



HAL
open science

Apports croisés de la modélisation géostatistique et déterministe : exemple des nitrates et de l'oxygène dissous dans un réseau hydrographique

Edwige Lefebvre Polus

► To cite this version:

Edwige Lefebvre Polus. Apports croisés de la modélisation géostatistique et déterministe : exemple des nitrates et de l'oxygène dissous dans un réseau hydrographique. Hydrologie. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2010. Français. NNT : 2010ENMP0048 . pastel-00563806

HAL Id: pastel-00563806

<https://pastel.hal.science/pastel-00563806>

Submitted on 7 Feb 2011

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.

École doctorale n°398 : Géosciences et Ressources Naturelles

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris

Spécialité « Géostatistique »

présentée et soutenue publiquement par

Edwige POLUS-LEFEBVRE

le 06 décembre 2010

Apports croisés de la modélisation géostatistique et déterministe

**Exemple des nitrates et de l'oxygène dissous
dans un réseau hydrographique**

Directeur de thèse : **Chantal de FOUQUET**

Co-encadrement de la thèse : **Nicolas FLIPO, Michel POULIN**

Jury

M. Ghislain de MARSILY, Professeur Emérite, Université Pierre et Marie Curie

M. Roberto BRUNO, Professeur, Università di Bologna

Mme Isabelle HALLEUX, Directeur R&D, Université de Liège

Mme Marie-Hélène TUSSEAU-VUILLEMIN, Directrice adjointe, Ifremer

M. Nicolas FLIPO, Attaché de Recherche, MINES ParisTech

Mme Chantal de FOUQUET, Maître de Recherche, MINES ParisTech

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Examineur

MINES ParisTech

Centre de Géosciences

35, rue Saint-Honoré - 77300 Fontainebleau

**T
H
È
S
E**

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier particulièrement Chantal de Fouquet, ma directrice de thèse, sans qui cette thèse n'aurait pas vu le jour, pour son investissement dans ce projet, sa rigueur scientifique, et surtout sa disponibilité. Nos nombreuses discussions souvent improvisées m'ont ainsi permis de faire mûrir mes connaissances en géostatistique et de mener à bien ce travail. Je salue la compréhension et le soutien qu'elle m'a témoignés durant ces quelques années bien agréables passées à Fontainebleau.

C'est également grâce à Nicolas Flipo et Michel Poulin, les « hydrologues », que cette thèse a pu aboutir. Comment, en effet, espérer comprendre le comportement des nitrates ou de l'oxygène dissous sans leurs avis éclairés ? Je les remercie vivement de m'avoir fait découvrir l'hydrologie, ainsi que pour leur patience et nos discussions parfois animées mais toujours très enrichissantes. Leur ouverture d'esprit et leur motivation ont rendu cette collaboration non seulement possible mais de plus très sympathique.

Toute ma gratitude va à Isabelle Halleux, de l'Université de Liège en Belgique et à Roberto Bruno, de l'Università di Bologna en Italie, qui ont tous deux accepté d'être les rapporteurs de ma thèse. Je les remercie de l'intérêt qu'ils ont porté au travail, de leur lecture attentive du manuscrit et des remarques très pertinentes qu'ils m'ont transmises. Un merci particulier à Roberto Bruno d'avoir fait l'effort de lire, de rédiger, et de s'exprimer en français.

Je voudrais également exprimer toute ma reconnaissance à Ghislain de Marsily, qui a fait l'honneur de présider mon jury de thèse d'une main de maître. Ses questions judicieuses ont par ailleurs soulevé des perspectives intéressantes.

Mes sincères remerciements vont aussi à Marie-Hélène Tusseau-Vuillemin, qui a accepté de se plonger dans la géostatistique. Ses remarques ont certainement rendu le manuscrit plus accessible aux hydrologues.

Je remercie le SIAAP, Veolia Water et plus généralement le PIREN-Seine d'avoir fourni les données nécessaires à ce travail.

Ensuite, je veux spécialement remercier toute l'équipe de Géostatistique, qui m'a chaleureusement accueillie. Jean-Paul pour ses qualités humaines, diplomatiques et scientifiques qui font de lui un chef hors pair ; Didier pour sa disponibilité et sa réactivité notamment concernant *RGeoS* (comment aurais-je fait sinon) ; Jacques, Lantu, et Hélène, pour leur aide précieuse et leur pédagogie ; Cachou et plus récemment Thomas, Nicolas et Fabien, toujours présents pour résoudre un souci ponctuel ; Isabelle, « notre deuxième maman », pour son attention, ses encouragements et sa bonne humeur ; Françoise pour son aide en début de thèse (dommage que je sois arrivée si tard), les relectures de l'anglais et nos discussions toujours intéressantes ; Nathalie et Dominique Vassiliadis pour leur aide et

leur bonne humeur ; et puis tout le monde pour les bons moments échangés autour d'un thé, d'un pique-nique en forêt ou au bord de la Seine, ou encore au Chili. Merci également aux *joggers* de m'avoir réconcilié avec le sport et fait découvrir la forêt de Fontainebleau.

J'ai une pensée pour tous les autres thésards que j'ai croisés, et notamment Cédric et Pierre-Yves qui nous ont motivés pour reprendre le flambeau de l'ABCTEM avec Charles, Elodie, et Jorge, puis Brice et Misha, ce qui nous a permis d'acquérir ce fameux billard où il fait bon décompresser après le dîner, euh pardon, le déjeûner (n'est-ce pas Fabien, Claire, Yvon, Béatrice, Amira, Nicolas, Thomas...). Et aussi pour Marco, puis Marie et Mathieu, qui m'ont gentiment accueillie dans leur bureau, ont tout fait pour que je m'y sente à l'aise, et m'ont bien aidé à apprendre R , Je pense également à nos italiennes Sara, Rose-Line, et Fausta avec qui on a partagé plus d'un fou rire, puis aux CFSG, stagiaires ou post-docs que j'ai simplement croisé dans les couloirs ou qui ont osé s'aventurer jusque dans ce bureau reculé pour discuter un peu et apporter un peu d'exotisme, comme Huey Chyi, Mathieu, Dag Johan, Iraci et Debora, Giovanni, Johan...

Et puis bien sûr il y a Claire, avec qui on a quand même réussi à organiser pas mal de choses dont un concours cuisine, Chadia et Yvon qui complètent le trio des 'expatriés' mariés en 2008, y Danitza quien trae un poquito de sol cada dia y a quien debo mi español, de belles amitiés qui ont commencé... Un grand merci à vous pour votre soutien et pour tous ces bons moments, et pourvu que ça dure !

Enfin, je ne peux pas oublier Charlotte et Mr Tshibangu qui m'ont motivée et donné l'envie de me lancer dans cette aventure, ni ma famille, mes amis, et tous ceux qui m'ont formidablement accompagnée et soutenue tout ce temps. Je remercie particulièrement mes parents, ainsi que Manu et Serge pour leur relecture très attentive, en m'excusant des courtes nuits de début octobre...et évidemment un tout grand merci à Seb, qui a essuyé toutes mes sautes d'humeur et m'a merveilleusement encouragée jusqu'au bout.

Table des matières

Glossaire	vii
Introduction	1
Partie I : Modélisation déterministe, données et géostatistique	6
1 Deux descriptions d'un réseau hydrographique	7
1.1 Modélisation déterministe et phénoménologique	7
1.2 Modélisation géostatistique	10
2 Les données : mesures et PROSE	17
2.1 2003, une année particulière?	18
2.2 Différents ensembles de mesures	20
2.3 Les résultats du modèle PROSE	21
3 Discussion sur la relation concentrations - flux	23
3.1 Deux approches pour l'estimation spatiale des concentrations	23
3.2 Comparaison des calculs de concentration moyenne annuelle	24
4 PROSE comme maquette?	29
4.1 Les débits	29
4.2 Nitrates : reconstruction de conditions aux limites amont par co-krigeage .	30
4.3 Nitrates : analyse variographique pour ausculter la simulation déterministe	36
4.4 Oxygène dissous : comparaison des valeurs PROSE aux mesures du SIAAP	41
4.5 Comparaison aux mesures du RNB	51
4.6 Synthèse	57
Partie II : Estimations simplifiées	60
5 Reconstitution de chroniques temporelles aux stations	61
5.1 Rappel : le modèle linéaire de co-régionalisation	61
5.2 Recalage temporel de la simulation PROSE aux stations	62
5.3 Reconstitution d'une chronique complète d'oxygène dissous	66
5.4 Synthèse	70

6	Estimations spatiales des débits, flux et concentrations de nitrates par bief	73
6.1	Les modèles envisagés	74
6.2	Estimation simplifiée	78
6.3	Faibles perturbations	79
6.4	Synthèse : comparaison des estimations	79
 Partie III : Estimation spatiale sur réseau hydrographique		82
7	Le modèle à filets	83
7.1	Une famille de modèles	84
7.2	Système de krigeage pour des composantes Y_i indépendantes	90
7.3	Inférence	93
8	Krigeage des concentrations en nitrates sur réseau	99
8.1	Décomposition du graphe en filets	99
8.2	Test d'indépendance des filets	99
8.3	Inférence	101
8.4	Estimation à partir des mesures du RNB	107
8.5	Variance d'estimation	109
8.6	Synthèse	113
9	Estimation conjointe des nitrates sur réseau	115
9.1	Krigeage des résidus	116
9.2	Krigeage avec PROSE en dérive externe	119
9.3	Synthèse : comparaison des estimations	121
10	Estimation des concentrations en oxygène dissous sur réseau	123
10.1	Krigeage des concentrations en oxygène dissous	124
10.2	Estimation conjointe des concentrations en oxygène dissous	127
10.3	Synthèse	131
 Conclusions et perspectives		133
 Bibliographie		139
 Annexes		148
A	Rappels de géostatistique	149
B	Remarque sur le cadre intrinsèque	157
C	Caractérisation de la qualité de l'eau des cours d'eau	159
D	La géostatistique pour ausculter une simulation déterministe	175

Glossaire

Abréviations

CL : Conditions aux Limites

CLA : Combinaison Linéaire Autorisée

DCE : Directive Cadre européenne sur l'Eau

FA : Fonction Aléatoire (cf. annexe A, §A.1)

FAI : Fonction Aléatoire Intrinsèque

FASt : Fonction Aléatoire Stationnaire

HAP : Hydrocarbure Aromatique Polycyclique

MECE : Masse d'Eau Cours d'Eau

MES : Matières En Suspension

MO : Matière Organique

NH_4^+ : Ammonium

NO_3^- : Nitrates

O_{2d} : Oxygène dissous

PO_4^{3-} : Orthophosphates

RNB : Réseau National de Bassin

SIAAP : Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne

STEP : Station d'Épuration

Définitions

Bief : Tronçon d'un cours d'eau compris entre deux singularités majeures.

PROSE : Modèle déterministe développé au Centre de Géosciences (Mines-ParisTech), qui couple un module hydraulique, un module de transport dissous et particulaire ainsi qu'un module bio-géochimique. Il simule la qualité des eaux à l'échelle de la rivière ou d'un réseau hydrographique (cf. §1.1.2).

SEQ-Eau : Système français d'Évaluation de la Qualité de l'Eau, définissant cinq classes de qualité des eaux (cf., par exemple, le site internet du Sandre) et précédant la directive cadre (DCE). Il est encore couramment utilisé en France, dans l'attente des bornes définitives des classes de qualité définies par la DCE, initialement prévues pour 2009.

Singularité : Le long d'un cours d'eau, tout ce qui perturbe ou modifie l'écoulement ou la composition biochimique de l'eau, créant une discontinuité. Il s'agit, entre autres, des STEP, écluses, confluences, séparation du cours d'eau en deux bras, rejets industriels, etc.

Valeurs PROSE : Valeurs extraites des résultats du modèle PROSE et utilisées comme données.

Introduction

La Directive Cadre européenne sur l'Eau (DCE) stipule qu'un « bon état écologique et chimique » de toutes les masses d'eau doit être atteint à l'horizon 2015. A cet effet, de nombreux projets et recherches visent à comprendre les mécanismes complexes régissant les interactions au sein d'un cours d'eau.

Pour les masses d'eau superficielles, cette directive largement inspirée de la gestion actuelle des eaux en France, basée sur le Système d'Evaluation de la Qualité de l'Eau (SEQ-Eau), demande tout d'abord de caractériser l'état actuel des cours d'eau et d'identifier les « tronçons problématiques ».

L'état d'un cours d'eau est défini par diverses substances, regroupées en classes d'indicateurs (DCE, 2007). Dans ce travail, nous nous intéressons aux « indicateurs physico-chimiques soutenant la biologie », et plus particulièrement aux **nitrate**s ainsi qu'à l'**oxygène dissous**, variable qui témoigne de « l'état de santé » d'un cours d'eau et plus largement d'un système hydrologique (Wetzel, 1983; Poulin et al., 1998; Garnier & Billen, 2007).

Différents outils permettent d'évaluer les concentrations associées aux indicateurs retenus. D'une part, la modélisation déterministe ou phénoménologique - plus globale - vise à reproduire les principaux processus physico-chimiques et biologiques qu'un cours d'eau peut accueillir. Si tous ces processus sont connus, la résolution d'un système d'équations différentielles, contraint par des conditions aux limites et d'autres données d'entrée (apports divers), permet de déterminer les concentrations recherchées. Le deuxième outil considéré est la modélisation géostatistique, qui s'intéresse non plus aux processus physiques influençant un ou plusieurs indicateurs, mais plutôt à la variabilité spatiale et temporelle de ces indicateurs.

La modélisation déterministe présente l'avantage indéniable aux yeux des acteurs de l'eau d'être fondée sur des phénomènes physiques, mais la qualité des estimations n'en reste pas moins dépendante de la paramétrisation. En effet, outre l'incertitude provenant des paramètres inhérents aux équations décrivant les différents processus, souvent empiriques, les données utilisées en entrée du modèle (les conditions aux limites amont et les apports divers) sont également entachées d'incertitudes. Par ailleurs, une connaissance approfondie du domaine étudié permet une modélisation plus précise ; tôt ou tard, le modélisateur se verra dès lors obligé de réaliser un compromis entre échelle de travail et qualité des sorties du modèle.

La modélisation géostatistique, quant à elle, peut s'appliquer à tout domaine échantillonné. Elle fournit des estimations qui minimisent la variance de l'erreur d'estimation, auxquelles est associée une mesure d'incertitude. Toutefois, les relations physiques entre variables n'ont aucune raison d'être vérifiées, ce qui peut induire des valeurs aberrantes telles qu'une concentration négative ou des relations irréalistes entre variables.

Ce travail vise à coupler les modélisations déterministe et géostatistique afin d'exploiter leurs avantages respectifs et d'améliorer l'estimation de la qualité des cours d'eau.

Plus précisément, l'objectif est de combiner le modèle déterministe et les mesures grâce à un modèle géostatistique bivariable, pour obtenir un estimateur spatio-temporel sur un réseau hydrographique le plus fidèle possible à la réalité. En effet, l'estimation géostatistique fournit un interpolateur exact, mais les mesures sont trop espacées pour qu'il puisse être précis, surtout si leur variabilité spatiale est importante. En revanche, les simulations déterministes fournissent un estimateur précis qui respecte les processus physiques, mais diffère des mesures aux stations. Le couplage de l'estimation géostatistique à la simulation déterministe vise à construire un interpolateur biogéochimique « exact » de la qualité des cours d'eau.

Cette thèse s'inscrit donc dans un cadre d'application des méthodes géostatistiques classiques au domaine de la qualité de l'eau. Les développements géostatistiques sont restreints à la mise en oeuvre du krigeage sur graphe, l'accent étant mis sur les résultats pratiques et les apports croisés de l'utilisation conjointe de méthodes déterministe et géostatistique. Dès lors, de nombreuses applications de la géostatistique sont classiques et parfois même élémentaires, telle l'estimation spatiale monodimensionnelle, incontournable en l'occurrence comme estimation de référence.

Deux volets, l'un temporel et l'autre spatial, ont été considérés séparément. En effet, si la question de l'estimation temporelle, traitée par Bernard-Michel (2006), est résolue, ce n'est pas le cas de l'estimation spatiale. C'est pour cette raison que l'accent est mis sur l'estimation spatiale le long d'un réseau hydrographique, pour résoudre d'abord la question du support de graphe, afin d'étendre dans le futur ce modèle de fonctions aléatoires 1D (spatial) à des fonctions aléatoires 2D (spatio-temporel).

Des méthodes géostatistiques bien rôdées, telles que le krigeage avec dérive externe, permettent de réaliser une estimation spatiale couplant des mesures et une fonction déterministe. Cependant, elles requièrent un modèle géostatistique valide pour la topologie considérée, le réseau hydrographique en l'occurrence. Le « modèle à filets » proposé par de Fouquet & Bernard-Michel (2006) est retenu pour ce travail.

Or ce modèle reste à finaliser, son inférence et donc sa mise en oeuvre n'ayant pu être réalisées précédemment par manque de données. Pour pallier cet inconvénient majeur, l'idée est ici d'exploiter les sorties d'un modèle déterministe, qui présentent une résolution spatio-temporelle très fine, pour tester les différentes hypothèses et inférer le modèle à filets. La simulation déterministe considérée est le modèle PROSE, qui reproduit entre autres les indicateurs de la qualité de l'eau dans la partie aval de la Seine.

Au préalable, il convient de s'assurer que le modèle PROSE reproduit suffisamment bien la réalité - les mesures aux stations - pour être utilisé comme maquette pour l'inférence d'un modèle géostatistique. Pour les nitrates et l'oxygène dissous, une analyse exploratoire conjointe détaillée des résultats du modèle PROSE et des mesures est donc effectuée.

La « maquette PROSE » étant jugée admissible, le test des hypothèses et l'inférence du modèle à filets sont alors réalisés pour les concentrations en nitrates. La mise en oeuvre du krigeage à partir des mesures sur le réseau hydrographique et, ensuite, l'estimation conjointe, couplant mesures et sorties du modèle déterministe PROSE, sont enfin examinées.

En marge de cet objectif principal qu'est l'estimation conjointe spatiale, de nombreuses questions sont apparues. Les suivantes ont été jugées intéressantes soit pour elles-mêmes, soit pour la généralisation de ce modèle au cadre spatio-temporel ou à plusieurs variables.

- **Estimations temporelles.** Faisant suite aux travaux de Bernard-Michel (2006), plusieurs exemples d'estimation géostatistique temporelle sont illustrés. Une incohérence entre les mesures de nitrates utilisées comme conditions aux limites amont et les mesures utilisées pour caractériser la qualité des cours d'eau est ainsi corrigée par un co-krigeage de différents ensembles de mesures, pour reconstruire des conditions aux limites amont

cohérentes avec les mesures le long du réseau. Une autre application est le « recalage » temporel de la simulation déterministe aux mesures en une station, examiné pour les nitrates et l’oxygène dissous.

- **Diagnostic de la simulation PROSE.** L’analyse exploratoire conjointe du modèle PROSE et des mesures, ainsi que l’ajustement d’un modèle variographique bivariable, permettent d’identifier et de localiser les imperfections du modèle déterministe. Ce nouvel outil de diagnostic de la modélisation déterministe a été appliqué aux concentrations en nitrates; il a fait l’objet d’un article publié dans *Hydrological Processes*, repris en annexe D.
- **Débits, flux et concentrations.** En hydrologie, on s’intéresse non seulement aux concentrations mais également aux flux. Plusieurs modèles simples permettant d’estimer conjointement les débits, flux et concentrations sont testés sur la « maquette PROSE ». En première approche, ces estimations sont effectuées sur des tronçons de rivières (ou biefs) afin de s’affranchir de la structure de graphe; elles concernent uniquement les nitrates.
- **Problématique DCE.** Pour répondre au calcul des indices légaux requis par la DCE, le modèle PROSE a été mis à profit pour examiner différentes méthodes d’interpolation spatiale et temporelle des mesures disponibles, dans la continuité des travaux de Bernard-Michel (2006) concernant le calcul de critères statistiques. Cinq indicateurs ont été retenus : les nutriments (nitrates, ammonium et orthophosphates), l’oxygène dissous, ainsi que les matières en suspension. Pour ces indicateurs, le critère préconisé par la DCE est le quantile 90. L’annexe C reprend un article publié dans *La Revue des Sciences de l’Eau*, où le calcul du quantile temporel en une station ainsi que son extrapolation spatiale sont étudiés à partir de la « maquette PROSE ».

Le mémoire est organisé en trois parties.

- La première s’intéresse au positionnement du problème, en décrivant tout d’abord les indicateurs de qualité des cours d’eau retenus et en décrivant la modélisation déterministe, puis les modèles géostatistiques sur graphe (chapitre 1). Le volet contextuel est complété par la présentation des différents ensembles de données (chapitre 2) et celle des deux approches envisageables pour l’estimation spatiale (chapitre 3), selon que l’on s’intéresse aux flux ou non. Cette première partie reprend également l’analyse exploratoire conjointe détaillée des résultats du modèle déterministe PROSE et des mesures (chapitre 4), sur laquelle s’appuie le reste du document.
- Ensuite, la deuxième partie aborde la modélisation « simplifiée », c’est-à-dire à une dimension. Elle s’ouvre par un chapitre consacré aux estimations temporelles (chapitre 5) et se referme sur l’estimation spatiale conjointe des débits, flux, et concentrations par bief (chapitre 6).
- La troisième partie comprend tout ce qui est lié à l’estimation sur réseau : la description du modèle à filets (chapitre 7), le test des hypothèses, l’inférence de ce modèle et la mise en oeuvre du krigeage à partir des mesures de concentrations en nitrates (chapitre 8), ainsi que leur estimation conjointe à l’aide de la simulation déterministe PROSE (chapitre 9). Enfin, un chapitre reprenant l’estimation des concentrations en oxygène dissous le long du réseau, d’abord à partir des seules mesures et ensuite à l’aide des résultats du modèle PROSE (chapitre 10), clôture cette partie principale.

Tous les calculs ont été effectués à l’aide du logiciel R (www.r-project.org) et du *package* ‘RGeoS’ (www.geosciences.mines-paristech.fr) pour les applications géostatistiques. A l’exception de la carte réelle du réseau hydrographique, issue du logiciel ArcGIS[©], tous les graphiques ont également été réalisés via le logiciel R.

Modélisation déterministe, données et géostatistique

Chapitre 1

Deux descriptions d'un réseau hydrographique

Ce chapitre s'articule autour de deux sections. La première concerne la modélisation déterministe, tandis que la seconde consiste en un tour d'horizon des modèles géostatistiques actuels sur graphe, susceptibles d'être adaptés à l'estimation sur réseau hydrographique. En effet, le réseau hydrographique est modélisé comme un arbre orienté, faisant intervenir des coordonnées curvilignes ainsi qu'une topologie de graphe.

1.1 Modélisation déterministe et phénoménologique

Les principaux processus bio-physico-chimiques qui régissent le comportement des indicateurs retenus sont d'abord brièvement décrits ; ils seront d'une aide précieuse pour l'interprétation des résultats. Un second paragraphe présente le modèle déterministe PROSE, retenu pour ce travail.

1.1.1 Quelques processus bio-physico-chimiques

Les interactions entre les indicateurs retenus ainsi que les différents processus auxquels ils sont soumis sont ici rappelés ; ce sont (entre autres) ces phénomènes et mécanismes qu'essaient de reproduire les modèles déterministes. Dans un souci de clarté, ce paragraphe s'organise autour des indicateurs retenus, bien que la plupart des phénomènes recensés en concernent plusieurs. L'ammonium, les orthophosphates, et les matières en suspension étant uniquement considérées pour l'article concernant la qualité des cours d'eau, cette description est surtout centrée sur les nitrates et l'oxygène dissous, indicateurs ici privilégiés pour les applications.

L'influence primordiale de la matière organique (MO), des bactéries et de la biomasse algale (plus précisément le phytoplancton) sur les concentrations en oxygène dissous et en nutriments apparaît également.

1.1.1.1 L'ammonium NH_4^+

Indicateur biochimique des zones urbanisées, l'ammonium provient essentiellement de la dégradation de la MO par les bactéries hétérotrophes (Wetzel, 1983; Billen et al., 1994, 1998a,?;

Poulin et al., 1998; Reichert, 2001; Reichert et al., 2001a). Sa transformation en nitrates intervient lors du processus de nitrification bactérienne.

Enfin, Moatar (2006) précise que, dans la Loire, les variations journalières des concentrations en ammonium sont beaucoup plus marquées en hiver et au printemps qu'en période d'étiage.

1.1.1.2 Les nitrates NO_3^-

Outre leur production par nitrification de l'ammonium, les nitrates proviennent principalement du lessivage des sols cultivés, et constituent à ce titre un indicateur biochimique des zones rurales (Poulin et al., 2000, 2002). D'un bassin versant à un autre, la part des nitrates apportée par l'atmosphère et les fertilisants agricoles est très variable (Howarth et al., 1996; Boyer et al., 2002; Seitzinger et al., 2002; Van Breemen et al., 2002). Concernant la Loire, 70% des nitrates ont une origine agricole (Moatar, 2006). Ce bilan est en accord avec Blanchard (2003) qui montre que les nitrates proviennent surtout des engrais et des rejets domestiques, ce pourquoi les concentrations élevées en nitrates sont toujours observées à proximité de terrains cultivés, et non de forêts ou de terres en jachère.

Si les nitrates sont un peu consommés par la biomasse algale, en l'absence d'ammonium (Wetzel, 1983; Billen et al., 1994; Poulin et al., 1998), c'est essentiellement le processus de dénitrification qui est à l'origine de leur disparition. Poulin et al. (1998, 2000) précisent qu'il faut des conditions (partiellement) anoxiques, qui se retrouvent par exemple dans le périphyton - ce biofilm à l'interface de l'eau et des sédiments - du Grand Morin (Flipo, 2005), siège de ce phénomène très variable. Ces résultats sont en accord avec les travaux de Birgand (2000) qui montraient que la dénitrification dans la colonne d'eau était très peu probable pour les petits bassins versants amont. Pour ces bassins, Vanrolleghem et al. (2001) indiquent qu'il suffit de prendre en compte les processus benthiques pour correctement simuler la qualité des eaux de surface.

A l'instar de l'ammonium, les variations journalières des concentrations en nitrates sont beaucoup plus faibles en période d'étiage que pendant le reste de l'année et les variations saisonnières sont très marquées (Flipo, 2005; Moatar, 2006; Poulin, 2006; Flipo et al., 2007a).

1.1.1.3 Les orthophosphates PO_4^{3-}

Principaux responsables de l'eutrophisation des rivières, les orthophosphates sont issus de la dégradation de la MO et des rejets de station d'épuration, ce qui explique leur plus forte concentration à proximité de zones présentant une forte densité de population et donc d'importants rejets d'eaux usées (Poulin et al., 1998; Garnier et al., 2005). Ensuite, ils sont préférentiellement consommés par la biomasse algale pour assurer sa croissance (Wetzel, 1983; Garnier et al., 1998; Poulin et al., 1998). Ils peuvent aussi, selon les conditions oxydo-réductrices du milieu, s'adsorber sur des matières minérales (Poulin et al., 2009). En tant que nutriments et parallèlement aux deux indicateurs précédents, les orthophosphates présentent une variabilité journalière plus faible en période d'étiage, et une variabilité saisonnière très marquée certaines années (Moatar, 2006).

1.1.1.4 L'oxygène dissous O_{2d}

La concentration en O_{2d} peut être vue comme l'indicateur de la santé d'un écosystème (Wetzel, 1983; Garnier & Billen, 2007) et constitue historiquement la première variable d'intérêt des modèles de qualité d'eau (Streeter and Phelps, 1925). En effet, l'oxygène dissous est la variable centrale de tout modèle déterministe ou phénoménologique décrivant la qualité des cours d'eau, étant donné que sa concentration est influencée par de nombreux phénomènes. Plusieurs

mécanismes sont en compétition : les auteurs (Even, 1995; Moatar, 1997; Even et al., 1998; Poulin et al., 1998, 2000; Even et al., 2000; Reichert, 2001; Reichert et al., 2001a; Even et al., 2004; Moatar, 2006) citent la photosynthèse par la biomasse algale et la ré-aération à l'interface eau-air comme principales sources d'oxygène, quand la dégradation de la MO et la respiration du phytoplancton et des bactéries constituent les principales consommations d'oxygène (Garnier & Billen, 2007). Le bilan en oxygène dissous fait donc intervenir de nombreux paramètres, tels le débit, la température de l'eau, le rayonnement et le pH (Moatar, 1997), et dépend fortement des phases successives de croissance et de sénescence des biomasses algales (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1998; Poulin, 2006) ainsi que du comportement des bactéries de la colonne d'eau (Even et al., 2000). Le comportement de ces dernières n'est pas encore tout à fait connu (Poulin, 2006); les rejets en MO biodégradable influencent également les concentrations en oxygène dissous (Billen et al., 1998a; Moatar, 2006). Moatar (2006) précise qu'une grande variabilité saisonnière est généralement observée, mais peut fortement varier d'une année à l'autre.

1.1.1.5 Les matières en suspension MES

A un instant donné et en un point donné, les MES peuvent être regroupées en trois classes : les MES se trouvant déjà dans la colonne d'eau, la couche de sédiments fluides déposée sur le lit du cours d'eau et susceptible d'être remise en suspension, et enfin les MES susceptibles d'arriver par érosion des sols ou par « curage » des réseaux d'assainissement (en raison des fortes vitesses de l'eau) (Poulin et al., 1998). Durant les périodes d'étiage, les MES ont tendance à sédimenter (Poulin et al., 1998, 2000), excepté lors du passage de péniches, la navigation étant l'une des causes principales de remise en suspension des MES - pour les cours d'eau navigables (Poulin et al., 1998, 2000; Even et al., 2000). Les crues peuvent également être à l'origine d'apports majeurs en particules érodées.

Actuellement, les MES font l'objet de nombreuses recherches, notamment parce qu'elles véhiculent des « micropolluants » adsorbés, et en raison de leur action défavorable envers la faune aquatique : elles réduisent l'éclairement et donc la photosynthèse planctonique, et modifient les habitats en colmatant les fonds et les berges (Moatar, 2006). Enfin, Moatar (2006) avance que la concentration en MES dépend essentiellement du régime de transport.

1.1.2 Le modèle déterministe PROSE

PROSE (Even, 1995; Even et al., 1998, 2004; Flipo et al., 2004; Flipo, 2005) est un modèle déterministe qui reproduit l'hydraulique et le transport sédimentaire sur environ 250 km du linéaire de la Seine, ainsi que l'ensemble des processus biogéochimiques que ce fleuve accueille. Ce modèle développé au Centre de Géosciences de l'École des Mines de Paris est ici brièvement présenté. Le modèle PROSE est composé de trois modules : hydrodynamique, transport et biogéochimique.

Le module hydrodynamique est basé sur une forme 1D (longitudinale) des équations de Saint-Venant, résolue par la méthode des différences finies. Le module de transport simule l'advection et la dispersion des substances conservatives et réactives, qu'elles soient dissoutes ou particulaires. Le modèle biogéochimique consiste en une adaptation du modèle RIVE (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995). Une description plus détaillée peut être trouvée en annexe D.

Le schéma conceptuel est fondé sur une simulation à échelle macroscopique de la dynamique des micro-organismes qui gouverne la transformation de la plupart des constituants (MO, nutriments, oxygène dissous). L'idée principale est que les processus biologiques restent toujours identiques, mais sont stimulés différemment en fonction des conditions environnementales, ce qui conduit à

différents états de l'hydrosystème (Reichert et al., 2001b; Billen et al., 2005).

Le schéma conceptuel utilisé pour modéliser la dynamique des producteurs primaires a été développé par Lancelot et al. (1991). Il se base sur l'interprétation d'expériences consistant à introduire du carbone marqué dans plusieurs organismes cellulaires. L'évolution de la matière organique (particulaire et dissoute) et des populations de bactéries hétérotrophes (qui se nourrissent de constituants organiques) est basée sur le modèle HSB de Billen and Servais (1989). Le modèle RIVE, décrivant les principaux processus biologiques, a été appliqué avec succès à de nombreuses rivières du bassin de la Seine (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995; Even et al., 1998; Billen et al., 2001; Even et al., 2004; Flipo et al., 2004; Garnier et al., 2005; Sferratore et al., 2005; Poulin, 2006; Even et al., 2007; Flipo et al., 2007c) ainsi qu'à d'autres bassins, parmi lesquels le Danube (Garnier et al., 2002), le Schelde (Billen et al., 2005) et la Rivière Rouge (Quynh et al., 2005). Il a ensuite été adapté pour simuler le comportement du périphyton (Flipo et al., 2004), dominant dans les rivières à faible profondeur. A des fins de modélisation, la rivière est divisée en trois compartiments : la colonne d'eau, les sédiments et le périphyton. La colonne d'eau peut échanger des matières en suspension avec les couches benthiques à travers la sédimentation, l'érosion, les pertes permanentes et l'arrachage.

Le modèle est initialisé en amont par des données journalières fournies par VEOLIA WATER (cf. §2.2.3) discrétisées selon le pas de calcul fixé (généralement 5 ou 10 minutes). En sortie, PROSE peut donc fournir une résolution temporelle au mieux égale au pas de calcul, ainsi qu'une résolution spatiale de quelques centaines de mètres, voire moins à proximité des singularités. Chaque point du réseau hydrographique est repéré par un point kilométrique (« pk [km] »), coordonnée curviligne définie par rapport à l'aval du domaine d'étude. Le système de coordonnées est continu et croissant d'amont en aval, et lors de séparations en deux bras qui se rejoignent ensuite, c'est le chemin le plus long qui sera continu, tandis que l'autre présentera une discontinuité à la confluence suivante. Par exemple, pour le modèle Seine, le pk aval est défini à Honfleur avec une valeur de 1000 km. Dans ce système de coordonnées curvilignes, il existe toujours un chemin continu, et les sources présentent un pk différent de zéro : $pk = 1000 - l$ si l est la longueur du cours d'eau. A noter également que chaque valeur ponctuelle fournie par le modèle est en réalité une moyenne calculée sur la section transversale de la rivière au pk considéré.

1.2 Modélisation géostatistique

Cinq modèles géostatistiques valides sur graphe, et dès lors susceptibles d'être applicables sur un réseau hydrographique, sont présentés dans cette section. Le premier peut paraître inattendu dans un tel contexte, étant donné qu'il s'intéresse à la variabilité spatiale des caractéristiques des fruits dans un arbre. Cependant, l'arbre étant représenté par un graphe non orienté, ce modèle pourrait également être candidat pour l'application au réseau hydrographique. Les quatre autres modèles sont spécifiques à la topologie de réseau hydrographique et donc de graphe orienté, même si leurs applications sont variées.

1.2.1 Arbres fruitiers (Augeron et al., 1993)

Les auteurs de cet article ont examiné la caractérisation de la qualité de fruits, ou du « statut nutritionnel » d'un arbre fruitier. Le principal problème réside dans le schéma d'échantillonnage à adopter pour obtenir une estimation réaliste de l'acidité des fruits d'un arbre, de leur taille, ou encore de leur teneur en sucre. Leur idée est de calculer un variogramme pour chaque variable mesurée, à partir d'un jeu de données exhaustif, puis de déterminer un schéma d'échantillonnage

optimal, et de regarder si le variogramme obtenu pour un arbre est applicable ou valide pour un autre arbre de mêmes âge et variété, cultivé dans des conditions analogues. Les deux arbres retenus pour cette expérimentation sont des pêchers, pour lesquels l'ensemble des fruits a été analysé.

Afin de prendre en compte la structure de graphe que tout arbre présente, quatre distances ont été définies pour exprimer la distance entre deux fruits - nécessaire au calcul du variogramme. La première, D1, est la distance métrique entre les fruits le long des branches, tandis que la deuxième, D2, est le nombre de « rameaux » reliant les deux fruits. (Les « rameaux » sont équivalents aux biefs d'un réseau hydrographique : il s'agit de segments reliant deux singularités, celles-ci pouvant être une fourche ou un pédoncule.)

Les deux autres distances, dites ultramétriques, se réfèrent à la structure hiérarchique de l'arbre : la distance D3 est le niveau « du plus petit ancêtre commun » lorsque les branches des extrémités se voient attribuer le niveau 1, et la distance D4 est « le plus petit âge commun » si les plus jeunes branches ont un âge ultramétrique égal à 1.

Les variogrammes calculés à l'aide de ces quatre distances présentent grossièrement la même allure et apparaissent stationnaires. Les auteurs supposent également que les fonctions aléatoires définissant les caractéristiques des fruits présentent une distribution gaussienne.

Toutefois, les deux dernières distances étant plus difficiles à appliquer en pratique, étant donné qu'elles nécessitent une description complète de l'arbre au préalable, les auteurs recommandent les deux premières (D1 et D2). En effet, outre cette commodité pratique, les distances D1 et D2 fournissent, lors du krigeage à partir d'un tiers des données, des variances d'estimation autrement plus faibles que les deux autres.

Après avoir retenu la distance D2, le modèle de variogramme obtenu pour le premier arbre a été utilisé pour estimer les caractéristiques des fruits du deuxième arbre (à partir d'un tiers des données également), avec succès : les écarts résiduels observés sont très semblables à ceux obtenus pour le premier arbre. Les auteurs insistent cependant sur le fait que les deux arbres sont de même variété, ont été plantés la même année et sont cultivés dans les mêmes conditions.

L'apport du krigeage par rapport à une simple moyenne arithmétique est analysé pour des estimations sur des supports croissants. Leur principal résultat est que, par rapport à la moyenne arithmétique, le krigeage est d'autant plus intéressant que le support est petit et le taux d'échantillonnage faible, la moyenne arithmétique donnant une aussi bonne estimation d'une caractéristique quelconque au niveau d'un arbre entier.

1.2.2 D'aval en amont (Monestiez et al., 2005; Bailly et al., 2006)

L'objectif de ces auteurs est de simuler la distribution spatiale de caractéristiques locales le long d'un réseau de drainage modélisé par un graphe (ou arbre) orienté. Ils espèrent ainsi modéliser ces caractéristiques aussi bien aux confluences (ou noeuds du graphe) que sur les « segments » joignant ces confluences.

Par rapport à l'article précédent, qui considérait un arbre non orienté, il s'agit de revoir tout d'abord l'hypothèse de stationnarité, et ensuite l'ajustement et la modélisation d'une covariance ou d'un variogramme expérimental(e).

Le réseau de drainage est arbitrairement décomposé en vertex (sources, confluences et exutoire) et segments (biefs) numérotés de l'exutoire vers les sources, mais les chemins reliant deux points ne sont définis qu'au fil de l'eau selon une abscisse curviligne, les points non reliés au fil de l'eau étant éloignés d'une distance infinie. Une rivière étant un chemin reliant une source à une confluence, deux rivières sont dites parallèles lorsqu'elles ne sont pas reliées au fil de l'eau.

L'hypothèse de stationnarité n'étant plus forcément valable sur un support arborescent, les auteurs ont adopté une **hypothèse d'indépendance conditionnelle** entre rivières parallèles : deux variables aléatoires définies sur des rivières parallèles sont indépendantes si la fonction aléatoire caractérisant leur partie aval commune est connue. Autrement dit, si s et s' sont deux points situés sur des rivières parallèles, et si $\Gamma_{ss'}$ désigne la partie aval commune à ces rivières (Fig. 1.1), alors les deux lois de distribution conditionnelle suivantes sont égales : $\mathcal{L}(Z(s)|Z(s'), Z(\Gamma_{ss'})) = \mathcal{L}(Z(s)|Z(\Gamma_{ss'}))$.

Cette hypothèse, particulièrement bien adaptée aux problèmes de débits et de flux de pollution, étant donné qu'elle découle de l'orientation de l'arbre, est aussi dénommée « hypothèse de causalité avale ».

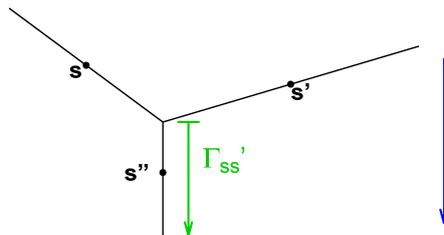


FIGURE 1.1 – Schématisation d'un réseau hydrographique simplifié.

Les auteurs présentent deux modèles. Dans le cas stationnaire, la covariance n'est définie qu'au fil de l'eau. La covariance entre deux points s et s' appartenant à des rivières parallèles n'est pas nulle et ne s'exprime pas simplement en fonction des localisations s et s' ; seule la covariance conditionnelle $Cov(Z(s), Z(s')|Z(s''))$, où $Z(s'') \in \Gamma_{ss'}$, est nulle. Lorsque la variable étudiée n'est pas stationnaire, les auteurs proposent un modèle avec une dérive, de manière à se ramener à des résidus stationnaires supposés gaussiens.

Selon le processus physique étudié, plusieurs distances permettant de définir la dérive en tout point sont envisagées : la distance du point à l'exutoire, la distance maximale du point à une source, ou encore la distance cumulée en amont du point. Une fois la distance choisie, une simulation séquentielle de la variable aléatoire est réalisée, en partant de la rivière principale (celle qui relie l'exutoire à une source) et en simulant progressivement des points appartenant à des rivières plus en amont. Cette procédure réitérée de l'exutoire vers l'amont permet d'obtenir une simulation en tout point du réseau hydrographique, et particulièrement en des points prédéfinis pour combler d'éventuelles lacunes des données.

Les auteurs ont appliqué leur modèle à la largeur de fossé d'un réseau artificiel de drainage, avec, comme distance, la distance amont cumulée. Une seconde application à la largeur du fluvisol a également été publiée (Monestiez et al., 2005). La distance retenue est la distance curviligne « le long de l'axe hydrographique » et, les données présentant une distribution approximativement lognormale, une dérive de type $Z(s) = m(s) \exp(Y(s))$ a été modélisée.

En insistant sur l'adéquation de ce modèle aux variables continues et gaussiennes - donc liées au débit d'eau -, et en soulignant l'importance de la nature de la variable lors du choix de la dérive, les auteurs remarquent cependant que ce modèle ne peut être utilisé pour simuler des variables non gaussiennes telles que la couverture sédimentaire ou des variables qui dépendent de l'utilisation des terrains adjacents.

1.2.3 Top-Kriging (Skøien et al., 2006)

L'idée du « Top-Kriging » est d'améliorer le krigeage ordinaire en tenant compte de la différence de support des échantillons et de la variable à estimer. Ainsi, des mesures effectuées sur un affluent majeur ou sur la rivière principale ne présentent pas le même support, et ces supports « emboîtés » ou gigognes peuvent être pris en compte via leur discrétisation selon une grille de même maille. Le variogramme ponctuel (calculé à partir des points discrétisés en distance euclidienne) est ensuite régularisé (moyenné) selon les surfaces drainées respectives des deux rivières considérées.

L'application de ce modèle à une partie de deux réseaux hydrographiques autrichiens s'est avérée concluante, et a montré que le Top-Kriging était plus précis (au sens d'une erreur d'estimation moindre) et plus réaliste que le krigeage ordinaire. Les auteurs ne précisent toutefois pas comment le krigeage ordinaire a été effectué, mais sous-entendent des distances euclidiennes. Les variogrammes (ponctuels) ont été ajustés par moindres carrés selon un même modèle pour les deux méthodes, repris d'un article précédent.

Ce modèle, applicable à une structure arborescente, ne demande aucune hypothèse supplémentaire par rapport au krigeage ordinaire, telle que la stationnarité des variables ou encore concernant leur distribution. Les auteurs le recommandent pour l'estimation des variables liées au débit, telles que le débit moyen annuel, les caractéristiques des flux et d'étiage, les concentrations, la turbidité ou encore la température des cours d'eau.

1.2.4 Modèle d'apport (Bruno et al., 2001)

Le principe de ce modèle est que la valeur d'une variable en un point u d'un réseau hydrographique est égale à la valeur de cette même variable juste avant ce point augmentée d'un apport local $Y(u)$:

$$Z(u) = p_z Z(u - du) + (1 - p_z) Y(u) \quad (1.1)$$

Les poids affectés à chacun des termes permettent de faire varier la proportion d'apport en fonction des phénomènes ou des variables étudiées ; ils dépendent des variables du problème. Les auteurs ont choisi des poids dépendant du point u considéré : $p_z = p_z(u - du)$.

Ce modèle combine deux systèmes de coordonnées : l'abscisse méandreuse u (distance curviligne amont cumulée) pour exprimer les variables à modéliser et éventuellement quelques données d'une part, et les coordonnées euclidiennes (x, y) pour exprimer les variables auxiliaires (occupation du sol, surface drainée, ...) de l'autre. Les abscisses méandreuses peuvent également être exprimées dans l'espace euclidien.

Lorsque la variable auxiliaire décrivant les propriétés du sol est stationnaire, la variable décrivant l'apport local l'est également ; on peut donc calculer sa moyenne, sa variance, et sa covariance, et estimer cette variable en tout point de l'espace euclidien. Par contre, la variable d'intérêt $Z(u)$, uniquement définie sur le réseau hydrographique, présente une moyenne constante et une variance variable, et n'est donc pas stationnaire.

A la confluence de deux rivières, on somme l'état de chaque rivière juste avant la confluence, ainsi que l'apport à la confluence, toujours avec des poids relatifs de somme unité.

En résumé, ce modèle est fondé sur quatre hypothèses :

- le lien entre les valeurs de la variable d'intérêt amont et aval est linéaire ;
- le principe de conservation de la masse est applicable ;

- la variable décrivant l'apport local est stationnaire d'ordre 2 ;
- les poids affectés aux différents termes définissant la variable en un point sont fonction de l'abscisse méandreuse.

Ce modèle a été appliqué à la teneur en métaux des sédiments formant le lit des rivières, dans le but de reconstituer la distribution régionale des métaux à partir d'échantillons prélevés dans ces sédiments.

L'évolution de la variance des teneurs le long des cours d'eau a pu être vérifiée, et associée à une régularisation progressive des variables, qui se stabilisent autour de la moyenne (constante). Le support des variables étudiées ($Z(u)$) augmente donc au fil de l'eau, contrairement aux apports locaux calculés ($Y(u)$) qui n'affichent aucune corrélation avec leur support.

Un krigeage ordinaire d'apports calculés permet de reconstituer la variable « d'apport local » rebaptisée « indice de concentration locale » (stationnaire) sur l'entièreté du champ considéré, dans l'espace euclidien, et donc a fortiori sur les abscisses méandreuses.

Ce modèle paraît très adapté aux variables liées au sol, qui présentent une structure dans l'espace euclidien. Les auteurs pensent qu'il pourrait être adapté à des apports non-stationnaires via les FAI-k, mais précisent que cela devra faire l'objet de recherches plus spécifiques.

1.2.5 D'amont en aval (Bernard-Michel, 2006)

Le modèle proposé dans la thèse de C. Bernard-Michel généralise celui de Ver Hoef et al. (2006), qui suggéraient une pondération des biefs (ou segments reliant deux singularités) de manière à conserver la stationnarité des variances aux confluences. En partant de la source et en adoptant l'hypothèse d'indépendance de deux rivières en amont d'une confluence, les auteurs construisent ainsi un modèle stationnaire par bief avec des discontinuités aux confluences.

Les pondérations obtenues n'étant pas toujours cohérentes ou réalistes, Bernard-Michel (2006) propose des poids choisis non plus pour maintenir la stationnarité, mais bien pour respecter l'additivité des débits ou flux aux confluences ; sur un bief, les concentrations ne sont plus nécessairement stationnaires.

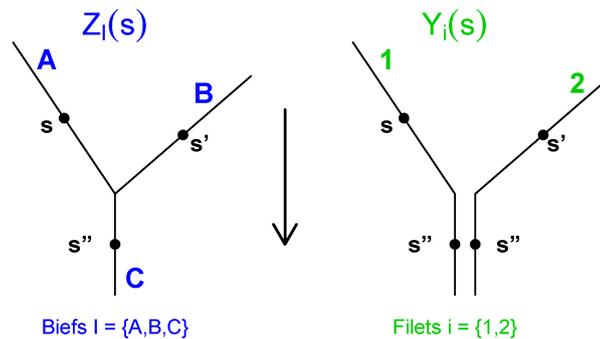


FIGURE 1.2 – Principe de décomposition d'un réseau hydrographique en filets.

Dès lors, une décomposition du réseau hydrographique en filets élémentaires Y_i reliant chaque source i à l'exutoire (Fig. 1.2), combinée à une pondération réaliste permet de déterminer un modèle de covariance non stationnaire valide entre deux points reliés au fil de l'eau. Plusieurs modèles peuvent découler de cette démarche, selon les hypothèses retenues sur l'indépendance ou la stationnarité des filets. Par exemple, si $Z_I(s)$ est la concentration associée au bief I et $Y_i(s)$ celle associée au filet i au même point s , sous hypothèse d'indépendance des filets, les

concentrations $Z_I(s)$ s'expriment en fonction des $Y_i(s)$: $Z_A(s) = Y_1(s)$, $Z_B(s') = Y_2(s')$, et $Z_C(s'') = w_A Y_1(s'') + w_B Y_2(s'')$.

Si ce modèle semble résoudre les principales difficultés de l'estimation le long des cours d'eau, son inférence en soulève d'autres. En effet, outre le manque de données disponibles sur un bief, la valeur de la variable d'intérêt (et mesurée) en un point est une combinaison linéaire des filets passant par ce point : les filets ne sont donc pas accessibles en pratique, si ce n'est à proximité de leur source.

Ce modèle a été testé pour des filets supposés indépendants et stationnaires, de même espérance m et variance σ^2 en vue d'estimer des débits spécifiques (débit ramené à la surface drainée, afin de réduire la non-stationnarité) et flux spécifiques de nitrates. Cependant, l'hypothèse de stationnarité des filets risque de ne pas être respectée, étant donné que des facteurs influents (pluie, occupation du sol, ...) n'ont pas été pris en compte.

Par ailleurs, pour pallier le manque d'information concernant les filets, les mesures effectuées à proximité des différentes sources ont été regroupées (selon leur distance à la source) et considérées comme plusieurs réalisations de la même fonction aléatoire. Les biefs de plus grand ordre de Strahler¹ ont été regroupés en fonction de leur surface drainée.

De manière générale, le fait de considérer des débits spécifiques et flux spécifiques diminue sensiblement la non-stationnarité, même si les résultats sont plus encourageants pour les flux que pour les débits. Par contre, le calage du modèle n'a pu être réalisé, en raison du manque de mesures mais peut-être également de corrélations entre filets élémentaires non prises en compte.

1.2.6 Synthèse

Le premier modèle, appliqué aux arbres fruitiers, a surtout été détaillé pour illustrer les problèmes posés par la structure de graphe tels que le choix de la distance. En effet, le réseau hydrographique présente une orientation d'amont en aval dont le modèle retenu doit tenir compte. Les quatre autres modèles satisfont à cette condition ; leurs principales caractéristiques sont comparées au tableau 1.1. Le modèle d'aval en amont est indiqué pour des variables continues aux

	D'aval en amont	Top-Kriging	Apports locaux	D'amont en aval
Continuité	oui	non	non	non
Indépendance	oui, conditionnelle	possible	possible	possible
Stationnarité	possible	non	non	possible
Construction	aval → amont	amont → aval	amont → aval	amont → aval

TABLE 1.1 – *Comparaison des principales caractéristiques des modèles géostatistiques présentés : **continuité** aux confluences, **indépendance** à l'amont des confluences, **stationnarité** par bief, sens de **construction** du modèle.*

confluences, ce qui n'est généralement pas observé pour les nutriments. De même, le Top-Kriging est essentiellement recommandé pour l'estimation de variables liées au débit, étant donné qu'il permet de tenir compte des différences de support.

Ensuite, le modèle d'apport paraît très adapté aux variables liées au sol, qui présentent une structure dans l'espace euclidien, et pourrait certainement être étendu à des apports non

1. Méthode de hiérarchisation des biefs d'un réseau hydrographique : tout bief dépourvu d'affluent se voit attribuer l'ordre 1, tandis qu'un bief d'ordre $n + 1$ est issu de la confluence de deux biefs d'ordre n .

stationnaires. Cependant, si ce modèle est bien adapté à l'étude de métaux dans les sédiments, le principe de conservation de la masse n'est plus nécessairement valable en ce qui concerne les nutriments et a fortiori l'oxygène dissous dans les cours d'eau, au vu des nombreuses interactions qu'ils accueillent (cf. §1.1.1).

Enfin, le dernier modèle semble convaincant pour l'estimation des débits, des concentrations et des flux, bien qu'il fasse également intervenir la conservation de la masse, mais uniquement aux confluences. En outre, aucune hypothèse de stationnarité ou de continuité des variables n'est requise. Ce « modèle à filets », le plus général des modèles présentés, est retenu pour ce travail ; il est détaillé au chapitre 7. Les questions relatives à son inférence, laissées en suspens en raison d'un manque de données, ainsi que sa mise en oeuvre seront examinées.

Chapitre 2

Les données : mesures et PROSE

Ce chapitre décrit les différents ensembles de données disponibles sur le domaine modélisé par PROSE et utilisés pour ce travail. Les stations présentées sont celles actives durant l'année 2003. Seule cette année a été considérée, étant donné que les résultats de PROSE étaient uniquement disponibles pour l'année 2003 au début de la thèse. 2003 étant une année de canicule, il est légitime de se demander si celle-ci a entraîné des répercussions sur la qualité des eaux de surface. C'est pourquoi après une brève présentation des stations informant le réseau considéré, ce chapitre s'ouvre sur une comparaison sommaire de mesures effectuées en 2001, 2002, et 2003, afin d'apporter un élément de réponse à cette question.

Le réseau modélisé par PROSE est constitué d'une portion de réseau hydrographique parsemée de petits îlots. Chacun résulte d'une séparation de la Seine en deux bras, qui se rejoignent ensuite pour englober l'îlot. Au vu de l'échelle de travail adoptée, il n'a pas paru judicieux de considérer ces séparations et confluences successives, qui seront donc négligées dans la suite.

Plusieurs ensembles de mesures avec différentes fréquences d'échantillonnage sont disponibles le long du réseau considéré :

- à l'instar de toute rivière de France, la Marne et la Seine sont informées par le **Réseau National de Bassin** (RNB, actuellement renommé Réseau de Contrôle - RC), qui fournit environ douze mesures annuelles en chacune de ses stations ;
- le **Syndicat Interdépartemental d'Assainissement de l'Agglomération Parisienne** (SIAAP) dispose d'une quinzaine de stations où des mesures hebdomadaires sont effectuées ;
- **VEOLIA WATER** mesure quotidiennement la qualité de l'eau en trois stations ;

Outre ces trois ensembles de mesures issues des stations dont la localisation est reprise à la figure 2.1, les résultats du modèle PROSE sont utilisés comme un dernier ensemble de données, très dense en comparaison des précédents. Ces sorties du modèle seront désormais dénommées « valeurs PROSE ».

Les valeurs PROSE ainsi que les mesures du RNB comprennent les débits instantanés et les concentrations en cinq nutriments désignés par la Directive Cadre sur l'Eau (DCE) comme indicateurs physico-chimiques soutenant la biologie, à savoir les nitrates (NO_3^-), l'ammonium (NH_4^+), les orthophosphates (PO_4^{3-}), l'oxygène dissous (O_{2d}) et les matières en suspension (MES). En revanche, seules les mesures de concentration en nitrates et en oxygène dissous fournies par le SIAAP et VEOLIA WATER sont utilisées et donc présentées ici.

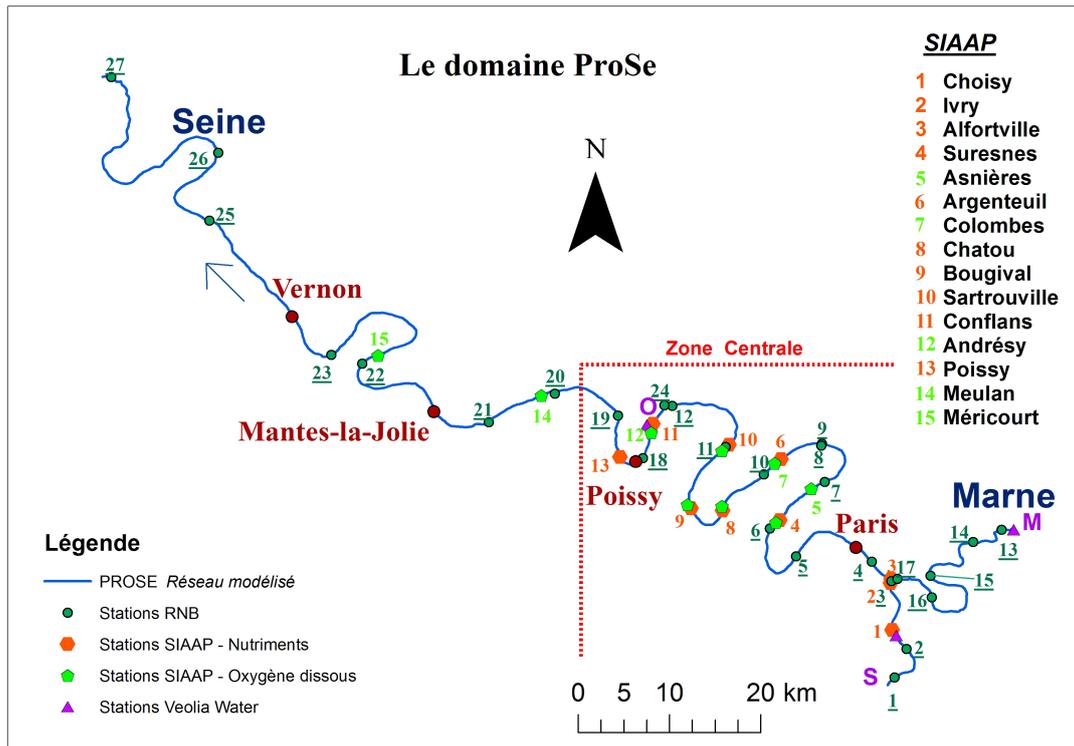


FIGURE 2.1 – Le réseau modélisé par PROSE et les ensembles de données disponibles.

