



**HAL**  
open science

## MCMC ou ABC ? Bonheurs et tourments de mise en oeuvre sur un cas de risque sanitaire

Clémence C. Rigaux, Sophie S. Ancelet, Frederic F. Carlin, Christophe C. Nguyen The, Isabelle I. Albert

### ► To cite this version:

Clémence C. Rigaux, Sophie S. Ancelet, Frederic F. Carlin, Christophe C. Nguyen The, Isabelle I. Albert. MCMC ou ABC ? Bonheurs et tourments de mise en oeuvre sur un cas de risque sanitaire. Club de rencontres AppliBUGS, AgroParisTech. Labo/service de l'auteur, Paris, FRA., Jun 2011, Paris, France. 29 diapos. hal-01004430

**HAL Id: hal-01004430**

**<https://hal.science/hal-01004430v1>**

Submitted on 6 Jun 2020

**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.



Met@risk  
Methods for Food Risk Analysis



# *MCMC ou ABC ?*

*Bonheurs et tourments de mise en œuvre sur un cas de risque sanitaire*

**Clémence RIGAUX**

En collaboration avec Sophie Ancelet, Frédéric Carlin, Christophe Nguyen-Thé, Isabelle Albert



*AppliBUGS, 17 juin 2011*

# Contexte : l'analyse du risque microbiologique dans les aliments

- Des modèles prédisant le comportement de bactéries pathogènes le long d'une chaîne de transformation des aliments (jusqu'à la maladie)
- Développement de méthodes quantitatives d'évaluation du risque microbiologique (QMRA : Quantitative Microbial Risk Assessment)
  - permettant de rendre compte des diverses situations par la prise en compte des sources de *variabilité* et d'*incertitudes*
  - permettant le calcul du risque de toxi-infection

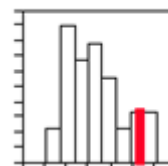
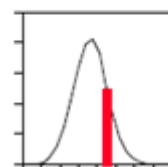
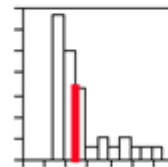


# Cas d'étude : *B.cereus* dans la purée de courgettes

- Un modèle de risque alimentaire dû au pathogène *Bacillus cereus* dans une chaîne de fabrication de purée de courgettes
  - Construit par Afchain et al., 2008
  - Tenant compte de la grande diversité génétique de *B.cereus* : 6 groupes
  - Analyse du risque par la méthode de simulation de Monte Carlo

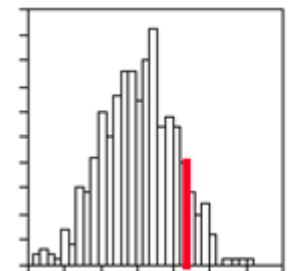


distributions  
des paramètres  $\theta$



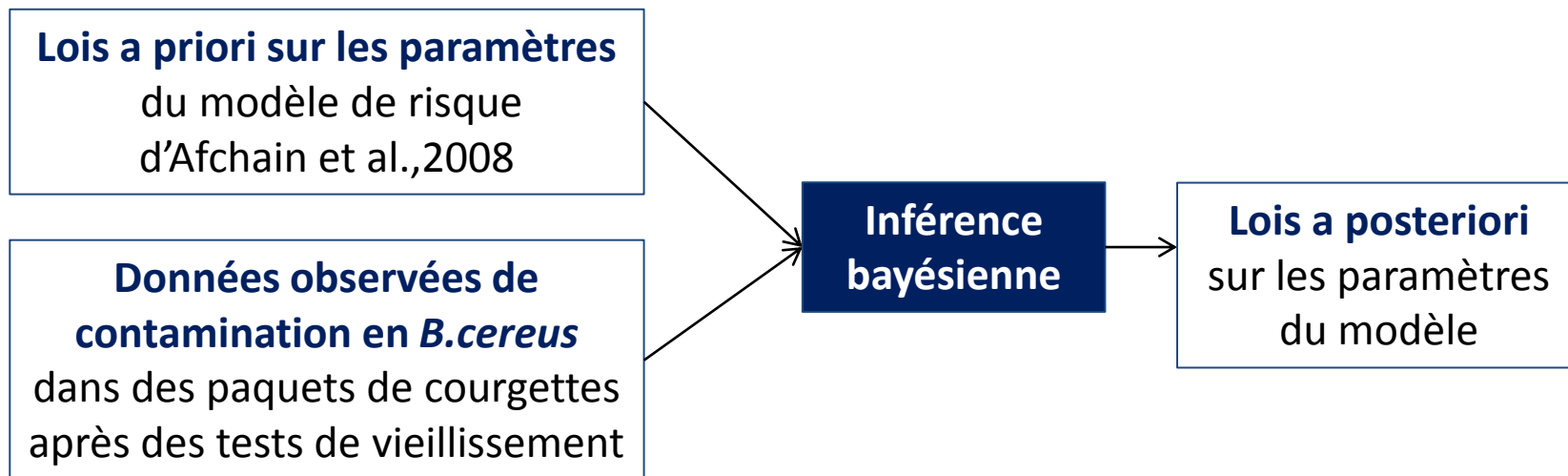
N tirages  
aléatoires pour  
chaque  
paramètre

