles en présence de contaminant et retour sur le plan d'expérience

Sommaire

6.1 Introduction	196
6.2 Matériel et méthode	196
6.2.1 Expérimentations et données utilisées	196
6.2.2 Modèle et équations	200
6.2.3 Distributions <i>a priori</i>	206
6.2.4 Ajustements et analyses	206
6.2.5 Ajustements par inférence bayésienne	213
6.3 Résultats	214
6.3.1 Décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	214
6.3.2 Déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress	224
6.3.3 Evaluer l'utilisation de données monospécifiques seules pour dé- crire le fonctionnement du microcosme complet en condition conta- minée	227
6.4 Discussion	233
6.4.1 Description du fonctionnement du microcosme complet en condi- tion contaminée	233

6.4.2	Détermination des données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress	238
6.4.3	Evaluation de l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée	241
6.5	Conclusion	242

6.1 Introduction

L'étude du fonctionnement du microcosme complet à trois espèces en présence de cadmium constitue la dernière étape de cette thèse. Ce chapitre a également pour but de questionner la mise en place des expérimentations réalisées avec le microcosme dans un cadre général d'optimisation des plans d'expérience.

Ce chapitre se décompose en trois objectifs : 1) estimer les paramètres du modèle complet pour décrire le fonctionnement du microcosme à trois espèces en condition contaminée, 2) déterminer les données suffisantes pour estimer les paramètres d'effet du cadmium sur les différents processus régissant le fonctionnement du microcosme et 3) tester l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée.

Ce chapitre fait l'objet d'un article en cours de préparation, il sera donc organisé de manière "classique". Il présente tout d'abord les données et le modèle utilisé. Les analyses effectuées sur le modèle pour répondre aux objectifs 2 et 3 sont également développées. Les résultats de l'ajustement du modèle complet sur la totalité des données disponibles ainsi que les résultats des différentes analyses sont ensuite présentés puis discutés.

6.2 Matériel et méthode

6.2.1 Expérimentations et données utilisées

Pour estimer les paramètres du modèle décrivant la dynamique du microcosme complet en condition contaminée et évaluer l'apport des différents types de données à l'estimation des paramètres, des données issues de plusieurs expérimentations ont été utilisées. Les données en condition non contaminée proviennent des expérimentations 3, 5 et 11, tandis que les données en condition contaminée proviennent des expérimentations 7, 8 et 9 (Tableau 2.1). Ces données sont schématisées sur la Figure 6.1.

Les expérimentations 7 et 8 ont été décrites dans le chapitre 5. Dans ce chapitre 6, toutes les données de l'expérimentation 8 sont utilisées, c'est-à-dire les données issues des béchers contenant des daphnies, des algues et des lentilles (alors que seules les données issues des béchers contenant des lentilles seules et des algues et des lentilles étaient utilisées dans le chapitre 5). Dans ces béchers, au début de l'expérimentation 8, ont été introduites : $2 \cdot 10^4$ cells/mL d'algues, 6 frondes de lentilles et 10 daphnies. Comme indiqué dans le chapitre 2, les daphnies sont comptées et leur taille mesurée tous les deux ou trois jours ; les néonates ôtés des béchers puis comptés. L'expérimentation a duré 21 jours.

Quatre types de données ont été collectées : 1) le nombre de cellules algales dans la colonne d'eau au cours du temps avec les lentilles et les daphnies, noté YFD_1 ; 2) le nombre de frondes de lentille au cours du temps avec les algues et les daphnies, noté FYD ; 3) la taille des daphnies au cours du temps, notée W ; et 4) le nombre de daphnies vivantes par bécher au cours du temps, noté Z . Ces données s'ajoutent à celles décrites dans le chapitre 5, section 5.2.

L'expérimentation 9 n'a été conduite qu'avec des algues, sans sédiment, en condition contaminée. Au début de l'expérimentation 9, $2 \cdot 10^4$ cells/mL d'algues sont introduites dans chaque bécher et le nombre d'algues par bécher dans la colonne d'eau et au fond du bécher sont suivis au cours du temps durant 14 jours.

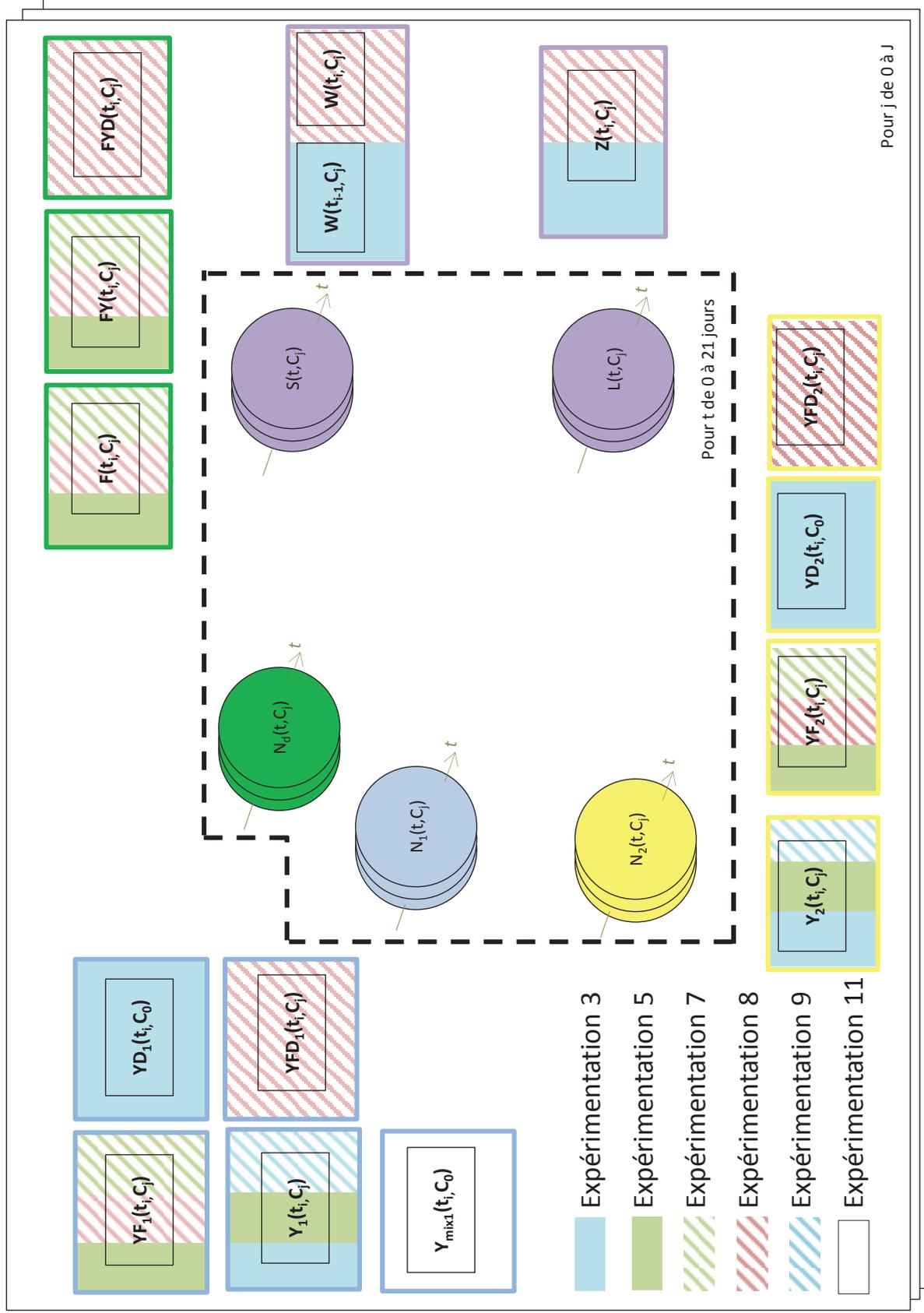


FIGURE 6.1 – Schéma des données utilisées pour l'estimation des paramètres des modèles du chapitre 6.

Les couleurs pleines et hachurées représentent les expérimentations sans cadmium et avec, respectivement.

Des sacrifices ont été réalisés au jour 7 pour mesurer le nombre d'algues par béccher au fond du béccher, comme expliqué dans le chapitre 4. La gamme de concentrations en cadmium testées dans cette expérimentation est la suivante : 0,00 ; 26,17 ; 36,44 ; 40,79 ; 43,56 $\mu\text{g/L}$ (concentrations mesurées). Les données collectées au cours de l'expérimentation 9 sont donc le nombre de cellules algales dans la colonne d'eau, noté Y_1 , et au fond du béccher, noté Y_2 , au cours du temps.

6.2.2 Modèle et équations

Les processus modélisés dans cette partie regroupent tous les processus identifiés dans le fonctionnement du microcosme, c'est-à-dire la croissance et la sédimentation des algues, la croissance des lentilles, la compétition interspécifique entre algues et lentilles, la croissance et la survie des daphnies et le broutage des algues par les daphnies.

Pour rappel, la partie déterministe du modèle décrivant le fonctionnement du microcosme avec les trois espèces s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN_1(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_1(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_1(t, C_j)}{K_1(0) \exp(-s \times t)} \right) - s \times N_1(t, C_j) - D_1(t, C_j) \times g_1(t, C_j) \\ \frac{dN_2(t, C_j)}{dt} = r_a(C_j) \times N_2(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_2(t, C_j)}{K_2} \right) + s \times N_1(t, C_j) \\ - (D_s(t, C_j) - D_1(t, C_j)) \times g_2(t, C_j) \\ \frac{dN_d(t, C_j)}{dt} = r_d(C_j) \times N_d(t, C_j) \times \left(1 - \frac{N_d(t, C_j)}{K_d} \right) - \beta(C_j) \times N_d(t, C_j) \times N_1(t, C_j) \\ L(t, C_j) = L_\infty - (L_\infty - L_0) \times \exp(-k(C_j) \times t) \\ S(t, C_j) = \exp(-(m_0 + k_s \times \max(0, C_j - NEC)) \times t) \end{array} \right. \quad (6.1)$$

Le modèle correspond au modèle complet, avec le processus de broutage décrit par une fonction de Holling type II (Equations (3.12) et (3.13), Tableau 3.1). La partie stochastique du modèle liant les variables aux données comporte toutes les équations du Tableau 3.2, exceptée l'équation (3.18c). Le modèle compte au total 28 paramètres, rapportés dans le Tableau 6.1. Le schéma du modèle complet avec variables, paramètres, données et liens (déterministes et stochastiques) est visible sur la Figure 6.2.

Tableau 6.1 – Variables et paramètres du modèle de référence.

Symbole	Définition	Unité	Distribution <i>a priori</i> ou valeur	Quantiles 2.5, 50, 97.5 des % distributions <i>a posteriori</i>		
$N_1(t, C_j)$	Nombre de cellules algales par bécber dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# cellules par bécber				
$N_2(t, C_j)$	Nombre de cellules algales par bécber au fond du bécber au temps t et à la concentration C_j	# cellules par bécber				
$V_1(0)$	Volume de la colonne d'eau à $t = 0$	mL	2000			
V_2	Volume d'eau occupé par les algues sédimentées	mL	100			
r_{a_0}	Taux de croissance intrinsèque des algues dans le témoin	jour ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	0.55	0.57	0.59
$r_{a_{0ES}}$	Taux de croissance intrinsèque des algues dans le témoin pour l'expérimentation 8	jour ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	0.78	0.83	0.87
E_{r_a}	Concentration en cadmium pour laquelle r_{a_0} est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$	$\log_{10}(E_{r_a}) \sim \mathcal{N}(1.78,0.1)$	1.54	1.56	1.58
b_{r_a}	Coefficient de courbure de la fonction de stress sur r_a	-	$\log_{10}(b_{r_a}) \sim \mathcal{N}(0.24,0.1)$	0.37	0.43	0.49
$K_1(0)$	Capacité limite dans la colonne d'eau pour les algues à $t = 0$	# cellules par bécber	$\log_{10}(K_1(0)) \sim \mathcal{U}(8,11)$	9.54	9.59	9.65
K_2	Capacité limite au fond du bécber pour les algues	# cellules par bécber	$\log_{10}(K_2) \sim \mathcal{U}(8,11)$	9.12	9.22	9.33
s	Taux de sédimentation algale	jour ⁻¹	$\log_{10}(s) \sim \mathcal{U}(-2,0)$	-1.19	-1.14	-1.09
s_{ES}	Taux de sédimentation algale pour l'expérimentation 8	jour ⁻¹	$\log_{10}(s_{ES}) \sim \mathcal{U}(-2,0)$	-0.78	-0.75	-0.73
β_0	Intensité de la compétition des algues sur les lentilles dans le témoin	# cellules par bécber ⁻¹ .jour ⁻¹	$\log_{10}(\beta_0) \sim \mathcal{U}(-11,-9)$	-9.97	-9.93	-9.89
β_{0ES}	Intensité de la compétition des algues sur les lentilles dans le témoin pour l'expérimentation 8	# cellules par bécber ⁻¹ .jour ⁻¹	$\log_{10}(\beta_{0ES}) \sim \mathcal{U}(-11,-9)$	-9.53	-9.46	-9.40
E_β	Concentration en cadmium pour laquelle β_0 est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$	$\log_{10}(E_\beta) \sim \mathcal{U}(-1,4)$	-0.99	-0.77	-0.15
b_β	Coefficient de courbure de la fonction de stress sur β	-	$\log_{10}(b_\beta) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	-1.11	-0.82	-0.62
$g_1(t, C_j)$	Nombre de cellules algales consommées par daphnies et par jour dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# cellules.jour ⁻¹ .daphnie ⁻¹				

Symbole	Définition	Unité	Distribution <i>a priori</i> ou valeur	Quantiles 2.5, 50, 97.5 % des distributions <i>a posteriori</i>		
$g_2(t, C_j)$	Nombre de cellules algales consommées par daphnies et par jour au fond du bécher au temps t et à la concentration C_j	# cellules.jour ⁻¹ .daphnie ⁻¹				
γ	Coefficient de régression	-	3			
δ_2	Taux d'ingestion maximum	cell.daphnie ⁻¹ .jour ⁻¹ .mm ⁻³	$\log_{10}(\delta_2) \sim \mathcal{U}(5,7.1)$	6.55	6.99	7.10
δ_3	Densité algale pour laquelle le taux d'ingestion maximum est divisé par deux	cell.mL ⁻¹	$\log_{10}(\delta_3) \sim \mathcal{U}(5.5,7)$	5.86	6.36	6.50
$D_1(t, C_j)$	Nombre de daphnies vivantes dans la colonne d'eau au temps t et à la concentration C_j	# daphnies				
δ	Ratio de densités algales pour lequel la moitié des daphnies vivantes broutent dans la colonne d'eau	-	$\log_{10}(\delta) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	-3.14	-2.83	-2.17
$S(t, C_j)$	Probabilité de survie d'une daphnie au temps t et à la concentration C_j	-				
$D_s(t, C_j)$	Nombre de daphnies vivantes dans le bécher au temps t et à la concentration C_j	# daphnies				
m_0	Taux de mortalité des daphnies dans le témoin	daphnie.jour ⁻¹	$\log_{10}(m_0) \sim \mathcal{U}(-4,0)$	-1.89	-1.71	-1.56
k_S	Pente de la fonction de stress sur la survie	1/($\mu\text{g.L}^{-1}$)jour ⁻¹	$\log_{10}(k_S) \sim \mathcal{U}(-4,4)$	-1.80	-1.54	-1.30
NEC	Concentration sans effet sur la survie des daphnies	$\mu\text{g.L}^{-1}$	$\log_{10}(NEC) \sim \mathcal{U}(-2,1)$	0.47	0.65	0.76
$L(t, C_j)$	Taille des daphnies au temps t et à la concentration C_j	mm				
$L(0)$	Taille à la naissance des daphnies	mm	$\mathcal{N}(1,0.10)$	0.600	0.602	0.613
L_∞	Taille maximale des daphnies	mm	$\mathcal{N}(4.8,0.59)$	3.85	3.92	3.99
k_0	Taux de croissance des daphnies dans le témoin	jour ⁻¹	$\mathcal{N}(0.11,0.030)$	0.138	0.146	0.154
E_k	Concentration en cadmium pour laquelle k_0 est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$	$\log_{10}(E_k) \sim \mathcal{U}(-1,4)$	1.26	1.68	3.31
b_k	Coefficient de courbure de la fonction de stress sur k	-	$\log_{10}(b_k) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	-0.68	-0.25	0.015
$N_d(t, C_j)$	Nombre de frondes de lentilles par bécher au temps t et à la concentration C_j	# frondes par bécher				
r_{d_0}	Taux de croissance intrinsèque des lentilles dans le témoin	jour ⁻¹	$\mathcal{U}(0,2)$	0.23	0.24	0.25
E_{r_d}	Concentration en cadmium pour laquelle r_{d_0} est réduite de 50 %	$\mu\text{g.L}^{-1}$	$\log_{10}(E_{r_d}) \sim \mathcal{N}(2.44,0.2)$	1.96	2.30	2.67

Symbole	Définition	Unité	Distribution <i>a priori</i> ou valeur	Quantiles 2.5, 50, 97.5 % des distributions <i>a posteriori</i>		
b_{r_d}	Coefficient de courbure de la fonction de stress sur r_d	-	$\log_{10}(b_{r_d}) \sim \mathcal{U}(-3,3)$	-1.05	-0.91	-0.77
K_d	Capacité limite pour les lentilles	# frondes par b�cher	$\log_{10}(K_d) \sim \mathcal{U}(0,3)$	2.33	2.38	2.43
σ_{N_1}	Variance du \log_{10} -nombre de cellules algales dans la colonne d'eau	# cellules par b�cher	$\mathcal{U}(0,5)$	0.17	0.18	0.19
σ_{N_2}	Variance du \log_{10} -nombre de cellules algales au fond du b�cher	# cellules par b�cher	$\mathcal{U}(0,5)$	0.21	0.25	0.31
σ_L	Variance de la taille des daphnies	mm	$\mathcal{U}(0,2)$	0.30	0.32	0.34
σ_{N_d}	Variance du \log_{10} -nombre de frondes de lentilles par b�cher	# frondes par b�cher	$\mathcal{U}(0,2)$	0.095	0.10	0.11

L'index i correspond aux temps de mesure, $t(i)$ correspond au $i^{\text{ me}}$ temps de mesure. C_j repr sente la $j^{\text{ me}}$ concentration en cadmium test e. \mathcal{N} symbolise la loi normale, \mathcal{B} la loi binomiale.

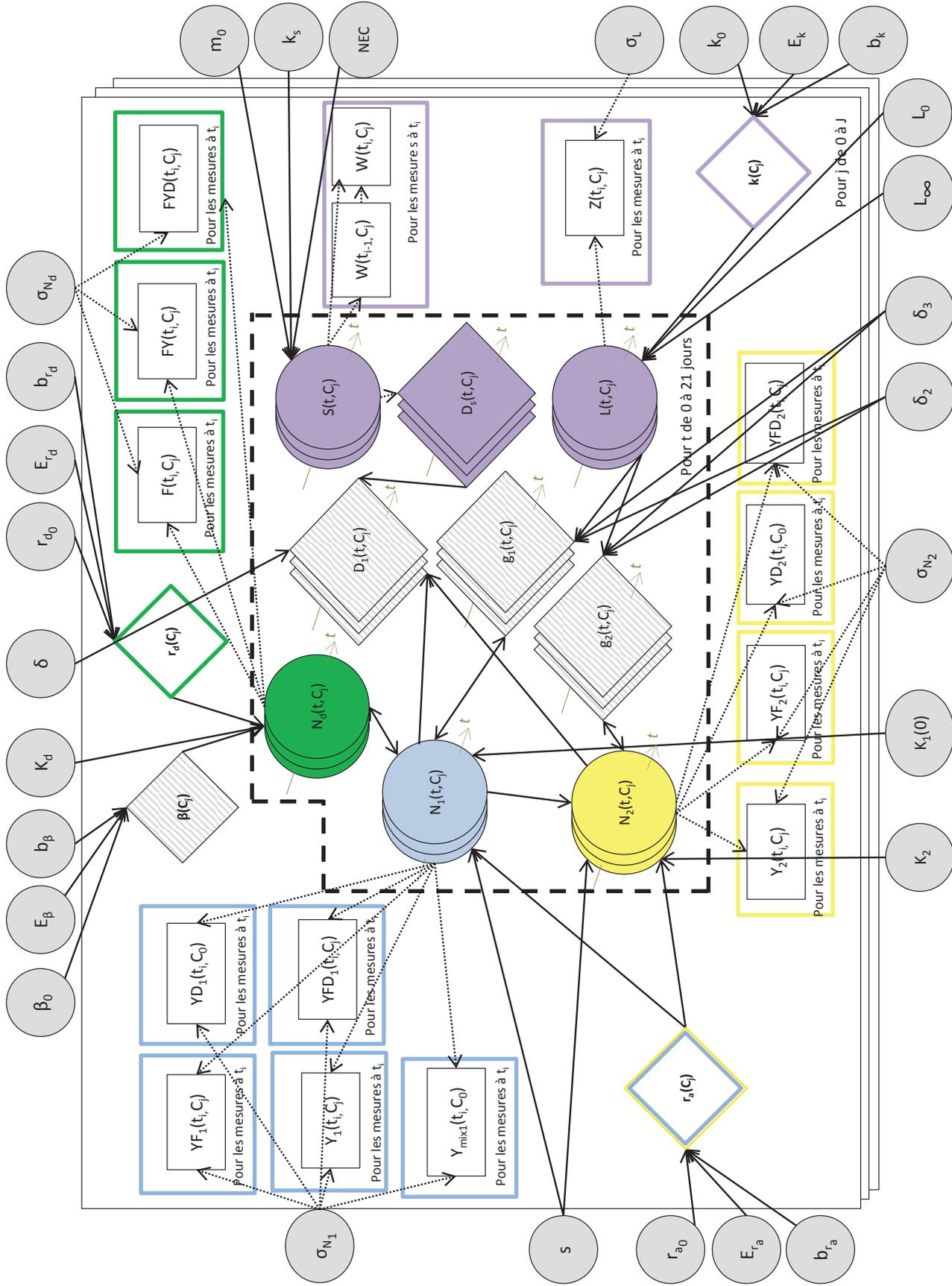


FIGURE 6.2 – Représentation graphique du modèle décrit en section 6.2.2.