2.1 2003, une année particulière ?

Tout d’abord, essayons d’apprécier l’influence de la canicule sur les mesures de concentration en nitrates, via une comparaison des mesures réalisées en 2001, 2002 et 2003, disponibles en la plupart des stations du SIAAP. Toutes stations confondues, les coefficients de corrélation entre les mesures effectuées la même semaine en 2001 et 2003, et 2002 et 2003 (respectivement $\rho = 0.34$ et $\rho = 0.58$) sont plus élevés que celui obtenu entre les mesures effectuées en 2001 et 2002 ($\rho = 0.16$). Les nuages de corrélation par station conduisent aux mêmes observations (Fig. 2.2 pour l’exemple de Bougival et Tab. 2.1), à savoir que la corrélation des mesures de concentration en nitrates effectuées en 2003 avec celles des années précédentes est clairement plus forte qu’entre les mesures effectuées en 2001 et 2002. En outre, les minima et maxima sont très proches pour les trois années, ce qui va à l’encontre de l’hypothèse de singularité des mesures de l’année caniculaire.

ρ	1	3	4	6	8	9	10	11	13
2001-2002	0.16	0.43	0.11	0	-0.01	0.01	0.05	0.01	-0.10
2002-2003	0.67	0.54	0.44	0.36	0.47	0.50	0.49	0.61	0.37
2001-2003	0.38	0.36	0.31	0.28	0.28	0.29	0.30	0.32	0.07

TABLE 2.1 – Coefficients de corrélation ρ entre les concentrations en nitrates mesurées en 2001, 2002, et 2003, en chacune des stations du SIAAP (cf. Fig. 2.1).

L’évolution au fil de l’eau des moyennes et écarts-type relatifs à chaque année sont repris à la figure 2.3. En 2003, les concentrations moyennes sur la Seine sont très proches de celles mesurées en 2002, alors qu’en 2001 de plus faibles concentrations moyennes ont été enregistrées. Sur la Marne

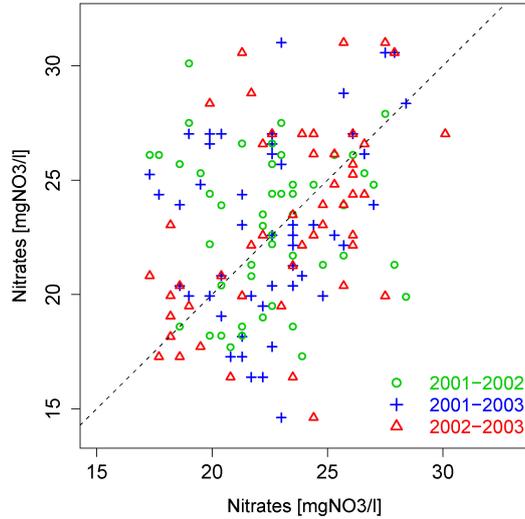


FIGURE 2.2 – *Corrélation entre les mesures de concentration en nitrates effectuées la même semaine en 2001, 2002 et 2003 à la station du SIAAP de Bougival; les tirets représentent la première bissectrice.*

en revanche, les concentrations moyennes mesurées en 2001 et 2002 sont égales et bien supérieures à celle de 2003. Les écarts-type semblent plus variables d'une année à l'autre, augmentant globalement sur la Seine entre 2001 et 2003. Les concentrations de cette dernière année présentent un écart-type sensiblement plus élevé que les précédentes sur la Seine, mais pas sur la Marne. Aucune différence systématique, qui trahirait l'influence de la canicule, n'est donc observée pour les concentrations en nitrates mesurées en 2003.

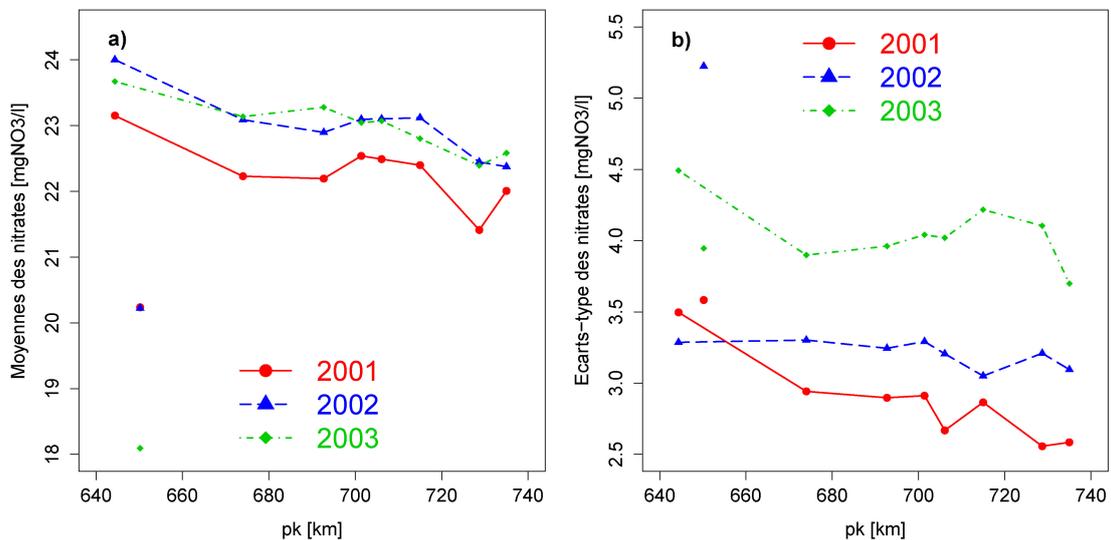


FIGURE 2.3 – *a) Moyennes annuelles et b) écarts-type des concentrations en nitrates mesurées par le SIAAP pour les années 2001 à 2003. Les points reliés sont relatifs aux stations situées sur la Seine, tandis que le point isolé correspond à l'unique station informant la Marne.*

Enfin, les mesures des autres nutriments semblent très peu corrélées d'année en année, rendant délicate l'appréciation de la particularité de l'année 2003.

Bien que cette simple comparaison soit fondée sur trois années seulement, et conscients que de plus amples investigations seraient nécessaires pour obtenir une réponse rigoureuse à la question posée, nous admettons que les mesures effectuées en 2003 ne présentent pas de particularités flagrantes imputables à la canicule.

2.2 Différents ensembles de mesures

2.2.1 Les mesures du RNB

Les mesures du RNB présentées ici nous ont été communiquées par le Service de Navigation de la Seine ; outre les mesures de concentration en nutriments, elles comprennent également des mesures du débit instantané. Le fait de disposer des débits et concentrations en un même point est assez exceptionnel, les débits étant généralement mesurés par des stations de jaugeage distinctes des stations affectées à la qualité de l'eau.

Le réseau modélisé par PROSE est informé par 27 stations du RNB (Fig.2.1) ; la station 24, sur l'Oise, ainsi que la station 9, sur un bras parallèle à celui qui comporte la station 8, ne sont pas retenues étant donné que l'Oise n'est pas modélisée par PROSE et que les séparations en deux bras sont négligées. Les stations du RNB utilisées sont donc au nombre de 25 ; chacune d'elles comporte entre 10 et 48 mesures régulièrement réparties durant l'année 2003. Les mesures sont effectuées en laboratoire à partir d'échantillons ponctuels instantanés prélevés manuellement.

2.2.2 Les mesures du SIAAP

Le SIAAP dispose d'une vingtaine de stations dans l'agglomération parisienne, qui fournissent des mesures de la qualité des eaux de la Seine, de la Marne et de l'Oise. Seules sont considérées les concentrations en nitrates et en oxygène dissous, obtenues par des protocoles de mesure très différents. En effet, un suivi hebdomadaire des concentrations en nitrates permet d'appréhender leur évolution, alors que les cycles journaliers de l'oxygène dissous justifient des mesures en continu. Si certaines stations sont équipées pour mesurer à la fois les concentrations en nitrates et en oxygène dissous, la plupart sont cependant spécifiques soit à l'oxygène dissous, soit aux autres nutriments.

Les concentrations en nitrates sont mesurées en laboratoire par des experts, à partir d'échantillons prélevés manuellement. Ces échantillons peuvent être issus d'un seul prélèvement au centre du cours d'eau ou résulter du mélange de trois échantillons prélevés respectivement en rive gauche, rive droite et au centre du cours d'eau ; nous admettons qu'ils sont représentatifs de la section transversale du cours d'eau. Les mesures sont hebdomadaires, synchrones (aux mêmes dates) sur un même tronçon de rivière ou bief, et considérées comme ponctuelles dans le temps et l'espace. Les dix stations retenues (neuf sur la Seine et une sur la Marne) sont représentées par des hexagones oranges sur la figure 2.1 et accueillent entre 49 et 52 mesures pour l'année 2003.

Les concentrations en oxygène dissous sont mesurées automatiquement en continu : des valeurs ponctuelles sont disponibles toutes les 15 minutes. Il est rare que l'on dispose d'une telle densité d'échantillonnage pour l'année entière, les début et fin d'année n'étant généralement pas informés. Le réseau considéré est informé par neuf stations situées le long de la Seine, fournissant de 858 à 26963 valeurs pour l'année 2003 (une année complète correspondant à 35041 valeurs). Outre les stations représentées par des pentagones verts sur la figure 2.1, les stations de Suresnes, Chatou, Bougival et Sartrouville fournissent également des mesures d'oxygène dissous.

2.2.3 Les mesures de VEOLIA WATER

Les trois stations de VEOLIA WATER délimitent l'amont du réseau pour les trois rivières principales, la Seine¹, la Marne, et l'Oise (Fig. 2.1). En effet, la fréquence journalière des mesures de VEOLIA WATER est exploitée pour les conditions aux limites amont du modèle PROSE. Chaque station fournit des concentrations moyennes journalières, notamment en nitrates et en oxygène dissous, calculées à partir de mesures ponctuelles automatiques effectuées à une fréquence au moins horaire. Les mesures de VEOLIA WATER se présentent donc sous la forme de données ponctuelles dans l'espace et régularisées (ou moyennées) dans le temps.

2.3 Les résultats du modèle PROSE

2.3.1 Les valeurs PROSE

Trois ensembles ont été constitués à partir des résultats du modèle PROSE, qui reprennent les concentrations des nutriments retenus ainsi que les débits instantanés. L'« ensemble initial » présente une grande densité temporelle, chaque point du réseau considéré étant informé toutes les 20 minutes. Pour des raisons techniques notamment, il n'a pas été possible de conserver une telle densité temporelle pour les deux autres ensembles, qui sont donc constitués de valeurs ponctuelles prises à midi et de valeurs horaires, respectivement. Les trois ensembles de valeurs PROSE présentent la même densité spatiale : deux points voisins sont éloignés au plus de 500 mètres. La grille spatiale du modèle PROSE n'est pas rigoureusement régulière ; elle est resserrée à proximité des singularités telles que les confluences ou rejets divers.

L'ensemble initial sera uniquement utilisé au chapitre 4 (§4.2) pour l'analyse exploratoire temporelle relative aux concentrations en nitrates. Nous y montrerons que les autres ensembles sont plus réalistes et dès lors plus pertinents pour la suite de l'étude ; **c'est donc à ces ensembles complémentaires**, constitués de valeurs ponctuelles à midi pour les nitrates, l'ammonium, les orthophosphates et les matières en suspension, et de valeurs horaires pour l'oxygène dissous et les débits instantanés, **que se réfèrent les valeurs PROSE dans tout le reste du document.**

PROSE modélisant les séparations en deux bras qui se rejoignent ensuite, négligés dans ce travail, les débits instantanés ont été reconstitués à partir des débits partiels, en gardant les coordonnées spatiales du bras le plus long. Les branches les plus courtes ne le sont que d'un ou deux points de discrétisation, ce qui correspond à environ 3% de la longueur totale du réseau.

De plus, les variations de débit entre une séparation et la confluence suivante sont tout à fait négligeables (de l'ordre de 0.01 m³/s, soit moins de 0.0001%). Au vu de l'échelle de travail adoptée, il paraît parfaitement raisonnable de négliger ces petites différences.

Les concentrations en nitrates sont également très proches sur deux bras parallèles, le plus grand écart enregistré étant de l'ordre de 2%. Le choix de négliger ces séparations, qui apparaît pleinement justifié pour les nitrates, ne l'est pas forcément pour d'autres indicateurs, tels que les matières en suspension, qui pourraient afficher des différences de concentrations plus importantes, selon la navigation par exemple.

1. En réalité, la station de VEOLIA WATER sur la Seine est localisée à Choisy, et les mesures sont « exportées » à Ablon, limite amont du domaine sur la Seine, pour initialiser le domaine. Les quelques kilomètres séparant ces deux villes (7.4 km exactement) sont négligés ; le paragraphe consacré à la variabilité spatiale (§4.3.2) montrera que cette approximation est tout à fait justifiée.

2.3.2 Les différents échantillonnages des valeurs PROSE

Les valeurs PROSE, qui présentent une densité spatiale et temporelle très importante, ont progressivement été échantillonnées pour obtenir des ensembles de données plus espacées, jusqu'à se rapprocher de l'échantillonnage qui caractérise les stations du RNB (Fig. 2.4).

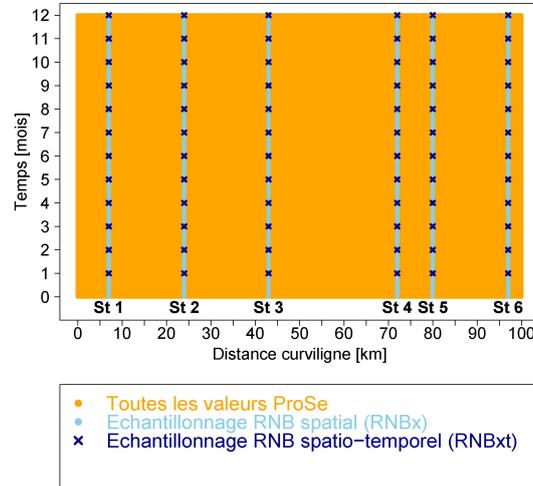


FIGURE 2.4 – Principe des différents échantillonnages des valeurs PROSE.

L'échantillonnage RNB spatial ne retient que les valeurs aux points kilométriques (« pk [km] ») des stations du RNB, soit une densité spatiale comparable à celle disponible en pratique. Les 365 valeurs ponctuelles à midi sont conservées en chacune des stations.

L'échantillonnage RNB spatio-temporel consiste, pour chacune des stations composant l'échantillonnage RNB spatial, à retenir uniquement les valeurs correspondant aux dates des mesures effectivement réalisées en cette station, soit environ douze valeurs ponctuelles par station.

Ces échantillonnages seront utilisés au chapitre 6. L'échantillonnage RNB spatial sera également utilisé aux chapitres 8, 9 et 10.

Chapitre 3

Discussion sur la relation concentrations - flux

3.1 Deux approches pour l'estimation spatiale des concentrations

Deux approches différentes peuvent être envisagées pour répondre à la question de la caractérisation de la qualité d'un cours d'eau, dont dépendent les grandeurs retenues.

Plaçons-nous en un point d'une rivière, et imaginons qu'un volume d'eau constant y soit prélevé puis analysé chaque semaine, par exemple pour en connaître la teneur en nutriments. La réglementation (cf. DCE) s'intéresse alors à la concentration annuelle moyenne en ce point, et à « l'état » correspondant (bon, moyen, mauvais) à cette concentration.

Par ailleurs, les hydrologues, qui affectionnent une approche physique des phénomènes, étudient non seulement les concentrations mais surtout les flux annuels - de nutriments, par exemple. Or, en un instant donné, le flux est défini comme le produit du débit par la concentration. Les concentrations n'étant pas additives, ce n'est plus la concentration moyenne annuelle qu'il faut considérer mais bien la moyenne des concentrations pondérées par les débits correspondants, pour obtenir un flux annuel moyen respectant cette définition.

Selon le point de vue adopté, la concentration annuelle considérée sera soit la moyenne arithmétique des concentrations (« **approche réglementaire** »), soit une moyenne pondérée par les débits (« **approche physique** »). A noter que, les débits étant généralement mesurés par des stations de jaugeage distinctes des stations de qualité, la concentration moyenne pondérée est habituellement inaccessible en pratique.

Les deux approches introduites temporellement, en cherchant une grandeur annuelle moyenne, sont également envisageables dans l'espace, en s'intéressant par exemple à une grandeur moyenne sur un tronçon de rivière ou sur une « masse d'eau » (DCE, 2007). Toutefois, cette thèse étant axée sur l'estimation géostatistique en tout point d'un réseau hydrographique, seules les grandeurs moyennes annuelles sont abordées dans ce chapitre.

Pour mieux comprendre ce chapitre et notamment la comparaison des variogrammes, le lecteur non familier avec la géostatistique pourra se référer à l'annexe A, §A.2.

3.2 Comparaison des calculs de concentration moyenne annuelle

Pour quantifier l'importance du choix de l'approche, nous comparons les deux calculs de concentration annuelle en nitrates le long du réseau modélisé par PROSE (moyenne arithmétique pour l'approche réglementaire et moyenne pondérée pour l'approche physique). Outre les valeurs PROSE, seules les mesures du RNB comprennent également des mesures du débit (cf. chapitre 2). Les concentrations moyennes en nitrates issues des deux approches sont donc confrontées pour ces deux ensembles de données.

3.2.1 Les valeurs PROSE

La figure 3.1 présente l'évolution sur le domaine des concentrations moyennes annuelles en nitrates calculées selon les deux approches, ainsi que leur nuage de corrélation. Jusqu'à un pk de 750 km, les moyennes pondérées sont systématiquement supérieures aux moyennes arithmétiques. Le nuage de corrélation est presque linéaire, le coefficient de corrélation étant très proche de l'unité ($\rho = 0.98$). Sa comparaison avec la première bissectrice confirme ce qui apparaît déjà sur la représentation des données : grosso modo, les moyennes pondérées varient entre 21.5 et 27.5 mgNO₃/l avec une variance de 3.34 (mgNO₃/l)² alors que les moyennes arithmétiques oscillent entre 19.5 et 30 mgNO₃/l et affichent une variance de 8.2 (mgNO₃/l)².

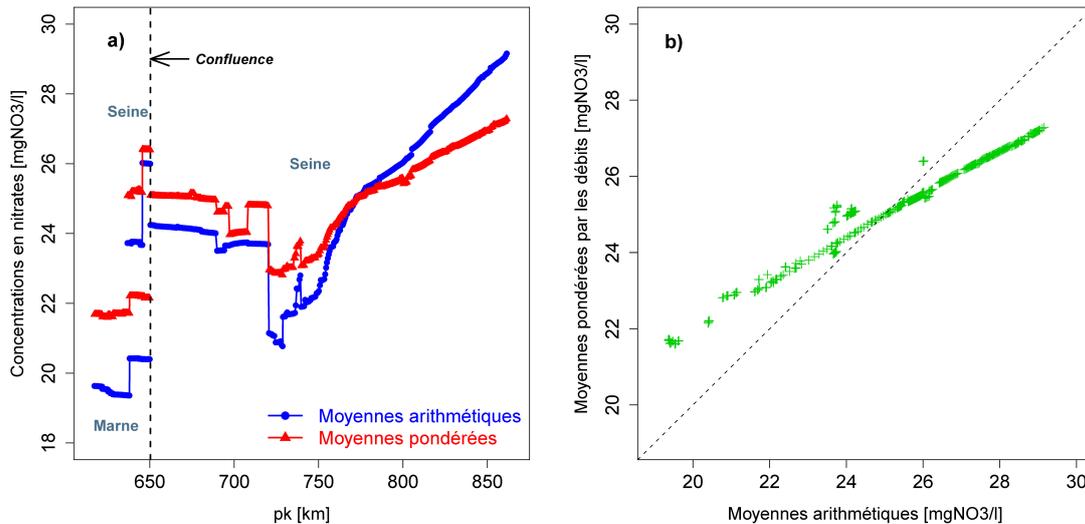


FIGURE 3.1 – a) Concentrations annuelles moyennes en nitrates (valeurs PROSE) le long du réseau modélisé, selon l'approche réglementaire (moyennes arithmétiques) et physique (moyennes pondérées). b) Nuage de corrélation entre les moyennes arithmétiques et pondérées.

Cette moindre variabilité des moyennes pondérées transparaît également sur les variogrammes spatiaux (Fig. 3.2), le variogramme relatif aux moyennes arithmétiques présentant systématiquement une variabilité bien plus importante que celui des moyennes pondérées. En effet, dans les trois cas de figure (sur la Marne avant la confluence, et sur la Seine avant et après la confluence), le palier atteint par le variogramme des moyennes arithmétiques vaut plus du double de celui qu'affiche le variogramme des moyennes pondérées. Cependant, tous les variogrammes relatifs à un même tronçon présentent une structure similaire, assez continue - aucun variogramme

ne présente d'effet de pépite notable -, ce qui, à l'instar du variogramme croisé, témoigne de la bonne corrélation spatiale entre les deux calculs.

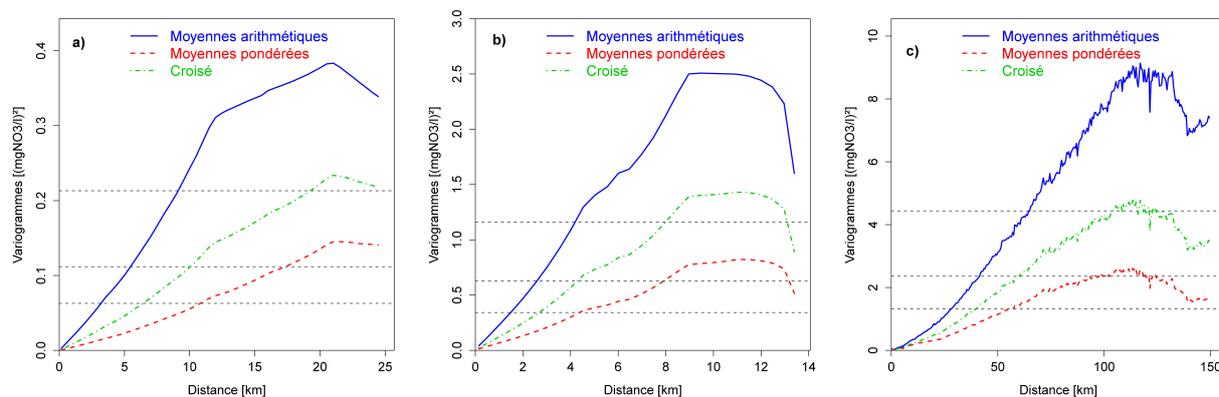


FIGURE 3.2 – Variogrammes spatiaux simples et croisé des concentrations annuelles en nitrates (valeurs PROSE) relatives à l'approche réglementaire (moyennes arithmétiques) et physique (moyennes pondérées), a) sur la Marne en amont de la confluence, b) sur la Seine en amont de la confluence, et c) sur la Seine en aval de la confluence.

La variabilité spatiale des concentrations annuelles en nitrates n'est pas identique sur les différents tronçons. En admettant leur stationnarité, différentes portées seraient ajustées selon le tronçon considéré, avec des amplitudes de différent ordre de grandeur.

La pondération des valeurs PROSE de concentration en nitrates par les débits correspondants conduit donc à des moyennes annuelles :

- plus élevées ;
- qui présentent une variabilité spatiale moindre.

Pour comprendre ces observations, examinons les courbes et le nuage de corrélation des débits instantanés et des concentrations en un point. Ces courbes étant similaires aux différentes stations, la station 6 du RNB est considérée pour l'exemple (Fig. 3.3).

L'augmentation des moyennes induite par la pondération s'explique aisément par l'allure des débits, plus importants durant le premier trimestre, lorsque de plus fortes concentrations sont mesurées, et très faibles pour le reste de l'année. Le nuage de corrélation, qui montre que la relation liant les débits aux concentrations en nitrates n'est pas linéaire, confirme cette explication : les débits importants sont associés à des concentrations moyennes à élevées. La pondération accorde donc plus de poids aux fortes concentrations, ce qui se traduit par une moyenne annuelle supérieure à la moyenne arithmétique. Le cas des valeurs PROSE sur la partie aval du domaine, en désaccord avec ces observations, sera développé au chapitre 4 (§4.5.1).

L'atténuation de la variabilité spatiale des moyennes annuelles pondérées provient également de l'allure des débits, identique tout au long du réseau. En revanche, les concentrations en nitrates varient au fil de l'eau, avec une augmentation - ou diminution - intervenant à partir du second trimestre et principalement en été, lorsque les débits sont faibles. Les différences de concentrations les plus importantes, responsables de la variabilité spatiale des moyennes arithmétiques, se voient dès lors associées à des débits faibles, alors que les légères différences du premier trimestre bénéficient d'une pondération forte.

En effet, si $C(x_i, t_\alpha)$ est la concentration au point x_i à l'instant t_α et $\bar{C}(t_\alpha)$ la concentration

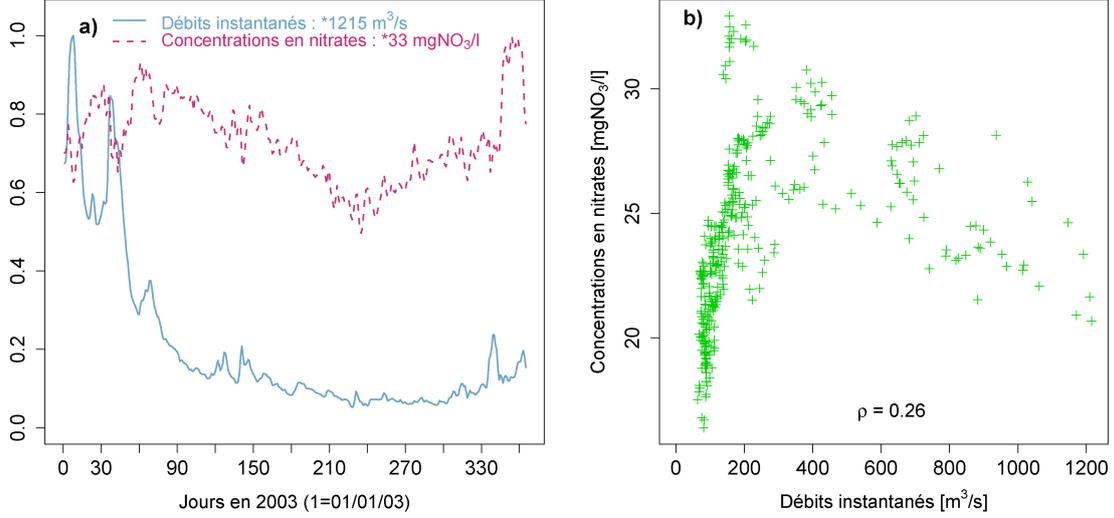


FIGURE 3.3 – a) Superposition des valeurs PROSE de débit et de concentrations en nitrates, rapportées au maximum. b) Nuage de corrélation entre les valeurs PROSE de débit et de concentrations en nitrates, où ρ est le coefficient de corrélation linéaire. Exemple de la station 6 du RNB.

moyenne sur le réseau à l'instant t_α , la variance spatiale des moyennes arithmétiques s'écrit

$$\begin{aligned} VAR &= \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \left[\frac{1}{N_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} C(x_i, t_\alpha) - \frac{1}{N_\alpha N_i} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \sum_{i=1}^{N_i} C(x_i, t_\alpha) \right]^2 \\ &= \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \left[\frac{1}{N_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} (C(x_i, t_\alpha) - \bar{C}(t_\alpha)) \right]^2 \end{aligned}$$

D'autre part, en notant $Q(x_i, t_\alpha)$ le débit au point x_i à l'instant t_α , et $Q_t(x_i)$ le débit total annuel au point x_i , la pondération des concentrations instantanées s'écrit $p_\alpha^i = Q(x_i, t_\alpha)/Q_t(x_i)$. Les poids étant très semblables pour tous les points x_i , on admet que $p_\alpha^i = p_\alpha \forall i$. La variance spatiale des moyennes pondérées s'écrit dès lors

$$\begin{aligned} VAR &= \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \left[\frac{1}{N_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} p_\alpha C(x_i, t_\alpha) - \frac{1}{N_\alpha N_i} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \sum_{i=1}^{N_i} C(x_i, t_\alpha) \right]^2 \\ &= \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \left[\frac{1}{N_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} p_\alpha (C(x_i, t_\alpha) - \bar{C}(t_\alpha)) \right]^2 \end{aligned}$$

La différence $C(x_i, t_\alpha) - \bar{C}(t_\alpha)$, qui apparaît dans les deux calculs de variance, est donc un écart spatial pour un instant t_α donné. Or ces écarts apparaissent inversement proportionnels aux débits : ils sont quasiment nuls au premier trimestre et maximaux en été, lorsque de faibles débits sont enregistrés. La variance spatiale des moyennes pondérées est alors atténuée par rapport à celle des moyennes arithmétiques, indépendantes des débits.

3.2.2 Les mesures du RNB

Comme observé en valeurs PROSE pour la partie amont du domaine, les moyennes pondérées (approche physique) des concentrations en nitrates mesurées par le RNB sont systématique-

ment supérieures aux moyennes arithmétiques relatives à l'approche réglementaire (Fig. 3.4). Le nuage de corrélation montre également une nette relation linéaire entre les deux calculs, avec un coefficient de corrélation proche de l'unité ($\rho = 0.99$, Fig. 3.4b).

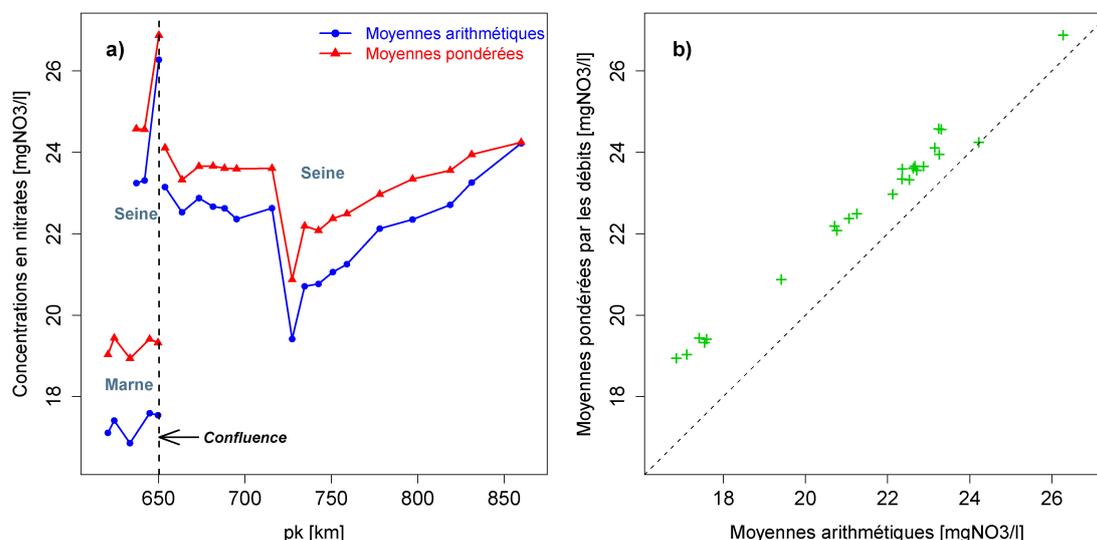


FIGURE 3.4 – a) Concentration annuelle moyenne en nitrates (mesures du RNB) le long du réseau modélisé, selon l'approche réglementaire (moyennes arithmétiques) et physique (moyennes pondérées). b) Nuage de corrélation entre les moyennes arithmétiques et pondérées.

La différence de variabilité spatiale entre les deux calculs est moins marquée qu'en valeurs PROSE, mais bien présente : les moyennes arithmétiques affichent une variance de $6.11 \text{ (mgNO}_3\text{/l)}^2$ contre $4.2 \text{ (mgNO}_3\text{/l)}^2$ pour les moyennes pondérées. Bien que moins structurés que ceux des valeurs PROSE en raison du faible nombre de points, les variogrammes spatiaux confirment cette atténuation de la variabilité spatiale des concentrations moyennes lorsque l'on considère la pondération par les débits.

La figure 3.5, qui présente les courbes des débits et concentrations en nitrates mesurés par le RNB à la station 6 ainsi que leur nuage de corrélation, montre que ces deux observations s'expliquent également par l'allure des débits, importants en hiver quand les concentrations sont élevées et peu variables d'une station à l'autre.

3.2.3 Synthèse

Les mesures du RNB ainsi que les valeurs PROSE conduisent à la même constatation : la pondération des concentrations par les débits instantanés fournit des moyennes annuelles plus élevées, dont la variabilité spatiale est atténuée.

L'augmentation des moyennes s'explique par la relation non-linéaire liant les débits aux concentrations en nitrates : des concentrations élevées sont mesurées en hiver, lorsque le débit est le plus important.

La variabilité spatiale des concentrations annuelles provient essentiellement des petites discontinuités inhérentes à tout réseau hydrographique (stations d'épuration, déversoirs d'orage, confluences mineures, . . .), qui induisent des augmentations ou diminutions des concentrations en été essentiellement. La chronique de débit - et donc la pondération - étant similaire sur l'entièreté du réseau, la pondération privilégie les faibles écarts du début d'année, alors que les différences les plus

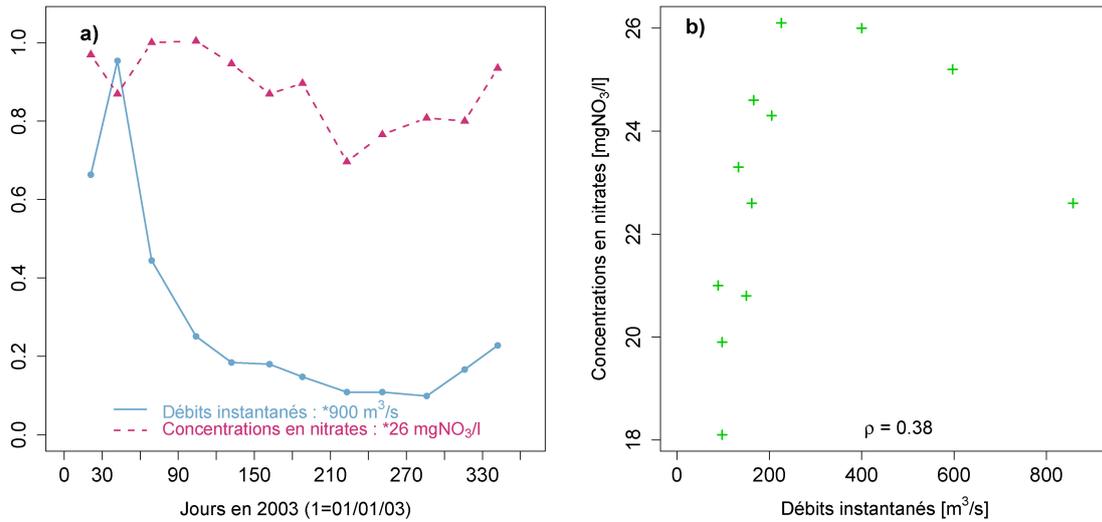


FIGURE 3.5 – a) *Superposition des chroniques de débit et de concentrations en nitrates mesurées par le RNB ; les valeurs sont rapportées au maximum.* b) *Nuage de corrélation entre les deux chroniques, où ρ est le coefficient de corrélation linéaire. Exemple de la station 6.*

marquées sont associées à de faibles débits, avec comme conséquence un lissage de la variabilité spatiale des concentrations annuelles.

L'approche physique sera abordée au chapitre 6, pour l'estimation conjointe des débits, flux et concentrations par bief. Cette approche est en effet indispensable dès que les flux sont concernés, mais requiert la connaissance des débits et des concentrations aux mêmes points, ces mesures étant rarement disponibles ensemble en pratique.

Dès lors, toute la troisième partie de ce travail, consacrée à l'estimation spatiale des - seules - concentrations sur réseau, est réalisée dans le cadre d'une approche réglementaire, c'est-à-dire en considérant des moyennes annuelles arithmétiques.

Chapitre 4

PROSE comme maquette ?

Avant d'utiliser les valeurs PROSE pour inférer le modèle géostatistique, il est nécessaire de s'assurer au préalable que ces valeurs soient réalistes. Comme les deux ensembles de mesures qui caractérisent le réseau modélisé sont relatifs à différents points et différents jours, la démarche consiste, après avoir brièvement analysé comment le modèle décrit les débits, à comparer les valeurs PROSE à chacun des deux ensembles. Ce chapitre s'intéresse d'abord aux mesures hebdomadaires du SIAAP, puis aux mesures mensuelles du RNB.

Outre une comparaison des chroniques temporelles et des statistiques classiques, les variogrammes expérimentaux (cf. annexe A, §A.2), temporels puis spatiaux, sont également confrontés. Dans un premier temps, les comparaisons portent sur les nitrates, dans la continuité des travaux de Bernard-Michel (2006), et se focalisent ensuite sur l'oxygène dissous, véritable indicateur de la « santé » d'un cours d'eau.

Ce chapitre fait donc référence aux mesures du SIAAP, du RNB, et aux valeurs PROSE, mais également aux mesures de VEOLIA WATER, ainsi qu'à l'ensemble initial de valeurs PROSE (cf. chapitre 2).

4.1 Les débits

Commençons par regarder comment PROSE reproduit les débits. La figure 4.1 présente la superposition des chroniques de débit simulées et mesurées en deux stations hydrométriques. La première est située à Paris tandis que la seconde caractérise la limite aval du réseau modélisé par PROSE ; chacune fournit une valeur de débit instantané par jour, qui est donc comparée à la valeur PROSE correspondante (i.e. le même jour à midi). Les chroniques mesurées et simulées sont quasiment confondues aux deux stations, témoignant d'une bonne reproduction des débits réels par PROSE tout au long du réseau. D'autre part, l'allure des chroniques aval est similaire à celle des chroniques amont, si ce n'est que le débit est forcément plus important à l'aval.

En hydrologie, afin de vérifier la bonne reproduction de la dynamique hydraulique par un modèle, il est courant de calculer le critère de Nash (Eq. 4.1). Il mesure la part de variance des mesures $X_{mes}(t)$ expliquée par les valeurs simulées $X_{sim}(t)$, et est donc égal à l'unité dans le cas idéal (Nash and Sutcliffe, 1970). La valeur de ce critère en chacune des stations (NASH = 0.99 en amont et 0.97 en aval) confirme l'excellente reproduction des débits par le modèle déterministe PROSE.

$$NASH = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (X_{sim}(t_i) - X_{mes}(t_i))^2}{\sum_{i=1}^N (X_{mes}(t_i) - \bar{X}_{mes}(t_i))^2}, \quad \bar{X}_{mes} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_{mes}(t_i) \quad (4.1)$$

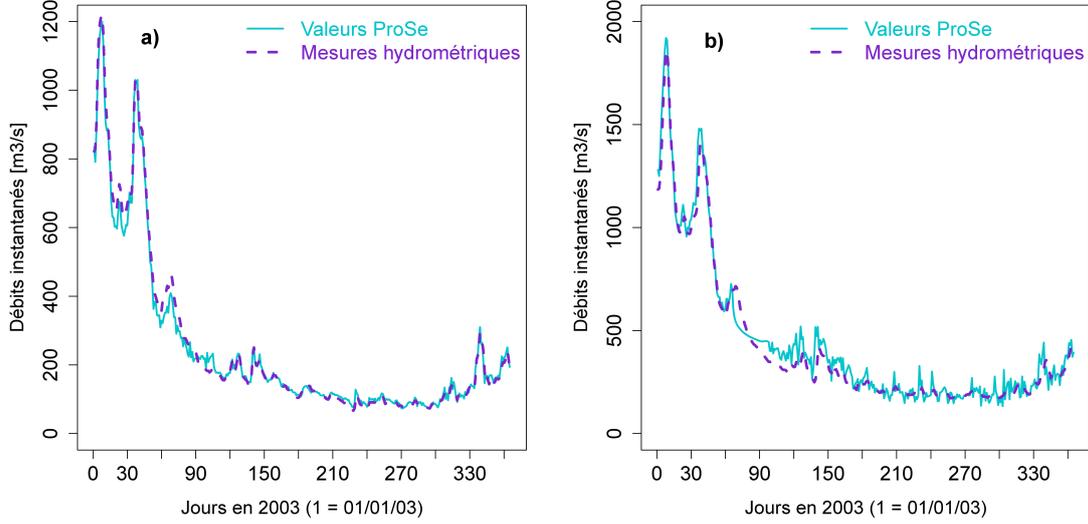


FIGURE 4.1 – Comparaison des débits instantanés journaliers simulés par PROSE et mesurés aux stations hydrométriques ; les stations sont respectivement situées a) à Paris, en amont du domaine, et b) à la limite aval du domaine.

4.2 Nitrates : reconstruction de conditions aux limites amont par co-krigeage

Alors que les nitrates sont mesurés instantanément en chaque station du SIAAP une fois par semaine, PROSE fournit 72 valeurs par jour (cf. §2.3.1, ensemble initial). Afin de comparer les valeurs mesurées et simulées au même support ponctuel, le choix d’une heure de mesure était indispensable. Celle-ci n’étant pas précisée pour les mesures, elle a arbitrairement été fixée à 12h, après avoir vérifié le comportement très continu à l’origine du variogramme temporel des valeurs PROSE.

4.2.1 Comparaison des mesures du SIAAP aux valeurs PROSE

La plupart des statistiques (moyenne, écart-type, minimum, maximum) des valeurs PROSE sont plus élevées que celles des valeurs mesurées (Tab. 4.1), excepté pour les deux stations aval (Conflans et Poissy), ce qui témoigne d’une faible surestimation des concentrations par le modèle. Les valeurs PROSE semblent également présenter une variabilité légèrement plus importante. La superposition des chroniques de nitrates mesurées et simulées pour chacune des stations du SIAAP (Fig. 4.2) permet d’appréhender visuellement la surestimation des concentrations en nitrates par PROSE, confirmée par les écarts repris au tableau 4.2.

Cependant, les variations temporelles des concentrations en nitrates sont très bien reproduites par le modèle PROSE tout au long du domaine, ainsi que les grandes tendances saisonnières. En effet, de faibles concentrations sont mesurées en été et d’autres beaucoup plus élevées en hiver,

	Mesures du SIAAP					Valeurs PROSE			
	N	min	max	m	σ	min	max	m	σ
Choisy	50	15.51	32.78	23.57	4.48	16.00	34.87	25.27	4.88
Ivry	50	18.02	36.33	26.18	3.70	18.39	36.62	27.38	4.02
Alfortville	51	10.63	24.81	18.09	3.95	12.06	29.76	20.42	4.43
Suresnes	49	15.95	31.45	23.46	3.79	18.72	34.45	25.53	3.62
Argenteuil	49	16.83	31.45	23.62	3.85	16.00	34.33	24.63	4.09
Chatou	49	15.06	31.01	23.36	3.96	17.35	34.70	24.81	3.99
Bougival	49	16.39	31.01	23.39	3.94	17.17	34.74	24.90	3.98
Sartrouville	49	15.51	31.90	23.10	4.17	17.36	34.43	24.98	3.88
Conflans	52	14.62	31.01	22.44	4.13	13.58	32.21	21.81	4.70
Poissy	52	16.40	30.60	22.63	3.72	16.02	28.84	22.40	3.52

TABLE 4.1 – *Statistiques classiques des concentrations en nitrates mesurées par le SIAAP et des valeurs PROSE correspondantes, d'amont (Choisy) en aval (Poissy). N est l'effectif, min et max les minimum et maximum (respectivement, $[mgNO_3/l]$), m la moyenne ($[mgNO_3/l]$) et σ l'écart-type ($[mgNO_3/l]$).*

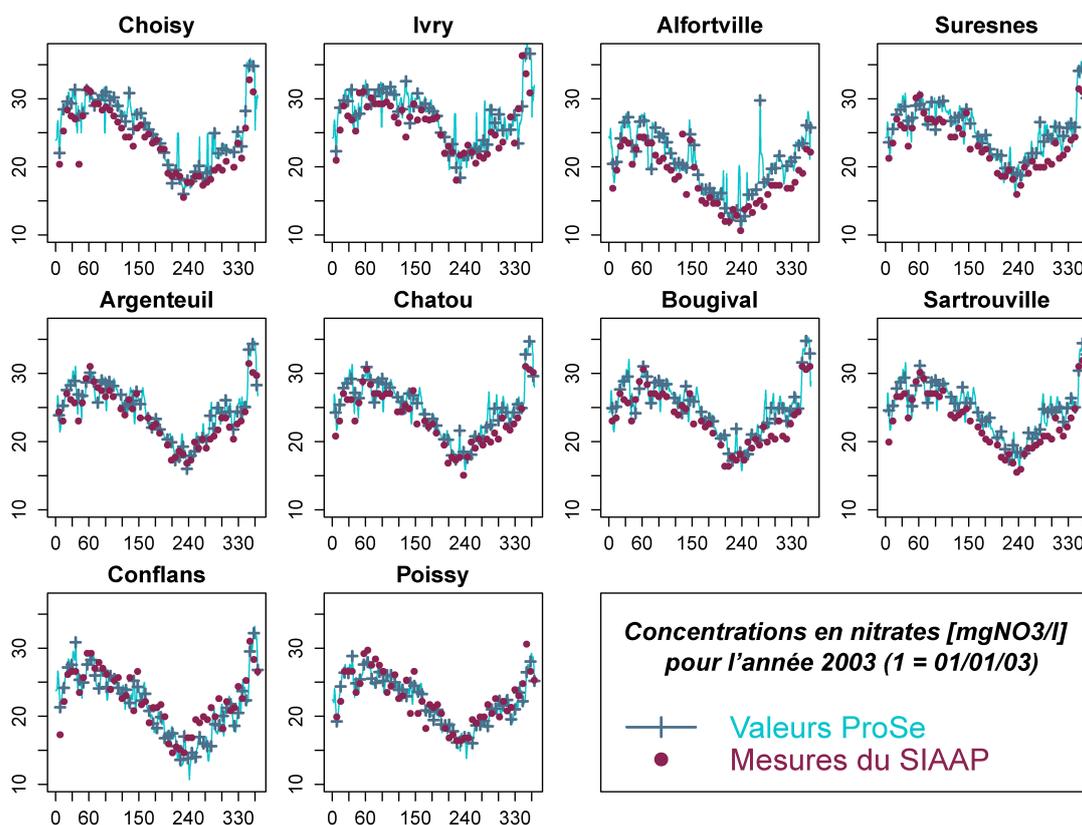


FIGURE 4.2 – *Comparaison des concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées aux stations du SIAAP pour l'année 2003 (les abscisses sont les numéros de jour); les croix bleues sont les valeurs PROSE à midi, retenues pour la comparaison aux mesures du SIAAP.*

l'amplitude de ces variations saisonnières étant de l'ordre de grandeur des valeurs minimales. Les coefficients de corrélation (Tab. 4.2) supérieurs à 0.8 (excepté à Ivry) témoignent également de la bonne reproduction des chroniques par le modèle PROSE.

	Différence moyenne		Ecart quadratique moyen [(mgNO ₃ /l) ²]	Coefficient de corrélation ρ
	[mgNO ₃ /l]	%		
Choisy	1.70	7	5.53	0.94
Ivry	1.21	5	8.22	0.77
Alfortville	2.33	14	11.73	0.82
Suresnes	2.07	9	6.51	0.92
Argenteuil	1.01	4	2.98	0.94
Chatou	1.45	7	4.08	0.94
Bougival	1.51	7	4.95	0.91
Sartrouville	1.88	9	5.44	0.94
Conflans	-0.63	-2	6.65	0.84
Poissy	-0.24	-1	3.54	0.87

TABLE 4.2 – Différence moyenne absolue et relative, écart quadratique moyen, et coefficient de corrélation entre les concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP, en chacune des stations.

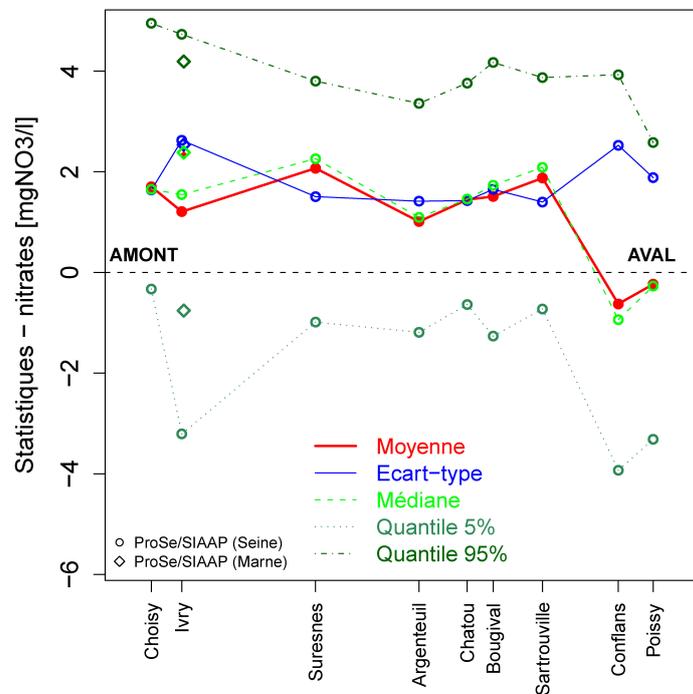


FIGURE 4.3 – Statistiques moyennes des différences entre concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP le long du réseau.

Les statistiques des différences PROSE-SIAAP varient peu le long du réseau modélisé (Fig. 4.3), avec une différence moyenne quasiment constante de l'amont à Sartrouville, suggérant un écart induit en amont qui se maintient au fil de l'eau.

4.2.2 Comparaison des mesures du SIAAP et de VEOLIA WATER

En cherchant la cause de cette surestimation du modèle PROSE, les données utilisées comme Conditions aux Limites (CL) amont, fournies par VEOLIA WATER (cf. §2.2.3) et obtenues selon un protocole de mesure différent de celui du SIAAP, ont été examinées.

La figure 4.4a confronte la chronique du SIAAP aux mesures de VEOLIA WATER à Choisy.

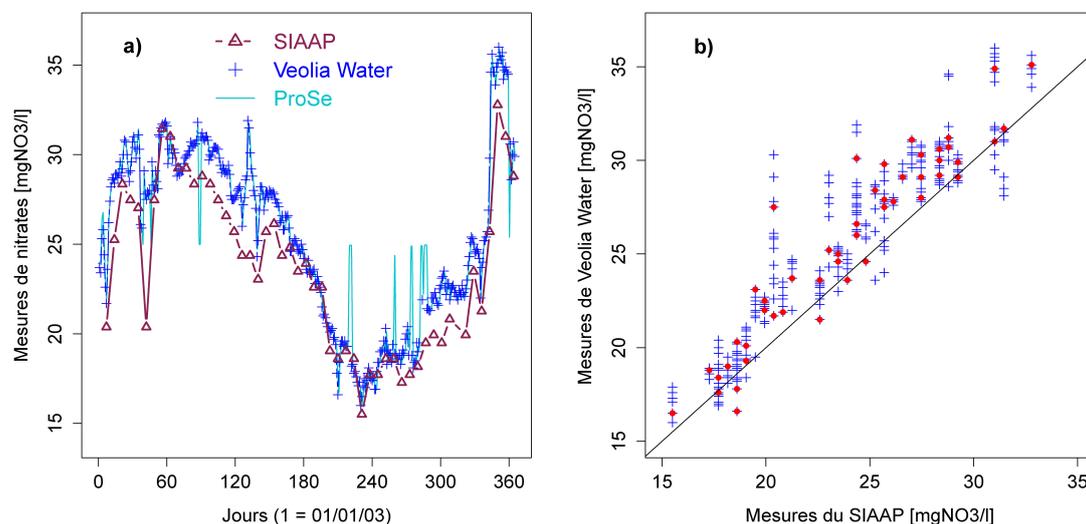


FIGURE 4.4 – a) Comparaison des concentrations en nitrates mesurées par le SIAAP et VEOLIA WATER à Choisy et des valeurs PROSE correspondantes. b) Nuage de corrélation entre les deux ensembles de mesures, une mesure hebdomadaire du SIAAP correspondant à 7 mesures journalières de VEOLIA WATER ; le nuage correspondant aux jours de mesures du SIAAP est repris par des points rouges.

La concordance flagrante des chroniques VEOLIA WATER et PROSE s’explique par la proximité d’Ablon et de Choisy, et suggère une très faible variabilité spatiale des nitrates.

En revanche, la chronique du SIAAP affiche la plupart du temps des concentrations plus faibles en nitrates (phénomène un peu moins marqué en été, lorsque les concentrations sont faibles), ce qui semble appuyer la thèse d’une différence de protocole de mesure qui induirait une surestimation apparente du modèle. Les différences VEOLIA WATER-SIAAP et PROSE-SIAAP à Choisy ne sont pas nulles ni constantes dans le temps, mais sont quasiment confondues pour les trois premiers trimestres, confirmant que les écarts entre les valeurs PROSE et les mesures du SIAAP résultent de la différence de méthode de mesure entre les données utilisées pour les CL amont (VEOLIA WATER), et les mesures du SIAAP utilisées pour la « validation » du modèle. En d’autres termes, si les mesures le long du réseau avaient été effectuées selon la méthode de VEOLIA WATER, on peut raisonnablement supposer que les écarts entre les valeurs de nitrates mesurées et simulées auraient été bien moindres.

On observe toutefois une forte relation entre les deux types de mesure, comme le montre le nuage de corrélation ($\rho = 0.94$, Fig. 4.4b), qui permet également d’apprécier la variabilité infra-hebdomadaire non négligeable des concentrations en nitrates. D’autre part, les variogrammes temporels simples et croisé des deux chroniques sont quasiment confondus jusqu’à deux mois, le variogramme des données VEOLIA WATER présentant, ensuite, la plus grande variabilité.

Comme on souhaiterait s’affranchir des écarts induits par les différences de protocole de mesure, le choix d’une référence s’impose. Le SIAAP disposant de stations plus nombreuses que

VEOLIA WATER, les mesures hebdomadaires ont été privilégiées. Afin d'améliorer la concordance entre les valeurs PROSE et la « référence SIAAP », des CL amont en nitrates cohérentes avec les mesures du SIAAP ont été reconstituées à partir des deux ensembles de mesures.

Disposant de mesures SIAAP à fréquence hebdomadaire et de mesures VEOLIA WATER à fréquence journalière, comment obtenir une chronique de « type SIAAP » i.e. passant par les mesures du SIAAP, à fréquence journalière? Différentes méthodes géostatistiques permettent de reconstruire une telle chronique (Matheron, 1970; Chilès and Delfiner, 1999), parmi lesquelles :

- le co-krigeage, estimation linéaire bivariable qui exploite la corrélation temporelle entre les deux variables ;
- le krigeage en dérive externe, où la variable auxiliaire (les mesures de VEOLIA WATER en l'occurrence), généralement plus lisse, est considérée comme étant déterministe ;
- les simulations conditionnelles, pour reconstituer plusieurs variantes possibles de la réalité et reconstituer la variabilité « réelle » des mesures.

Au vu de la très bonne corrélation entre les deux ensembles de mesures, le co-krigeage des données SIAAP par les données VEOLIA WATER paraît naturellement indiqué (cf. annexe A, §A.4.2). Le co-krigeage a été préféré aux simulations conditionnelles afin d'éviter d'introduire une variabilité supplémentaire, étant donné que l'objectif est d'obtenir une *estimation* la plus fidèle possible à la valeur réelle.

4.2.3 Principe du co-krigeage

Les instants de mesure du SIAAP étant un sous-ensemble de ceux de VEOLIA WATER, plus nombreux, il y a hétérotopie partielle : la variable auxiliaire (les mesures de VEOLIA WATER, Z_2) est connue de manière plus fréquente que la variable d'intérêt (les mesures du SIAAP, Z_1). Le co-krigeage, estimation linéaire bivariable, est donc un outil adéquat pour reconstituer des mesures SIAAP à plus haute fréquence tout en exploitant l'excellente corrélation entre les deux ensembles de mesures :

$$Z_1(t_0)^* = \sum_{\alpha_1} \lambda_1 Z_1(t_{\alpha_1}) + \sum_{\alpha_2} \lambda_2 Z_2(t_{\alpha_2}).$$

Le modèle bivariable ajusté manuellement sur les variogrammes temporels expérimentaux des nitrates à Choisy est constitué de trois composantes : un petit effet de pépite, une composante exponentielle de moyenne portée (200 jours) ainsi qu'une composante périodique en cosinus¹, avec une période proche de l'année (350 jours) qui reflète les variations saisonnières observées sur les chroniques temporelles.

Les mesures couvrant une seule année civile, les variogrammes expérimentaux sont pertinents pour les quelques premiers mois ; il serait donc inadapté d'y ajuster un modèle que l'on utiliserait pour l'année entière. En outre, le voisinage unique est à proscrire en raison de la non-stationnarité résultant des variations saisonnières. Au terme d'une étude de sensibilité comparant les résultats du co-krigeage obtenus avec des voisinages glissants compris entre une semaine et six mois, un voisinage glissant de deux mois, compromis entre l'information disponible et la pertinence du modèle variographique, a été retenu.

1. La composante en cosinus est en réalité un modèle moyen sur la période considérée. En effet, dans le cas d'une période annuelle par exemple, la variabilité entre l'été et l'hiver est beaucoup plus forte qu'entre le printemps et l'automne, ce qui se traduit par un variogramme non stationnaire, dépendant à la fois de l'intervalle de temps entre deux points mais également des points considérés. Dans ce travail, l'approximation consistant à prendre un variogramme - stationnaire - moyen sur la période est acceptée. Il s'écrit $\gamma(\tau) = c(1 - \cos(2\pi\tau/T))$, où T est la période et c le « palier » autour duquel oscille le variogramme, l'amplitude d'une période valant donc $2c$.