$Y=f(\theta)$   
distribution du risque



# Mise en place d'une méthode d'inférence bayésienne

But : utiliser l'information issue de données de contamination dans les paquets de courgettes pour améliorer le modèle de Afchain et al.,2008, qui peut être vu comme un réseau bayésien :



→ remontée de l'information de long de la chaîne

# Mise en place d'une méthode d'inférence bayésienne

Le théorème de Bayes donne la **loi a posteriori**, ie la loi des paramètres  $\theta$  sachant les données  $X$  :

$$[\theta|X] = \frac{[\theta][X|\theta]}{[X]}$$

→ Ici, deux méthodes possibles de calcul :

Méthode de Monte Carlo par Chaîne de Markov : MCMC  
Chaînes de Markov convergeant vers la loi a posteriori

Méthode de calcul bayésien approché : ABC  
Méthode approchée n'utilisant pas la vraisemblance des observations, utilisant la simulation des données



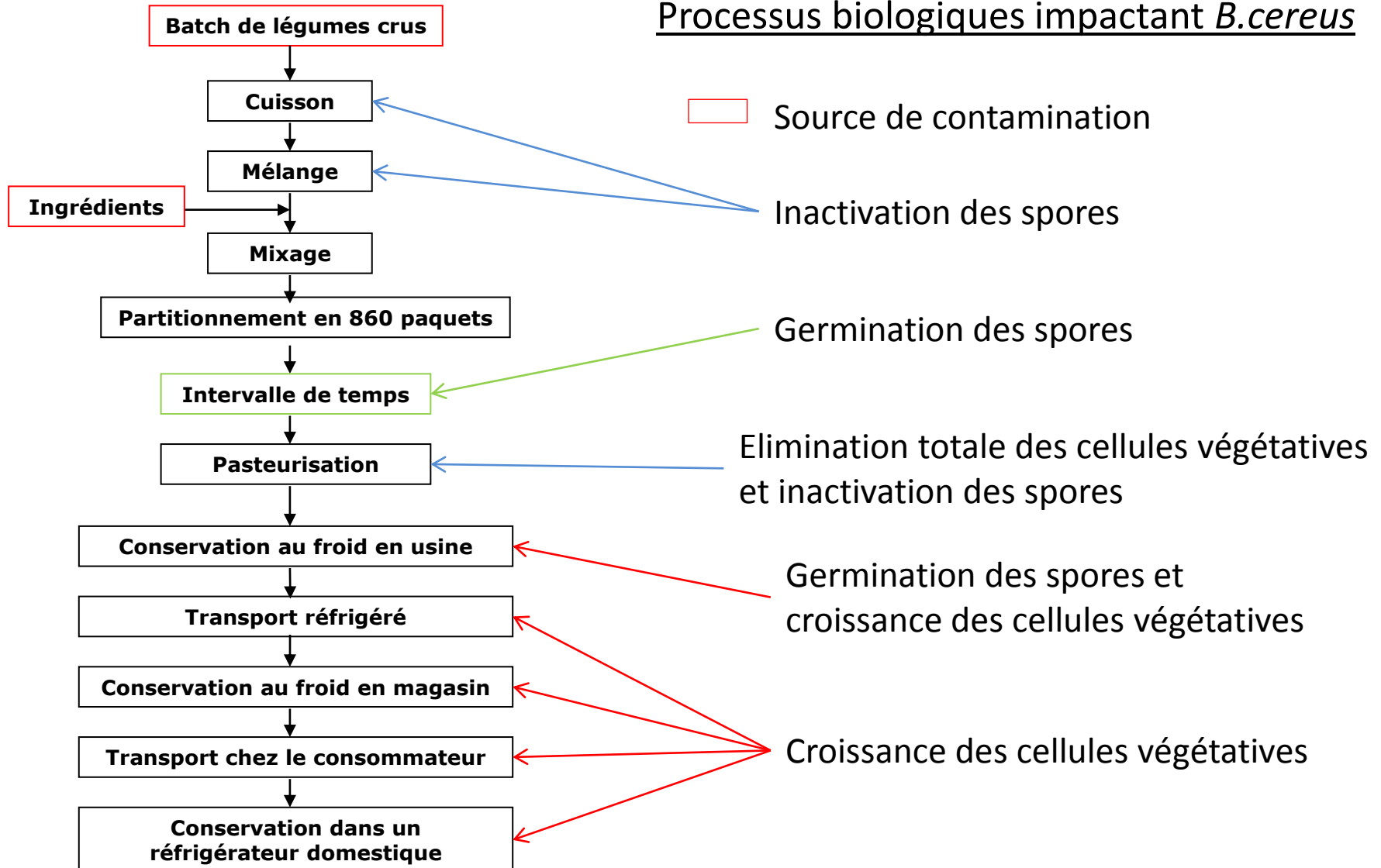
# Plan

- ✓ Introduction
- 1. Présentation du modèle et des données
- 2. Essai d'inférence bayésienne par méthode ABC
- 3. Mise en place de l'inférence bayésienne par MCMC