Les grands ronds colorés représentent les variables d'état, les losanges les variables intermédiaires, les rectangles les données et les petits ronds gris les paramètres. Le code couleur est le suivant : le bleu correspond aux algues dans la colonne d'eau, le jaune aux algues sur le fond du béccher, le vert aux lentilles et le violet aux daphnies. Les variables intermédiaires hachurées correspondent aux processus d'interactions (broutage et compétition). Les flèches continues représentent les liens déterministes, les flèches pointillées les liens stochastiques. Les flèches fines grises symbolisent la dépendance au temps des variables. Le polygone pointillé indique la dépendance au temps des variables. Les feuillets indiquent la hiérarchie correspondant à la concentration en cadmium.

6.2.3 Distributions *a priori*

Dans ce chapitre, les distributions *a priori* utilisées pour les paramètres relatifs aux algues et aux lentilles, ainsi qu'à l'effet du cadmium sur ces deux espèces, sont les mêmes que celles présentées dans le chapitre 5 (Table 1 de l'article du chapitre 5). Pour les paramètres relatifs à la survie des daphnies et à l'effet du cadmium sur cette survie, les distributions *a priori* utilisées sont vaguement informatives (uniformes larges). Les distributions *a priori* pour les paramètres de croissance des daphnies sont les mêmes que celles utilisées au chapitre 4 (Table 1 de l'article du chapitre 4), et celles utilisées pour les paramètres d'effet du cadmium sur cette croissance sont vaguement informatives (uniforme larges). Les distributions *a priori* des paramètres sont résumées dans le Tableau 6.1.

6.2.4 Ajustements et analyses

Cette partie présente les différentes estimations de paramètres effectuées ainsi que les analyses réalisées pour chacun des trois objectifs du chapitre.

a. Objectif 1 : Décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée

Le premier objectif de ce chapitre est de décrire le fonctionnement du microcosme à trois espèces en condition contaminée. Deux ajustements exploratoires pour les fonctions de stress sur les processus relatifs aux daphnies ont été effectués. Ensuite, les paramètres des modèles complets ont été estimés avec toutes les données disponibles. Les différents modèles utilisés sont résumés dans le Tableau 6.2.

Fonctions de stress sur les processus relatifs aux daphnies

Dans un premier temps, les fonctions de stress à utiliser sur les processus de croissance et de survie des daphnies (Equation (3.6), Tableau 3.1 et Equation (3.21), Tableau 3.2 pour la croissance ; Equations (3.5), Tableau 3.1 et Equation (3.20), Tableau 3.2 pour la survie) ont été ajustées sur les données relatives à ces processus (taille des daphnies et nombre de daphnies vivantes) issues de toutes les expérimentations.

Tableau 6.2 – Modèles utilisés.

Nom	Caractéristiques
Modèle I	Modèle complet à 28 paramètres, Eq. (6.1)
Modèle II	Modèle complet à 31 paramètres, $r_{a_{0E8}}$, s_{E8} , β_{0E8} pour les données de l'expérimentation 8
Modèle III	Modèle complet avec $j = 0$ (témoins uniquement) et $r_{a_{0E8}}$, s_{E8} , β_{0E8} pour les données de l'expérimentation 8 (21 paramètres)

Ces ajustements ont été réalisés pour vérifier que le cadmium a un effet sur ces processus tout en réduisant les temps de calcul. Différents modèles traduisant différents types d'effet du cadmium ont donc été testés. Les DIC des modèles de croissance et de survie avec et sans effet du cadmium sur le taux de croissance et le taux de survie ont été comparés. Les distributions *a priori* des paramètres des différents processus relatifs aux daphnies n'ont cependant pas été modifiées pour effectuer ensuite l'inférence avec le modèle complet.

Modèles complets

Deux modèles ont été testés. Le premier modèle est le modèle tel qu'il est présenté en section 6.3, Eq. (6.1) (Modèle I, Tableau 6.2). Dans le second modèle (Modèle II, Tableau 6.2), trois paramètres supplémentaires ont été ajoutés pour décrire, avec les équations du modèle I, les données de l'expérimentation 8. Ainsi, le taux de croissance intrinsèque des algues, le taux de sédimentation algale et le paramètre d'intensité de la compétition des algues sur les lentilles sont différents pour les données de l'expérimentation 8 (comme discuté dans le chapitre 5) et notés $r_{a_{0E8}}$, s_{E8} et β_{0E8} , respectivement. Les paramètres du modèle I sont conservés pour les autres données. Ce qui fait au total 31 paramètres pour le modèle II.

Dans le but d'évaluer l'intérêt d'utiliser des paramètres relatifs aux algues différents pour les données de l'expérimentation 8, les modèles I et II ont été ajustés sur toutes les données disponibles et les résultats de ces deux ajustements ont été comparés. Le modèle choisi sera dénommé "modèle de référence" dans la suite de cette section.

b. Objectif 2 : Déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress

Le second objectif de ce chapitre consiste à déterminer les données et les gammes de concentrations testées qui sont nécessaires à l'estimation des paramètres des fonctions de stress pour les différentes espèces. Pour cela, quatre jeux de données partiels ont été utilisés pour estimer les paramètres des fonctions de stress avec le modèle de référence. Les différentes estimations obtenues ont ensuite été comparées aux estimations à partir de toutes les données disponibles qui constituent les estimations de référence. Le Tableau 6.3 résume les différents jeux de données utilisés pour chaque configuration et la méthode est schématisée sur la Figure 6.3. Pour chacune des estimations, toutes les données témoin sont utilisées, alors que seule une partie des données en condition contaminée est utilisée pour constituer les jeux de données partiels.

Le jeu de données A comporte toutes les données en condition contaminée à l'exception des données "monospécifiques" qui correspondent aux données issues de béchers ne contenant qu'une seule espèce (données notées Y_1 et Y_2 pour les algues et F pour les lentilles). Les données de l'expérimentation 9 et les données "lentilles seules" des expérimentations 7 et 8 n'ont donc pas été incluses dans ce jeu de données A.

Le jeu de données B comporte toutes les données en condition contaminée à l'exception des données "microcosme partiel" qui correspondent aux données issues de béchers ne contenant que deux espèces (données notées YF_1 et YF_2 pour les algues et FY pour les lentilles). Les données concernant les algues et les lentilles provenant de béchers "algues et lentilles ensemble" des expérimentations 7 et 8 n'ont donc pas été incluses dans ce jeu de données B.

Pour le jeu de données C, les seules données en condition contaminée utilisées sont les données "microcosme complet", qui correspondent aux données issues des béchers de l'expérimentation 8 contenant les trois espèces (données notées YFD_1 et YFD_2 pour les algues et FYD pour les lentilles).

Le jeu de données D comporte toutes les données en condition contaminée à l'exception des données algues et lentilles (seules et ensemble) de l'expérimentation 8. Les concentrations en cadmium testées dans l'expérimentation 8 sont très inférieures (concentration maximum testée : $9.09 \mu\text{g/L}$) aux concentrations en cadmium pour

Tableau 6.3 – Jeux de données utilisés pour l'estimation des paramètres du modèle complet (détermination des données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress).

Nom	Données utilisées	Intérêt
Référence	Toutes les données disponibles	
Jeu de données A	Toutes les données, à l'exception des données monospécifiques des expérimentations 7, 8 et 9	Evaluer l'apport de l'information des données monospécifiques
Jeu de données B	Toutes les données, à l'exception des données des microcosmes partiels à deux espèces des expérimentations 7 et 8	Evaluer l'apport de l'information des données "microcosmes partiels"
Jeu de données C	Toutes les données sans contaminant et les données en microcosme complet à trois espèces de l'expérimentation 8	Evaluer si l'information apportées par les données "microcosme complet" est suffisante
Jeu de données D	Toutes les données, à l'exception des données monospécifiques et microcosmes partiels à deux espèces de l'expérimentation 8	Evaluer l'information apportée par des données à des concentrations faibles par rapport aux concentrations pour lesquelles les taux de croissance sont réduits de 50 % connues

lesquelles les taux de croissance sont réduits de 50 % (E_{r_a} et E_{r_d}) estimées dans le chapitre précédent pour les algues (39.8 [37.2, 41.7] $\mu\text{g/L}$) et les lentilles (204 [102, 457] $\mu\text{g/L}$). Le jeu de données D est utilisé pour évaluer l'information apportée par les données collectées à des concentrations très inférieures à E_{r_a} et E_{r_d} , pour les algues et les lentilles.

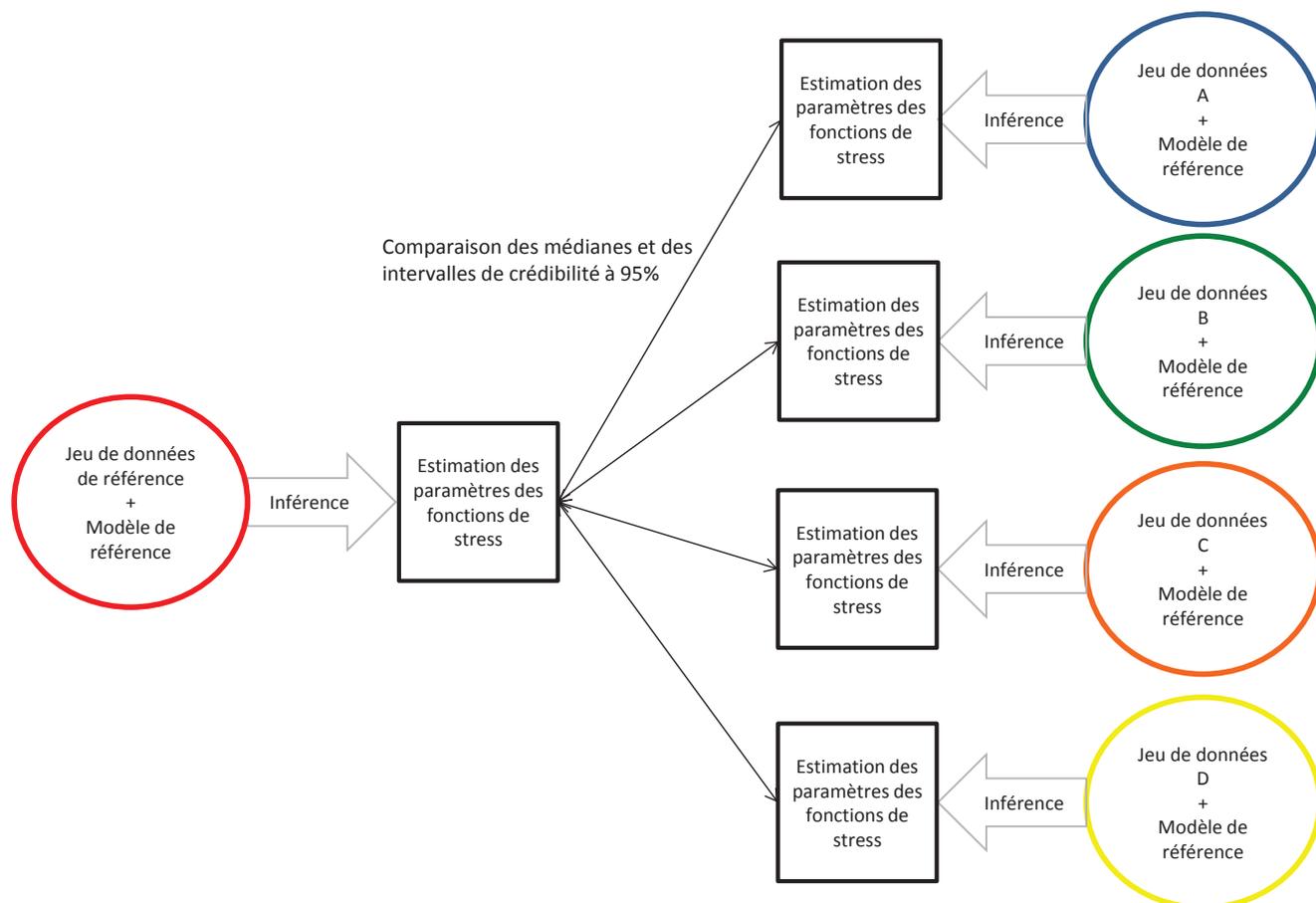


FIGURE 6.3 – Schéma de la méthode d'analyse utilisée pour déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress.

c. Objectif 3 : Evaluer l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée

Pour ce troisième objectif, la capacité des données monospécifiques seules à décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée a été évaluée. Pour cela, l'analyse résumée sur la Figure 6.4 a été effectuée.

Tout d'abord, les paramètres du modèle complet sans contaminant ont été estimés à partir des données des expérimentations en condition non contaminée (expérimentations 3, 5 et 11, Tableau 2.1) et des données témoins des expérimentations en condition contaminée (données témoins des expérimentations 7, 8 et 9, Tableau 2.1). Ensuite, les paramètres des fonctions de stress, à l'exception de la valeur du paramètre dans le

témoin (E_k et b_k pour les taux de croissance et le paramètre d'intensité de la compétition, et NEC et k_S pour le taux de survie) ont été estimés indépendamment, en utilisant les données "monospécifiques". Pour les lentilles, les paramètres du modèle "lentilles seules" (Equation (3.17c) avec $N_1 = 0$ et Equation (3.16b) pour la partie déterministe (Tableau 3.1) et Equation (3.19a) pour la partie stochastique (Tableau 3.2)) ont été estimés avec les données issues des béchers ne comportant que des lentilles des expérimentations 7 et 8. Pour les algues, les paramètres du modèle "algues seules" (Equation (3.17a et b), avec $N_d = 0$ et $D_s = 0$, et Equation (3.16a) pour la partie déterministe (Tableau 3.1) et Equations (3.18a et b) pour la partie stochastique (Tableau 3.2)) ont été estimés avec les données issues de l'expérimentation 9. Pour les daphnies, les paramètres du modèle décrivant la croissance et la survie des daphnies (Equations (3.5), (3.6) et (3.16e) pour la partie déterministe (Tableau 3.1) et Equations (3.20) et (3.21) pour la partie stochastique (Tableau 3.2)) ont été estimés avec les données de croissance et de survie des daphnies issues de l'expérimentation 8.

Des données en condition contaminée ont ensuite été simulées avec les distributions jointes des paramètres du modèle en condition non contaminée (issues de la première phase d'estimation) et les distributions jointes des paramètres des fonctions de stress issues de la seconde phase d'estimation. Ces données simulées ont ensuite été comparées aux données observées en microcosme complet, c'est-à-dire aux données de l'expérimentation 8 issues des béchers comprenant les trois espèces. Pour cela, le pourcentage de données observées comprises dans la bande de crédibilité à 95% des données simulées a été calculé.

6.2.5 Ajustements par inférence bayésienne

Après discrétisation du modèle par la méthode d'Euler, avec un pas de temps égal à 0.1, trois chaînes MCMC ont été réalisées en parallèle pour chacun des ajustements détaillés ci-dessus. Environ 110 000 itérations ont été nécessaires pour arriver à la convergence des chaînes pour les modèles I et II, soit quatre à cinq jours de calcul pour chacun des modèles.

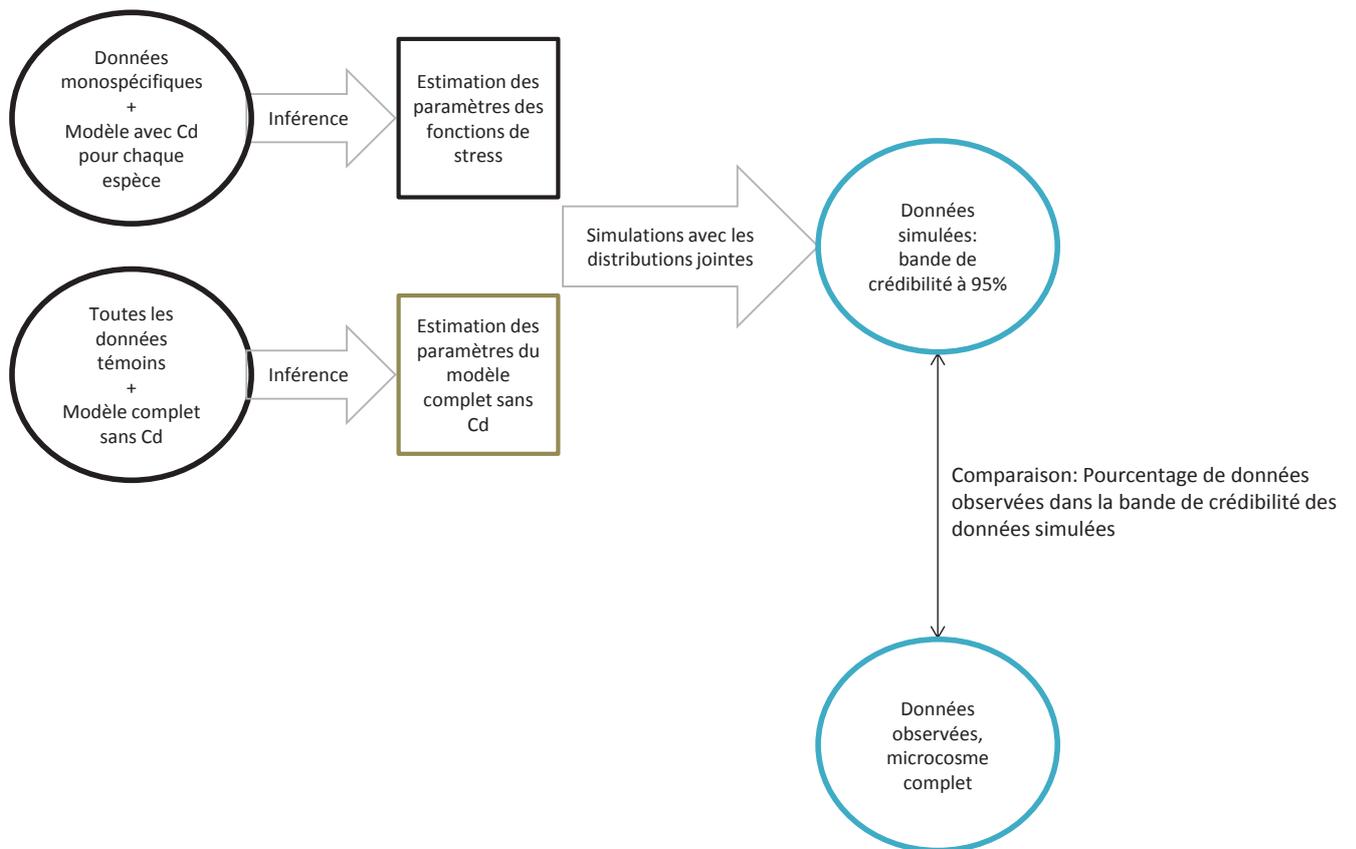


FIGURE 6.4 – Schéma de la méthode d'analyse utilisée pour répondre à l'objectif 3.

6.3 Résultats

Pour chaque simulation, la convergence de l'algorithme MCMC est vérifiée par le critère de Gelman et Rubin [Gelman and Rubin \(1992\)](#). Les résultats sont présentés pour chacun des objectifs du chapitre.

6.3.1 Décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée

Cette section présente les résultats de l'estimation des paramètres des modèles I et II avec toutes les données disponibles. Je présenterai tout d'abord les distributions marginales des paramètres obtenues avec chacun des deux modèles, puis les ajustements du modèle aux différentes données par espèce pour le modèle choisi.

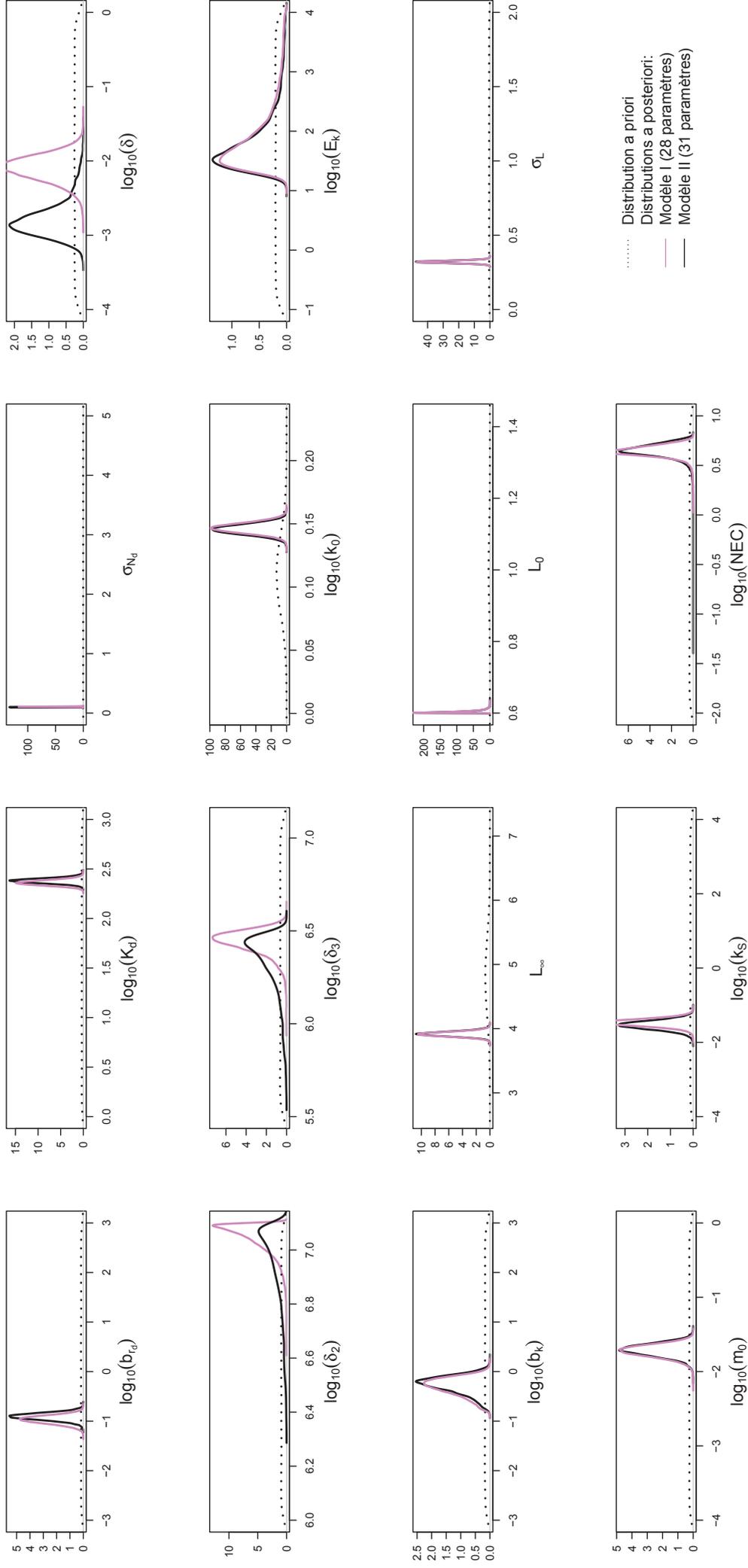
a. Choix des modèles

Les modèles incluant un effet du cadmium sur les processus de survie et de croissance des daphnies ont été choisis.