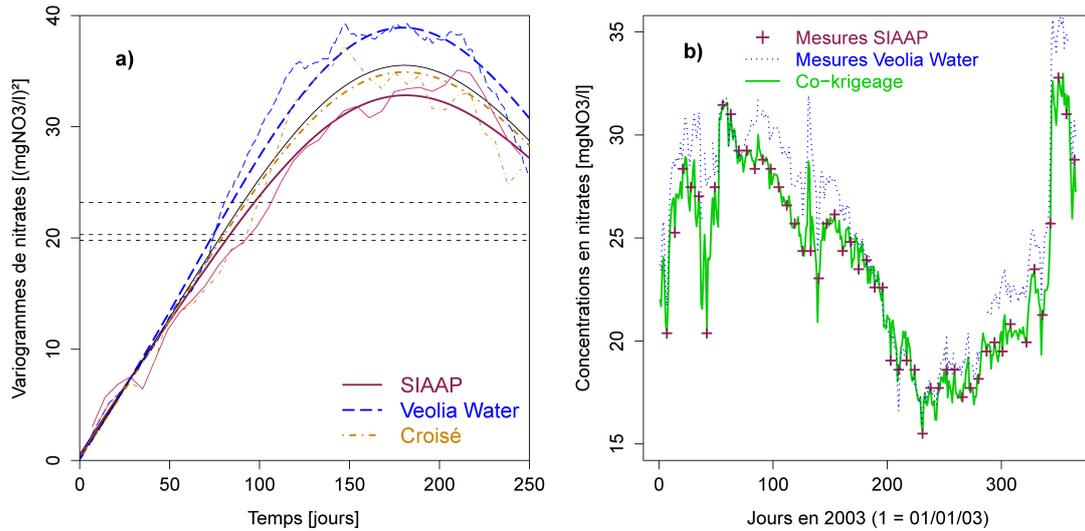


FIGURE 4.5 – a) *Modèle bivariable ajusté sur les variogrammes temporels expérimentaux des concentrations en nitrates à Choisy.* b) *Co-krigeage des mesures du SIAAP par celles de VEOLIA WATER.*

La figure 4.5 présente l’ajustement des variogrammes ainsi que la chronique journalière de nitrates obtenue par co-krigeage. Celle-ci comprend les mesures initiales du SIAAP, et affiche une dynamique temporelle inspirée de celle des mesures de VEOLIA WATER. La variance d’estimation ponctuelle associée à cette chronique reconstituée est très acceptable : les écarts-type relatifs σ_E/Z^* sont inférieurs à 6%.

La même procédure a été réitérée pour les CL amont en nitrates sur l’Oise, où on dispose également de mesures du SIAAP, juste avant la confluence avec la Seine. Sur la Marne en revanche, il ne serait pas pertinent de négliger les quelques 30 km séparant les stations du SIAAP et de VEOLIA WATER, ce pourquoi les CL amont relatives à cette rivière n’ont pas été modifiées.

Les deux chroniques reconstituées ont ensuite été utilisées comme CL amont sur la Seine et l’Oise respectivement, à la place des mesures de VEOLIA WATER, lors d’une seconde simulation du modèle PROSE.

4.2.4 CL amont : initiales vs. modifiées

La figure 4.6 présente, en chaque station du SIAAP, les chroniques de nitrates mesurées et simulées à partir des CL amont modifiées. La comparaison de ces chroniques avant et après modification des CL amont (cf. Fig. 4.2) montre, tout d’abord, que les deux chroniques sont identiques pour la station localisée sur la Marne (Alfortville), étant donné que la CL correspondante est restée inchangée. Ensuite, la différence est à peine perceptible pour les deux stations situées en aval de la confluence de la Seine et de l’Oise (Conflans et Poissy), mais elle est en revanche flagrante pour toutes les autres stations (Tab. 4.3). Enfin, la meilleure concordance des chroniques simulées et mesurées, qui peut déjà être notée visuellement pour les trois premiers trimestres de l’année, est confirmée par les coefficients de corrélation, supérieurs à ceux obtenus avec les CL amont initiales. Seule la station d’Ivry, située en aval d’une importante station d’épuration (Seine Amont), fait exception.

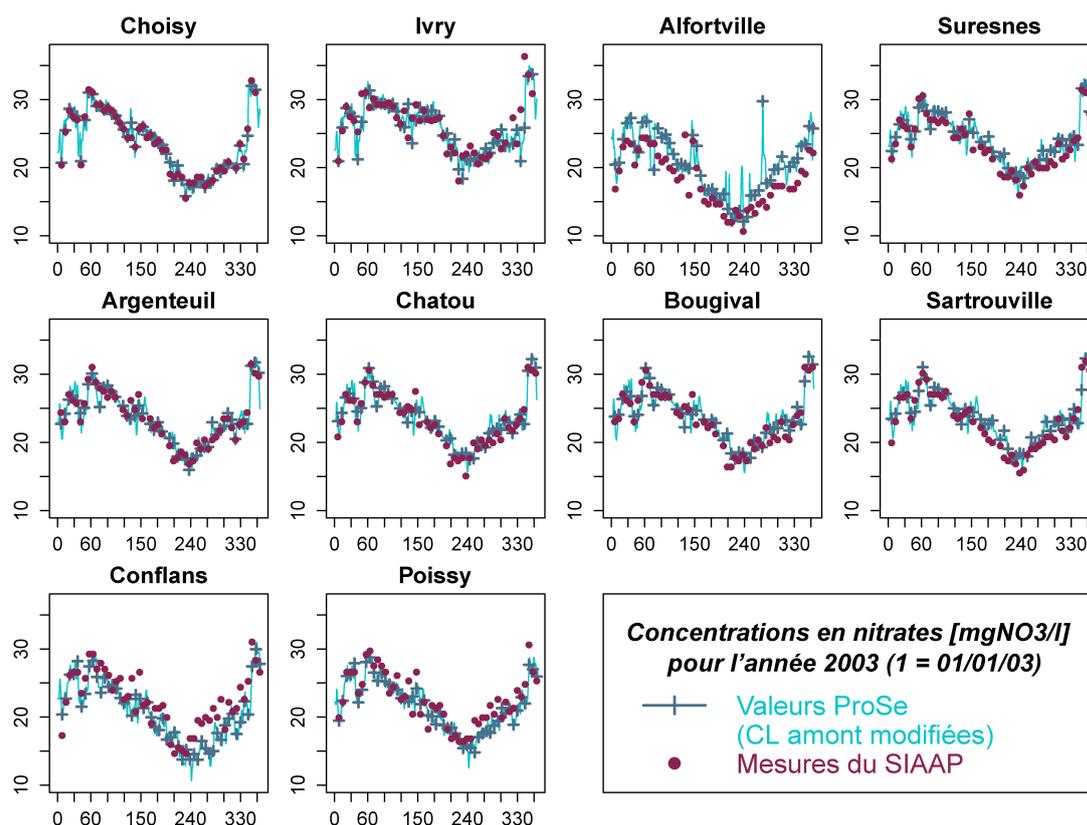


FIGURE 4.6 – *Comparaison des concentrations en nitrates mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE après modification des CL amont, pour l'année 2003 (les abscisses sont les numéros de jour) ; les croix bleues sont les valeurs PROSE à midi, retenues pour la comparaison aux mesures du SIAAP.*

L'évolution spatiale des statistiques des différences entre concentrations mesurées par le SIAAP et simulées par PROSE après modification des CL amont (Fig. 4.7, à comparer à la Fig. 4.3), confirme également la meilleure adéquation des valeurs PROSE après modification des CL amont. Même si, localement, des différences non négligeables sont encore observées (à Ivry notamment), la moyenne proche de zéro indique que le modèle PROSE est plus cohérent avec les données du SIAAP, du moins jusqu'à Sartrouville.

C'est donc à ce second ensemble de valeurs simulées (cf. §2.3.1), obtenu après modification des CL amont en nitrates, que se réfèrent dorénavant les « valeurs PROSE ».

4.3 Nitrates : analyse variographique pour ausculter la simulation déterministe

La bonne reproduction par le modèle PROSE des chroniques de nitrates mesurées est une condition nécessaire à son utilisation comme maquette, mais toutefois pas suffisante. En effet, il convient également de s'assurer que le modèle PROSE restitue de manière réaliste la variabilité temporelle et spatiale des mesures.

Idéalement, les variogrammes simples des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE présentent la même structure et le même palier. Ensuite, le variogramme croisé nous renseigne sur la corrélation

	Différence moyenne		Ecart quadratique moyen [(mgNO ₃ /l) ²]	Coefficient de corrélation ρ
	[mgNO ₃ /l]	%		
Choisy	0.04	<1	0.37	0.99
Ivry	-0.40	-1	6.93	0.74
Alfortville	2.33	14	11.73	0.82
Suresnes	0.88	4	2.02	0.96
Argenteuil	-0.04	<1	1.26	0.96
Chatou	0.38	2	1.76	0.95
Bougival	0.38	2	2.31	0.93
Sartrouville	0.73	4	2.61	0.94
Conflans	-1.60	-7	8.16	0.84
Poissy	-0.92	-4	3.35	0.91

TABLE 4.3 – Différence moyenne relative et absolue, écart quadratique moyen, et coefficient de corrélation entre les valeurs PROSE de nitrates obtenues après modification des CL amont et les mesures du SIAAP, en chacune des stations.

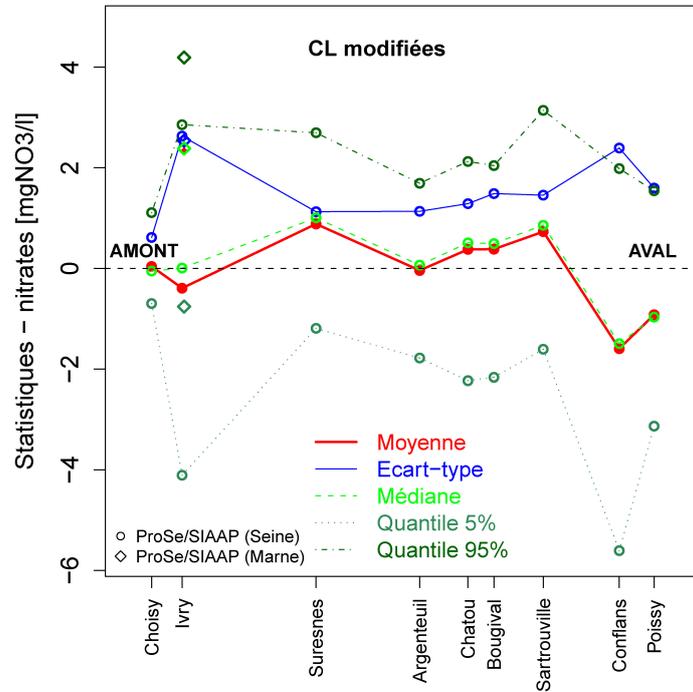


FIGURE 4.7 – Statistiques moyennes des différences entre concentrations en nitrates simulées par PROSE avec les CL amont modifiées et mesurées par le SIAAP le long du réseau.

temporelle ou spatiale entre mesures et valeurs PROSE. Un variogramme croisé nul indique une absence de corrélation tandis qu'un variogramme croisé proche des deux simples reflète une forte corrélation. Un variogramme croisé situé entre les deux simples témoigne d'une corrélation d'autant plus élevée que l'écart entre les variogrammes simples est faible. En effet, plaçons-nous dans le cadre de la corrélation intrinsèque (cf. annexe A, §A.4.3), et considérons deux variables aléatoires Z_1 et Z_2 , avec $\sigma_1 < \sigma_2$. Les paliers théoriques des variogrammes simples s'écrivent respectivement σ_1^2 et σ_2^2 , alors que celui du croisé vaut $C_{12}(0) = \rho_{12}\sigma_1\sigma_2$. Dès lors, si le variogramme croisé est

situé entre les deux simples, soit $\sigma_1^2 < \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 < \sigma_2^2$, on en déduit que $\rho_{12} > \sigma_1/\sigma_2$. Dans le cas où l'écart entre les deux variogrammes simples est important, le coefficient de corrélation n'est donc pas nécessairement très fort.

4.3.1 Comparaison des variogrammes temporels

Les variogrammes temporels simples et croisé des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE, en chacune des stations du SIAAP sont présentés à la Fig. 4.8.

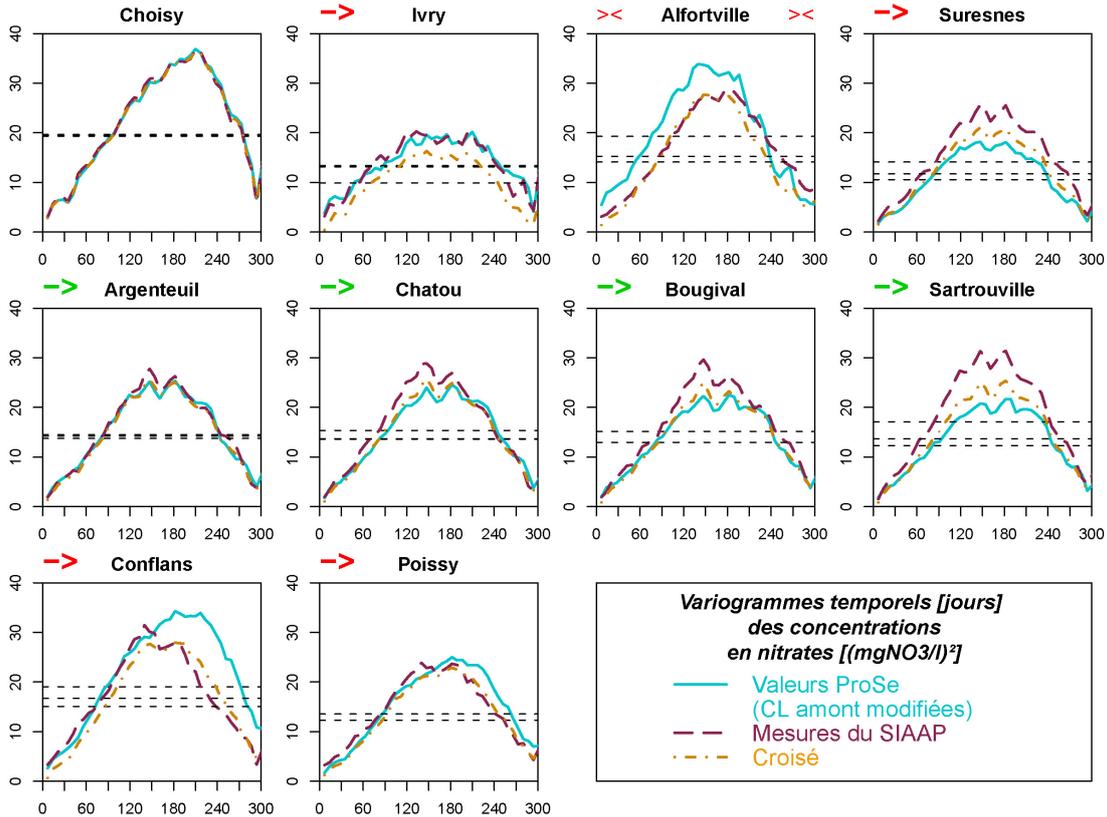


FIGURE 4.8 – Variogrammes temporels des concentrations en nitrates mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE (à partir des CL amont modifiées).

Globalement, les structures temporelles des mesures et des valeurs PROSE sont très fortement corrélées. En effet, les variogrammes présentent tous la même allure, les variogrammes simples sont très proches et le variogramme croisé est compris ou presque entre les deux variogrammes simples. À Choisy, conséquence directe de la modification des CL amont, les variogrammes simples et croisé des valeurs PROSE et des mesures du SIAAP sont même confondus. La variabilité temporelle des données diffère selon les stations : elle est maximale à Choisy et minimale à Ivry. Elle augmente ensuite légèrement au fil de l'eau entre Suresnes et Conflans, pour diminuer à Poissy.

L'écart entre les variogrammes des valeurs mesurées et simulées varie également selon les stations. À l'amont de la confluence Seine/Marne, la variabilité des valeurs PROSE est quasiment égale à celle des mesures. L'écart croît ensuite entre Argenteuil et Sartrouville, les mesures présentant systématiquement un variogramme supérieur à celui des valeurs PROSE, ce qui peut s'expliquer par les erreurs inhérentes à toute mesure. Aux deux stations aval, Conflans et Poissy, la variabilité temporelle des concentrations simulées est « recalée » à celle des mesures.

Cette évolution de la variabilité temporelle au fil de l'eau n'étant pas tout à fait identique pour les mesures et les valeurs PROSE, une analyse approfondie de ces variogrammes et de leur ajustement en modèle linéaire de co-régionalisation (cf. annexe A, §A.4.3) s'est révélée être un outil permettant d'appréhender la qualité du modèle PROSE. Quelques imperfections du modèle ont ainsi pu être mises en évidence, interprétables notamment en termes de quantification des rejets de station d'épuration et des apports latéraux, ou de description des processus physiques tels que la nitrification/dénitrification. Cette analyse détaillée a fait l'objet d'un article de recherche publié dans *Hydrological Processes* (cf. annexe D²), dont les principaux résultats sont repris ici.

A l'instar de l'ajustement bivarié réalisé à Choisy en vue du co-krigeage des mesures du SIAAP par celles de VEOLIA WATER (cf. §4.2.3), le modèle linéaire de co-régionalisation ajusté³ sur les variogrammes des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE comporte trois composantes temporelles :

- un effet de pépité, faible ;
- une composante exponentielle admettant une portée d'environ 2 mois ;
- une composante périodique en cosinus, de période proche de l'année, reflétant la variabilité saisonnière. Cette composante est largement prédominante en toutes les stations.

Ajuster un modèle de variogramme bivarié revient à modéliser les relations entre variables. La démarche consiste donc à analyser l'évolution de ces relations entre mesures et modèle pour mieux comprendre son fonctionnement.

La comparaison des variogrammes modélisés a été effectuée globalement et par composante temporelle, afin de mieux cibler les éventuels dysfonctionnements du modèle. Les critères statistiques usuels (moyenne, variance, RMSE, . . .) et les variogrammes temporels confirment dans l'ensemble la bonne reproduction par le modèle PROSE des concentrations en nitrates et de leur variabilité temporelle (cf. Fig. 4.6 et Tab. 4.3). Cependant, l'analyse fine par composante a révélé quelques divergences de comportement entre les concentrations simulées et mesurées. En effet, l'évolution des variogrammes temporels simples et croisé (et de leurs relations) le long de la Seine présente des discontinuités, et ces changements de comportement ne se cantonnent pas aux confluences majeures (Seine/Marne entre Ivry et Suresnes et Seine/Oise entre Conflans et Poissy) :

1. Alors que les variogrammes simples et croisé sont quasiment confondus à Choisy, le variogramme croisé apparaît inférieur aux simples à Ivry, ces deux derniers étant presque superposés. La variabilité des données est en majeure partie reproduite par PROSE, mais les structures temporelles sont moins bien corrélées. En outre, les variogrammes observés à Ivry sont largement inférieurs à ceux observés à Choisy : la variabilité des concentrations en nitrates est sensiblement lissée entre Choisy et Ivry. Deux singularités peuvent expliquer cette première discontinuité. D'une part, un déversoir d'orage rejette de l'eau dont la concentration en nitrates est négligeable et arbitrairement fixée à 0 mgNO₃/l dans le modèle. La seconde éventualité concerne la station d'épuration (STEP) Seine Amont, qui rejette des eaux très concentrées en nitrates (en moyenne 102 mgNO₃/l) mais dépourvues de variabilité saisonnière, ce qui pourrait expliquer le lissage observé. Le changement de comportement des variogrammes entre Choisy et Ivry pourrait donc résulter d'une méconnaissance ou d'une quantification approximative des rejets du déversoir d'orage, de la STEP Seine Amont, ou encore d'une combinaison des deux.

2. Que le lecteur curieux ne s'étonne pas de trouver dans cet article des variogrammes légèrement différents de ceux présentés ici : ils sont issus d'une simulation différente du modèle PROSE, pour laquelle la chlorophylle *a* a été négligée. L'apport pédagogique de cet article n'est cependant pas remis en cause, l'influence de la chlorophylle *a* sur les concentrations en nitrates apparaissant négligeable sur le domaine.

3. Bien qu'un ajustement automatique eût été préférable, l'ajustement en modèle linéaire de co-régionalisation a été effectué manuellement en raison, d'une part, du faible nombre de stations et, d'autre part, de la durée d'échantillonnage couvrant une unique période.

2. Après la confluence Seine/Marne, les valeurs PROSE et les mesures du SIAAP apparaissent fortement corrélées, le variogramme croisé étant systématiquement situé entre les deux simples, très proches. A Suresnes, la variabilité saisonnière des valeurs PROSE est toutefois légèrement inférieure à celle des mesures. Un important déversoir d'orage situé à Clichy, entre Suresnes et Argenteuil, est responsable de la deuxième discontinuité, qui conduit à un « recalage » du variogramme des valeurs PROSE à celui des mesures. La concentration en nitrates des rejets de ce déversoir d'orage, également fixée à 0 mgNO₃/l, semble donc parfaitement caractérisée. Entre Argenteuil et Sartrouville, la variabilité des valeurs PROSE s'écarte progressivement de celle des mesures, toujours supérieure. Cette « dérive » dans l'espace s'explique par la légère surestimation des concentrations estivales par le modèle (cf. Fig. 4.6), induite soit par une nitrification excessive soit par une dénitrification sous-estimée.
3. La troisième discontinuité est imputable à la STEP Seine Aval, qui traite les eaux usées de cinq millions d'habitants. En aval de cette STEP, les concentrations sont sous-estimées, ce qui pourrait résulter d'une caractérisation approchée des rejets ou d'une surestimation de la dénitrification par le modèle.
4. La diminution de la variabilité des concentrations en nitrates observée entre Conflans et Poissy est due à la confluence Seine/Oise, visiblement responsable d'un lissage des concentrations, déjà annoncé par les écarts-type du tableau 4.1.

Cette analyse montre la puissance de l'outil *variogramme* et, plus particulièrement, de l'ajustement bivariable des variogrammes simples et croisé, pour mieux comprendre l'influence des singularités sur les concentrations, mais également pour déceler et localiser les petites imperfections de la modélisation. Ainsi, cette analyse a montré combien il est important de caractériser précautionneusement la composition des différents rejets (STEP et déversoirs d'orage), et a pointé quelques processus physiques dont la description pourrait être améliorée (nitrification/dénitrification).

4.3.2 Comparaison des variogrammes spatiaux

Les variogrammes spatiaux des concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP sont présentés à la figure 4.9a. Afin de s'affranchir dans un premier temps des discontinuités relatives aux confluences majeures, aucune d'entre elles n'intervient dans leur calcul. Seules les stations du SIAAP situées sur un même segment sont donc considérées. Celles-ci étant synchrones (échantillonnées le même jour), une cinquantaine de variogrammes spatiaux *instantanés* ont été calculés ; les variogrammes présentés sont les variogrammes instantanés moyens.

Tout d'abord, observons les très faibles valeurs des variogrammes spatiaux, en comparaison des variogrammes temporels qui atteignaient des valeurs avoisinant les 30 (mgNO₃/l)² (cf. Fig. 4.8) : l'importante variabilité temporelle des concentrations en nitrates est totalement prédominante, estompant leur variabilité spatiale.

Ensuite, le pic observé pour une distance d'environ 8 km est dû aux deux stations situées sur la Seine en amont de sa confluence avec la Marne, Choisy et Ivry, qui n'interviennent dès lors que dans le calcul du point considéré. En effet, toutes les autres stations se situent sur la Seine, en aval de sa confluence avec la Marne. Ce pic suggère que la variabilité spatiale n'est pas identique sur différents tronçons, ou pourrait être induit par la STEP Seine Amont, dont l'influence sur les nitrates a déjà été soupçonnée lors de l'analyse détaillée des variogrammes temporels.

La figure 4.9b, qui reprend les variogrammes spatiaux relatifs aux stations situées sur la Seine en aval de sa confluence avec la Marne, montre que le variogramme des valeurs PROSE affiche une légère structure non stationnaire qui ne se retrouve pas sur celui des valeurs mesurées. Le variogramme croisé, quasiment nul, témoigne d'une absence de corrélation entre les structures

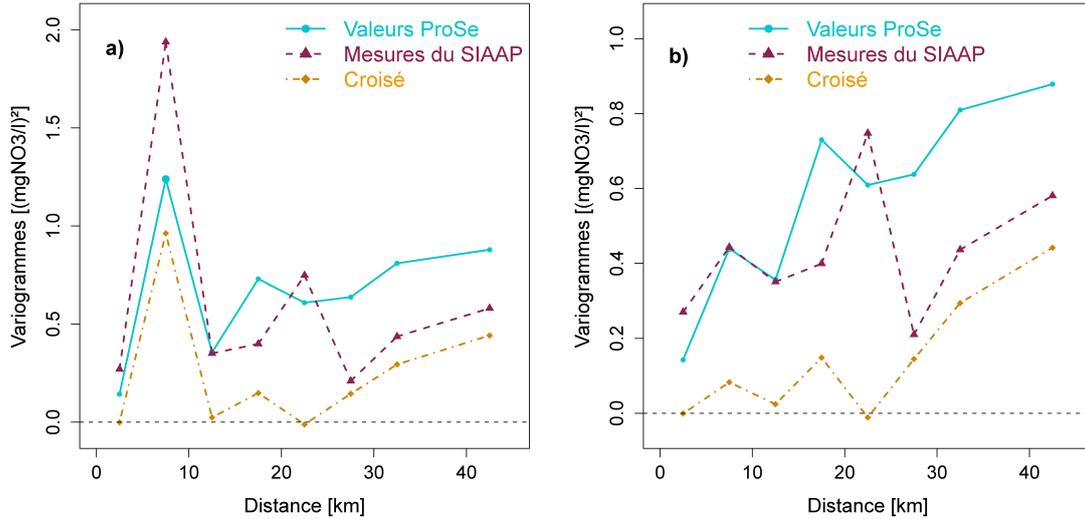


FIGURE 4.9 – Variogrammes spatiaux instantanés moyens (simples et croisé) des concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées aux stations du SIAAP ; les « couples de points » formés par stations situées de part et d'autre d'une confluence majeure ne sont pas pris en compte. a) Toutes les stations situées sur la Seine sont considérées. b) Seules les stations situées en aval de la confluence Seine/Marne sont considérées.

spatiales des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE. Cependant, les deux variogrammes simples présentent une variabilité spatiale quasiment identique pour des distances inférieures à 25 km, excepté à l'origine. Cela évoque les simulations non conditionnelles (au sens géostatistique) : le modèle PROSE reproduirait une variabilité spatiale réaliste des concentrations, mais non corrélée à la variabilité spatiale observée sur les mesures.

4.4 Oxygène dissous : comparaison des valeurs PROSE aux mesures du SIAAP

Le modèle PROSE semble très bien reproduire les concentrations en nitrates observées ainsi que leur variabilité temporelle et spatiale, ce qui le valide pour des phénomènes présentant une faible variabilité spatiale suggérant un transport très peu réactif. Cette section examine maintenant le cas des variables soumises à un transport hautement réactif, avec l'exemple de l'oxygène dissous.

Les concentrations en oxygène dissous sont mesurées en continu par le SIAAP, avec des mesures quart-horaires. Les valeurs PROSE étant disponibles à fréquence horaire, seule une mesure sur quatre a été retenue afin de garantir la pertinence de la comparaison. Les statistiques classiques (minimum, maximum, moyenne, écart-type) calculées sur les mesures exhaustives et l'échantillonnage horaire sont quasiment égales, suggérant qu'une fréquence horaire est suffisante pour décrire correctement leur comportement.

4.4.1 Les chroniques

La superposition des chroniques d'oxygène dissous issues du modèle PROSE et mesurées par le SIAAP (Fig. 4.10), ainsi que les statistiques classiques entre concentrations simulées et mesurées (Tab. 4.4) conduisent directement à définir deux ensembles de stations : celles informées uniquement en été (Asnières, Colombes, Sartrouville et Meulan, en vert), et celles fournissant également des mesures hivernales (Suresnes, Chatou, Bougival et Andrésey, en vert).

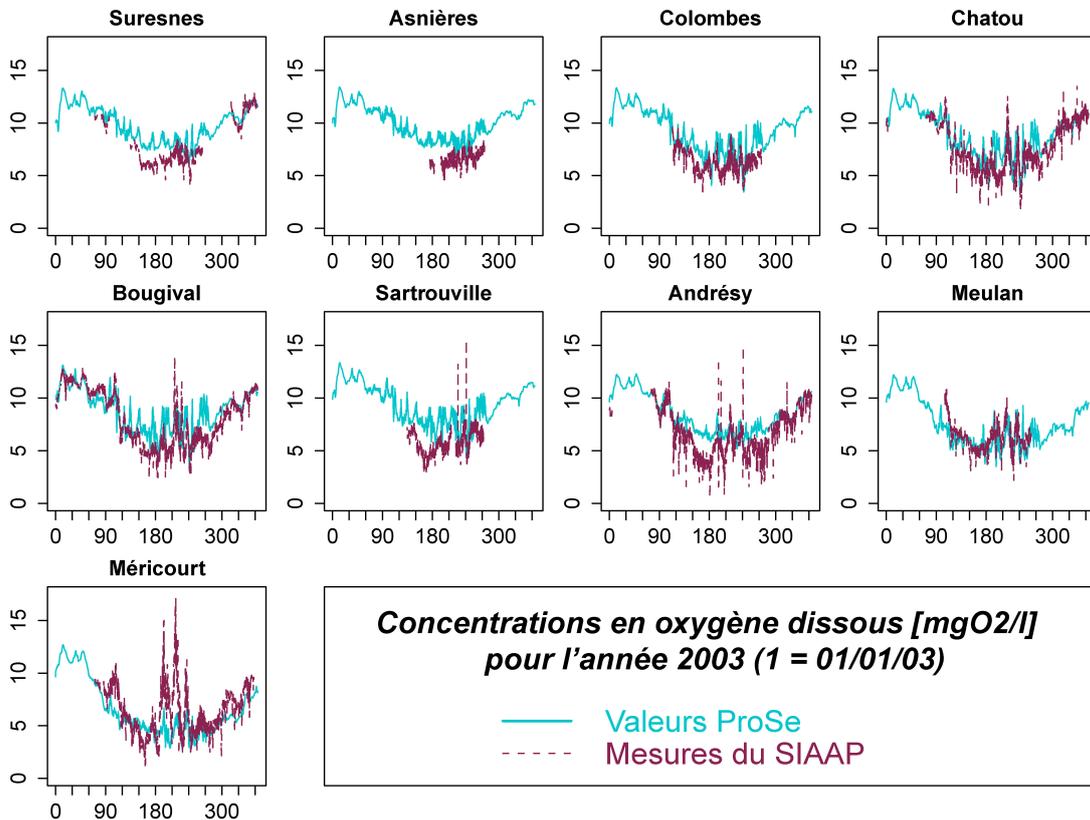


FIGURE 4.10 – Comparaison des concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées aux stations du SIAAP pour l'année 2003 (les abscisses sont les numéros de jour).

Pour l'été 2003, le modèle surestime globalement les concentrations, alors que les maxima mesurés sont systématiquement supérieurs à ceux simulés, avec pour conséquence des écarts-type - pour certains beaucoup - plus élevés pour les mesures que pour les valeurs PROSE. A Asnières seulement, station disposant du plus faible nombre de mesures, effectuées exclusivement en été, ce phénomène n'est pas observé.

Certaines chroniques du SIAAP font en effet apparaître des pics de concentration en été, qui ne sont pas bien reproduits par le modèle PROSE. Les valeurs PROSE présentent bien une variabilité accrue en été, mais l'amplitude de ces variations estivales est bien moindre que celle des pics observés.

Ces derniers expliquent les statistiques des différences entre valeurs PROSE et mesures du SIAAP (Tab. 4.5), calculées sur un champ temporel commun à toutes les stations, i.e. en été, qui confirment la surestimation, en moyenne, des concentrations estivales en oxygène dissous par le modèle, excepté pour les deux stations à l'aval du domaine. D'autre part, ces pics estivaux expliquent également les coefficients de corrélation d'environ 0.5 obtenu pour le premier ensemble

	Mesures du SIAAP					Valeurs PROSE			
	N	min	max	m	σ	min	max	m	σ
Suresnes	4429	4.20	13.00	8.07	2.17	6.01	12.14	9.18	1.57
Asnières	2022	4.60	8.30	6.64	0.66	5.99	10.41	8.44	0.77
Colombes	3577	3.10	9.90	6.32	1.02	3.44	10.23	7.55	1.17
Chatou	6907	1.60	13.49	7.67	2.18	3.26	11.91	8.44	1.73
Bougival	8566	2.42	14.00	8.12	2.51	3.50	13.11	8.76	1.87
Sartrouville	3068	3.00	15.50	5.73	1.06	4.32	10.55	7.72	1.10
Andrésy	6745	0.80	14.90	6.75	2.11	5.03	10.70	7.85	1.36
Meulan	3557	1.50	10.90	6.25	1.28	3.49	9.30	5.79	0.98
Méricourt	6481	0.90	17.20	6.36	2.22	2.80	9.10	5.35	1.27

TABLE 4.4 – *Statistiques classiques des concentrations en oxygène dissous mesurées par le SIAAP et des valeurs PROSE correspondantes, d'amont (Suresnes) en aval (Méricourt). N est le nombre de mesures, min et max les minimum et maximum (respectivement, [mgO₂/l]), m la moyenne ([mgO₂/l]) et σ l'écart-type ([mgO₂/l]).*

(les stations échantillonnées en été uniquement), annonçant une corrélation plutôt médiocre entre les mesures et les valeurs PROSE.

	Différence moyenne		Ecart quadratique moyen [(mgO ₂ /l) ²]	Coefficient de corrélation ρ
	[mgO ₂ /l]	%		
Suresnes	1.11	17	2.02	0.94
Asnières	1.80	28	3.73	0.54
Colombes	1.23	21	2.65	0.54
Chatou	0.77	14	1.98	0.84
Bougival	0.65	13	2.15	0.86
Sartrouville	1.99	38	5.47	0.35
Andrésy	1.10	24	2.55	0.87
Meulan	-0.46	-5	1.36	0.58
Méricourt	-1.00	-8	4.04	0.62

TABLE 4.5 – *Différence moyenne relative et absolue, écart quadratique moyen et coefficient de corrélation entre les valeurs PROSE d'oxygène dissous et les mesures du SIAAP, en chacune des stations.*

En revanche, les stations appartenant au second ensemble, échantillonnées en plusieurs saisons, affichent des coefficients de corrélation bien plus élevés ($\rho > 0.8$), résultant notamment de la bonne reproduction des variations saisonnières. En effet, les chroniques montrent qu'à l'instar des nitrates, cet indicateur présente une variabilité annuelle marquée, avec des concentrations plus faibles en été et plus élevées en hiver. L'amplitude des variations saisonnières, de l'ordre de grandeur des valeurs minimales, croît progressivement au fil de l'eau : les concentrations estivales décroissent d'amont en aval, alors qu'en hiver les valeurs restent à peu près constantes le long du domaine.

La figure 4.11 présente les statistiques des différences entre les valeurs PROSE et les mesures du SIAAP, pour chacun des trimestres de l'année 2003.

Cette décomposition saisonnière révèle que la surestimation des concentrations en oxygène dissous par le modèle PROSE intervient principalement au cours des deuxième et troisième trimestres (au

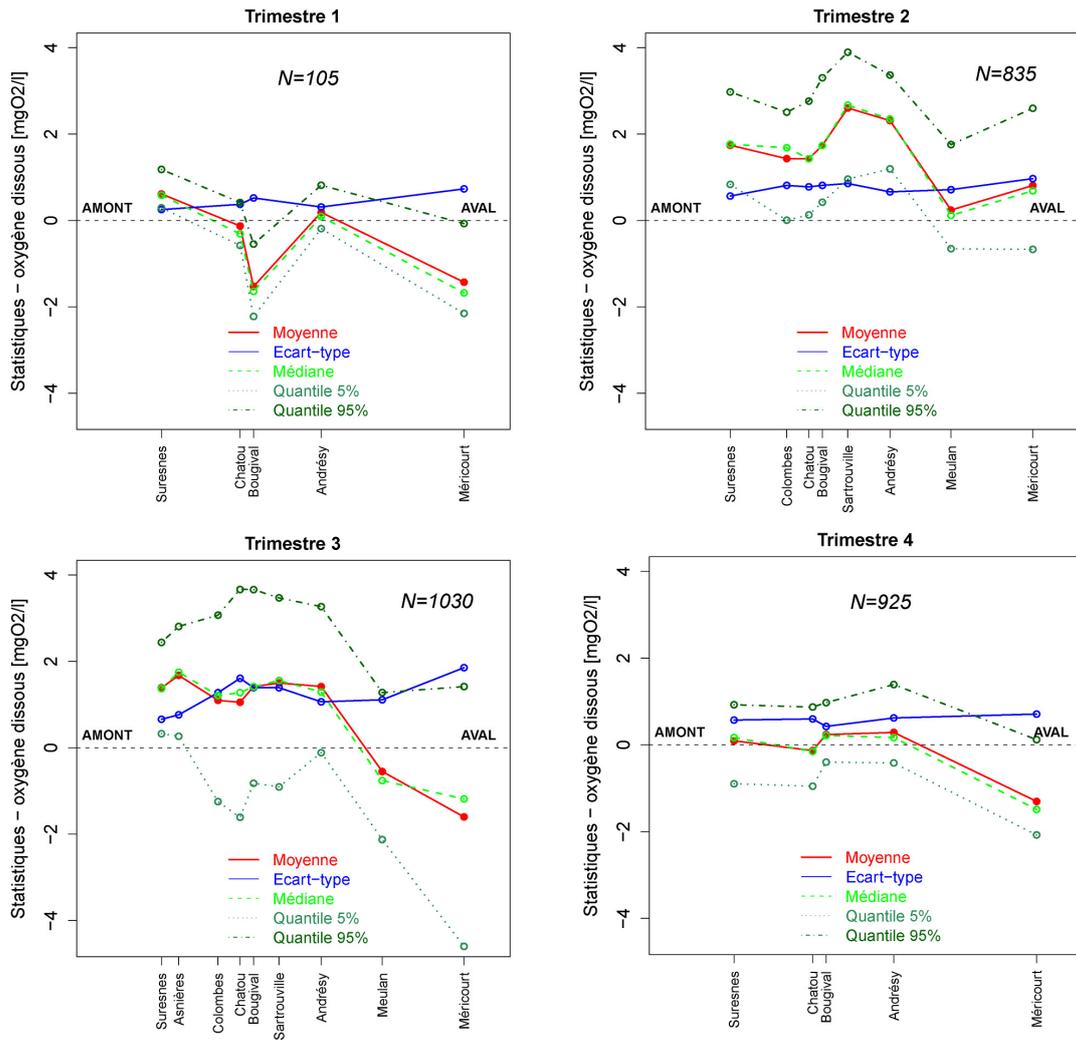


FIGURE 4.11 – *Statistiques moyennes des différences entre concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP le long du réseau, pour les quatre trimestres de l'année 2003. Pour chaque trimestre, les statistiques sont calculées sur un champ temporel commun.*

printemps et surtout en été), lorsque les producteurs primaires photosynthétisent le plus et que la chlorophylle *a* (*chl a*) apparaît, alors que les différences moyennes (aux stations informées) sont quasiment nulles pour les deux autres, du moins jusqu'à Andrésey. Ceci suggère une imperfection du modèle dans les processus impliquant la *chl a*, très difficile à simuler étant donné que des espèces très variées de producteurs primaires sont regroupées en « familles » qui moyennent les processus (Roué-Le Gall et al., 2009). Cette imperfection porte d'autant plus à conséquence que les différences sont relatives aux périodes caractérisées par de faibles concentrations en oxygène dissous.

Les écarts-type sont relativement faibles et constants tout au long de l'année excepté au troisième trimestre, où ils sont maximaux et affichent une tendance à la hausse d'amont en aval, en raison des pics estivaux des mesures. En effet, ceux-ci affichent une amplitude croissante vers l'aval du domaine, les concentrations maximales sur l'ensemble du réseau étant observées à Méricourt. Cette station aval est particulière étant donné qu'elle fournit des mesures estivales et hivernales

qui ne sont pas bien corrélées aux valeurs PROSE : les pics très élevés de concentration mesurés en été ne sont pas reproduits par le modèle PROSE.

4.4.2 Les variogrammes temporels

Deux échelles de temps sont considérées pour l'analyse des variogrammes temporels simples et croisés des valeurs PROSE et des mesures du SIAAP : l'une annuelle et l'autre journalière. En effet, outre les variations saisonnières (cf. § 1.1.1) mises en évidence sur les chroniques, l'oxygène dissous présente un cycle journalier résultant principalement de l'activité photosynthétique. La figure 4.12 présente donc les variogrammes temporels pour une période d'un peu plus de 6 mois, tandis que la figure 4.14 affiche les variogrammes pour une durée de 5 jours. En chaque station, les variogrammes simples et croisé ont été calculés sur le même champ temporel, en exploitant la fréquence horaire disponible.

4.4.2.1 Echelle annuelle

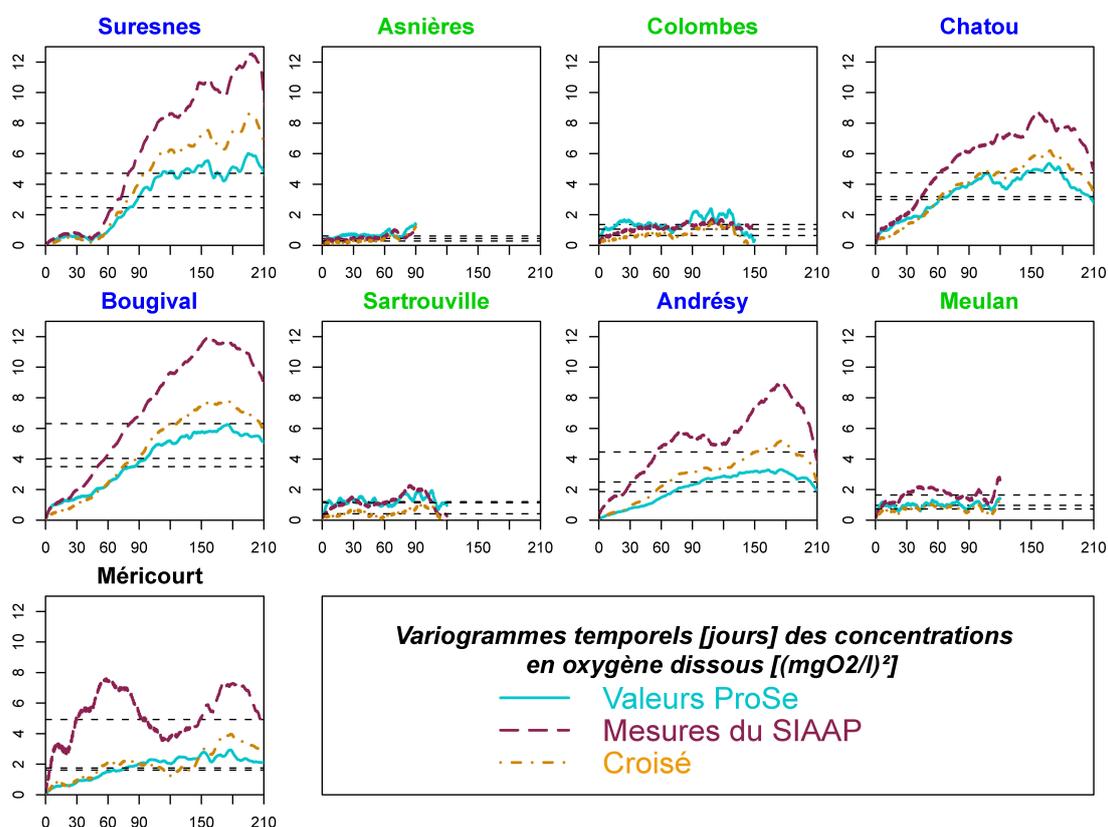


FIGURE 4.12 – Variogrammes temporels des concentrations en oxygène dissous mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE ; échelle annuelle.

La variabilité temporelle, illustrée par l'amplitude des variogrammes, n'est pas identique en toute station : on retrouve les deux ensembles de stations définies ci-avant (cf. § 4.4.1) selon les périodes échantillonnées. Les stations échantillonnées exclusivement en période estivale (en vert clair) conduisent à des variogrammes peu structurés qui présentent une très faible variabilité temporelle en comparaison de celle observée aux stations appartenant au second ensemble (en

bleu).

En effet, les variogrammes relatifs à ces stations, et principalement ceux des valeurs PROSE, laissent deviner la périodicité annuelle. Les variogrammes simples et croisé affichent approximativement la même structure, les variogrammes relatifs aux valeurs PROSE étant systématiquement inférieurs à ceux des mesures du SIAAP, confirmant le lissage des concentrations par le modèle, détecté par les statistiques. En outre, les variogrammes croisés attestent de la corrélation non négligeable entre les structures temporelles des mesures et des valeurs PROSE.

A nouveau, la station de Méricourt se distingue, avec un variogramme des mesures affichant une période d'environ quatre mois qui ne se retrouve pas sur celui des valeurs PROSE, mais apparaît sur le variogramme croisé. Cette période se devine également à Andrésy. C'est un artéfact dû aux pics estivaux, qui atteignent des concentrations similaires voire supérieures aux concentrations hivernales.

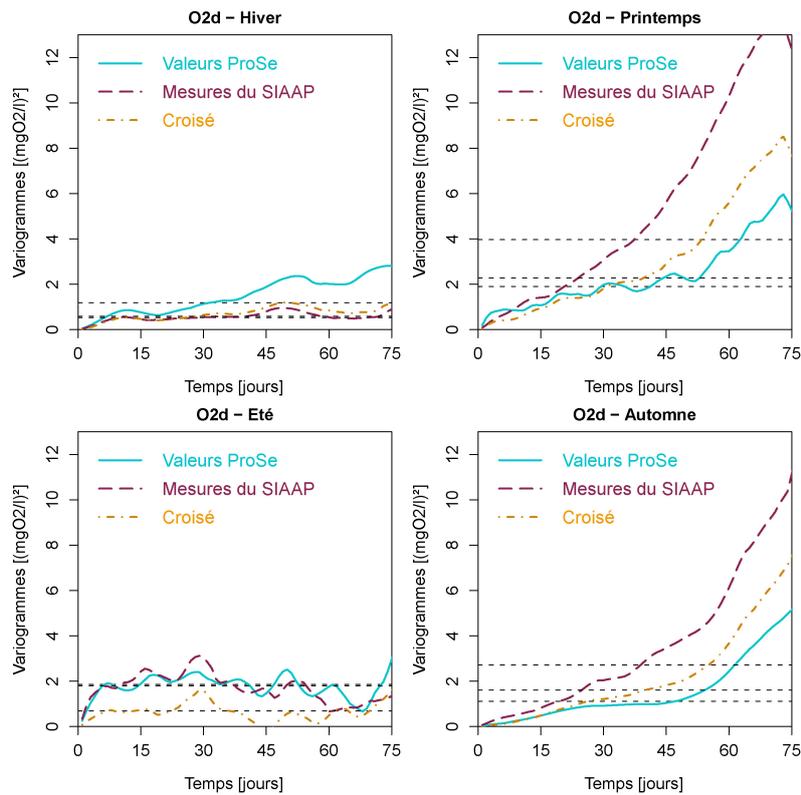


FIGURE 4.13 – Variogrammes temporels des concentrations en oxygène dissous mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE; échelle annuelle.

Ces premières observations suggèrent que la variabilité temporelle des concentrations en oxygène dissous varie selon la saison considérée. La figure 4.13 présente donc les variogrammes temporels simples et croisés calculés pour chaque saison à Bougival, seule station disposant de mesures pour l'année entière.

La variabilité temporelle de l'oxygène dissous est du même ordre de grandeur en hiver et en été, puis au printemps et en automne. En ces saisons, tous les variogrammes, et particulièrement ceux des mesures, affichent des amplitudes plus élevées.

En été, une période d'environ 12 jours apparaît, essentiellement visible sur les valeurs PROSE. Cette période se retrouve également sur les variogrammes estivaux des autres stations, sauf à Andrésy et Méricourt, caractérisées par des pics démesurés où une période d'une vingtaine de jours semble ressortir.

En été, les deux variogrammes simples sont à peu près similaires, alors que le croisé, plus faible, dénote une corrélation médiocre, qui s'avère induite par un décalage temporel de certains cycles journaliers. Pour les autres saisons, une corrélation plutôt forte est observée. Enfin, en hiver, la variabilité des valeurs PROSE, bien que faible, apparaît supérieure à celle des mesures, alors qu'au printemps et en automne, les mesures sont nettement plus variables que les valeurs PROSE.

4.4.2.2 Echelle journalière

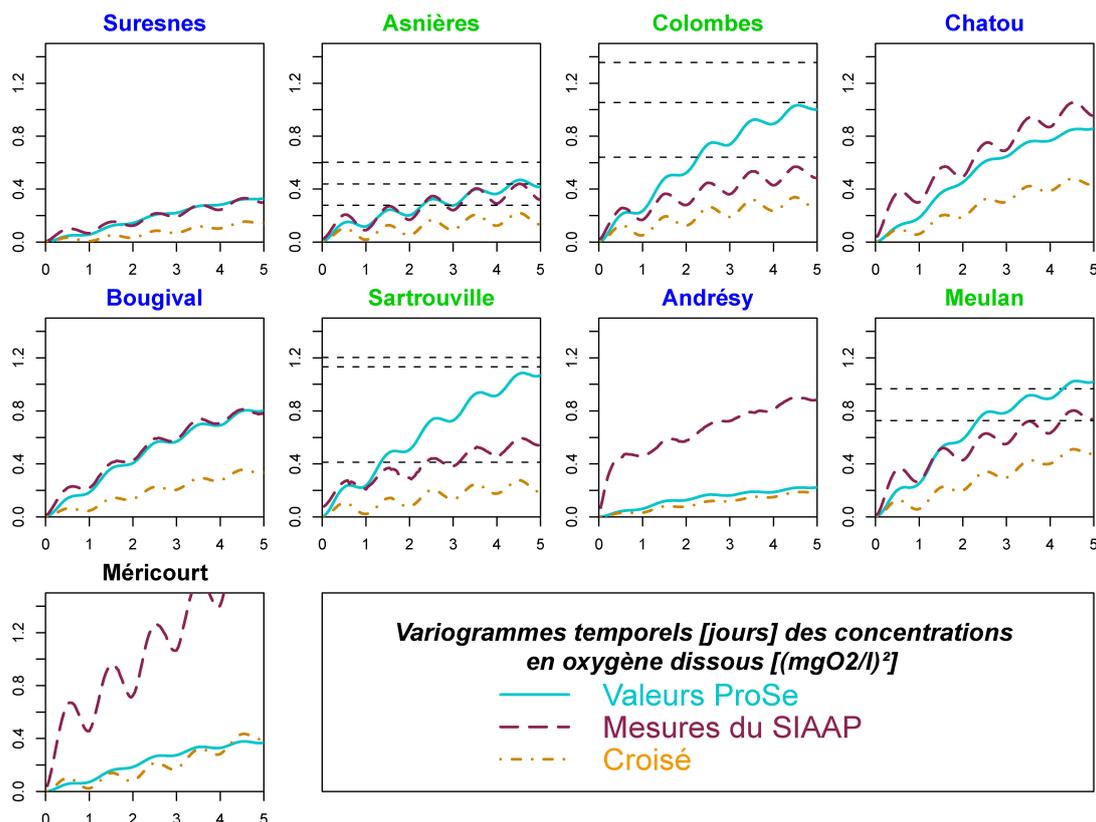


FIGURE 4.14 – Variogrammes temporels des concentrations en oxygène dissous mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE; échelle journalière.

A l'échelle de quelques jours, les cycles journaliers apparaissent sur les variogrammes simples et croisé, montrant que le modèle PROSE reproduit correctement ces variations nycthémerales. Leur amplitude, variable selon les stations, est cependant systématiquement supérieure sur les variogrammes des mesures, témoignant à nouveau d'un phénomène de lissage par le modèle - particulièrement visible à Méricourt.

A l'origine, un très faible effet de pépite est observé sur le variogramme des mesures en certaines stations, mais n'apparaît ni sur le croisé, ni sur le variogramme des valeurs PROSE, tous deux continus à l'origine. Il traduit vraisemblablement la variance de l'erreur de mesure.

L'amplitude des variations journalières est plus marquée sur les mesures que sur les valeurs PROSE, surtout pour les stations échantillonnées en plusieurs saisons. La périodicité journalière, qui apparaît également sur les variogrammes croisés, montre que le modèle PROSE reproduit correctement la variabilité induite par ces cycles nycthémeraux. Cependant, les variabilités à petit intervalle de temps des mesures et des valeurs PROSE ne sont pas bien corrélées, le variogramme croisé

étant considérablement inférieur aux simples. Il présente toutefois une structure analogue à celle des mesures, confirmant qu'au moins partiellement, la variabilité des mesures est bien reproduite par le modèle. Cette moindre corrélation pourrait s'expliquer par un décalage temporel entre les cycles journaliers des mesures et des valeurs PROSE.

Pour les stations échantillonnées en été uniquement (en vert sur la figure), les valeurs PROSE montrent une variabilité égale ou supérieure à celle des mesures à l'échelle de quelques jours, alors que pour les autres (Suresnes, Chatou et Bougival), les variogrammes simples sont très proches, montrant que le modèle PROSE reproduit correctement la variabilité temporelle à cette échelle, même si les variations journalières sont atténuées.

A Andrésy et Méricourt, le variogramme des valeurs PROSE est plutôt faible et superposé au croisé, tous deux étant largement inférieurs au variogramme des mesures. Une partie de la variabilité des mesures, plus importante à Méricourt qu'à Andrésy, n'est donc pas modélisée par PROSE : il s'agit des pics de concentration estivaux.

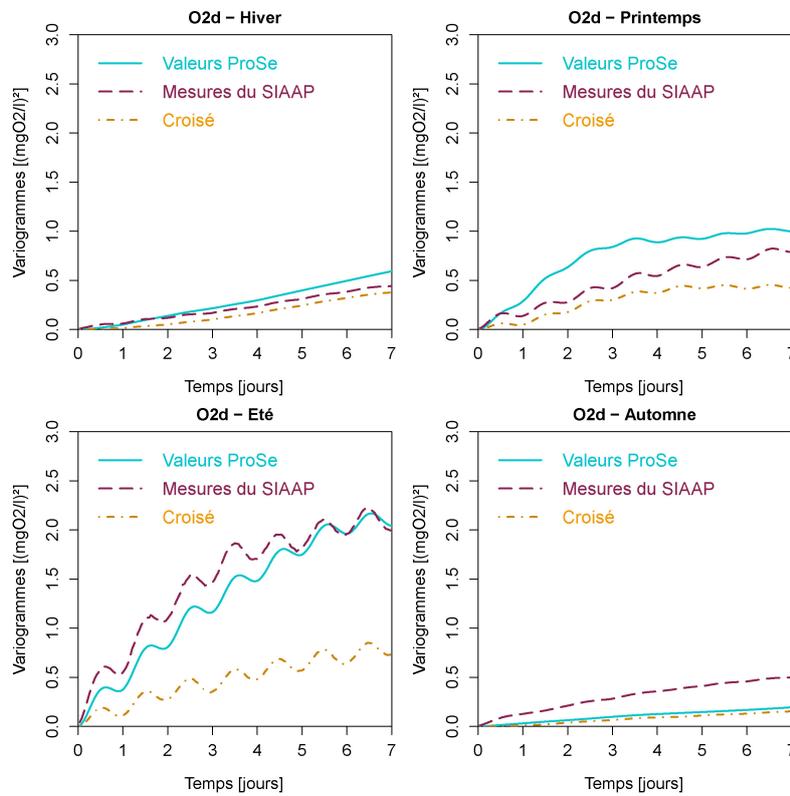


FIGURE 4.15 – Variogrammes temporels des concentrations en oxygène dissous mesurées aux stations du SIAAP et simulées par PROSE ; échelle annuelle.

Les variations nyctémérales résultant de l'activité photosynthétique des producteurs primaires, qui intervient au printemps mais surtout en été, il est légitime de se demander si ces observations restent valables quelle que soit la saison considérée. La figure 4.15 compare donc les variogrammes temporels simples et croisé calculés pour chacune des saisons, à Bougival.

La périodicité journalière est totalement absente des variogrammes temporels en hiver et en automne. On la devine au printemps, notamment sur le variogramme des mesures, mais elle est essentiellement caractéristique de l'été. C'est également en été que la variabilité temporelle est maximale à cette échelle de quelques jours.

Les relations entre valeurs PROSE et mesures ainsi que leur corrélation temporelle évoluent au fil des saisons. Ainsi, en hiver, bien que légèrement plus variables, les valeurs PROSE présentent

une variabilité temporelle similaire à celle des mesures. Au printemps, une structure de portée d'environ 4 jours apparaît sur les valeurs PROSE uniquement, alors nettement plus variables que les mesures. En été, la variabilité des deux ensembles de données augmentent fortement et les mesures sont légèrement plus variables que les valeurs PROSE, du moins jusqu'à un intervalle de 5 jours. En automne, bien que faible, la variabilité des mesures reste supérieure à celle des valeurs PROSE.

