



UE-BIO2224M - Statistiques Bayésiennes Et Applications

Modèle hiérarchique toxico-dynamique pour calculer des concentrations en contaminant protectrices des communautés d'espèces aquatiques

22 Octobre 2025

Participants

AGBOMAKOUNZO M. Auré
FOUSSENI SALAMI CISSE TIDJANI

Tuteur pédagogique

Nicolas LARTILLOT



Sommaire

Contexte biologique

- Définition
- Approche classique
- Approche toxicodynamique
- Objectif

Jeu de données

Modélisation

- Modèle toxicodynamique non hiérarchique
- Modèle toxicodynamique hiérarchique

Résultats

Conclusion



Contexte biologique

Définitions:

- Approche Classique : dose réponse (LCx)
 - Évalue la sensibilité des espèces à un contaminant à un temps d'exposition fixe.
 - Objectif principal : déterminer la concentration produisant x% de morts: concentration létale.
 - Limité sur plusieurs points: temps, incertitude statistique, pas de NEC.
- Approche toxicodynamique :
 - Estime une concentration protectrice écologiquement réaliste (par exemple la HC5) et statistiquement robuste, en considérant la dynamique temporelle des effets, l'incertitude statistique et le NEC.

Objectif



**Proposer un modèle toxicologique hiérarchique (TD)
qui pallie les faiblesses de l'approche classique.**



Données

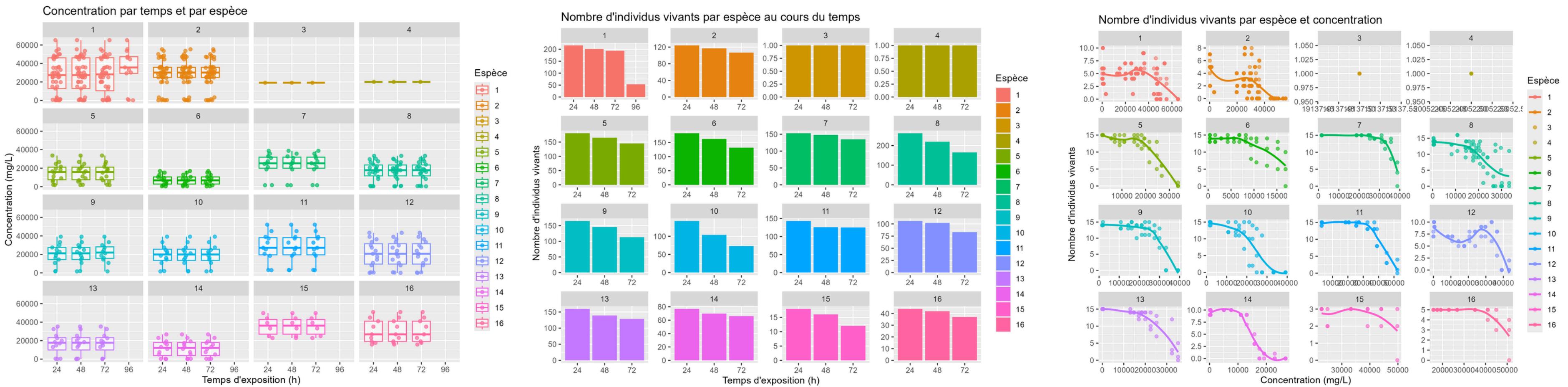
Données:

- Polluant : Sel
- Trait d'histoire mesurés : survie
- Test de toxicité : aiguë, sur 24,48,72 et 96 h
- Plusieurs espèces : de 217 taxons de macroinvertébrés, communauté écologique

TABLE 1 – Résumé statistique du jeu de données df

	conc	Nprec_at_tk_1	N_alive_at_tk	Time	TimePrece	Species_Id
Min.	10	0.00	0.000	24.00	0.00	1.000
1st Qu.	10797	4.00	3.000	24.00	0.00	2.000
Median	22800	7.00	6.000	48.00	24.00	6.000
Mean	22602	8.32	7.176	48.78	24.78	6.657
3rd Qu.	33080	14.00	13.000	72.00	48.00	11.000
Max.	65233	16.00	16.000	96.00	72.00	16.000

Exploration du jeu de données



Données hétérogènes (concentration, échantillon par espèce) composées d'espèces rares et temps d'observation variés,

Modélisation

• Modèle toxico-dynamique :

Modélisation de la suivie des espèces aquatique soumise a la salinité de l'eau

Modèle de survie

Soit :

$$S(t) = \exp \left[-M_0 t - K_s \left((C_w - NEC)(t - t_{NEC}) + \frac{C_w}{K_r} \left(e^{-K_r t} - e^{-K_r t_{NEC}} \right) \right) \right]$$

En supposant que $K_r \rightarrow +\infty$, alors $t_{NEC} = 0$, ce qui simplifie la formule qui devient :

$$S(t) = \exp \left[- \left(M_0 + K_s(C_w - NEC) \right) t_k \right]$$

Ainsi, $S_{i,j,k}$, qui est la probabilité de survie d'une espèce j exposée à la concentration i à un temps donné, sachant qu'elle a survécu au temps précédent, est égale à :

$$\frac{S(t_k)}{S(t_{k-1})} = \exp \left[- \left(M_0 + K_s(C_w - NEC) \right) (t_k - t_{k-1}) \right]$$

Définitions des paramètres du modèle

$N_{i,j,k}$: le nombre d'individus de l'espèce j survivants à la concentration i au temps t_k (N).

$N_{i,j,k-1}$: le nombre d'individus de l'espèce j survivant à la concentration Cw_i au temps t_{k-1} (N_p).