Le modèle II à 31 paramètres, qui inclut des paramètres différents pour les taux de croissance $r_{a_{0_{E8}}}$ et de sédimentation s_{E8} des algues et l'intensité de la compétition des algues sur les lentilles $\beta_{0_{E8}}$ pour les données de l'expérimentation 8, a été préféré au modèle I à 28 paramètres sur la base des ajustements obtenus pour chacun des modèles.

b. Estimation des paramètres

Les distributions *a priori* et *a posteriori* marginales des paramètres estimés avec les modèles I et II à partir de toutes les données disponibles sont présentées sur la Figure 6.5. Les quantiles à 2.5%, 50% et 97.5% des paramètres du modèle II sont résumés dans le Tableau 6.1.



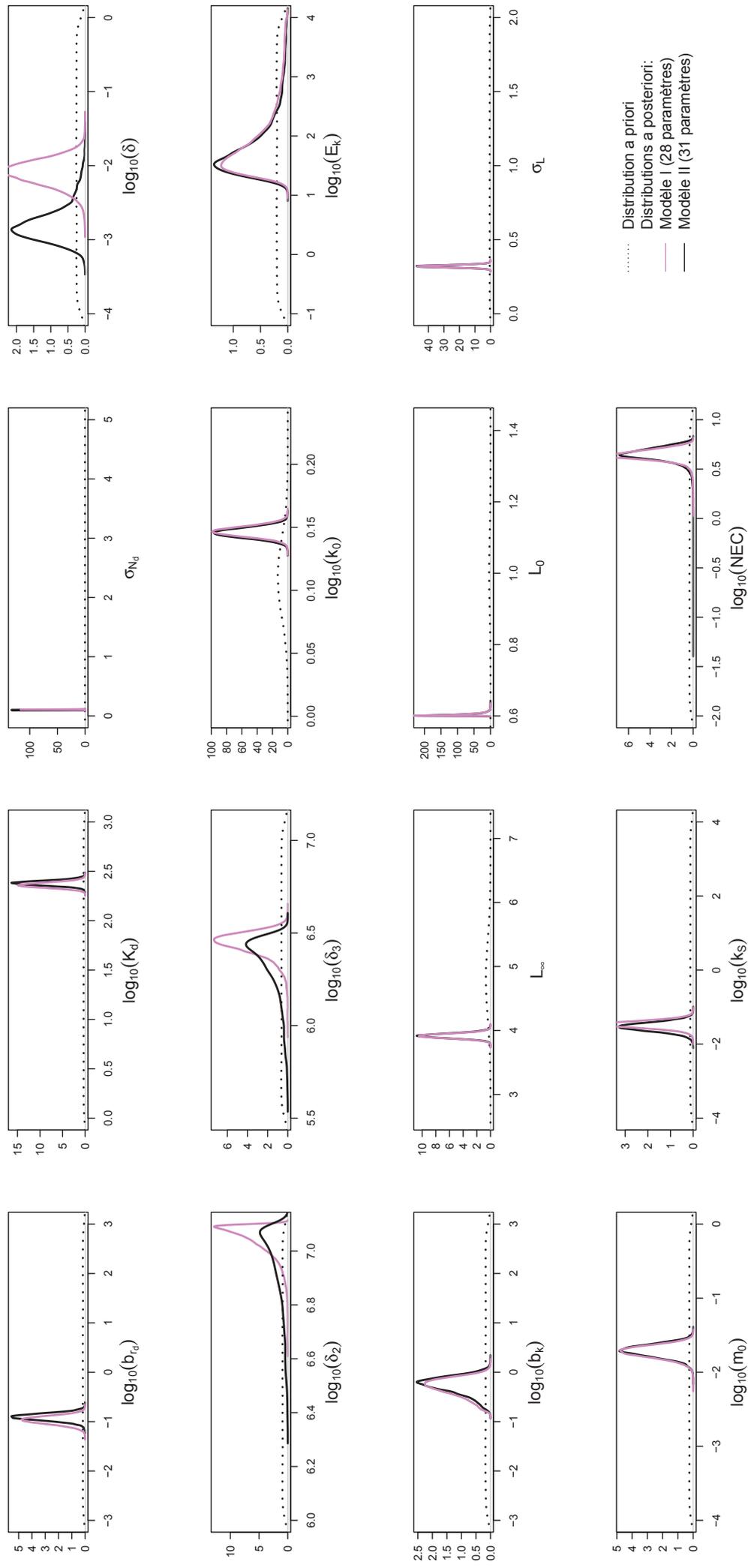


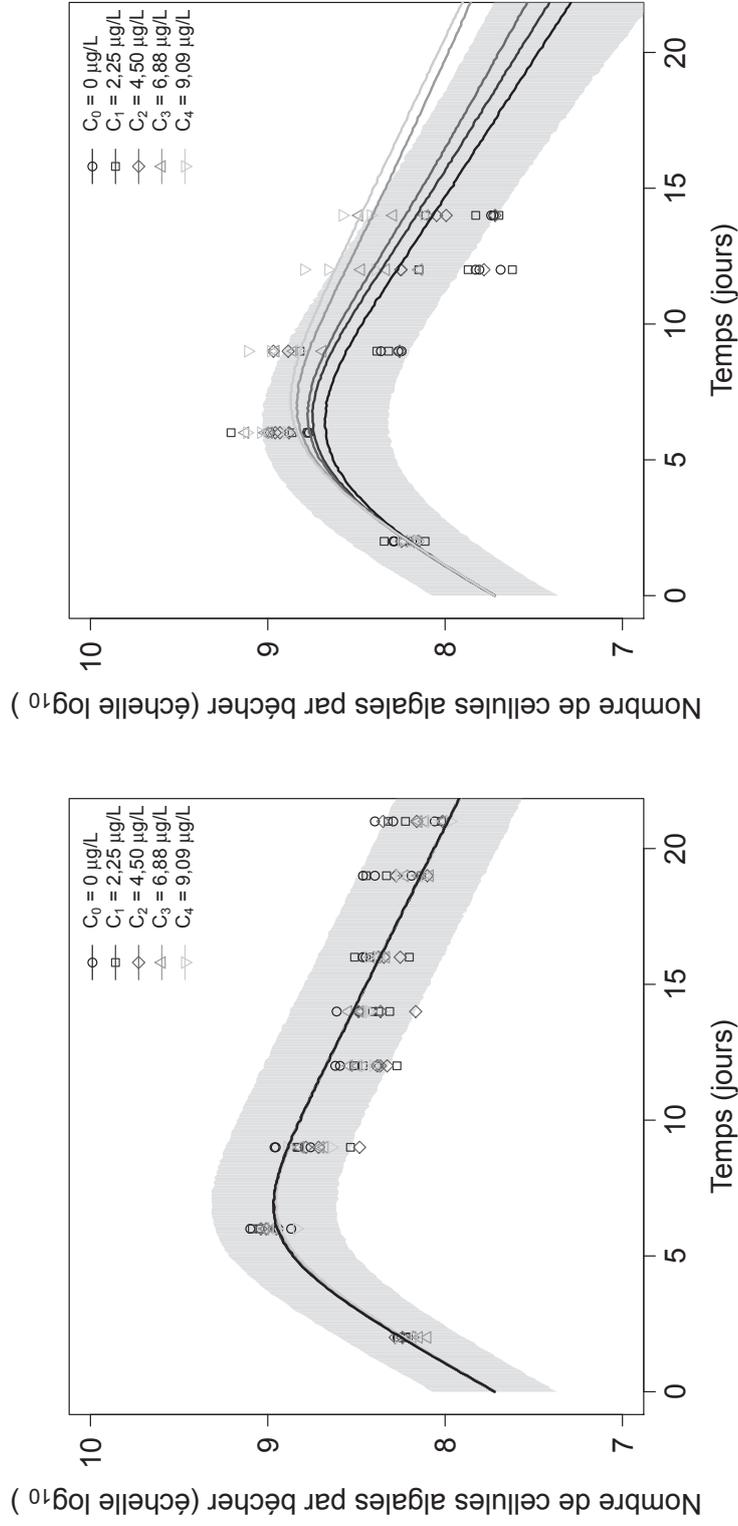
FIGURE 6.5 – Distributions *a priori* et *a posteriori* des paramètres des modèles complets (modèles I et II).

Les distributions *a posteriori* obtenues sont globalement étroites, ce qui suggère que les données ont été assez informatives pour estimer les paramètres des deux modèles, en dehors des paramètres de broutage δ_2 et δ_3 . Avec le modèle II, les trois paramètres $r_{a_{0E8}}$, s_{E8} et β_{0E8} présentent des estimations effectivement différentes de celles des paramètres r_{a_0} , s et β_0 , tandis que les estimations de ces paramètres avec le modèle I sont un compromis entre ces deux estimations (Figure 6.5). A l'exception des paramètres de la fonction de stress sur l'intensité de la compétition (E_β et b_β) où les estimations obtenues sont différentes et bien plus précises pour le modèle II, les estimations des autres paramètres sont similaires et généralement un peu plus précises pour le modèle II, à l'exception des paramètres de broutage (δ , δ_2 et δ_3).

c. Dynamique des algues

Les dynamiques algales en présence de lentilles et en présence de lentilles et de daphnies (expérimentation 8) sont représentées sur les Figures 6.6a et 6.6b. Sans daphnies, la dynamique est la même que dans les autres expérimentations, avec une augmentation du nombre d'algues par béccher jusqu'au septième jour d'expérimentation, puis une diminution du nombre d'algues par béccher. Cependant, l'augmentation et la diminution du nombre d'algues par béccher sont plus importantes que dans les autres expérimentations précédemment menées, les taux de croissance r_{a_0} et de sédimentation s étant plus élevés que dans les autres expérimentations (Figure 6.5). Cette dynamique est identique quelle que soit la concentration en cadmium testée.

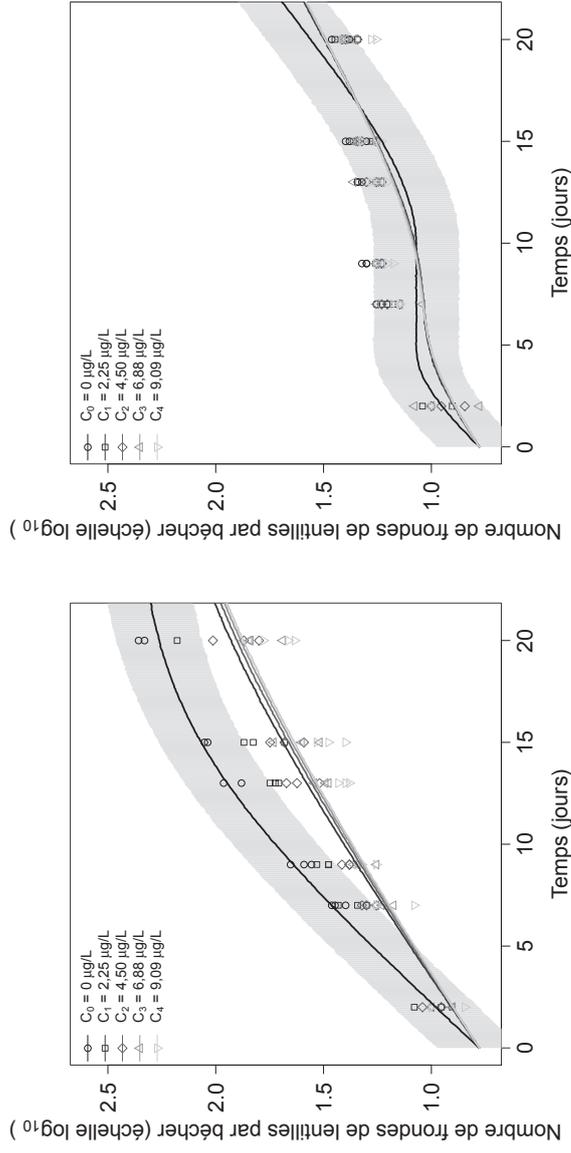
En présence de daphnies, dans le témoin, la dynamique algale est globalement similaire mais le nombre d'algues par béccher est plus faible qu'en l'absence de daphnies. Dès le sixième jour d'expérimentation, des différences entre les concentrations testées apparaissent : plus la concentration en cadmium est élevée, plus le nombre d'algues par béccher augmente, notamment aux deux concentrations testées les plus élevées (C_3 et C_4). Le modèle sur-estime le nombre d'algues par béccher dans le témoin et pour les deux premières concentrations en cadmium testées (C_0 , C_1 et C_2). Au total, 91% des données observées sont dans la bande de crédibilité à 95% pour le nombre d'algues par béccher dans la colonne d'eau pour les données de l'expérimentation 8.



(a) Avec lentilles

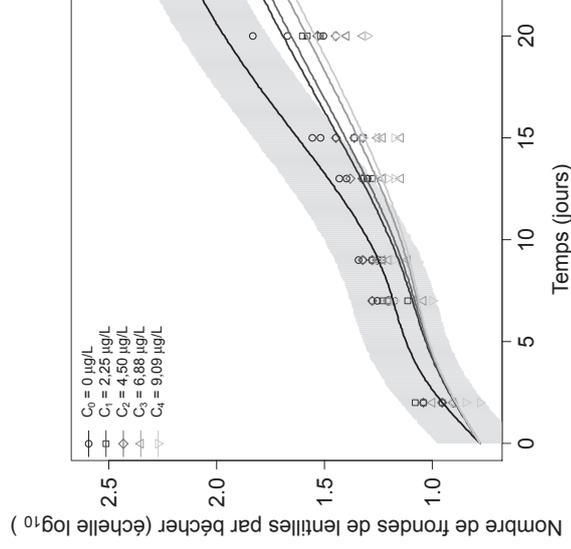
(b) Avec lentilles et daphnies

FIGURE 6.6 – Dynamique des algues en présence de lentilles (a) et en présence de lentilles et de daphnies (b) pour l'expérimentation 8 (objectif 1). Pour chaque concentration testée les symboles représentent les données et les courbes les quantiles à 50% des données simulées avec les distributions *a posteriori* jointes des paramètres. La bande de crédibilité à 95% des données dans le témoin est colorée en gris.



(a) Lentilles seules

(b) Avec algues



(c) Avec algues et daphnies

FIGURE 6.7 – Dynamique des lentilles seules (a), en pr sence d’algues (b) et en pr sence d’algues et de daphnies (c) pour l’exp rimentation 8 (objectif 1).

Pour chaque concentration test e les symboles repr sentent les donn es et les courbes les quantiles   50% des donn es simul es avec les distributions *a posteriori* jointes des param tres. La bande de cr dibilit    95% des donn es dans le t moin est color e en gris.

d. Dynamique des lentilles

La dynamique des lentilles est présentée sur la Figure 6.7, quand elles sont seules (a), en présence d'algues (b) ou en présence d'algues et de daphnies (c). Sans contaminant, le nombre de frondes de lentille par b cher en pr sence d'algues est tr s inf rieur au nombre de frondes de lentille en absence d'algues (cf. chapitre 5) tandis qu'en pr sence d'algues et de daphnies, le nombre de frondes de lentille par b cher se situe   une valeur interm diaire.

En pr sence de cadmium, le nombre de frondes par b cher des lentilles seules est similaire quelle que soit la concentration test e, mais inf rieur au t moin. En pr sence d'algues, il y a tr s peu de diff rence dans les nombres de frondes de lentille par b cher entre les concentrations test es et le t moin. En revanche, en pr sence de daphnies, le nombre de frondes de lentille par b cher est plus  lev  dans le t moin, et diminue l g rement lorsque la concentration en cadmium augmente. Le mod le tend   sous-estimer le nombre de frondes de lentille par b cher en pr sence d'algues, et   le sur-estimer en pr sence d'algues et de daphnies. Au total, 92% des donn es observ es sont dans la bande de cr dibilit    95% pour le nombre de frondes de lentille par b cher pour les donn es de l'exp rimentation 8.

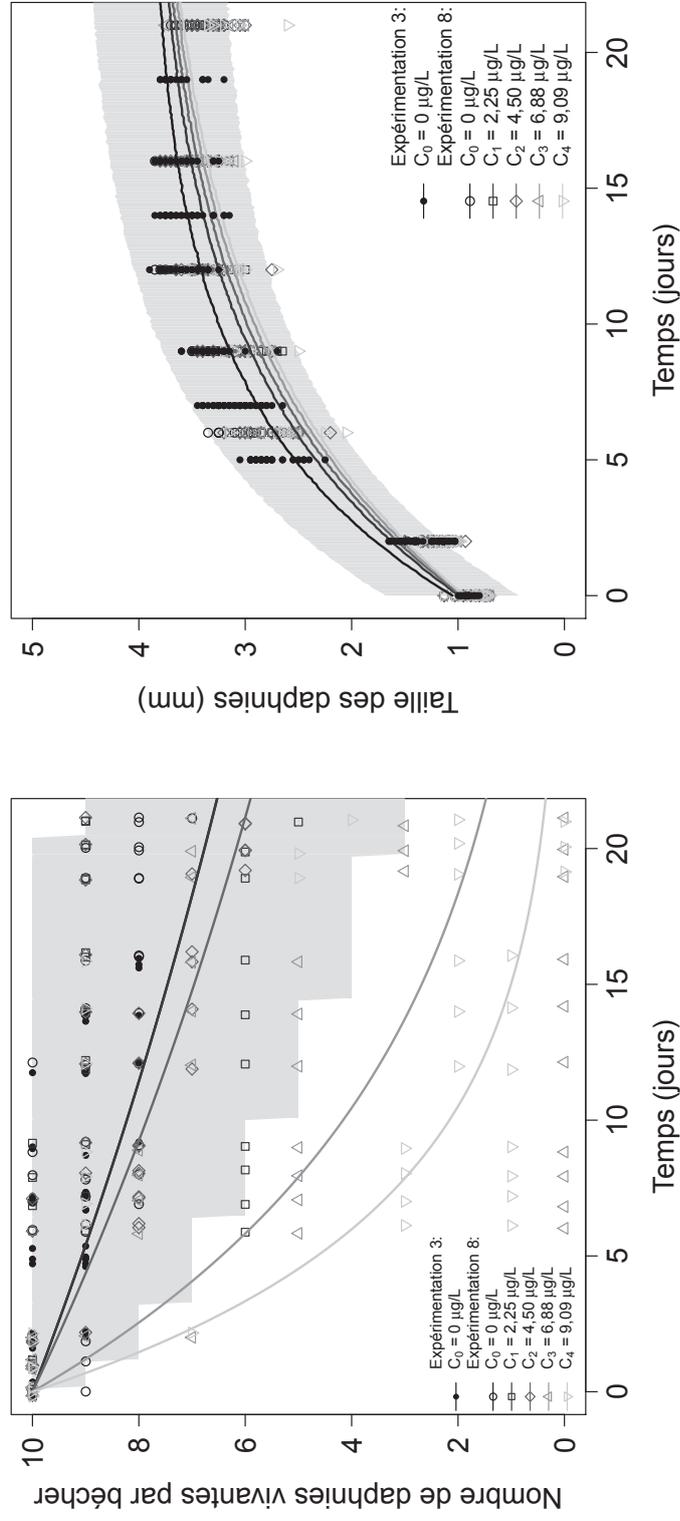


FIGURE 6.8 – Survie (a) et croissance (b) des daphnies pour l'exp rimentation 8 (objectif 1).

Pour chaque concentration test e les symboles repr sentent les donn es et les courbes les quantiles   50% des donn es simul es avec les distribution *a posteriori* jointes des param tres. Les bandes de cr dibilit    95% des donn es dans le t moin sont color es en gris pour chaque type de donn es.

e. Survie et croissance des daphnies

Le nombre de daphnies vivantes par b cher ainsi que la taille des daphnies au cours du temps sont repr sent es sur les Figures 6.8a et 6.8b, respectivement. La *NEC* est estim e   4,47 [2,95;5,75] $\mu\text{g/L}$. La premi re concentration en cadmium test e (C_1) est donc estim e sans effet sur la survie.   la seconde concentration (C_2), l'effet sur la survie est assez faible, tandis que pour les deux concentrations les plus  lev es (C_3 et C_4), le nombre de daphnies vivantes diminue tr s fortement d s les premiers jours d'exp rimentation. Ces donn es pr sentent une importante variabilit . Au total, 92% des donn es observ es sont dans la bande de cr dibilit    95% pour le nombre de daphnies survivantes par b cher.

Le taux de croissance des daphnies est affect  d s la premi re concentration en cadmium test e (C_1), mais il existe assez peu de diff rences entre les concentrations test es pour la taille des daphnies. La taille maximum semble cependant  tre l g rement sur-estim e par le mod le pour les concentrations les plus  lev es en cadmium. Au total, 98% des donn es observ es sont dans la bande de cr dibilit    95% pour la taille des daphnies, l'incertitude est donc sur-estim e.

