

# Estimation des paramètres d'un modèle mécaniste d'une communauté d'espèces aquatiques à partir d'expériences en microcosmes

Dominique Lamonica

Bernard Clément, Sandrine Charles, Christelle Lopes

Séminaire Applibugs - 28 novembre 2014



# Evaluation du risque en écotoxicologie



thedailyplanet.blogspot.fr

- Les écosystèmes aquatiques subissent une forte pression chimique.

- L'évaluation du risque en écotoxicologie vise à qualifier et à quantifier l'impact de ces substances toxiques sur les écosystèmes. Pour cela, la concentration en toxique est reliée aux effets sur les espèces présentes.



# Différents outils pour l'évaluation du risque



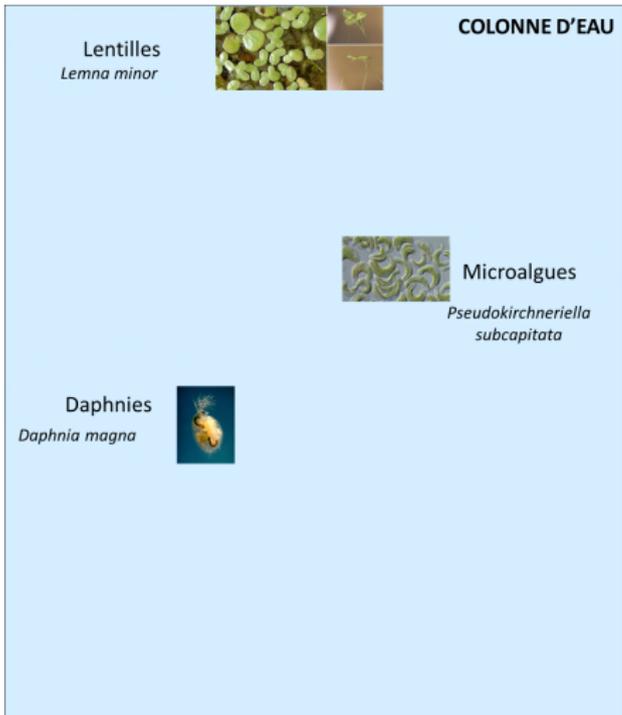
- Essais monospécifiques : une seule espèce en conditions contrôlées.
- Ecosystèmes naturels ou mésocosmes : un grand nombre de composants (espèces, milieux) et une grande variabilité des conditions.
- Microcosmes: un petit nombre d'espèces en conditions contrôlées.  
→ Les microcosmes constituent donc un bon compromis puisqu'ils réduisent la complexité tout en préservant la pertinence écologique de l'essai.

# Le microcosme étudié : basé sur Clément et al. (1998)



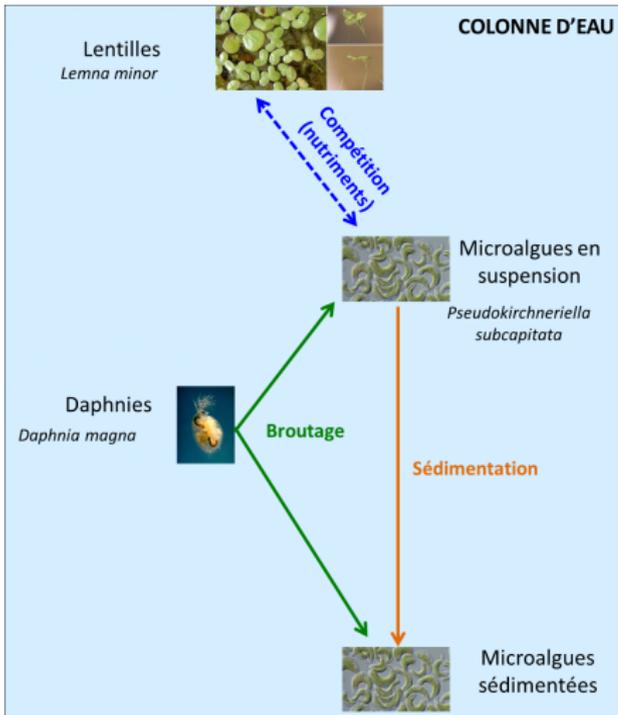
- Un système aquatique de deux phases en conditions contrôlées au laboratoire