K_r : taux contrôlant le délai d'exposition et l'effet

Cw_i : la concentration i de salinité (Cw)

n_{obs} : le nombre d'observations

K_s : taux de mortalité due à la salinité

M_0 : taux de mortalité naturelle

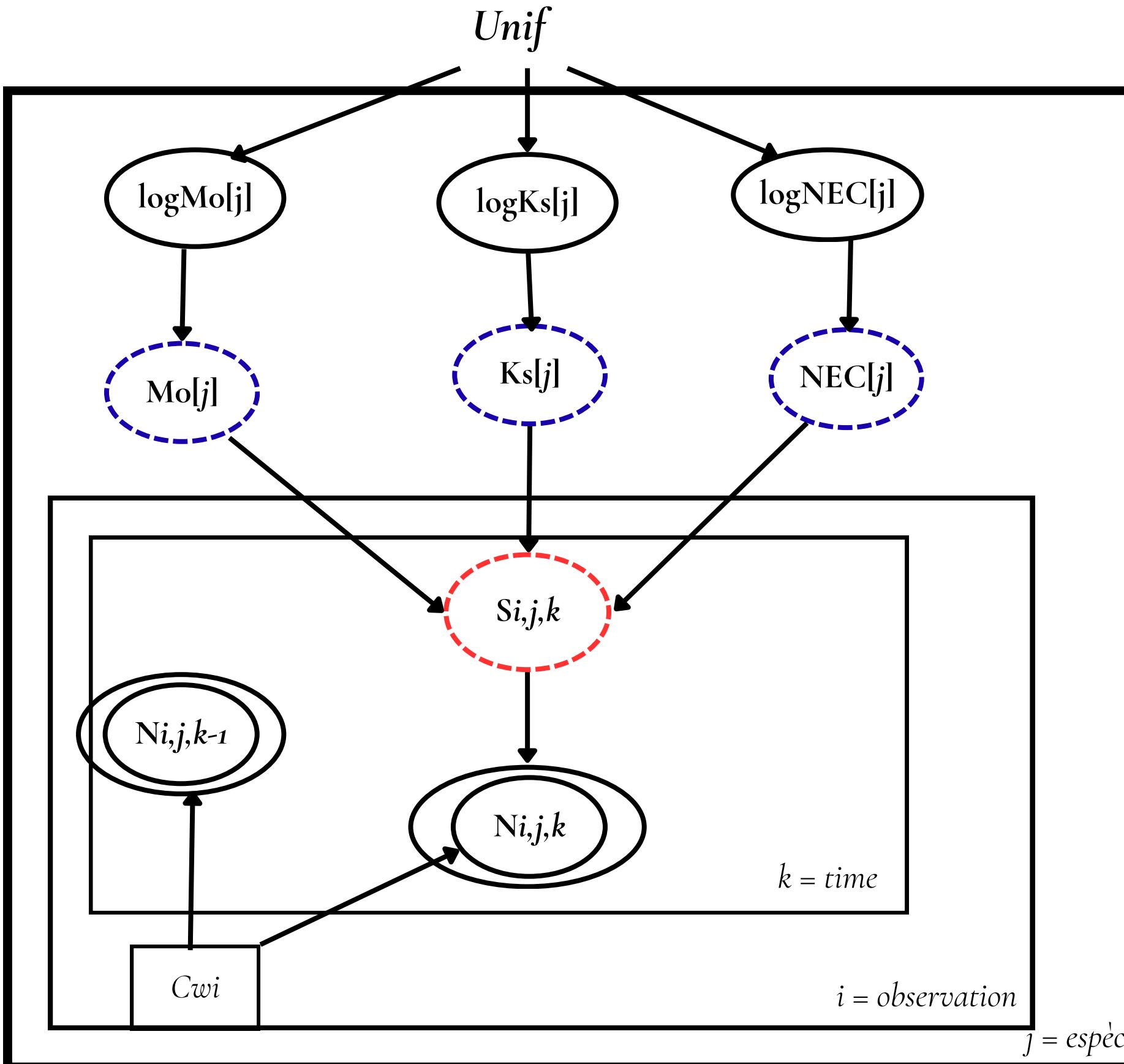
t_{NEC} : temps d'effet de la concentration

NEC : concentration non effet

$S_{i,j,k}$: la probabilité de survie d'une espèce j exposée à la concentration Cw_i au temps t_k , sachant qu'elle a survécu au temps t_{k-1} (S)

Modèles

- Modèle toxico-dynamique non hiérarchique



```

model_nh <- "
model {
  for (i in 1:n_obs) {
    S_temp[i] <- ifelse(
      Cw[i] < NEC[sp_id[i]],
      exp(-M0[sp_id[i]] * delta_t[i]),
      exp(-M0[sp_id[i]] * delta_t[i] - Ks[sp_id[i]] * (log(Cw[i]) - log(NEC[sp_id[i]])) * delta_t[i])
    )
    S[i] <- max(0.0001, min(0.9999, S_temp[i])) # pour forcer S[i] de rester entre [0,1]
    N[i] ~ dbin(S[i], Np[i])
  }

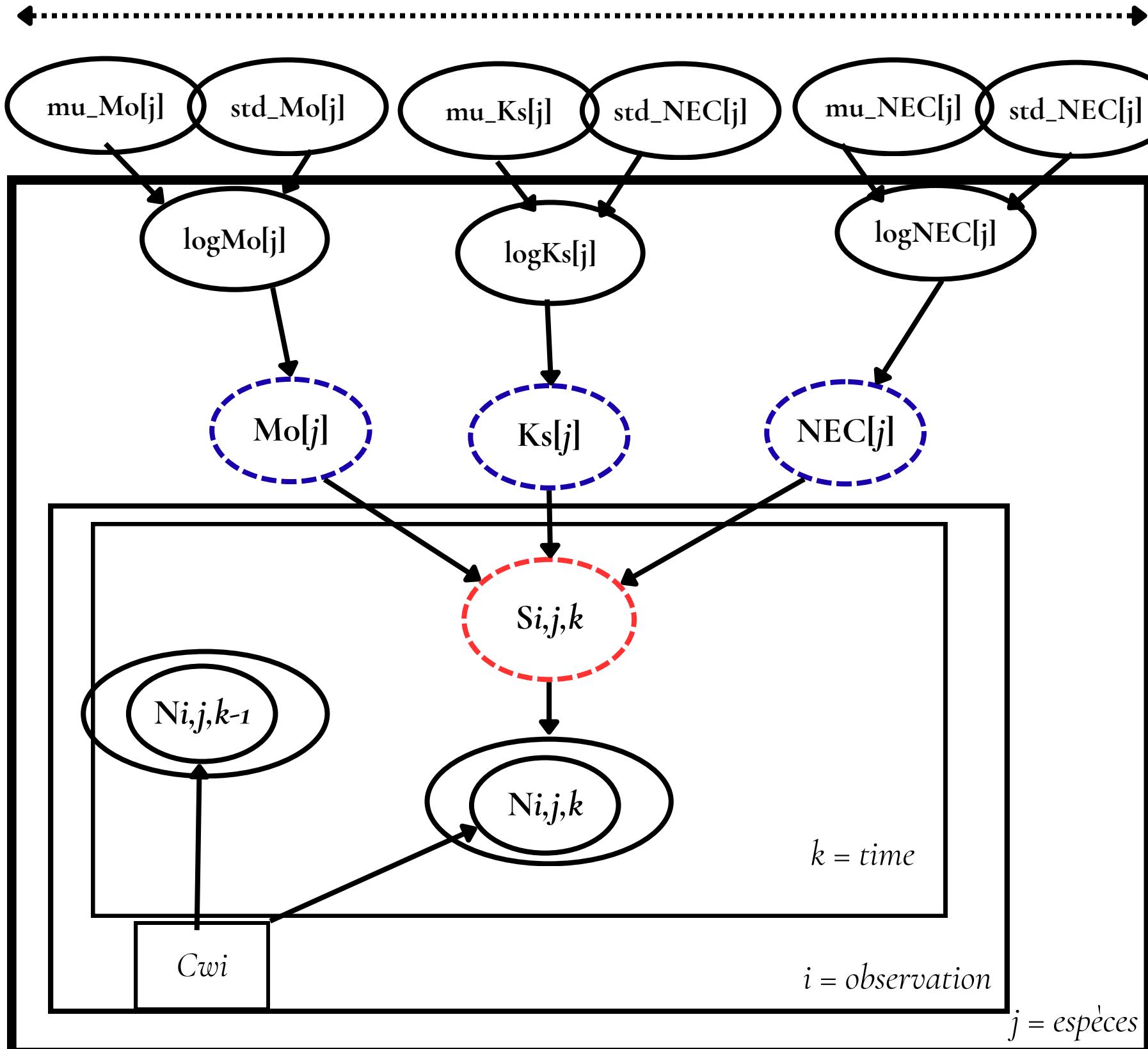
  for (j in 1:n_sp) {
    # Paramètres indépendants (non hiérarchique)
    logit_M0[j] ~ dunif(-8, 1)
    log10_Ks[j] ~ dunif(-7, 2)
    log10_NEC[j] ~ dunif(-1, 5)

    M0[j] <- 1 / (1 + exp(-logit_M0[j]))
    Ks[j] <- 10^log10_Ks[j]
    NEC[j] <- 10^log10_NEC[j]
  }
}"