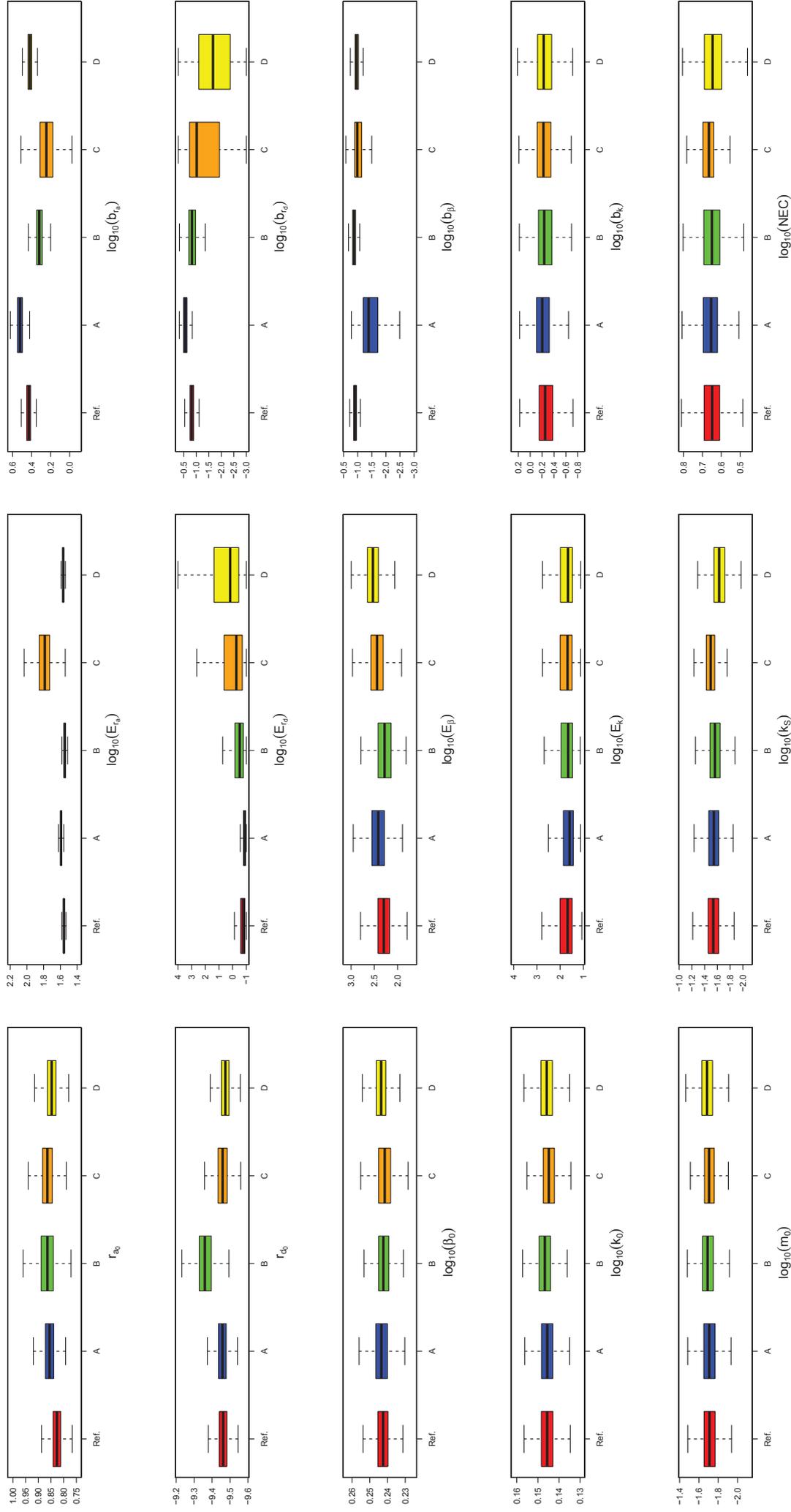


FIGURE 6.9 – Boxplot des distributions *a posteriori* des paramètres des fonctions de stress pour chaque jeu de données testé (objectif 2).

Les estimations obtenues avec toutes les données (jeu de données de référence, Tableau 6.2) sont en rouge, sans les données "monospécifiques" (jeu de données A, Tableau 6.2) en bleu, sans les données "microcosme à deux espèces" (jeu de données B, Tableau 6.2) en vert, sans les données "monospécifiques" (jeu de données C, Tableau 6.2) en orange et sans les données algues et lentilles (seules et ensemble) de l'expérimentation 8 (jeu de données D, Tableau 6.2) en jaune.

6.3.2 Déterminer les données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress

Les estimations des paramètres des quatre fonctions de stress (sur les taux de croissance des populations d'algues et de lentilles, sur le taux de survie et le taux de croissance individuelle des daphnies) obtenues avec le modèle II pour chaque jeu de données (de référence et partiels) sont représentées sur la Figure 6.9.

Tout d'abord, les estimations des paramètres des fonctions de stress affectant les processus liés aux daphnies sont quasiment identiques quel que soit le jeu de données partiel utilisé, ce qui était attendu puisque les données de survie et de taille pour les daphnies sont les mêmes pour tous les jeux de données partiels.

Les jeux de données partiels A et B (sans les données "monospécifiques" et sans les données "microcosme à deux espèces", respectivement) conduisent à des estimations très similaires à celles obtenues avec le jeu de données complet.

Pour le jeu de données A, la courbure de la fonction de stress sur l'intensité de la compétition (b_β) présente une médiane légèrement plus élevée et un intervalle de crédibilité plus large, comparé à l'estimation de référence. La courbure de la fonction de stress sur le taux de croissance des algues (b_{r_a}) présente une médiane légèrement plus faible et un intervalle de crédibilité plus large, comparé à l'estimation de référence.

Pour le jeu de données B, les courbures des fonctions de stress sur le taux de croissance des algues (b_{r_a}) présente une médiane légèrement plus faible et un intervalle de crédibilité plus large, comparé à l'estimation de référence. Le taux de croissance des lentilles dans le témoin (r_{d_0}) présente une médiane légèrement plus élevée et un intervalle de crédibilité plus large, comparé à l'estimation de référence.

Le jeu de données partiel C (sans les données "monospécifiques" et sans les données "microcosme à deux espèces") conduit à des estimations globalement plus larges des paramètres des fonctions de stress que les trois jeux de données précédents. Ce résultat était attendu, notamment pour les paramètres relatifs aux taux de croissance des algues et des lentilles, puisque les concentrations testées sont inférieures aux concentrations en cadmium pour lesquelles les taux de croissance sont réduits de 50 % estimés.

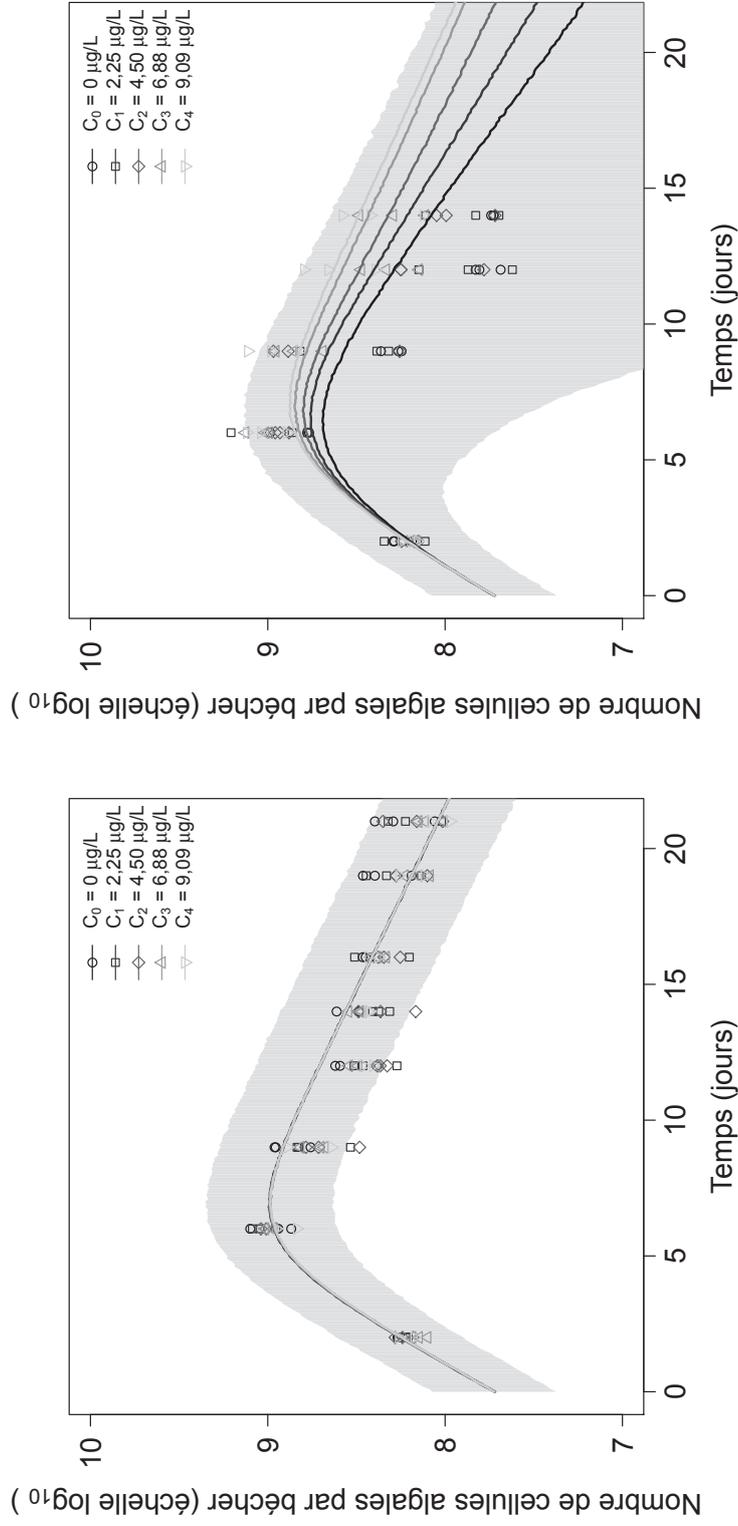
Enfin, le jeu de données partiel D (sans les données algues et lentilles (seules et ensemble) de l'expérimentation 8) conduit à des estimations plus larges des paramètres de la fonction de stress sur le taux de croissance des lentilles. Pour les autres paramètres, les estimations sont similaires à celles de référence.

6.3.3 Evaluer l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée

Les résultats des simulations effectuées pour répondre au troisième objectif du chapitre sont présentées ici par espèce. Les quantiles à 50% des simulations effectuées avec les distributions jointes des fonctions de stress et les différentes données observées des microcosmes complets à trois espèces sont superposées pour chaque espèce. Pour rappel, les données ont été simulées avec les distributions jointes des paramètres des fonctions de stress obtenues avec les "données monospécifiques" et les distributions jointes de tous les autres paramètres avec les données témoin.

a. Dynamique des algues

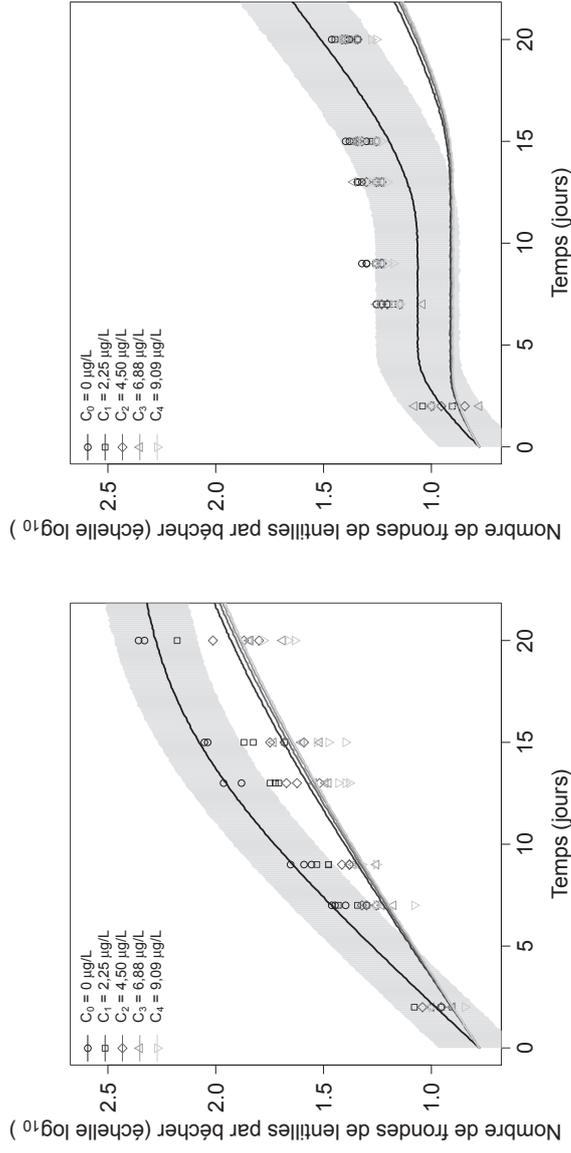
Les dynamiques simulées pour les algues en présence de lentilles et en présence de lentilles et de daphnies superposées aux données observées sont représentées sur les Figures 6.8a et 6.8b, respectivement. La dynamique algale simulée lorsque les daphnies ne sont pas présentes décrit correctement les données observées et est identique à celle issue de l'ajustement du modèle II sur toutes les données disponibles (Figure 6.6a). La dynamique algale simulée lorsque les daphnies sont présentes est également similaire à celle issue de l'ajustement du modèle II sur toutes les données disponibles (Figure 6.6b), mais l'intervalle de crédibilité à 95% autour des données simulées est beaucoup plus large. Hors témoin, 95% des données observées sont dans l'intervalle de crédibilité à 95% des données simulées pour les algues.



(a) Avec lentilles

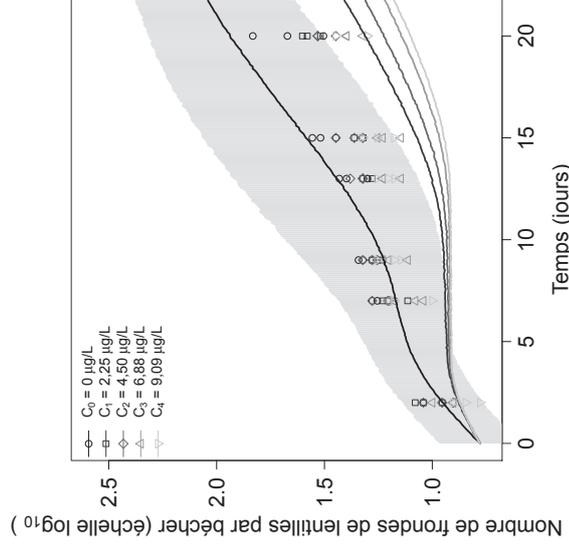
(b) Avec lentilles et daphnies

FIGURE 6.10 – Dynamique des algues en pr sence de lentilles (a) et en pr sence de lentilles et de daphnies (b) pour l'exp rimentation 8 (objectif 3). Pour chaque concentration test e les symboles repr sentent les donn es observ es et les courbes les quantiles   50% des donn es simul es avec les distributions *a posteriori* jointes des param tres. La bande de cr dibilit    95% des donn es dans le t moin est color e en gris.



(a) Lentilles seules

(b) Avec algues



(c) Avec algues et daphnies

FIGURE 6.11 – Dynamique des lentilles seules (a), en présence d’algues (b) et en présence d’algues et de daphnies (c) pour l’expérimentation 8 (objectif 3).

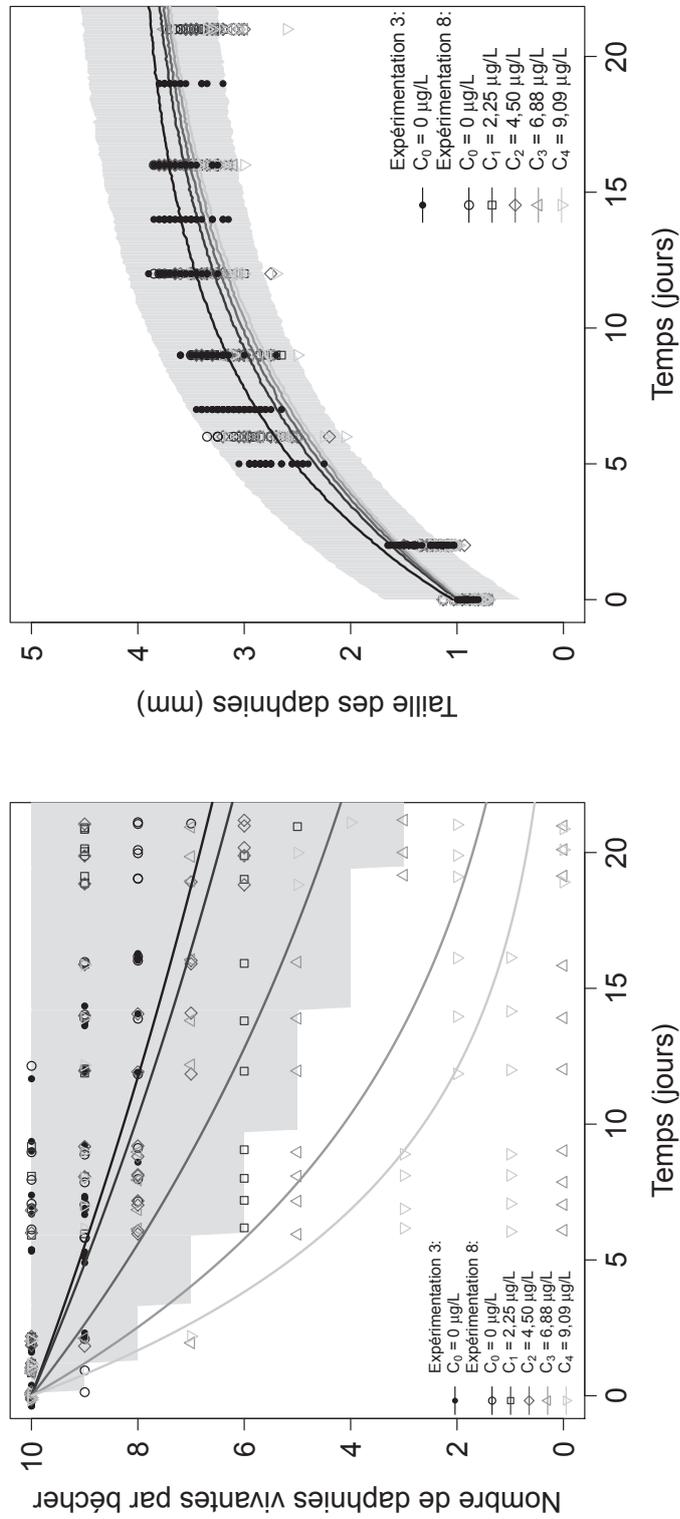
Pour chaque concentration testée les symboles représentent les données observées et les courbes les quantiles à 50% des données simulées avec les distributions *a posteriori* jointes des paramètres. La bande de crédibilité à 95% des données dans le témoin est colorée en gris.

b. Dynamique des lentilles

Les dynamiques simulées pour les lentilles seules, en présence d'algues et en présence d'algues et de daphnies sont superposées aux données observées sur les Figures 6.11a, 6.11b et 6.11c, respectivement. La dynamique simulée pour les lentilles seules est identique à celle issue de l'ajustement du modèle II sur toutes les données disponibles, et décrit donc bien les données observées. En revanche, en présence d'algues ou en présence d'algues et de daphnies, les données simulées ne présentent quasiment pas de croissance des lentilles jusqu'au quinzième jour d'expérimentation. Elles sous-estiment donc significativement le nombre observé de frondes de lentille par béccher pour toutes les concentrations testées (hors témoin). Hors témoin, seulement 58% des données observées sont dans l'intervalle de crédibilité à 95% des données simulées pour les lentilles.

c. Survie et croissance des daphnies

Le nombre de daphnies vivantes par béccher simulé ainsi que la taille des daphnies simulée au cours du temps superposées aux données observées sont représentées sur les Figures 6.12a et 6.12b, respectivement. La *NEC* est estimée à 3,47 [0,030;5,50] $\mu\text{g/L}$ avec les données de survie uniquement. Elle est donc inférieure à celle estimée avec le modèle II et toutes les données disponibles (4,47 [2,95;5,75] $\mu\text{g/L}$, Tableau 6.1). Dès la première concentration testée (C_1), le cadmium est donc estimé avoir un effet, bien que faible, sur la survie. A la seconde concentration (C_2), l'effet sur la survie est plus fort, tandis que pour les deux concentrations les plus élevées (C_3 et C_4), le nombre de daphnies vivantes diminue très fortement dès les premiers jours d'expérimentation.



(a) Survie

(b) Croissance

FIGURE 6.12 – Survie (a) et croissance (b) des daphnies pour l'expérimentation 8 (objectif 3).

Pour chaque concentration testée les symboles représentent les données et les courbes les quantiles à 50% des données simulées avec les distribution *a posteriori* jointes des paramètres. Les bandes de crédibilité à 95% des données dans le témoin sont colorées en gris pour chaque type de données.

Pour les deux concentrations testées les plus élevées (C_3 et C_4), les nombres simulés de daphnies vivantes sont similaires à ceux issus de l'ajustement du modèle II sur toutes les données disponibles (Figure 6.8a). Pour la première et la seconde concentration testée (C_1 et C_2), le nombre simulé de daphnies vivantes est sous-estimé par rapport à celui issu de l'ajustement du modèle II sur toutes les données disponibles. Hors témoin, 90% des données observées sont dans l'intervalle de crédibilité à 95% des données simulées pour les nombre de daphnies vivantes par b cher.