# Le microcosme étudié : basé sur Clément et al. (1998)



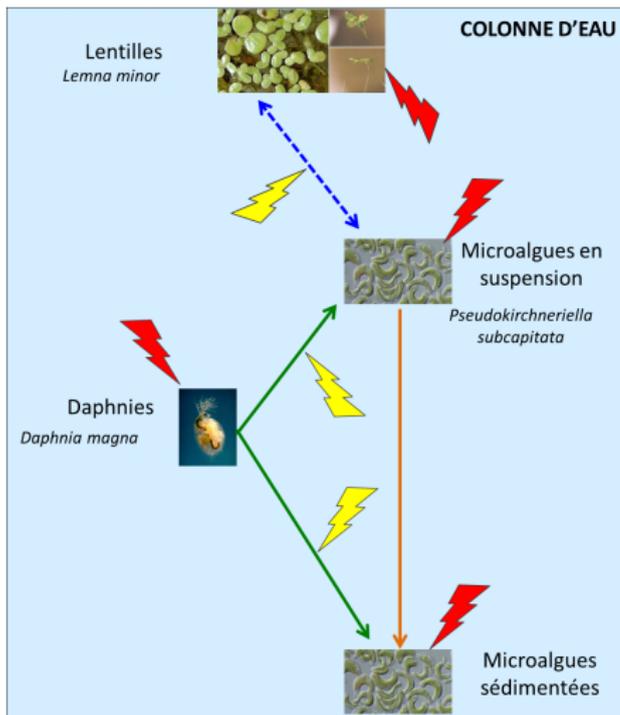
- Un système aquatique de deux phases en conditions contrôlées au laboratoire
- 3 espèces connues

# Le microcosme étudié : basé sur Clément et al. (1998)

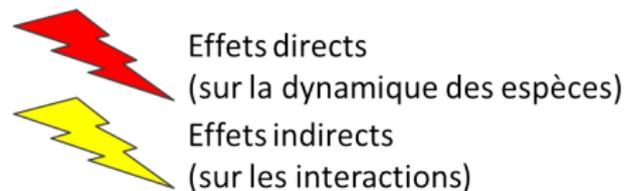


- Un système aquatique de deux phases en conditions contrôlées au laboratoire
- 3 espèces connues
- En interaction

# Le microcosme étudié : basé sur Clément et al. (1998)



- Un système aquatique de deux phases en conditions contrôlées au laboratoire
- 3 espèces connues
- En interaction
- Soumises à un facteur de stress



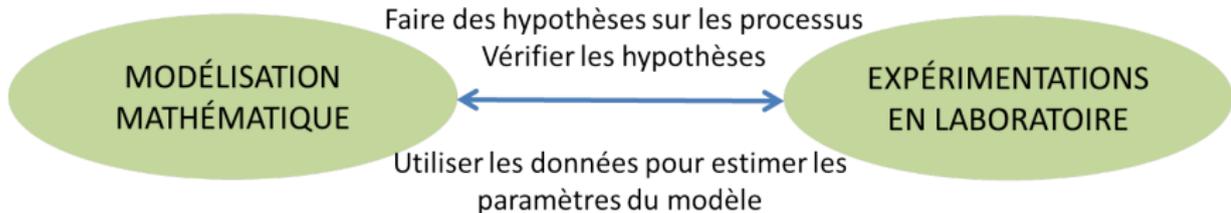
# Objectifs de la thèse

Difficultés à discriminer les effets directs et indirects du toxique  
—→ Le fonctionnement du microcosme doit être précisément décrit  
**d'abord sans toxique** puis avec toxique : la modélisation est un outil pertinent pour décrire ce fonctionnement.