```

Modèles

Unif



- Modèle toxico-dynamique hiérarchique

```

model_h <- "model {
  for (i in 1:n_obs) {
    S1[i] <- ifelse(
      Cw[i] < NEC[sp_id[i]],
      exp(-M0[sp_id[i]] * delta_t[i]), # mortalité naturelle dépendant du temps
      exp(-M0[sp_id[i]] * delta_t[i] - Ks[sp_id[i]] * (log(Cw[i]) - log(NEC[sp_id[i]])) * delta_t[i])
    )
    S[i] <- max(0.0001, min(0.9999, S1[i])) # pour forcer S[i] de rester entre [0,1]
    N[i] ~ dbin(S[i], Np[i])
  }

  for (j in 1:n_sp) {
    log10_Ks[j] ~ dnorm(mu_Ks, tau_Ks)
    log10_NEC[j] ~ dnorm(mu_nec, tau_nec)
    logit_M0[j] ~ dnorm(mu_M0, tau_M0)
    M0[j] <- 1 / (1 + exp(-logit_M0[j]))
    Ks[j] <- 10^log10_Ks[j]
    NEC[j] <- 10^log10_NEC[j]
  }

  mu_M0 ~ dunif(-8, 1) # 5
  mu_Ks ~ dunif(-7, 2)
  mu_nec ~ dunif(-1, 5) # 3

  sigma_M0 ~ dunif(0, 10)
  sigma_Ks ~ dunif(0, 10)
  sigma_nec ~ dunif(0, 10)

  tau_M0 <- 1 / (sigma_M0 * sigma_M0)
  tau_Ks <- 1 / (sigma_Ks * sigma_Ks)
  tau_nec <- 1 / (sigma_nec * sigma_nec)
  }"

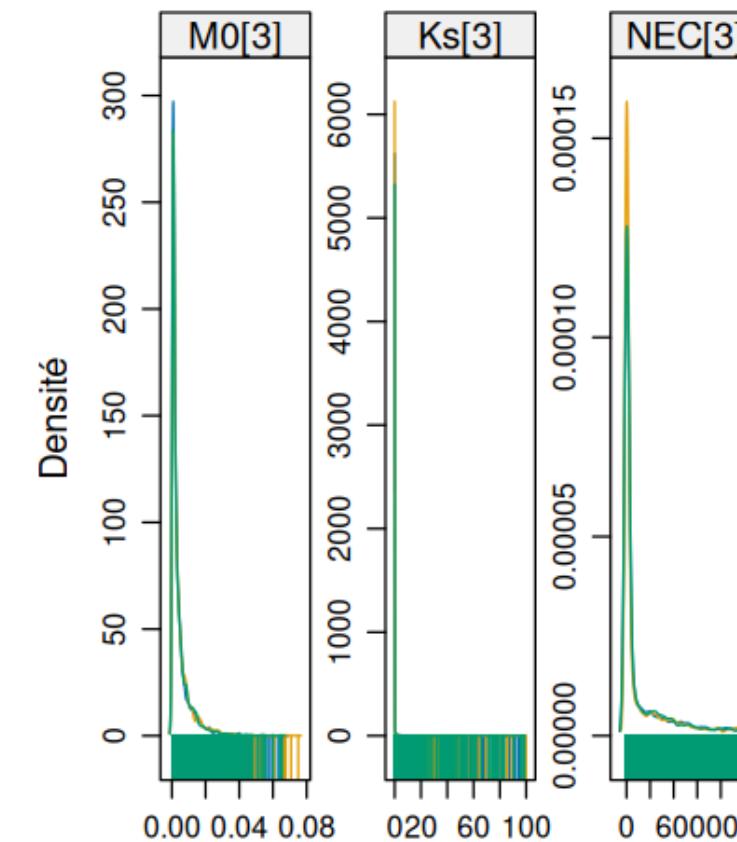
```