4.4.2.3 Discussion et synthèse

La confrontation des valeurs PROSE aux mesures de concentration en oxygène dissous conduit à des résultats différents pour les stations échantillonnées uniquement en été, où la corrélation entre les deux ensembles de données semble médiocre, et pour celles échantillonnées en plusieurs saisons, où la corrélation globale est très bonne. Cette meilleure corrélation s'explique tout d'abord par la périodicité annuelle de ces concentrations, observée sur les mesures couvrant plusieurs saisons et bien reproduite par le modèle PROSE. Mais ces résultats différents proviennent également du fait que **l'été est la saison où les concentrations en oxygène dissous sont les moins bien reproduites par PROSE**. En effet, bien qu'elles présentent une variabilité lissée, les valeurs PROSE des concentrations printanières et automnales présentent une très bonne corrélation avec les mesures correspondantes. Cette très bonne corrélation se dégrade en été, où on observe que :

- les pics sur les mesures, surtout présents vers l'aval du domaine, sont atténués par le modèle PROSE ;
- PROSE surestime systématiquement les concentrations, excepté aux deux stations aval ;
- les concentrations estivales mesurées et simulées présentent des variabilités temporelles similaires, à l'échelle du trimestre comme à l'échelle de quelques jours, mais avec une corrélation médiocre, contrairement aux autres saisons.

Les pics estivaux caractérisant les mesures en aval du domaine ne reflètent pas la concentration en oxygène dissous dans l'eau, étant donné qu'ils dépassent la concentration à saturation, et **faussent** dès lors **la comparaison aux valeurs PROSE**. En effet, lorsque la concentration en oxygène dissous dans l'eau dépasse la concentration à saturation, un phénomène de dégazage se produit. De petites bulles d'oxygène gazeux se forment et remontent à la surface pour « évacuer » cet oxygène excédentaire. Ce faisant, ces bulles d'oxygène peuvent se heurter au capteur de mesure, qui fournit alors une mesure dépassant la concentration à saturation. Le modèle PROSE, quant à lui, ne tolère aucun dépassement de cette concentration à saturation, étant donné que ce n'est pas physiquement possible. Dans le modèle, le dégazage est « immédiat » : la concentration en oxygène est tronquée à la valeur à saturation. Dès lors, aux stations faisant apparaître ces pics (essentiellement à Andrésy et à Méricourt), la corrélation entre les chroniques mesurées et simulées ne semble pas si bonne. Il en est de même pour la corrélation entre les variogrammes temporels, où, masquée par ces pics intenses, la périodicité annuelle se devine à peine sur les variogrammes des mesures, alors qu'elle est bien présente sur les variogrammes des valeurs PROSE.

La surestimation presque constante **des concentrations estivales pourrait**, comme pour les nitrates, **être induite par les conditions aux limites amont**, qu'il serait donc intéressant d'étudier.

Par ailleurs, la cause du changement de comportement du modèle entre Andrésy et Meulan pourrait également être recherchée. Ce changement ne concerne que les moyennes, étant donné qu'aucune différence significative n'a été notée sur les variogrammes temporels.

Enfin, la **corrélation médiocre des variogrammes temporels estivaux**, à l'échelle du trimestre ou de quelques jours, **semble provenir d'un petit déphasage des cycles journaliers**. En effet, le modèle PROSE fournit des valeurs présentant la même variabilité temporelle que les mesures, mais avec des cycles journaliers légèrement décalés dans le temps par rapport aux mesures, ce qui pourrait expliquer que les variogrammes simples montrent des amplitudes similaires, tandis que le variogramme croisé apparaît nettement inférieur.

Afin de mieux comprendre le modèle déterministe et d'avancer dans l'identification des causes de ces petits dysfonctionnements, une analyse des ajustements des variogrammes saisonniers dans le cadre d'un modèle linéaire de co-régionalisation semble indiquée. Cette analyse n'apparaît toutefois pas aisée à réaliser en l'occurrence, en raison du peu de stations informées en plusieurs saisons : une unique station est informée toute l'année 2003, et parmi les trois autres, deux fournissent des mesures « brouillées » par des pics estivaux démesurés. Pour un résultat optimal, cette analyse devrait donc être réalisée pour une année où une majorité des stations du SIAAP est informée en toutes les saisons.

4.4.3 Les variogrammes spatiaux

La figure 4.16a présente les variogrammes spatiaux simples et croisé des concentrations en oxygène dissous mesurées par le SIAAP et simulées par PROSE. Ces variogrammes moyens sont obtenus à partir des variogrammes instantanés calculés pour les échantillons communs à toutes les stations - en l'occurrence 1147 instants de mesure, tous estivaux. Les discontinuités n'ont pas été prises en compte, toutes les stations de mesure étant situées sur la Seine, en aval de sa confluence avec la Marne.

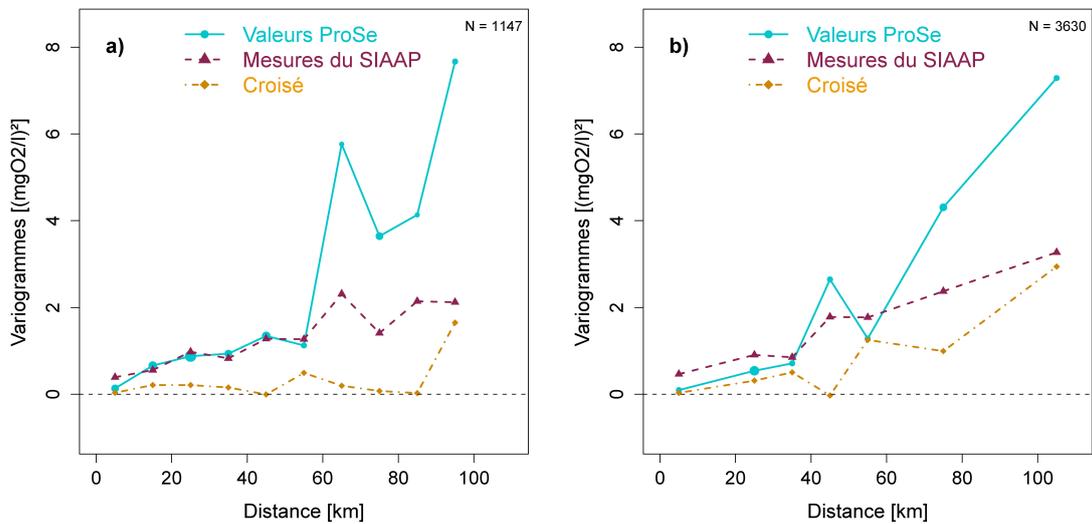


FIGURE 4.16 – Variogrammes spatiaux des concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP. a) Toutes les stations sont considérées. b) Seules les stations du deuxième ensemble (échantillonnées en plusieurs saisons) sont considérées. Le diamètre des points expérimentaux du variogramme des valeurs PROSE est proportionnel au nombre de couples de stations appartenant à la classe de distance correspondante.

Ces variogrammes sont du même ordre de grandeur que les variogrammes temporels relatifs aux stations du premier ensemble (en vert) : en été, la variabilité spatiale n'est pas du tout négligeable en regard de la variabilité temporelle.

Jusqu'à une distance de 50 km, les variogrammes simples sont presque parfaitement superposés, si ce n'est à l'origine où le variogramme des mesures affiche un faible effet de pépité inexistant sur celui des valeurs PROSE. Bien que pour des distances supérieures, les valeurs PROSE apparaissent plus variables que les mesures, cette figure montre que le modèle PROSE induit une variabilité spatiale de l'oxygène dissous quasiment égale à celle des mesures. Le variogramme croisé proche de zéro témoigne cependant de la piètre corrélation entre les différentes structures, à l'instar de ce qui avait été observé pour les nitrates : là encore, PROSE agit comme une simulation non conditionnelle.

L'été n'étant pas représentatif de l'année entière, d'autres variogrammes spatiaux ont été calculés pour les stations échantillonnées en plusieurs saisons (Fig. 4.16b). Les variogrammes simples affichent alors des structures quelque peu différentes, mais le variogramme croisé, également structuré, atteste cette fois de leur corrélation.

Afin de mieux comprendre les relations entre mesures et modèle, des variogrammes spatiaux ont été calculés par trimestre (Fig. 4.17), à partir des stations échantillonnées en plusieurs saisons. Le variogramme présenté à la figure 4.16b n'est donc autre que la moyenne (pondérée) de ces variogrammes.

La variabilité spatiale des concentrations en oxygène dissous n'évolue pas significativement au gré des saisons ; loin d'être négligeable, elle est toutefois inférieure à la variabilité annuelle, et rejoint l'ordre de grandeur de la variabilité temporelle observée en été.

Les variogrammes relatifs à l'été ressemblent à ceux de la figure 4.16b, avec des variogrammes simples quasiment confondus jusqu'à environ 60 kilomètres, et un variogramme croisé qui oscille autour de zéro. Cette imperfection du modèle pourrait provenir de la modélisation approximative du comportement de la chl *a* et/ou de son influence sur l'oxygène dissous, déjà mise en avant lors de la comparaison des chroniques.

En revanche, le printemps et l'automne montrent tous deux des variogrammes simples et croisé similaires, dénotant une bonne corrélation entre les structures des valeurs PROSE et des mesures. Aux distances inférieures à 30 km, le dernier trimestre pourrait même être interprété en modèle à résidu (i.e. les mesures sont égales aux valeurs PROSE augmentées d'un résidu non corrélé). Pour des distances supérieures, la variabilité spatiale des valeurs PROSE outrepassa celle des mesures, quelle que soit la saison considérée.

4.5 Comparaison aux mesures du RNB

Pour les nitrates d'abord et l'oxygène dissous ensuite, une comparaison synthétique des chroniques mesurées et simulées par PROSE ouvrira le paragraphe. Suivront les statistiques des différences entre valeurs PROSE et mesures du RNB, tandis que l'analyse de leurs variogrammes temporels puis spatiaux complèteront cette analyse exploratoire conjointe.

Les mesures considérées sont donc celles du Service de Navigation de la Seine, qui comprennent entre 10 et 48 mesures annuelles et sont habituellement les seules disponibles (cf. §2.2.1 et Fig. 2.1).

4.5.1 Nitrates

Le tableau 4.6 reprend les statistiques classiques (effectif, moyenne, écart-type) et les coefficients de corrélation des concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées par le RNB.

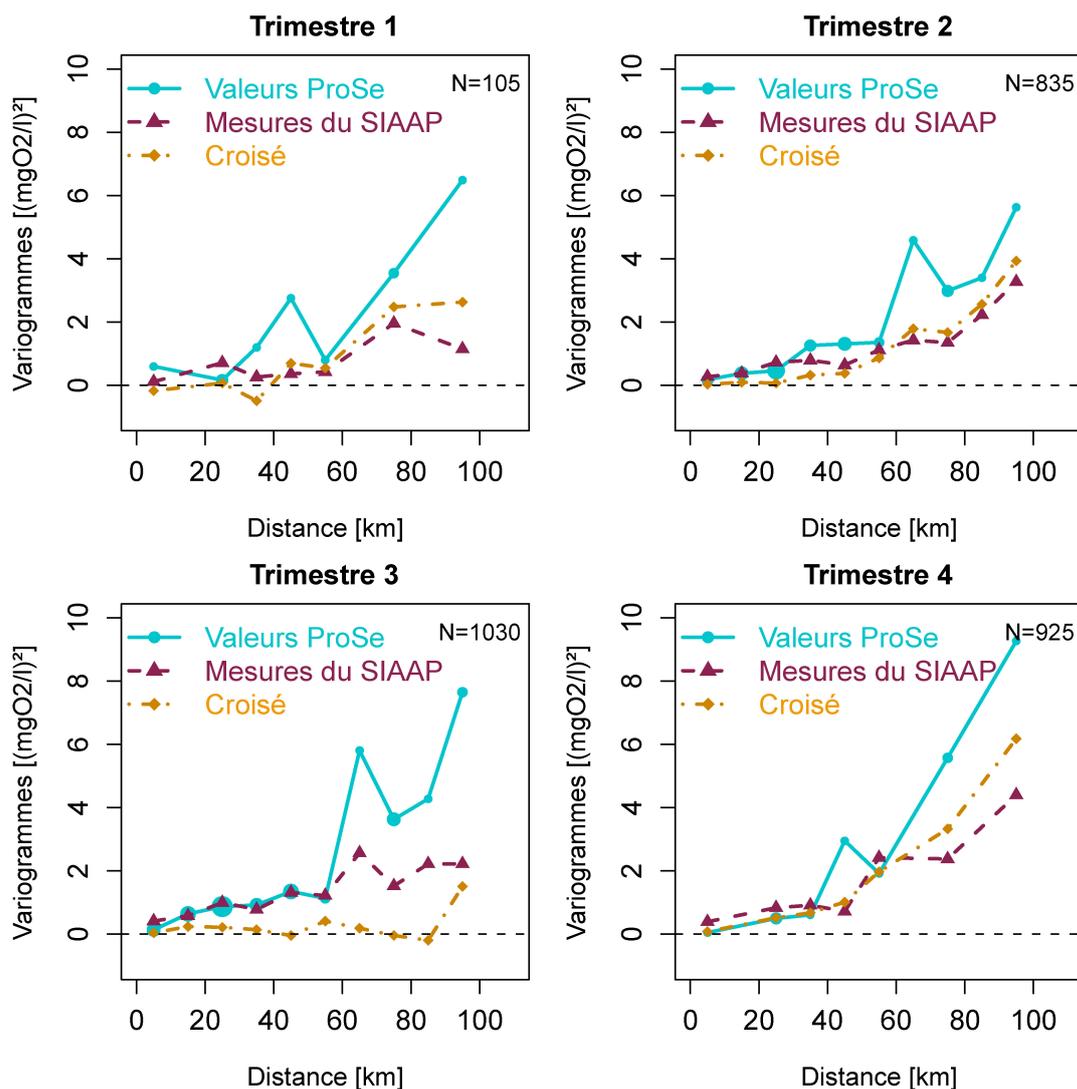


FIGURE 4.17 – Variogrammes spatiaux simples et croisé des concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées par le SIAAP, pour chacun des trimestres de l'année 2003.

Globalement, en amont, les valeurs PROSE se superposent aux mesures du RNB, montrant une excellente corrélation entre les deux chroniques, confirmée par les coefficients de corrélation. Une tendance à la surestimation des concentrations au fil de l'eau sur la Seine, ainsi qu'une surestimation systématique sur la Marne sont notées. Les valeurs PROSE conservent toutefois une remarquable corrélation avec les mesures, qui traduit la bonne reproduction de la périodicité saisonnière des mesures.

À partir de la station 21, la corrélation se dégrade progressivement jusqu'à devenir médiocre au-delà du $pk = 800$ km ($\rho < 0.5$) : la périodicité saisonnière est toujours très marquée sur les mesures, alors qu'elle disparaît progressivement des valeurs PROSE, dévoilant un dysfonctionnement - ou une « dérive » - du modèle. Pour les trois stations aval, les valeurs PROSE ont même tendance à augmenter durant le printemps, à l'inverse des concentrations mesurées.

La surestimation des concentrations en nitrates par le modèle ainsi que sa « dérive » à l'aval du domaine sont confirmées par les statistiques des différences entre valeurs PROSE et mesures du RNB (Fig. 4.18).

		RNB		PROSE					RNB		PROSE		
<i>St</i>	<i>N</i>	<i>m</i>	σ	<i>m</i>	σ	ρ	<i>St</i>	<i>N</i>	<i>m</i>	σ	<i>m</i>	σ	ρ
1	12	23.24	4.02	23.80	3.96	0.97	15	11	16.85	3.61	20.27	4.36	0.98
2	12	23.31	4.12	23.65	4.00	0.95	16	11	17.59	3.28	21.18	3.84	0.96
3	23	26.27	4.19	26.36	3.08	0.71	17	23	17.54	3.04	20.57	3.84	0.91
4	11	23.15	2.85	24.14	2.80	0.82	18	12	20.71	3.50	21.63	3.25	0.94
5	11	22.53	2.60	23.38	2.47	0.93	19	12	20.77	2.98	21.99	2.96	0.92
6	12	22.88	2.53	23.68	3.06	0.92	20	12	21.06	3.22	22.58	2.89	0.85
7	12	22.67	2.72	23.55	3.10	0.93	21	12	21.25	2.99	23.75	2.78	0.70
8	12	22.63	2.78	23.56	3.08	0.87	22	12	22.13	3.28	25.04	3.01	0.56
10	12	22.36	2.98	23.32	3.28	0.90	23	12	22.35	2.39	25.79	2.71	0.54
11	11	22.63	3.81	23.77	3.12	0.91	25	12	22.71	2.38	27.19	2.62	0.19
12	24	19.41	3.51	20.64	4.17	0.92	26	12	23.26	2.55	27.68	2.74	0.29
13	11	17.11	3.57	20.56	4.32	0.97	27	48	24.22	2.76	28.86	3.21	0.31
14	10	17.41	3.63	20.95	4.21	0.98							

TABLE 4.6 – *Statistiques classiques des concentrations en nitrates mesurées aux stations (*St*) du RNB et des valeurs PROSE correspondantes. Les stations reprises en rouge sont celles situées sur la Marne ; *N* est l'effectif, *m* la moyenne ($[mgNO_3/l]$), σ l'écart-type ($[mgNO_3/l]$), et ρ le coefficient de corrélation.*

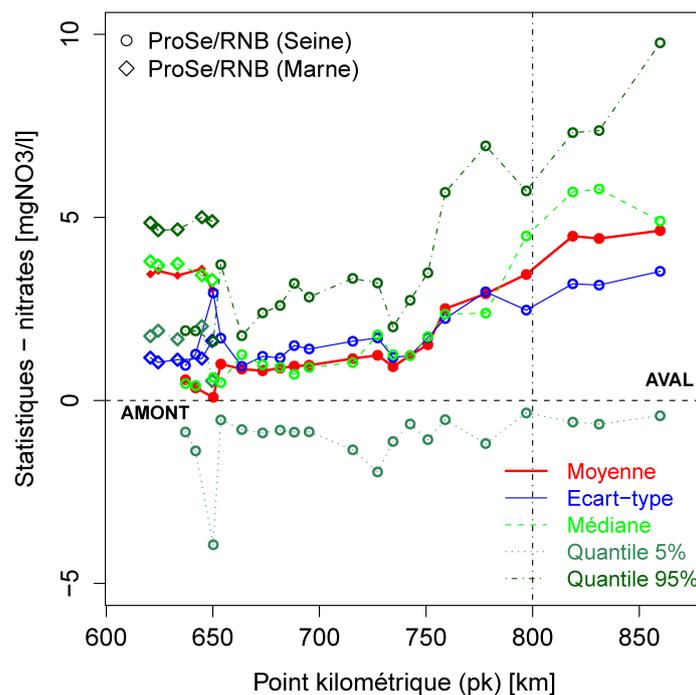


FIGURE 4.18 – *Statistiques moyennes des différences entre concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées par le RNB le long du réseau.*

Remarquons que cette « dérive » n'a pu être mise en évidence lors de la comparaison des valeurs PROSE aux mesures du SIAAP (cf. §4.3.1), le point le plus aval échantillonné par cet organisme se situant à Poissy, au $pk = 735$ km.

Jusqu'à la station 20, les variogrammes temporels simples et croisés des valeurs PROSE et des mesures du RNB font tous apparaître la périodicité annuelle des concentrations, avec un variogramme croisé entre les deux simples témoignant d'une forte corrélation. Si le modèle PROSE surestime systématiquement la variabilité temporelle des nitrates sur la Marne, sur la Seine, en revanche, les variogrammes simples sont très proches.

En aval de la station 20, les variogrammes des valeurs PROSE concordent de moins en moins avec ceux des mesures, et les variogrammes croisés fluctuent autour du zéro, confortant l'hypothèse d'un dysfonctionnement du modèle à l'aval.

Nous avons donc décidé de restreindre le domaine de validité du modèle PROSE aux pk inférieurs à 800 km.

Examinons maintenant les variogrammes spatiaux (Fig. 4.19), qui, comme précédemment, sont des moyennes de variogrammes instantanés calculés entre stations synchrones. Le domaine restreint a donc été divisé en trois tronçons répondant à ces critères, indépendamment des discontinuités majeures : la Marne (stations 13 à 17), la Seine amont (stations 1 à 8, de part et d'autre de la confluence Seine/Marne), et la Seine aval (stations 10 à 23, de part et d'autre de la confluence Seine/Oise).

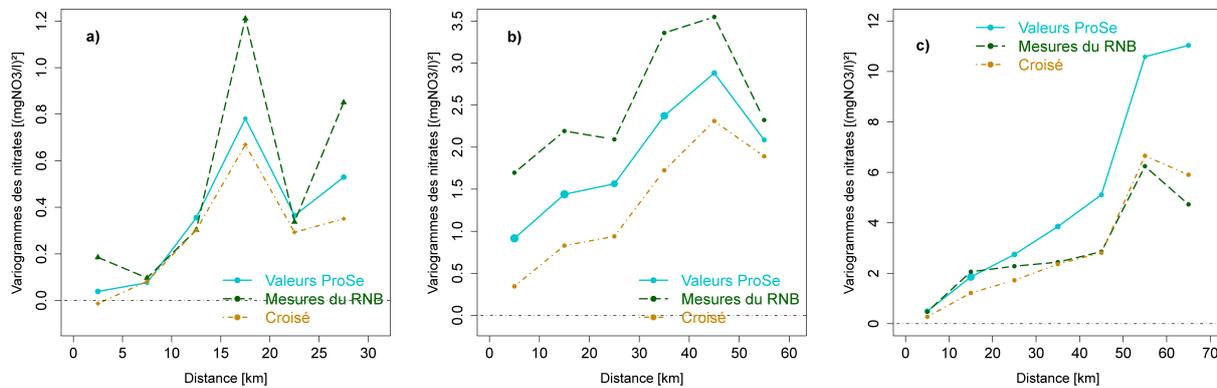


FIGURE 4.19 – Variogrammes spatiaux simples et croisé des concentrations en nitrates simulées par PROSE et mesurées aux stations du RNB. a) Marne. b) Seine amont : $pk \in [630, 700]$. c) Seine aval : $pk \in [700, 800]$.

Deux observations importantes ressortent, qui argumentent et confortent l'hypothèse d'un comportement différent des concentrations en nitrates selon le bief considéré, déjà évoquée au § 4.3.2.

- La variabilité spatiale des mesures et des valeurs PROSE, bien que toujours inférieure à leur variabilité temporelle, apparaît plus élevée sur les tronçons incluant une discontinuité.
- Les variogrammes croisés structurés et très proches des variogrammes simples témoignent de la bonne corrélation entre les structures spatiales des concentrations en nitrates mesurées et simulées. C'est également le cas des variogrammes relatifs à la Marne, calculés entre stations d'un même bief, ce qui contraste avec les observations précédentes (cf. §4.3.2) : sur la Marne, PROSE n'agit pas comme une simulation non conditionnelle.

4.5.2 Oxygène dissous

Le tableau 4.7 reprend les statistiques classiques (effectif, moyenne, écart-type) et les coefficients de corrélation des concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées par le RNB.

<i>St</i>	<i>N</i>	RNB		PROSE			<i>St</i>	<i>N</i>	RNB		PROSE		
		<i>m</i>	σ	<i>m</i>	σ	ρ			<i>m</i>	σ	<i>m</i>	σ	ρ
1	12	9.56	1.91	10.00	1.89	0.91	15	11	9.33	2.22	9.52	1.72	0.96
2	11	9.47	1.60	9.76	1.78	0.75	16	11	9.59	2.38	9.43	1.63	0.87
3	43	10.01	1.87	9.78	1.82	0.92	17	43	9.93	1.77	9.60	1.35	0.88
4	11	9.71	1.74	9.72	1.66	0.93	18	23	8.85	1.99	8.36	1.98	0.87
5	12	9.54	1.78	9.83	1.63	0.94	19	12	8.58	2.27	8.03	2.25	0.81
6	35	9.37	2.03	9.75	1.73	0.92	20	12	8.23	2.30	7.72	2.32	0.88
7	12	9.48	2.03	9.86	1.65	0.92	21	13	7.75	2.17	6.27	2.75	0.88
8	12	9.22	2.16	9.85	1.64	0.91	22	24	7.29	2.62	5.23	3.05	0.81
10	12	9.22	2.34	8.91	2.20	0.92	23	12	8.27	2.04	7.58	2.54	0.95
11	12	9.13	2.42	9.53	2.06	0.93	25	24	7.49	2.23	7.26	2.64	0.88
12	23	7.35	2.46	6.88	2.89	0.87	26	12	7.74	2.10	8.71	2.24	0.85
13	11	9.68	2.38	9.78	1.78	0.87	27	48	7.54	2.32	8.19	2.47	0.76
14	10	9.69	2.37	9.95	1.64	0.87							

TABLE 4.7 – *Statistiques classiques des concentrations en oxygène dissous mesurées aux stations (St) du RNB et des valeurs PROSE correspondantes. Les stations reprises en rouge sont celles situées sur la Marne ; N est l'effectif, m la moyenne ([mgO₂/l]), σ l'écart-type ([mgO₂/l]), et ρ le coefficient de corrélation.*

Sur la Marne comme sur la Seine, les concentrations mesurées semblent très bien reproduites par le modèle. En effet, les deux chroniques sont quasiment confondues sur l'entièreté du domaine et affichent des coefficients de corrélation élevés, dévoilant le très bon fonctionnement de PROSE sur l'ensemble du réseau : contrairement aux nitrates, aucune dérive n'est observée en aval du domaine.

Les concentrations mesurées et simulées sont toutes deux caractérisées par des pics estivaux qui s'amplifient d'amont en aval, excepté à la station 22 où ils sont beaucoup plus marqués sur les mesures du RNB que sur les valeurs PROSE. Ceci rejoint les observations du §4.4.1, qui dévoilaient la tendance du modèle à sous-estimer l'importance des pics estivaux, et tout particulièrement à Méricourt, station située à 1.5 km de la station 22.

Les statistiques des différences entre les chroniques mesurées par le RNB et simulées par PROSE (Fig. 4.20) confirment l'exactitude des simulations, avec une différence moyenne oscillant autour du zéro, excepté à proximité de la station 22 ou encore de la station du SIAAP de Méricourt, portion du domaine pour laquelle PROSE sous-estime les pics estivaux excessivement marqués sur les mesures. Cette observation revêt une importance particulière, étant donné que, Méricourt étant la station du SIAAP la plus en aval, la comparaison des mesures du SIAAP aux valeurs PROSE suggérerait une forme de dérive du modèle en aval, consistant à sous-estimer considérablement ces pics estivaux. Or les chroniques mesurées en aval par le RNB, très bien reproduites par le modèle PROSE, montrent que cette sous-estimation ne survient que localement.

Les variogrammes temporels simples et croisé des concentrations en oxygène dissous mesurées par le RNB et simulées par PROSE sont uniquement analysés à l'échelle annuelle, en raison de la fréquence mensuelle des mesures. Bien que calculés à partir d'un nombre limité de mesures, ils reflètent tous la périodicité annuelle de l'oxygène dissous ainsi que la forte corrélation entre les structures des mesures et valeurs PROSE. La station 22 fait à nouveau exception.

A l'amont, et principalement sur la Marne, la variabilité des mesures est supérieure à celle des valeurs PROSE, ce qui pourrait s'expliquer par le fait que l'heure des mesures du RNB n'est pas précisée et que les valeurs PROSE sont arbitrairement prises à midi.

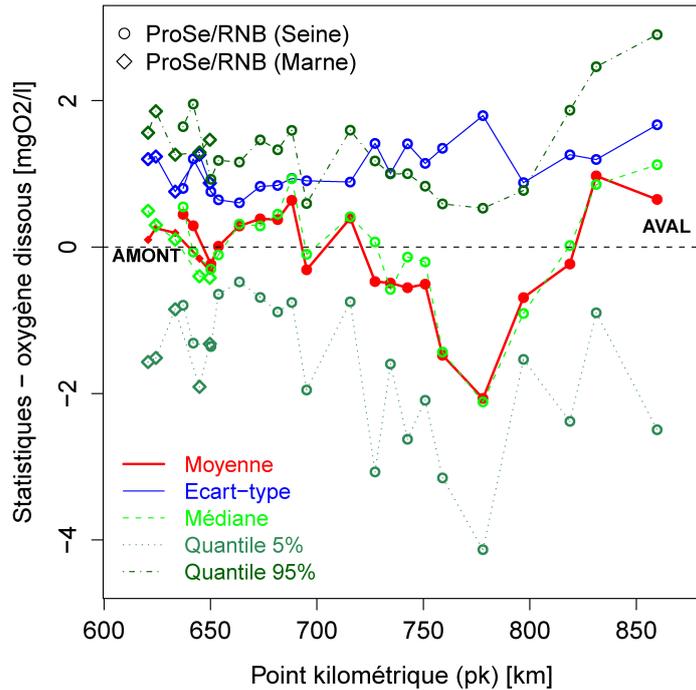


FIGURE 4.20 – Statistiques moyennes des différences entre concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées par le RNB le long du réseau.

A l'aval, la variabilité des valeurs PROSE apparaît cette fois légèrement supérieure à celle des mesures, mais toujours aussi bien corrélée à celle des mesures.

Observons enfin les variogrammes spatiaux (Fig. 4.21), qui, comme pour les nitrates, sont calculés sur les trois tronçons définis par les jours de mesure et indépendamment des discontinuités.

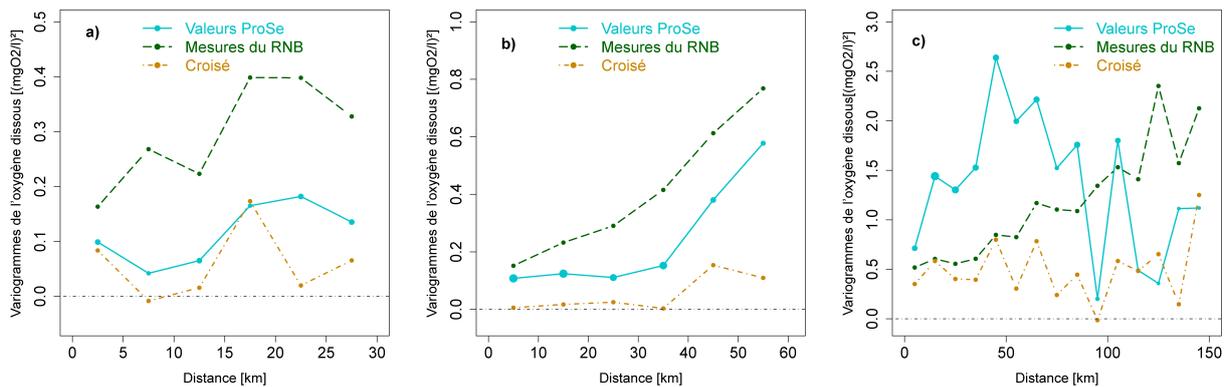


FIGURE 4.21 – Variogrammes spatiaux des concentrations en oxygène dissous simulées par PROSE et mesurées aux stations du RNB. a) Marne. b) Seine amont : $pk \in [630, 700]$. c) Seine aval : $pk \in [700, 860]$.

Les variogrammes des mesures du RNB paraissent structurés dans l'espace, aussi bien par bief (Fig. 4.21a) qu'à travers une discontinuité majeure (Fig. 4.21b et c). Ils présentent le même ordre de grandeur sur les différents tronçons, suggérant que, contrairement aux nitrates, le comportement des concentrations en oxygène dissous n'est pas fortement influencé par les confluences.

Par contre, le variogramme des valeurs PROSE, tantôt inférieur, tantôt supérieur à celui des mesures, ne semble pas aussi bien structuré. Quant au variogramme croisé, il est approximativement constant (quasiment nul ou plutôt pépitique) pour les trois tronçons, dénotant une piètre corrélation.

Ces observations contrastent avec celles du paragraphe §4.4.3 (comparaison aux mesures du SIAAP), où les variogrammes couvrant plusieurs trimestres sont deux fois plus importants et présentent une bien meilleure corrélation (cf. Fig. 4.16b).

4.6 Synthèse

Pour les concentrations en **nitrates**, la comparaison des valeurs PROSE (après modification des CL amont) aux mesures hebdomadaires du SIAAP et aux mesures mensuelles du RNB conduit aux mêmes conclusions.

Bien que sous-estimant légèrement leur variabilité temporelle, le modèle reproduit très bien les chroniques de nitrates, fortement corrélées aux mesures. Suite à la mise en évidence d'une dérive du modèle lors de la comparaison aux mesures du RNB, les seules disponibles en aval, le domaine a été tronqué au $pk = 800$ km. Sur ce domaine réduit d'une soixantaine de kilomètres, *le modèle PROSE est donc jugé admissible comme maquette temporelle* pour les concentrations en nitrates. La variabilité spatiale de ces concentrations, qui apparaît plus faible que leur variabilité temporelle - et même négligeable en considérant l'échantillonnage des mesures du SIAAP -, varie selon les tronçons considérés. Que l'on considère la comparaison aux mesures du SIAAP, montrant des variogrammes simples et croisés qui évoquent des simulations non conditionnelles, ou aux mesures du RNB, avec des structures spatiales corrélées, *le modèle PROSE est adopté comme maquette spatiale* pour les nitrates.

Les comparaisons des valeurs PROSE d'**oxygène dissous** aux mesures horaires du SIAAP puis aux mesures mensuelles du RNB se sont en revanche révélées complémentaires.

En effet, l'analyse des mesures exhaustives du SIAAP a permis d'évaluer la capacité de PROSE à reproduire le comportement de l'oxygène dissous à l'échelle de quelques jours, alors que l'analyse des mesures RNB, beaucoup moins nombreuses mais réparties sur l'année entière, a démontré le bon fonctionnement du modèle à l'échelle annuelle. De plus, il ressort de cette seconde comparaison que la sous-estimation des pics estivaux par PROSE intervient uniquement sur une vingtaine de kilomètres, et non sur la partie aval du domaine, comme le laissait présager l'analyse des mesures du SIAAP. Ces deux confrontations *légitiment l'utilisation du modèle PROSE comme maquette temporelle* pour l'oxygène dissous.

Spatialement, les conclusions divergent selon les mesures d'oxygène dissous considérées. Pour celles couvrant plusieurs trimestres, les mesures horaires du SIAAP affichent une variabilité spatiale non négligeable en regard de la variabilité temporelle, et fortement corrélée avec celle des valeurs PROSE, suggérant *la validité du modèle comme maquette spatiale*. En revanche, la variabilité spatiale des mesures mensuelles du RNB apparaît très faible et sans rapport avec celle des valeurs PROSE, pour un champ temporel commun. Si ces mesures du RNB décrivent correctement la variabilité annuelle des concentrations en oxygène dissous, elle se révèlent cependant insuffisantes pour caractériser correctement leur comportement spatial instantané.

Estimations simplifiées

Chapitre 5

Reconstitution de chroniques temporelles aux stations

Faisant suite aux analyses exploratoires conjointes des mesures et des valeurs PROSE de nitrates et d'oxygène dissous, ce chapitre reprend quelques exemples d'application de la géostatistique classique au domaine de la qualité de l'eau. Les estimations temporelles présentées font appel à des méthodes géostatistiques bien connues (Matheron, 1970), l'objectif étant de montrer les vastes possibilités offertes par ces méthodes pour le domaine qui nous concerne, et notamment pour l'évaluation des incertitudes.

Pour les nitrates, le co-krigeage temporel de mesures hebdomadaires par des mesures journalières s'est déjà révélé bien utile pour obtenir des conditions aux limites amont plus cohérentes (cf. §4.2). Les mesures du SIAAP et les valeurs PROSE s'ajustant dans le cadre du modèle linéaire de co-régionalisation en chaque station (cf. annexe A, §A.4.3), un co-krigeage des mesures par les valeurs PROSE permet de « recalcr » le modèle aux données, pour obtenir une chronique journalière encore plus proche de la réalité, à l'exemple des travaux de de Fouquet et al. (2010) en pollution atmosphérique. La comparaison au krigeage des mesures permet de quantifier l'apport du co-krigeage et donc du modèle PROSE. La même démarche est réitérée à partir des mesures mensuelles du RNB, pour les nitrates et l'oxygène dissous.

Ensuite, la reconstitution d'une chronique complète d'oxygène dissous est envisagée à partir d'une chronique lacunaire, en s'aidant d'une part des valeurs PROSE en ce point mais également de la chronique complète mesurée quelques kilomètres en aval.

Trois ensembles de données interviennent donc, pour les nitrates et l'oxygène dissous : les valeurs PROSE, les mesures du SIAAP, ainsi que les mesures du RNB (cf. chapitre 2).

5.1 Rappel : le modèle linéaire de co-régionalisation

Dans le modèle linéaire de co-régionalisation, les variogrammes simples et croisé sont des combinaisons linéaires des mêmes composantes temporelles $\gamma^u(\tau)$, une composante présente sur le variogramme croisé étant nécessairement présente sur les deux variogrammes simples. Ce modèle peut être vu comme une combinaison linéaire de plusieurs composantes temporelles u , mutuellement non corrélées, et chacune en corrélation intrinsèque (Eq. 5.1).

$$\gamma_{ij}(\tau) = \sum_u b_{ij}^u \gamma^u(\tau) \quad (5.1)$$

A l'instar de ceux définis pour le modèle de corrélation intrinsèque (cf. annexe A, §A.4.3), un coefficient de corrélation et un rapport de paliers peuvent être calculés pour chaque composante u (Eq. 5.2).

$$\begin{aligned}\rho_{12}^u &= \frac{b_{12,n_e}^u}{\sqrt{b_{11,n_e}^u \cdot b_{22,n_e}^u}} \\ (\omega_{12}^u)^2 &= \frac{b_{22,n_e}^u}{b_{11,n_e}^u}\end{aligned}\tag{5.2}$$

Etant donné qu'ils synthétisent les relations entre les fonctions aléatoires $Z_1(s)$ et $Z_2(s)$ pour la composante u , ces coefficients sont supposés constants quel que soit le champ temporel ou le nombre d'échantillons n_e considéré.

$$\begin{aligned}\rho_{12,n_{e_1}}^u &= \rho_{12,n_{e_2}}^u \quad \forall n_{e_1} \neq n_{e_2} \\ \omega_{12,n_{e_1}}^u &= \omega_{12,n_{e_2}}^u \quad \forall n_{e_1} \neq n_{e_2}\end{aligned}$$

5.2 Recalage temporel de la simulation PROSE aux stations

5.2.1 Démarche

En chaque station de mesure, deux informations différentes sont disponibles : d'une part, les mesures, hebdomadaires ou mensuelles, qui échantillonnent la réalité en certains instants et, d'autre part, la simulation déterministe PROSE, exhaustive, proche de la réalité mais différente de ces mesures.

L'objectif est de combiner ces deux ensembles de données afin d'obtenir une chronique complète plus réaliste, respectant les mesures. L'analyse exploratoire du chapitre précédent (cf. §4.3.1) ayant montré que les valeurs PROSE et les mesures présentent une forte corrélation temporelle et que leurs variogrammes simples et croisé répondent à un modèle linéaire de co-régionalisation, le co-krigeage apparaît à nouveau comme l'outil approprié.

D'importants écarts entre mesures et valeurs PROSE de concentrations en nitrates ayant été relevés sur la Marne (cf. §4.2.1), celle-ci a été retenue pour l'exemple, avec la station d'Alfortville pour le SIAAP et la station 17, très proche, pour le RNB (cf. Fig. 2.1). En ces stations, tant les nitrates que l'oxygène dissous s'ajustent à l'aide d'un modèle de variogramme bivariable à trois composantes : un très faible effet de pépite, une composante exponentielle de portée mensuelle, ainsi qu'une composante sinusoïdale de période annuelle largement prédominante.

Le modèle variographique bivariable modélise les relations entre les mesures et les valeurs PROSE. Pour éviter de fausser ces relations, l'ajustement (manuel) est effectué à partir de variogrammes expérimentaux calculés sur le même champ temporel, en l'occurrence les 12 ou 52 jours de mesure, selon les mesures considérées (RNB ou SIAAP, respectivement). Or les valeurs PROSE présentent une plus grande densité d'échantillonnage - elles sont disponibles tous les jours à midi ; elles peuvent donc être mises à profit pour affiner ou « corriger » les variogrammes temporels.

En effet, les relations entre les mesures $Z_1(t)$ et les valeurs PROSE $Z_2(t)$ sont synthétisées par les coefficients b_{ij,n_e}^u ajustés sur les n_e échantillons ($b_{ij,52}^u$ ajustés sur les 52 instants de mesures du

SIAAP, par exemple), et donc par les coefficients de corrélation ρ_{12}^u et rapports de paliers ω_{12}^{u2} qui s'en déduisent (cf. Eq. 5.2). Par ailleurs, l'ajustement du variogramme exhaustif des valeurs PROSE, calculé à partir des 365 valeurs, fournit les coefficients $b_{22,365}^u$. Un modèle variographique « corrigé » peut dès lors être reconstitué à partir de ces coefficients et des paramètres ρ_{12}^u et ω_{12}^u , en conservant les relations (le rapport des variabilités et la corrélation) observées entre mesures et valeurs PROSE :

$$b_{11,365}^u = \frac{b_{22,365}^u}{\omega_{12}^{u2}} \text{ et } b_{12,365}^u = \rho_{12}^u \frac{b_{22,365}^u}{\omega_{12}^u} \quad \forall u.$$

Un co-krigeage des mesures par les valeurs PROSE, fondé sur ce modèle variographique « corrigé », permet alors d'obtenir une chronique journalière passant par les mesures ainsi qu'une variance d'estimation associée réalistes.

5.2.2 Recalage aux mesures du SIAAP

La figure 5.1 présente les variogrammes expérimentaux des concentrations en nitrates mesurées et simulées à Alfortville, calculés sur le champ temporel commun (51 jours), ainsi que leur ajustement en modèle linéaire de co-régionalisation. Le variogramme expérimental des 365 valeurs PROSE est en outre affiché. En cette station, l'échantillonnage des valeurs PROSE selon les jours de mesure du SIAAP conduit à surestimer la variabilité temporelle : la comparaison de l'ajustement du modèle initial et du modèle corrigé montre que ce dernier est caractérisé par des paliers globaux réduits d'environ 10% (Tab. 5.1).

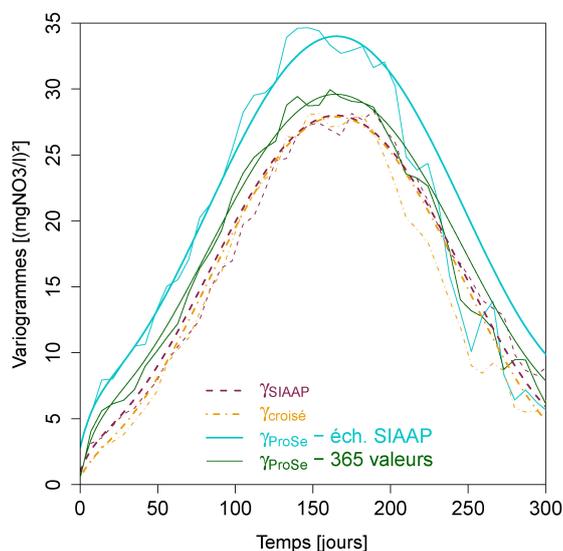


FIGURE 5.1 – Ajustement des variogrammes expérimentaux simples et croisé des concentrations en nitrates mesurées par le SIAAP et simulées par PROSE à Alfortville, calculés sur le même champ temporel (échantillonnage hebdomadaire). Le variogramme des 365 valeurs PROSE au même point et son ajustement sont également représentés.

La correction du modèle variographique permet dès lors d'obtenir une estimation et surtout une incertitude associée plus réaliste. En l'occurrence, la variance d'estimation sera réduite avec le modèle corrigé, et l'estimation sera donc plus précise.

u	$b_{ij,52}^u$			ρ_{12}^u ω_{12}^u		$b_{ij,365}^u$		
	11	12	22			11	12	22
Pep	1	0.5	2.8	0.30	1.67	0.2	0.1	0.5
Exp	3	2.4	5	0.62	1.29	3.3	2.6	5.5
Cos	12	12.5	13.1	1	1.04	10.9	11.3	11.8
Palier total	16	15.4	20.9	-	-	14.4	14	17.8

TABLE 5.1 – Paramètres de l’ajustement des variogrammes expérimentaux des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE de nitrates à Alfortville à l’aide d’un modèle linéaire de co-régionalisation à trois composantes u : pépitique (Pep), exponentielle (Exp) et périodique (Cos). Correction de ce modèle via l’ajustement du variogramme calculé sur les 365 valeurs PROSE, les coefficients de corrélation ρ_{12}^u et les rapports de paliers ω_{12}^u .

Le co-krigeage des mesures du SIAAP par les valeurs PROSE a été effectué avec un voisinage glissant de 150 jours (Fig. 5.2a). La chronique ainsi obtenue est alors comparée au krigeage des seules mesures du SIAAP réalisé dans les mêmes conditions (Fig. 5.2b), avec un ajustement selon les paramètres $b_{11,52}^u$ et le même voisinage glissant.

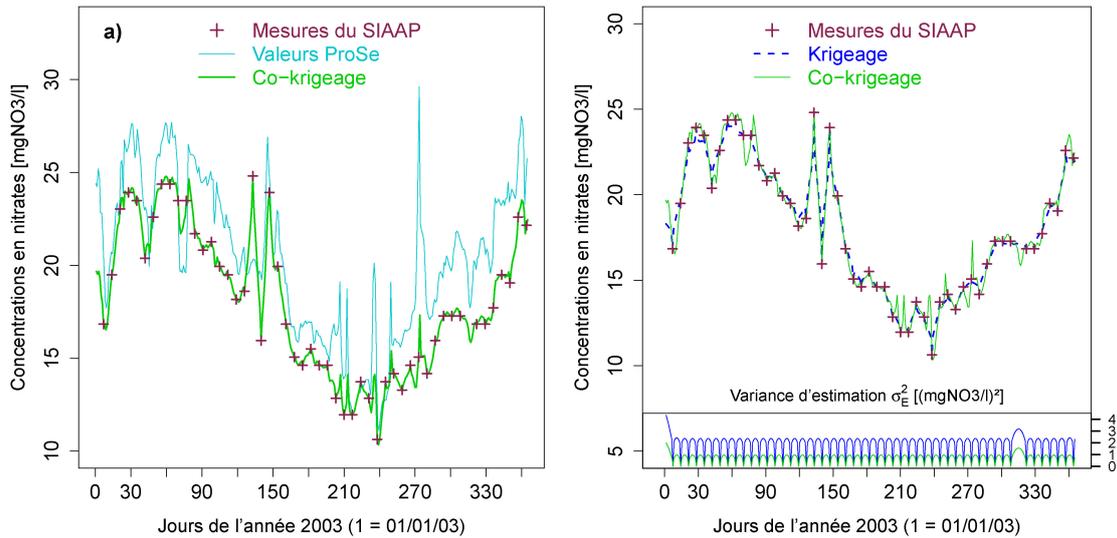


FIGURE 5.2 – a) Co-krigeage des concentrations en nitrates mesurées par le SIAAP à Alfortville, par les valeurs PROSE. b) Comparaison du co-krigeage au krigeage des mesures du SIAAP, et des variances d’estimation associées.

L’apport du co-krigeage et donc de la simulation déterministe PROSE est indéniable. La variabilité infra-hebdomadaire des nitrates, qui apparaît non négligeable sur les valeurs PROSE, est absente de la chronique krigée, mais se retrouve sur la chronique co-krigée. En outre, le co-krigeage conduit à une variance d’estimation inférieure à celle associée au krigeage, avec une incertitude relative moyenne $\sigma_E/Z^* \approx 4.5\%$ contre $\sigma_E/Z^* \approx 7.5\%$ pour le krigeage. Ces incertitudes ne dépassent toutefois pas les 9% ou 13%, pour le co-krigeage et le krigeage respectivement, ce qui reste très raisonnable.

Le co-krigeage s’avère dès lors être un outil efficace pour recalculer la simulation déterministe aux mesures en une station donnée.

Toutefois, si le co-krigeage des mesures par les valeurs PROSE permet d’obtenir une chronique journalière passant par les mesures, il faut garder à l’esprit que cette chronique ne reflète pas la

variabilité *réelle* des concentrations - le modèle lisse la réalité. Il ne serait dès lors pas pertinent d'en calculer le quantile 90 par exemple, qu'il serait plutôt indiqué d'estimer à l'aide d'un modèle non linéaire plus précis ou de simulations géostatistiques.

5.2.3 Recalage aux mesures du RNB

L'ajustement des variogrammes expérimentaux simples et croisé calculés à partir des valeurs mensuelles de concentrations en nitrates a à nouveau été corrigé à l'aide du variogramme des 365 valeurs PROSE et des paramètres ρ_{12}^u et ω_{12}^u synthétisant les relations entre mesures et valeurs PROSE (cf. Eq. 5.2 et Tab. 5.2). Ici, l'échantillonnage selon les mesures du RNB induit une sous-estimation de la variabilité globale d'environ 15%. En l'absence de correction du modèle variographique, le co-krigeage conduirait donc à des variances d'estimation également sous-estimées, ce qui n'est absolument pas souhaitable.

u	$b_{ij,12}^u$			ρ_{12}^u	ω_{12}^u	$b_{ij,365}^u$		
	11	12	22			11	12	22
Pep	0.2	0.2	0.2	1	1	1	1	1
Exp	2.3	2	3	0.76	1.14	3.8	3.3	5
Cos	8.5	9.5	12	0.94	1.19	8.5	9.5	12
Palier total	11	11.7	15.2	-	-	13.3	13.8	18

TABLE 5.2 – Paramètres de l'ajustement des variogrammes expérimentaux des mesures du RNB et des valeurs PROSE de nitrates pour la station 17 à l'aide d'un modèle linéaire de co-régionalisation à trois composantes u : pépitiq (Pep), exponentielle (Exp) et périodique (Cos). Correction de ce modèle via l'ajustement du variogramme calculé sur les 365 valeurs PROSE, les coefficients de corrélation ρ_{12}^u et les rapports de paliers ω_{12}^u .

La figure 5.3a présente la chronique journalière obtenue en co-krigeant les mesures du RNB par les valeurs PROSE, en considérant un voisinage glissant de 150 jours. Celle-ci affiche la variabilité journalière des valeurs PROSE, et passe par les données du RNB. En outre, la variance d'estimation associée est bien inférieure aux concentrations estimées : l'incertitude relative est de 7% en moyenne, avec $\sigma_E/Z^* \leq 14\%$.

La démarche est réitérée pour recalibrer les valeurs PROSE d'oxygène dissous aux mesures mensuelles du RNB, à la station 17. Bien qu'il sous-estime légèrement la variabilité globale, l'ajustement des variogrammes calculés sur le champ temporel commun est très proche du modèle corrigé. A priori, l'importance de la correction apparaît donc moindre pour l'oxygène dissous que pour les nitrates.

La figure 5.3b présente la chronique co-krigée, qui affiche une variabilité à petite échelle empruntée aux valeurs PROSE, mais qui passe par les points de mesures du RNB. La variance d'estimation associée apparaît faible, avec une incertitude relative moyenne inférieure à 5% ($\sigma_E/Z^* < 10\%$).

Le recalage de la simulation déterministe PROSE aux mesures par co-krigeage est donc également validé pour les mesures mensuelles du RNB.

5.2.4 Comparaison

La figure 5.4 compare les chroniques de nitrates recalées aux mesures hebdomadaires du SIAAP et aux mesures mensuelles du RNB.

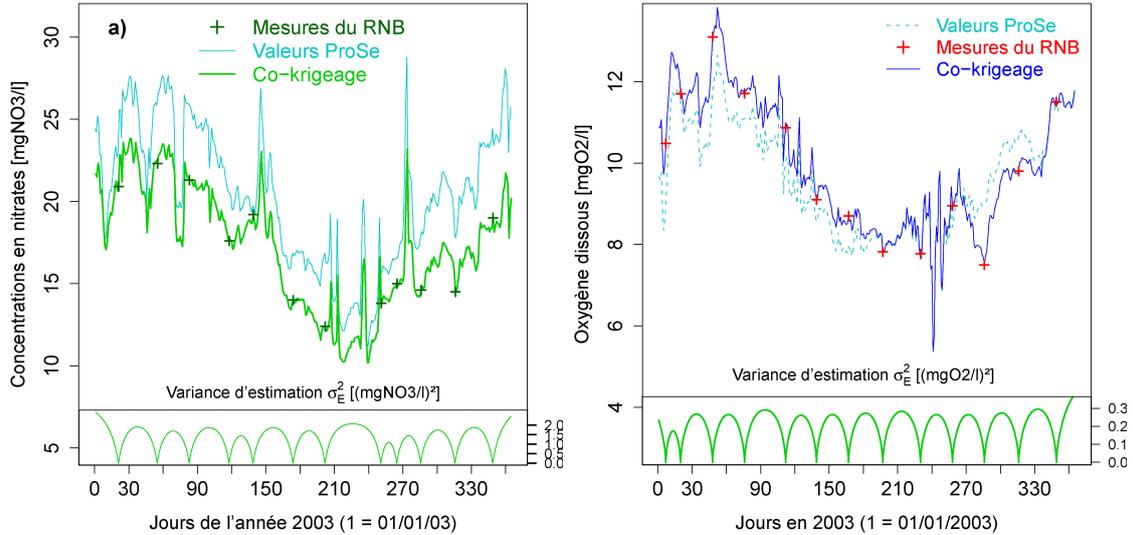


FIGURE 5.3 – Co-krigeage des mesures du RNB par les valeurs PROSE à la station 17, et variance d'estimation associée. a) Concentrations en nitrates. b) Concentrations en oxygène dissous.

La chronique recalée aux mesures du RNB semble « simplement » avoir été traduite ; son allure est quasiment identique à celle de la chronique PROSE. L'estimation obtenue est donc largement fondée sur la simulation PROSE, les mesures étant trop peu nombreuses pour influencer l'estimation autrement que par la moyenne locale.

En revanche, si la chronique issue du co-krigeage des mesures hebdomadaires s'inspire également des valeurs PROSE, elle est localement modifiée au gré des mesures. L'allure de la « simulation recalée » n'est donc plus tout à fait la même que celle des valeurs PROSE, mais elle reflète mieux la réalité étant donné qu'elle tient compte des différentes informations.

5.3 Reconstitution d'une chronique complète d'oxygène dissous

Intéressons-nous maintenant aux importantes lacunes des chroniques d'oxygène dissous mesurées par le SIAAP, avec l'exemple de Chatou où aucune mesure n'a pu être effectuée 70 jours d'affilée (i.e. 1680 mesures manquantes), durant le premier trimestre de l'année. La première idée pour combler cette lacune consisterait à s'appuyer uniquement sur les valeurs PROSE, or l'analyse exploratoire conjointe des valeurs PROSE et des mesures (cf. §4.4) a montré que la variabilité des mesures est considérablement lissée par le modèle. Comme l'objectif est de reconstituer *les mesures*, avec une variabilité réaliste, un moyen de pallier ce lissage est de considérer également les mesures effectuées à Bougival, station située 4.7 km en aval de Chatou et la seule à fournir des mesures en continu tout au long de l'année. En effet, bien que présentant une variabilité temporelle légèrement accrue par rapport aux mesures de Chatou, une excellente corrélation est observée entre les deux chroniques ($\rho = 0.93$).

C'est donc un co-krigeage des mesures à Chatou par les valeurs PROSE, mais également par les mesures à Bougival, qui est retenu pour compléter la chronique de Chatou.

Si une faible corrélation était observée entre les mesures de Chatou et Bougival, le co-krigeage induirait également un lissage des mesures. Dans ce cas, en admettant que la maquette PROSE suggère que la variabilité temporelle est identique aux deux stations, une solution pour

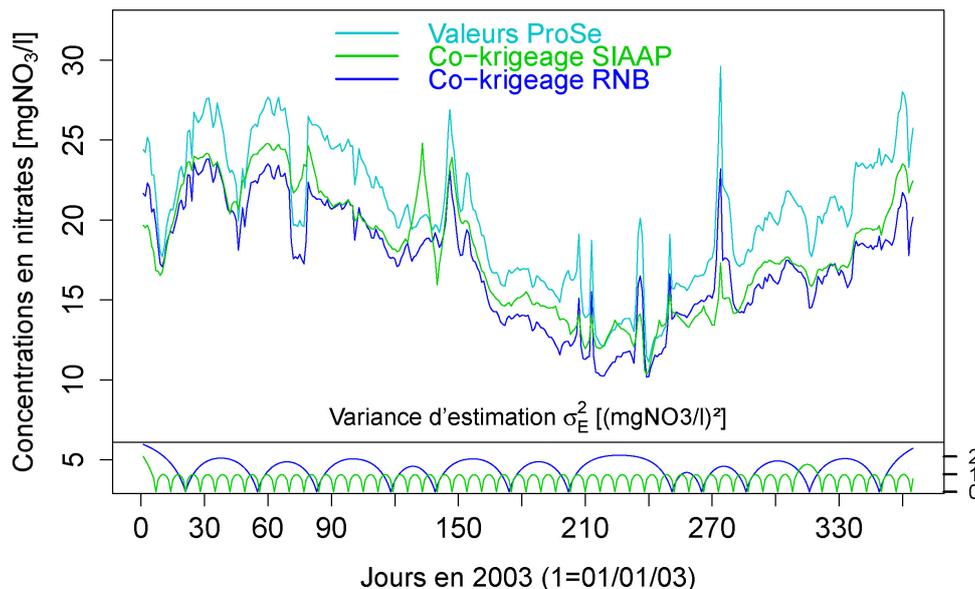


FIGURE 5.4 – Comparaison des recalages de la simulation déterministe PROSE aux mesures hebdomadaires du SIAAP et aux mesures mensuelles du RNB, sur la Marne immédiatement en amont de la confluence avec la Seine.

reconstituer les mesures à Chatou serait de considérer les mesures de Bougival comme une simulation non conditionnelle des mesures de Chatou. La démarche reviendrait alors à « conditionner la simulation » (les mesures de Bougival) par les mesures de Chatou, i.e. à reporter la variabilité des mesures de Bougival à Chatou. En notant $Z_C(t)$ les mesures à Chatou et $Z_{snc}(t)$ les mesures à Bougival - la simulation non conditionnelle -, cela s'écrirait :

$$Z_C(t) = Z_{snc}(t) + (Z_C(t) - Z_{snc}(t))^* = Z_C^*(t) + Z_{snc}(t) - Z_{snc}^*(t).$$

5.3.1 Ajustement d'un modèle linéaire de co-régionalisation trivariable

Soient $Z_1(t)$ et $Z_2(t)$ les mesures du SIAAP à Chatou et Bougival, respectivement, et $Z_3(t)$ les valeurs PROSE à Chatou : le co-krigeage temporel de $Z_1(t)$ par $Z_2(t)$ et $Z_3(t)$ requiert un modèle variographique trivariable. Grosso modo, le champ temporel commun aux trois variables comporte 9 mois, sur lesquels les variogrammes expérimentaux sont calculés puis ajustés dans le cadre du modèle linéaire de co-régionalisation, avec trois composantes¹ (Tab. 5.3 et Fig. 5.5a) :

- un faible effet de pépité ;
- une composante exponentielle de courte portée ;
- une composante sinusoïdale de période annuelle reflétant la variabilité saisonnière de l'oxygène dissous.