## Utilisation du microcosme pour l'évaluation du risque

- Description du fonctionnement du microcosme, prise en compte des interactions entre les différentes espèces
- Quantification et interprétation des effets d'un toxique (cadmium) sur ce fonctionnement

# Utilisation de l'expérimentation et de la modélisation pour décrire le fonctionnement du microcosme



## Modélisation :

- Modèle mécaniste
- Système d'équations différentielles couplées

# Utilisation de l'expérimentation et de la modélisation pour décrire le fonctionnement du microcosme

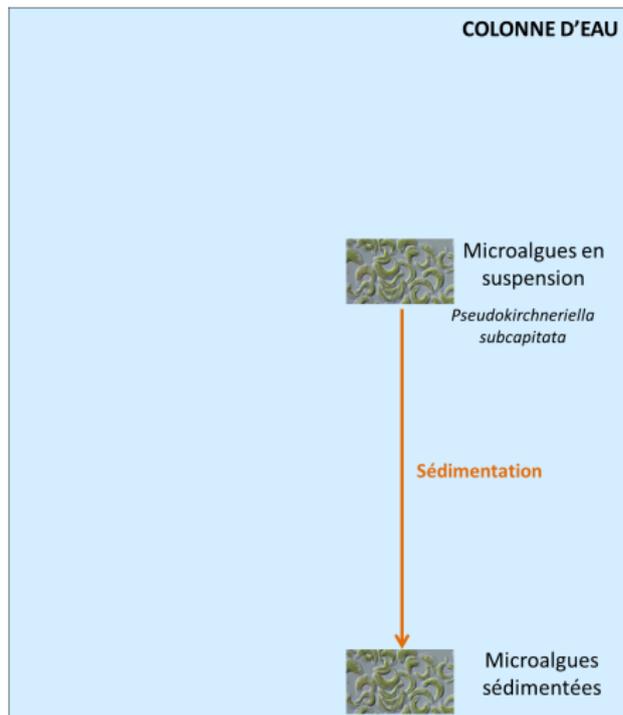
## Expérimentation :



- Béchers de deux litres
- La température, la lumière, les niveaux d'oxygène dissous et de nutriments sont contrôlés
- Suivi des microcosmes sur 21 jours

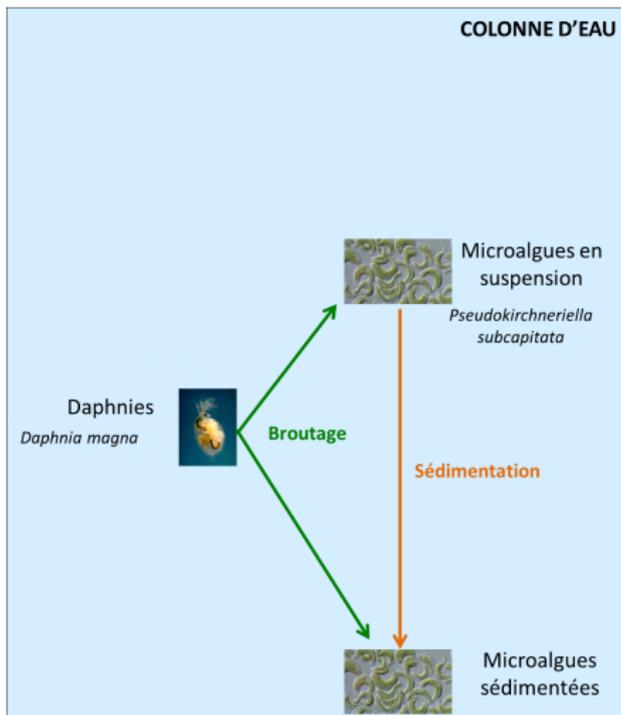


# Microcosme partiel : algues sans daphnies



- Algues dans les deux compartiments : dans la colonne d'eau et à la surface du sédiment  
→ Nombre d'algues en suspension  $N_{a_1}(t)$   
→ Nombre d'algues sédimentées  $N_{a_2}(t)$
- Processus : croissance et sédimentation

# Microcosme partiel : algues et daphnies



- Nombre de daphnies néonates initial : 10 par microcosme
- Nombre d'algues en suspension  $N_{a_1}(t)$
- Nombre d'algues sédimentées  $N_{a_2}(t)$
- Processus : croissance et sédimentation algales, broutage des algues par les daphnies, croissance et survie des daphnies.

# Modélisation de la dynamique algale en présence de daphnies

Croissance

Sédim.