Resultats

Diagnostic : Distribution a posteriori des paramètres

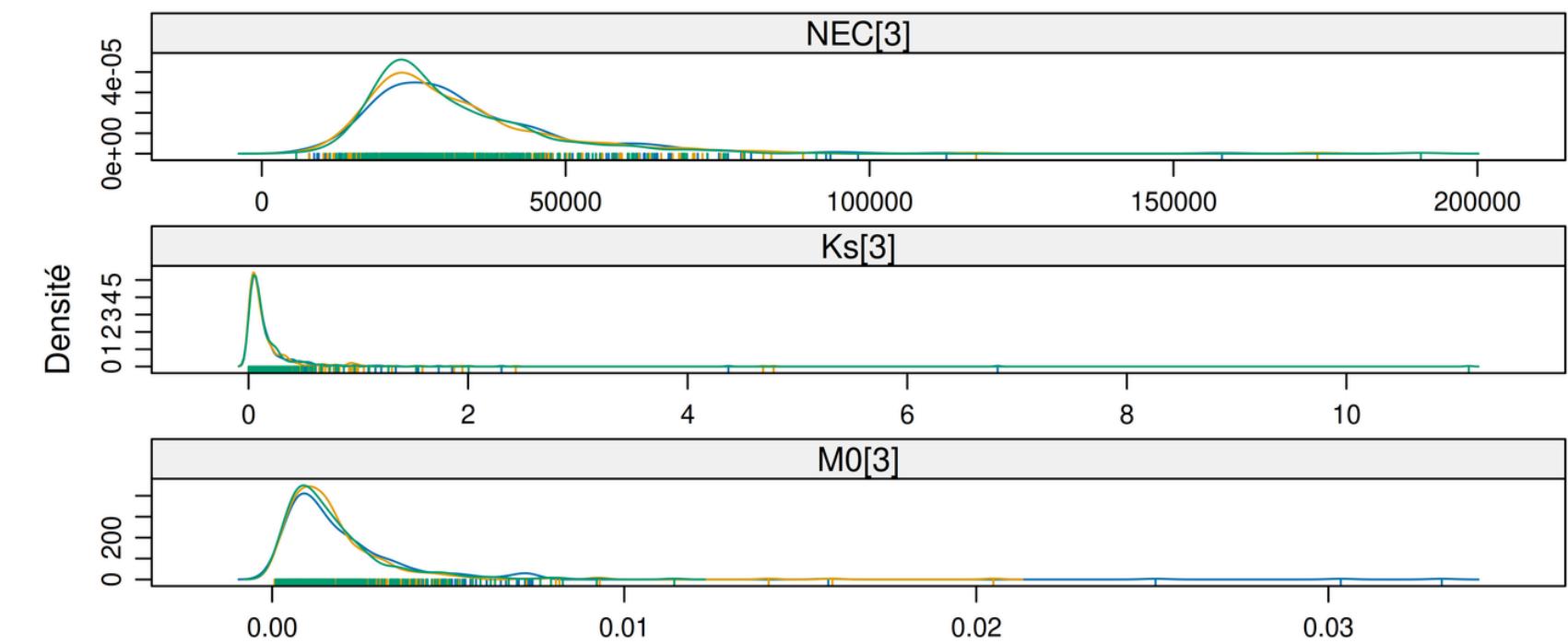
Modèle non TDH

Densités postérieures pour les premiers éléments



Modèle TDH

Densités postérieures de l'espèce n°3

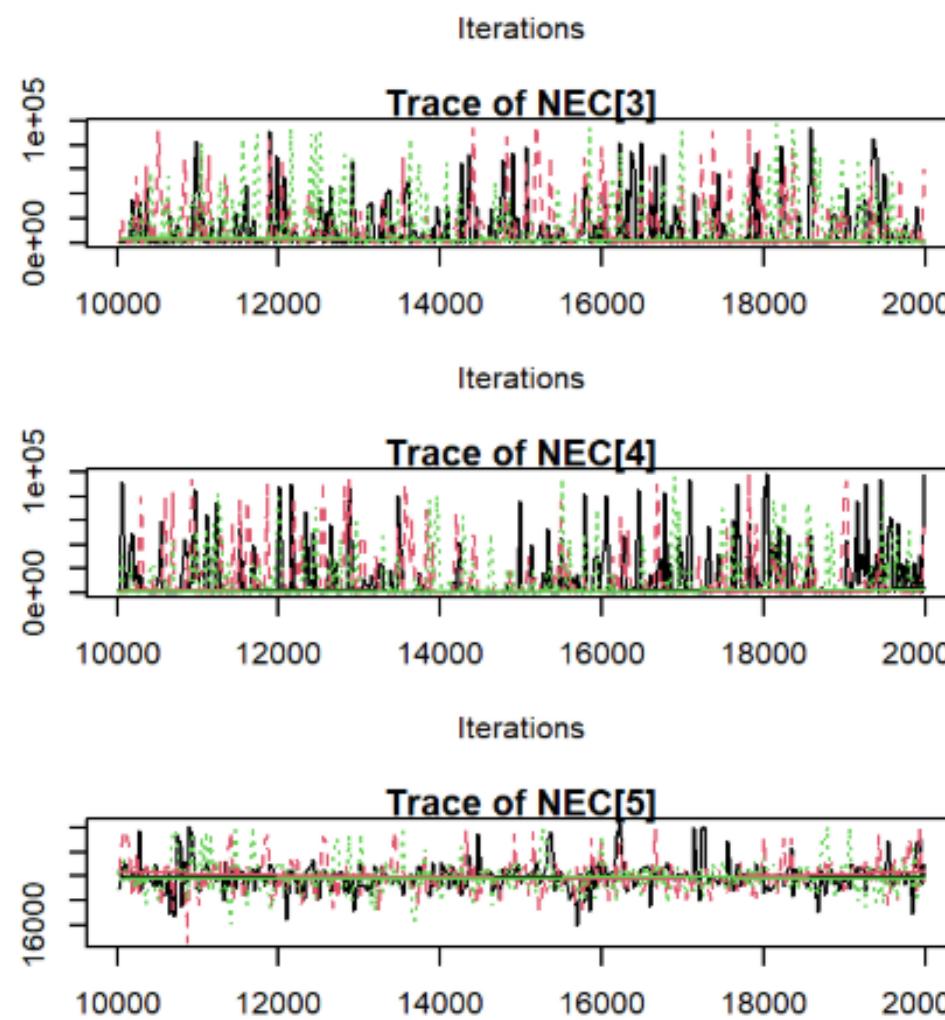


Le modèle TDH exploite la structure interspécifique pour mieux estimer les paramètres de chaque espèces .