Les variogrammes calculés sur 9 mois sous-estimant la variabilité annuelle, il serait souhaitable de corriger leur ajustement à l'aide des variogrammes des mesures à Bougival et des valeurs

1. Les variogrammes expérimentaux calculés sur plusieurs trimestres lissent la variabilité journalière induite par les cycles nyctéméraux, qui caractérise essentiellement les mois estivaux. L'absence d'une composante périodique journalière reflétant cette variabilité n'est pas du tout préjudiciable en l'occurrence, vu que la période concernée par l'estimation comprend uniquement des mois hivernaux ; il faudrait toutefois l'inclure au modèle variographique pour une estimation durant l'été.

u	a	$b_{ij,9m}^u$						$\rho_{ij,9m}^u$			$\omega_{ij,9m}^u$		
		11	12	13	22	23	33	12	13	23	12	13	23
Pep	-	0.1	0.02	0.02	0.05	0	0.02	0.28	0.45	0	0.71	0.45	0.63
Exp	10	1	0.75	0.45	1.05	0.5	1	0.73	0.45	0.49	1.02	1	0.98
Cos	280	3.7	3.7	2.75	3.8	2.8	2.1	0.99	0.99	0.99	1.01	0.75	0.74
Palier	total -	4.8	4.47	3.22	4.9	3.3	3.12						

TABLE 5.3 – Paramètres de l’ajustement des variogrammes des concentrations en oxygène dissous mesurées par le SIAAP à Chatou ($Z_1(t)$) et Bougival ($Z_2(t)$) et simulées par PROSE à Chatou ($Z_3(t)$), calculés sur le champ temporel commun de 9 mois, à l’aide d’un modèle linéaire de co-régionalisation à trois composantes u de portée a : pépitique (Pep), exponentielle (Exp) et périodique (Cos). Les relations entre les différentes variables sont synthétisées par les paramètres $\rho_{ij,9m}^u$ et $\omega_{ij,9m}^u$.

PROSE à Chatou calculés sur l’année entière. Il s’agit donc cette fois non plus de « resserrer » l’échantillonnage comme précédemment (cf. §5.2), mais d’étendre le domaine temporel de 9 à 12 mois.

Tout d’abord, la pertinence d’une telle démarche a été vérifiée à l’aide des chroniques complètes, avec cependant deux remarques : la portée de la composante périodique se voit augmentée, et, pour les mesures, l’amplitude de cette composante périodique est surestimée lorsqu’elle est déduite du variogramme des valeurs PROSE. L’ajustement corrigé du variogramme des mesures à Chatou sera donc déduit de celui des mesures à Bougival.

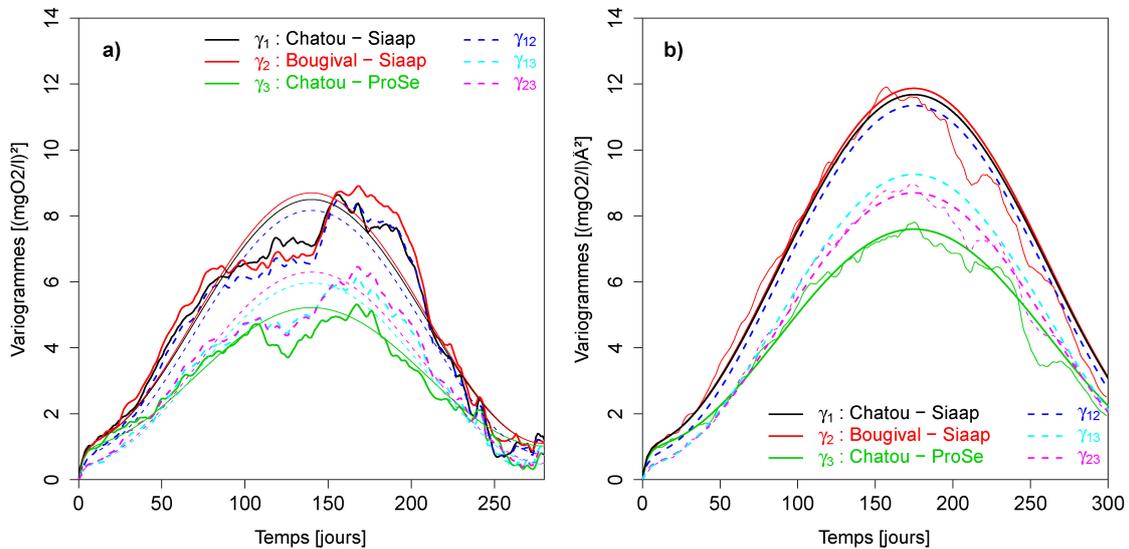


FIGURE 5.5 – a) Ajustement des variogrammes expérimentaux simples et croisé des concentrations en oxygène dissous mesurées par le SIAAP à Chatou et Bougival et simulées par PROSE à Chatou, calculés sur le même champ temporel (9 mois). b) Modèle trivarié corrigé à l’aide des variogrammes des mesures à Bougival et des valeurs PROSE à Chatou, calculés sur l’année entière.

Les variogrammes exhaustifs des mesures à Bougival $Z_2(t)$ et des valeurs PROSE à Chatou $Z_3(t)$ ont donc été calculés puis ajustés ($b_{ij,12m}^u$ avec $i, j = \{2, 3\}$) ; les relations qui s’en déduisent ($\rho_{23,12m}^u$ et $\omega_{23,12m}^u$) sont quasiment égales à celles du tableau 5.3. Le modèle variographique trivarié a

ensuite pu être corrigé (Fig. 5.5b et Tab. 5.4), selon les équations suivantes :

$$\forall u, \forall i \neq j, \begin{cases} b_{ij,12m}^u &= \rho_{ij,9m}^u b_{jj,12m}^u / \omega_{ij,9m}^u \\ b_{ii,12m}^u &= b_{jj,12m}^u / \omega_{ij,9m}^{u2} \end{cases}$$

u	a	$b_{ij,12m}^u$					
		11	12	13	22	23	33
Pep	-	0.1	0.02	0.02	0.05	0	0.02
Exp	10	0.98	0.73	0.44	1.02	0.5	0.98
Cos	350	5.3	5.3	4.4	5.4	4.1	3.3
Palier	total -	6.38	6.05	4.56	6.47	4.6	4.3

TABLE 5.4 – *Modèle variographique corrigé des mesures d’oxygène dissous du SIAAP à Chatou ($Z_1(t)$) et Bougival ($Z_2(t)$) et des valeurs PROSE à Chatou ($Z_3(t)$); modèle linéaire de régionalisation à trois composantes u de portée a : pépitique (Pep), exponentielle (Exp) et périodique (Cos).*

La principale différence avec le modèle initial concerne l’amplitude de la composante périodique, bien plus élevée pour l’année entière que calculée sur 9 mois.

5.3.2 Reconstitution des mesures manquantes par co-krigeage

On souhaiterait reconstituer les trois premiers mois de la chronique du SIAAP à Chatou, avec une fréquence horaire. Au vu du nombre de points concernés, un voisinage glissant, fixé à 120 jours, s’impose. Le co-krigeage étant réalisé pour une variable $Z_1(t)$ à moyenne inconnue, le voisinage doit contenir au moins une valeur $Z_1(t_\alpha)$, ce qui implique en l’occurrence une matrice trop grande pour pouvoir être inversée en un temps de calcul raisonnable. Une solution consisterait à définir un voisinage qui comprendrait plusieurs valeurs, éventuellement éloignées du point à estimer, de $Z_1(t)$, ainsi que les valeurs de $Z_2(t)$ et $Z_3(t)$ à proximité immédiate de ce point à estimer, ou encore à régulariser les variables auxiliaires au fur et à mesure que l’on s’éloigne du point à estimer. Cependant, la fréquence horaire est-elle vraiment nécessaire pour rendre compte de la variabilité infra-journalière des concentrations en oxygène dissous ?

Après avoir restreint le champ à estimer aux quatre premiers mois (ce qui correspond au voisinage choisi), la concentration moyenne en fonction de l’heure de mesure a été tracée. Pour chacun des ensembles de données, les minimum et maximum sont observés respectivement à 6h et 18h, avec une variation relative inférieure ou égale à 5%. De manière pragmatique, nous avons donc décidé de retenir quatre valeurs par jour, à 0h, 6h, 12h et 18h, pour représenter la variabilité infra-journalière tout en réduisant considérablement le nombre de données. Les variogrammes expérimentaux calculés sur ces sous-ensembles de données concordent parfaitement avec ceux calculés sur les données horaires, montrant que ces quatre valeurs par jour apparaissent suffisantes pour décrire la variabilité à petite échelle de temps.

Une autre optique aurait pu être de négliger cette faible variabilité infra-journalière et de s’intéresser aux moyennes journalières.

A défaut d’une chronique horaire, c’est donc une série temporelle comprenant quatre valeurs instantanées, régulièrement espacées par jour, que le co-krigeage des mesures du SIAAP à Chatou a permis d’obtenir (Fig. 5.6), avec un écart-type d’estimation très raisonnable ($\sigma_E/Z^* \leq 9\%$) de 4% en moyenne. Comparé à un co-krigeage par les seules valeurs PROSE à Chatou, outre le fait

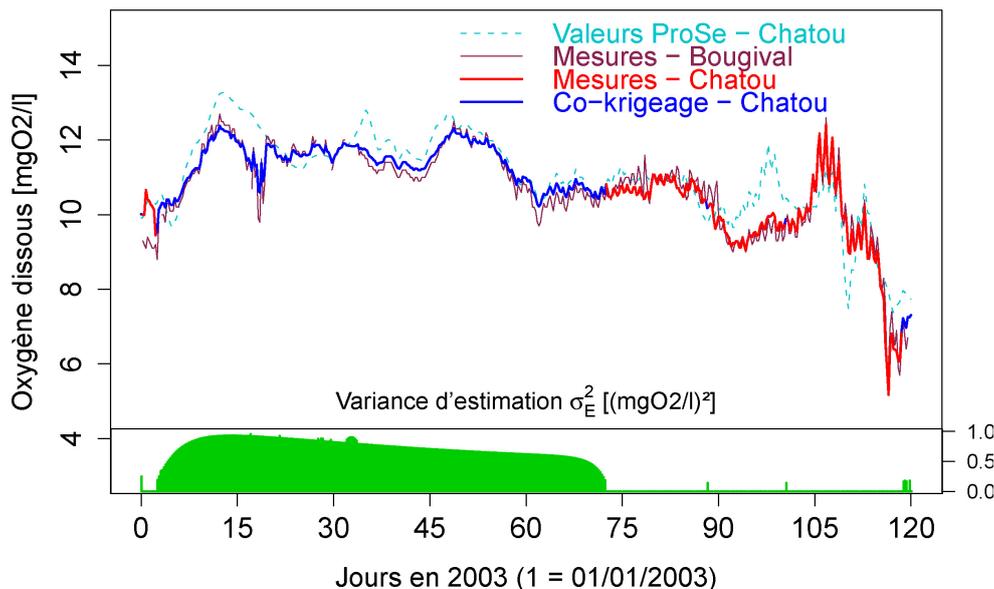


FIGURE 5.6 – Co-krigeage des mesures d’oxygène dissous du SIAAP à Chatou par les mesures à Bougival et les valeurs PROSE à Chatou, et variance d’estimation associée.

que la variance d’estimation est légèrement inférieure, cette chronique est plus réaliste, étant donné qu’elle ne se fie pas seulement au modèle déterministe qui a tendance à lisser la variabilité réelle, mais qu’elle intègre également la variabilité des mesures à Bougival. Toutefois la chronique reconstituée ne peut être considérée comme une chronique mesurée ; en effet, c’est une *estimation* qui ne représente donc pas la variabilité *réelle* des concentrations. Celle-ci pourrait être obtenue à partir de modèles non linéaires ou encore de simulations géostatistiques, qui n’ont pas fait l’objet de ce travail mais en constituent une perspective intéressante.

5.4 Synthèse

L’estimation temporelle conjointe des mesures et des valeurs PROSE a tout d’abord démontré l’adéquation du co-krigeage pour le recalage temporel de la simulation déterministe aux mesures, co-krigeage en l’occurrence préféré au krigeage avec dérive externe en vertu de la forte corrélation temporelle observée entre valeurs PROSE et mesures, dont témoigne l’ajustement en modèle linéaire de co-régionalisation.

Les chroniques journalières de nitrates obtenues à partir des mesures hebdomadaires présentent une variabilité à petits intervalles de temps inspirée des valeurs PROSE, mais une allure quelque peu modifiée pour respecter les mesures. En revanche, les chroniques co-krigées à partir des mesures du RNB affichent une allure identique à celle de la simulation PROSE, qui semble « simplement » avoir été translatée. Le recalage de la simulation d’oxygène dissous aux mesures du RNB conduit à une situation intermédiaire, l’écart entre les mesures et valeurs PROSE n’étant pas constant dans le temps. Dans tous les cas, les incertitudes associées aux estimations sont très raisonnables, les écarts-type relatifs étant de l’ordre de quelques pourcents en moyenne.

Ce chapitre a également montré que les ajustements des variogrammes expérimentaux dépendent du champ temporel sur lequel ils sont calculés. Lorsque ce champ temporel est insuffisant pour caractériser totalement la variabilité des mesures, une correction des paramètres de l’ajus-

tement peut se révéler judicieuse.

En l'occurrence, les coefficients de corrélation et rapports de paliers déduits de l'ajustement d'un modèle linéaire de co-régionalisation sur le champ temporel commun aux mesures et valeurs PROSE ont été exploités pour reconstruire un modèle variographique exhaustif, qui exploite la totalité des valeurs PROSE tout en préservant les relations observées entre mesures et modèle. Cette correction est recommandée, étant donné qu'elle conduit à des modèles de variogramme sensiblement différents, que le modèle initial soit ajusté sur des valeurs hebdomadaires (SIAAP), mensuelles (RNB), ou sur des chroniques incomplètes. Seuls les variogrammes d'oxygène dissous ajustés sur des valeurs mensuelles mais sans lacunes montrent des variogrammes initiaux proches des variogrammes corrigés, la correction restant cependant indiquée pour le comportement à proximité de l'origine.

Enfin, un co-krigeage trivariable mêlant mesures du SIAAP et valeurs PROSE a permis de compléter une chronique lacunaire d'oxygène dissous. Quasiment trois mois de données ont ainsi pu être reconstitués, avec une fréquence de quatre valeurs régulières par jour pour caractériser la variabilité infra-journalière.

Chapitre 6

Estimations spatiales des débits, flux et concentrations de nitrates par bief

Après un volet temporel, ce chapitre s'intéresse à l'estimation spatiale conjointe des concentrations, débits et flux de nitrates, par bief, i. e. par tronçon de rivière exempt de singularités majeures telles que confluences ou stations d'épuration (STEP).

Différents modèles présentant des approximations ainsi qu'une complexité plus ou moins importantes sont examinés pour l'estimation trivariable uni-dimensionnelle. Il sont tout d'abord testés sur la maquette PROSE, et les modèles adéquats sont ensuite appliqués aux échantillonnages des valeurs PROSE selon les mesures du RNB (cf. § 2.3.2), dans le but d'évaluer les difficultés liées à leur application aux mesures réelles.

Le réseau considéré, tronqué au $pk = 800$ km en raison de la dérive du modèle décelée au chapitre 4 (§4.5.1), peut être divisé en cinq biefs (Fig. 6.1a). Les biefs A et B reprennent respectivement la Marne et la Seine à l'amont de leur confluence; les biefs C, D, E, situés sur la Seine à l'aval de cette confluence, sont délimités par la STEP Seine Aval et la confluence avec l'Oise.

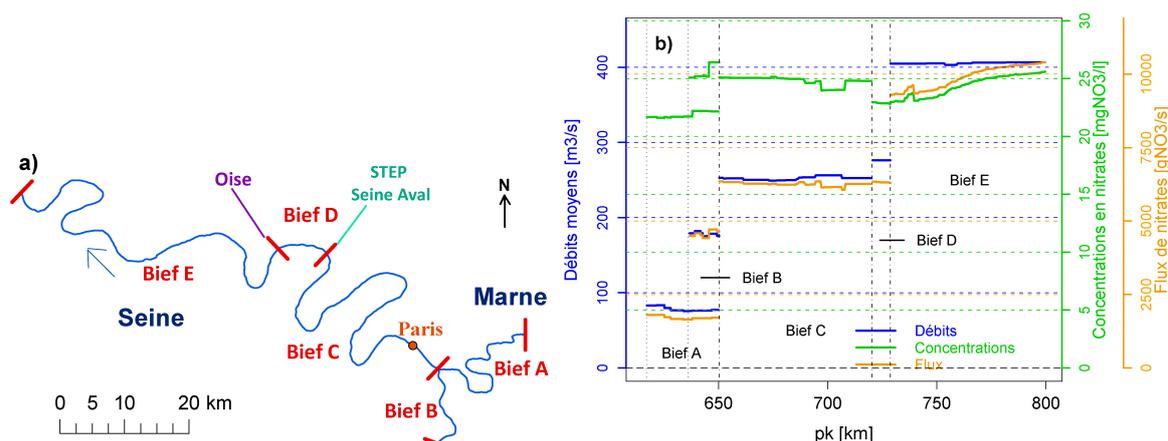


FIGURE 6.1 – a) Décomposition du réseau modélisé par PROSE en 5 biefs. b) Evolution spatiale des valeurs PROSE de débit, concentration et flux de nitrates sur les différents biefs, selon l'approche physique.

Pour l'estimation spatiale, les moyennes temporelles de débit ($Q(s)$), flux ($F(s)$) et concentration ($C(s)$) sont considérées, afin de s'affranchir de leur variabilité saisonnière d'une part, mais également de répondre à la question des concentrations et flux annuels. Dès que les flux sont concernés, « l'approche physique » est indispensable pour le calcul des concentrations moyennes. Celles-ci sont donc calculées en pondérant les concentrations instantanées par les débits correspondants (cf. chapitre 3), afin de garantir la relation liant les trois variables en tout point s : $F(s) = Q(s).C(s)$

6.1 Les modèles envisagés

La figure 6.1b présente les valeurs PROSE de débit, concentration et flux de nitrates sur lesquelles vont être testés les modèles proposés.

Parmi les modèles trivariés susceptibles d'être appropriés à l'estimation considérée, les suivants ont été examinés :

- *Estimation simplifiée.* Cette première approche, fondée sur un principe simple, consiste à estimer les flux par le produit de l'estimation des concentrations et de l'estimation des débits, en négligeant leur éventuelle corrélation.
- *Faibles perturbations.* Inspiré de la faible variabilité spatiale des données, et de l'allure des flux, dont les variations suivent soit celles des débits, soit celles de concentrations, ce modèle considère que des débits et concentrations oscillent faiblement autour d'une valeur de référence.
- *Modèle à résidu.* Ce modèle est envisagé en analogie avec le modèle « puissance P , accumulation A , teneur T » bien connu dans le domaine minier (Rivoirard, 1991), pour lequel, en un point x , la même relation lie les trois variables : $A(x) = P(x).T(x)$. Il permet de s'affranchir de la non-additivité des teneurs (concentrations) en supposant que les accumulations (flux) s'expriment en fonction des puissances (débits), et d'un résidu non corrélé.

Le modèle en logarithme pourrait également s'avérer être une piste intéressante ; la transformation des variables brutes en leurs logarithmes respectifs permettrait en effet de s'affranchir du produit des débits et des concentrations, le logarithme des flux étant alors estimé par la somme de ceux des débits et des concentrations. Cependant ce modèle n'a pas été testé ici, en raison de la complexité de la transformation inverse et des hypothèses sous-jacentes (Rivoirard, 1995; Chilès and Delfiner, 1999; Emery, 2001a), l'objectif étant de trouver un modèle relativement aisé à mettre en oeuvre.

6.1.1 Estimation simplifiée

Puisque les flux sont égaux au produit des débits par les concentrations, l'estimation simplifiée consiste à estimer les flux par le produit des krigeages des débits et des concentrations :

$$F(s) = Q(s).C(s) \Rightarrow F^*(s_0) = Q^*(s_0).C^*(s_0)$$

	Bief A	Bief B	Bief C	Bief D	Bief E
ρ	-0.56	-0.20	-0.79	-0.91	0.75

TABLE 6.1 – Coefficients de corrélation entre les débits et concentrations, pour les différents biefs.

Une telle estimation peut être biaisée si les débits et les concentrations ne sont pas indépendants. Si la corrélation entre ces deux variables n'est pas toujours claire, elle n'est toutefois pas nulle (Tab. 6.1), et lorsqu'elle devient importante, il serait préférable de les estimer par un co-krigeage, ou de considérer un autre modèle. Cependant le co-krigeage requerrait un modèle variographique bivariable délicat à ajuster en l'occurrence, ce qui justifie le choix du krigeage. De plus cette première estimation se veut simple à réaliser, afin d'évaluer ensuite l'utilité ou non d'un modèle plus raffiné.

Une approximation de la variance associée à une telle estimation des flux est proposée par Journel (1977), pour des estimations des débits et des concentrations sans biais et indépendantes (Eq. 6.1).

$$\sigma_F^2 = F^{*2} \left(\frac{\sigma_Q^2}{Q^{*2}} + \frac{\sigma_C^2}{C^{*2}} \right) \quad (6.1)$$

6.1.2 Faibles perturbations

Le modèle de faibles perturbations s'inspire de l'observation des données, les variations de flux suivant soit les variations de débit, soit les variations de concentration (cf. Fig. 6.1b). De même, la structure des variogrammes des flux s'apparente tantôt à celle du variogramme des débits, tantôt à celle du variogramme des concentrations, et les variogrammes croisés correspondants révèlent une forte corrélation entre les différentes structures. D'une manière générale, Cela témoigne de deux « typologies » du fonctionnement d'un système hydrologique, qui peuvent être définies comme suit.

Dans le premier cas, le flux est proportionnel aux concentrations en nitrates; les variations de débit sont négligeables par rapport à celles des concentrations et le débit peut être considéré constant. C'est le cas d'un apport en polluant sans (ou avec un faible) apport d'eau, qui peut par exemple provenir de réactions physico-chimiques telles que la nitrification de l'ammonium.

Dans le second cas, le flux est proportionnel au débit, et la concentration peut être considérée constante sur le bief : les apports ou pertes de débit se font à même concentration constante.

Il existe une troisième typologie moins aisée à formaliser, lorsque les variations des débits et des concentrations sont du même ordre de grandeur. Dans ce cas, aucune variable ne peut être considérée constante. C'est ce modèle plus général qui est formalisé ici.

Le modèle des faibles perturbations consiste à considérer que les débits et concentrations fluctuent faiblement autour d'une valeur constante de référence X_0 , par exemple la moyenne ou la valeur amont (Eq. 6.2). Les flux, qui se déduisent du produit des débits et des concentrations, peuvent également être exprimés en fonction de ces perturbations (Eq. 6.3). Les perturbations étant supposées faibles, leur produit devient négligeable, et les flux s'expriment alors comme une somme des perturbations de débit $\eta(s)$ et de concentration $\epsilon(s)$. Le modèle des faibles perturbations revient donc à linéariser le produit de deux perturbations en négligeant les termes du second ordre, à l'instar des travaux de Dong (1990) pour des équations bien plus complexes. En conséquence, les variogrammes simples et croisé de ces perturbations suffisent à exprimer les variogrammes simples et croisés des trois variables considérées (Eq. 6.4).

$$Q(s) = Q_0(1 + \eta(s)) \text{ et } C(s) = C_0(1 + \epsilon(s)) \quad (6.2)$$

$$F(s) = Q_0 C_0 (1 + \eta(s) + \epsilon(s) + \eta(s)\epsilon(s)) \approx Q_0 C_0 (1 + \eta(s) + \epsilon(s)) \quad (6.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_Q(h) = Q_0^2 \gamma_\eta(h) \\ \gamma_C(h) = C_0^2 \gamma_\epsilon(h) \\ \gamma_{QC}(h) = Q_0 C_0 \gamma_{\eta\epsilon}(h) \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \gamma_F(h) = Q_0^2 C_0^2 (\gamma_\eta(h) + \gamma_\epsilon(h) + 2\gamma_{\eta\epsilon}(h)) \\ \gamma_{QF}(h) = Q_0^2 C_0 (\gamma_\eta(h) + \gamma_{\eta\epsilon}(h)) \\ \gamma_{CF}(h) = Q_0 C_0^2 (\gamma_\epsilon(h) + \gamma_{\eta\epsilon}(h)) \end{array} \right. \quad (6.4)$$

Pour une valeur de référence donnée, trois tests permettent de déterminer l'adéquation ou non de ce modèle :

1. Les perturbations sont-elles faibles ? Cette hypothèse est - arbitrairement - jugée acceptable si leur écart-type est inférieur à 0.5 ;
2. Le produit des perturbations est-il négligeable ?
3. Les approximations consistant à exprimer les variogrammes simple et croisés impliquant les flux en fonction de ceux des perturbations sont-elles raisonnables ?

Ce modèle a été testé pour des perturbations autour de la moyenne et de la valeur amont ; les résultats étant analogues, seules les perturbations autour de la moyenne sont présentées ici. En effet, même si les données sont peu nombreuses, il est toujours possible de calculer une moyenne, alors que l'amont d'un tronçon n'est pas forcément informé ; toutefois rien n'empêche de considérer une autre valeur de référence.

Les écarts-type des perturbations de débit $\eta(s)$ et de concentration $\epsilon(s)$ sont tous largement inférieurs à 0.5 (Tab. 6.2), validant l'hypothèse de faibles perturbations et donc le premier test.

La figure 6.2a présente l'évolution des perturbations et de leur produit, qui apparaît quasiment nul et donc négligeable sur les différents biefs.

Pour apprécier le dernier test, l'évolution du rapport des variogrammes des flux et de leur expression (cf. Eq. 6.4) est observée : il doit être constant et égal à l'unité. La figure 6.2b présente les résultats pour le bief B, à titre d'exemple. Les trois rapports (relatifs à γ_F , γ_{QF} , et γ_{CF}) présentent des écarts minimes par rapport à l'unité, justifiant pleinement les approximations inhérentes à ce modèle.

	Bief A	Bief B	Bief C	Bief D	Bief E
σ_η	0.04	0.01	<0.01	<0.01	<0.01
σ_ϵ	0.01	0.02	0.01	<0.01	0.04

TABLE 6.2 – *Écarts-type des perturbations de débit ($\eta(s)$) et de concentration ($\epsilon(s)$) pour les différents biefs.*

Les faibles perturbations semblent donc tout à fait indiquées pour l'estimation conjointe des débits, flux et concentrations, qui revient au co-krigeage des perturbations de débit $\eta(s)$ et de concentration $\epsilon(s)$. En négligeant les termes faisant intervenir des perturbations au second ordre (ou plus), la variance d'estimation associée aux flux s'exprime également en fonction des variances d'estimation des perturbations σ_η^2 et σ_ϵ^2 (Eq. 6.5).

$$\sigma_F^2 \approx Q_0^2 C_0^2 (\sigma_\eta^2 + \sigma_\epsilon^2) \quad (6.5)$$

Dans le cas où l'une des perturbations est négligeable, l'estimation conjointe trivariante se résume au krigeage de l'autre perturbation.

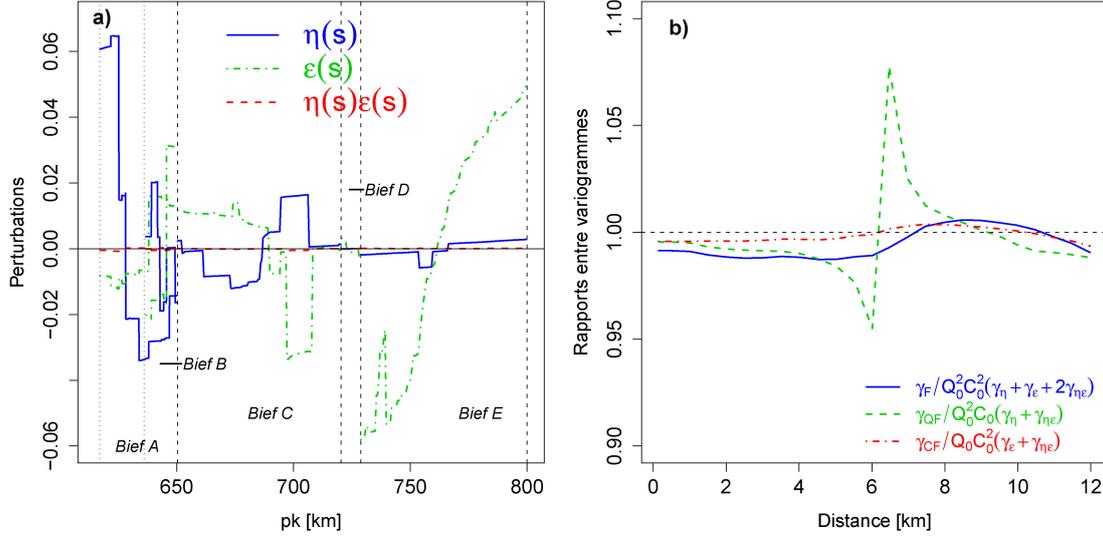


FIGURE 6.2 – a) Evolution des perturbations de débit $\eta(s)$ et de concentration $\epsilon(s)$, et de leur produit. b) Rapport des variogrammes simple et croisés relatifs aux flux à leur expression en fonction des variogrammes des perturbations ; exemple du bief B.

6.1.3 Modèle à résidu

Le modèle à résidu suppose les flux subordonnés aux débits : $F(s) = aQ(s) + R(s)$. Le résidu $R(s)$ de la régression linéaire sans terme indépendant (de pente a) est d'espérance nulle et sans corrélation avec les débits : $E[R] = 0$ et $R(s) \perp Q(s') \forall s, s'$. Trois affirmations en découlent, qui permettent de tester ce modèle.

1. $\gamma_F(h) = a^2\gamma_Q(h) + \gamma_R(h)$ et $\gamma_{QF}(h) = a\gamma_Q(h)$: le variogramme croisé débits/flux est proportionnel au variogramme des débits ;
2. $\gamma_{QR}(h) = 0$: le variogramme croisé débits/résidus est nul ;
3. $\gamma_{QF}(h)/\gamma_Q(h) = a = E[C]$: le rapport du variogramme croisé débits/flux au variogramme des débits est constant, et égal à la pente de la régression linéaire $F(s)|Q(s)$. De plus, cette pente est égale à la moyenne des concentrations.

La figure 6.3 illustre ces trois tests pour le bief C, les résultats étant similaires pour les autres biefs.

Le premier test consiste à comparer les variogrammes simples et croisé des débits et des flux. Les unités étant très différentes, ces variogrammes ont été normés par la variance (la covariance pour le croisé) des données (Fig. 6.3.1). Alors que les variogrammes simples semblent bornés (pour des portées différentes), le variogramme croisé apparaît plutôt linéaire, dévoilant une structure différente : la proportionnalité du variogramme croisé à celui des débits n'est pas convaincante. Après avoir effectué la régression linéaire $F(s)|Q(s)$ sans terme indépendant, et en avoir calculé les résidus $R(s) = F(s) - aQ(s)$, on vérifie que ces derniers ne sont pas spatialement corrélés aux débits. La figure correspondante compare le variogramme croisé débits/résidus au variogramme des débits, mais également au produit des écarts-type expérimentaux des débits et des résidus $\sigma_Q\sigma_R$ (en pointillés noirs sur la figure 6.3.2), qui correspondrait au « palier expérimental » de l'enveloppe de corrélation maximale si les deux variables s'ajustaient dans le cadre du modèle linéaire de co-régionalisation. Ce « palier expérimental » n'a pas rigoureusement de sens mais est donné à titre indicatif afin d'évaluer le degré de validité de l'hypothèse de non-corrélation ; en l'occurrence, elle est à rejeter. Non seulement le variogramme croisé, largement supérieur à celui des débits, ne

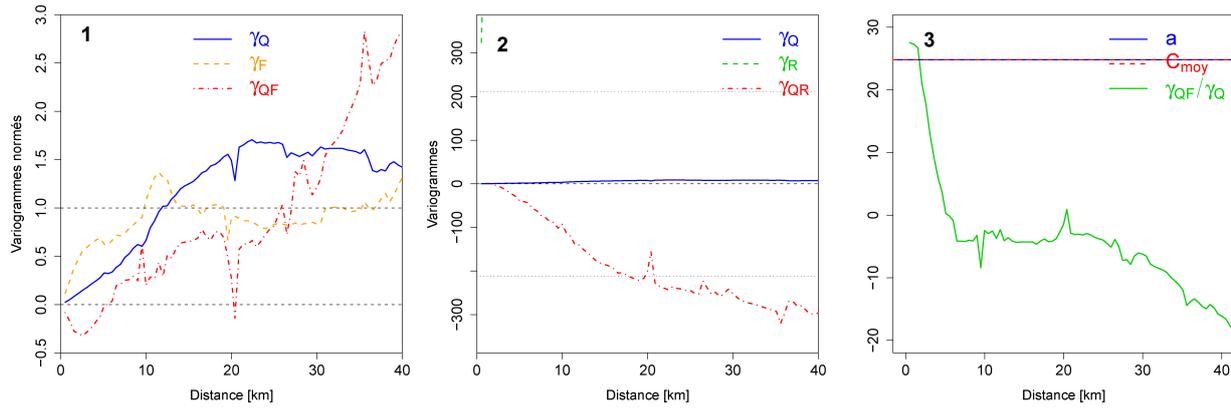


FIGURE 6.3 – Test du modèle à résidu sur les débits $Q(s)$, flux $F(s)$ et concentrations $C(s)$; exemple du bief C. **1** Variogrammes normés des débits Q et des flux F . **2** Variogrammes des débits Q et des résidus de la régression linéaire R . **3** Rapport du variogramme croisé débits-flux γ_{QF} au variogramme des flux γ_F .

peut être considéré comme nul, mais en outre il outrepassé ce « palier expérimental », qui reflète la corrélation maximale entre les deux variables.

En ce qui concerne le dernier test, la pente de la régression linéaire est bien identique à la concentration moyenne, confirmant que les résidus sont d'espérance nulle (Fig. 6.3.3). En revanche, le rapport du variogramme croisé débits/flux à celui des débits $\gamma_{QF}(h)/\gamma_Q(h)$ n'est pas du tout constant, ni égal à la pente de la régression, ce qui est en contradiction avec l'hypothèse de résidus non corrélés aux débits.

En conclusion, le modèle à résidu ne semble pas approprié à l'estimation des débits, flux et concentrations de nitrates pour le réseau considéré, aucun des trois tests ne s'étant révélé convaincant.

6.2 Estimation simplifiée

L'estimation simplifiée est tout d'abord appliquée à un sous-ensemble des valeurs PROSE reprenant une valeur sur trois de débit, concentration et flux, et est ensuite comparée à la réalité PROSE.

Les estimations obtenues pour les trois variables à l'aide d'un modèle de variogramme sphérique ou linéaire sont très proches de la réalité PROSE, et affichent des variances d'estimation très faibles ($\sigma_E/X^* \approx 1\%$, où $X=Q,C,F$), montrant que ce modèle simplifié semble suffisant pour l'estimation trivariante conjointe des débits, flux et concentrations de nitrates.

L'estimation simplifiée a alors été appliquée aux échantillonnages des valeurs PROSE selon les mesures du RNB (cf. §2.3.2). Le bief D n'est pas traité étant donné que l'unique station qu'il comporte est insuffisante pour le calcul d'un variogramme.

L'échantillonnage RNB spatial, qui retient environ une valeur tous les dix kilomètres, conduit à des écarts relatifs entre estimation et réalité PROSE inférieurs ou égaux à 1%, et des variances d'estimation environ dix fois plus élevées que celles obtenues à partir d'un tiers des valeurs. Toutefois les écarts-type d'estimation relatifs restent très raisonnables : $\sigma_E/X^* \leq 3\%$.

En revanche l'échantillonnage spatio-temporel conduit à des écarts relatifs beaucoup plus importants par rapport à la réalité PROSE. Les concentrations sont plutôt bien estimées (l'écart relatif à la réalité PROSE est inférieur à 5%), confirmant les observations de Bernard-Michel (2006) :

des mesures de concentrations peu nombreuses mais régulières dans le temps s'avèrent suffisantes pour évaluer la concentration moyenne annuelle, en l'occurrence avec une incertitude de 0.6% en moyenne ($\sigma_E/C^* \leq 3\%$). Cependant les débits et donc les flux présentent des écarts dépassant les 20% par rapport à la réalité PROSE, dévoilant l'insuffisance de mesures mensuelles pour caractériser correctement le débit moyen annuel. Les variances sont également plus élevées que pour l'échantillonnage spatial, avec des écarts-type d'estimation relatifs qui atteignent 15% pour les flux.

6.3 Faibles perturbations

La démarche a été réitérée pour le modèle des faibles perturbations : une estimation a d'abord été réalisée à partir d'une valeur PROSE sur trois, pour deux modèles variographiques bivariés ajustés aux perturbations de débit et de concentration (l'un stationnaire et l'autre intrinsèque). Le modèle a ensuite été appliqué aux échantillonnages des valeurs PROSE selon les stations du RNB.

La validation du modèle des faibles perturbations s'est à nouveau révélée très convaincante, avec des écarts relatifs à la réalité PROSE du même ordre de grandeur que pour l'estimation simplifiée (0.01%). La comparaison des estimations effectuées dans un cadre stationnaire ou intrinsèque conduit à des estimations et écarts-type relatifs quasiment identiques, les débits estimés avec un variogramme linéaire paraissant toutefois légèrement plus proche de la réalité PROSE.

Les estimations ensuite obtenues à partir des échantillonnages spatial puis spatio-temporel des valeurs PROSE montrent la même évolution qu'avec le modèle simplifié. L'échantillonnage spatial selon les mesures du RNB conduit à des estimations relativement proches de la réalité, tandis que l'échantillonnage temporel en chaque station s'avère plus problématique pour l'estimation des flux. En effet, les débits annuels calculés à partir des mesures mensuelles sont parfois très différents des débits réels, la probabilité de ne pas échantillonner un événement pluvieux étant loin d'être négligeable puisque la durée de ces événements est bien inférieure à la fréquence d'échantillonnage, raison pour laquelle les débits sont usuellement mesurés par des stations de jaugeage. Il en résulte une estimation très imprécise des débits et donc des flux annuels. Remarquons toutefois que l'échantillonnage temporel en chaque station n'affecte pas outre mesure les concentrations annuelles, qui sont correctement estimées à partir des mesures mensuelles.

La question de l'incertitude de l'estimation spatiale due à l'échantillonnage temporel en chaque station est traitée au chapitre 8, §8.5.

6.4 Synthèse : comparaison des estimations

Contrairement à l'estimation simplifiée et aux faibles perturbations, le modèle à résidu n'est pas adapté à l'estimation conjointe des débits, flux et concentrations de nitrates. Pour les deux modèles retenus, les variances d'estimation sont négligeables pour les débits et concentrations et peuvent sembler importantes pour les flux, cependant les écarts-type relatifs restent tout à fait raisonnables (quelques pourcents en moyenne). Étant donné que les erreurs d'estimation sont du même ordre de grandeur quel que soit le modèle retenu, il est difficile de recommander l'un plutôt que l'autre. Toutefois les nitrates sont très peu variables spatialement ; il serait dès lors intéressant d'examiner le cas d'un indicateur présentant des fluctuations spatiales plus marquées.

Pour clore ce chapitre, l'estimation trivariée conjointe des débits, flux et concentrations de nitrates par bief a été réalisée à partir des mesures du RNB, étant donné que les débits sont

exceptionnellement disponibles aux stations de mesures (cf. §2.2.1); la figure 6.4 présente les estimations obtenues à l'aide du co-krigeage des perturbations de débit et de concentrations, dans un cadre intrinsèque.

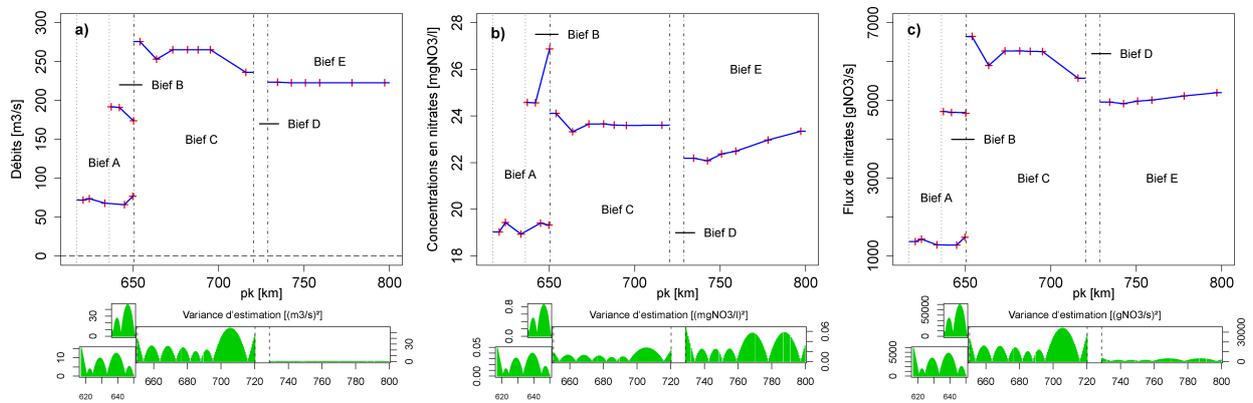


FIGURE 6.4 – Estimation des débits (a), concentrations (b) et flux (c) de nitrates sur les différents biefs du réseau considéré, à partir des mesures mensuelles du RNB ajustées par un modèle de faibles perturbations dans un cadre intrinsèque.

Estimation spatiale sur réseau hydrographique

Chapitre 7

Le modèle à filets

Le modèle à filets est un modèle générique qui se décline en différentes typologies, définies par trois hypothèses essentielles, indépendamment du degré de stationnarité des composantes associées aux filets :

- indépendance ou corrélation des composantes associées aux filets ;
- moyennes liées ou moyennes locales ;
- degré de liberté des coefficients associés aux biefs et aux filets.

Le système de krigeage ainsi que l'inférence pratique vont dépendre des hypothèses retenues.

La lecture de l'annexe A (§A.1, A.2, et A.3) est fortement recommandée aux lecteurs non familiers avec la géostatistique, avant d'aborder ce chapitre théorique.

Principe

On souhaite estimer la concentration $Z(s)$ en tout point s d'un réseau constitué de plusieurs arêtes ou biefs I , à partir de mesures $Z_I(s_\alpha)$. A l'image de la décomposition d'un graphe en rivières, le réseau est décomposé en filets élémentaires i , chacun d'eux reliant une « source » à l'exutoire (Fig. 7.1). Le modèle consiste à combiner des fonctions aléatoires (FA) Y_i à une dimension, stationnaires (FASt) ou intrinsèques (FAI), définies sur ces filets.

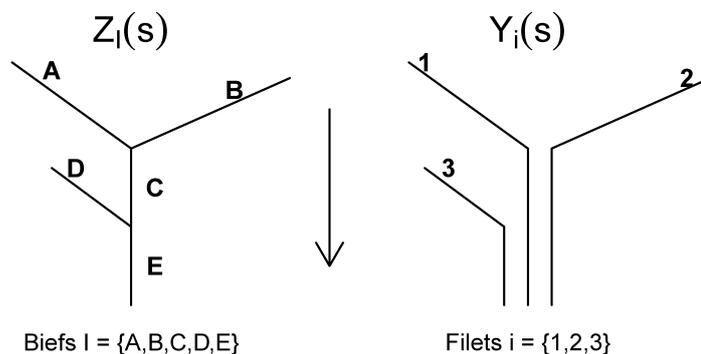


FIGURE 7.1 – *Principe de la décomposition d'un réseau hydrographique en filets.*

Notation	Description
I	un bief
I_α	le bief comportant le point s_α
i	un filet
$Z_I(s)$	la concentration <i>observable</i> sur le bief I , à l'abscisse curviligne s
$Y_i(s)$	la composante <i>non observable</i> associée au filet i , à l'abscisse curviligne s
S_I	l'ensemble des filets passant par le bief I
W_i^I	le coefficient affecté au filet i pour le bief I
B_{iI}	l'ensemble des biefs en amont du bief I par lesquels passe le filet i
w_K	poids attribué au bief K à l'amont d'une confluence

TABLE 7.1 – *Notations adoptées pour décrire le modèle à filets.*

Le modèle

En adoptant les notations reprises au tableau 7.1, la concentration $Z_I(s)$ en tout point s du réseau s'exprime comme une combinaison linéaire des composantes $Y_i(s)$, dont les coefficients W_i^I dépendent du filet i et du bief I considérés (Eq. 7.1).

$$W_i^I = \begin{cases} 0 & \text{si } i \notin S_I \\ 1 & \text{si } i \in S_I \text{ et } B_{iI} = \emptyset \\ \prod_{K \in B_{iI}} w_K & \text{sinon} \end{cases} \quad (7.1)$$

Selon les hypothèses sur les moyennes, deux grandes classes de modèles sont ainsi définies : les modèles à moyennes liées, avec $E[Y_i] = m_i \neq 0$ (Eq. 7.2), et les modèles à moyennes locales, où $E[Y_i] = 0$ (Eq. 7.3).

$$Z_I(s) = \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) \quad (7.2)$$

$$Z_I(s) = m + \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) \quad (7.3)$$

L'estimation en un point s_0 de la concentration $Z_{I_0}(s_0)$ par une combinaison linéaire des mesures $Z_{I_\alpha}(s_\alpha)$ revient donc à estimer une combinaison linéaire des composantes $Y_i(s_0)$ par une autre combinaison linéaire des composantes $Y_j(s_\alpha)$.

7.1 Une famille de modèles

Le modèle à filets peut être décliné en une famille de modèles, en fonction des hypothèses retenues. En effet, outre le degré de stationnarité des composantes Y_i , un modèle est défini par trois hypothèses majeures, qui font l'objet de cette section :

- **Indépendance** ou corrélation des composantes Y_i associées aux filets. L'hypothèse d'indépendance des concentrations à l'amont d'une confluence, qui découle de l'hypothèse d'indépendance des composantes Y_i , est généralement admise (Monestiez et al., 2005; Ver Hoef et al., 2006) mais non vérifiable en raison du faible nombre de données disponibles.

- **Moyennes** liées ou non au fil de l'eau. L'hypothèse retenue pour les moyennes détermine l'expression des concentrations $Z_I(s)$ en fonction des composantes $Y_i(s)$ (Eq. 7.2 ou 7.3), ainsi que le système de krigeage.
- **Coefficients** déterministes W_i^I connus ou inconnus. Le degré de liberté des poids w_K conditionne directement l'inférence du modèle.

7.1.1 Indépendance ou corrélation des Y_i

Plusieurs méthodes sont proposées pour tester la corrélation entre les concentrations sur deux affluents A et B , en les supposant connues de manière exhaustive. Elles reposent essentiellement sur le fait que si les concentrations sont corrélées, on peut imaginer que la corrélation est maximale à proximité de la confluence et diminue vers l'amont.

Aucun des tests présentés ne permet rigoureusement de conclure à l'indépendance des concentrations sur deux affluents, soit en raison des hypothèses sous-jacentes, soit parce que plusieurs phénomènes peuvent expliquer un même résultat. Pour cette raison, il est recommandé d'évaluer la corrélation entre les concentrations de deux affluents à partir des résultats de différents tests, qui peuvent paraître redondants mais sont complémentaires.

Définissons tout d'abord les deux distances utilisées (Fig. 7.2), selon l'abscisse curviligne s . La première retient la distance curviligne calculée au fil de l'eau : $d_{AC} = |s_C - s_A| = d + d'$. Dans ce cas, la distance entre les points s_A et s_B , situés à égale distance d de la confluence s_0 , est nulle : $d_{AB} = |s_A - s_B| = 0$. La seconde distance considère en revanche la distance curviligne le long du graphe, indépendamment du sens d'écoulement. La distance entre deux points reliés au fil de l'eau reste inchangée ($d_{AC} = |s_C - s_A| = d + d'$). En revanche, la distance entre les points s_A et s_B , situés à égale distance d de la confluence, est alors égale au double de cette distance : $d_{AB} = |s_0 - s_A| + |s_0 - s_B| = 2d$.

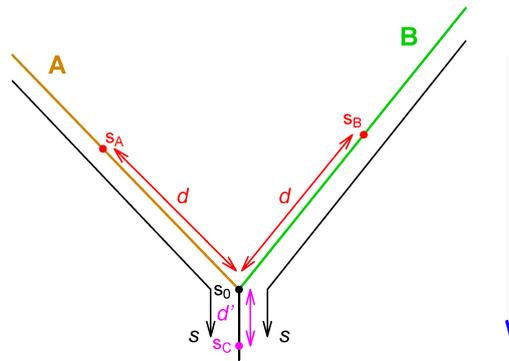


FIGURE 7.2 – Distance curviligne calculée au fil de l'eau (s) et le long du graphe (x).

7.1.1.1 « Variogramme croisé »

Pour se rapprocher d'outils connus, une première solution consiste à calculer un « variogramme croisé » entre les concentrations $Z_A(s)$ et $Z_B(s)$, en les considérant comme deux variables aléatoires définies sur le même champ, recalé à la confluence (Fig. 7.3 et Eq. 7.4). En l'absence de corrélation, ce « variogramme croisé » est nul : $\gamma_{12}(h) = 0$.

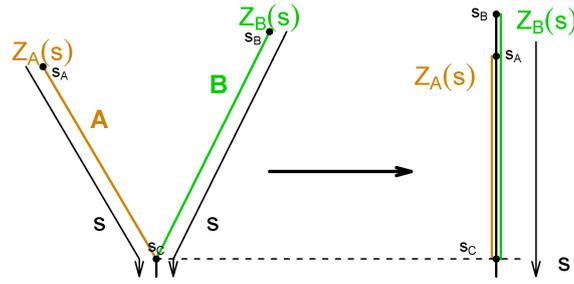


FIGURE 7.3 – Principe de calcul du « variogramme croisé ».

$$\gamma_{12}(h) = \frac{1}{2}E[(Z_A(s+h) - Z_A(s))(Z_B(s+h) - Z_B(s))] \quad (7.4)$$

Ce « variogramme croisé », inadapté pour caractériser la variabilité conjointe des concentrations $Z_A(s)$ et $Z_B(s)$, est uniquement calculé pour tester l'existence d'une corrélation.

7.1.1.2 Ecarts quadratiques

Si les concentrations Z_A et Z_B sont corrélées, l'évolution des écarts quadratiques entre un point du bief A proche de la confluence et tous les points du bief B (en s'éloignant progressivement de la confluence) devrait être croissante. En répétant le calcul avec un point plus éloigné de la confluence sur le bief A , on devrait obtenir une courbe supérieure à la précédente, et ainsi de suite en considérant des points du bief A de plus en plus éloignés de la confluence. Si les concentrations des biefs A et B ne sont pas corrélées, les évolutions obtenues devraient être indépendantes du point du bief A considéré. Trois visualisations des écarts quadratiques sont proposées.

Remarquons qu'en dehors du cadre stationnaire, les écarts quadratiques considérés ne sont pas des combinaisons linéaires autorisées, étant donné qu'ils font intervenir deux points situés sur des biefs différents et donc constitués de composantes différentes (cf. annexe B).

Evolution en fonction de la distance x_2 le long d'un seul bief. La figure 7.4 illustre le principe de ce test, qui consiste à examiner l'évolution des écarts quadratiques ϵ_i^2 en fonction de l'abscisse curviligne x_2 , en négligeant la distance x_1 séparant le point x_i (appartenant au bief A) de la confluence.

Pour cet exemple, un point du bief A est considéré et l'évolution des écarts quadratiques est observée le long du bief B ; les rôles des deux biefs peuvent tout à fait être inversés.

« **Carte variographique** » Le principe de la « carte variographique » consiste à calculer un écart quadratique moyen entre deux segments d'une longueur donnée, le premier situé sur le bief A et le second sur le bief B . Cela revient à calculer un variogramme moyen $\bar{\gamma}(l_{A_i}, l_{B_j})$, l_{I_j} étant le j^{eme} segment du bief I en partant de la confluence (à « contre-courant » donc). Si les segments l_{A_i} et l_{B_j} sont respectivement discrétisés en n_k et n_l points, la valeur obtenue pour chaque couple de segments est donc une moyenne de $n_k n_l$ écarts quadratiques (Eq. 7.5). Ces écarts quadratiques moyens sont ensuite reportés sur une grille afin de rendre compte de la variabilité conjointe des concentrations sur les deux biefs considérés (Fig. 7.5). Si les filets ne sont pas corrélés, cette variabilité sera constante sur toute la grille.

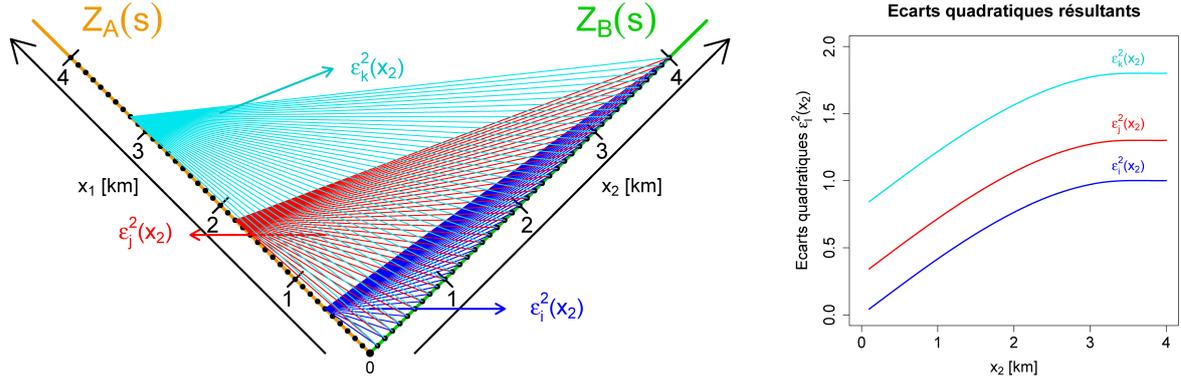


FIGURE 7.4 – Principe de calcul des écarts quadratiques entre deux biefs en fonction de la distance le long d'un seul bief, et exemple de résultat escompté dans le cas d'une corrélation.

$$2\bar{\gamma}(l_{A_i}, l_{B_j}) = \frac{1}{n_k n_l} \sum_{k=1}^{n_k} \sum_{l=1}^{n_l} [Z_A(x_{1,k}) - Z_B(x_{2,l})]^2 \quad (7.5)$$

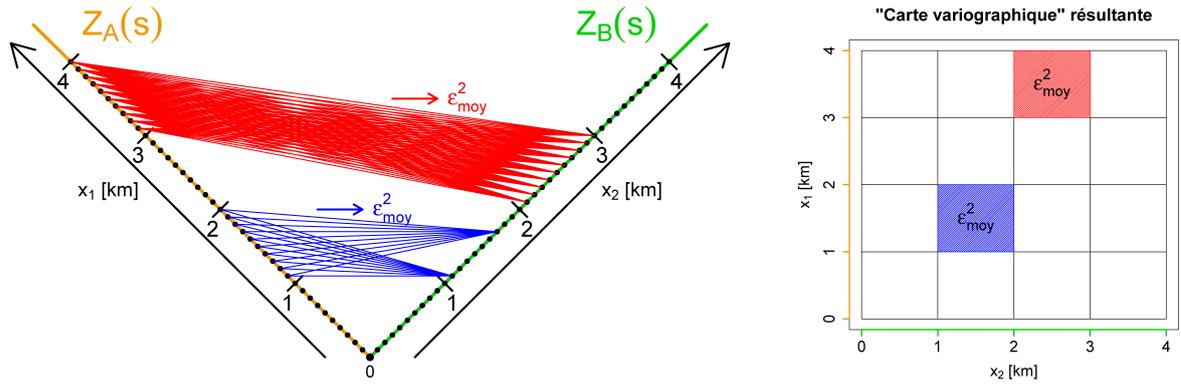


FIGURE 7.5 – Principe de calcul de la « carte variographique » reprenant les écarts quadratiques moyens entre deux biefs.

7.1.1.3 Pseudo-variogramme croisé le long du graphe

Une autre méthode pour tester la corrélation entre les concentrations des biefs A et B considère le pseudo-variogramme croisé le long du graphe $\psi_{AB}(h) = 1/2E \left[(Z_A(x) - Z_B(x+h))^2 \right]$. En notant Z_{A_0} et Z_{B_0} les concentrations - connues - immédiatement à l'amont de la confluence sur les biefs A et B respectivement (Fig. 7.6), le pseudo-variogramme croisé s'exprime également selon l'équation 7.6, où $Z_{A_0} - Z_{B_0} = C$ est une valeur constante, connue.

$$\begin{aligned} \psi_{AB}(h) &= \frac{1}{2}E \left[((Z_A(x) - Z_{A_0}) - (Z_B(x+h) - Z_{B_0}) + (Z_{A_0} - Z_{B_0}))^2 \right] \\ &= \gamma_A(x - x_0) + \gamma_B(x+h - x_0) + C - Cov(Z_A(x) - Z_{A_0}, Z_B(x+h) - Z_{B_0}) \end{aligned} \quad (7.6)$$

Si les concentrations $Z_A(x)$ et $Z_B(x)$ ne sont pas corrélées, leurs accroissements ne le sont pas non plus, et $\psi_{AB}(h) = \gamma_A(x - x_0) + \gamma_B(x+h - x_0) + C$.