# 1. Présentation du modèle et des données

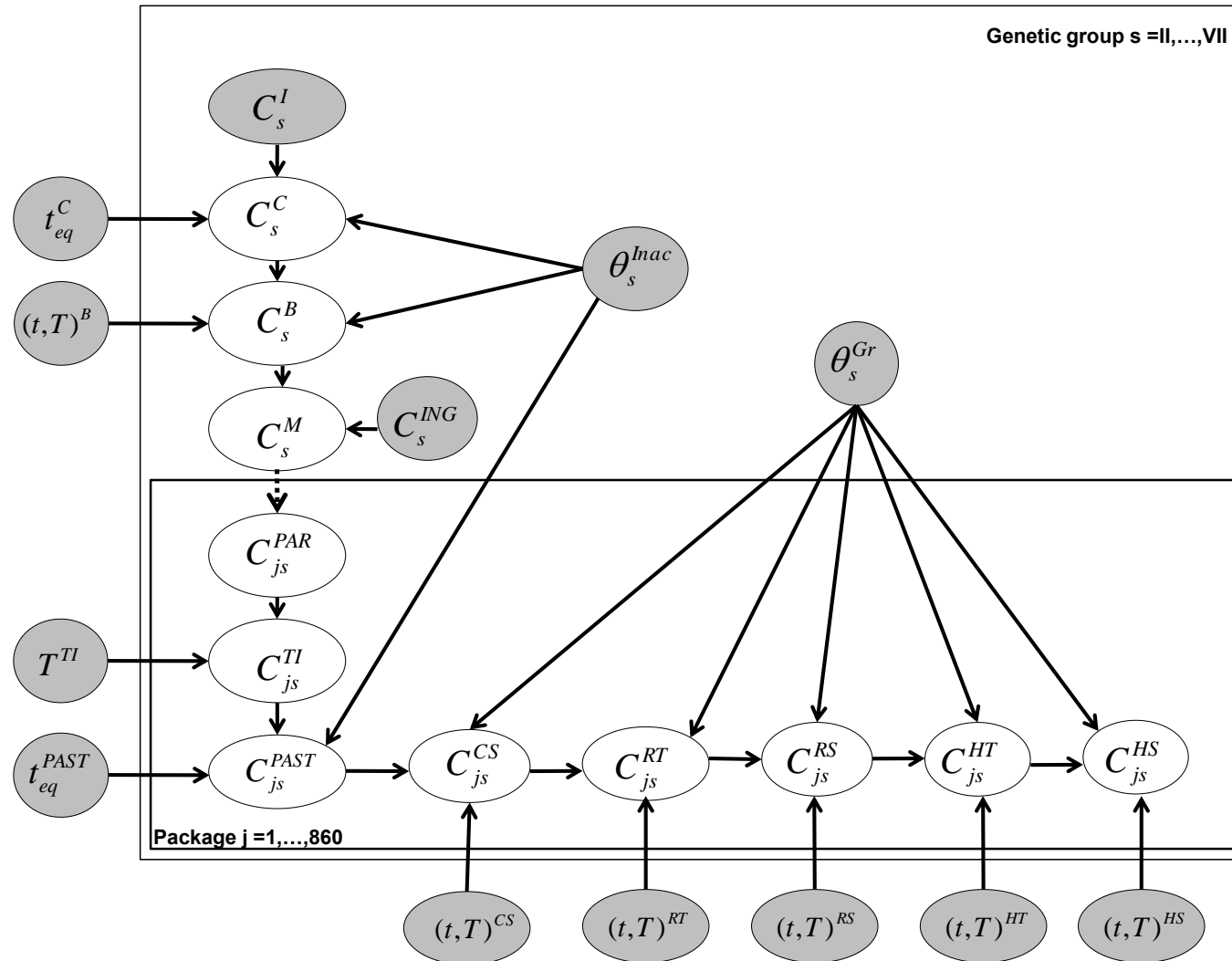
## Processus biologiques impactant *B.cereus*





# 1. Présentation du modèle et des données

Ce modèle peut être vu comme un réseau bayésien :



# 1. Présentation du modèle et des données

Des données de contamination *après vieillissement*, souvent censurées à gauche :  
 75% des contaminations totales sous le seuil de détection  
 Pour les 25% des contaminations positives, censure des concentrations en souches non détectées

Données (source)	Produit	Conditions	Contamination en log CFU/g (groupes génétiques détectés)
14 paquets venant du même batch (INRA)	5 paquets de 800g	21 jours à 4°C	< 1,7
			5,5 (VI)
	4 paquets de 800g	21 jours à 10°C	3 (VI)
			3,8 (II)
			3,1 (II)
	5 paquets de 800g	5 jours à 20-25°C	6 (IV)
7,2 (II et IV)			
6,4 (IV)			
6,3 (IV)			
50 paquets venant de batch différents (USINE)	27 paquets de 400g	20 jours à 4°C puis 10 jours à 8°C	6,3 (IV)
			3,7 (II)
			2,7 (II)
			3,7 (II)
	23 paquets de 400g	10 jours à 4°C puis 20 jours à 8°C	5 (II)
			< 2 pour les 23 autres paquets
			5,2 (VI)
			4,4 (VI)
			4,7 (VI)
			< 2 pour les 20 autres paquets

# Plan

- ✓ Introduction
- 1. Présentation du modèle et des données
- 2. Essai d'inférence bayésienne par méthode ABC
- 3. Mise en place de l'inférence bayésienne par MCMC



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Motivations pour tenter l'ABC dans notre contexte :

- Complexité du modèle
- Problème initial de la loi multinomiale non programmable en Winbugs ou en Jags
- Difficulté de convergence de la méthode MCMC
- Comparaison de la méthode MCMC et de la méthode ABC

## Objectif et principe de la méthode ABC :

Calcul des lois a posteriori sans utiliser de vraisemblance mais en comparant directement les données simulées (par le modèle de simulation de Monte Carlo) avec les données observées



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Méthode ABC : algorithme de type acceptation/rejet :

1. Générer  $\theta$  (vecteur de paramètres) à partir des lois a priori
2. Simuler des données avec  $\theta$  (à l'aide du modèle)
3. Accepter  $\theta$  si les données simulées sont *proches* des données observées  
Sinon, refuser  $\theta$ .  
Retourner en 1.