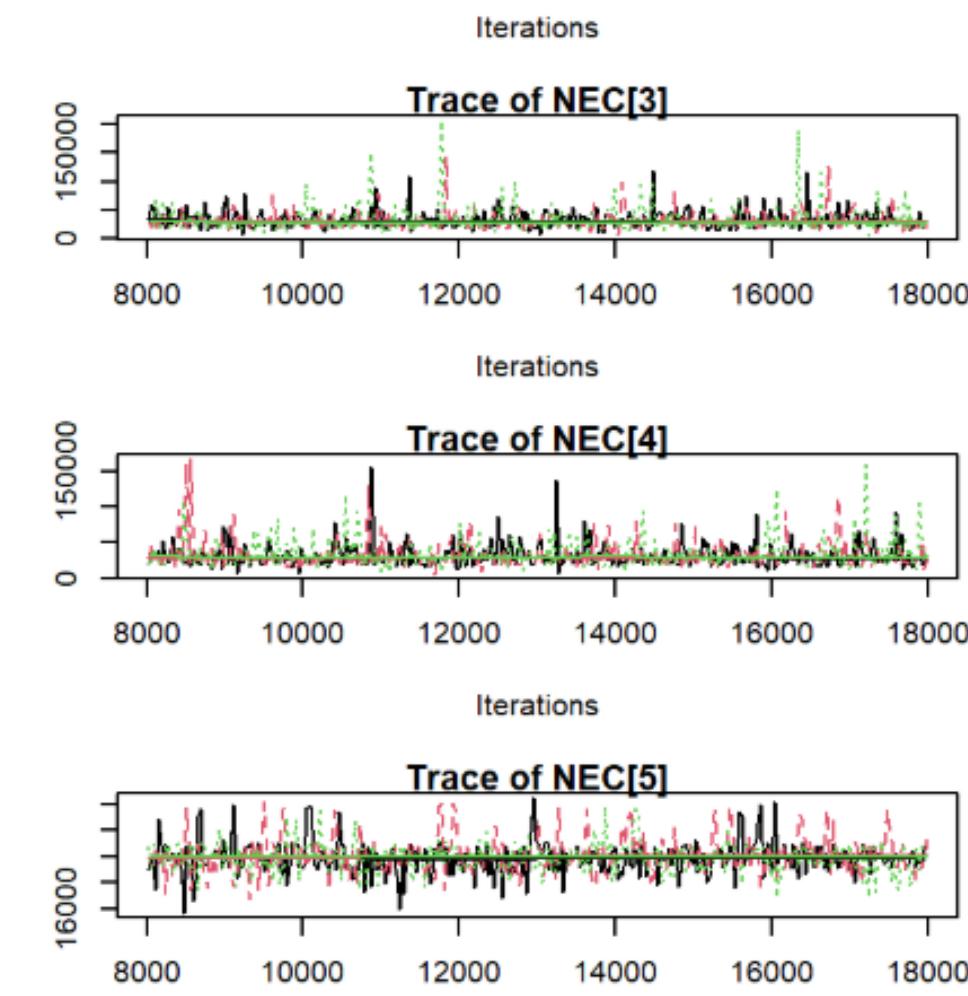
Resultats

Diagnostic : Distribution a posteriori des paramètres

Modèle TD non H



Modèle TD H



Le traceplot de gauche (modèle hiérarchique) montre des chaînes MCMC bien mélangées et stables autour d'une moyenne commune, indiquant une bonne convergence. Bonne capacité du modèle hiérarchique à stabiliser les estimations grâce au partage d'information entre espèces.

Results

DIC (Deviance Information criterion) = D + pD

Spiegelhalter et al. (2002)

Modèle TD non H

```
| ****|  
Mean deviance: 1697  
penalty 50.12  
Penalized deviance: 1747
```