Les tailles des daphnies simul es sont identiques   celles issues de l'ajustement du mod le II sur toutes les donn es disponibles quelle que soit la concentration test e (6.8b). Hors t moin, 98% des donn es observ es sont dans l'intervalle de cr dibilit    95% des donn es simul es pour les nombre de daphnies vivantes par b cher.

6.4 Discussion

Dans ce dernier chapitre, nous avons d crit le fonctionnement du microcosme complet   trois esp ces en pr sence de cadmium, qui constituait la derni re  tape de cette th se. Nous avons  galement  valu  l'apport d'information des diff rents types de donn es collect es au cours des exp rimentations avec le microcosme, dans une perspective d'optimisation des plans d'exp rience. Les r sultats obtenus sont discut s dans cette section.

6.4.1 Description du fonctionnement du microcosme complet en condition contamin e

Le premier objectif de ce chapitre  tait la description du fonctionnement du microcosme   trois esp ces en condition contamin e. Les param tres du mod le complet ont  t  estim s avec toutes les donn es disponibles. Le mod le choisi (mod le II) comporte trois param tres suppl mentaires relatifs aux algues qui sont diff rents pour l'exp rimentation 8 (taux de croissance et de s dimentation des algues et intensit  de la comp tition des algues sur les lentilles).

a. Estimation des paramètres

Les estimations des paramètres sont relativement précises, ce qui suggère que les données collectées comportaient suffisamment d'information. L'intérêt de l'inférence bayésienne, qui permet l'utilisation de toutes les données disponibles pour estimer simultanément les paramètres d'un modèle, a de nouveau été mis en évidence. En effet, le modèle présenté dans ce chapitre est plus complexe que le modèle algues-daphnies en condition non contaminée développé dans le chapitre 4. Malgré cela, l'intégration des nouvelles données et l'augmentation de la taille du modèle et du nombre de paramètres ne posent pas de problèmes techniques pour l'estimation des paramètres. Cela confirme l'intérêt d'estimer les paramètres de modèles complexes liant dynamique de population et effets de contaminants (et plus généralement de facteurs de stress) dans un cadre bayésien.

L'estimation des paramètres relatifs au processus de broutage, en particulier δ_2 et δ_3 , reste insatisfaisante malgré l'apport des données de l'expérimentation 8. Tout d'abord, ces paramètres du modèle de Holling type II sont fortement corrélés. Pour le paramètre δ_2 un problème identique au problème d'estimation du paramètre I_{lim} du modèle d'ingestion à seuil utilisé dans le chapitre 4 est retrouvé : la borne supérieure de la distribution *a posteriori* est très proche de la borne supérieure de la distribution *a priori*. Les densités algales sont suffisamment faibles pour que le plateau de la courbe de Holling type II ne soit pas atteint (voir Figure 3.3).

Les estimations des paramètres de broutage δ_2 et δ_3 (Tableau 6.1) sont très différentes de celles obtenues avec les données de l'expérimentation 12 (étude du broutage des daphnies en bécher de 100 mL, complément du chapitre 4), ce qui est probablement dû aux conditions d'expérimentation très différentes, notamment la taille des béchers et la durée des expérimentations. De même, l'estimation des paramètres de broutage en utilisant simultanément les données de l'expérimentation 3 et de l'expérimentation 14 (expérimentation algues et daphnies en microcosme avec la densité algale initiale multipliée par 10 par rapport aux conditions standard, Tableau 2.1) avec des paramètres communs pour les deux expérimentations a posé des problèmes et les ajustements obtenus sont insatisfaisants. Des dynamiques algales différentes dues à une dynamique des nutriments différentes (notamment leur appauvrissement rapide)

peuvent expliquer ces problèmes. L'intégration des données collectées au cours d'expérimentations en conditions particulières pour l'estimation des paramètres du modèle en conditions standard n'est donc pas concluante. Cela peut s'expliquer par les variations de conditions dans les expérimentations (taille des systèmes, durée des expérimentations, conditions biotiques initiales), qui peuvent faire varier les paramètres d'une condition expérimentale à une autre.

Les paramètres de la fonction de stress de survie des daphnies ont pu être estimés. L'estimation de la *NEC* est de 4,47 [2,95;5,75] $\mu\text{g/L}$. Des valeurs de *NEC* plus élevées (8,6 $\mu\text{g/L}$ Nebeker et al. (1986)) ou plus faibles (0,720 [0,0427;1,78] Forfait-Dubuc et al. (2012)) ont également été estimées dans la littérature. Notre estimation est élevée par rapport à l'estimation obtenue sur le microcosme à cinq espèces (avec du sédiment), estimée à 1,8 [1,2;2,3] $\mu\text{g/L}$ Billoir et al. (2012). Cependant, l'estimation de la *NEC* dans l'étude de Billoir et al. n'inclut pas de données relatives à la dynamique algale liées au nombre de daphnies survivantes. Il serait donc probablement plus judicieux de comparer à ces estimations l'intervalle de crédibilité à 95% obtenu dans ce chapitre avec les données de survie seules. L'intervalle de cette estimation 3,47 [0,030;5,50] $\mu\text{g/L}$ contient celui trouvé par Billoir et al. Le nombre de daphnies survivantes présente une grande variabilité, qui peut expliquer l'intervalle plus large estimé dans ce chapitre.

L'estimation de la taille des daphnies à la naissance L_0 pose également problème puisque la borne inférieure de la distribution *a posteriori* est très proche de la borne inférieure de la distribution *a priori*. Cette borne inférieure ne peut pas être diminuée puisque la longueur des daphnies à la naissance est supposée être supérieure à 0,6 mm Ebert (1991). Ce paramètre aurait donc pu être fixé dans notre étude, d'autant plus qu'il ne dépend pas des conditions d'expérimentation mais uniquement des conditions d'élevage des daphnies.

b. Cas particulier de l'expérimentation 8

Les estimations des paramètres r_{a_0} , s et β_0 sont effectivement différentes à partir des données de l'expérimentation 8 (Tableau 6.1). Ces valeurs différentes expliquent la dynamique algale observée dans l'expérimentation 8, qui est différente de celle ob-

servée dans les autres expérimentations (voir chapitre 5). Les ajustements du modèle II sont meilleurs que les ajustements du modèle I et les estimations sont plus précises avec le modèle II : utiliser ce modèle comme modèle de référence est donc justifié, malgré un nombre de paramètres plus élevé.

La connaissance du fonctionnement du microcosme sans contaminant, acquise grâce au couplage de la modélisation et des expérimentations, permet d'identifier les processus susceptibles de générer des données très différentes d'une expérimentation à l'autre. Le modèle peut donc être modifié en considérant des paramètres différents pour ces processus. Ces paramètres sont alors estimés à partir de ces données spécifiques.

Cependant, l'ajout de paramètres montre des limites. Tout d'abord, l'interprétation de l'ajout de paramètres est difficile. Il n'est pas évident de déterminer si la variabilité observée est liée à la variabilité biologique du système ou à une condition expérimentale particulière (changement d'expérimentateur, culture modifiée, etc.). De plus, la relative simplicité du microcosme étudié et du modèle utilisé nous a permis d'ajouter des paramètres. La complexification de l'écosystème par l'ajout d'espèces ou de compartiments abiotiques pourrait potentiellement limiter l'identification des processus à l'origine des différentes dynamiques observées entre les expérimentations en augmentant le nombre d'interactions. Théoriquement, la modélisation et le cadre bayésien peuvent aisément permettre l'utilisation de paramètres différents entre les expérimentations.

L'ajout de paramètres spécifiques à une expérimentation suppose en outre une importante communication entre les expérimentateur·rice·s et les modélisateur·rice·s. Ces ajouts de paramètres doivent s'appuyer sur des hypothèses biologiques ou des variations de facteurs expérimentaux particuliers qui peuvent être définis par les expérimentateur·rice·s.

c. Ajustements

Les ajustements du modèle choisi (modèle II) aux données sont globalement satisfaisants. Cependant, certaines prédictions sont sur-estimées par rapport aux observations. Les nombres d'algues par béccher dans la colonne d'eau en présence de lentilles

et de daphnies sont sur-estimés par le modèle, de même que les nombres de frondes de lentille par béccher en présence d'algues et de daphnies. Plus le nombre d'algues est élevé, plus le nombre de frondes de lentille est bas du fait de l'interaction entre les deux espèces ; l'estimation des paramètres est donc un compromis conduisant à une légère sur-estimation des algues et des lentilles, en présence de daphnies. Il est difficile de déterminer la raison de cette sur-estimation. La présence des daphnies peut expliquer cette sur-estimation puisqu'on ne l'observe pas pour les autres types de données (monospécifiques et en microcosme partiel à deux espèces). L'existence d'une interaction entre les daphnies et les lentilles ou une modification de l'interaction entre algues et lentilles induite par la présence des daphnies peuvent être supposées. Il n'existe pas, à ma connaissance, d'études portant sur une telle interaction ; mais intuitivement, l'hypothèse d'une modification de l'interaction algues-lentilles induites par les daphnies paraît plus probable qu'une interaction directe entre daphnies et lentilles.

Les nombres de daphnies vivantes par béccher ont été également difficiles à décrire en raison de la forte variabilité inter-répliquat pour les concentrations en cadmium différentes du témoin.

6.4.2 Détermination des données suffisantes à l'estimation des paramètres des fonctions de stress

Le second objectif de ce chapitre avait pour but de déterminer quels types de données en condition contaminée ainsi que les gammes de concentrations testées nécessaires à l'estimation des paramètres des fonctions de stress pour les différentes espèces.

Cette partie du chapitre constitue une première approche vers une démarche d'optimisation de plans d'expérience. En écotoxicologie, l'optimisation des plans d'expériences est une préoccupation récente [Albert et al. \(2001\)](#); [J. S. Andersen and Holst \(2000\)](#); [Forfait-Dubuc et al. \(2012\)](#); [Wright and Bailer \(2006\)](#). Elle est liée à l'utilisation plus fréquente de modèles concentration-réponse [Forfait-Dubuc et al. \(2012\)](#).

Comme nous l'avons vu au cours de cette thèse, une des difficultés inhérentes à l'utilisation de microcosme multi-espèces se situe au niveau du nombre d'expérimenta-

tions à réaliser pour collecter les données nécessaires à l'estimation des paramètres du modèle décrivant le fonctionnement du microcosme. Il serait donc intéressant de déterminer quelles combinaisons d'espèces sont à étudier en fonction des interactions existant entre elles pour réduire le nombre de béciers d'une même expérimentation. De même, une meilleure connaissance des gammes et du nombre de concentrations à tester en fonction des sensibilités des différentes espèces en présence permettrait de ne pas multiplier les expérimentations. Des connaissances sur les combinaisons d'espèces et sur les gammes de concentrations à tester rendrait plus aisée la mise en oeuvre d'études s'appuyant sur les microcosmes de laboratoire. Ainsi, la question des plans d'expérience des microcosmes pourrait constituer une base vers leur utilisation standardisée pour l'évaluation du risque écotoxicologique.

Les estimations des paramètres obtenues avec les jeux de données A et B (sans les données monospécifiques et sans les données de microcosmes partiels à deux espèces, respectivement) sont très similaires à celles obtenues avec le jeu de données de référence (toutes les données disponibles). Les estimations obtenues avec le jeu de données C (données issues des microcosmes complets à trois espèces uniquement, en plus des données sans contaminant) sont moins précises que celles obtenues avec le jeu de données de référence. La multiplication des données n'est donc pas indispensable puisque l'absence de données monospécifiques ou de données en microcosme partiel ne nuit pas à la précision des estimations des paramètres des fonctions de stress. Les seules données issues des microcosmes complets ne sont pas cependant suffisantes.

Les estimations obtenues avec le jeu de données D (sans les données algues et lentilles (seules et ensemble) de l'expérimentation 8) diffèrent des estimations obtenues avec le jeu de données de référence pour les paramètres de la fonction de stress sur la croissance des lentilles. Pour les fonctions de stress sur les processus relatifs aux algues, les estimations sont similaires. L'expérimentation 8 aurait donc probablement pu être menée sans les microcosmes partiels composés des algues et des lentilles ensemble, sans nuire à la précision des estimations. Les données fournies par les microcosmes ne contenant que des lentilles ont apporté l'information nécessaire à l'estimation des paramètres relatifs à cette espèce.

La connaissance du fonctionnement du microcosme sans contaminant est essentielle pour limiter le nombre d'expérimentations et le nombre de béchers pour chaque expérimentation. L'étude du microcosme partiel algues-lentilles ayant montré que les lentilles n'ont pas d'effet sur les algues au sein du microcosme (chapitre 5), nous avons pu mener des expérimentations en condition contaminée en nous affranchissant des béchers ne contenant que des algues seules. Il est difficile de savoir *a priori* quels types de données sont nécessaires pour l'estimation des paramètres des fonctions de stress. Il semble pourtant que les expérimentations peuvent être menées en ne sélectionnant que certains types de données, pour un microcosme à trois espèces : par exemple, on peut choisir de réaliser une expérimentation ne comportant que les microcosmes complets avec une gamme de concentrations testées, limitée par l'espèce la plus sensible au contaminant ; et une expérimentation ne comportant que les microcosmes partiels à deux espèces avec une gamme de concentrations testées basée sur les sensibilités des deux espèces les moins sensibles. Par ailleurs, l'utilisation de microcosmes présentant le plus de combinaisons d'espèces possibles sans contaminant semble essentielle pour assurer l'estimation précise des paramètres du modèle en condition non contaminée. Ces résultats ne sont valables que dans le cas du microcosme utilisé, qui implique des espèces liées par des interactions particulières et avec une sensibilité au contaminant choisi. Un plan d'expérience adéquat pour l'étude d'un autre contaminant pour ce même microcosme pourrait aisément être mis en place à l'aide des connaissances acquises au cours de ce chapitre.

La généralisation d'un protocole expérimental pour un microcosme comportant plus de trois espèces avec des sensibilités au contaminant variées et impliquant un plus grand nombre d'interactions constituerait un approfondissement intéressant. Par exemple, l'étude du fonctionnement du microcosme original à cinq espèces Clément and Cadier (1998), notamment en condition contaminée, pourrait aisément se baser sur le travail réalisé sur le microcosme à trois espèces. Un plan d'expérience pourrait ainsi être mis au point en fonction des connaissances acquises, en particulier sur les combinaisons d'espèces, les gammes et le nombre de concentrations à tester pour obtenir des données suffisantes à l'estimation des paramètres. Il apparaît par contre quasiment impossible d'appliquer une telle méthode pour l'étude d'un microcosme comportant

plus d'une dizaine d'espèces, comme les microcosmes SAM (*Standardized Aquatic Microcosm*) développés par Taub et al. Taub (1989), étant donné le nombre d'interactions potentielles.

6.4.3 Evaluation de l'utilisation de données monospécifiques seules pour décrire le fonctionnement du microcosme complet en condition contaminée

La mise en évidence des limites de l'utilisation de données monospécifiques pour l'évaluation du risque constituait le dernier objectif de ce chapitre. La méthode proposée dans cette perspective était la comparaison des données observées du microcosme complet et des données simulées à partir des estimations des paramètres avec les données sans contaminant et des estimations des paramètres des fonctions de stress (issues de l'ajustement sur les données monospécifiques).

En ce qui concerne les données relatives aux algues et aux daphnies, les données simulées sont globalement proches des données observées. A l'inverse, la dynamique des lentilles en présence d'algues, et celle en présence des algues et des daphnies, sont très approximativement reproduites par simulation. Les nombres de frondes de lentille sont très sous-estimés par rapport aux données observées, ce qui est dû au fait que l'effet direct du cadmium sur l'intensité de la compétition des algues sur les lentilles n'est pas pris en compte pour simuler les données.

Dans le cas de notre microcosme, la méthode proposée semble protectrice. Les informations apportées par les données simulées ne font que sous-estimer le nombre de frondes de lentille, donc la concentration en cadmium maximale, supportée par l'écosystème, évaluée serait plus faible que celle évaluée en utilisant les données observées. Cela est dû à la particularité des interactions liant les trois espèces de notre microcosme. La même méthode appliquée à un microcosme de composition différente pourrait conduire à sur-estimer les nombres d'individus de chaque espèce. Dans ce cas, des concentrations ayant un effet sur les espèces pourraient être considérées comme non impactantes pour le système.

La modélisation des systèmes témoins, additionnée à l'apport des expérimentations

monospécifiques, n'est donc pas suffisante pour décrire le microcosme complet en condition contaminée. L'apport des données issues d'expérimentations impliquant les espèces en interaction (microcosmes à deux ou trois espèces) est nécessaire pour identifier les effets directs des contaminants sur les processus d'interaction et obtenir une description plus fine du fonctionnement du microcosme en condition contaminée. La méthode utilisant le modèle du microcosme témoin en complément des données issues d'expérimentations monospécifiques peut néanmoins suffire en première intention, puisqu'elle permet de prendre en compte une partie des effets indirects dus aux interactions et donc de décrire correctement la dynamique des algues en présence de daphnies dans le microcosme. Il faut cependant garder à l'esprit que les effets directs sur les processus d'interaction, et donc une partie des effets indirects dus aux interactions, ne sont alors pas considérés, comme le montre la description insatisfaisante de la dynamique des lentilles en présence d'algues et en présence d'algues et de daphnies.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, le fonctionnement du microcosme complet à trois espèces en condition contaminée a été décrit en tenant compte d'une dynamique algale différente dans l'expérimentation 8, *via* l'utilisation de paramètres relatifs aux algues, spécifiques de cette expérimentation. L'apport des différents types de données (monospécifiques, en microcosmes partiels à deux espèces, en microcosme complet) et des différentes gammes de concentrations testées a été évalué. Enfin, l'insuffisance de l'information apportée par les données monospécifiques a été mise en évidence.

Discussion générale et Perspectives

Dans cette partie, la méthode développée sera discutée en revenant sur les trois points majeurs développés dans cette thèse : 1) l'utilisation d'un microcosme de laboratoire pour la prise en compte des interactions entre espèces dans l'évaluation du risque lié aux contaminants ; 2) l'apport de la modélisation pour l'interprétation des observations et donc la compréhension du fonctionnement d'un écosystème, notamment quand il est soumis à un stress chimique ; et 3) l'intérêt de la méthode du couplage entre expérimentations et modélisation. Les différentes perspectives engendrées par le travail réalisé au cours de cette thèse seront ensuite évoquées.

Intérêt et limites du microcosme pour l'étude des interactions

L'outil microcosme présente des avantages et des inconvénients. Des problèmes liés au dispositif expérimental ont été rencontrés, notamment la contamination bactérienne du sédiment, ce qui nous a conduit à le supprimer du dispositif expérimental. Le microcosme s'est donc révélé plastique et a pu ainsi être légèrement modifié pour répondre à certaines interrogations sur les processus, notamment avec la conduite des expérimentations en conditions particulières. Par ailleurs, la taille du microcosme est un avantage logistique pour la mise en oeuvre des expérimentations puisqu'elle permet d'avoir un nombre assez important de béchers et donc de réplicats.

Une variabilité inter-et intra-expérimentations a pu être observée et prise en compte grâce au cadre bayésien pour l'ajustement des modèles aux données. Cette variabilité a été quantifiée mais ses sources ne peuvent pas être identifiées avec certitude. Elle peut être liée aux variations de conditions expérimentales et à la variabilité biologique. La combinaison des processus complexes impliqués dans le fonctionnement du microcosme accentue cette variabilité.

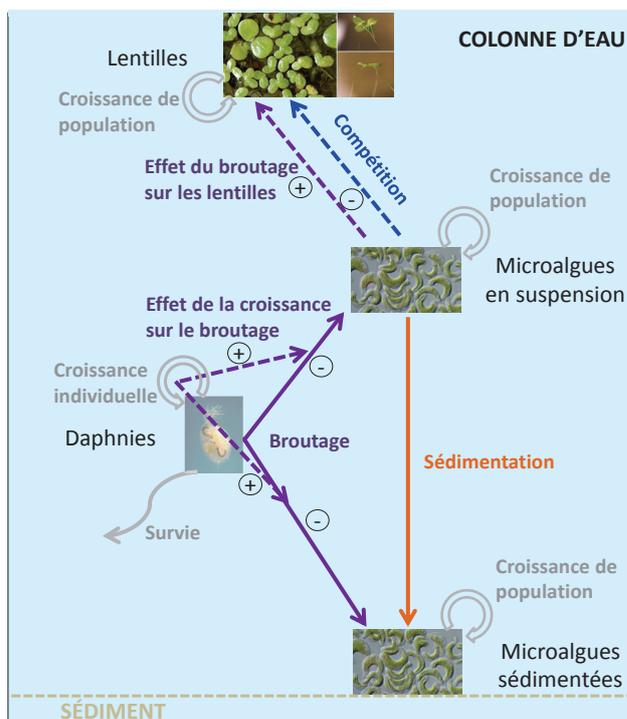
Même si la reproduction des daphnies peut être prise en compte, la dynamique de l'espèce ne peut pas être incluse dans le fonctionnement du microcosme puisque le nombre de jeunes produits est trop important. Des modifications des conditions expérimentales (comme la densité algale inoculée ou la quantité de nutriments) pourraient

permettre de laisser la population de daphnies se développer. Il pourrait également être intéressant d'intégrer au microcosme une espèce produisant moins de néonates, pour approfondir la connaissance du fonctionnement d'un tel écosystème avec la dynamique de population d'un consommateur primaire. La reproduction reste cependant un processus compliqué à modéliser.