Loi a posteriori = distribution des  $\theta$  acceptés

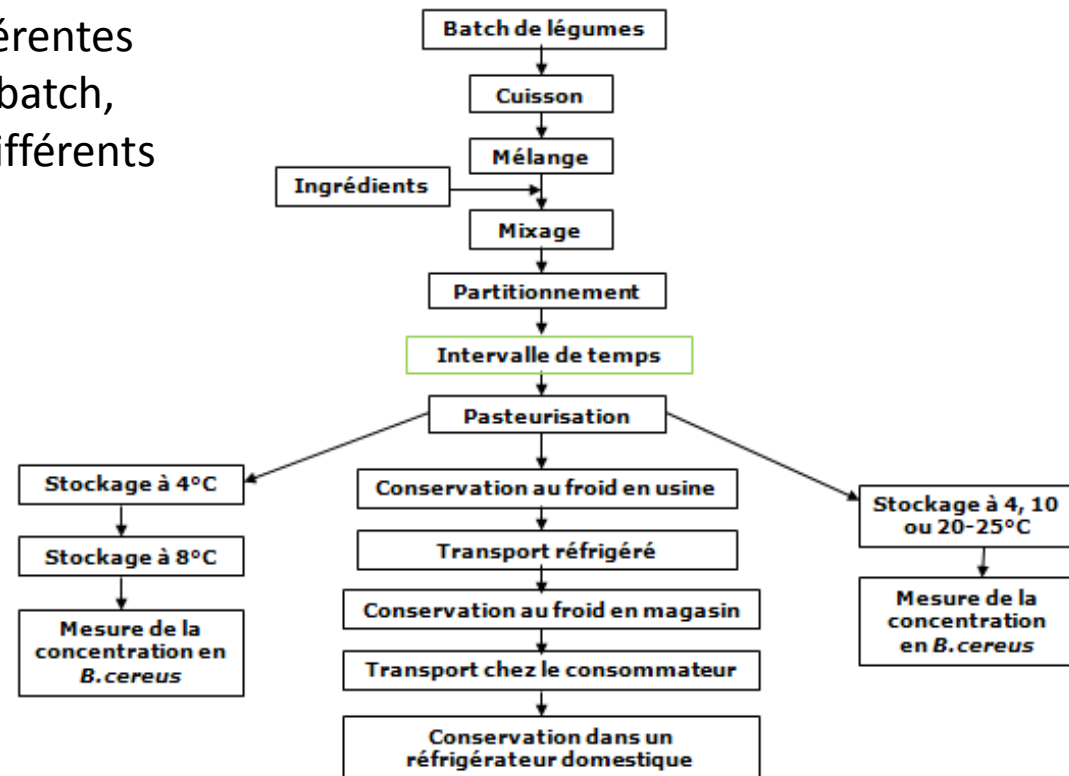


# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Mise en place de la méthode :

Simulation de 64 paquets dans les *mêmes conditions de vieillissement* que les données, par le modèle d'Afchain et al., 2008, « *augmenté* » :

- 5 conditions de vieillissement différentes
- 14 paquets Inra venant du même batch, 50 paquets industriels de bacs différents



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Mise en place de la méthode :

- Construction d'une *distance* entre données simulées et observées
- Ici en utilisant des *statistiques résumées* des concentrations simulées après vieillissement :

nécessaires pour obtenir une comparaison globale des concentrations des données avec les concentrations prédites (mais perte de précision)



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

**Définition de la statistique résumée** : un ensemble de conditions résumant les données :

A l'intérieur de chaque condition de vieillissement :

- Le type de groupes génétiques dominants (ie au dessus du seuil de détection, avec les autres groupes génétiques en quantité 10 fois inférieure) (II,...,VI)
- Le nombre de paquets contaminés par ces groupes dominants
- La quantité de bactéries de ces groupes dominants ( $\log_{10}$ ufc/g)
- Le nombre de paquets non contaminés

**Distance** :

On juge une série de 64 prédictions *similaire* aux 64 données si :

A l'intérieur de chaque condition de vieillissement :

- On retrouve le même type de groupes génétiques dominants
- Et un nombre similaire de paquets contaminés par cette souche ( $\pm 1$  ou  $\pm 2$ )
- Et en quantité similaire : marge d'erreur  $\pm \delta \log_{10}$ ufc/g
- Et un nombre similaire de paquets non contaminés





# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Exemple sur une condition de vieillissement :

On accepte les 5 paquets simulés correspondants si ils comportent :

- De 1 à 3 paquets avec
  - entre  $3.1 - \delta$  et  $3.8 + \delta$   $\log_{10}$  ufc/g de souche II
  - des concentrations simulées en souches III à VII  $<$  à  $1/10$  de la concentration simulée en II dans ces paquets
- De 2 à 4 paquets avec
  - entre  $3 - \delta$  et  $7.5 + \delta$   $\log_{10}$  ufc/g de souche VI
  - des concentrations simulées en souches III, III, IV, V et VII  $<$  à  $1/10$  de la concentration simulée en IV dans ces paquets
- Les 5 paquets simulés correspondent à un des cas ci-dessus, avec éventuellement un paquet non contaminé.