Broutage

$$\begin{aligned}\frac{dN_{a_1}(t)}{dt} &= r_{a_1} N_{a_1}(t) \left(1 - \frac{N_{a_1}(t)}{K_{a_1}(t)}\right) - s N_{a_1}(t) - D_1(t) \cdot g(t) \\ \frac{dN_{a_2}(t)}{dt} &= r_{a_2} N_{a_2}(t) \left(1 - \frac{N_{a_2}(t)}{K_{a_2}(t)}\right) + s N_{a_1}(t) - D_2(t) \cdot g(t)\end{aligned}$$

- Croissance algale : croissance logistique
- Sédimentation : décroissance exponentielle des algues en suspension
- $D_1(t)$  et  $D_2(t)$  : nombre de daphnies vivantes dans chaque compartiment au temps  $t$
- $g(t)$  : fonction de taux d'ingestion, i.e. quantité d'algues ingérée par daphnie et par unité de temps

# Modélisation de la dynamique algale en présence de daphnies

## Broutage

$$\begin{aligned}\frac{dN_{a_1}(t)}{dt} &= r_{a_1} N_{a_1}(t) \left(1 - \frac{N_{a_1}(t)}{K_{a_1}(t)}\right) - s N_{a_1}(t) - D_1(t) \cdot g(t) \\ \frac{dN_{a_2}(t)}{dt} &= r_{a_2} N_{a_2}(t) \left(1 - \frac{N_{a_2}(t)}{K_{a_2}(t)}\right) + s N_{a_1}(t) - D_2(t) \cdot g(t)\end{aligned}$$

- Croissance algale : croissance logistique
- Sédimentation : décroissance exponentielle des algues en suspension
- $D_1(t)$  et  $D_2(t)$  : nombre de daphnies vivantes dans chaque compartiment au temps  $t$
- $g(t)$  : **fonction de taux d'ingestion, i.e. quantité d'algues ingérée par daphnie et par unité de temps**

# Modélisation du nombre de daphnies dans le microcosme

## Broutage

$$\begin{aligned}\frac{dN_{a_1}(t)}{dt} &= r_{a_1} N_{a_1}(t) \left(1 - \frac{N_{a_1}(t)}{K_{a_1}(t)}\right) - s N_{a_1}(t) - D_1(t) \cdot g(t) \\ \frac{dN_{a_2}(t)}{dt} &= r_{a_2} N_{a_2}(t) \left(1 - \frac{N_{a_2}(t)}{K_{a_2}(t)}\right) + s N_{a_1}(t) - D_2(t) \cdot g(t)\end{aligned}$$

- $D_1(t)$  et  $D_2(t)$  : nombre de daphnies vivantes dans chaque compartiment au temps  $t$
- $D_s(t)$  : nombre de daphnies vivantes dans le microcosme au temps  $t$ , modélisé par un modèle de survie binomial conditionnel
- $D_2(t) = D_s(t) - D_1(t)$



# Parties stochastiques du modèle

- Nombres d'algues par béccher dans la colonne d'eau et sur le sédiment :

$$\log Y_{a_1}(t_i) \sim \mathcal{N}(\log N_{a_1}(t_i), \sigma_{N_{a_1}})$$

$$\log Y_{a_2}(t_i) \sim \mathcal{N}(\log N_{a_2}(t_i), \sigma_{N_{a_2}})$$

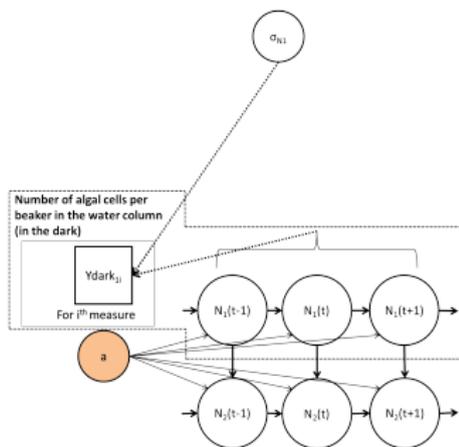
- Nombre de daphnies vivantes par béccher :

$$W(t_i) \sim \mathcal{B}\left(1 - \frac{S(t_{i-1}) - S(t_i)}{S(t_{i-1})}, W(t_{i-1})\right) \text{ (avec } S(t) \text{ la proportion de daphnies vivantes au temps } t)$$