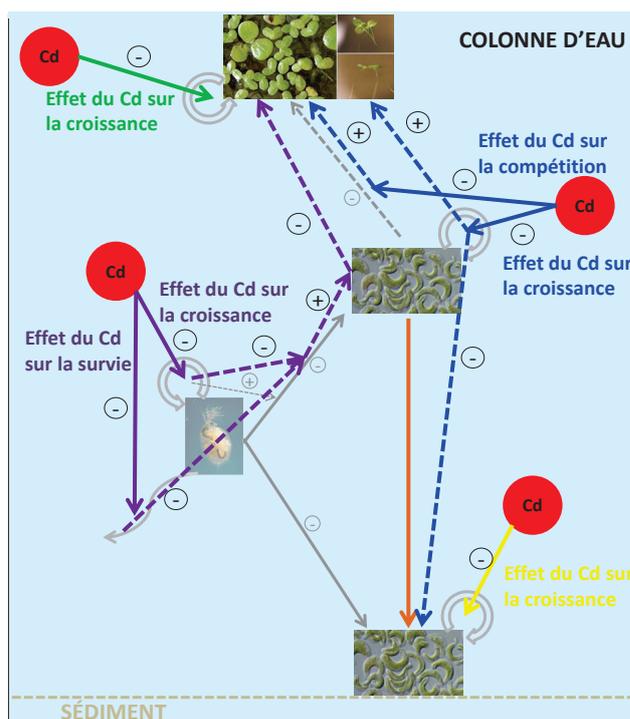
Le microcosme étudié présente des caractéristiques particulières quant aux espèces qui le composent et à leurs interactions. Par exemple, une des espèces, *Daphnia magna*, ne peut pas être étudiée indépendamment de sa source de nourriture, les algues. Deux types d'interaction sont présentes (le broutage des algues par les daphnies et la compétition pour les nutriments entre les algues et les lentilles) et deux des espèces, les daphnies et les lentilles, sont supposées ne pas être en interaction. Le microcosme pourrait être considéré comme trop spécifique pour être représentatif d'autres écosystèmes. Pourtant, selon les conditions des milieux naturels, les réseaux d'espèces sont variables et ne présentent pas nécessairement toutes les interactions potentiellement existantes. En outre, le microcosme utilisé ne vise pas à être représentatif d'un milieu naturel, mais à appréhender les effets directs et indirects d'un contaminant sur des espèces en interaction.

Description du fonctionnement du microcosme *via* la modélisation

Le fonctionnement du microcosme a été modélisé en conditions non contaminée et contaminée avec succès en prenant en compte les interactions entre les espèces. Les processus ont été décrits relativement finement. La connaissance du microcosme en condition non contaminée, essentielle pour décrire ensuite son fonctionnement en condition contaminée, a été appréhendée grâce à la décomposition en microcosmes partiels et à la modélisation de leurs fonctionnements. Pour étudier les interactions entre les espèces composant les microcosmes partiels, la méthode a consisté à modéliser et à comparer la dynamique des espèces lorsqu'elles sont isolées et lorsqu'elles sont ensemble. Chacune des étapes successives de modélisation réalisées a permis de décrire le fonctionnement des microcosmes partiels à deux espèces, puis du microcosme complet.



(a) Sans cadmium



(b) Avec cadmium

FIGURE 7.1 – Schéma du fonctionnement du microcosme complet.

Les flèches circulaires représentent le processus de croissance de chaque espèce et la flèche sortante la survie des daphnies. Les flèches pleines représentent les interactions directes et les flèches pointillées les effets indirects. Les symboles positifs et négatifs indiquent que l'effet ou l'interaction engendre une augmentation et une diminution, respectivement, du récepteur, c'est-à-dire de l'intensité de l'interaction ou du nombre d'individus de l'espèce. La cascade d'effets du cadmium sur le broutage des algues sédimentées n'a pas été représentée sur la figure (b) pour des raisons de lisibilité, mais elle est identique à celle des effets sur le broutage des algues en suspension.

Les effets directs et indirects du cadmium ont ainsi pu être discriminés grâce à la modélisation successive des différents microcosmes, tout d'abord en condition non contaminée, puis en présence du contaminant. Des concentrations critiques d'effet ont été estimées ainsi que leurs incertitudes pour chacun des processus affectés par le cadmium, en incluant les effets sur les interactions. Ainsi, la dynamique globale de chaque espèce au sein du microcosme a pu être prédite, avec et sans contaminant. Les interactions et les effets ainsi identifiés sont résumés et schématisés sur les Figures 7.1a (sans cadmium) et 7.1b (avec cadmium). Certains processus ont été difficiles à appréhender (par exemple le broutage des daphnies) et des imprécisions persistent, notamment en ce qui concerne l'existence d'un effet direct de la présence de daphnies sur l'interaction algues-lentilles.

Si la modélisation a effectivement permis de mieux comprendre le fonctionnement du microcosme et de grandement améliorer l'interprétation des données observées, l'utilisation du modèle dans le cadre de l'évaluation du risque écotoxicologique reste à questionner. Comme démontré au chapitre 6 (objectif 3), la combinaison des données monospécifiques, pour définir des fonctions de stress, et du modèle en condition non contaminée, auquel sont appliquées ces fonctions de stress, ne permet pas d'appréhender la dynamique observée de toutes les espèces du microcosme. La prise en compte des effets indirects dus aux interactions ne suffit pas, il est nécessaire de connaître également les effets directs du contaminant sur les processus d'interaction. Les paramètres de toutes les fonctions de stress, sur les processus intrinsèques aux espèces et sur les interactions, doivent donc être pris en compte dans la détermination de la concentration critique d'effet. Si toutes les fonctions de stress utilisées étaient des fonctions à seuil de type NEC, le choix de la concentration critique d'effet pourrait se porter sur la plus petite NEC estimée. Par contre, si les paramètres des fonctions de stress estimés comprennent des EC_x , comme c'est le cas dans notre modèle, le choix de la concentration critique d'effet apparaît plus complexe. En effet, sélectionner l' EC_{50} sur le taux de croissance des lentilles comme concentration critique d'effet, par exemple, n'implique pas que le nombre de frondes de lentilles à cette concentration sera réduit de 50% à la fin de l'expérimentation dans le microcosme, puisque les interactions avec les autres espèces, les effets directs (sur les interactions) et indi-

rects (dus à la combinaison des effets directs sur les autres espèces et des interactions) ne sont pas pris en compte. L'effet observé du contaminant sur le fonctionnement global de l'écosystème ne peut donc pas être appréhendé sans le modèle qui prend en compte les interactions. Une solution pourrait être la simulation, avec le modèle complet en condition contaminée, de différents scénarios de contamination (*i.e.* à différentes concentrations) pour déterminer la concentration ayant l'impact recherché (dans l'exemple, une réduction de 50% du nombre de frondes de lentilles à la fin de l'expérimentation).

Couplage expérimentation-modélisation

L'apport de la modélisation à l'expérimentation est un des points positifs de cette thèse. En effet, le couplage entre ces deux outils s'est fait très naturellement du fait de l'organisation du travail par étapes successives. Les allers-retours successifs réalisés entre expérimentations et modélisation sont schématisés sur la Figure 7.2.

La méthode des allers-retours entre expérimentations et modélisation a mis en évidence le fait que les données collectées au cours d'expérimentations permettent non seulement d'estimer les paramètres des modèles développés en parallèle, mais également de valider les méthodes (telle que l'estimation simultanée des paramètres à partir de toutes les données disponibles, chapitre 4), la structure du modèle (modèle algues-daphnies, chapitre 4 et fonctions de stress, chapitre 5) et les hypothèses biologiques (sur les interactions et les effets du cadmium, chapitres 5).

La méthode utilisée a également prouvé que l'utilisation de la modélisation permet d'optimiser les protocoles expérimentaux. La modélisation des processus a permis d'identifier les difficultés dans l'estimation des paramètres et d'améliorer le protocole expérimental pour pallier les problèmes. Par exemple, les temps de mesure sur lesquels l'effort expérimental doit être fourni dans le but d'estimer les paramètres relatifs à certains processus (notamment le taux de croissance des daphnies) ont été déterminés, de même que les modifications des conditions expérimentales à apporter (pour estimer les paramètres de broutage ou le taux de sédimentation, par exemple). La modélisation peut donc orienter les expérimentations à mener pour collecter les données fournissant l'information nécessaire à une meilleure estimation des paramètres.

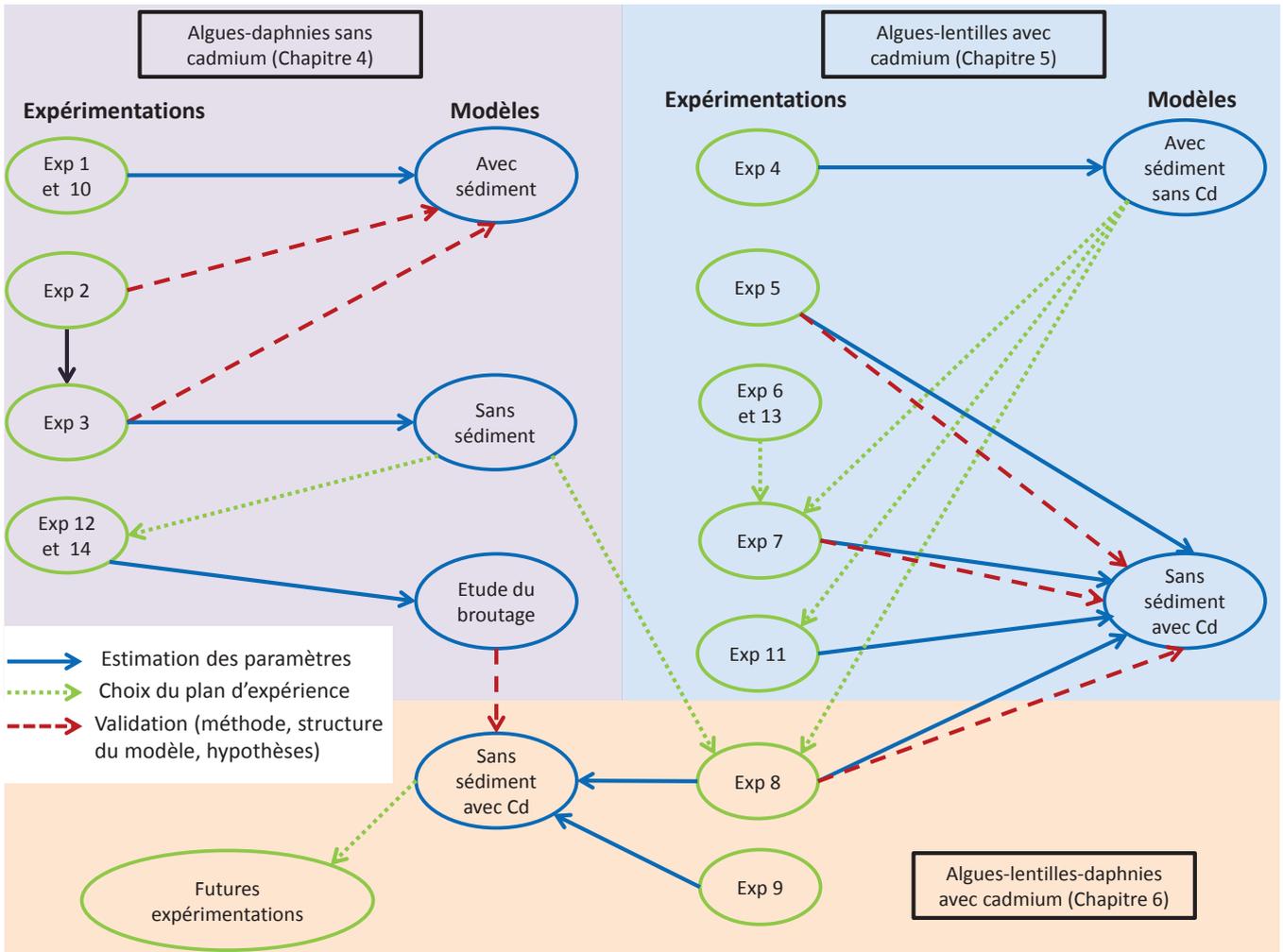


FIGURE 7.2 – Schéma des allers-retours entre la modélisation et les expérimentations au cours de la thèse.

Les allers-retours entre modélisation et expérimentations ont aussi montré leur utilité dans la conception des plans d'expérience. Par exemple, la modélisation de l'interaction algues-lentilles sans contaminant a conduit à noter que la compétition entre ces deux espèces est unilatérale dans les conditions du microcosme, ce qui a permis d'alléger les expérimentations suivantes en n'utilisant pas de béchers contenant des algues seules dans les expérimentations suivantes avec cadmium. La modélisation du microcosme complet en condition contaminée a permis de déterminer les types de données nécessaires à l'estimation des paramètres décrivant l'effet du cadmium. Un plan d'expérience plus efficace, c'est-à-dire produisant suffisamment de données pour estimer au mieux les paramètres et décrire le fonctionnement du microcosme avec le moins de béchers et d'expérimentations possibles, est bénéfique pour l'utilisation optimale des microcosmes. En effet, comme nous l'avons vu au cours de cette thèse, les expérimentations restent compliquées à mettre en oeuvre, malgré la petite taille du dispositif expérimental, comparées aux bioessais monospécifiques.

Il a été montré que la prise en compte de la variabilité est également facilitée par la modélisation (cas particulier de l'expérimentation 8, chapitre 6). Par ailleurs, le travail effectué illustre le fait que le cadre bayésien permet d'estimer les paramètres, avec leurs incertitudes, en prenant en compte toutes les données simultanément dans un modèle global, ce qui permet une compréhension fine des processus impliqués. Néanmoins, l'intégration de données collectées dans des conditions différentes peut poser des problèmes.

Cette approche de modélisation couplée à l'expérimentation en parallèle permet d'explorer les données, de soulever les problèmes, liés aux hypothèses biologiques ou au protocole expérimental par exemple, et de progresser dans la connaissance du système étudié.

Perspectives

Suite au travail réalisé au cours de cette thèse, les perspectives sont multiples : je ne mentionne que celles qui me semblent les plus pertinentes. Il serait en premier lieu intéressant d'utiliser le logiciel *Stan* [sta \(2015\)](#) pour simuler les chaînes MCMC puisque ce dernier permet l'intégration numérique des équations différentielles, à la différence

de JAGS, ce qui réduirait probablement le temps de calcul pour l'ajustement des modèles complets aux données.

Dans le but d'approfondir la connaissance des mécanismes régissant les différents processus impliqués dans le fonctionnement du microcosme, une autre perspective consisterait à poursuivre l'exploration du microcosme complet en s'appuyant sur la méthode développée au cours de cette thèse. De nouvelles expérimentations pourraient alors être conduites, toujours en parallèle du développement d'un modèle, pour étudier des processus tels que la dynamique des nutriments, la biodisponibilité du cadmium ou la bioaccumulation par les différentes espèces. Ainsi, les interactions et leurs mécanismes sous-jacents ainsi que les effets du cadmium et son mode d'action pourraient être mieux décrits et compris. Appliquer les méthodes utilisées au cours de cette thèse au microcosme original, avec la réintroduction du sédiment et des deux espèces benthiques, afin de prendre en compte les interactions des espèces avec le compartiment abiotique, constitue également une suite directe du travail mené durant cette thèse. De nouveaux contaminants ainsi que des sédiments contaminés pourraient être étudiés selon la méthode des allers-retours développée.

Dans une perspective plus lointaine, il pourrait également être intéressant d'étudier des microcosmes différents sous pression chimique avec la méthode des allers-retours entre expérimentations et modélisation afin de décrire d'autres interactions biotiques et les effets de contaminants (cadmium ou autre) sur ces interactions. Cela permettrait de mieux appréhender l'impact des contaminants sur des communautés d'espèces différentes. Les différents modèles obtenus pourraient ensuite être combinés pour simuler un écosystème plus complexe et donc plus représentatif des écosystèmes naturels.

Enfin, dans une perspective plus générale, il serait particulièrement intéressant de travailler sur l'intégration de la méthode développée dans cette thèse dans l'évaluation du risque écotoxicologique. De nombreuses grandeurs peuvent être extraites du modèle décrivant le fonctionnement du microcosme en condition contaminée : les données prédites, telles que le nombre d'individus de chaque espèce et la taille des daphnies, au cours du temps et pour une concentration donnée, et leurs intervalles de crédibilité, ainsi que les paramètres et leurs incertitudes. Des grandeurs parmi

les variables et/ou les paramètres doivent être sélectionnées comme critères d'effet pour déterminer les concentrations en contaminant toxiques pour le microcosme. Il est nécessaire que les grandeurs choisies soient représentatives du "bon fonctionnement" du microcosme. Ce choix apparaît au premier abord comme difficile puisque les grandeurs possibles sont nombreuses et que certaines varient au cours du temps ; pour ces dernières, il serait alors nécessaire de définir un ou plusieurs temps auxquels la grandeur est prise en compte. Des approches intégrées proposent un cadre conceptuel pour la prise en compte de plusieurs grandeurs indicatrices dans l'évaluation du risque liée aux contaminants. Par exemple, l'approche *weight of evidence* (WOE) Piva et al. (2011); Weed (2005) combine plusieurs indicateurs pour évaluer les risques liés à des sédiments contaminés. Ces indicateurs, parmi lesquels la biodisponibilité du contaminant liée à la chimie du sédiment et des effets sub-léthaux sur des biomarqueurs pour deux espèces Benedetti et al. (2014), sont intégrés dans une valeur globale, *i.e.* le WOE, qui résume le risque lié au contaminant étudié. Ce type d'approche pourrait constituer une base pour formaliser l'intégration des grandeurs fournies par le modèle en vue d'évaluer de manière globale le risque lié au contaminant testé sur le microcosme. La construction de protocoles standardisés adaptés au microcosme étudié, notamment pour limiter la variabilité, serait à poursuivre (par exemple dans la continuité de la thèse de Delhaye Delhaye (2012)). L'optimisation des plans d'expérience, dans le but de limiter le nombre d'expérimentations à mener et de réplicats utilisés, serait également à envisager (en se basant sur le travail effectué dans le chapitre 6 de cette thèse). Ces travaux permettraient d'affiner l'utilisation du microcosme et de sa modélisation comme outil pour l'évaluation du risque écotoxicologique.

Bibliographie

- (2015). Rstan : the r interface to stan, version 2.8.0. (Cité en page 37.)
- (2015). Stan : A c++ library for probability and sampling, version 2.9.0. (Cité en pages 37 et 207.)
- Acevedo, M. F. and Waller, W. T. (2000). Modelling and control of a simple trophic aquatic system. *Ecological Modelling*, 131(2-3) :269–284. (Cité en page 29.)
- Adema, D. (1978). Daphnia magna as a test animal in acute and chronic toxicity tests. *Hydrobiologia*, 59(2) :125–134. (Cité en page 47.)
- Albert, C., Ashauer, R., K'unsch, H. R., and Reichert, P. (0001). Bayesian experimental design for a toxicokinetic-toxicodynamic model (english). *Journal of statistical planning and inference*, 142(1) :263 – 275. (Cité en page 195.)
- Andres, S., Ribeyre, F., and Boudou, A. (1998). Effects of temperature and exposure duration on transfer of cadmium between naturally contaminated sediments and burrowing mayfly nymphs (*hexagenia rigida*). *Archives of environmental contamination and toxicology (USA)*, 35(2) :295. (Cité en page 16.)
- Ashauer, R. and Escher, B. I. (2010). Advantages of toxicokinetic and toxicodynamic modelling in aquatic ecotoxicology and risk assessment. *Journal of environmental monitoring*, 12(11) :2056–2061. (Cité en pages 26 et 27.)
- Axelsen, J., Holst, N., Hamers, T., and Krogh, P. (1997). Simulations of the predator-prey interactions in a two species ecotoxicological test system. *Ecological modelling*, 101(1) :15–25. (Cité en page 29.)
- Balen, B., Tkalec, M., Sikić, S., Tolić, S., Cvjetko, P., Pavlica, M., and Vidaković-Cifrek, Z. (2011). Biochemical responses of *Lemna minor* experimentally exposed to cadmium and zinc. *Ecotoxicology (London, England)*, 20(4) :815–26. (Cité en page 50.)
- Barnthouse, W. (1992). The Role of Models in Ecological Risk Assessment : A 1990's Perspective. *Environmental toxicology and chemistry*, 11 :1751–1760. (Cité en page 28.)

- Bartell, S., Lefebvre, G., Kaminski, G., Carreau, M., and Campbell, K. R. (1999). An ecosystem model for assessing ecological risks in Quebec rivers, lakes, and reservoirs. *Ecological Modelling*, 124 :43–67. (Cité en page 29.)
- Bartleson, R. D., Kemp, W. M., and Stevenson, J. C. (2005). Use of a simulation model to examine effects of nutrient loading and grazing on *Potamogeton perfoliatus* L. communities in microcosms. *Ecological Modelling*, 185(2-4) :483–512. (Cité en page 29.)
- Basile, a., Sorbo, S., Conte, B., Cobianchi, R. C., Trinchella, F., Capasso, C., and Carginale, V. (2012). Toxicity, Accumulation, and Removal of Heavy Metals by Three Aquatic Macrophytes. *International Journal of Phytoremediation*, 14(4) :374–387. (Cité en page 49.)
- Begum, M. and Sen, P. K. (2007). TK/TD dose-response modeling of toxicity. *Environmetrics*, 18 :515–525. (Cité en page 27.)
- Benedetti, M., Gorbi, S., Fattorini, D., D'Errico, G., Piva, F., Pacitti, D., and Regoli, F. (2014). Environmental hazards from natural hydrocarbons seepage : Integrated classification of risk from sediment chemistry, bioavailability and biomarkers responses in sentinel species. *Environmental Pollution*, 185 :116 – 126. (Cité en page 209.)
- Beyers, R. J. and Odum, H. T. (1993). *Ecological microcosms / Robert J. Beyers, Howard T. Odum*. Springer advanced texts in life sciences. New York : Springer-Verlag, c1993. (Cité en page 14.)
- Billoir, E., da Silva Ferrão-Filho, A., Laure Delignette-Muller, M., and Charles, S. (2009). DEBtox theory and matrix population models as helpful tools in understanding the interaction between toxic cyanobacteria and zooplankton. *Journal of theoretical biology*, 258(3) :380–8. (Cité en page 34.)
- Billoir, E., Delhayé, H., Clément, B., Delignette-Muller, M. L., and Charles, S. (2011). Bayesian modelling of daphnid responses to time-varying cadmium exposure in laboratory aquatic microcosms. *Ecotoxicology and environmental safety*, 74(4) :693–702. (Cité en pages 19, 25 et 35.)