	5,5 (VI)
Condition de vieillissement	3 (VI)
	7,5 (VI)
INRA 2 : 5 paquets	3,8 (II)
	3,1 (II)



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Résultat :

Avec 400 000 simulations (durée : 15h) et  $\delta = 0.5 \log_{10} \text{ufc/g}$  :

Conditions	Pourcentage de simulation acceptées
Inra 1	98,9%
Inra 2	0,00%
Inra 3	1,21%
Industriel 1	0,00%
Industriel 2	0,00%
Les 64 paquets	0,00%

- Certaines conditions très difficiles à accepter
- L'ensemble des conditions doit être accepté simultanément pour accepter une simulation. Donc 0 simulation acceptée.

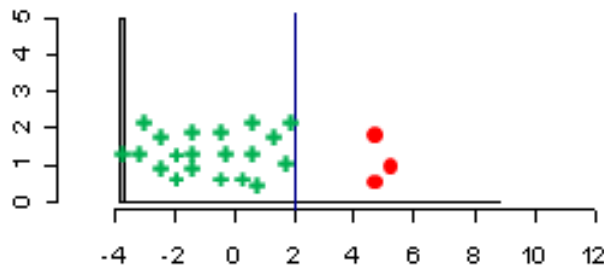


# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Comment expliquer qu'on n'accepte jamais ?

- Résultat du modèle multivarié, de dimension  $64 \times 6 = 384 \rightarrow$  difficultés
- Données assez éloignées des prédictions du modèle
  - Souche VI : prévalence prédite par le modèle de 0.03%, mais dans les données prévalence supérieure à 7.8%
  - Condition Inra 2 : prédiction surtout de II, III et IV, mais dans les données: du II et du VI

### Exemple : groupe génétique VI, condition Industriel 2



- **Données > limite de détection**
- **Données censurées**
- **Limite de détection totale**
- **Concentrations prédites**



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

## Essais pour avoir des meilleurs taux d'acceptation :

- Assouplissements de la distance :  
augmentation de la marge d'erreur  $\delta$ , autoriser quelques paquets non contaminés, diminution de la limite de censure pour les groupes génétiques non détectées, etc.
- Modification des priors (élargissements)  
→ problème : les taux d'acceptation s'améliorent pour certaines conditions de vieillissement mais se dégradent pour d'autres
- Essais en supposant tous les paquets issus d'un même batch

Tous les paramètres  $\theta$  à ce niveau de modèle sont au niveau batch  
51 batches → 51 jeux de  $\theta$  par simulation, donc  $66 \times 51 = 3366$  inputs !  
1 batch → 1 jeu de  $\theta$  par simulation, donc 66 inputs seulement  
mais sous-estimation de la variabilité !

→ modèle d'Afchain et al., 2008, de Monte Carlo de 1<sup>er</sup> degré : ne sépare pas la variabilité et l'incertitude

→ problème de prise en compte de la *variabilité entre les paquets* qui viennent d'un même batch et les paquets venant de batch différents



# 2. Essai d'inférence bayésienne par ABC

**Résultats des essais pour avoir des meilleurs taux d'acceptation :**  
 (en supposant tous les paquets issus d'un même batch)

Conditions	Pourcentage de simulation acceptées		
	Modèle normal	Priors modifiés (10)	Priors modifiés (10)
	1000 simulations Erreur = 1 log <sub>10</sub> ufc/g	300 000 simulations Erreur = 1 log <sub>10</sub> ufc/g	1 000 000 simulations Erreur = 5 log <sub>10</sub> ufc/g
Inra 1	99,8%	98,2%	98,3%
Inra 2	0,00%	0,1%	0,8%
Inra 3	1,5%	12,6%	19,6%
Industriel 1	0,60%	1,5%	1,8%
Industriel 2	0,00%	0,55%	1,44%
Les 64 paquets	0,00%	0,00%	0,00%

Configuration 10 : élargissement des priors de  $\delta_{VI}$ ,  $z$ ,  $T_{minI}$ ,  $\text{Log}_{10}N_{max}$ ,  $t_{Ceq}$ ,  $t_{eqpas}$ ,  $T_b$ , TTI

→ Toujours aucune acceptation simultanée !  
 ??