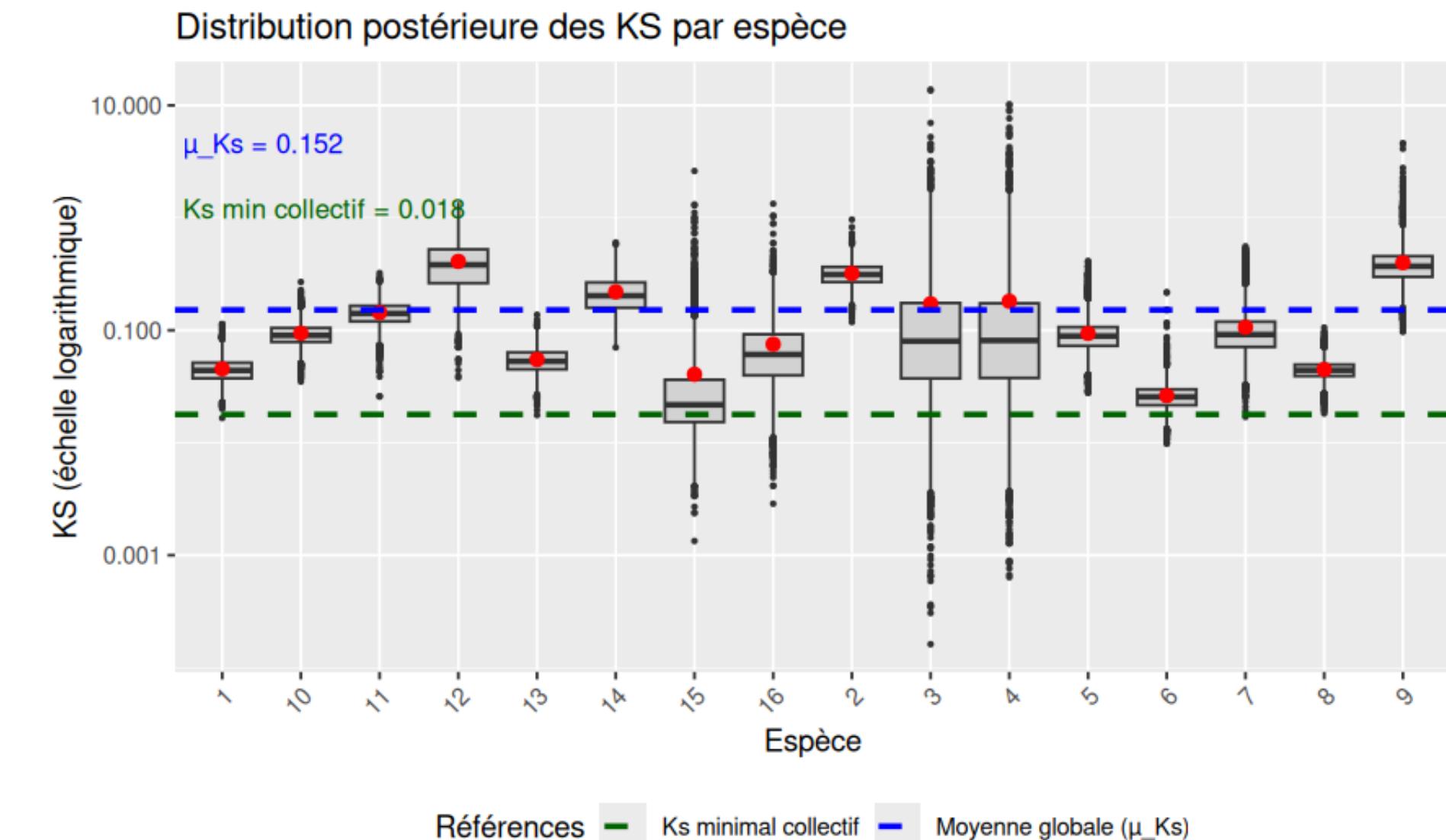
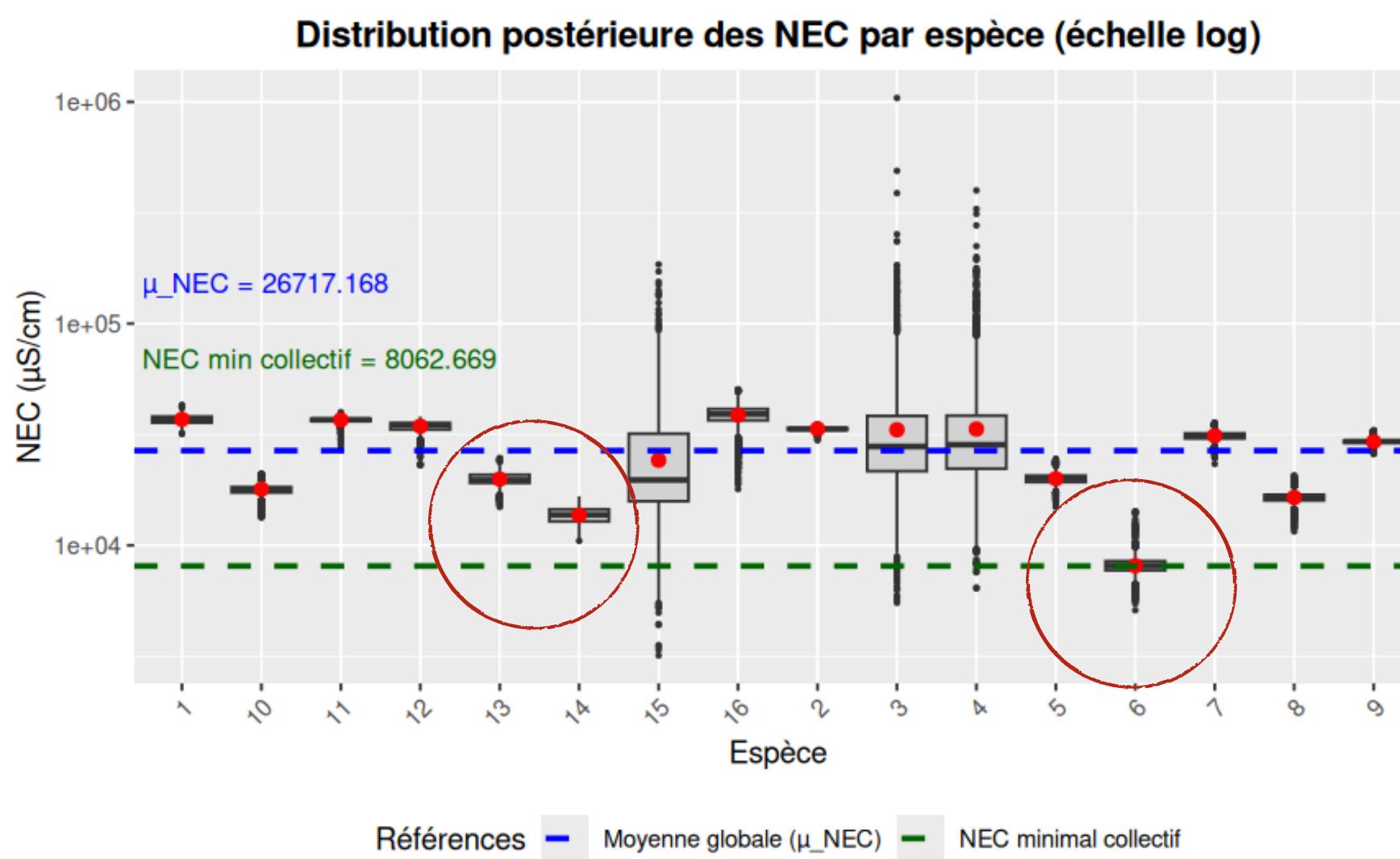
Modèle TD H

```
| ****|  
Mean deviance: 1697  
penalty 47.88  
Penalized deviance: 1745
```