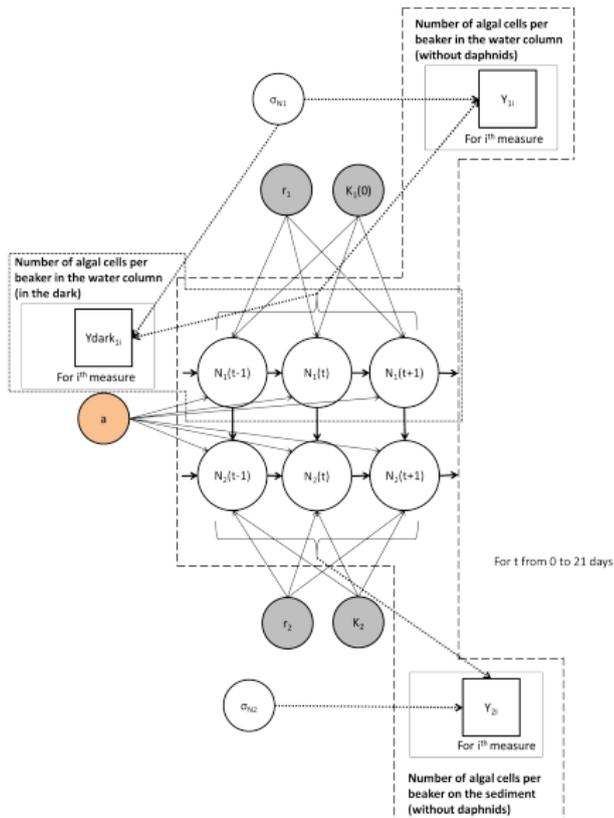
- Taille des daphnies :

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

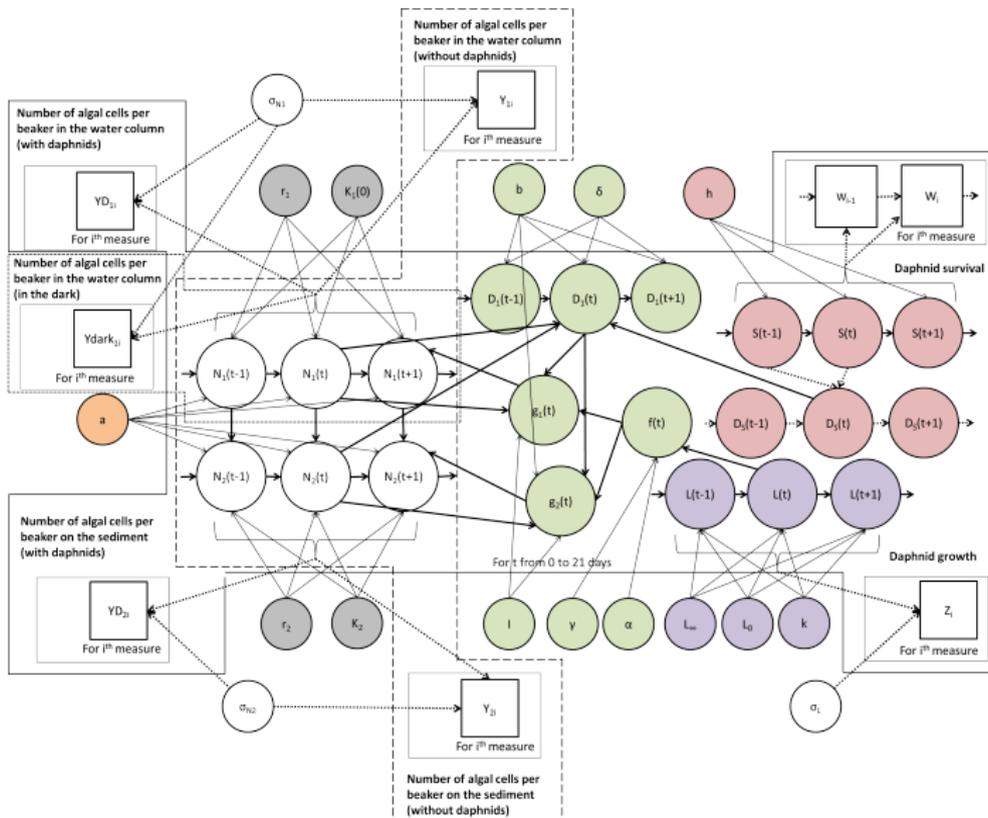
## Modèle sans daphnies, à l'obscurité

For  $t$  from 0 to 21 days

### Modèle sans daphnies et algues à l'obscurité



Modèle complet (avec et sans daphnies et algues à l'obscurité)