# Plan

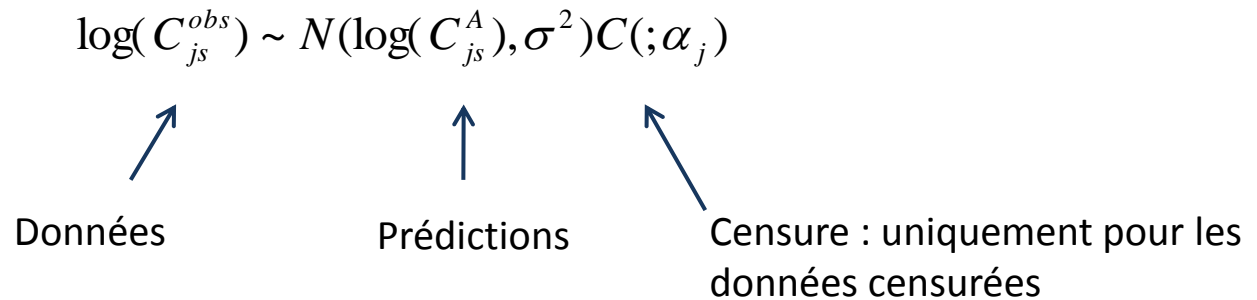
- ✓ Introduction
- 1. Présentation du modèle et des données
- 2. Essai d'inférence bayésienne par méthode ABC
- 3. Mise en place de l'inférence bayésienne par MCMC



# 3. Inférence bayésienne par MCMC

## Mise en place :

- Utilisation de Jags
- «Augmentation» du modèle : rajout d'étapes de vieillissement des paquets dans les mêmes conditions que les données
- *Vraisemblance*  $[X|\theta]$  : raccordement des données de concentrations en *B.cereus* (en ufc/g) aux concentrations simulées via une loi lognormale censurée ( $i$  : batch,  $j$  : paquet,  $s$  : groupe génétique,  $\alpha_j = \text{LoD}$  ou  $\log(C_{js}^{obs} / 10)$ ):

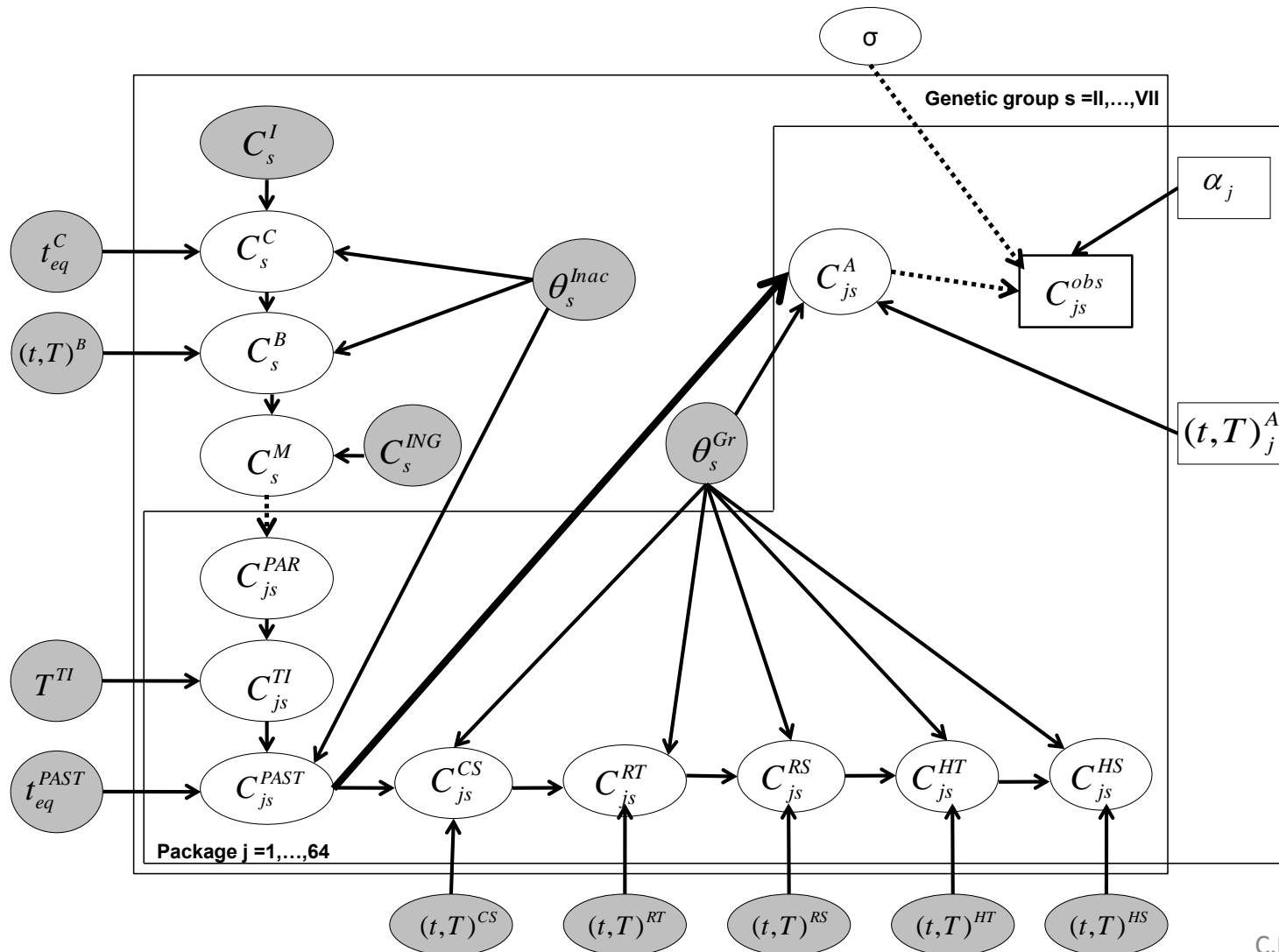


Prior mis sur l'erreur :  $\sigma \sim \text{Unif}(0,100)$



# 3. Inférence bayésienne par MCMC

Le réseau bayésien augmenté :