delta_DIC = 2

Exploration des résultats TDH

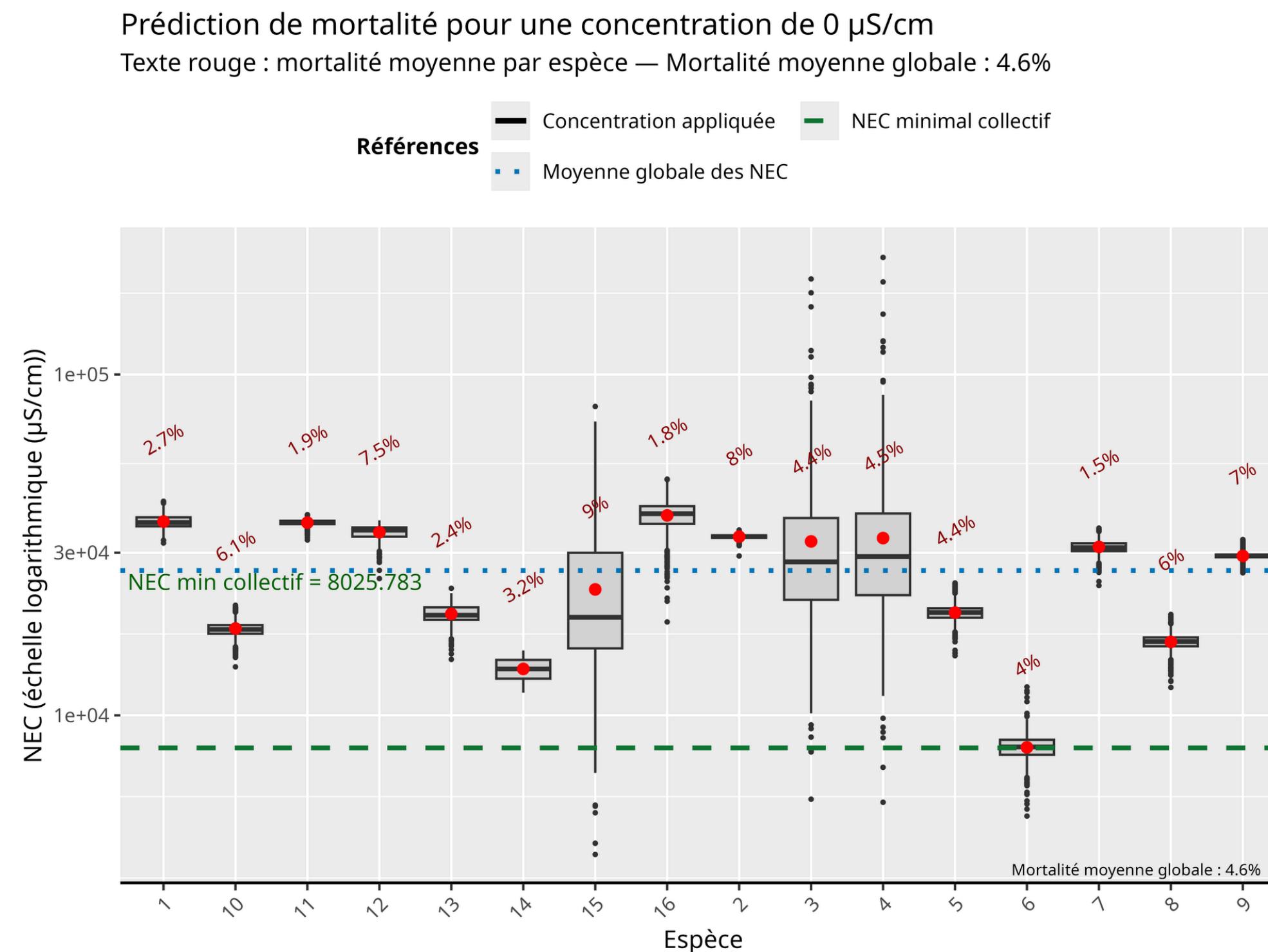
Quelles sont les espèces les plus sensibles ?



Les espèces 6, 14, 13 sont les plus sensibles

Exploration des résultats TDH

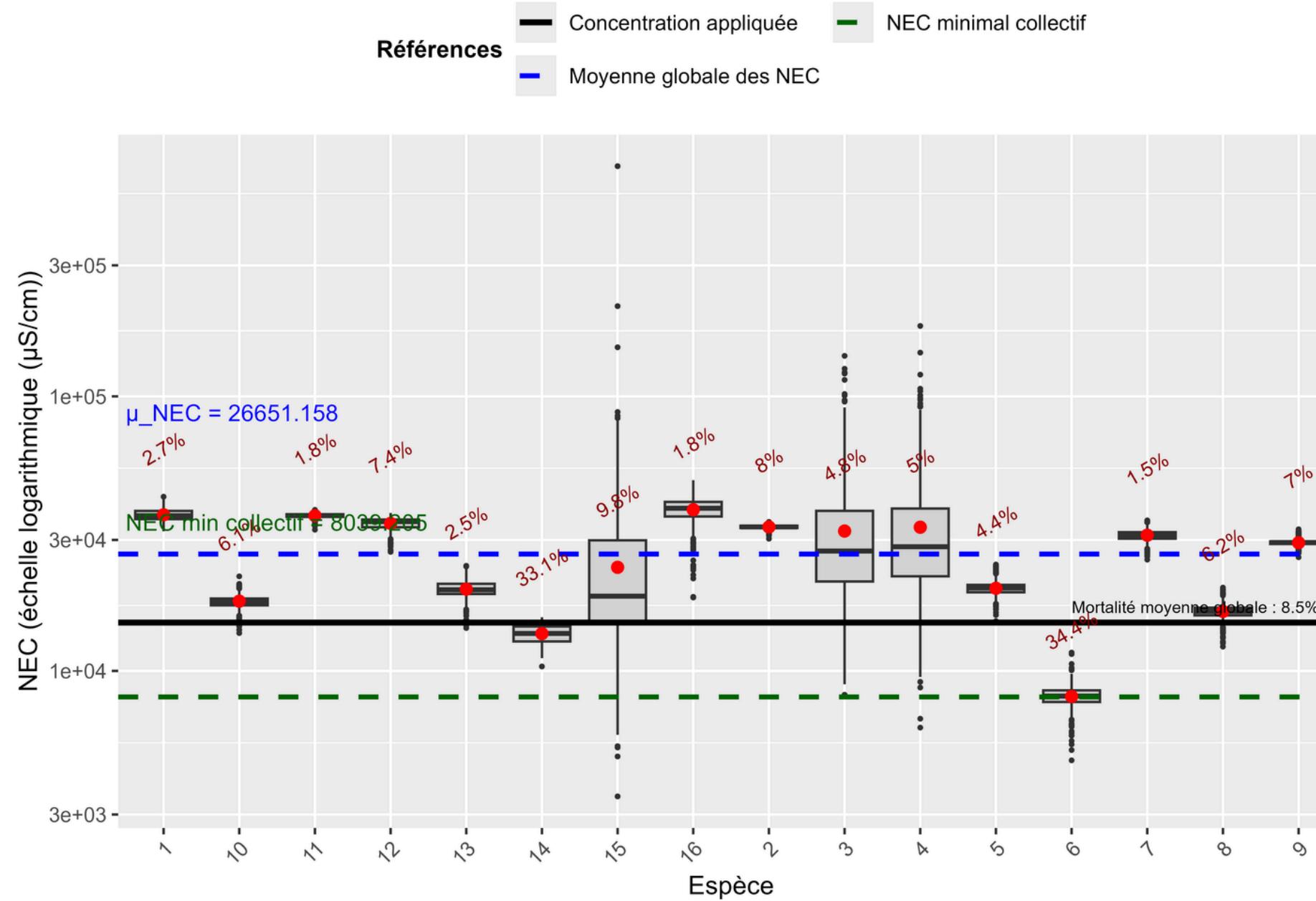
A quelle concentration, le taux de mortalité des espèces augmente de 2 fois ?