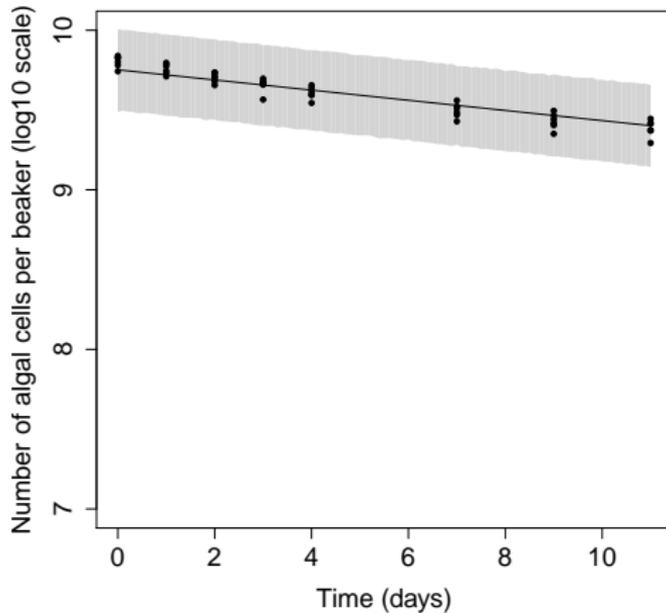
## Données et estimation des paramètres (1/2)

- **Données** : nombre d'algues par bécher dans la colonne sans et avec daphnies, nombre d'algues par bécher sur le sédiment sans et avec daphnies, nombre de daphnies par bécher, taille des daphnies suivie sur 21 jours, nombre d'algues dans la colonne d'eau sans croissance, avec sédiment.
- 17 paramètres à estimer avec toutes les données simultanément

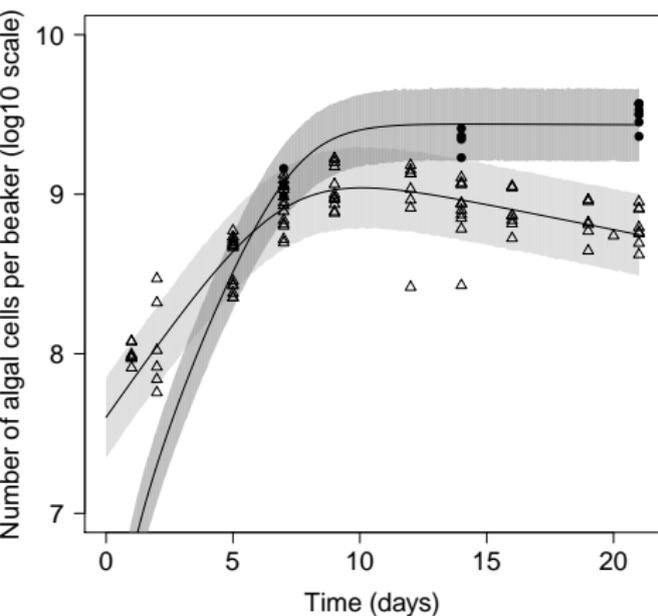
## Estimation des paramètres (2/2)

- Estimation des paramètres par inférence bayésienne, utilisation de JAGS et du package Rjags
- Package Rjags → pas d'intégration numérique, discrétisation du modèle par schéma d'Euler de pas de temps 0.1
- 3 chaînes MCMC en parallèle (packages dclone et snow de R), critère de convergence de Gelman-Rubin
- Priors plus ou moins informatifs suivant les connaissances des paramètres et des processus (basées sur la littérature et des expérimentations faites précédemment sur ce microcosme)