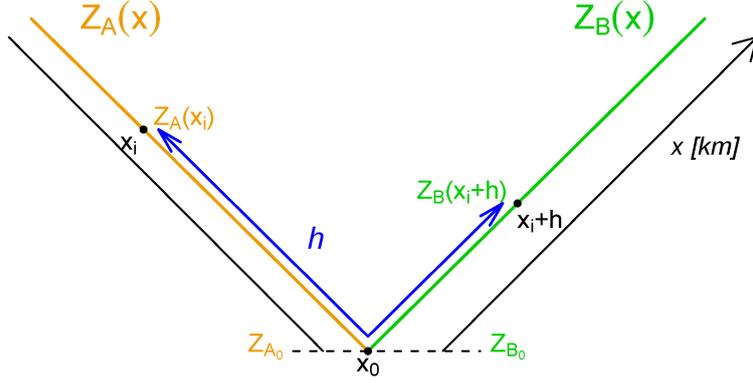


FIGURE 7.6 – Principe de calcul du pseudo-variogramme croisé le long des biefs A et B.

Notons qu'une covariance d'accroissements nulle est une condition nécessaire mais toutefois pas suffisante pour la non-corrélation des concentrations Z_A et Z_B : $Z_A(x) \perp Z_B(x') \forall x, x' \Rightarrow Cov(Z_A(x) - Z_{A_0}, Z_B(x+h) - Z_{B_0}) = 0$. En effet, si un variogramme linéaire peut être ajusté le long du graphe, cette condition sera également vérifiée, en vertu de la propriété d'écran du variogramme linéaire à 1D (Matheron, 1970).

En pratique, ce test consiste à comparer, à h fixé, le pseudo-variogramme croisé à son expression, en admettant que $Z_A(x) \perp Z_B(x') \forall x, x'$ (Eq. 7.7). Le rôle des deux biefs se voulant symétrique, la distance h est limitée à la distance du bief le plus court.

$$\frac{1}{n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [Z_A(x_i) - Z_B(x_i + h)]^2 = \frac{1}{n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [(Z_A(x_i) - Z_{A_0})^2 - (Z_B(x_i + h) - Z_{B_0})^2] + C^2 \quad (7.7)$$

7.1.1.4 Covariance d'accroissements

Le dernier test, plus général que le précédent, repose sur le même principe et les mêmes hypothèses; il répond à la nécessité de travailler sur des combinaisons linéaires autorisées (cf. annexe B). Soient $\Delta_h Z_I(x) = Z_I(x+h) - Z_I(x)$ et $\Delta_h Z_J(x') = Z_J(x'+h) - Z_J(x')$, des accroissements sur les biefs respectifs I et J , leur variogramme s'exprime en fonction des variogrammes simples et de la covariance d'accroissements, notée K_{IJ}^Δ . Cette dernière constitue le seul terme qui fait intervenir conjointement les deux variables (Eq. 7.8, Chauvet (1987)).

$$\begin{aligned} \Gamma_{IJ}^\Delta(h, x, x') &= \frac{1}{2} E [(\Delta_h Z_J(x') - \Delta_h Z_I(x))^2] \\ &= \gamma_I(h) + \gamma_J(h) - Cov(\Delta_h Z_J(x'), \Delta_h Z_I(x)) \\ &= \gamma_I(h) + \gamma_J(h) - K_{IJ}^\Delta(h, x, x') \end{aligned} \quad (7.8)$$

Sous hypothèse d'indépendance des composantes associées aux filets, cette covariance d'accroissements est nulle pour des biefs n'ayant aucun filet en commun (Eq. 7.9), avec un pas d'accroissement h identique sur les deux biefs. Ce test est le seul qui soit rigoureusement autorisé en dehors du cadre stationnaire et qui tient compte de la configuration d'arbre.

A nouveau, si les concentrations des biefs I et J s'ajustent à l'aide d'un modèle de variogramme linéaire, la covariance d'accroissements est également nulle : $K_{IJ}^\Delta = 0$ est une condition nécessaire mais pas suffisante pour l'indépendance des concentrations sur les biefs I et J .

$$\begin{aligned}
K_{IJ}^\Delta(h, x, x') &= Cov(\Delta_h Z_I(x), \Delta_h Z_J(x')) \\
&= Cov\left(\sum_{i \in S_I} W_i^I \Delta_h Y_i(x), \sum_{j \in S_J} W_j^J \Delta_h Y_j(x')\right) \\
&= \sum_{i \in S_I \cap S_J} W_i^I W_i^J C_i(x' - x)
\end{aligned} \tag{7.9}$$

« **Carte variographique** ». Par analogie avec les outils présentés pour les écarts quadratiques, la covariance d'accroissements peut être illustrée par une « carte variographique ». Pour chaque segment l_{I_j} des biefs A et B , il s'agit de calculer les accroissements $\Delta_h Z_I(x_k)$ pour différentes valeurs de h . La covariance d'accroissements moyenne pour des segments l_{A_i} et l_{B_j} donnés est exprimée par l'équation 7.10, où $n(h)$ est le nombre de pas d'accroissement considérés, n_k et n_l étant le nombre d'accroissements considérés au sein d'un segment des biefs A et B respectivement.

$$\overline{K_{AB}^\Delta}(l_{A_i}, l_{B_j}) = \frac{1}{n(h)} \sum_h \frac{1}{n_k n_l} \sum_{k=1}^{n_k} \sum_{l=1}^{n_l} \Delta_h Z_A(x_k) \Delta_h Z_B(x_l) \tag{7.10}$$

Covariance d'accroissements. Soient les accroissements $\Delta_h Z_A(x) = Z_A(x+h) - Z_A(x)$ et $\Delta_h Z_B(x') = Z_B(x'+h) - Z_B(x')$ sur les biefs A et B à l'amont d'une confluence. En admettant la stationnarité à petite distance, leur covariance s'exprime en fonction des covariances croisées C_{AB} (Eq. 7.11), nulles si les concentrations des biefs A et B sont indépendantes. En posant $d = x' - x$, le calcul pratique s'effectue selon l'équation 7.12, où $N(h, d)$ est le nombre de couples d'accroissements de pas h distants de d .

$$\begin{aligned}
\overline{K_{AB}^\Delta} &= Cov(\Delta_h Z_A(x), \Delta_h Z_B(x')) \\
&= 2C_{AB}(x' - x) - C_{AB}(x' + h - x) - C_{AB}(x' - x - h)
\end{aligned} \tag{7.11}$$

$$\overline{K_{AB}^\Delta}(h, d)^* = \frac{1}{N(h, d)} \sum_{i=1}^{N(h, d)} (Z_A(x_i + h) - Z_A(x_i)) (Z_B(x'_i + h) - Z_B(x'_i)) \tag{7.12}$$

Ces différents tests permettent de juger de l'indépendance des concentrations sur deux biefs à l'amont de leur confluence; les résultats sont ensuite étendus aux composantes Y_i définies sur les filets. L'indépendance des composantes Y_i est en effet une hypothèse plus stricte, que seul un test d'indépendance des concentrations sur deux affluents permet d'évaluer.

7.1.2 Les moyennes

Trois principales typologies du modèle sont envisageables selon les hypothèses retenues pour les moyennes des composantes Y_i (constantes ou nulles), qui déterminent la « classe » du modèle (cf. Eq. 7.2 et 7.3).

- **Composantes Y_i de moyenne constante m_i .** Les moyennes des concentrations sont alors également constantes par bief, et liées au fil de l'eau (Eq. 7.2). En tout point du réseau, la moyenne des concentrations sur un bief I vaut donc $m_I = \sum_{i \in S_I} W_i^I m_i$. Cette hypothèse est adaptée au cas où la masse est conservée : tout se passe comme si les filets étaient des rivières parallèles, qui ne se mélangent pas.

- **Composantes Y_i d'espérance nulle et moyenne constante localement.** En admettant que les moyennes des concentrations sont constantes localement, i.e. par bief ou par ensemble de biefs, la concentration $Z_I(s)$ s'exprime selon l'équation 7.13, où m_I est la « moyenne locale » *inconnue* associée au bief I . Ce type de modèle peut par exemple être exploité pour l'estimation en amont, près des sources, où les concentrations dans les cours d'eau ne dépendraient que du milieu local (composition du sol, agriculture, etc).

$$Z_I(s) = m_I + \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) \quad (7.13)$$

- **Composantes Y_i d'espérance nulle et moyenne déterministe.** La moyenne locale m_I peut être remplacée par une dérive déterministe $g(s)$ connue. Les concentrations s'expriment alors en fonction de cette dérive et d'un « résidu » combinant les composantes Y_i (Eq. 7.14).

$$Z_I(s) = m(s) + \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) = a_0 + a_1 g(s) + \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) \quad (7.14)$$

7.1.3 Les coefficients W_i^I

Un coefficient W_i^I est associé à chaque filet i et chaque bief I . Il est nul si le filet i ne passe pas par le bief I , et dépend des poids w_K successifs accordés aux différents affluents dans les autres cas (cf. Eq. 7.1). Pour le réseau schématisé à la figure 7.1, par exemple, les deux confluences conduisent à quatre poids $w_A, w_B, w_C,$ et w_D . Les coefficients W_i^I dépendent directement de ces poids w_K , c'est sur ces derniers que vont porter les hypothèses. Ils peuvent par exemple être déterminés par une relation physique, conduisant à des coefficients soit parfaitement **connus**, soit **contraints** en chaque confluence. Ou ils peuvent être totalement **libres**, afin de refléter au mieux les variations du système hydrologique en aval d'une confluence, en incluant les éventuelles interactions entre les constituants des différents affluents.

7.2 Système de krigeage pour des composantes Y_i indépendantes

Dans cette section, on s'intéresse au modèle à composantes indépendantes, pour des concentrations dont les moyennes inconnues sont supposées liées dans un premier temps (cf. Eq. 7.2) et constantes localement ensuite (cf. Eq. 7.13). La démarche conduisant au système de krigeage est développée dans le premier cas, tandis que les résultats sont directement présentés pour le modèle à moyennes locales. Quelles que soient les hypothèses retenues, l'estimation des concentrations se résume au co-krigeage d'une combinaison linéaire des composantes Y_i associées aux filets (Eq. 7.15 et 7.16), les seules à intervenir dans le système de krigeage.

$$Z_{I_0}(s_0)^* = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z_{I_{\alpha}}(s_{\alpha}) + \lambda_0 \Leftrightarrow \left(\sum_{i \in S_{I_0}} W_i^{I_0} Y_i(s_0) \right)^* = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \sum_{i \in S_{I_{\alpha}}} W_i^{I_{\alpha}} Y_i(s_{\alpha}) + \lambda_0 \quad (7.15)$$

$$\left(m_{I_0} + \sum_{i \in S_{I_0}} W_i^{I_0} Y_i(s_0) \right)^* = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \left(m_{I_{\alpha}} + \sum_{i \in S_{I_{\alpha}}} W_i^{I_{\alpha}} Y_i(s_{\alpha}) \right) + \lambda_0 \quad (7.16)$$

Soient les composantes Y_i des fonctions aléatoires intrinsèques (FAI), caractérisées par des accroissements stationnaires ainsi qu'un variogramme $\gamma_i(h)$. Les composantes étant supposées indépendantes, $\gamma_{ij}(h) = 0 \forall i \neq j$.

Conditions d'autorisation. Afin de garantir l'existence de la variance d'estimation, il faut s'assurer que l'erreur d'estimation ε soit une combinaison linéaire autorisée, c'est-à-dire que la somme des coefficients de la combinaison linéaire de chaque FAI Y_i soit nulle. Portant uniquement sur les composantes, les conditions d'autorisation sont identiques quelle que soit l'hypothèse retenue pour les moyennes. (Aucune condition d'autorisation n'est requise pour des composantes Y_i stationnaires.)

L'équation 7.17 reprend l'expression de l'erreur d'estimation pour le modèle à moyennes liées. Les moyennes m_i étant inconnues et a priori différentes, on obtient les conditions d'autorisation exprimées par l'équation 7.18.

$$\varepsilon = Z_{I_0}(s_0)^* - Z_{I_0}(s_0) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \sum_{i \in S_{I_{\alpha}}} W_i^{I_{\alpha}} Y_i(s_{\alpha}) + \lambda_0 - \sum_{i \in S_{I_0}} W_i^{I_0} Y_i(s_0) \quad (7.17)$$

$$\sum_{\alpha | i \in S_{I_{\alpha}}} \lambda_{\alpha} W_i^{I_{\alpha}} = W_i^{I_0} \quad \forall i_{(ech.)} \quad (7.18)$$

Ces conditions impliquent que l'estimation n'est possible que sur des biefs I dont tous les filets $i \in S_I$ sont échantillonnés. Par ailleurs, si le réseau informé comprend p filets échantillonnés, il y aura p conditions d'autorisation.

Dans ce modèle, une étape préalable à l'estimation consiste donc à restreindre le réseau au « réseau informé » ; par exemple, deux biefs non informés à l'amont d'une confluence sont mis de côté et la confluence devient une source (Fig. 7.7). Cela signifie également qu'il est impossible d'effectuer une estimation à l'amont d'une confluence si aucun affluent n'est informé.

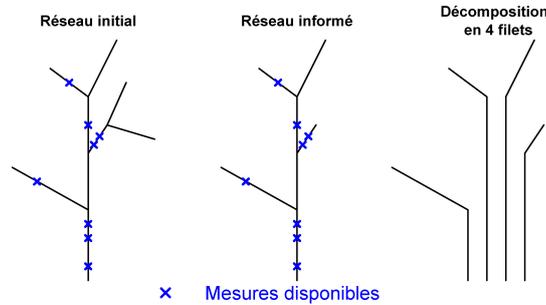


FIGURE 7.7 – Restriction du réseau au « réseau informé » et décomposition en filets.

Le krigeage est alors défini par q conditions de non-biais, qui garantissent sa qualité d'estimateur exact ($E[\varepsilon] = 0$), ainsi qu'une variance d'erreur d'estimation $VAR[\varepsilon] = \sigma_E^2$ minimale. Les conditions de non-biais incluant les conditions d'autorisation ($q \geq p$), le krigeage nécessite dès lors n mesures avec $n > q$.

7.2.1 Modèle à moyennes liées inconnues

Pour des composantes admettant une moyenne constante m_i inconnue, seules les combinaisons linéaires des composantes Y_i interviennent dans l'erreur d'estimation (Eq. 7.17). Dès lors,

en admettant que l'espérance des accroissements soit nulle au moins sur un voisinage donné, **le non-biais est assuré par les conditions d'autorisation et $\lambda_0 = 0$** .

Le système de krigeage s'obtient en minimisant la variance de l'erreur d'estimation ε sous les contraintes de non-biais. L'équation 7.19 reprend l'expression de la variance d'estimation, avec les notations $\gamma_i^{\alpha\beta} = \gamma_i(s_\beta - s_\alpha)$ et $S_{\alpha\beta} = S_{I_\alpha} \cap S_{I_\beta}$.

$$VAR[\varepsilon] = - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \lambda_\alpha \lambda_\beta \sum_{i \in S_{\alpha\beta}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_\beta} \gamma_i^{\alpha\beta} - \sum_{i \in S_{I_0}} W_i^{I_0} \gamma_i^{00} + 2 \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha \sum_{i \in S_{\alpha 0}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_0} \gamma_i^{\alpha 0} \quad (7.19)$$

Pour minimiser cette variance sous les contraintes de non-biais, un paramètre de Lagrange μ_i est introduit par condition ; leur nombre est donc égal à celui des filets échantillonnés, soit p . La fonction à minimiser est alors celle reprise par l'équation 7.20.

$$\phi = VAR[\varepsilon] - 2 \sum_{i=1}^p \mu_i \left(\sum_{\alpha | i \in S_{I_\alpha}} \lambda_\alpha W_i^{I_\alpha} - W_i^{I_0} \right) \quad (7.20)$$

L'annulation des dérivées partielles $\partial\phi/\partial\lambda_\alpha$ et $\partial\phi/\partial\mu_i$ fournit le système de krigeage (Eq. 7.21) ; la variance de l'erreur d'estimation associée à une estimation ponctuelle est exprimée par l'équation 7.22.

$$\begin{bmatrix} \sum_{i \in S_{\alpha\beta}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_\beta} \gamma_i^{\alpha\beta} & W_i^{I_\alpha} \\ W_i^{I_\alpha} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_\beta \\ \mu_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i \in S_{\alpha 0}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_0} \gamma_i^{\alpha 0} \\ W_i^{I_0} \end{bmatrix} \quad (7.21)$$

$$\sigma_E^2 = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha \sum_{i \in S_{\alpha 0}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_0} \gamma_i^{\alpha 0} + \sum_{i=1}^p \mu_i W_i^{I_0} \quad (7.22)$$

7.2.2 Modèle à moyennes locales inconnues

Pour un modèle à composantes d'espérance nulle, en admettant que l'espérance des accroissements soit nulle au moins sur un voisinage donné, **les conditions d'autorisation et $\lambda_0 = 0$ ne suffisent plus à assurer le non-biais**. En effet, l'erreur d'estimation fait intervenir les moyennes locales m_I inconnues (Eq. 7.23) qui conduisent aux contraintes exprimées par l'équation 7.24, où $\mathbb{1}_{m_{I_\alpha} = m_{I_\beta}}$ est l'indicatrice d'égalité des moyennes : elle vaut un si $m_{I_\alpha} = m_{I_\beta}$ et zéro sinon. La condition implicite $\sum_\alpha \lambda_\alpha = 1$ assure la compatibilité des conditions d'autorisation et de non-biais, et implique que le bief (ou l'ensemble de biefs) comportant le point à estimer soit échantillonné.

$$\varepsilon = \sum_{\alpha} \lambda_\alpha m_{I_\alpha} - m_{I_0} + \sum_{\alpha} \lambda_\alpha \sum_{i \in S_{I_\alpha}} W_i^{I_\alpha} Y_i(s_\alpha) - \sum_{i \in S_{I_0}} W_i^{I_0} Y_i(s_0) \quad (7.23)$$

$$\sum_{\alpha} \mathbb{1}_{m_{I_\alpha} = m_{I_0}} \lambda_\alpha = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{\alpha} \mathbb{1}_{m_{I_\alpha} = m_J} \lambda_\alpha = 0 \quad \forall m_J \neq m_{I_0} \quad (7.24)$$

Ces conditions concernent les l ensembles de biefs admettant une moyenne m_J différente : d'une part les points appartenant à l'ensemble de biefs admettant la moyenne m_{I_0} , et d'autre part les

points expérimentaux appartenant aux autres ensembles. Autant de conditions que de moyennes m_J différentes, soit l conditions, viennent donc s'ajouter aux conditions d'autorisation pour garantir le non-biais.

Si la moyenne est constante par bief uniquement, ces conditions deviennent $\sum_{\alpha \in S_{I_0}} \lambda_\alpha = 1$ et $\sum_{\alpha \in S_{I_\alpha}} \lambda_\alpha = 0 \quad \forall I_\alpha \neq I_0$, alors que si la moyenne est constante sur l'ensemble du domaine, une seule condition subsiste : $\sum_\alpha \lambda_\alpha = 1$. On retrouve alors la condition de non-biais du krigeage usuel à moyenne inconnue.

Le système de krigeage, obtenu en minimisant la variance d'estimation sous ces $q = p + l$ contraintes (p conditions d'autorisation et l conditions supplémentaires de non-biais), est repris par l'équation 7.25 (où $j=2, \dots, l$), et la variance d'estimation associée à une estimation ponctuelle par l'équation 7.26.

$$\begin{bmatrix} \sum_{i \in S_{\alpha\beta}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_\beta} \gamma_i^{\alpha\beta} & W_i^{I_\alpha} & 1_{m_{I_\alpha}=m_{I_0}} & 1_{m_{I_\alpha}=m_J} \\ W_i^{I_\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ 1_{m_{I_\alpha}=m_{I_0}} & 0 & 0 & 0 \\ 1_{m_{I_\alpha}=m_J \neq m_{I_0}} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_\beta \\ \mu_i \\ \mu_{p+1} \\ \mu_{p+j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i \in S_{\alpha 0}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_0} \gamma_i^{\alpha 0} \\ W_i^{I_0} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.25)$$

$$\sigma_E^2 = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha \sum_{i \in S_{\alpha 0}} W_i^{I_\alpha} W_i^{I_0} \gamma_i^{\alpha 0} + \sum_{i=1}^p \mu_i W_i^{I_0} + \mu_{p+1} \quad (7.26)$$

7.3 Inférence

L'inférence consiste à déterminer les différents paramètres décrivant le modèle et nécessaires à l'estimation. En acceptant l'hypothèse d'indépendance des composantes, il s'agit des modèles de covariance $C_i(h)$ ou de variogramme $\gamma_i(h)$ pour chaque composante Y_i , ainsi que de tous les coefficients W_i^I . Le variogramme étant un outil plus général que la covariance, l'inférence est examinée pour des FAI. En admettant que tous les variogrammes soient proportionnels à une structure élémentaire $\gamma(h)$ - éventuellement constituée de plusieurs composantes -, la modélisation se réduit à la détermination des « paliers » ou d'un facteur par composante : $\gamma_i(h) = c_i^2 \gamma(h)$.

L'ajustement des composantes correspondant aux filets accessibles via les biefs amont est directement effectué sur les variogrammes expérimentaux. Les deux méthodes d'inférence proposées portent donc sur les filets i qui ne sont pas directement accessibles par les mesures. Elles sont détaillées pour le modèle à moyennes liées (cf. Eq. 7.2).

En pratique, pour un réseau hydrographique donné, le réalisme d'une hypothèse d'indépendance des composantes sera tout d'abord apprécié. Il s'agira ensuite de choisir les hypothèses adéquates sur les moyennes. Enfin, le test de conservation de la masse en aval des confluences renseignera sur le degré de liberté à affecter aux coefficients, avant d'appliquer la méthode d'inférence la mieux adaptée.

7.3.1 D'amont en aval

La première méthode consiste à exprimer la composition des variogrammes des concentrations $Z_I(s)$, accessibles expérimentalement, en fonction de ceux des composantes $Y_i(s)$, nécessaires

à l'estimation (Eq. 7.27). Les paramètres c_i du modèle de variogramme des composantes sont alors déduits des ajustements des variogrammes expérimentaux des concentrations $Z_I(s)$ et des ajustements déjà obtenus. La procédure s'applique d'amont en aval, en intégrant successivement les ajustements précédents.

$$\gamma_I(h) = \sum_{i \in S_I} W_i^{I2} \gamma_i(h) = \sum_{i \in S_I} W_i^{I2} c_i^2 \gamma(h) \quad (7.27)$$

Cette méthode conduit à un système de n équations à m inconnues. Le nombre d'équations est égal au nombre de biefs; il est donc immuable et dépend exclusivement de la configuration du réseau considéré. En revanche, le nombre d'inconnues dépend des hypothèses sur les coefficients W_i^I , qui déterminent si $n \geq m$ ou $n < m$.

Le principal avantage de cette méthode d'inférence réside dans le fait que l'ajustement est réalisé d'amont en aval à partir des variogrammes expérimentaux des biefs. Cela génère un « recalage » des variogrammes des composantes à la variabilité réelle en chaque confluence, limitant la portée des approximations dues aux hypothèses. De plus, cette méthode est valable quelle que soit la typologie envisagée (que les moyennes par biefs soient liées ou pas). Sa majeure faiblesse provient de sa dépendance à la qualité des ajustements des variogrammes expérimentaux $\gamma_I(s)$, qui peut se révéler médiocre en pratique lorsque seuls quelques points sont disponibles par bief.

7.3.1.1 Coefficients connus

Si les coefficients W_i^I sont connus, les ajustements des variogrammes des composantes se déduisent directement des équations 7.27. Dans une configuration où tous les affluents sont informés, l'inférence se traduit par un système à n équations et m inconnues avec $m < n$, soit un système entièrement déterminé. Les équations supplémentaires peuvent alors être exploitées pour vérifier conjointement les hypothèses, et appréhender globalement l'importance des approximations qu'elles induisent.

Pour le modèle à moyennes liées, l'expression de la conservation de la masse en chaque confluence fixe par exemple les poids w_K égaux aux débits relatifs de chaque affluent. Il s'agit toutefois d'être prudent avec cette hypothèse de conservation de la masse, particulièrement avec les nutriments. En effet, elle suppose l'absence d'interaction entre les affluents alors que leurs constituants respectifs peuvent interagir, même s'il faut plusieurs kilomètres pour que l'homogénéisation soit complète. Une vérification toute simple consiste à comparer la concentration immédiatement à l'aval de la confluence à celle obtenue en pondérant les concentrations des affluents juste à l'amont de la confluence par leur débit relatif respectif. Cependant, si la masse est conservée juste à l'aval de la confluence, il faut également se demander jusqu'où cette hypothèse peut être considérée comme réaliste.

7.3.1.2 Coefficients contraints

L'hypothèse de conservation de la masse peut s'avérer irréaliste à grande distance de la confluence, en raison des interactions bio-physico-chimiques qui peuvent avoir lieu entre les différents constituants. Imaginons un affluent riche en bactéries responsables de la nitrification, qui ont déjà transformé tout l'ammonium disponible en nitrates. Supposons alors que le second affluent ne contienne pas de bactéries ni de nitrates, mais uniquement de l'ammonium. A l'aval de la confluence, au fur et à mesure que les constituants se mélangent, les bactéries du premier affluent vont dégrader l'ammonium du second, créant ainsi plus de nitrates. La masse d'ammonium se

verra donc progressivement diminuée, et celle des nitrates augmentée.

Dans une telle situation, les débits relatifs ne décrivent pas correctement l'apport des différents filets. Une seconde hypothèse envisageable est alors celle des coefficients contraints, qui revient à imaginer des coefficients qui tiennent compte des éventuelles interactions entre les différents filets à l'aval de la confluence. On peut par exemple imposer que la somme des poids soit égale à l'unité en chaque confluence, en s'inspirant des travaux de Bruno et al. (2001).

Par rapport au cas des coefficients connus, il y a donc une inconnue supplémentaire en chaque confluence, qui sera déterminée à l'aide des équations qui permettraient de vérifier les hypothèses. Si tous les affluents sont informés, le système est tout juste déterminé : $n = m$.

7.3.1.3 Coefficients libres

On peut également concevoir un système avec des coefficients tout à fait libres, qui ne revêtent plus aucun sens physique et sont entièrement déterminés par les mesures, pour traduire au mieux la combinaison effective des filets. Ce faisant, le nombre d'inconnues se voit encore accru d'un nombre égal au nombre de confluences, et le système n'est plus déterminé : $n < m$. Les équations indéterminées sont alors optimisées via la méthode des moindres carrés pondérés par le nombre de couples de points rapporté à la distance, afin d'accorder plus de crédit aux valeurs correspondant aux petites distances.

En résumé, pour un réseau où tous les biefs sources sont informés, le système est entièrement déterminé pour des coefficients contraints, et donc a fortiori pour des coefficients connus où les hypothèses peuvent en outre être vérifiées. Par contre si les coefficients sont libres, les différents paramètres devront être optimisés, par exemple via le maximum de vraisemblance.

7.3.2 Identification automatique

Une méthode alternative s'inspire de l'ajustement des paramètres des covariances généralisées $K_i(h) = c_i K(h)$ dans un cadre non stationnaire. Chilès and Delfiner (1999) proposent une identification automatique dont le principe est le suivant. Soit une Combinaison Linéaire Autorisée $CLA = \sum_i \lambda_i Z_i$. Sa variance théorique s'exprime en fonction des covariances K_i (Eq. 7.28) ; expérimentalement, la variance peut être approchée par le carré de la CLA, en admettant que son espérance soit nulle au moins sur un voisinage donné (Eq. 7.29). Les paramètres c_i et c_j des covariances K_{ij} peuvent dès lors être déterminés en identifiant les variances théorique et expérimentale.

$$VAR[CLA] = VAR \left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i \right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j K_{ij} = f(\lambda_i, c_i, K) \quad (7.28)$$

$$VAR \left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i \right] = E \left[\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i \right)^2 \right] \approx \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i \right)^2 \quad (7.29)$$

En pratique, on minimise l'écart entre variance théorique et variance expérimentale pour une famille de CLA, afin de réduire l'erreur inhérente à l'approximation de l'espérance par une seule réalisation. Chilès and Delfiner (1999) préconisent une pondération inversement proportionnelle à la variance théorique (avec un palier égal à l'unité), afin de tenir compte des différences de

configuration. La minimisation s'effectue donc selon l'équation 7.30, où $\omega_k = VAR[CLA_k | c_i = 1 \forall i] = f(\lambda_i, K)$.

$$\underbrace{\min}_{c_i} \sum_k \omega_k [CLA_k^2 - VAR[CLA_k]]^2 \quad (7.30)$$

La méthode reste valable dans un cadre intrinsèque, pour des $CLA = \sum_I \lambda_I \sum_i W_i^I Y_i$. L'identification des variances théorique et expérimentale de CLA construites arbitrairement permet ainsi de déterminer les paramètres c_i des ajustements des variogrammes $\gamma_i(h)$ des différentes composantes associées aux filets i . Cette identification peut être réitérée en chaque confluence, à condition de disposer d'au moins un point sur chaque affluent. Le système obtenu comprend donc autant d'équations – à optimiser – que de confluentes ; le nombre d'inconnues dépend des hypothèses sur les coefficients W_i^I .

Cette méthode présente l'avantage indéniable d'être applicable même pour des biefs très peu informés. Cependant elle est plus approximative que la précédente étant donné que l'espérance est approchée par une seule valeur. De plus, cette méthode adaptée au modèle à moyennes liées (Eq. 7.2) nécessite des précautions dans la construction des CLA pour des tronçons répondant au modèle des moyennes locales (Eq. 7.13), étant donné que l'espérance des CLA, non nulle, fait intervenir des moyennes différentes, inconnues et non liées. La variance expérimentale ne peut dès lors plus nécessairement être approchée par le carré de la CLA. Cette restriction est levée si des CLA peuvent être construites entre biefs admettant la même moyenne, ou si les moyennes locales peuvent être connues par ailleurs.

7.3.2.1 Coefficients connus

Si tous les coefficients sont connus, par exemple égaux aux débits relatifs, la minimisation de l'écart quadratique entre variances expérimentale et théorique détermine les ajustements des variogrammes des différentes composantes. La composition des variogrammes expérimentaux (Eq. 7.27) peut alors être mise à profit pour tester les hypothèses (cf. §7.3.1.1).

7.3.2.2 Coefficients contraints

Lorsque l'hypothèse de conservation de la masse n'est pas réaliste, les interactions peuvent être prises en compte dans les coefficients, inconnus mais contraints en chaque confluence, par exemple en imposant que leur somme soit égale à l'unité. Les équations 7.27 qui permettaient de tester les hypothèses sont alors utilisées pour déterminer les coefficients aux confluentes correspondantes.

Dans cette configuration, l'identification reprise par l'équation 7.30 ne peut se faire en pondérant chaque écart par sa variance théorique pour un ajustement avec $c_i = 1$. En effet, les coefficients W_i^I qui interviennent dans cette variance théorique ne sont pas connus. Une solution envisageable est de négliger la pondération des écarts et donc les différences de configuration. L'identification s'écrit donc simplement selon l'équation 7.31.

$$\underbrace{\min}_{w_I, c_i} \sum_k [CLA_k^2 - VAR[CLA_k]]^2 \quad (7.31)$$

7.3.2.3 Coefficients libres

Les coefficients peuvent également être totalement libres et uniquement déterminés par les mesures. La minimisation découlant de l'identification des variances se fait donc selon l'équation 7.31, sans pondération, avec un résultat d'autant meilleur que les paramètres à déterminer sont peu nombreux.

Chapitre 8

Krigeage des concentrations en nitrates sur réseau

Le modèle à filets (cf. chapitre 7) est appliqué aux concentrations annuelles en nitrates, selon l'approche « réglementaire » (cf. chapitre 3). Après avoir décomposé le réseau en filets, l'indépendance des concentrations à l'amont d'une confluence est testée, et l'inférence du modèle réalisée.

L'indépendance et l'inférence, examinées sur la maquette PROSE dans un premier temps, sont ensuite appliquées aux mesures du RNB, afin d'apprécier les difficultés pratiques d'une telle démarche. Une comparaison du krigeage des mesures du RNB obtenu à l'aide des deux modèles, ainsi qu'un paragraphe consacré à la variance d'estimation, complètent ce chapitre.

Trois ensembles de données sont utilisées : les valeurs PROSE, leurs moyennes annuelles, ainsi que celles des mesures du RNB (cf. chapitres 2 et 3).

8.1 Décomposition du graphe en filets

Dans un souci de facilité de mise en oeuvre, la partie amont de la Seine du domaine modélisé par PROSE (Fig. 8.1a), tronqué au $pk = 800$ km (cf. §4.5.1), a également été tronquée juste à l'aval de la station d'épuration (STEP) Seine Amont.

Le réseau retenu comporte cinq biefs et trois « confluences » : les confluences Seine/Marne et Seine/Oise, ainsi que la STEP Seine Aval (Fig. 8.1b). En effet cette dernière peut être assimilée à un affluent - ponctuel - étant donné les discontinuités de débits et de concentrations qu'elle induit. N'étant pas modélisée par PROSE, l'Oise est également traitée comme un « affluent ponctuel ».

La décomposition de ce réseau en filets élémentaires est reprise à la figure 8.1c. Quatre filets sont nécessaires, dont deux - ceux correspondant aux « affluents ponctuels » - ne sont pas informés en amont, à la source.

8.2 Test d'indépendance des filets

La première question concerne l'indépendance des composantes Y_i associées aux filets, qui peut être testée à l'amont des confluences essentiellement via différentes méthodes (cf. §7.1.1). En l'occurrence, ces tests ont été effectués à l'amont de la confluence Seine/Marne, la seule à

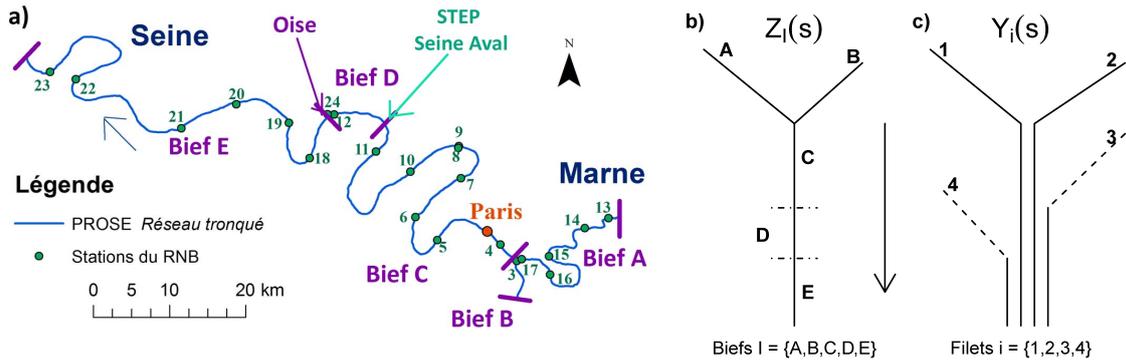


FIGURE 8.1 – a) Réseau hydrographique considéré pour l’estimation des concentrations en nitrates. b) Schématisation en 5 biefs. c) Décomposition en 4 filets.

posséder deux affluents informés. Afin de faciliter l’interprétation et d’éviter les redondances, une seule illustration de chaque méthode est présentée ici.

8.2.1 A partir des valeurs PROSE

Le tout premier examen consiste à observer le « variogramme croisé » entre les concentrations de la Marne (bief A) et de la Seine (bief B) à l’amont de leur confluence (Fig. 8.2a), calculé comme si les deux variables $Z_A(s)$ et $Z_B(s)$ étaient définies sur le même champ. Ce variogramme affiche une amplitude très faible et oscille autour du zéro.

Ensuite, la figure 8.2b présente les écarts quadratiques moyens par segments de 1 km. De part et d’autre de la discontinuité observée sur les données de la Marne (cf. Fig. 3.1), qui se retrouve sur la « carte variographique », ces derniers apparaissent approximativement constants.

Malgré les écarts tout à fait raisonnables induits par les petites discontinuités, aucune structure traduisant une corrélation plus forte à proximité de la confluence n’est mise en évidence. Ces deux tests suggèrent donc que l’hypothèse d’indépendance des concentrations en nitrates à l’amont d’une confluence est réaliste.

La figure 8.3 présente les résultats des deux autres tests, portant sur la covariance d’accroissements. Le pseudo-variogramme croisé est presque parfaitement égal à la somme des variogrammes simples (Fig. 8.3a), et la carte variographique reprenant la covariance d’accroissements moyenne par kilomètre est quasiment nulle excepté à la discontinuité observée sur la Marne (Fig. 8.3b). Ces résultats indiquent que les accroissements ne sont pas corrélés, et confortent les observations précédentes. A noter toutefois qu’ils peuvent également traduire une variabilité le long du graphe caractérisée par un variogramme linéaire.

Même s’il serait nécessaire de conforter ces résultats pour d’autres confluences, ce qui n’est pas possible sur le réseau considéré, l’hypothèse d’indépendance à l’amont d’une confluence est donc acceptée, et étendue à l’indépendance des composantes Y_i associées aux filets.

8.2.2 A partir des mesures du RNB

Bien que la Marne soit informée par 5 stations, l’unique station du RNB située sur la Seine à l’amont de la confluence rend le test de l’indépendance des concentrations impossible. Lorsque chaque affluent ne dispose pas d’au moins deux stations, les accroissements ne sont tout

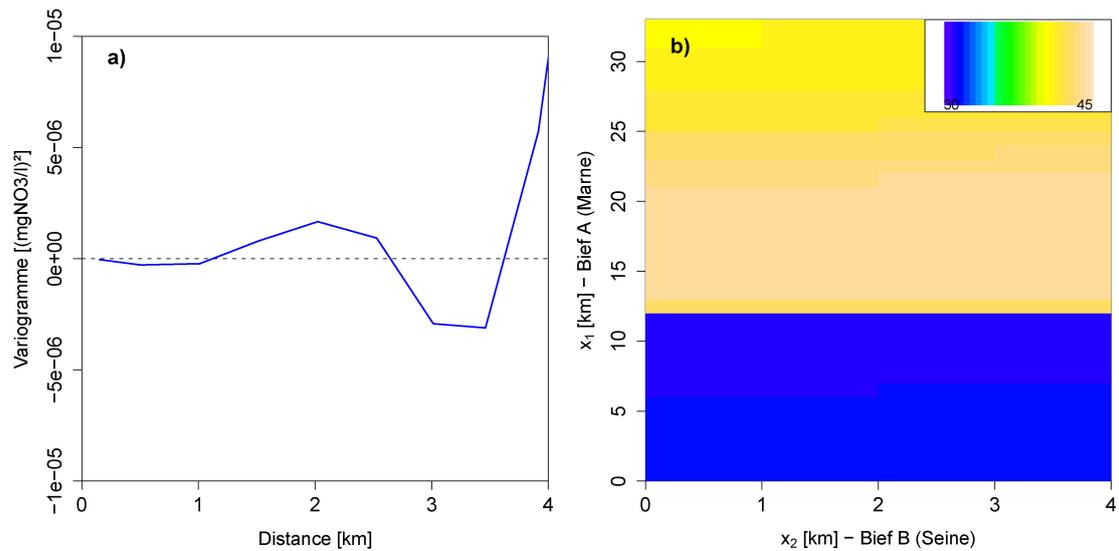


FIGURE 8.2 – Résultats des tests de l’indépendance des concentrations en nitrates à l’amont de la confluence Seine/Marne. a) « variogramme croisé ». b) « Carte variographique » associée aux écarts quadratiques.

simplement pas accessibles, tout comme leur covariance, le « variogramme croisé », ainsi que les variogrammes simples intervenant dans l’expression du pseudo-variogramme croisé le long du graphe. De plus ce test n’a de sens qu’en présence de mesures exhaustives.

Un écart quadratique pourrait toutefois être calculé entre la station située sur la Seine et celles situées sur la Marne, mais serait-il pertinent d’en déduire une hypothèse d’indépendance ou de corrélation ? A titre d’information, cet écart a été calculé : il semble croître avec la distance le long du graphe, ce qui va à l’encontre de l’hypothèse d’indépendance déduite des valeurs PROSE.

Les stations du RNB se révèlent donc insuffisantes pour tester pertinemment la corrélation des composantes associées aux filets sur le réseau considéré ; en se fiant aux résultats obtenus sur la maquette PROSE, ces composantes seront considérées indépendantes.

8.3 Inférence

Les composantes Y_i associées aux filets étant supposées indépendantes, il s’agit maintenant, dans une deuxième étape, de déterminer les hypothèses les mieux adaptées pour les moyennes et les coefficients W_i^I (cf. Eq. 7.1).

Le choix d’un modèle à moyennes liées est motivé tout d’abord par la faible variabilité spatiale des concentrations moyennes en nitrates (cf. §4.3.2), qui suggère que les interactions avec les autres constituants sont plutôt rares. En outre, ce modèle paraît indiqué pour une première application, son inférence apparaissant plus aisée.

Dans cette même optique, la question de la conservation de la masse de nitrates est tout d’abord examinée, afin de légitimer le choix de coefficients connus, avec des poids w_K égaux aux débits relatifs de chaque affluent.

Les hypothèses étant posées, l’inférence est ensuite envisagée, en admettant que tous les variogrammes sont proportionnels à une structure élémentaire, déterminée à partir des variogrammes des concentrations. Dans la mesure du possible, l’inférence est réalisée d’amont en aval, à partir

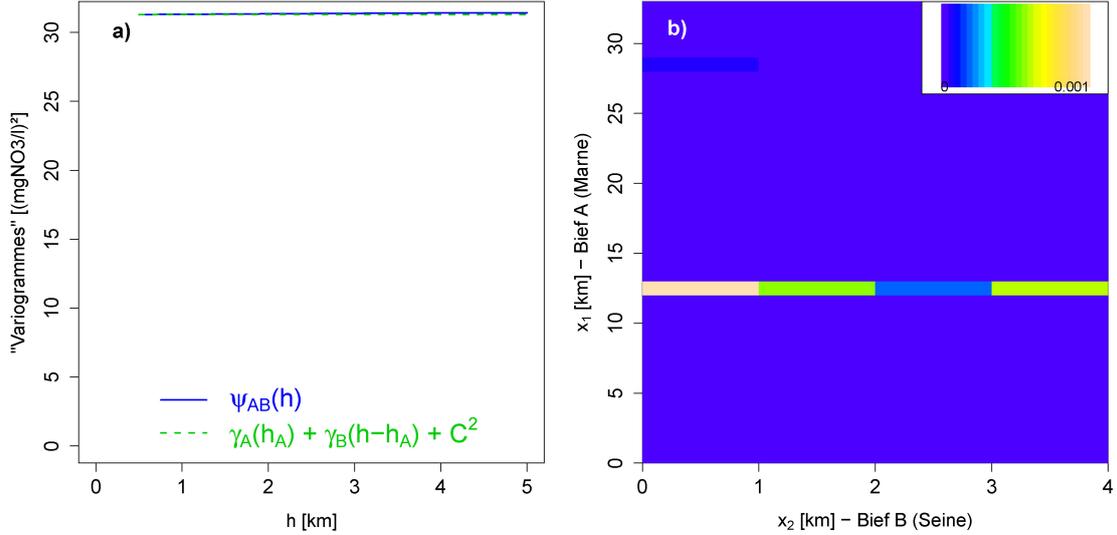


FIGURE 8.3 – Résultats des tests de l’indépendance des concentrations en nitrates à l’amont de la confluence Seine/Marne à l’aide des covariances d’accroissements. a) Comparaison du pseudo-variogramme croisé le long du graphe à son expression (cf. Eq. 7.7). b) « Carte variographique » associée à la covariance d’accroissements.

de la composition de ces variogrammes (cf. Eq. 7.27) ; si cette méthode n’aboutit pas, le recours à l’inférence par identification automatique est alors considéré.

8.3.1 A partir des valeurs PROSE

8.3.1.1 Conservation de la masse

La figure 8.4 présente la comparaison de la concentration immédiatement à l’aval de la confluence Seine/Marne à la somme des concentrations des affluents pondérées par leur débit relatif respectif (cf. §7.3.1.1).

L’hypothèse de conservation de la masse de nitrates se vérifie immédiatement à l’aval de la confluence, et reste tout à fait réaliste sur une trentaine (voire une cinquantaine) de kilomètres. Des poids w_K égaux aux débits relatifs sont donc retenus (Tab. 8.1), avec comme conséquence des coefficients W_i^I connus pour tout filet i et tout bief I . Ce choix a pu être validé malgré la présence de deux « affluents ponctuels » : les rejets de la STEP Seine Aval ainsi que les concentrations et débits de l’Oise sont des données d’entrée nécessaires au modèle PROSE, et dès lors disponibles.

Aff. K	A	B	C	S_{Aval}	D	Oise
w_K	0.31	0.69	0.91	0.09	0.68	0.32

TABLE 8.1 – Poids w_K correspondant au débit relatif moyen de chaque affluent (Aff.). Les deux « affluents ponctuels », la STEP Seine Aval (S_{Aval}) et l’Oise, sont également repris.

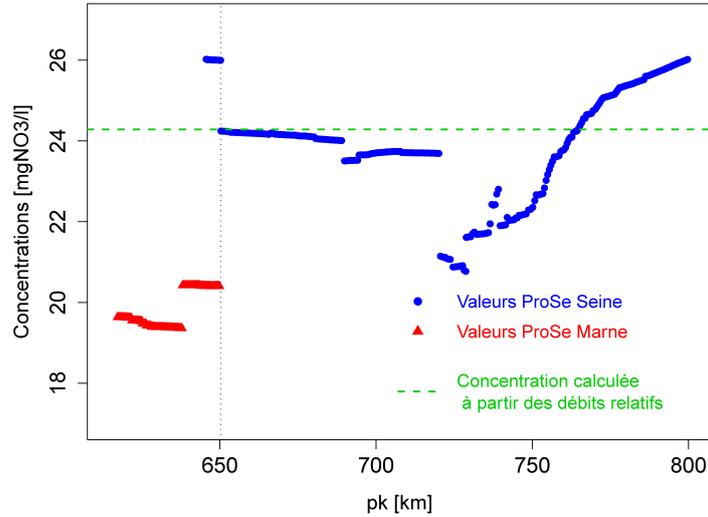


FIGURE 8.4 – Evolution des valeurs PROSE de nitrates de part et d'autre de la confluence Seine/Marne ; la ligne verte pointillée illustre la concentration obtenue en pondérant celles de la Marne et de la Seine immédiatement à l'amont de la confluence par leur débit relatif moyen.

8.3.1.2 Inférence d'amont en aval

Comme tous les variogrammes des composantes sont supposés proportionnels à une structure élémentaire ($\gamma_i(h) = c_i\gamma(h)$), l'étape préalable à leur inférence consiste à déterminer cette structure élémentaire $\gamma(h)$. En l'occurrence, les variogrammes des concentrations suggèrent une composante linéaire unique (Fig. 8.5), ajustée automatiquement (avec une pondération égale au nombre de couples de points rapporté à la distance).

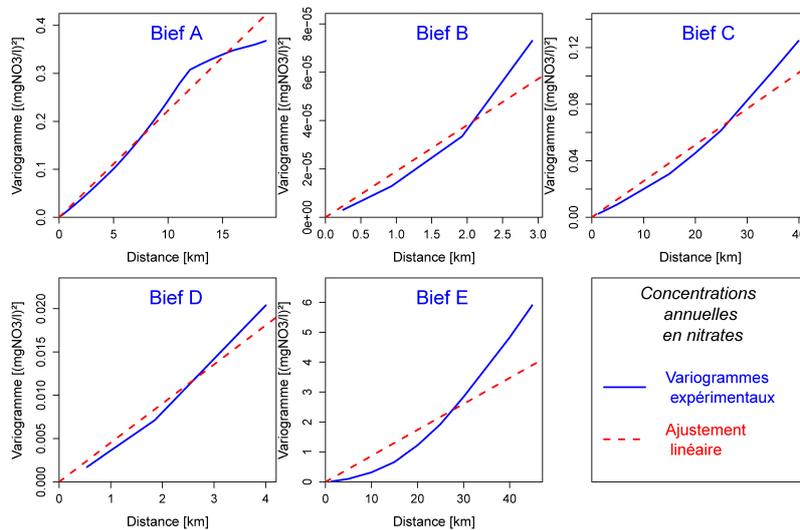


FIGURE 8.5 – Variogrammes spatiaux expérimentaux des valeurs PROSE de concentrations annuelles en nitrates sur les différents biefs, et ajustement par une composante linéaire.

Les coefficients W_i^I étant connus, le système d'inférence comporte autant d'inconnues que de filets, soit $m = 4$: quatre des cinq équations disponibles - le réseau comportant $n = 5$ biefs - suffisent donc à le résoudre.

Les pentes des variogrammes associés aux filets 1 et 2, c_1 et c_2 , sont directement ajustées sur les variogrammes expérimentaux relatifs aux biefs A et B (γ_A et γ_B), tandis que les pentes des variogrammes γ_3 et γ_4 sont déduites de l'expression des variogrammes γ_D et γ_E , respectivement (cf. Eq. 7.27).

Comme $n > m$, l'équation supplémentaire relative au bief C peut être exploitée pour apprécier l'importance des approximations induites par les hypothèses retenues. La comparaison de l'ajustement du variogramme des concentrations sur le bief C à celui déduit des coefficients et des variogrammes γ_1 et γ_2 (Fig. 8.6) montre une bonne concordance des deux ajustements, indiquant que ces approximations sont raisonnables. En effet le variogramme déduit coïncide avec le variogramme expérimental jusqu'à une distance de 20 km, validant les hypothèses et le paramétrage du modèle.

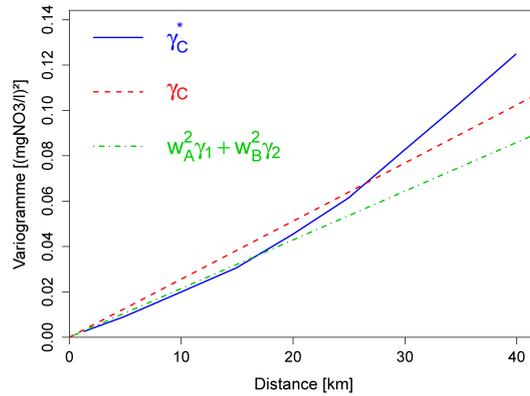


FIGURE 8.6 – Comparaison de l'ajustement du variogramme expérimental des concentrations du bief C à celui déduit des poids w_K et des variogrammes γ_1 et γ_2 .

8.3.2 A partir des mesures du RNB

Les biefs B et D ne comportant qu'une station, leurs variogrammes expérimentaux sont inaccessibles. Le cas du bief B n'est pas si inquiétant étant donné que le second affluent, le bief A, est connu. En revanche, le bief D constitue le seul affluent informé de la confluence Seine/Oise, ce qui s'avère problématique. Une solution permettant de contourner cet écueil consiste à le regrouper avec un bief adjacent, le bief C ou E en l'occurrence, et de réduire ainsi le réseau à 4 biefs et 3 filets. Deux critères simples permettent de déterminer le choix le plus pertinent :

- l'écart entre la concentration du bief D et la moyenne des concentrations du bief candidat I pondérées par l'inverse de la distance à la station du bief D $d_{\alpha,D}$:

$$\left| C_D - \sum_{\alpha \in I} C_{\alpha} \frac{1/d_{\alpha,D}}{\sum_{\alpha} 1/d_{\alpha,D}} \right| ;$$

- l'écart de concentration entre la station du bief D et la plus proche station du bief candidat I rapporté à l'écart moyen entre deux stations voisines du bief candidat :

$$\frac{|C_D - C_I|}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-1} |C_{I_{i+1}} - C_{I_i}|}, \text{ avec } C_I = C_{C_n} \text{ ou } C_I = C_{E_1}.$$

Les deux critères présentent des valeurs moindres pour le bief E (Tab. 8.2).

Critère	Bief C	Bief E
Ecart à la moyenne [mgNO ₃ /l]	3.23	1.58
Rapport des écarts	37.22	3.95

TABLE 8.2 – Résultats des deux tests pour le regroupement du bief D avec un bief adjacent.

Cependant, en anticipant l'étape suivante, à savoir l'inférence proprement dite, un autre critère, plus pragmatique, peut être envisagé : celui de l'information. En effet, le bief D résulte de la « confluence » du bief C et de l'« affluent ponctuel » que constitue la STEP Seine Aval, avec des rejets qui ne sont pas forcément disponibles. En revanche, le bief E est issu de la confluence du bief C et de l'Oise, rivière non modélisée par PROSE mais informée par le RNB, notamment à proximité immédiate de sa confluence avec la Seine. D'un point de vue pratique, regrouper le bief D avec le bief C, et négliger la discontinuité *non informée* due à la STEP, pourrait alors s'avérer plus judicieux.

Néanmoins, en l'occurrence, les rejets de cette STEP constituent une donnée d'entrée du modèle PROSE et sont donc disponibles. Le critère de l'information ne permettant pas de départager les deux biefs, le bief E, privilégié par les deux autres critères, est fusionné avec le bief D pour devenir le « bief DE » ; la discontinuité induite par la confluence Seine/Oise est désormais négligée, et le réseau considéré est donc celui schématisé à la figure 8.7.

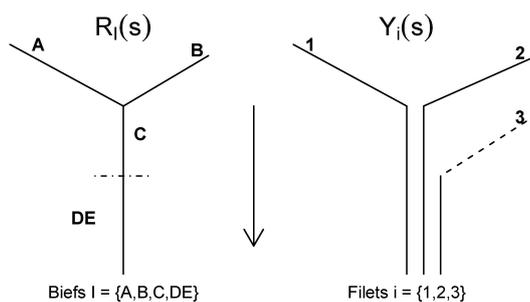


FIGURE 8.7 – Décomposition du réseau PROSE composé de 4 biefs et d'un « affluent ponctuel » en 3 filets, après regroupement des biefs D et E.

8.3.2.1 Conservation de la masse

Les mesures du RNB comprenant des mesures du débit, le test de conservation de la masse de nitrates est exceptionnellement possible (Fig. 8.8). Bien que moins concluant que le test effectué sur la maquette PROSE, et à défaut d'autres informations, celui-ci conduirait également à accepter l'hypothèse de conservation de masse jusqu'à une distance d'environ 80 km. A noter que les débits relatifs de la Seine et de la Marne sont identiques à ceux trouvés à partir des valeurs PROSE.

Pour les autres confluences, lorsque les débits relatifs ne sont pas connus, il est toujours possible de considérer la différence de débit à l'aval et à l'amont de la « confluence », au prix d'une approximation supplémentaire. Ici, les rejets de la STEP étant disponibles, son débit relatif est connu et égal à 10%.

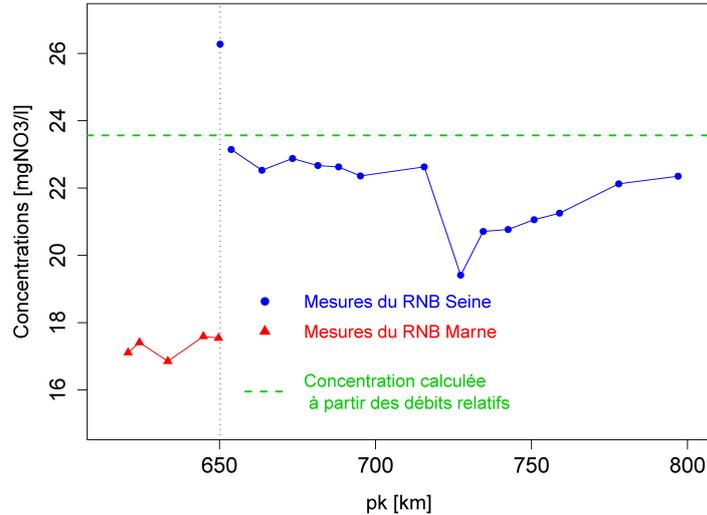


FIGURE 8.8 – Evolution des concentrations en nitrates mesurées par le RNB de part et d'autre de la confluence Seine/Marne ; la ligne verte pointillée illustre la concentration obtenue en pondérant celles de la Marne et de la Seine à l'amont de la confluence par leur débit relatif moyen.

8.3.2.2 Inférence d'amont en aval

Le choix de la structure élémentaire s'avère délicat en raison du faible nombre de stations disponibles pour calculer les variogrammes expérimentaux des concentrations. Toutefois, en s'appuyant sur les observations obtenues à partir de la maquette, une structure linéaire a été retenue et ajustée automatiquement (Fig. 8.9).

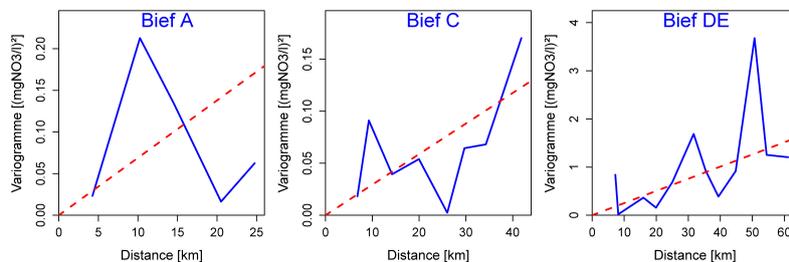


FIGURE 8.9 – Variogrammes spatiaux expérimentaux sur les différents biefs des concentrations annuelles en nitrates calculées à partir des mesures du RNB, et ajustement par une composante linéaire.