Exploration des résultats TDH

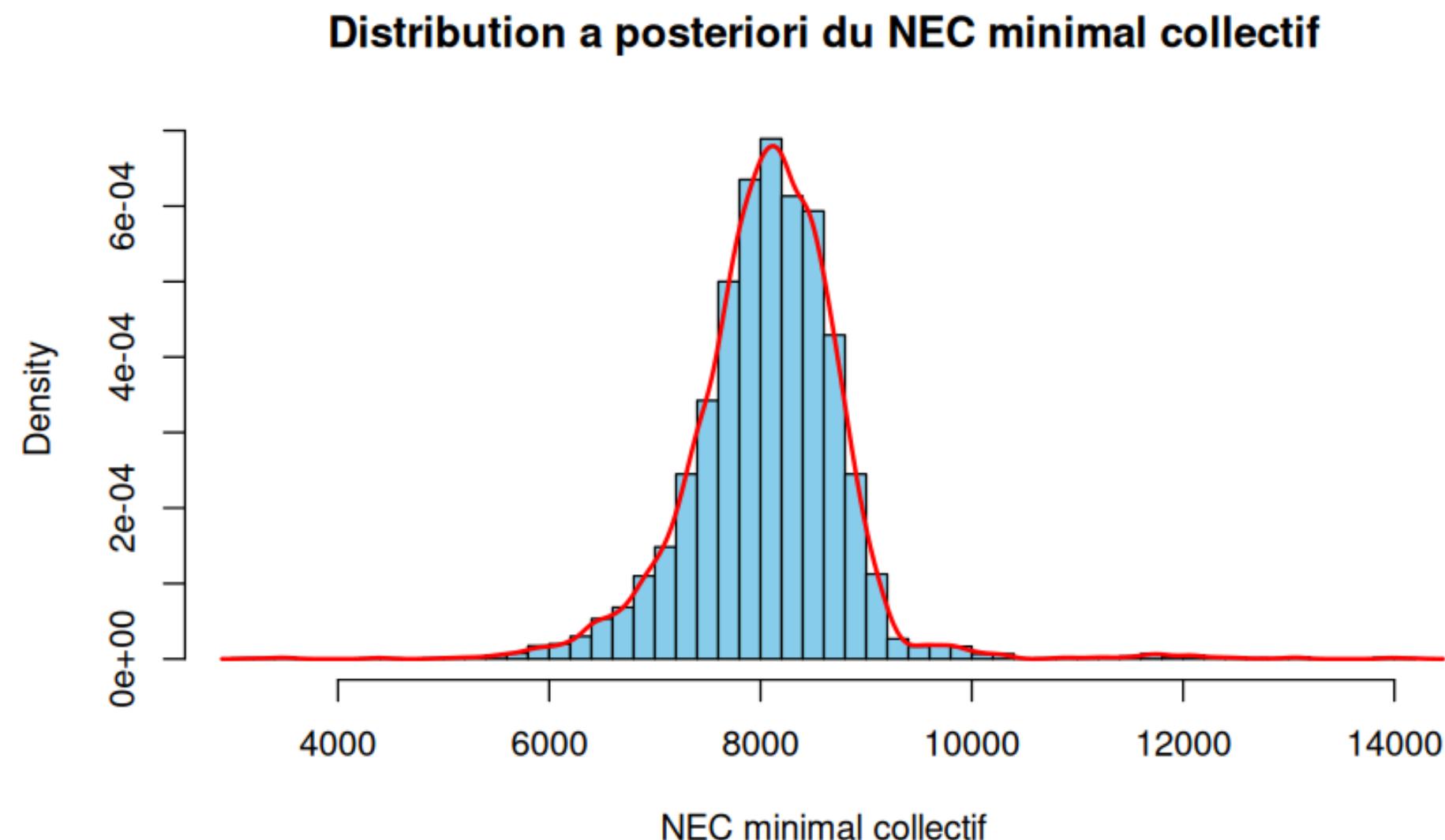
A quelle concentration, le taux de mortalité des espèces augmente de 2 fois ?

Prédiction de mortalité pour une concentration de 15000 µS/cm
Texte rouge : mortalité moyenne par espèce — Mortalité moyenne globale : 8.5%



Exploration des résultats TDH

A quelle concentration, on protège 95% des espèces (HC5) ?



```
mean_HC5  
CI_HC5  
[1] 10502.2  
2.5% 97.5%  
6062.728 14897.908
```

Conclusion

- Le modèle toxicodynamique hiérarchique (TDH) permet une meilleure convergence et une estimation des paramètres.
- Il corrige les limites des modèles classiques, notamment en prenant en compte la dépendance au temps, la variabilité entre espèces et la propagation de l'incertitude issue des données expérimentales.



Merci pour votre attention

Avez vous des questions ?



AGBOMAKOUNZO M. Auré
FOUSSENI SALAMI CISSE TIDJANI