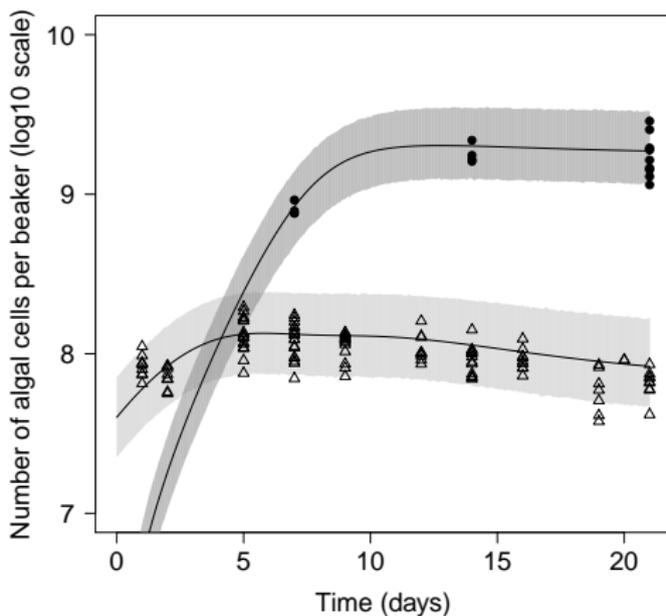
# Dynamique algale à l'obscurité



# Dynamique algale : sans daphnies



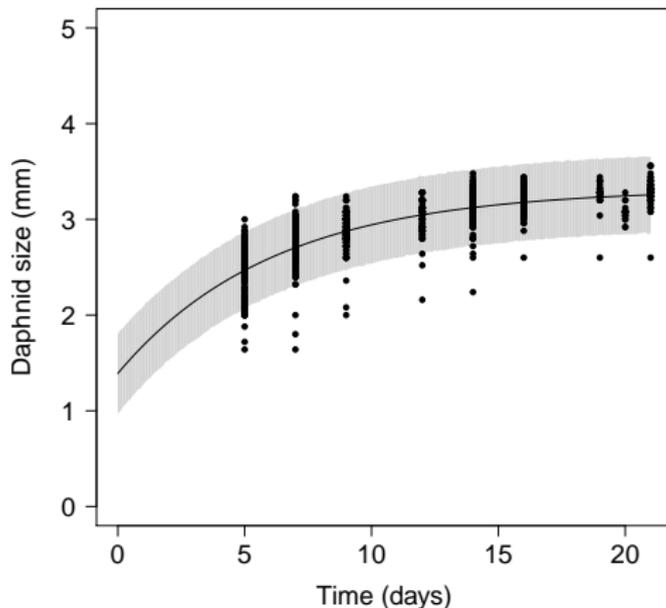
# avec daphnies



● Données sédiment      — Ajustement médian  
△ Données colonne d'eau      [ ] Bande de crédibilité à 95%