Les coefficients W_i^I étant connus via les débits relatifs, l'inférence est réalisée en résolvant un système à 3 équations (biefs A, C, et DE) et 3 inconnues.

8.3.2.3 Inférence par identification automatique

En pratique, les débits sont rarements connus et le test de conservation de la masse ne peut être réalisé ; les coefficients W_i^I sont alors au mieux contraints, en imposant par exemple que la somme des poids w_K soit égale à l'unité en toute confluence. A l'instar du paragraphe précédent, l'inférence est examinée ici pour une structure élémentaire linéaire, dans un contexte plutôt défavorable mais général.

Le variogramme $\gamma_1(h) = c_1|h|$ associé au filet 1 est directement ajusté sur le variogramme expérimental du bief A ; chaque confluence est ensuite traitée séparément pour l'ajustement respectif des variogrammes $\gamma_2(h)$ et $\gamma_3(h)$.

L'ajustement du filet 2 s'effectue à partir de combinaisons linéaires autorisées de forme $CLA = w_A Z_A(s_A) - Z_C(s_C) + (1 - w_A) Z_B(s_B)$, construites autour de la confluence Seine/Marne. En exploitant la station du bief B, les cinq stations du bief A, et les sept stations du bief C, 35 CLA peuvent ainsi être calculées. Les variances théorique et expérimentale pour une CLA donnée sont exprimées par les équations 8.1 et 8.2, respectivement.

$$VAR[CLA] = 2w_A \gamma_A C(s_C - s_A) + 2(1 - w_A) \gamma_B C(s_C - s_B) = 2w_A^2 c_1 |s_C - s_A| + 2(1 - w_A)^2 c_2 |s_C - s_B| \quad (8.1)$$

$$VAR[CLA]^* = CLA^2 = w_A^2 (Z_A - Z_B)^2 + 2w_A (Z_B Z_C + Z_A Z_B - Z_B^2) + (Z_C - Z_B)^2 \quad (8.2)$$

La minimisation conjointe de la fonction $f = \sum_{i=1}^{35} (VAR[CLA_i]^* - VAR[CLA_i])^2$, pour $w_A \in [0, 1]$ et $c_2 > 0$, fournit un poids $w_A = 0.39$ et une pente c_2 quasiment nulle. Afin d'éviter de considérer un variogramme nul, une valeur $\epsilon = 10^{-5}$ est arbitrairement¹ retenue pour l'ajustement du $\gamma_2(h)$. Ces résultats ne sont somme toute pas très différents de l'inférence effectuée sur la maquette PROSE à partir des débits relatifs, où w_A valait 0.31 et c_2 était également très faible en regard des autres ajustements.

La même procédure a été appliquée au troisième filet, de part de d'autre de la STEP Seine Aval, à partir du rejet de la STEP, des 7 stations informant le bief C et des 7 autres informant le bief DE, soit 49 CLA. Pour $w_C \in [0, 1]$ et $c_3 > 0$, la minimisation de la fonction f ne converge pas, offrant deux solutions : conclure à l'impossibilité d'inférer le modèle dans une telle situation, ou élargir l'intervalle du poids w_C en autorisant $w_C > 1$ (et donc $w_{Sav} < 0$). Ce faisant, l'optimisation conduit à une pente c_3 quasiment nulle (fixée à 0.00001), et à un poids $w_C = 2.28$. Cette situation embarrassante résulte d'une part de la configuration du réseau avec ses « affluents ponctuels » mais principalement du fait que la concentration annuelle en nitrates est beaucoup plus variable en aval du domaine considéré qu'en amont : dès lors, la contrainte retenue pour les poids w_K n'est pas la mieux adaptée, et des coefficients W_i^J libres seraient sans doute plus appropriés. Cependant, les « affluents ponctuels » du réseau considéré impliquent une information incomplète, rendant en l'occurrence impossible l'inférence du modèle avec des coefficients libres, les paramètres à optimiser étant trop nombreux.

8.4 Estimation à partir des mesures du RNB

Le modèle ayant été inféré, le krigeage en réseau des mesures du RNB est réalisé avec un voisinage unique, le réseau considéré ne comportant que 25 stations. Un examen des poids de krigeage a confirmé ce que suggère un modèle à composante unique linéaire : seules les stations adjacentes au point à estimer influencent réellement l'estimation. L'importance de l'approximation due à l'hypothèse de conservation de la masse au-delà de quelques dizaines de kilomètres est

1. Une étude de sensibilité de l'estimation à la valeur retenue a été menée pour $\epsilon = 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001$. Excepté pour une valeur du même ordre de grandeur que les variogrammes ajustés ($\epsilon = 0.001$), où les poids de krigeage diffèrent sensiblement, la valeur retenue pour ϵ ne semble pas influencer grandement l'estimation.

donc limitée.

Pour un réseau plus important cependant, un voisinage glissant correspondant à la distance moyenne de validité de l'hypothèse de conservation de la masse pourrait par exemple être retenu.

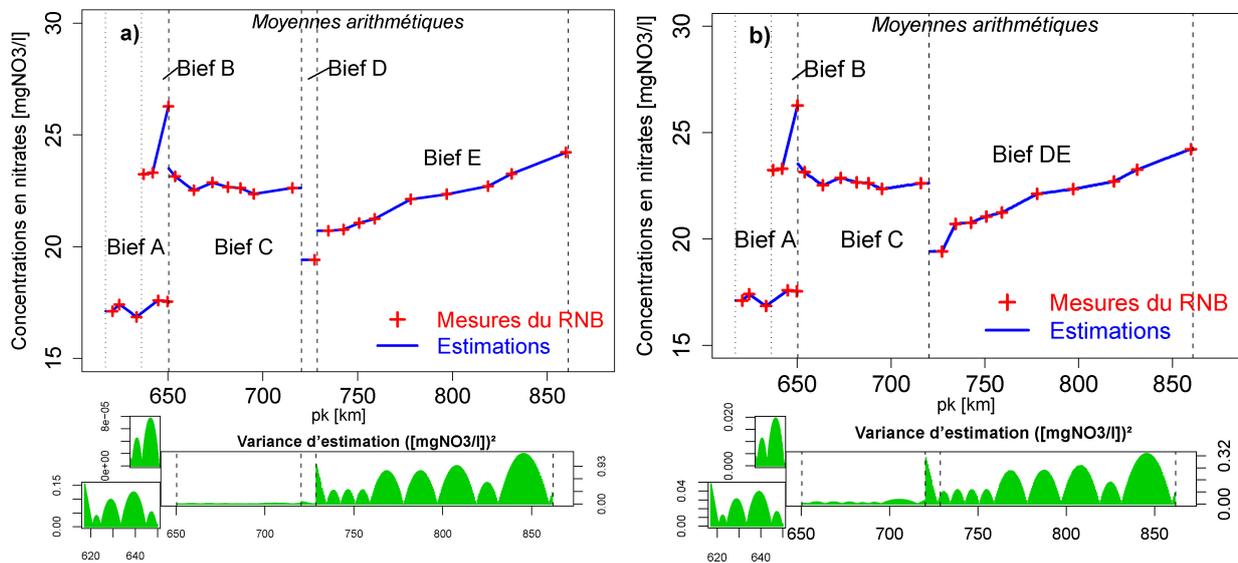


FIGURE 8.10 – Krigeage des concentrations en nitrates mesurées par le RNB le long du réseau et variance d'estimation associée. a) A partir du modèle inféré sur la maquette PROSE. b) A partir du modèle inféré d'amont en aval sur les mesures du RNB.

La figure 8.10 présente les estimations et variances associées obtenues à partir du modèle inféré d'amont en aval sur la maquette PROSE d'une part, et sur les mesures du RNB de l'autre. Hormis la zone à proximité de la confluence Seine/Oise, négligée dans le second cas, les estimations sont identiques, validant l'inférence réalisée sur les mesures du RNB. La seule différence concerne l'amplitude de la variance d'estimation, qui dépend directement du modèle de variogramme retenu.

Comparé à un krigeage 1D par bief (cf. ch6 et Fig. 6.4b), les principales différences de l'estimation en réseau se situent à proximité des confluences, comme on peut le voir pour la confluence Seine/Marne. En effet, l'estimation immédiatement à l'aval de cette confluence fait intervenir la mesure la plus proche sur le bief C mais également les mesures des deux affluents, selon la pondération (les w_K) retenue.

Il est alors légitime de se demander à partir de quand la mise en oeuvre du krigeage en réseau en vaut la peine, par rapport à un « simple » krigeage par bief. Outre la situation évidente des biefs informés par une unique station de mesure, une réponse intuitive serait : « lorsque la variabilité induite par les discontinuités est du même ordre de grandeur ou inférieure à la variabilité spatiale le long d'un bief ». Un simple test, consistant à comparer l'écart quadratique entre deux points situés immédiatement de part et d'autre d'une discontinuité à l'amplitude des variogrammes des biefs concernés, indique que pour le réseau considéré et les concentrations en nitrates, seuls les biefs D et E (ou la discontinuité correspondant à la confluence Seine/Oise) répondent à ce critère.

La comparaison du krigeage par bief au krigeage en réseau a également été effectuée sur la maquette PROSE échantillonnée selon les stations du RNB, afin de pouvoir comparer les erreurs d'estimation (par rapport à la « réalité PROSE »). Cette comparaison confirme que le modèle à filets est essentiellement avantageux en aval du domaine. Les estimations sont quasiment égales,

excepté à proximité immédiate de la confluence, où le krigeage en réseau est préférable (l'estimation est plus précise).

Un test plus rigoureux consiste à comparer le rapport des variances d'estimation par bief et en réseau $r = \sigma_{Ebief}^2 / \sigma_{Ereseau}^2$: le krigeage en réseau devient avantageux dès que $r > 1$. A proximité des confluences *informées*, le krigeage à l'aide du modèle à filets fournit indéniablement une estimation de meilleure qualité ($1 < r \leq 13.5$). Sur le reste du réseau, les différences sont moins marquées ($0.85 < r < 1.3$) et dépendent des données considérées : la maquette PROSE indique que le modèle à filets est principalement efficace en aval du domaine, le krigeage par bief fournissant des variances d'estimation plus faibles pour la Marne, alors que les mesures conduisent à un krigeage en réseau légèrement plus précis sur l'ensemble du réseau.

Par rapport à un krigeage par bief, l'intérêt du modèle à filets se situe donc principalement à proximité des confluences informées.

8.5 Variance d'estimation

L'estimation réalisée revient à estimer une moyenne annuelle $Z_{AN}(s)$ en tout point du réseau à partir de mesures *instantanées*, supposées représentatives de la moyenne journalière. Rigoureusement, il faudrait donc effectuer un krigeage ponctuel spatial de blocs temporels, à l'aide de l'estimateur spatio-temporel

$$Z_{AN}^*(s_0) = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i_{\alpha}=1}^{n_{\alpha}} \lambda_{\alpha}^{i_{\alpha}} Z(s_{\alpha}, t_{i_{\alpha}}).$$

Ce krigeage spatio-temporel a été décomposé en deux estimations séparées, l'une temporelle et l'autre spatiale. Or la variance d'estimation présentée à la figure 8.10 est bien associée à une estimation spatiale ponctuelle, mais ne tient pas compte des blocs temporels. La variance d'estimation réelle, qui serait fournie par le krigeage spatio-temporel, intègre également une composante associée à l'estimation temporelle, et est donc supérieure à celle présentée.

Cette section reprend quelques pistes et réflexions permettant de prendre en compte et d'évaluer la variance due à l'estimation temporelle.

8.5.1 Approximation du krigeage spatio-temporel

La décomposition de l'estimation spatio-temporelle en deux krigeages séparés peut être effectuée de deux manières, en analogie avec la décomposition de l'estimation bidimensionnelle d'un panneau par composition des « terme de ligne » et « terme de tranche » (Matheron, 1970). Le choix d'estimer d'abord l'un ou l'autre dépend de la densité d'échantillonnage : afin de limiter l'approximation, Matheron (1970) recommande d'estimer en premier lieu le terme le mieux connu, c'est-à-dire celui qui conduit à une variance d'estimation moindre.

En l'occurrence, on peut soit estimer en tout point la concentration instantanée pour chaque jour de mesure, et ensuite en estimer la moyenne annuelle, soit estimer d'abord la moyenne annuelle en chaque station, et ensuite estimer ces moyennes annuelles en tout point. Etant donné que, contrairement aux jours de mesure, les stations de mesures sont fixes, c'est la seconde solution qui a été retenue, consistant en un krigeage d'abord temporel puis spatial. Cette solution permet d'éviter le krigeage spatial instantané à partir de données très peu nombreuses - les stations n'étant pas toutes synchrones -, pour lequel ne fût-ce que l'inférence se serait révélée très délicate. Outre la commodité pratique, deux autres arguments motivent ce choix :

- les mesures régulières en chaque station assurent une faible erreur d'estimation de la moyenne (Bernard-Michel, 2006) ;
- l'estimation sur un support ponctuel, qui, à échantillonnage égal, conduit à une variance d'estimation plus élevée qu'une estimation par blocs, est réalisée en second lieu.

L'estimation temporelle a été approchée par la moyenne arithmétique. En effet, Bernard-Michel (2006) a montré que le krigeage de la moyenne annuelle des concentrations en nitrates était équivalent à l'estimation par segments d'influence. Or les mesures régulières conduisent à des segments d'influence de longueur identique, légitimant l'approximation du krigeage temporel par les moyennes arithmétiques.

L'estimation spatiale s'écrit donc $Z_{AN}^*(s_0) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z_{AN}^*(s_{\alpha}) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \sum_{i=1}^{n_{\alpha}} \lambda_i Z_{\alpha}(t_i)$, où $\lambda_i = 1/n$.

8.5.2 Décomposition de la variance d'estimation

L'erreur d'estimation en un point s_0 peut être décomposée en une erreur spatiale et une erreur temporelle :

$$\epsilon = Z_{AN}(s_0) - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z_{AN}^*(s_{\alpha}) = \underbrace{Z_{AN}(s_0) - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z_{AN}(s_{\alpha})}_{\epsilon_{s_0}} + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \underbrace{(Z_{AN}(s_{\alpha}) - Z_{AN}^*(s_{\alpha}))}_{\epsilon_{t_{\alpha}}}.$$

En admettant que les erreurs spatiales ϵ_{s_0} et temporelles $\epsilon_{t_{\alpha}}$ ne soient pas corrélées, la variance d'estimation σ_E^2 peut également être décomposée en deux termes, l'un spatial et l'autre temporel (Eq. 8.3).

$$\sigma_E^2 = VAR[\epsilon] = VAR[\epsilon_{s_0}] + VAR\left[\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \epsilon_{t_{\alpha}}\right] \quad (8.3)$$

L'hypothèse de non-corrélation des deux termes de l'erreur d'estimation a été vérifiée sur le bief C, à l'aide de la maquette PROSE. La démarche, schématisée à la figure 8.11a, est la suivante.

Un krigeage spatial est d'abord réalisé à partir des vraies moyennes annuelles - calculées sur 365 valeurs - échantillonnées tous les kilomètres, fournissant l'erreur d'estimation purement spatiale ϵ_{s_0} .

Ensuite, aux points retenus comme données pour le krigeage spatial, un échantillonnage régulier de 12 valeurs par an, le même en tout point s_{α} , est considéré pour le calcul de la moyenne annuelle, conduisant aux erreurs temporelles $\epsilon_{t_{\alpha}}$.

Pour chaque point d'estimation s_0 , on dispose donc de l'erreur spatiale ϵ_{s_0} ainsi que du terme temporel de l'erreur, c'est-à-dire de la combinaison linéaire des erreurs temporelles selon les poids de krigeage spatial : $\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \epsilon_{t_{\alpha}}$. Pour un variogramme spatial linéaire, seuls les voisins directs du point s_0 interviennent dans l'estimation ; en l'occurrence, $Z_{AN}^*(s_0) = (Z_{AN}(s_{\alpha}) + Z_{AN}(s_{\beta}))/2$. Afin d'éviter d'induire une corrélation apparente, les estimations ont été réalisées de manière à ce que chaque donnée $Z_{AN}(s_{\alpha})$ n'intervienne qu'une seule fois (cf. Fig. 8.11a).

Le nuage de corrélation entre les deux termes de l'erreur d'estimation (cf. Eq. 8.3) montre qu'ils ne sont pas corrélés, le coefficient de corrélation étant de -0.04 (Fig. 8.11b).

L'hypothèse de non-corrélation des erreurs spatiales et temporelles étant tout à fait réaliste, la variance d'estimation complète s'écrit

$$\sigma_E^2 = \sigma_{\epsilon_{s_0}}^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} Cov(\epsilon_{t_{\alpha}}, \epsilon_{t_{\beta}}) = \sigma_{\epsilon_{s_0}}^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} \rho(|s_{\alpha} - s_{\beta}|) \sigma_{\epsilon_{t_{\alpha}}} \sigma_{\epsilon_{t_{\beta}}}.$$

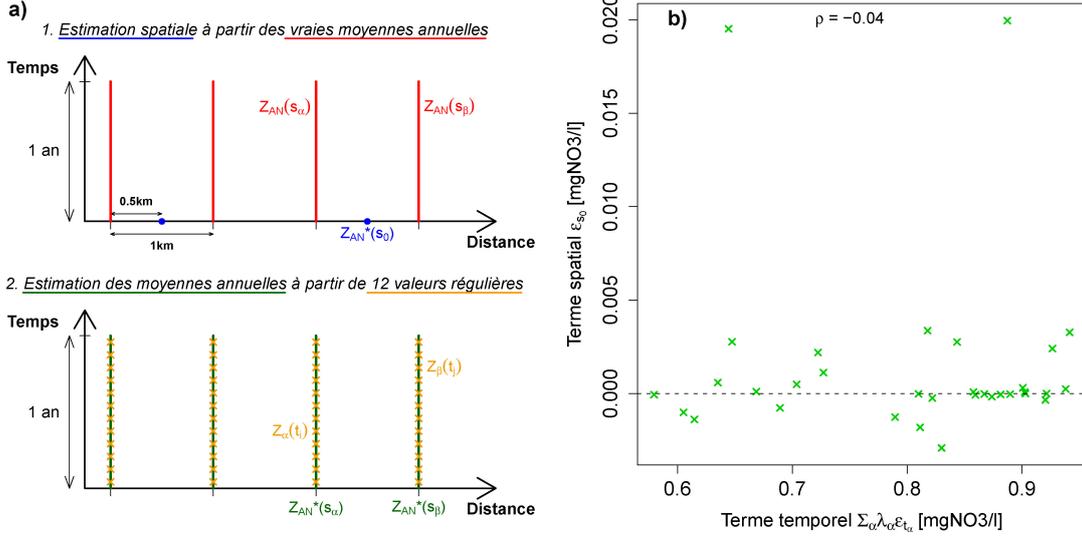


FIGURE 8.11 – a) Principe de test de la corrélation des erreurs spatiales et temporelles sur la maquette PROSE (bief C), en deux temps. b) Nuage de corrélation entre le terme spatial et le terme temporel de l'erreur d'estimation.

En supposant que toutes les variances d'estimation des moyennes sont égales ($\sigma_{\epsilon_{t\alpha}} = \sigma_{\epsilon_{t\beta}} = \sigma_{\epsilon_t}$), se pose alors la question de la corrélation des erreurs temporelles.

- Si les erreurs temporelles ne sont pas corrélées, alors $\rho(|s_{\alpha} - s_{\beta}|) = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta$ et

$$\sigma_E^2 = \sigma_{\epsilon_{s_0}}^2 + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 \sigma_{\epsilon_t}^2.$$

- Au contraire, si les erreurs temporelles sont parfaitement corrélées, alors $\rho(|s_{\alpha} - s_{\beta}|) = 1$ et

$$\sigma_E^2 = \sigma_{\epsilon_{s_0}}^2 + \left(\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}\right)^2 \sigma_{\epsilon_t}^2 = \sigma_{\epsilon_{s_0}}^2 + \sigma_{\epsilon_t}^2.$$

La variance d'estimation complète est égale à la somme des variances d'estimation spatiale et temporelle.

Le variogramme spatial des erreurs temporelles calculées précédemment montre une variabilité faible et structurée, indiquant une forte corrélation. L'hypothèse consistant à considérer des erreurs parfaitement corrélées a donc été retenue, ce qui revient à majorer la composante temporelle de la variance d'estimation. Cette simplification a été envisagée à l'instar de ce qu'avaient fait de Fouquet et al. (2007) pour l'estimation spatiale de la concentration annuelle en dioxyde d'azote à partir de mesures instantanées; elle est tout à fait raisonnable étant donné que les erreurs temporelles comme leur variance (ou écart-type) d'estimation sont très faibles en regard des concentrations estimées.

8.5.3 Calcul de la variance d'estimation complète

Le terme spatial $\sigma_{\epsilon_{s_0}}^2$ de la variance d'estimation complète est obtenu par le krigeage faisant l'objet de la section précédente (§8.4). Il reste ensuite à déterminer la valeur de la variance d'estimation temporelle $\sigma_{\epsilon_t}^2$, qui peut être déduite de la littérature, d'études préalables, ou de la moyenne des variances associées aux krigeages temporels. Une majoration raisonnable de ces valeurs peut également être envisagée, pour l'ensemble des stations ou encore par bief.

Un krigeage de la moyenne annuelle a été réalisé en chaque station, afin de vérifier que les variances d'estimation associées sont du même ordre de grandeur, et, dans l'affirmative, choisir la valeur à retenir. Pour les stations bénéficiant d'un échantillonnage plus fréquent qu'une mesure par mois, seules 12 valeurs correspondant à l'échantillonnage mensuel ont été retenues, afin d'obtenir une variance d'estimation moyenne représentative de l'échantillonnage habituel du RNB. Les mesures effectuées aux stations 3 et 22 s'étant avérées insuffisantes pour caractériser la structure temporelle des nitrates, ces deux stations ont été laissées de côté. La figure 8.12 compare les estimations obtenues pour les autres stations aux moyennes arithmétiques, et présente les variances d'estimation obtenues.

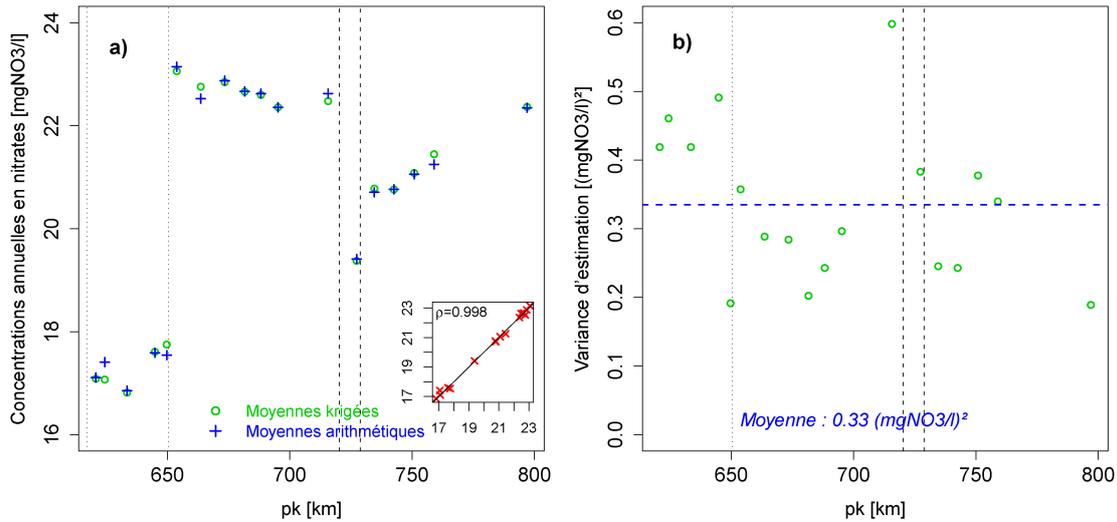


FIGURE 8.12 – a) Krigeage de la moyenne annuelle et moyenne arithmétique des concentrations en nitrates mesurées par le RNB en chaque station le long du réseau. b) Variances d'estimation associées.

On y vérifie d'une part que les moyennes arithmétiques sont une bonne approximation du krigeage de la moyenne, avec un écart inférieur à 2% (l'écart moyen est de 0.4%), et que les variances d'estimation associées aux krigeages temporels sont du même ordre de grandeur pour les différentes stations. Dès lors, la moyenne de ces variances d'estimation, soit $\sigma_{\epsilon_t}^2 = 0.33 \text{ mgNO}_3/\text{l}$, a été retenue, étant donné que l'hypothèse de parfaite corrélation des erreurs temporelles induit déjà une majoration de la variance temporelle.

Une vérification de l'ordre de grandeur de la variance d'estimation complète à l'aide d'une estimation spatio-temporelle reste toutefois une tâche à accomplir.

La figure 8.13 reprend le krigeage spatial des mesures du RNB, auquel sont associées les variances d'estimation intégrant les composantes spatiale et temporelle. Ainsi, en une station de mesure, la variance de krigeage n'est pas nulle : elle comprend uniquement la variance de l'erreur d'estimation temporelle. Même si la variance d'estimation complète se voit considérablement augmentée - la variance des erreurs temporelles apparaissant plus importante que la variance de krigeage spatial en raison de la très faible variabilité spatiale des nitrates -, elle reste cependant largement inférieure aux concentrations estimées : $\sigma_E/Z^* < 5\%$.

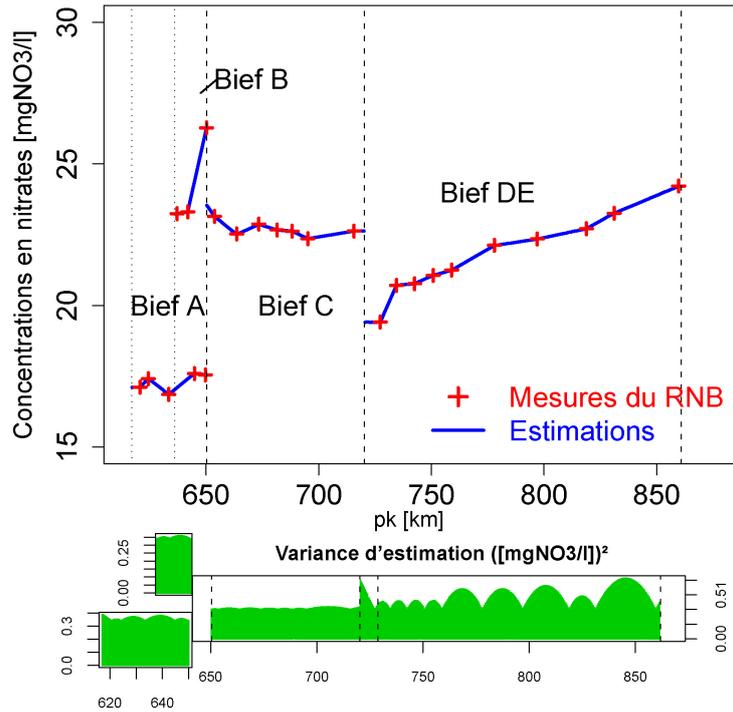


FIGURE 8.13 – *Krigeage des concentrations en nitrates mesurées par le RNB le long du réseau à partir du modèle inféré d'amont en aval sur les mesures du RNB, et variance d'estimation intégrant la composante temporelle.*

8.6 Synthèse

Ce chapitre a mis en évidence les limites de l'exploitation des mesures du RNB, trop clairsemées spatialement pour permettre de tester les différentes hypothèses ou pour calculer des variogrammes expérimentaux permettant de décider d'une structure élémentaire. C'est là que le recours à un modèle déterministe comme maquette trouve tout son intérêt : en l'occurrence, le modèle PROSE a permis de tester et de valider les hypothèses d'indépendance des concentrations à l'amont d'une confluence et de conservation de la masse des nitrates jusqu'à une distance donnée, mais également de choisir la structure variographique élémentaire la mieux adaptée pour le réseau considéré. Aidées par ces informations, les mesures du RNB se sont alors révélées suffisantes pour inférer le modèle à filets.

L'estimation spatiale de la concentration annuelle en nitrates résultant de cette inférence est très proche de celle obtenue à partir du modèle inféré sur les valeurs PROSE. Comparé à une estimation par bief, l'estimation en réseau présente l'avantage d'être réalisée en une étape sur l'entièreté du domaine, mais le principal intérêt du modèle à filets se trouve aux abords des discontinuités.

La variance d'estimation associée est très faible en regard des concentrations estimées. Elle se décompose en deux termes, l'un relatif à l'erreur spatiale ponctuelle et l'autre à l'erreur commise en estimant la moyenne annuelle à partir d'une douzaine de mesures instantanées. Ces deux termes sont du même ordre de grandeur, bien que la variance de l'erreur temporelle soit généralement plus importante que celle de l'erreur spatiale - la variabilité temporelle des nitrates étant largement supérieure à leur variabilité spatiale.

Enfin, il est à noter que le domaine considéré, avec ses « affluents ponctuels », n'a pas facilité la tâche : l'absence de biefs amont informés s'est avérée très préjudiciable pour l'inférence du modèle d'une part, mais également pour l'estimation.

Chapitre 9

Estimation conjointe des nitrates sur réseau

Le chapitre précédent a validé l'application du modèle à filets aux concentrations en nitrates le long d'un réseau hydrographique disposant d'une information clairsemée : les estimations obtenues passent par les mesures, mais la variabilité spatiale des concentrations est fortement lissée. Or le modèle PROSE fournit des valeurs présentant une densité spatiale beaucoup plus importante que les stations de mesure du RNB. L'objectif de ce chapitre est donc de combiner la description spatiale fine des valeurs PROSE aux mesures du RNB, afin d'obtenir un interpolateur spatial plus réaliste. En d'autres termes, on cherche à « recaler » la **simulation déterministe PROSE aux mesures du RNB**.

Différentes méthodes géostatistiques peuvent être utilisées pour réaliser une estimation de la concentration $Z(s)$ en s'aidant d'une variable auxiliaire mieux informée (cf. annexe A, §A.4) - en l'occurrence les valeurs PROSE $g(s)$. Les méthodes examinées sont les suivantes :

- *Le krigeage des résidus (KR) de la régression linéaire $Z(s)|g(s)$* . La fonction aléatoire $Z(s)$ se décompose en une partie déterministe $m(s)$ appelée dérive, par exemple fonction de la variable auxiliaire, et un résidu aléatoire $R(s)$ d'espérance nulle : $Z(s) = m(s) + R(s)$. Lorsque, comme ici, la dérive est connue en tout point, le krigeage de $Z(s)$ se résume au krigeage du résidu $R(s)$ (Eq. 9.2).

$$Z^*(s_0) = m(s_0) + R^*(s_0) \quad (9.1)$$

$$= m(s_0) + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} R(s_{\alpha}) \quad (9.2)$$

- *Le krigeage avec dérive externe (KDE)*. Il généralise le krigeage des résidus à une dérive déterministe décrite par une fonction externe $g(s)$, la simulation PROSE en l'occurrence, à un facteur et à une constante près. La concentration s'exprime alors $Z(s) = a_0 + a_1 g(s) + X(s)$, où les coefficients a_0 et a_1 de la régression linéaire $Z(s)|g(s)$ dépendent du voisinage v_0 considéré. Le variogramme de la variable $Z(s)$, $\gamma_Z(h)$, est égal au variogramme des résidus $\gamma_X(h)$. Le krigeage avec dérive externe revient à estimer la partie aléatoire de $Z(s)$, $X(s)$, tout en assurant le non-biais de l'estimateur visé $Z^*(s_0)$.
- *Le co-krigeage* des mesures du RNB par les valeurs PROSE, qui a permis de recaler temporellement la simulation PROSE aux mesures en une station (cf. chapitre 5), n'a pas été envisagé pour le recalage spatial. En effet, la corrélation entre les structures variographiques spatiales des mesures du RNB et des valeurs PROSE est beaucoup moins évidente qu'entre leurs structures temporelles.

Les deux premières méthodes ont été testées pour les concentrations annuelles en nitrates (moyennes arithmétiques, cf. chapitre 3). Les données intervenant dans ce chapitre sont exclusivement les mesures du RNB ainsi que les valeurs PROSE (cf. chapitre 2).

A l'instar du krigeage, l'estimation conjointe des concentrations par l'une ou l'autre méthode (KR ou KDE) requiert un modèle variographique valide sur le réseau. Chaque méthode est d'abord appliquée avec un modèle de variogramme unique sur l'entièreté du réseau, ce qui est possible car les variogrammes linéaire et exponentiel sont des modèles valides pour l'estimation mono-dimensionnelle sur un graphe non-orienté (de Fouquet & Bernard-Michel, 2006). Une estimation à l'aide du modèle à filets est ensuite réalisée, puis comparée à la première estimation (avec un modèle unique) afin de déterminer l'apport de ce modèle plus fin qui tient compte de la structure et de l'orientation du réseau.

Ce chapitre portant uniquement sur l'estimation spatiale, seul le terme spatial des variances d'estimation est présenté. Afin de tenir compte de l'échantillonnage temporel en chaque station, il faudrait ajouter à ces variances un terme temporel d'environ $0.33 \text{ (mgNO}_3\text{/l)}^2$ (cf. §8.5).

9.1 Krigeage des résidus

On considère que les mesures du RNB $Z(s)$ se composent d'un terme proportionnel aux valeurs PROSE $g(s)$, et d'un résidu $R(s)$. La dérive $m(s)$ s'écrit par exemple $m(s) = ag(s) + b$ avec a et b constantes, et les résidus considérés sont ceux de la régression linéaire $Z(s)|g(s)$. Un résidu expérimental $R(s_\alpha) = Z(s_\alpha) - ag(s_\alpha) - b$ peut être calculé en chaque point de mesure s_α . Les valeurs PROSE $g(s)$ - et donc la dérive $m(s)$ - étant connues partout, en tout point s_0 du réseau, estimer $Z(s_0)$ revient à estimer $R(s_0)$.

9.1.1 Modèle unique

Supposons d'abord que les résidus admettent le même variogramme sur l'entièreté du réseau. Les confluences et discontinuités majeures ne sont pas prises en compte, et la distance considérée est la distance curviligne x le long du graphe (cf. Fig. 7.2).

Les résidus sont calculés à partir d'une régression linéaire globale, tous biefs confondus ($a = -4.86$ et $b = 1.14$, Fig. 9.1a). Leur variogramme expérimental $\gamma_R(h)$ a été ajusté automatiquement à l'aide d'un modèle à deux composantes, un important effet de pépité - induit par les discontinuités - ainsi qu'une composante linéaire : $\gamma_R(h) = 0.21 + 0.010|h|$.

Le krigeage des résidus est effectué aux points des valeurs PROSE, avec un voisinage unique étant donné le faible nombre de points expérimentaux. La figure 9.1b présente les concentrations estimées. Leur évolution spatiale est analogue à celle des valeurs PROSE, qui semblent translatées pour se rapprocher des mesures. Aux points de mesure, l'estimation est discontinue, avec des pics plus ou moins marqués selon les biefs. Ces pics ne semblent pas réalistes étant donné qu'aucun processus physique (dénitrification ou apport massif de nitrates) ne permet de justifier un tel profil.

La dérive étant entièrement déterministe, la variance d'estimation est égale à la variance d'estimation spatiale des résidus, dont la majeure partie résulte de l'effet de pépité décelé sur les résidus. En moyenne, l'écart-type d'estimation est égal à 3%. Cette variance d'estimation ne tient pas compte de l'incertitude sur la moyenne, due au fait que la régression linéaire n'est pas optimale.

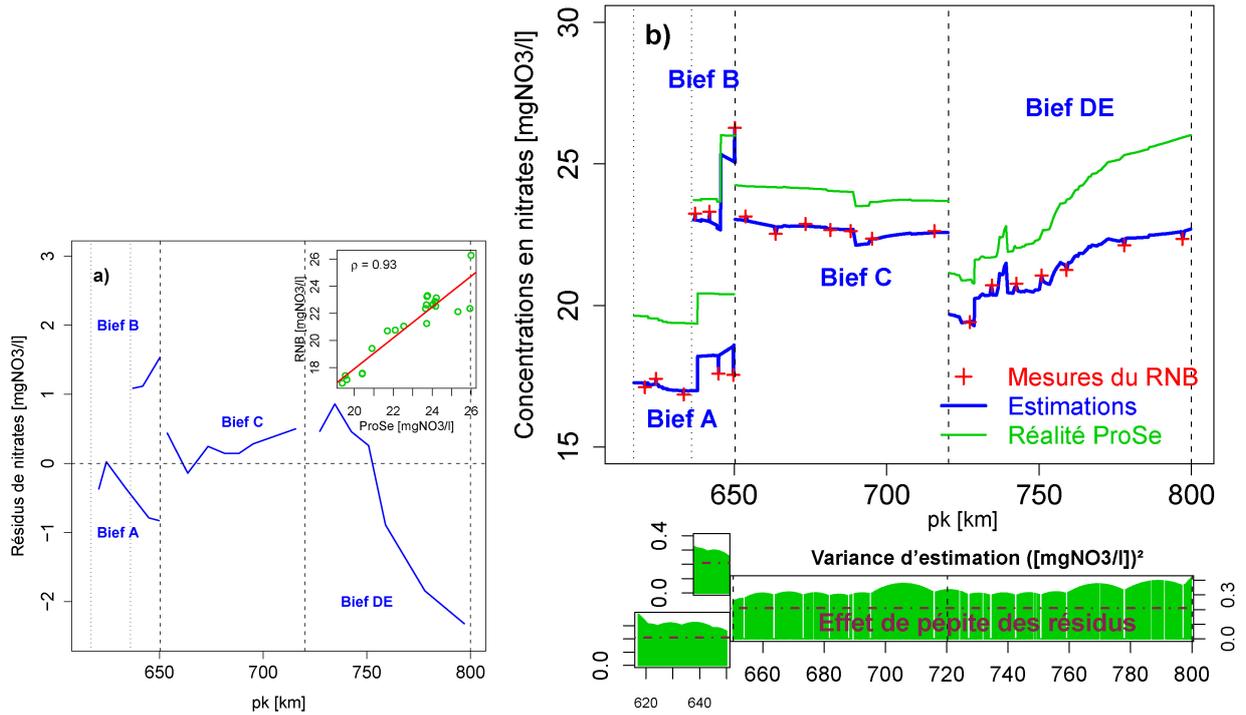


FIGURE 9.1 – a) Résidus de la régression linéaire globale des mesures du RNB $Z(s)$ sur les valeurs PROSE $g(s)$. b) Estimation conjointe des concentrations en nitrates par krigeage des résidus de la régression $Z(x)|g(x)$, et variance d'estimation associée. Modèle de variogramme unique sur l'ensemble du réseau.

9.1.2 Modèle à filets

Afin de tenir compte du sens d'écoulement et des discontinuités majeures, le krigeage des résidus est ensuite réalisé à l'aide du modèle à filets (cf. chapitres 7 et 8), pour des variables à moyennes liées. Les résidus expérimentaux sur les différents biefs sont décomposés en composantes élémentaires associées aux filets (Fig. 8.7), supposées mutuellement indépendantes : $R_I(s) = \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s)$ avec $Y_i \perp Y_j \quad \forall i \neq j$. La pondération des concentrations par les débits relatifs aux confluences étant déjà prise en compte dans la dérive - les valeurs PROSE -, les coefficients w_K ont été déterminés en imposant que leur somme soit égale à l'unité en chaque confluence.

Le modèle à filets utilisé pour le krigeage des résidus est donc caractérisé par :

- des composantes élémentaires Y_i mutuellement indépendantes ;
- des résidus $R_I(s)$ à moyennes liées ;
- des coefficients w_K contraints.

Les résidus $R_I(s_\alpha)$ sont calculés à partir d'une régression linéaire propre à chaque bief I , dont les coefficients sont repris au tableau 9.1. La méthode d'inférence d'amont en aval (cf. §7.3.1) a ensuite permis de déterminer des poids w_K relatifs aux confluences (Tab. 9.2) et d'ajuster un modèle variographique pour chaque composante Y_i . D'après les résultats du chapitre 8, et en examinant les variogrammes expérimentaux des résidus, une structure élémentaire à composante linéaire unique a été retenue.

Le modèle à filets étant inféré, le krigeage des résidus est effectué en voisinage unique. Les estimations des concentrations sont ensuite reconstituées à l'aide des valeurs PROSE $g(s_0)$ et des coefficients des régressions linéaires : $Z^*(s_0) = a_{I_0} g(s_0) + b_{I_0} + R^*(s_0)$ (Fig. 9.2). Les estimations présentent une allure très similaire à celle des valeurs PROSE ; elles passent par les mesures du

	Bief A	Bief B	Bief C	Bief DE
a	0.52	1.33	0.73	0.49
b	6.91	-8.31	5.09	9.70

TABLE 9.1 – Coefficients de la régression linéaire $Z_I(s)|g_I(s) = ag_I(s) + b$ des mesures du RNB $Z(s)$ sur les valeurs PROSE $g(s)$ pour chaque bief I .

Aff. K	A	B	C	S_{Aval}
w_K	0.84	0.16	0.86	0.14

TABLE 9.2 – Poids w_K associé à chaque affluent (Aff.) K , contraints de sorte que leur somme soit égale à l'unité en toute confluence. « L'affluent ponctuel », la STEP Seine Aval (S_{Aval}), est également repris.

RNB, à proximité desquelles l'estimation semble continue.

La variance de krigeage des résidus est très faible en comparaison des concentrations estimées, avec un écart-type d'estimation moyen de 0.4% ($\sigma_E/Z^* \leq 1.1\%$); elle est largement inférieure à celle obtenue avec un modèle unique sur le réseau.

9.1.3 Comparaison

Le krigeage des résidus permet de « recalcr » les concentrations en nitrates issues du modèle déterministe PROSE aux mesures du RNB.

Le krigeage des résidus avec un modèle simplifié, le variogramme linéaire unique, fournit des estimations irréalistes aux abords des discontinuités. En effet, elles sont négligées par ce modèle, alors que les variations de concentration qu'elles induisent sont largement supérieures à la variabilité spatiale observée entre deux discontinuités. Cette hypothèse inadaptée est à l'origine du comportement de l'estimateur à proximité des confluences, mais également de l'important effet de pépité qui apparaît sur le variogramme unique et se retrouve dans la variance d'estimation.

En revanche, le modèle à filets, qui tient compte de la structure du réseau hydrographique et des discontinuités aux confluences, permet de pallier ces inconvénients, et fournit une estimation conjointe tout à fait satisfaisante. La variance d'estimation associée très faible par rapport aux valeurs estimées.

Comparé à un krigeage des résidus par bief, les estimations sont quasiment égales excepté à proximité immédiate de la confluence informée (Seine/Marne). Les variances d'estimation sont du même ordre de grandeur : leur rapport $r = \sigma_{Ebief}^2 / \sigma_{Ereseau}^2$ est très proche de l'unité et égal à 1.04 en moyenne ; les différences majeures se retrouvent immédiatement en aval de la confluence Seine/Marne.

Les droites de régression sont clairement distinctes de la première bissectrice ($a = 1$ et $b = 0$), avec $a < 1$ sur le bief A et $a > 1$ sur le bief B , montrant que les mesures du RNB ne se décomposent visiblement pas en deux termes dont l'un serait égal aux valeurs PROSE. Un modèle de type $Z(s) = g(s) + R(s)$ ne paraît donc pas adapté.

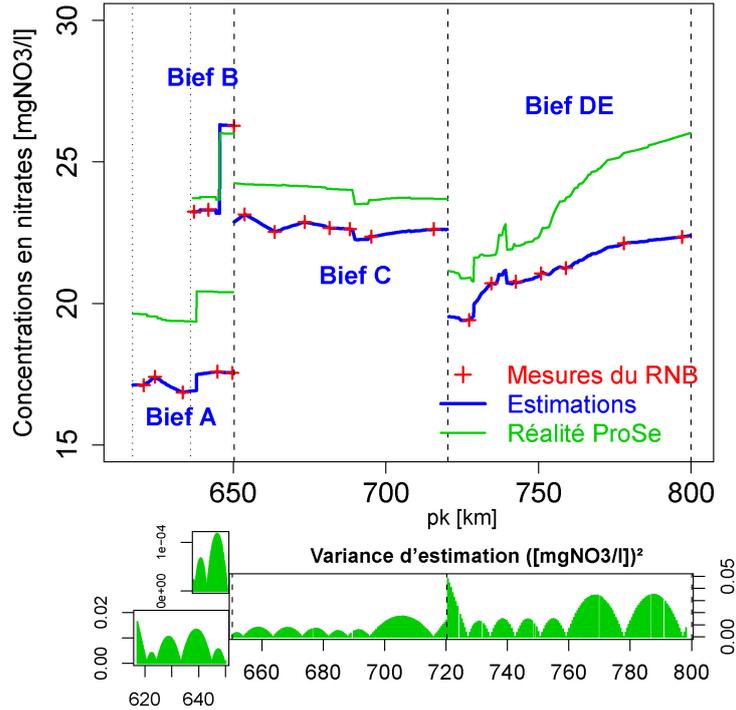


FIGURE 9.2 – Estimation conjointe des concentrations en nitrates par krigeage des résidus des régressions $Z(s)|g(s)$ des mesures du RNB sur les valeurs PROSE par bief, et variance d'estimation associée. Modèle à filets intégrant la structure d'arbre orienté, avec composantes Y_i indépendantes, moyennes liées et coefficients w_K contraints.

9.2 Krigeage avec PROSE en dérive externe

Le krigeage avec dérive externe est fondé sur des hypothèses moins strictes que le krigeage des résidus, les coefficients de la régression linéaire étant déterminés par voisinage, et non plus pour l'entièreté du réseau. La définition du voisinage est donc importante : il doit être suffisamment étendu pour contenir assez de données, mais suffisamment restreint pour que la régression linéaire soit pertinente. Pour le réseau considéré, un voisinage glissant de ± 50 km a été retenu a priori. L'estimateur s'écrit $Z^*(s_0) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z(s_{\alpha})$; les conditions de non-biais, qui assurent $E[Z^*(s_0) - Z(s_0)] = 0$ pour tout a_0 et a_1 inconnus, portent ici sur les concentrations (Eq. 9.3).

$$\begin{cases} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} = 1 \\ \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} g(s_{\alpha}) = g(s_0) \end{cases} \quad (9.3)$$

En pratique, pour un voisinage v_0 donné, une régression linéaire $Z(s)|g(s)$ pour tous les points $s_{\alpha} \in v_0$ fournit les coefficients $a_0(v_0)$ et $a_1(v_0)$ ainsi que les résidus expérimentaux $X(s_{\alpha})$. Le variogramme de ces résidus, $\gamma_X(h)$, est ensuite calculé à partir des résidus de la régression linéaire - il est donc approché -, puis ajusté automatiquement par un modèle valide, qui intervient dans le système de krigeage. Les pondérateurs λ_{α} obtenus en résolvant le système permettent de calculer l'estimateur $Z^*(s_0)$.

Les résidus considérés pour chaque estimation - pour chaque point s_0 - sont donc différents; l'ajustement du variogramme des résidus est optimal pour le voisinage correspondant v_0 . En outre, l'incertitude sur la moyenne, qui résulte de la non-optimalité de la régression linéaire, est prise en compte.

9.2.1 Modèle unique

Tout d'abord, un variogramme linéaire unique est retenu sans tenir compte ni des discontinuités majeures ou confluences. Les données retenues pour chaque estimation étant limitées au voisinage, cette hypothèse est beaucoup moins forte que pour le krigeage des résidus, avec un modèle de variogramme unique pour l'ensemble du réseau.

La figure 9.3a présente les estimations obtenues. La simulation déterministe PROSE est bien recalée aux mesures du RNB, et les estimations présentent un comportement réaliste aux abords des confluences. De plus, la variance d'estimation est très faible en comparaison des valeurs estimées ($\sigma_E/Z^* = 1\%$ en moyenne).

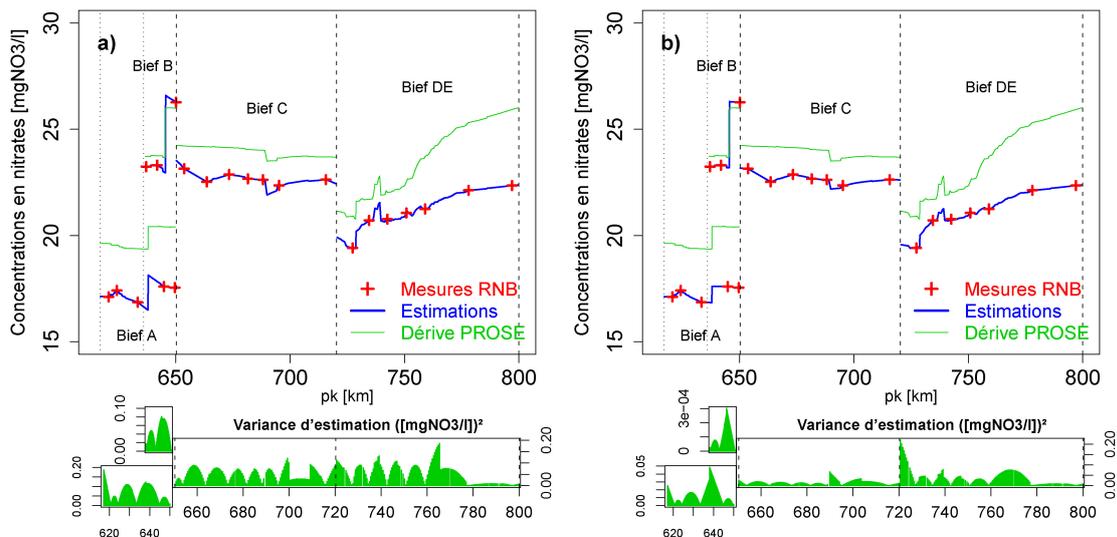


FIGURE 9.3 – Estimation conjointe des concentrations en nitrates via le krigeage des mesures du RNB avec les valeurs PROSE en dérive externe, et variance d'estimation associée. a) Modèle variographique unique sur l'ensemble du réseau, ajusté selon le voisinage. b) Estimation par bief.

Toutefois, un krigeage par bief des mesures avec les valeurs PROSE en dérive externe s'avère tout aussi satisfaisant, voire plus précis (Fig. 9.3b). Excepté à proximité des extrémités ou des discontinuités inhérentes aux différents biefs, les estimations sont très proches que l'on considère un krigeage par bief ou sur le domaine complet. Cependant le krigeage par bief fournit une variance d'estimation plus faible, avec un écart-type relatif moyen de 0.5% ; le rapport des variances d'estimation est largement inférieur à l'unité : en moyenne, $\sigma_{E_{bief}}^2 / \sigma_{E_{reseau}}^2 = 0.3$.

Cela s'explique par la variabilité spatiale des concentrations en nitrates au sein d'un bief, faible en regard des écarts induits par les discontinuités. Dans une telle configuration, une estimation par bief apparaît donc préférable à une estimation en réseau ne tenant pas compte des discontinuités.

9.2.2 Modèle à filets

L'intérêt du krigeage avec dérive externe réside dans la définition d'un voisinage suffisamment restreint pour que les hypothèses y soient vérifiées. L'application du modèle à filets amène une contradiction : son inférence nécessite que les différents biefs soient suffisamment informés. L'inférence du modèle à filets à partir de toutes les mesures du RNB disponibles sur le réseau s'étant déjà avérée délicate (cf. §8.3.2), il est difficile de l'envisager sur un voisinage restreint. En effet, il n'est pas rare que les biefs soient informés par uniquement une ou deux stations,

contraignant soit à restreindre le voisinage et effectuer une estimation par bief, soit à ajuster des variogrammes ne comprenant qu'un ou deux points, ce qui se révèle très hasardeux. Dans tous les cas, la configuration du réseau ne permet pas d'exploiter les avantages du modèle à filets, qui a donc été abandonné pour le krigeage avec dérive externe.

9.3 Synthèse : comparaison des estimations

Le modèle variographique linéaire unique sur l'ensemble du réseau est à proscrire en raison des discontinuités qui sont négligées. Outre un comportement indésirable à proximité des confluences, cette hypothèse inadaptée induit également un effet de pépité important sur le variogramme, que l'on retrouve dans la variance d'estimation. Pour le krigeage avec dérive externe, ces inconvénients liés au modèle unique sont fortement atténués grâce à un voisinage glissant restreint ; le krigeage par bief apparaît néanmoins préférable, au sens d'une meilleure précision.

Les différentes estimations montrent que le krigeage des résidus avec le modèle à filets, comme le krigeage par bief avec PROSE en dérive externe, permettent effectivement de recalculer la simulation déterministe aux mesures du RNB.

Les petites discontinuités sont moins marquées en considérant le krigeage des résidus, et la variance d'estimation est légèrement plus faible que pour le krigeage avec dérive externe, ce qui pourrait laisser penser que le krigeage des résidus est mieux adapté. Cependant ces résultats dépendent des hypothèses sous-jacentes à chacun des modèles, et la vraie question est donc : « lequel de ces modèles repose sur des hypothèses réalistes ? »

Le krigeage des résidus à l'aide du modèle à filets respecte la structure de graphe orienté du réseau hydrographique et ses discontinuités, mais les résultats dépendent de la qualité de la régression linéaire, non optimale.

Le krigeage par bief avec dérive externe nécessite autant d'estimations que le réseau comporte de biefs et est moins précis aux extrémités de ces biefs (la variance d'estimation est plus importante).

Le choix d'une méthode plutôt que l'autre dépend de l'objectif recherché. Le krigeage par bief avec dérive externe fournit aisément un recalage de la simulation déterministe aux mesures, à l'échelle d'un bief ou du réseau - le recalage est alors effectué en plusieurs étapes. En revanche, une caractérisation plus locale de la variabilité des concentrations en nitrates à proximité des confluences requerra plutôt la mise en oeuvre du modèle à filets et donc du krigeage des résidus. Enfin, le choix de la méthode repose également sur la configuration du réseau et des données, l'inférence du modèle à filets n'étant pas immédiate.

Chapitre 10

Estimation des concentrations en oxygène dissous sur réseau

L'oxygène dissous est un indicateur très réactif, tant temporellement que spatialement, qui présente un comportement beaucoup plus variable que les nitrates. Si, entre les singularités, les concentrations en nitrates affichent une régularité ainsi qu'une continuité spatiale remarquables, les concentrations en oxygène dissous laissent en revanche présager une situation plus complexe.

La première question concerne le support temporel. L'analyse exploratoire conjointe des mesures et des valeurs PROSE d'oxygène dissous ayant montré des comportements différents selon les trimestres ou les saisons (cf. §4.4), des moyennes saisonnières le long du réseau pourraient être considérées. Cependant, excepté la concentration hivernale qui apparaît moins variable, les moyennes saisonnières s'avèrent très semblables et présentent la même allure que la moyenne annuelle (Fig. 10.1a). En adoptant une démarche réglementaire, c'est donc la concentration moyenne annuelle en oxygène dissous - calculée comme une moyenne arithmétique - qui est retenue.

Ce choix est également motivé par la fréquence mensuelle de mesure du RNB, rendant impossible l'estimation des concentrations journalières. Celle-ci pourrait toutefois se révéler intéressante en été, lorsque de faibles concentrations présentant une forte variabilité temporelle à petite échelle de temps sont observées.

Les concentrations annuelles en oxygène dissous présentent une variabilité spatiale différente selon les biefs, au sein desquels d'importantes discontinuités sont observées : il s'agit de barrages, à l'origine d'une ré-oxygénation des cours d'eau. Sur le réseau considéré, quatre barrages sont recensés sur la Marne et neuf sur la Seine. Parmi ceux-ci, les trois barrages responsables des discontinuités majeures ont été retenus et délimitent de nouveaux biefs. Le barrage d'Andrésy étant situé à moins d'un kilomètre de la confluence Seine/Oise, ces singularités ont été fusionnées. Pour l'oxygène dissous, le réseau est désormais divisé en 7 biefs (Fig. 10.1b et Tab. 10.1).

Un premier paragraphe s'attache à rechercher un modèle géostatistique valide décrivant la variabilité des concentrations en oxygène dissous. Ensuite, l'estimation des concentrations moyennes à partir des mesures du RNB est abordée. L'estimation conjointe des mesures et des valeurs PROSE le long du réseau est enfin examinée.

Les variances associées aux estimations ne tiennent pas compte de l'incertitude liée à l'estimation de la moyenne annuelle à partir de mesures mensuelles. Il conviendrait donc d'estimer la variance d'estimation correspondante, comme pour les nitrates (cf. §8.5).

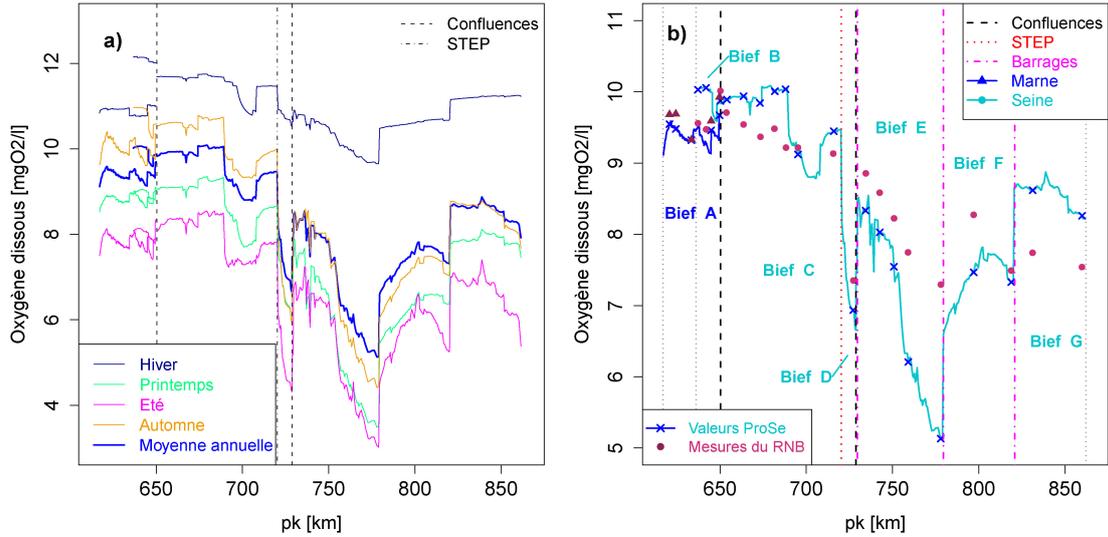


FIGURE 10.1 – a) Evolution des valeurs PROSE des concentrations moyennes saisonnières et annuelle en oxygène dissous le long du domaine. b) Evolution des concentrations moyennes annuelles en oxygène dissous mesurées par le RNB et simulées par PROSE le long du réseau ; les discontinuités retenues y sont également situées.