- Billoir, E., Delhaye, H., Forfait, C., Clément, B., Triffault-Bouchet, G., Charles, S., and Delignette-Muller, M. (2012). Comparison of bioassays with different exposure time patterns : the added value of dynamic modelling in predictive ecotoxicology. *Ecotoxicology and environmental safety*, 75(1) :80–6. (Cité en pages 19, 25, 34, 50 et 193.)
- Billoir, E., Delignette-muller, M. L., Pery, A. R. R., Geffard, O., and Charles, S. (2008). Statistical cautions when estimating DEBtox parameters. *Journal of Theoretical Biology*, 254 :55–64. (Cité en pages 25, 26, 32 et 34.)
- Biron, P. A., Massarin, S., Alonzo, F., Garcia-Sanchez, L., Charles, S., and Billoir, E. (2012). Population-level modeling to account for multigenerational effects of uranium in daphnia magna. *Environmental Science and Technology*, 46 :1136–1143. (Cité en page 26.)
- Bodiguel, X., Maury, O., Mellon-Duval, C., Roupsard, F., Le Guellec, A. M., and Loizeau, V. (2009). A dynamic and mechanistic model of PCB bioaccumulation in the European hake (*Merluccius merluccius*). *Journal of Sea Research*, 62(2-3) :124–134. (Cité en page 26.)
- Bone, A. J., Colman, B. P., Gondikas, A. P., Newton, K. M., Harrold, K. H., Cory, R. M., Unrine, J. M., Klaine, S. J., Matson, C. W., and Di Giulio, R. T. (2012). Biotic and abiotic interactions in aquatic microcosms determine fate and toxicity of Ag nanoparticles : part 2-toxicity and Ag speciation. *Environmental science & technology*, 46(13) :6925–33. (Cité en page 16.)
- Boullemant, A., Le Faucheur, S., Fortin, C., and Campbell, P. G. C. (2011). Uptake of lipophilic cadmium complexes by three green algae : influence of humic acid and its pH dependence. *Journal of Phycology*, 47(4) :784–791. (Cité en page 49.)
- Brandt, K. K., Jørgensen, N. O., Nielsen, T. H., and Winding, A. (2004). Microbial community-level toxicity testing of linear alkylbenzene sulfonates in aquatic microcosms. *FEMS Microbiology Ecology*, 49(2) :229–241. (Cité en page 16.)
- Brockway, D., Hill, J. I., Maudsley, J., and Lassiter, R. (1979). Development replicability

- and modeling of naturally derived microcosms. *International Journal of Environmental Studies*. (Cité en page 13.)
- Brockway, D. L., Smith, P. D., and Stancil, F. E. (1984). Fate and effects of atrazine in small aquatic microcosms. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 32 :345–353. (Cité en page 16.)
- Burns, C. (1969). Particle size and sedimentation in the feeding behavior of two species of *Daphnia*. *Limnol. Oceanogr*, 14(3) :392–402. (Cité en page 74.)
- Cairns, J. (1984). Are single species toxicity tests alone adequate for estimating environmental hazard ? (Cité en pages 2 et 13.)
- Cairns, J. and Cherry, D. S. (1993). *Freshwater Multi-Species Test Systems*, pages 101–116. Blackwell Publishing Ltd. (Cité en page 14.)
- Cairns, J., Niederlehner, B., and Pratt, J. R. (1990). Evaluation of joint toxicity of chlorine and ammonia to aquatic communities. *Aquatic Toxicology*, 16(2) :87–100. (Cité en page 16.)
- Calow, P. (1993). *Handbook of ecotoxicology / edited by Peter Calow*. London ; Boston : Blackwell Scientific Publications, 1993-1994. (Cité en pages 8, 10, 11 et 13.)
- Campbell, P. G. C., Errécalde, O., Fortin, C., Hiriart-Baer, V. P., and Vigneault, B. (2002). Metal bioavailability to phytoplankton—applicability of the biotic ligand model. *Comparative biochemistry and physiology. Toxicology & pharmacology : CBP*, 133(1-2) :189–206. (Cité en page 49.)
- Caquet, T., Lagadic, L., Jonot, O., Baturu, W., Kilanda, M., Simon, P., Le Bras, S., Echaubard, M., and Ramade, F. (1996). Outdoor experimental ponds (mesocosms) designed for long-term ecotoxicological studies in aquatic environment. *Ecotoxicology and environmental safety*, 34(34) :125–133. (Cité en pages 10 et 11.)
- Cauzzi, N. (2007). *Evaluation de l'éco-compatibilité de sédiments contaminés , traités ou non par un procédé physico-chimique , dans le cadre d'un scénario de dépôt en gravière Etude en microcosmes aquatiques*. PhD thesis. (Cité en pages 19 et 51.)

- Chèvre, N., Brazzale, A. R., Becker-van Slooten, K., Behra, R., Tarradellas, J., and Guettinger, H. (2005). Modeling the concentration-response function of the herbicide dinoseb on *Daphnia magna* (survival time, reproduction) and *Pseudokirchneriella subcapitata* (growth rate). *Ecotoxicology and environmental safety*, 62(1) :17–25. (Cité en page 34.)
- Choung, C. B., Hyne, R. V., Stevens, M. M., and Hose, G. C. (2013). The ecological effects of a herbicide-insecticide mixture on an experimental freshwater ecosystem. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, 172 :264–74. (Cité en page 16.)
- Christensen, V., Christensen, V., Pauly, D., and Pauly, D. (1992). ECOPATH II - a software for balancing steady-state ecosystem models and calculating network characteristics. *Science*, 61(681) :169–185. (Cité en page 29.)
- Ciric, C. (2012). *Conception et développement d'un nouveau modèle d'écosystème aquatique adapté pour décrire la dynamique des espèces dans des mésocosmes lotiques*. PhD thesis. (Cité en page 29.)
- Clément, B. and Cadier, C. (1998). Development of a new laboratory freshwater/sediment microcosm test. *Ecotoxicology*, 7 :279–290. (Cité en pages 16, 18, 38, 39, 41, 51, 62 et 197.)
- Clément, B. and Zaid, S. (2004). A new protocol to measure the effects of toxicants on daphnid-algae interactions. *Chemosphere*, 55(10) :1429–38. (Cité en pages 19 et 51.)
- Clément, B. J. P., Delhaye, H. L., and Triffault-Bouchet, G. G. (2014). Comparison of laboratory batch and flow-through microcosm bioassays. *Ecotoxicology and environmental safety*, 108C :217–223. (Cité en pages 16, 19, 49 et 51.)
- Cleuvers, M. and Ratte, H.-T. (2002). Phytotoxicity of coloured substances : is Lemna Duckweed an alternative to the algal growth inhibition test? *Chemosphere*, 49(1) :9–15. (Cité en page 47.)
- Coutellec, M. A., Delous, G., Cravedi, J. P., and Lagadic, L. (2008). Effects of the mixture of diquat and a nonylphenol polyethoxylate adjuvant on fecundity and pro-

- geny early performances of the pond snail *Lymnaea stagnalis* in laboratory bioassays and microcosms. *Chemosphere*, 73 :326–336. (Cité en page 16.)
- Crossland, N. O. and La Point, T. W. (1992). The design of mesocosm experiments. *Environmental toxicology and chemistry*, 11(1) :1–4. (Cité en pages 11, 13 et 14.)
- Čypaitė, A., Žaltauskaitė, J., and Vencloviėnė, J. (2014). Assessment of chlorophyll-a, chlorophyll-b and growth rate in freshwater green algae *Pseudokirchneriella subcapitata* exposed to cadmium and copper. In *The 9th International Conference "ENVIRONMENTAL ENGINEERING"*, number May. (Cité en page 49.)
- Daam, M. a. and Van den Brink, P. J. (2007). Effects of chlorpyrifos, carbendazim, and linuron on the ecology of a small indoor aquatic microcosm. *Archives of environmental contamination and toxicology*, 53(1) :22–35. (Cité en pages 14 et 16.)
- De Laender, F., De Schamphelaere, K. a. C., Vanrolleghem, P. a., and Janssen, C. R. (2008). Do we have to incorporate ecological interactions in the sensitivity assessment of ecosystems? An examination of a theoretical assumption underlying species sensitivity distribution models. *Environment international*, 34(3) :390–6. (Cité en pages 2, 13 et 28.)
- Delhaye, H. (2012). *Développement d'un bioessai de toxicité chronique en microcosme aquatique de laboratoire et évaluation de l'outil au travers de l'étude des effets du cadmium*. PhD thesis. (Cité en pages 19, 51 et 209.)
- Delignette-Muller, M. L., Lopes, C., Veber, P., and Charles, S. (2014). Statistical handling of reproduction data for exposure-response modeling. *Environmental Science and Technology*, 48 :7544–7551. (Cité en pages 23, 34 et 35.)
- DeMott, W. (1982). Feeding selectivities and relative ingestion rates of *Daphnia* and *Bosmina*. *Limnol. Oceanogr*, 27(3) :518–527. (Cité en pages 74 et 75.)
- Drost, W., Matzke, M., and Backhaus, T. (2007). Heavy metal toxicity to *Lemna minor* : studies on the time dependence of growth inhibition and the recovery after exposure. *Chemosphere*, 67(1) :36–43. (Cité en page 49.)

- Ducrot, V., Billoir, E., Pery, A. R. R., Garric, J., and Charles, S. (2010). From individual to population level effects of toxicants in the tubicifid *branchiura sowerbyi* using threshold effect models in a bayesian framework. *Environmental science and technology*, 44(9) :3566 – 3571. (Cité en pages 25 et 34.)
- Ducrot, V., Pery, A. R. R., Mons, R., Queau, H., Charles, S., and Garric, J. (2007). Dynamic energy budget as a basis to model population-level effects of zinc-spiked sediments in the gastropod *valvata piscinalis*. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 26(8) :1774–1783. (Cité en page 26.)
- Dudzik, M., Harte, J., Jassby, A., Lapan, E., Levy, D., and Rees, J. (1979). Some considerations in the design of aquatic microcosms for plankton studies . *International Journal of Environmental Studies*, 13(2) :125. (Cité en page 18.)
- Ebert, D. (1991). The effect of size at birth, maturation threshold and genetic differences on the life-history of *daphnia magna*. *Oecologia*, 86(2) :243. (Cité en page 193.)
- ECB (2003). *Technical guidance document on risk assessment*. European Chemicals Bureau. (Cité en pages 1, 2 et 21.)
- Egloff, D. and Palmer, D. (1971). Size relations of the filtering area of two *Daphnia* species. *Limnol. Oceanogr*, 16(November) :900–905. (Cité en pages 74, 75 et 124.)
- EPA, U. (2001). *2001 update of ambient water quality criteria for cadmium*. (Cité en page 48.)
- Faupel, M., Ristau, K., and Traunspurger, W. (2012). The functional response of a freshwater benthic community to cadmium pollution. *Environmental pollution*, 162 :104–9. (Cité en page 16.)
- Fliedner, a. and Klein, W. (1996). Effects of lindane on the planktonic community in freshwater microcosms. *Ecotoxicology and environmental safety*, 33(3) :228–35. (Cité en page 16.)
- Focks, A., ter Horst, M., van den Berg, E., Baveco, H., and van den Brink, P. J. (2014). Integrating chemical fate and population-level effect models for pesticides at land-

- scape scale : New options for risk assessment. *Ecological Modelling*, 280 :102–116. (Cité en page 30.)
- Fontaine, C. and Gonzalez, A. (2005). Population synchrony induced by resource fluctuations and dispersal in an aquatic microcosm. *Ecology*, 86(6) :1463–1471. (Cité en page 29.)
- Forbes, V., Forbes, T., and Riviere, J. (1997). Ecotoxicologie : theorie et applications. / ecotoxicology in theory and practice. (Cité en pages 11, 13 et 18.)
- Forbes, V. E. and Calow, P. (2002). Extrapolation in Ecological Risk Assessment : Balancing Pragmatism and Precaution in Chemical Controls Legislation. *BioScience*, 52(3) :249. (Cité en pages 1 et 28.)
- Forfait-Dubuc, C., Charles, S., Billoir, E., and Delignette-Muller, M. L. (2012). Survival data analyses in ecotoxicology : critical effect concentrations, methods and models. What should we use ? *Ecotoxicology (London, England)*, 21(4) :1072–83. (Cité en pages 34, 35, 71, 72, 84, 193 et 195.)
- Fox, D. R. (2010). A Bayesian approach for determining the no effect concentration and hazardous concentration in ecotoxicology. *Ecotoxicology and environmental safety*, 73(2) :123–31. (Cité en page 34.)
- Fussmann, G. F. (2000). Crossing the Hopf Bifurcation in a Live Predator-Prey System. *Science*, 290(5495) :1358–1360. (Cité en page 29.)
- Gabsi, F. and Preuss, T. G. (2014). Modelling the impact of the environmental scenario on population recovery from chemical stress exposure : A case study using *Daphnia magna*. *Aquatic Toxicology*, 156 :221–229. (Cité en pages 27 et 30.)
- Gallucci, F., de Castro, I. B., Perina, F. C., de Souza Abessa, D. M., and de Paula Teixeira, A. (2015). Ecological effects of Irgarol 1051 and Diuron on a coastal meiobenthic community : A laboratory microcosm experiment. *Ecological Indicators*, 58 :21–31. (Cité en page 16.)
- Gauci, F. X. (2011). *Contribution à la modélisation du fonctionnement d'un microcosme de laboratoire*. PhD thesis. (Cité en pages 58 et 59.)

- Gauld, D. T. (1951). The grazing rate of planktonic copepods. *Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom*, 29(3) :695. (Cité en page 123.)
- Gelman, A. and Rubin, D. (1992). Inference from iterative simulation using multiple sequences. *Statistical science*, 7(4) :457–511. (Cité en pages 37, 93 et 175.)
- Genesseaux, M. (2015). *Etude de la spéciation, des effets et de la répartition du cadmium dans un microcosme de laboratoire*. PhD thesis. (Cité en pages 57 et 58.)
- Gergs, A., Kulkarni, D., and Preuss, T. G. (2015). Body size-dependent toxicokinetics and toxicodynamics could explain intra- and interspecies variability in sensitivity. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, 206 :449–455. (Cité en page 27.)
- Gopalswamy, A. M., Royle, J. A., Delampady, M., Nichols, J. D., Karanth, K. U., and Macdonald, D. W. (2012). Density estimation in tiger populations : combining information for strong inference. *Ecology*, 93(7) :1741–1751. (Cité en page 35.)
- Graham, D. W., Miles, D., Denoyelles, F., and Smith, V. H. (1999). Development of small outdoor microcosms for studying contaminant transformation rates and mechanisms under various water column conditions. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 18(6) :1124–1132. (Cité en page 14.)
- Grasman, J., van Nes, E. H., and Kersting, K. (2009). Data-directed modelling of Daphnia dynamics in a long-term micro-ecosystem experiment. *Ecological Modelling*, 220(3) :343–350. (Cité en page 29.)
- Grimm, V. (1999). Ten years of individual-based modelling in ecology : what have we learned and what could we learn in the future ? *Ecological Modelling*, 115(2-3) :129–148. (Cité en page 30.)
- Grimm, V., Berger, U., DeAngelis, D. L., Polhill, J. G., Giske, J., and Railsback, S. F. (2010). The ODD protocol : A review and first update. *Ecological Modelling*, 221(23) :2760–2768. (Cité en page 66.)
- Guilhermino, L., Sobral, O., Chastinet, C., Ribeiro, R., Gonçalves, F., Silva, M. C., and Soares, a. M. (1999). A Daphnia magna first-brood chronic test : An alternative to

- the conventional 21-Day chronic bioassay? *Ecotoxicology and environmental safety*, 42(1) :67–74. (Cité en page 50.)
- Hadfield, J., Richardson, D., and Burke, T. (2006). Towards unbiased parentage assignment : combining genetic , behavioural and spatial data in a Bayesian framework. *Molecular Ecology*, 15 :3715–3730. (Cité en page 35.)
- Hazlerigg, C. R., Tyler, C. R., Lorenzen, K., Wheeler, J. R., and Thorbek, P. (2014). Population relevance of toxicant mediated changes in sex ratio in fish : An assessment using an individual-based zebrafish (*Danio rerio*) model. *Ecological Modelling*, 280 :76–88. (Cité en page 30.)
- Hendriks, A. J., Maas-Diepeveen, J. L. M., Heugens, E. W., and Straalen, N. V. (2005). Meta-analysis of intrinsic rates of increase and carrying capacity of populations affected by toxic and other stressors. *Environmental toxicology and chemistry*, 24(9) :2267–2277. (Cité en page 34.)
- Heugens, E., Jager, T., Creighton, R., Kraak, M., Hendriks, a., Vanstraelen, M., and Admiraal, W. (2003). Temperature Dependent Effects of Cd on *Daphnia magna* : Accumulation versus Sensitivity. *Environmental Science and Technology*, 37 :2145–2151. (Cité en page 26.)
- Hitchcock, D. R., McCutcheon, S. C., and Smith, M. C. (2003). Using rotifer population demographic parameters to assess impacts of the degradation products from trinitrotoluene phytoremediation. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 55(2) :143–151. (Cité en page 16.)
- Horemans, N., Van Hees, M., Van Hoeck, A., Saenen, E., De Meutter, T., Nauts, R., Blust, R., and Vandenhove, H. (2015). Uranium and cadmium provoke different oxidative stress responses in *Lemna minor* L. *Plant Biol (Stuttg)*, 17 Suppl 1 :91–100. (Cité en page 50.)
- Horvat, T., Vidaković-Cifrek, Ž., Oreščanin, V., Tkalec, M., and Pevalek-Kozlina, B. (2007). Toxicity assessment of heavy metal mixtures by *Lemna minor* L. *Science of the Total Environment*, 384(1-3) :229–238. (Cité en page 50.)

- Hou, W., Chen, X., Song, G., Wang, Q., and Chi Chang, C. (2007). Effects of copper and cadmium on heavy metal polluted waterbody restoration by duckweed (*Lemna minor*). *Plant Physiology and Biochemistry*, 45 :62–69. (Cité en page 49.)
- Hrabik, T. R., Roth, B. M., and Ahrenstorff, T. (2014). Predation risk and prey fish vertical migration in lake superior : Insights from an individual based model of siscowet (*salvelinus namaycush*). *Journal of Great Lakes Research*, 40 :730 – 738. (Cité en page 30.)
- J. S. Andersen, J. J. M. Bedaux, S. A. L. M. K. and Holst, H. (2000). The influence of design characteristics on statistical inference in nonlinear estimation : A simulation study based on survival data and hazard modeling. *Journal of Agricultural, Biological, and Environmental Statistics*, 5(3) :323–341. (Cité en page 195.)
- Jager, T., Albert, C., Preuss, T. G., and Ashauer, R. (2011). General unified threshold model of survival—a toxicokinetic-toxicodynamic framework for ecotoxicology. *Environmental science & technology*, 45(7) :2529–40. (Cité en pages 27 et 73.)
- Jager, T., Crommentuijn, T., van Gestel, C. a. M., and Kooijman, S. a. L. M. (2004). Simultaneous modeling of multiple end points in life-cycle toxicity tests. *Environmental science & technology*, 38(10) :2894–2900. (Cité en pages 25 et 34.)
- Jager, T., Heugens, E. H. W., and Kooijman, S. a. L. M. (2006). Making sense of ecotoxicological test results : Towards application of process-based models. *Ecotoxicology*, 15 :305–314. (Cité en page 34.)
- Jager, T. and Zimmer, E. I. (2012). Simplified Dynamic Energy Budget model for analysing ecotoxicity data. *Ecological Modelling*, 225 :74–81. (Cité en pages 23 et 26.)
- Johnston, A. S. A., Hodson, M. E., Thorbek, P., Alvarez, T., and Sibly, R. M. (2014). An energy budget agent-based model of earthworm populations and its application to study the effects of pesticides. *Ecol Modell*, 280 :5–17. (Cité en page 30.)
- Källqvist, T. (2009). Effect of water hardness on the toxicity of cadmium to the green alga *Pseudokirchneriella subcapitata* in an artificial growth medium and nutrient-

- spiked natural lake waters. *Journal of toxicology and environmental health. Part A*, 72(3-4) :277–283. (Cité en pages 48, 49 et 152.)
- Khadraoui, K. (2015). A simple Markovian individual-based model as a means of understanding forest dynamics. *Mathematics and Computers in Simulation*, 107 :1–23. (Cité en page 30.)
- Kimball, K. D. and Levin, S. a. (1985). Limitations of Laboratory Bioassays : The Need for Ecosystem-Level Testing. *BioScience*, 35(3) :165–171. (Cité en pages 10 et 13.)
- Klok, C., Hjorth, M., and Dahllöf, I. (2012). Qualitative use of Dynamic Energy Budget theory in ecotoxicology. *Journal of Sea Research*, 73 :24–31. (Cité en page 26.)
- Knops, M., Altenburger, R., and Segner, H. (2001). Alterations of physiological energetics, growth and reproduction of *Daphnia magna* under toxicant stress. *Aquatic Toxicology*, 53 :79–90. (Cité en page 50.)
- Kon Kam King, G., Delignette-Muller, M. L., Kefford, B. J., Piscart, C., and Charles, S. (2015). Constructing time-resolved species sensitivity distributions using a hierarchical toxico-dynamic model. *Environmental Science and Technology*, 49(20) :12465 – 12473. (Cité en page 34.)
- Kon Kam King, G., Larras, F., Charles, S., and Delignette-Muller, M. L. (2015). Hierarchical modelling of species sensitivity distribution : development and application to the case of diatoms exposed to several herbicides. *Ecotoxicology and environmental safety*, 114 :212–21. (Cité en page 34.)
- Kooijman, S. and Bedaux, J. (1996). Analysis of toxicity tests on *Daphnia* survival and reproduction. *Water Research*, 30(7) :1711–1723. (Cité en page 24.)
- Kooijman, S., Bedaux, J. J. M., Péry, A. R. R., and Jager, T. (2003). Water quality - Guidance document on the statistical analysis of ecotoxicity data. In *ISO TC 147/SC 5/WG 10/N 0390*, page Ch. 7. (Cité en page 32.)
- Kooijman, S. A. L. M., Vrije, B., and Amsterdam, U. (2000). Dynamic Energy Budget theory. (Cité en pages 24 et 25.)