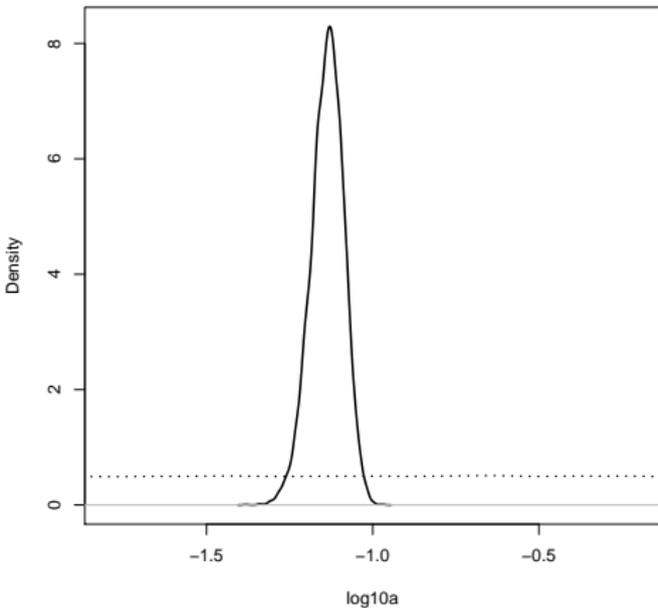


# Croissance des daphnies $L(t)$

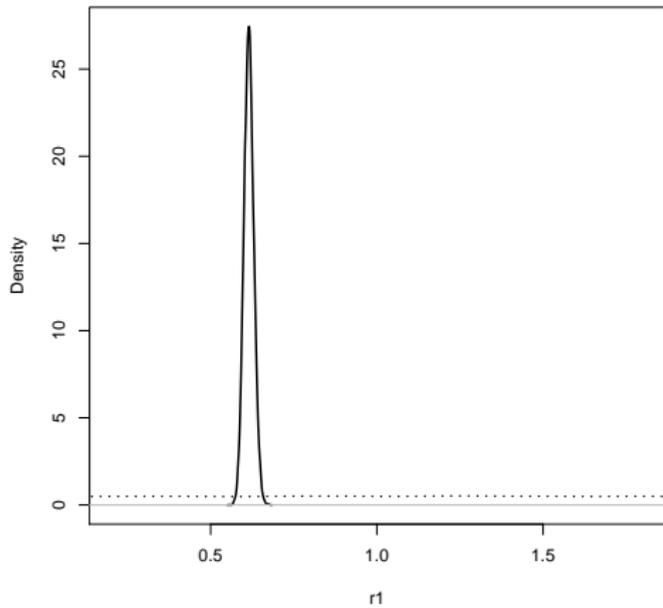


- Données
- Ajustement médian
- Bande de crédibilité à 95%

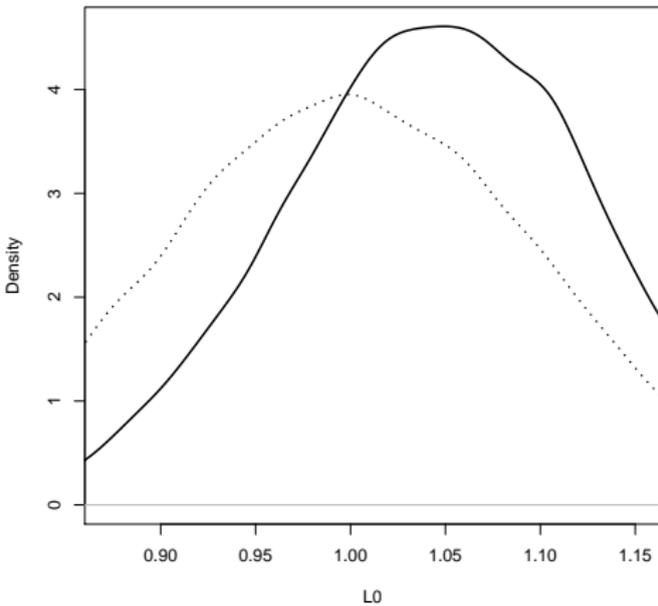
# Comparaison priors/posteriors : taux de sédimentation $\log s$



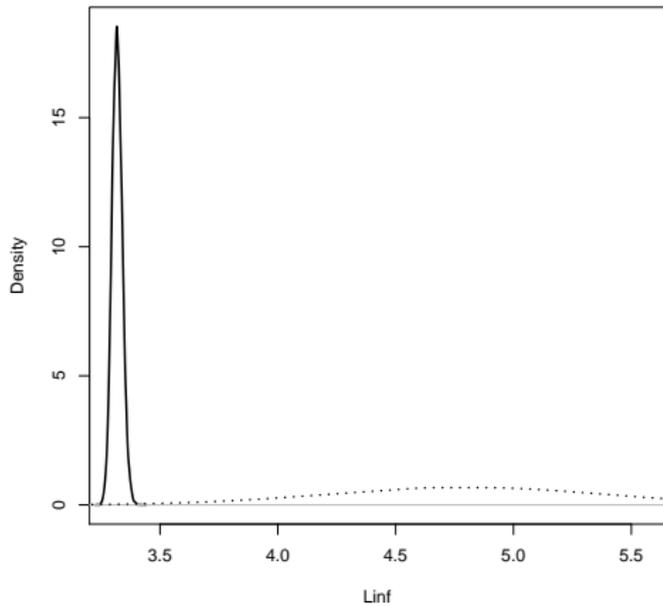
# taux de croissance algale $r_{a1}$



# Comparaison priors/posteriors : longueur à la naissance $L(0)$



# longueur maximale $L_\infty$



## Conclusion et perspectives

- Bonne description des processus avec des valeurs biologiquement réalistes des paramètres
- Problème de la discrétisation → méthode ABC ?
- Existence de corrélation entre les paramètres → test avec certains paramètres fixés
- Validation du modèle par l'estimation des paramètres avec des données partielles
- Intégration de nouvelles données
- Reproduction des daphnies

The image shows three glass beakers on a white surface, each containing a green plant stem submerged in water. The beakers are covered with clear plastic wrap, secured with rubber bands. The central beaker has a thin metal rod or probe inserted into the water. The text 'Merci de votre attention' is overlaid in the center of the image.

Merci de votre attention