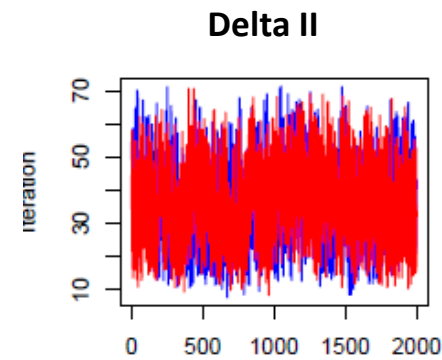
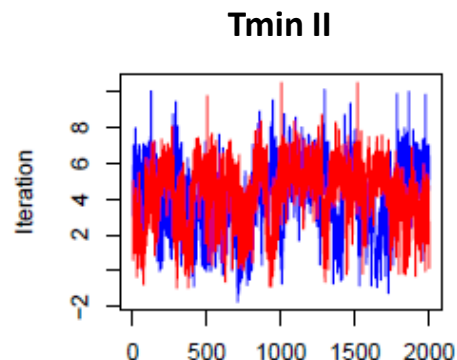
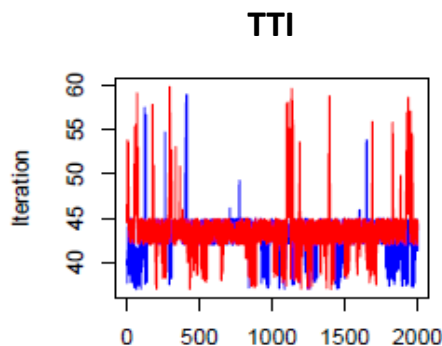




# 3. Inférence bayésienne par MCMC

## Méthodes de calcul :

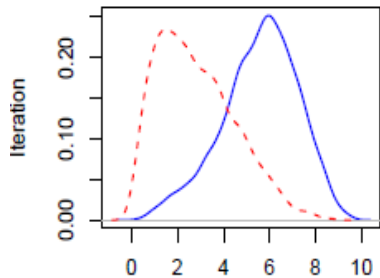
- Simulation de 1 batch et de 64 paquets par batch
  - Hypothèse : les paquets sont tous issus d'un même batch
  - Même problème de prise en compte de la variabilité/incertitude que pour l'ABC
- Avec le logiciel Jags, simulation de 2 chaînes de Markov indépendantes
- Période de chauffe (« Burn-in ») de 1 000 000 itérations
- 2 000 000 itérations avec un pas de 1000
- Convergence atteinte pour la majorité des inputs sauf difficultés pour 2 ou 3 : grosse autocorrélation



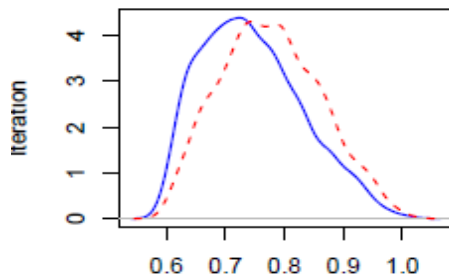
# 3. Inférence bayésienne par MCMC

Résultats : **prior** (--) versus **posterior** (—) : les + importantes modifications

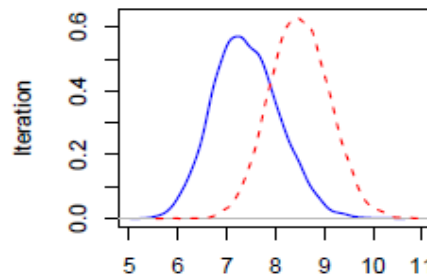
Delta VI



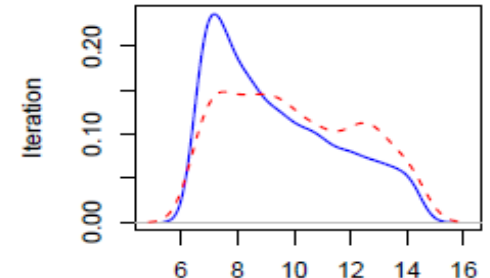
Muopt



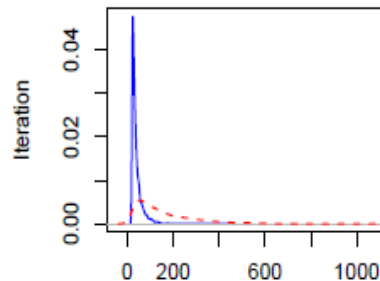
Log10Nmax



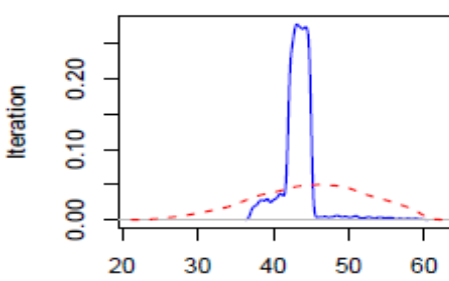
z



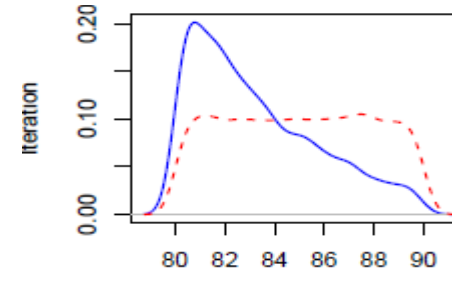
Durée cuisson éq.