- Kottelat, R. (2008). *Caractérisation physico-chimique de microcosmes alimentés en continu et leur utilisation dans l'étude des voies d'exposition de Cd et Cr (III) chez Daphnia magna*. PhD thesis. (Cité en pages 48 et 50.)
- Koukal, B., Guéguen, C., Pardos, M., and Dominik, J. (2003). Influence of humic substances on the toxic effects of cadmium and zinc to the green alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. *Chemosphere*, 53 :953–961. (Cité en pages 47, 48 et 152.)
- Kramer, V. J., Etterson, M. a., Hecker, M., Murphy, C. a., Roesijadi, G., Spade, D. J., Spromberg, J. a., Wang, M., and Ankley, G. T. (2011). Adverse outcome pathways and ecological risk assessment : Bridging to population-level effects. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 30(1) :64–76. (Cité en page 2.)
- Kristiansen, T., Lough, R. G., Werner, F. E., Broughton, E. A., and Buckley, L. J. (2014). Individual-based modeling of feeding ecology and prey selection of larval cod on georges bank. *Mar Ecol Prog Ser*, 376 :227–243. (Cité en page 30.)
- Kulakowska, K. a., Kulakowski, T. M., Inglis, I. R., Smith, G. C., Haynes, P. J., Prosser, P., Thorbek, P., and Sibly, R. M. (2014). Using an individual-based model to select among alternative foraging strategies of wood pigeons : Data support a memory-based model with a flocking mechanism. *Ecological Modelling*, 280 :89–101. (Cité en page 30.)
- Lacaze, E., Geffard, O., Bony, S., and Devaux, A. (2010). Genotoxicity assessment in the amphipod *gammarus fossarum* by use of the alkaline comet assay. *Mut.Res.-Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*, 700 :32 – 38. (Cité en page 11.)
- Lamonica, D., Herbach, U., Orias, F., Clément, B., Charles, S., and Lopes, C. (2016). Mechanistic modelling of daphnid-algae dynamics within a laboratory microcosm. *Ecological Modelling*, 320 :213–230. (Cité en page 100.)
- Lampert, W., Fleckner, W., Rai, H., and Taylor, B. E. (1986). Phytoplankton control by grazing zooplankton : spring clear-water phase : A study on the spring clear-water phase. *Limnol. Oceanogr*, 31(3) :478–490. (Cité en page 74.)

- Landis, W. G., Matthew, R. A., Markiewicz, A. J., and Matthews, G. B. (1993). Multivariate analysis of the impacts of the turbine fuel JP-4 in a microcosm toxicity test with implications for the evaluation ecosystem dynamics and risk assessment. *Ecotoxicology*, 2(4) :271–300. (Cité en page 14.)
- Lavoie, M., Le Faucheur, S., Boullemant, A., Fortin, C., and Campbell, P. G. C. (2012). The Influence Of pH on algal cell membrane permeability and its implications for the uptake of lipophilic metal complexes. *Journal of Phycology*, 48(2) :293–302. (Cité en pages 48 et 49.)
- Léopold, M. (1984). Éloge du professeur rené truhaut. *Revue d'histoire de la pharmacie*, (262) :340. (Cité en page 1.)
- Liu, C., Bednarska, A. J., Sibly, R. M., Murfitt, R. C., Edwards, P., and Thorbek, P. (2014). Incorporating toxicokinetics into an individual-based model for more realistic pesticide exposure estimates : A case study of the wood mouse. *Ecological Modelling*, 280 :30–39. (Cité en page 30.)
- Lopes, C., a.R.R. Péry, Chaumot, a., and Charles, S. (2005). Ecotoxicology and population dynamics : Using DEBtox models in a Leslie modeling approach. *Ecological Modelling*, 188(1) :30–40. (Cité en page 26.)
- Louda, S. M., Rand, T. a., Kula, a. a. R., Arnett, a. E., West, N. M., and Tenhumberg, B. (2011). Priority resource access mediates competitive intensity between an invasive weevil and native floral herbivores. *Biological Invasions*, 13 :2233–2248. (Cité en page 30.)
- Lunn, D. J., Thomas, A., Best, N., and Spiegelhalter, D. (2000). Winbugs &ndash ; a bayesian modelling framework : Concepts, structure, and extensibility. *Statistics and Computing*, 10(4) :325–337. (Cité en page 37.)
- Machado, M. D., Lopes, A. R., and Soares, E. V. (2015). Responses of the alga *Pseudokirchneriella subcapitata* to long-term exposure to metal stress. *Journal of Hazardous Materials*, 296 :82–92. (Cité en pages 11 et 49.)

- Maloney, F. (2007). *Influence de paramètres physico-chimiques (dureté, pH et présence d'un agent chélateur, l'EDTA) sur la réponse toxique au cadmium de l'algue verte d'eau douce Pseudokirchneriella subcapitata*. PhD thesis. (Cité en page 48.)
- Mance, G. (1987). *Pollution threat of heavy metals in aquatic environments*. (Cité en pages 12, 48 et 152.)
- Martin, B. T., Jager, T., Nisbet, R. M., Preuss, T. G., Hammers-Wirtz, M., and Grimm, V. (2013). Extrapolating ecotoxicological effects from individuals to populations : a generic approach based on Dynamic Energy Budget theory and individual-based modeling. *Ecotoxicology*, 22(3) :574–583. (Cité en page 30.)
- Merlin, G., Thiebaud, H., Blake, G., Sembiring, S., and Alary, J. (1992). Mesocosms' and microcosms' utilization for ecotoxicity evaluation of dichloromethane, a chlorinated solvent (english). *Chemosphere (Oxford)*, 24(1) :37 – 50. (Cité en page 17.)
- Miller, R. J., Lenihan, H. S., Muller, E. B., Tseng, N., Hanna, S. K., and Keller, A. a. (2010). Impacts of metal oxide nanoparticles on marine phytoplankton. *Environmental science & technology*, 44(19) :7329–7334. (Cité en page 26.)
- Moore, D. R. J. and Caux, P. Y. (1997). Estimating low toxic effects. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16(4) :794–801. (Cité en page 22.)
- Moore, J. E. and Barlow, J. (2011). Bayesian state-space model of fin whale abundance trends from a 1991 - 2008 time series of line-transect surveys in the California Current. *Journal of Applied Ecology*, 48 :1195–1205. (Cité en page 35.)
- Muller, E. B., Hanna, S. K., Lenihan, H. S., Miller, R. J., and Nisbet, R. M. (2014). Impact of engineered zinc oxide nanoparticles on the energy budgets of *Mytilus galloprovincialis*. *Journal of Sea Research*, 94 :29–36. (Cité en page 26.)
- Nebeker, V., Onjukka, T., Cairns, a., Krawczyk, F., and Al, E. T. (1986). Survival of *Daphnia Magna* and *Hyaella Azteca* in Cadmium-Spiked Water and Sediment. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 5 :933–938. (Cité en pages 50 et 193.)

- Newman, M. C. (2008). "what exactly are you inferring?" a closer look at hypothesis testing. *Environmental Toxicology And Chemistry / SETAC*, 27(5) :1013 – 1019. (Cit  en page 1.)
- Niederlehner, B. and Cairns, John, J. (1994). Consistency and sensitivity of community level endpoints in microcosm tests. *Journal of Aquatic Ecosystem Health*, 3(2) :93–99. (Cit  en page 14.)
- Nisbet, R. M., Muller, E. B., Lika, K., and Kooijman, S. A. L. M. (2000). From molecules to ecosystems through dynamic energy budget models. *Journal of Animal Ecology*, 69(6) :913–926. (Cit  en page 24.)
- Nriagu, J. and Sprague, J. (1987). *Cadmium in the aquatic environment*. John Wiley and Sons, New York, NY (USA). (Cit  en page 50.)
- OECD (1984). *Current approaches in the statistical analysis of ecotoxicity data : a guidance to application*. Tech. rep., Organisation for Economic Cooperation and Development. (Cit  en pages 11 et 22.)
- Oldenkamp, R., Hendriks, H. W. M., van de Meent, D., and Ragas, A. M. J. (2015). Hierarchical Bayesian Approach To Reduce Uncertainty in the Aquatic Effect Assessment of Realistic Chemical Mixtures. *Environmental Science & Technology*, 49(17) :10457–10465. (Cit  en page 34.)
- Orias, F. (2012). *Contribution exp rimentale   la mod lisation d'un microcosme algues-daphnies en conditions normale et contamin e (cadmium)*. PhD thesis. (Cit  en pages 55 et 58.)
- Paquet, N., Lavoie, M., Maloney, F., Duval, J. F., Campbell, P. G., and Fortin, C. (2015). Cadmium accumulation and toxicity in the unicellular alga pseudokirchneriella subcapitata : Influence of metal-binding exudates and exposure time. *Environmental Toxicology and Chemistry*, (7) :1524. (Cit  en page 49.)
- Park, R. a., Clough, J. S., and Wellman, M. C. (2008). AQUATOX : Modeling environmental fate and ecological effects in aquatic ecosystems. *Ecological Modelling*, 213(1) :1–15. (Cit  en page 29.)

- Paule, a., Roubex, V., Lauga, B., Duran, R., Delmas, F., Paul, E., and Rols, J. L. (2013). Changes in tolerance to herbicide toxicity throughout development stages of phototrophic biofilms. *Aquatic Toxicology*, 144-145 :310–321. (Cité en page 17.)
- Péry, A. R. R., Béthune, A., Gahou, J., Mons, R., and Garric, J. (2005). Body residues : a key variable to analyze toxicity tests with *Chironomus riparius* exposed to copper-spiked sediments. *Ecotoxicology and environmental safety*, 61(2) :160–7. (Cité en page 26.)
- Pieters, B. J., Jager, T., Kraak, M. H. S., and Admiraal, W. (2006). Modeling responses of *Daphnia magna* to pesticide pulse exposure under varying food conditions : intrinsic versus apparent sensitivity. *Ecotoxicology*, 15(7) :601–608. (Cité en page 26.)
- Piva, F., Ciaprini, F., Onorati, F., Benedetti, M., Fattorini, D., Ausili, A., and Regoli, F. (2011). Assessing sediment hazard through a weight of evidence approach with bioindicator organisms : A practical model to elaborate data from sediment chemistry, bioavailability, biomarkers and ecotoxicological bioassays. *Chemosphere*, 83 :475 – 485. (Cité en page 209.)
- Plummer, M. (2003). *JAGS : A Program for Analysis of Bayesian Graphical Models Using Gibbs Sampling*. March 20-22, Vienna, Austria. (Cité en pages 37 et 90.)
- Plummer, M. (2009). *rjags : Bayesian graphical models using mcmc*. Rpackage version 1.0.3-12. (Cité en pages 37, 90 et 93.)
- Plummer, M., Best, N., Cowles, K., and Vines, K. (2006). Coda : Convergence diagnosis and output analysis for mcmc. *R News*, 6(1) :7–11. (Cité en page 93.)
- Prasad, M. N. V., Malec, P., Waloszek, a., Bojko, M., and Strzalka, K. (2001). Physiological responses of *Lemna trisulca* L. (duckweed) to cadmium and copper bioaccumulation. *Plant Science*, 161 :881–889. (Cité en page 49.)
- Pratt, J. R., Melendez, a. E., Barreiro, R., and Bowers, N. J. (1997). Redicting the ecological effects of herbicides. *Ecological Applications*, 7(4) :1117–1124. (Cité en page 13.)

- Preston, B. L. (2002). Indirect effects in aquatic ecotoxicology : Implications for ecological risk assessment. *Environmental Management*, 29(3) :311–323. (Cité en pages 2 et 13.)
- Radić, S., Stipanicev, D., Cvjetko, P., Mikelić, I. L., Rajčić, M. M., Sirac, S., Pevalek-Kozlina, B., and Pavlica, M. (2010). Ecotoxicological assessment of industrial effluent using duckweed (*Lemna minor* L.) as a test organism. *Ecotoxicology (London, England)*, 19(1) :216–22. (Cité en page 50.)
- Rai, L. and Mallick, N. (1993). Heavy metal toxicity to algae under synthetic microcosm. *Ecotoxicology*, 242 :231–242. (Cité en pages 14 et 17.)
- Ramade, F. (2002). *Dictionnaire encyclopédique des sciences de la nature et de la biodiversité*. Dunod. (Cité en pages 10 et 13.)
- Razinger, J., Dermastia, M., Koce, J. D., and Zrimec, A. (2008). Oxidative stress in duckweed (*Lemna minor* L.) caused by short-term cadmium exposure. *Environmental Pollution*, 153(3) :687–694. (Cité en page 50.)
- Rigler, F. (1961). The relation between concentration of food and feeding rate of daphnia magna straus. *Canadian Journal of Zoology*, 39(6) :857–868. (Cité en page 74.)
- Ritz, C. (2010). Toward a unified approach to dose-response modeling in ecotoxicology. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 29(1) :220–229. (Cité en page 22.)
- Robinson, K. a., Baird, D. J., and Wrona, F. J. (2003). Surface metal adsorption on zooplankton carapaces : implications for exposure and effects in consumer organisms. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, 122(2) :159–67. (Cité en page 50.)
- Roger, P. A. and Reynaud, P. A. (1978). La numération des algues en sol submergé : Loi de distribution des organismes et densité d'échantillonnage. *Rev. Ecol. Biol. Sol*, 15(2) :219–234. (Cité en page 71.)
- Sanchez, P. and Tarazona, J. V. (2002). Development of a multispecies system for testing reproductive effects on aquatic invertebrates. Experience with *Daphnia magna*, *Chironomus prasinus* and *Lymnaea peregra*. *Aquatic Toxicology*, 60 :249–256. (Cité en page 13.)

- Sanderson, H., Boudreau, T. M., Mabury, S. a., Cheong, W.-J., Solomon, K. R., Anderson, H. A. N. S. S., Oudreau, T. I. M. B., Abury, S. C. A. M., Heong, W. O. O. A. Y. C., and Olomon, K. E. R. S. (2002). Ecological impact and environmental fate of perfluorooctane sulfonate on the zooplankton community in indoor microcosms. *Environmental toxicology and chemistry / SETAC*, 21(7) :1490–6. (Cité en page 17.)
- Schmitt, W., Bruns, E., Dollinger, M., and Sowig, P. (2013). Mechanistic TK/TD-model simulating the effect of growth inhibitors on Lemna populations. *Ecological Modelling*, 255 :1–10. (Cité en page 27.)
- Schmitt-Jansen, M. and Altenburger, R. (2005). Predicting and observing responses of algal communities to photosystem II-herbicide exposure using pollution-induced community tolerance and species-sensitivity distributions. *Environmental toxicology and chemistry / SETAC*, 24(2) :304–312. (Cité en page 17.)
- Seguin, F., Leboulanger, C., Rimet, F., Druart, J. C., and Bérard, a. (2001). Effects of atrazine and nicosulfuron on phytoplankton in systems of increasing complexity. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 40 :198–208. (Cité en page 17.)
- Siehoff, S., Hammers-Wirtz, M., Strauss, T., and Ratte, H. T. (2009). Periphyton as alternative food source for the filter-feeding cladoceran *Daphnia magna*. *Freshwater Biology*, 54 :15–23. (Cité en page 77.)
- Soetaert, K., Petzoldt, T., and Setzer, R. W. (2010). Solving differential equations in r : Package desolve. *Journal of Statistical Software*, 33(9) :1–25. (Cité en page 91.)
- Sólymos, P. (2010). dclone : Data cloning in R. *The R Journal*, 2(2) :29–37. (Cité en page 93.)
- Stamatelos, S. K., Androulakis, I. P., Tony Kong, A. N., and Georgopoulos, P. G. (2013). A semi-mechanistic integrated toxicokinetic-toxicodynamic (TK/TD) model for arsenic(III) in hepatocytes. *Journal of Theoretical Biology*, 317 :244–256. (Cité en page 27.)
- Sturtz, S., Ligges, U., and Gelman, A. (2005). R2winbugs : A package for running winbugs from r. *Journal of Statistical Software*, 12(3) :1–16. (Cité en page 37.)

- Sugiura, K. (1996). The use of an aquatic microcosm for pollution effects assessment. *Water Research*, 30(8) :1801–1812. (Cité en pages 17 et 29.)
- Surhone, L. M., Tennoe, M. T., and Henssonow, S. F. (2010). *OpenBUGS*. Betascript Publishing, Mauritius. (Cité en page 37.)
- Swartzman, G., Rose, K., Kinding, A., and Taub, F. (1989). Modeling the direct and indirect effects of streptomycin in aquatic microcosms. *Aquatic Toxicology*, 14 :109–130. (Cité en pages 14, 17 et 28.)
- Swartzman, G. L., Taub, F. B., Meador, J., Huang, C., and Kindig, A. (1990). Modeling the effect of algal biomass on multispecies aquatic microcosms response to copper toxicity. *Aquatic Toxicology*, 17(2) :93–117. (Cité en pages 14, 17 et 28.)
- Taenzler, V., Bruns, E., Dorgerloh, M., Pfeifle, V., and Weltje, L. (2007). Chironomids : suitable test organisms for risk assessment investigations on the potential endocrine disrupting properties of pesticides. *Ecotoxicology (London, England)*, 16(1) :221 – 230. (Cité en page 11.)
- Taraldsen, J. E. and Norberg-King, T. J. (1990). New Method for Determining Effluent Toxicity Using Duckweed (*Lemna minor*). *Environmental Toxicology and Chemistry*, 9(6) :761–767. (Cité en page 49.)
- Taub, F. (1989). Standardized aquatic microcosm-development and testing. In A., B. and (eds.), R. F., editors, *Aquatic ecotoxicology : fundamentals, concepts and methodologies*, chapter II, pages 47–91. CRC Press, Boca Raton, Florida. (Cité en pages 13, 14, 28 et 198.)
- Team, R. C. (2013). R : A Language and Environment for Statistical Computing. (Cité en pages 37, 90 et 93.)
- Thornton, A., Weinhart, T., Bokhove, O., and Zhang, B. (2010). Modeling and optimization of algae growth. pages 1–36. (Cité en page 70.)
- Tierney, L., Rossini, A. J., Li, N., and Sevcikova, H. (2013). snow : Simple Network of Workstations. (Cité en page 93.)

- Tkalec, M., Prebeg, T., Roje, V., Pevalek-Kozlina, B., and Ljubešić, N. (2008). Cadmium-induced responses in duckweed *Lemna minor* L. *Acta Physiologiae Plantarum*, 30 :881–890. (Cité en page 49.)
- Traas, T. P., Stäb, J. a., Kramer, R. R. G., Cofino, W. P., and Aldenberg, T. (1996). Modeling and risk assessment of tributyltin accumulation in the food web of a shallow freshwater lake. *Environmental Science and Technology*, 30(4) :1227–1237. (Cité en page 29.)
- Triffault-Bouchet, G., Clément, B., and Blake, G. (2005). Assessment of contaminated sediments with an indoor freshwater/ sediment microcosm assay. *Environmental toxicology and chemistry*, 24(9) :2243–2253. (Cité en pages 19 et 51.)
- Van Straalen, N. M. (1997). How to measure no effects. Part II : Threshold effects in ecotoxicology. *Environmetrics*, 8(April 1995) :249–253. (Cité en page 26.)
- Vanoverbeke, J. (2008). Modeling individual and population dynamics in a consumer-resource system : Behavior under food limitation and crowding and the effect on population cycling in *Daphnia*. *Ecological Modelling*, 216(3-4) :385–401. (Cité en page 70.)
- Varga, M., Horvatić, J., and Čelić, A. (2013). Short term exposure of *Lemna minor* and *Lemna gibba* to mercury, cadmium and chromium. *Open Life Sciences*, 8(11) :1083–1093. (Cité en page 50.)
- Verrhiest, G., Clément, B., and Blake, G. (2001). Single and combined effects of sediment-associated PAHs on three species of freshwater macroinvertebrates. *Ecotoxicology*, 10(6) :363–72. (Cité en pages 19 et 51.)
- Vigneault, B. and Campbell, P. G. C. (2005). Uptake of cadmium by freshwater green algae : Effects of pH and aquatic humic substances. *Journal of Phycology*, 41(1) :55–61. (Cité en pages 48 et 152.)
- Von Bertalanffy, L. (1938). A quantitative theory of organic growth. *Hum. Biol.*, 10 :181–213. (Cité en page 73.)

- Wang, W. (1990). Literature review on duckweed toxicity testing. *Environmental research*, 52 :7–22. (Cité en page 47.)
- Weed, D. L. (2005). Weight of evidence : a review of concept and methods. *Risk Analysis : An Official Publication Of The Society For Risk Analysis*, 25(6) :1545 – 1557. (Cité en page 209.)
- Wensem, J. V., Straalen, N. V., and Kooijman, S. (1997). Carbon and nitrogen fluxes in decomposing leaf litter with microbial-detritivore interactions : model simulations compared to microcosm ecotoxicity tests. *Ecological modelling*, 61(96) :175–189. (Cité en page 29.)
- Wright, S. E. and Bailer, A. J. (2006). Optimal experimental design for a nonlinear response in environmental toxicology. *Biometrics*, (3) :886. (Cité en page 195.)
- Yang, J., Rasa, E., Tantayotai, P., Scow, K. M., Yuan, H., and Hristova, K. R. (2011). Mathematical model of *Chlorella minutissima* UTEX2341 growth and lipid production under photoheterotrophic fermentation conditions. *Bioresource technology*, 102(3) :3077–82. (Cité en page 70.)
- Zhang, J., Bailer, a. J., and Oris, J. T. (2012). Bayesian approach to estimating reproductive inhibition potency in aquatic toxicity testing. *Environmental toxicology and chemistry / SETAC*, 31(4) :916–27. (Cité en page 34.)