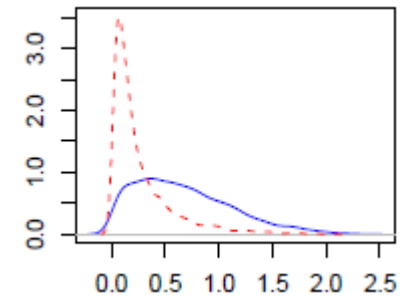
Température intervalle



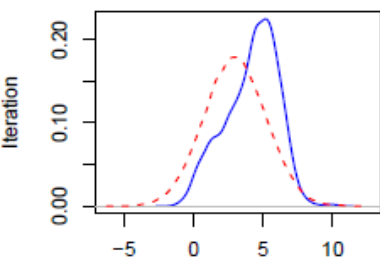
Température blanchiment



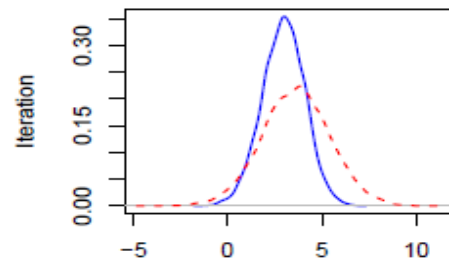
Concentration initiale VI



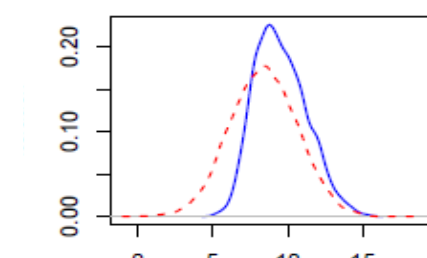
Tmin II



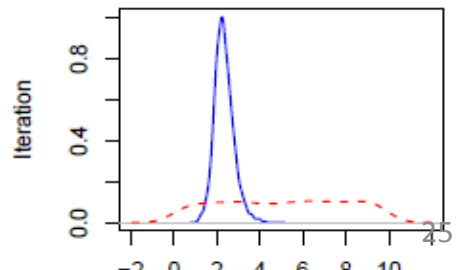
Tmin VI



Tmin IV



Erreur  $\sigma$



# 3. Inférence bayésienne par MCMC

## Résultats : prévalence

Augmentation de la prévalence finale pour les souches II et VI, diminution pour les autres

MC prevalence (%)							
Genetic Group	Initial	After cooking	Milk (ingredient)	Starch (ingredient)	After mixing with ingredients and partitioning	After pasteurization	After home cold storage
II	100	60	100	100	28	13	13
III	100	48	100	100	80	40	40
IV	100	45	100	100	100	84	84
V	100	24	100	100	5	0.1	0.1
VI	100	45	100	100	6	0.03	0.03
VII	100	64	100	100	10	1	1
<b>Total</b>	100	83	100	100	100	88	88
MCMC prevalence (%)							
II	100	100	100	100	80	59	59
III	100	87	100	100	65	1	1 -
IV	100	86	100	100	100	72	72 -
V	100	82 +	100	100	6	0.00	0.00
VI	100	93	100	100	50	15	15
VII	100	99	100	100	19	0.05	0.05 -
<b>Total</b>	100	100	100	100	100	90	90

# 3. Inférence bayésienne par MCMC

## Retour sur résultats

- Modifications des contaminations : cohérentes avec les données (II, VI)
  - Modifications des priors :
    - soit en accord avec les avis d'experts ( ex :  $T_{min}$ )
      - réduction d'incertitude sur les lois de certains paramètres
    - soit assez surprenantes aux yeux des experts
      - questionnement du modèle, des connaissances ou de la méthode
- Ex : Grosse réduction des durées équivalentes de cuisson  
→ problème avec le modèle de temps équivalents?



# Conclusion

## Inférence bayésienne sur un réseau AQR :

Technique puissante permettant de faire remonter l'information apportée par les données le long de la chaîne de production

- permet de réduire l'incertitude sur les paramètres
- et d'éventuellement s'interroger sur certains aspects du modèle

**Méthode ABC** : n'a pas abouti – modèle trop éloigné des données ??

**Méthode MCMC** : fonctionne, avec des résultats cohérents

- mais convergence lente à atteindre, car forte autocorrélation
- prise en compte difficile de la variabilité entre les paquets de batchs différents, due à la structure du modèle





# Merci de votre attention !

## Quelques références :

Afchain, A.L., Carlin, F., Nguyen-the, C., Albert, I., 2008. Improving quantitative exposure assessment by considering genetic diversity of *B. cereus* in cooked, pasteurised and chilled foods. *International Journal of Food Microbiology*, 128, 165-173.

Albert, I., Grenier, E., Denis, J.B., Rousseau, J., 2008. Quantitative Risk Assessment from Farm to Fork and Beyond: a global Bayesian Approach Concerning Food-Borne Diseases. *Risk Analysis*, 28, 557-571.

Delignette-Muller, M.L., Cornu, M., Pouillot, R., Denis, J.B., 2006. Use of Bayesian modelling in risk assessment: application to growth of *Listeria monocytogenes* and food flora in cold-smoked salmon. *International Journal of Food Microbiology*, 106, 195–208.