Bief	cours d'eau	pk_i [km]	Amont	pk_f [km]	Aval
A	Marne	617	limite	650.35	Conf. Seine/Marne
B	Seine	636	limite	650.35	Conf. Seine/Marne
C	Seine	650.35	Conf. Seine/Marne	720.29	STEP Seine Aval
D	Seine	720.29	STEP Seine Aval	728.75	Conf. Seine/Oise
E	Seine	729.68	Bar. d'Andrésy	779.48	Bar. de Méricourt
F	Seine	779.48	Bar. de Méricourt	820.58	Bar. de ND Garenne
G	Seine	820.58	Bar. de ND Garenne	862	limite

TABLE 10.1 – Limites amont (pk_i) et aval (pk_f) des différents biefs composant le réseau modélisé par PROSE pour l'oxygène dissous : confluences (Conf.), barrages (Bar.) ou stations d'épuration (STEP).

Dans ce chapitre interviennent donc les mesures du RNB ainsi que les valeurs PROSE d'oxygène dissous (cf. chapitre 2), utilisées d'abord comme maquette pour décider d'un modèle valide, et ensuite comme « variable auxiliaire » pour l'estimation conjointe des concentrations.

10.1 Krigeage des concentrations en oxygène dissous

L'évolution spatiale des concentrations en oxygène dissous (Fig. 10.1b) montre que :

- la masse d'oxygène dissous ne se conserve pas au fil de l'eau, cet indicateur étant très réactif ;
- la variabilité spatiale des concentrations annuelles varie selon les biefs ; elle apparaît plus marquée vers l'aval du domaine ;
- la variation des concentrations au sein d'un bief est du même ordre de grandeur voire supérieure à celle induite par les discontinuités ;

- les principales discontinuités de concentration ne sont pas liées aux discontinuités de débit : la confluence Seine/Marne n’introduit pas de discontinuité majeure, alors que certains barrages, qui n’induisent aucune variation de débit, sont à l’origine d’une soudaine augmentation des concentrations.

Cette dernière observation étant en contradiction avec le concept fondamental du modèle à filets, il n’a pas été retenu pour l’estimation spatiale des concentrations moyennes en oxygène dissous. Les modèles possibles ont d’abord été examinés « en réalité PROSE », puis ont été appliqués aux mesures du RNB. Les estimations effectuées à partir de la « maquette PROSE » ne sont pas détaillées, seules celles obtenues à partir des mesures sont présentées ici.

10.1.1 Sur la « maquette PROSE »

La figure 10.2a présente le variogramme expérimental calculé le long du graphe sur l’ensemble du réseau, sans tenir compte des discontinuités, à partir de l’ensemble des valeurs PROSE. Il apparaît légèrement non-stationnaire aux petites distances, mais pourrait toutefois être raisonnablement modélisé à l’aide d’une structure linéaire, valide le long du graphe.

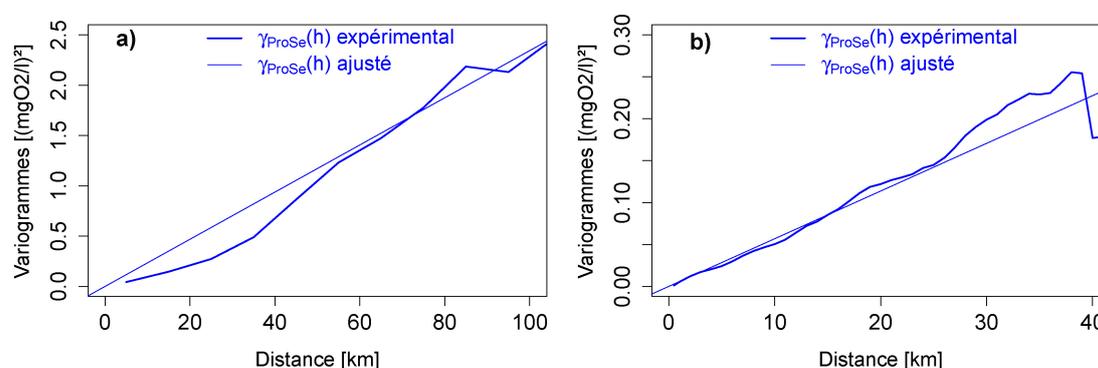


FIGURE 10.2 – Ajustement du variogramme expérimental des valeurs PROSE de concentrations en oxygène dissous à l’aide d’un modèle linéaire. a) Variogramme global sur l’ensemble du réseau. b) Variogramme tenant compte des failles.

La légère non-stationnarité du variogramme expérimental suggère toutefois que ce modèle global le long du graphe pourrait être amélioré. En effet, les couples de points situés de part et d’autre d’un barrage sont mélangés avec ceux situés sur un même bief. Or les concentrations en oxygène dissous présentent une variabilité spatiale approximativement identique de part et d’autre des barrages, mais elles sont discontinues à ces endroits précis. La localisation des barrages étant exactement connue, la démarche consiste alors à restreindre le modèle aux segments entre barrages. Un modèle global pour tous ces segments est considéré, en admettant que les barrages sont uniquement responsables d’un « décalage » de la concentration, et non d’un changement de variabilité.

L’estimation revient alors à effectuer un krigeage « en présence de failles » (Maréchal, 1983). Cette méthode consiste d’abord à calculer un variogramme pour l’ensemble du réseau en restreignant les couples de points à ceux situés entre deux failles. L’estimation est ensuite réalisée avec un voisinage limité par ces failles.

Sur le réseau modélisé par PROSE, quatre failles ont été retenues : la STEP Seine Aval et les barrages majeurs. La confluence Seine/Marne n’a pas été considérée comme telle, la discontinuité de concentration à cet endroit étant négligeable.

La figure 10.2b présente le variogramme expérimental obtenu pour l'ensemble des valeurs PROSE, en tenant compte des failles : la non-stationnarité a disparu, sa croissance étant presque parfaitement linéaire, suggérant la meilleure adéquation du krigeage en présence de failles pour l'estimation des concentrations en oxygène dissous.

En outre, par rapport au variogramme calculé sans tenir compte des discontinuités, la variabilité spatiale est atténuée.

Deux krigeages en réseau (en tenant compte des failles ou non) ainsi qu'un krigeage par bief des concentrations en oxygène dissous ont été effectués sur la maquette PROSE échantillonnée selon les stations du RNB. Les estimations ont ensuite été comparées à la « réalité PROSE ». Dans tous les cas, les écarts moyens sont très faibles (inférieurs à 2%) ; les différences selon le krigeage considéré sont minimales, même si le krigeage en réseau avec failles fournit la meilleure estimation (au sens d'une erreur moyenne minimale).

La variance d'estimation pour une estimation en réseau est nettement inférieure en tenant compte des failles. Globalement, le krigeage en présence de failles s'avère même plus précis que le krigeage par bief (sauf à l'amont et à proximité immédiate de certaines failles).

Pour l'estimation des concentrations en oxygène dissous, le krigeage en réseau (avec un modèle variographique global) en présence de failles, qui permet de tenir compte des discontinuités aux barrages, s'avère donc pertinent.

10.1.2 A partir des mesures du RNB

La figure 10.3 présente les variogrammes expérimentaux calculés le long du graphe sur l'ensemble du réseau à partir des mesures du RNB.

Le variogramme expérimental calculé sans tenir compte des discontinuités (Fig. 10.3a) affiche une structure linéaire aisément ajustée.

En revanche, le variogramme calculé en tenant compte des failles présente une variabilité moindre mais n'affiche pas de structure évidente ; il est calculé dans de moins bonnes conditions que le précédent car le nombre de couples de points chute rapidement. Cependant, jusqu'à une distance de 20 km, les mesures montrent une structure linéaire presque confondue avec celle des valeurs PROSE. Au vu de l'allure du variogramme des valeurs PROSE, le variogramme expérimental des mesures tenant compte des failles est également ajusté à l'aide d'une composante linéaire.

L'ajustement des variogrammes expérimentaux permet ensuite de réaliser le krigeage des concentrations en oxygène dissous en tout point du réseau, à partir des mesures aux stations du RNB. Le voisinage de krigeage est adapté au modèle retenu : voisinage unique ou voisinage limité par les failles. La figure 10.4 présente les estimations obtenues pour le krigeage en réseau sans tenir compte des discontinuités (Fig. 10.4a) et pour le krigeage en présence de failles (Fig. 10.4b).

Sans tenir compte des discontinuités, les estimations ne paraissent pas optimales à proximité des discontinuités en aval du domaine, mais les variances d'estimation obtenues sont plutôt faibles, avec un écart-type relatif moyen de 2% ($0.5\% \leq \sigma_E/Z^* \leq 5\%$).

Le krigeage en présence de failles fournit des estimations analogues aux précédentes, excepté à proximité immédiate des failles. En effet, avec un modèle de variogramme linéaire, l'extrapolation fournit une estimation constante, égale à la donnée la plus proche. Dans le modèle, les variances d'estimation apparaissent très faibles, avec un écart-type d'estimation moyen de 1.2% ($0.2\% \leq \sigma_E/Z^* \leq 3\%$).

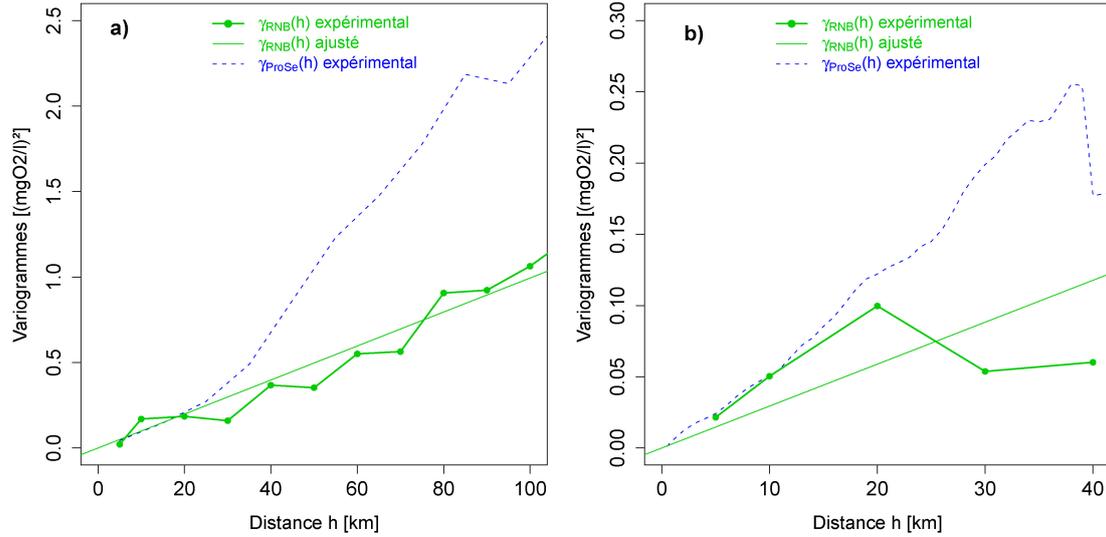


FIGURE 10.3 – Ajustement du variogramme expérimental des concentrations en oxygène dissous mesurées par le RNB à l'aide d'un modèle linéaire. Le variogramme expérimental des valeurs PROSE est repris à titre d'information. a) Variogramme global sur l'ensemble du réseau. b) Variogramme tenant compte des failles.

10.1.3 Comparaison des estimations

La définition d'un voisinage de krigeage tenant compte des failles (STEP et barrages) modifie sensiblement l'estimateur à proximité de ces failles. Leur prise en compte pour le calcul du variogramme conduit à un modèle de plus faible pente et, donc, à des variances d'estimation inférieures à celles obtenues sans tenir compte des discontinuités. Le rapport des variances d'estimation $r = \sigma_E / \sigma_{E_{\text{failles}}}$ est approximativement égal à 3, excepté à proximité immédiate des failles où il décroît assez rapidement.

En résumé, le krigeage en présence de failles, avec un modèle de variogramme global sur l'ensemble du réseau ainsi qu'un voisinage tenant compte de ces failles, fournit une estimation relativement précise des concentrations annuelles en oxygène dissous.

10.2 Estimation conjointe des concentrations en oxygène dissous

Intéressons-nous maintenant à l'estimation conjointe, c'est-à-dire au couplage des mesures du RNB et de la simulation PROSE (cf. annexe A, §A.4). Le tableau 10.2 présente les statistiques élémentaires pour les deux ensembles de données. Si, le long du réseau, la moyenne et le maximum des concentrations annuelles sont très proches, le minimum des valeurs PROSE est, en revanche, largement inférieur à celui des mesures du RNB. Cela explique l'écart-type plus élevé des valeurs PROSE, témoignant d'une variabilité supérieure à celle des mesures, déjà notée sur la figure 10.1b. Cependant, les deux ensembles de données sont bien corrélés, avec un coefficient de corrélation linéaire proche de l'unité ($\rho = 0.88$).

Pour le calcul des variogrammes simples et croisé entre mesures et valeurs PROSE (Fig. 10.5), deux méthodes sont possibles :

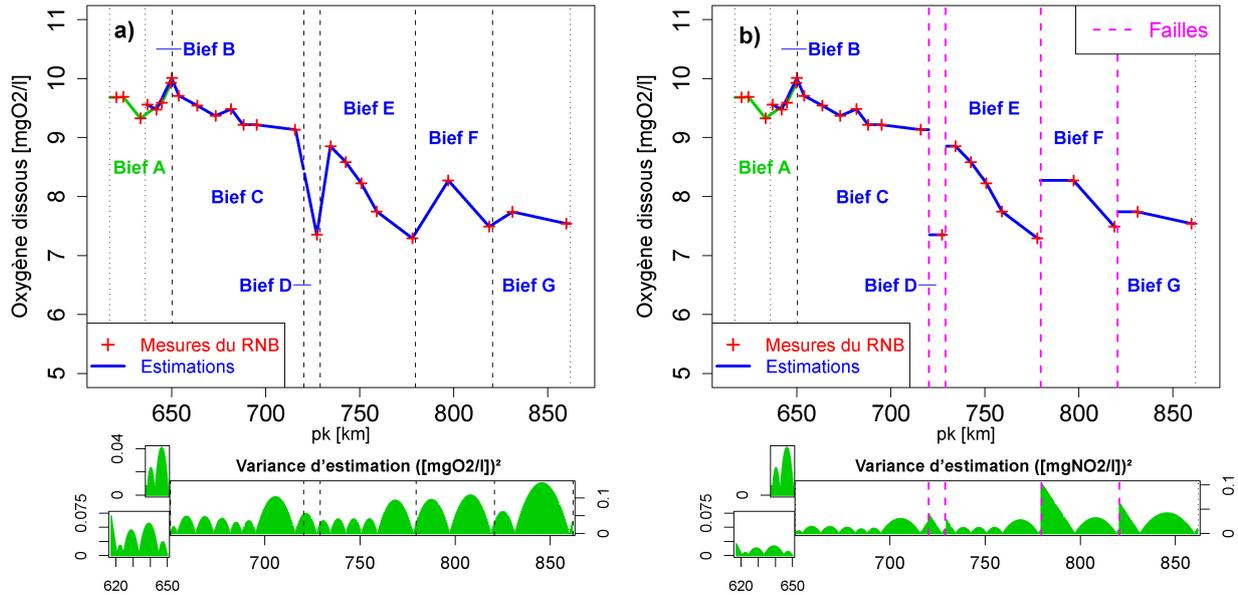


FIGURE 10.4 – Estimation des concentrations en oxygène dissous à partir des mesures du RNB, et variance d'estimation associée. a) Krigeage en réseau avec modèle global. b) Krigeage en présence de failles.

	min	max	m	σ
RNB	7.3	10	8.9	0.9
PROSE	5.1	10.1	8.8	1.4

TABLE 10.2 – Statistiques classiques des concentrations annuelles en oxygène dissous mesurées par le RNB et simulées par PROSE. \min et \max sont les minimum et maximum (respectivement), m la moyenne, et σ l'écart-type.

1. la localisation précise des failles étant connue, le calcul des variogrammes peut en tenir compte ;
2. les failles étant intégrées aux valeurs PROSE, une solution alternative consiste à se reposer sur le modèle déterministe pour leur localisation, et à calculer un variogramme unique le long du graphe sans tenir compte des discontinuités.

La figure 10.5 présente les variogrammes obtenus pour les deux calculs.

Les variogrammes simples calculés *en tenant compte des failles* n'affichent pas de structure évidente. Cela est dû à un effectif restreint : les quelques stations du RNB informant un tronçon entre deux failles ne sont pas suffisantes pour décrire la variabilité spatiale des concentrations en oxygène dissous. Le variogramme croisé ne semble pas mieux structuré. Cependant, le variogramme calculé à partir des valeurs PROSE exhaustives est mieux structuré et apparaît linéaire. En retenant cette solution (choix 1), l'estimation conjointe des concentrations en oxygène dissous s'orientera, comme pour les nitrates (cf. chapitre 8), vers un krigeage des résidus de la régression linéaire entre mesures et valeurs PROSE, ou vers un krigeage avec dérive externe. Un co-krigeage pourrait également être envisagé, avec un modèle variographique arbitraire. Dans tous les cas, l'estimation sera réalisée en réseau en limitant le voisinage aux failles.

En revanche, s'ils affichent une amplitude plus élevée, les variogrammes simples et croisé calculés le long du graphe *sans tenir compte des discontinuités* sont incontestablement structurés.

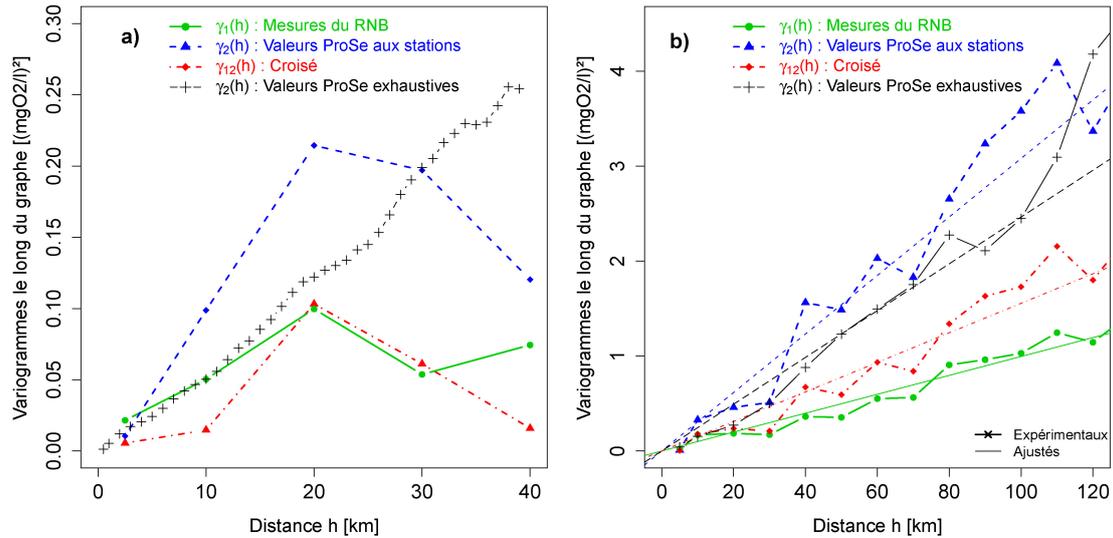


FIGURE 10.5 – Variogrammes expérimentaux simples et croisé des concentrations annuelles en oxygène dissous mesurées par le RNB et simulées par PROSE. a) En tenant compte des failles (choix 1). b) Sans tenir compte des failles (choix 2).

Ils s’ajustent aisément en corrélation intrinsèque, à l’aide d’une composante linéaire. On retrouve d’ailleurs un coefficient de corrélation de 0.89, très proche de la corrélation expérimentale ($\rho = 0.88$). Avec cette solution (choix 2), deux options sont possibles pour l’estimation conjointe, selon l’objectif visé. Les mesures et les valeurs PROSE s’ajustant dans le cadre d’un modèle bivariable (en l’occurrence la corrélation intrinsèque), un co-krigeage fournira une estimation combinant ces deux ensembles de données. D’autre part, un krigeage des concentrations avec les valeurs PROSE en dérive externe permettra de recalibrer la simulation PROSE aux mesures. Les estimations seront réalisées avec un voisinage unique.

La variabilité plus faible des variogrammes calculés en tenant compte des failles aurait pu être un argument en faveur de la première solution, quitte à utiliser un modèle variographique approché pour le co-krigeage, en imposant une corrélation égale à la corrélation expérimentale. Cependant, de manière pragmatique, la seconde solution (choix 2) a été retenue. Elle est plus générale, étant donné que la localisation des failles n’est pas requise ; en contrepartie, les variogrammes affichant des amplitudes plus élevées, l’incertitude associée à l’estimation sera plus importante.

10.2.1 Co-krigeage des concentrations

Un modèle de corrélation intrinsèque a été ajusté aux variogrammes simples et croisé des mesures $Z_1(s)$ et des valeurs PROSE $Z_2(s)$ d’oxygène dissous (cf. Fig 10.5b), calculés à partir des données aux 25 stations du RNB. Cependant, le variogramme des valeurs PROSE exhaustives est moins élevé, montrant que l’échantillonnage selon les stations du RNB conduit à surestimer la variabilité spatiale. L’ajustement peut donc être corrigé en suivant la démarche adoptée pour les estimations temporelles (cf. §5.2.1). Le tableau 10.3 reprend l’ajustement initial et l’ajustement après correction, qui sont relativement proches ; ici, la correction n’apparaît pas indispensable. Les failles étant supposées intégrées aux valeurs PROSE, le co-krigeage en réseau a été effectué en voisinage unique à l’aide du modèle variographique corrigé. Les estimations obtenues reproduisent correctement les discontinuités, avec des écarts légèrement atténués par rapport à ceux des valeurs PROSE (Fig. 10.6). L’estimation spatiale passe par les mesures et, entre les stations, elle affiche

	$b_{11,25}$	$b_{12,25}$	$b_{22,25}$	ρ_{12}	ω_{12}	$b_{11,exh.}$	$b_{12,exh.}$	$b_{22,exh.}$
Lin	0.010	0.016	0.031	0.89	1.76	0.008	0.012	0.025

TABLE 10.3 – Paramètres de l’ajustement des variogrammes spatiaux expérimentaux des mesures du SIAAP et des valeurs PROSE d’oxygène dissous à l’aide d’un modèle de corrélation intrinsèque à composante linéaire (Lin) unique. Correction de ce modèle via l’ajustement du variogramme calculé sur les valeurs PROSE exhaustives (exh.), le coefficient de corrélation ρ_{12} et le rapport des paliers ω_{12}^2 .

une variabilité spatiale empruntée aux valeurs PROSE. L’incertitude associée à l’estimation est très faible ; en moyenne, l’écart-type d’estimation est inférieur au pourcent ($0.1\% \leq \sigma_E/Z^* \leq 2\%$).

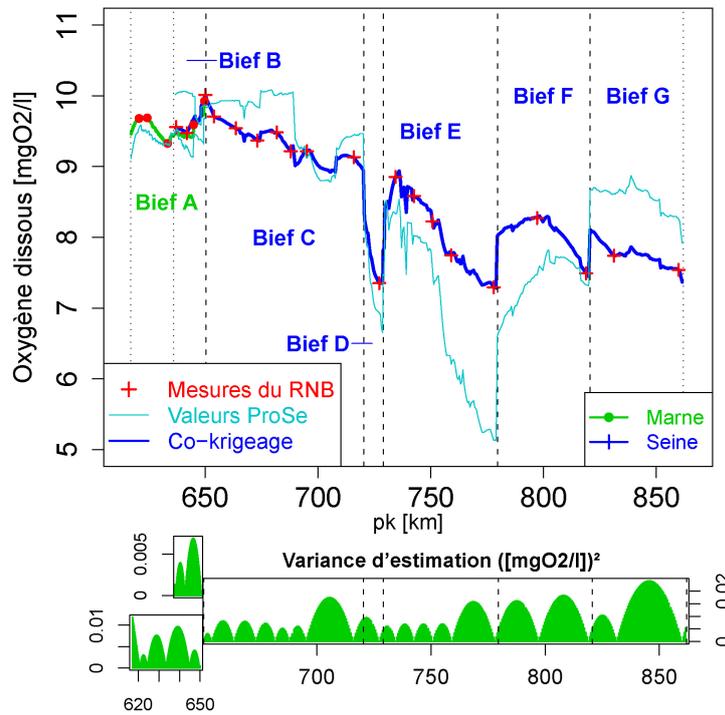


FIGURE 10.6 – Co-krigeage spatial des concentrations annuelles en oxygène dissous mesurées par le RNB et simulées par PROSE, à l’aide d’un modèle unique le long du graphe.

10.2.2 Krigeage avec PROSE en dérive externe

Le krigeage des concentrations annuelles en oxygène dissous avec la simulation PROSE en dérive externe a été effectué sans tenir compte des discontinuités, en suivant une démarche identique à celle du krigeage des concentrations en nitrates avec PROSE en dérive externe (cf. §9.2). Un voisinage glissant de ± 50 km, compromis entre le nombre de données disponibles et la pertinence d’une régression linéaire, a été retenu a priori. Le variogramme des résidus est ajusté automatiquement par une structure linéaire sur le voisinage.

L’estimation obtenue avec PROSE en dérive externe est quasiment égale au co-krigeage (Fig. 10.7), à quelques exceptions locales près, notamment à proximité des barrages situés en aval du domaine.

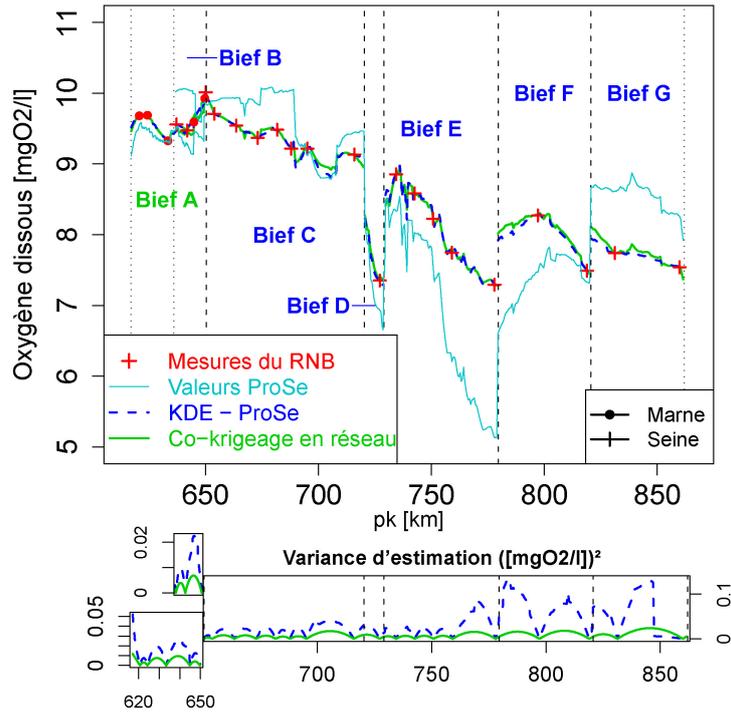


FIGURE 10.7 – Comparaison du krigeage spatial des concentrations annuelles en oxygène dissous avec les valeurs PROSE en dérive externe au co-krigeage de ces concentrations, et variances d'estimation associées.

Les variances d'estimation associées au krigeage avec dérive externe sont (presque) systématiquement supérieures à celles fournies par le co-krigeage, avec un écart-type d'estimation moyen de 1.6% ($0.2\% \leq \sigma_E/Z^* \leq 5\%$).

L'analogie des estimations obtenues par co-krigeage et à l'aide de la dérive externe s'explique ici par le modèle de corrélation intrinsèque. En effet, le krigeage avec dérive externe considère la dérive tout entière, alors qu'en co-krigeage, seules interviennent les structures présentes sur le variogramme croisé. Ainsi, si le variogramme des valeurs PROSE présentait par exemple un effet de pépité absent du variogramme croisé, cet effet de pépité serait filtré par le co-krigeage. En revanche, le krigeage avec dérive externe fournirait une estimation incluant les petites fluctuations responsables de cet effet de pépité.

Le modèle variographique conjoint des valeurs PROSE et des mesures comportant une unique structure présente sur tous les variogrammes, le co-krigeage considère toute l'information auxiliaire (en l'occurrence la simulation PROSE), à l'instar du krigeage en dérive externe, ce qui explique que les estimations obtenues soient très proches.

10.3 Synthèse

L'oxygène dissous est un indicateur beaucoup plus réactif que les nitrates, avec une variabilité spatiale plus marquée. L'analyse de leur évolution spatiale au fil de l'eau a conduit à redéfinir le découpage du réseau. En effet, les STEP et barrages induisent des discontinuités majeures de concentration en oxygène dissous, contrairement aux singularités responsables des discontinuités de débit (confluences).

Cette particularité de l'oxygène dissous a amené à rejeter le modèle à filets, en contradiction avec les observations, et à examiner de plus près le rôle des barrages. Ceux-ci, tout comme la STEP Seine Aval, « décalent » la concentration moyenne (augmentation pour les barrages et diminution pour la STEP) sans pour autant modifier fondamentalement son évolution spatiale. Dès lors, un krigeage en réseau « en présence de failles » s'avère approprié pour estimer la concentration annuelle en tout point du domaine, avec une incertitude de l'ordre du pourcent.

Enfin, les concentrations annuelles calculées à partir des valeurs PROSE et des mesures du RNB étant spatialement corrélées, un co-krigeage de ces deux ensembles de données sur l'ensemble du réseau permet d'obtenir une estimation conjointe précise (l'écart-type d'estimation moyen est inférieur à 1%) des concentrations en oxygène dissous. Les estimations passent par les mesures et affichent, entre les stations, une variabilité spatiale héritée des valeurs PROSE. Le co-krigeage étant effectué avec un modèle de corrélation intrinsèque, le krigeage avec les valeurs PROSE en dérive externe fournit des estimations analogues, mais avec des variances d'estimation plus élevées.

Conclusions et perspectives

Coupler les modélisations déterministe et géostatistique permet d'améliorer l'estimation spatiale ou temporelle de la qualité des cours d'eau, et contribue à l'amélioration des deux modélisations : la simulation déterministe permet de pallier le manque de données, tandis que la modélisation géostatistique aide à préciser le fonctionnement de la simulation déterministe.

Rappelons que le réseau modélisé par PROSE et considéré dans ce travail est certes restreint, étant donné qu'il ne comporte que deux affluents informés (la Seine et la Marne), mais présente, en raison de ses « affluents ponctuels » (l'Oise et la STEP Seine Aval), une configuration complexe.

Apport de la simulation déterministe à la modélisation géostatistique

Le modèle déterministe PROSE apparaît comme une maquette temporelle et spatiale admissible, les valeurs PROSE fournissant une image pertinente de la réalité accessible au travers des mesures. En admettant que la variabilité spatio-temporelle des valeurs PROSE reste également représentative de celle des mesures à une échelle plus fine, la « maquette PROSE » a été exploitée à des fins de modélisation géostatistique.

Ainsi, la « maquette PROSE » a d'abord été utilisée pour **tester différents modèles visant à estimer conjointement les débits, flux et concentrations** de nitrates le long d'un bief, en moyenne annuelle. Un modèle à résidu analogue à celui utilisé pour estimer les puissances, accumulations et teneurs pour l'exploitation minière ne semble pas adapté à une telle estimation. En revanche, deux autres méthodes se sont révélées adaptées à l'estimation des débits, flux et concentrations de nitrates : une estimation simplifiée, estimant les flux comme un produit des krigeages des débits et des concentrations, ainsi qu'un modèle de « faibles perturbations », inspiré des faibles fluctuations des trois variables autour d'une valeur de référence, qui consiste à négliger tous les termes faisant intervenir des perturbations aux ordres supérieurs à deux.

La « maquette PROSE » a ensuite été exploitée pour **évaluer les conséquences de l'échantillonnage spatial puis spatio-temporel**, selon les mesures du RNB. L'échantillonnage spatial conduit à des estimations des débits, flux et concentrations de nitrates (avec l'un ou l'autre modèle) associées à des écarts-type d'estimation inférieurs à 3%. La combinaison de l'échantillonnage spatial et temporel en chaque station induit des écarts plus importants, qui restent raisonnables pour les concentrations, mais ne sont plus négligeables pour les débits et donc pour les flux, ces derniers étant associés à des écarts-type d'estimation atteignant 15%.

Les mesures mensuelles se révèlent donc insuffisantes pour caractériser le débit (et le flux) annuel moyen de manière satisfaisante - ce pourquoi, habituellement, des stations de jaugeage indépendantes des stations de qualité mesurent les débits à plus haute fréquence. Pour l'estimation des flux, disposer de mesures de débit et de concentration en un même point du réseau hydrographique constitue un avantage indéniable.

Ensuite, la « maquette PROSE » a été utilisée pour **tester les hypothèses** usuellement admises pour la modélisation géostatistique sur graphe, mais rarement vérifiables en pratique à cause du nombre réduit de stations de mesure : l'indépendance des concentrations à l'amont d'une confluence ainsi que la conservation de la masse du composé.

Différentes méthodes ont été proposées pour tester l'indépendance à l'amont d'une confluence, un « variogramme croisé », l'évolution des écarts quadratiques, ainsi qu'un « pseudo-variogramme croisé » et la covariance d'accroissements, valides quel que soit le degré de stationnarité des concentrations. Pour l'unique confluence dont les deux affluents sont informés (dénommée « confluence informée »), les différents tests se sont révélés concluants et ont conduit à accepter cette hypothèse d'indépendance pour les concentrations en nitrates.

La conservation de la masse des constituants (des nitrates, par exemple, et non de l'azote) à l'aval d'une confluence s'est également avérée valide pour les concentrations en nitrates, mais sur un voisinage limité. En effet, les interactions bio-physico-chimiques au sein d'un cours d'eau interviennent progressivement, au fur et à mesure du mélange des constituants. Or il faut parfois plusieurs (dizaines de) kilomètres pour que le mélange de deux affluents soit homogène.

A contrario, l'oxygène dissous étant un indicateur très réactif, sa masse n'est pas conservée au fil de l'eau.

La « maquette PROSE » a surtout rendu possible **l'inférence du modèle à filets** pour les concentrations en nitrates, avec notamment le choix d'une structure élémentaire adaptée pour le réseau considéré, ce qui était impossible - de manière pertinente - à partir des quelques mesures du RNB. Une fois le modèle inféré, l'estimation spatiale des concentrations en nitrates à partir des mesures du RNB a été effectuée, et la variance d'estimation calculée. La comparaison de cette estimation au krigeage par bief a démontré l'intérêt du modèle à filets, qui fournit des estimations plus précises particulièrement à proximité des confluences informées.

Pour l'oxygène dissous, qui présente un mode de fonctionnement différent de celui des nitrates, la « maquette PROSE » a conduit à rejeter le modèle à filets. En effet, les concentrations en oxygène dissous ne sont plus conditionnées par les discontinuités de débit, mais par les STEP et barrages, qui introduisent des discontinuités majeures de concentration (diminution pour la STEP et augmentation pour les barrages) sans vraiment modifier leur comportement ou leur variabilité spatiale.

Un krigeage sur réseau avec un modèle unique tenant compte de ces « failles » fournit une estimation précise (avec un écart-type d'estimation moyen d'environ 1% dans le modèle) de la concentration annuelle en oxygène dissous en tout point du réseau.

Apport de la modélisation géostatistique à la simulation déterministe

L'analyse exploratoire conjointe des valeurs PROSE et des mesures a dévoilé un « biais systématique » du modèle PROSE, avec une surestimation non négligeable des concentrations en nitrates sur la majeure partie du réseau considéré. L'analyse approfondie a fait apparaître une incohérence entre les mesures journalières utilisées comme conditions aux limites amont et les mesures hebdomadaires utilisées pour la validation du modèle, explicable par une différence de protocole de mesure. Le co-krigeage temporel de la chronique hebdomadaire amont par la chronique journalière servant de condition aux limites initiale a permis de reconstituer une chronique journalière pertinente utilisée comme condition aux limites amont modifiée. La simulation PROSE obtenue avec les conditions aux limites modifiées concorde beaucoup mieux avec les données de validation sur l'ensemble du réseau, démontrant l'intérêt d'une analyse exploratoire détaillée. En outre, l'homogénéisation du peu de données d'origines diverses s'avère également utile pour mieux appréhender le fonctionnement des systèmes.

L'analyse variographique conjointe des valeurs PROSE et des mesures a ensuite montré que les relations entre valeurs PROSE et mesures évoluaient le long du réseau, se révélant ainsi comme un nouvel **outil de « diagnostic » d'un modèle déterministe**. En effet, l'ajustement d'un modèle variographique bivarié en une station modélise les relations entre les mesures et les valeurs PROSE en cette station, sur la base de processus se développant à différentes échelles temporelles. L'évolution des ajustements réalisés aux différentes stations d'amont en aval permet alors de localiser et d'identifier les imperfections de la modélisation déterministe, facilitant ensuite leur correction.

Ainsi, l'analyse des variogrammes simples et croisé des concentrations en nitrates, ajustés dans le cadre d'un modèle linéaire de co-régionalisation en chaque station, a conduit tout d'abord à localiser spatialement des zones spécifiques de dysfonctionnement du modèle PROSE, puis à reconsidérer en certains points la quantification des rejets de station d'épuration et des apports latéraux, ou encore la description des processus de nitrification et dénitrification au sein du modèle.

Apport de l'utilisation conjointe

Le recours à la simulation déterministe lors de l'estimation géostatistique des concentrations à partir des mesures permet de réelles améliorations. En effet, les mesures sont trop clairsemées, dans le temps comme dans l'espace, pour obtenir une estimation (ponctuelle) précise avec une résolution fine. Par ailleurs, les valeurs PROSE présentent une haute densité spatio-temporelle, mais ne concordent pas parfaitement avec les mesures. L'estimation géostatistique intégrant les valeurs PROSE permet d'exploiter les avantages des deux ensembles de données, et de « recalcr » la simulation déterministe aux mesures, temporellement et spatialement.

Temporellement, par station, les valeurs PROSE apparaissant fortement corrélées aux mesures, un co-krigeage temporel des mesures par la simulation déterministe a permis de la « recalcr » aux mesures, c'est-à-dire d'obtenir une chronique présentant la variabilité des valeurs PROSE à petite échelle de temps, et passant par les mesures. Cette méthode a été validée pour l'obtention d'une chronique journalière des concentrations en nitrates, à partir de mesures hebdomadaires puis mensuelles. Elle a également permis d'obtenir une chronique de concentrations en oxygène dissous comportant quatre valeurs régulières par jour (pour représenter la variabilité infra-journalière, essentiellement induite par l'activité photosynthétique) à partir de mesures mensuelles.

Le co-krigeage semble donc indiqué pour le « recalcr » **temporel de la simulation déterministe aux mesures** par station.

De plus, un co-krigeage temporel à trois variables mêlant valeurs PROSE et mesures a également permis de **compléter une chronique lacunaire** d'oxygène dissous. L'estimation des concentrations manquantes à partir de cette chronique informée sur 9 mois consécutifs s'appuie non seulement sur les valeurs PROSE en cette station, mais également sur les mesures effectuées quelques kilomètres en aval durant l'année entière. Le recours à une troisième variable est souhaitable pour éviter de se fier uniquement au modèle déterministe qui a tendance à lisser la variabilité réelle, et pour exploiter ainsi la variabilité horaire réelle accessible au travers des mesures.

Enfin, la densité temporelle des sorties du modèle déterministe a été mise à profit pour affiner ou « corriger » le modèle variographique bivarié ajusté sur le champ temporel commun (à partir des points expérimentaux communs) aux mesures et aux valeurs PROSE de nitrates et d'oxygène dissous, soit 12 ou 52 mesures annuelles. Dans le cadre d'un modèle linéaire de co-régionalisation, cette correction peut être réalisée tout en préservant les relations observées entre les deux ensembles de données sur le champ commun. Ces relations, qui sont supposées identiques quel que

soit le champ d'observation, sont synthétisées par deux paramètres pour chaque composante temporelle : le coefficient de corrélation et le rapport des paliers.

Trois méthodes ont ensuite été envisagées pour « **recaler** » **spatialement la simulation déterministe aux mesures** de nitrates et d'oxygène dissous : le co-krigeage, qui exploite la corrélation spatiale conjointe des valeurs PROSE et des mesures, ainsi que le krigeage des résidus ou avec dérive externe, où les valeurs PROSE sont considérées comme une dérive déterministe.

La corrélation spatiale entre valeurs PROSE et mesures de concentrations en *nitrates* étant beaucoup moins claire que leur corrélation temporelle, le co-krigeage n'a pas été retenu pour l'estimation conjointe de ces concentrations. Des estimations très satisfaisantes, associées à des variances relativement faibles, ont été obtenues aussi bien par un krigeage des résidus avec un modèle à filets que par un krigeage avec dérive externe et un variogramme global.

Pour le réseau considéré, il est délicat de départager les méthodes. Le « choix idéal » du krigeage avec dérive externe et modèle à filets n'est pas toujours applicable ; reste alors à déterminer les approximations pertinentes : dépendre des régressions linéaires (krigeage des résidus) ou approcher le modèle variographique (krigeage avec dérive externe).

Les concentrations en *oxygène dissous* mesurées et simulées par PROSE apparaissant spatialement corrélées, le krigeage avec dérive externe comme le co-krigeage apparaissent appropriés pour leur estimation conjointe. Si les variogrammes simples et croisé calculés en tenant compte des « failles » montrent une variabilité inférieure à ceux obtenus globalement le long du graphe (sans les prendre compte), leur structure n'est pas du tout évidente, les quelques stations disponibles entre failles s'avérant insuffisantes pour caractériser correctement la variabilité spatiale des concentrations en oxygène dissous. De façon pragmatique, un modèle bivariable ajusté sur les variogrammes calculés globalement le long du graphe, qui affichent des structures simples et croisée bien marquées, a donc été préféré à un ajustement arbitraire, laissant aux valeurs PROSE le soin d'intégrer les failles aux estimations.

Les mesures et valeurs PROSE s'ajustant en corrélation intrinsèque, le co-krigeage spatial sur réseau fournit une estimation des concentrations en oxygène dissous en tout point du domaine très proche de celle obtenue à l'aide d'un krigeage avec dérive externe. Dans les deux cas, bien qu'atténuées, les failles se retrouvent sur les estimations. L'écart-type d'estimation moyen obtenu par krigeage avec dérive externe est légèrement supérieur à celui issu du co-krigeage, inférieur à 1%.

Perspectives

Tout d'abord, le « **diagnostic** » **d'un modèle déterministe via l'analyse variographique conjointe des simulations et des mesures**, testé avec succès pour les nitrates sur le réseau PROSE, constitue une piste prometteuse.

Cet outil peut-il également être *appliqué à d'autres variables* ? Reste-t-il par exemple adapté pour l'oxygène dissous, indicateur au comportement autrement plus complexe que les nitrates en raison des nombreuses interactions biogéochimiques dans lesquelles il intervient et des ré-aérations aux barrages ? D'autre part, cette méthode pourrait être *étendue à un autre modèle déterministe*, ainsi qu'à un autre réseau hydrographique.

Mais les principales perspectives concernent **la modélisation géostatistique sur réseau hydrographique**, indispensable à l'estimation conjointe. En effet, dans ce travail, le modèle à filets a pu être inféré et appliqué avec succès à l'estimation spatiale des mesures des concentrations

en nitrates pour l'année 2003, sur le réseau modélisé par PROSE. De nombreux développements restent à accomplir, pour valider l'application de ce modèle et le généraliser.

- Bien que l'année 2003 ne semble pas statistiquement particulière, c'était tout de même une année caniculaire ; il serait dès lors souhaitable de valider le test d'hypothèses, l'inférence ainsi que l'application du modèle à filets pour les concentrations en nitrates relevées durant *d'autres années*.
- Les hydrologues étant généralement davantage concernés par les flux que par les concentrations, il serait également intéressant d'*étendre le modèle à filets à l'estimation conjointe des débits, flux, et concentrations* de nitrates. Ce modèle trivariable à filets pourrait s'inspirer des deux modèles validés par biefs, l'estimation simplifiée et les faibles perturbations, en étendant le modèle à plusieurs composantes associées à chaque filet.
- Les estimations spatiale et temporelle ont ici été envisagées séparément, en ajoutant une composante temporelle à la variance d'estimation spatiale. Une estimation spatio-temporelle serait préférable, et fournirait des estimations et variances associées plus réalistes. *La généralisation du modèle à filets à un cadre spatio-temporel* reviendrait à considérer des composantes associées aux filets à deux dimensions (une d'espace et l'autre de temps), et pourrait s'appuyer sur les résultats des estimations temporelles. Ce modèle pourrait ensuite être appliqué à l'estimation du risque de dépassement d'un seuil fixé, question importante en environnement.
- *L'extension du modèle à filets à un réseau hydrographique plus vaste* constitue également un prolongement nécessaire de ce travail. Le modèle à filets pourrait être envisagé à l'échelle du bassin de la Seine, en s'aidant d'un modèle phénoménologique. Cela permettrait notamment de valider les hypothèses d'indépendance à l'amont d'une confluence et de conservation de la masse sur un voisinage donné, testées sur l'unique confluence *informée* du réseau modélisé par PROSE. En outre, la généralisation indispensable des méthodes d'inférence amènerait assurément de nouveaux défis intéressants, telles les questions d'échelle.
- Enfin, le modèle à filets, adapté pour les nitrates, ne l'est pas pour l'oxygène dissous. Qu'en est-il des *autres variables*, en particulier des nutriments au comportement spatial plus variable que les nitrates, comme l'ammonium ou les orthophosphates ?

En conclusion, ce travail démontre l'intérêt de l'utilisation conjointe des modélisations déterministe et géostatistique. De nombreuses pistes restent encore à explorer, laissant entrevoir autant de résultats innovants et intéressants pour améliorer la caractérisation de la qualité des cours d'eau, mais également pour l'estimation géostatistique sur graphe.

Bibliographie

- Ambrose, R., Barnwell, T., McCutcheon, S., Williams, J., 1996. Water Resources Handbook. McGraw-Hill, New York, Ch. Chapter 14 : Computer models for water quality analysis.
- Ambrose, R. B., Wool, T. A., Wool, J. P., Schanz, R. W., 1988. WASP4, A hydrodynamic and water quality model. Model theory, user's manual guide and programmer's guide. US Environmental Protection Agency.
- Anderton, S., Latron, J., Gallart, F., 2002a. Sensitivity analysis and multi-response, multi-criteria evaluation of a physically based distributed model. *Hydrol. Process.* 16, 333–353.
- Anderton, S., Latron, J., White, S., Llorens, P., Gallart, F., Salvany, C., O'Connell, P., 2002b. Internal evaluation of a physically based distributed model using data from a Mediterranean mountain catchment. *EGS* 6 (1), 67–83.
- Arheimer, B., Olsson, J., 2003. Integration and coupling of hydrological models with water quality models : Applications in Europe. Tech. rep., Workgroup Report, WMO RA VI (K55.1.02).
- Arhonditsis, G., Brett, M., 2004. Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* 271, 13–26.
- Augeron, J.-M., Monestiez, P., Habib, R., 1993. Spatial dependencies and sampling in a fruit tree : a new concept for spatial prediction in fruit studies. *Journal of Horticultural Science* 68 (1), 99–112.
- Bagnold, R., 1966. An Approach to the Sediment Transport Problem from General Physics. *Physiographic and Hydraulic Studies of Rivers.* Tech. rep., Geological Survey Professional paper 422-I.
- Bailly, J.-S., Monestiez, P., Philippe, L., 2006. Modelling spatial variability along drainage networks using geostatistics. *Mathematical Geology* 38 (5), 515–539.
- Barnwell, T., Brown, L., Whittemore, R., 1987. Systems Analysis in Water Quality Management. Pergamon Press New York, Ch. QUAL2E - A Case Study in Water Quality Modelling Software, pp. 377–387.
- Bernard-Michel, C., de Fouquet, C., 2004. Geostatistical indicators of waterway quality for nutrients. *Proceedings of the Seventh International Geostatistics Congress* 2, 907–912.
- Bernard-Michel, C., 2006. Indicateurs géostatistiques de la pollution dans les cours d'eau. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model. *Journal of Hydrology* 105, 157–172.

- Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Wat. Res.* 16, 41–51.
- Beven, K., 2006a. A manifesto for the equifinality thesis. *Journal of Hydrology* 320, 18–36.
- Beven, K., 2006b. On undermining science ? *Hydrological Processes* 20, 3141–3146.
- Billen, G., Garnier, J., Brion, N., Sanchez, N., 1998a. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Les transformations bactériennes de l'azote, pp. 567–590.
- Billen, G., Garnier, J., Ficht, A., Cun, C., 2001. Ecological modeling of the 50 last years of anthropogenic impact in the seine estuary. *Estuaries* 24 (6), 977–993.
- Billen, G., Garnier, J., Hanset, P., 1994. Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : The RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia* 289, 119–137.
- Billen, G., Garnier, J., Meybeck, M., 1998b. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Les sels nutritifs : l'ouverture des cycles, pp. 531–5.
- Billen, G., Garnier, J., Rousseau, V., 2005. Nutrient fluxes and water quality in the drainage network of the scheldt basin over the last 50 year. *Hydrobiologia* 540 (1-3), 47–67.
- Billen, G., Servais, P., 1989. Modélisation des processus de dégradation bactérienne de la matière organique en milieu aquatique. In : et al., B. (Ed.), *Micro-organismes dans les écosystèmes océaniques*. Masson Paris, pp. 219–245.
- Birgand, F., 2000. Quantification and modelling of in-stream processes in agricultural canals of the lower coastal plain. Ph.D. thesis, North Carolina State University.
- Blanchard, C., 2003. Modélisation des flux spécifiques de carbone, azote et phosphore dans le bassin loire-bretagne, unpublished thesis - Université de Tours.
- Boudreau, B. P., 1997. *Diagenetic Models and their Implementation*. Springer.
- Boyer, E., Goodale, C., Jaworski, N., Howarth, R., 2002. Anthropogenic nitrogen sources and relationships to riverine nitrogen export in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 137–169.
- Brown, L. C., Barnwell, T. O., 1987. Enhanced stream water quality models, QUAL2E and QUAL2E UNCAS — Documentation and user's TechReport. US EPA.
- Bruno, R., Palumbo, V., Bonduà, S., 2001. Identification of regional variability component by geostatistical analysis of stream sediments. In : *geoEnv III - Geostatistics for Environmental Applications*. pp. 113–123.
- Butts, M., Payne, J., Kristensen, M., Madsen, H., 2004. An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *Journal of Hydrology* 298, 242–266.
- Casper, Vohland, 2008. Validation of a large scale hydrological model with data fields retrieved from reflective and thermal optical remote sensing data - a case study for the upper rhine valley. *Physics and Chemistry of the Earth* 33, 1061–1067.

- Castelier, E., 1993. Cahiers de Géostatistique, Fasc. 3. Ecole des Mines de Paris, Ch. Dérive externe et régression linéaire, pp. 47–59.
- Chauvet, P., 1987. Eléments d'analyse structurale des fai-k à 1 dimension. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Chilès, J.-P., Séguret, S., Riboud, P.-M., 2008. Geostatistical analysis of validation data of an air pollution simulator. Proceedings of the Eighth International Geostatistics Congress 2, 861–870.
- Chilès J.-P., Delfiner, P., 1999. Geostatistics : modeling spatial uncertainty. Wiley, New-York.
- Crabtree, R., Gent, R., Clifford, I., 1994. Controlling pollution from combined sewer overflows : Practical experience of applying an integrated approach in the UK. *Genie-Urbain-Genie Rural* 5, 269–272.
- DCE, novembre 2007. Circulaire dce 2005/12.
<http://www.ain.pref.gouv.fr/DDAF/ODE/politique/docs/circulaire-dce-bee.pdf>.
- Dong, A., 1990. Estimation géostatistique des phénomènes régis par des équations aux dérivées partielles. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Ebel, B., Loague, K., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation : Seeing through the fog of equifinality. *Hydrol. Process.* 20, 2887–2900.
- Emery, X., 2001a. Géostatistique avancée. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - Centre de Géostatistique and Universidad de Chile - Departamento de Ingeniería de Minas.
- Emery, X., 2001b. Géostatistique linéaire. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - Centre de géostatistique and Universidad de Chile - Departamento de Ingeniería de Minas.
- Even, S., 1995. Modélisation d'un écosystème fluvial : la Seine - le modèle PROSE. Thèse de Doctorat, Centre d'Informatique Géologique.
- Even, S., Mouchel, J.-M., Servais, P., Flipo, N., Poulin, M., Blanc, S., Chabanel, M., Paffoni, C., 2007. Modeling the impacts of Combined Sewer Overflows on the river Seine water quality. *Sci Total Environ* 375 (1-3), 140–151.
- Even, S., Mouchel, J.-M., Servais, P., Le Hir, P., Thouvenin, B., Poulin, M., Garnier, J., 2000. Suspended Matter and Ecological Behaviour of Rivers and Estuaries. Conceptual and Numerical Modelling. *Verh. Intern. Verein. Limnol.* 27, 238–241.
- Even, S., Poulin, M., Garnier, J., Billen, G., Servais, P., Chesterikoff, A., Coste, M., 1998. River ecosystem modelling : Application of the PROSE model to the Seine river (France). *Hydrobiologia* 373, 27–37.
- Even, S., Poulin, M., Mouchel, J.-M., Seidl, M., Servais, P., 2004. Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecol. Model.* 173, 177–196.
- Fischer, H., Pusch, M., 2001. Comparison of bacterial production in sediments and epiphyton and the pelagic zone of a lowland river. *Freshwater Biology* 46, 1335–1348.
- Flipo, N., 2005. Modélisation intégrée des transferts d'azote dans les aquifères et les rivières : Application au bassin du Grand Morin. Thèse de Doctorat, Centre d'Informatique Géologique.

- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Théry, S., Ledoux, E., 2007a. Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Sci Total Environ* 375, 69–79.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Tusseau-Vuillemin, M.-H., Améziane, T., Dauta, A., 2004. Biogeochemical modelling at the river scale : Plankton and periphyton dynamics - Grand Morin case study, France. *Ecol. Model.* 176, 333–347.
- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France) : combined use of geostatistics and physically-based modeling. *Environ Pollut* 146 (1), 241–256.
- Flipo, N., Rabouille, C., Poulin, M., Even, S., Tusseau-Vuillemin, M., Lalande, M., 2007c. Primary production in headwater streams of the Seine basin : the Grand Morin case study. *Sci Total Environ* 375, 98–109.
- de Fouquet, C., Bernard-Michel, C., 2006. Modèles géostatistiques de concentrations ou de débits le long des cours d'eau. *Comptes Rendus Géoscience* 338, 307–318.
- de Fouquet, C., Gallois, D., Perron, G., 2007. Geostatistical characterization of nitrogen dioxide concentration in an urban area - part ii : Time component of the estimation error. *Atmospheric Environment* 41, 6691–6700.
- de Fouquet, C., Malherbe, L., Ung, A., 2010. Geostatistical analysis of the temporal variability of ozone concentrations. Comparison between CHIMERE model output and surface observations. *Soumis à Atmospheric Environment*.
- Garnier, J., Billen, G., 2007. Production *vs.* Respiration in river systems : An indicator of an « ecological status ». *Sci Total Environ* 375, 110 – 124.
- Garnier, J., Billen, G., Coste, M., 1995. Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine : Observations and modelling. *Limnol. Oceanogr.* 40 (4), 750–765.
- Garnier, J., Billen, G., Hannon, E., Fonbonne, S., Videnina, Y., Soulie, 2002. Modeling transfer and retention of nutrients in the drainage network of the danube river. *Estuar. Coast. Shelf* 54, 285–308.
- Garnier, J., Billen, G., Hanset, P., Testard, P., Coste, M., 1998. Développement algal et eutrophisation dans le réseau hydrographique de la Seine. In : Meybeck, M., de Marsily, G., Fustec, E. (Eds.), *La Seine en son bassin-Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé*. Elsevier, pp. 593–626.
- Garnier, J., Billen, G., Sanchez, N., Leporcq, B., 2000. Ecological functioning of the Marne reservoir (upper Seine basin, France). *Regul. Rivers : Res. Mgmt.* 16, 51–71.
- Garnier, J., Némery, J., Billen, G., Théry, S., 2005. Nutrient dynamics and control of eutrophication in the Marne river system : modelling the role of exchangeable phosphorus. *Journal of Hydrology* 304, 397–412.
- Güntner, A., Uhlenbrook, S., Seibert, J., Leibundgut, C., 1999. Multi-criterial validation of TOP-MODEL in a mountainous catchment. *Hydrological Processes* 13, 1603–1620.

- Howarth, R., Billen, G., Swaney, D., Townsend, A., Jaworski, N., Lajtha, K., Downing, J., Elmgren, R., Caraco, N., Jordan, T., Berendse, F., Freney, J., Kudeyarov, V., Murdoch, P., Zhao-Liang, Z., 1996. Regional nitrogen budgets and riverine N and P fluxes for the drainages to the North Atlantic Ocean : Natural and human influences. *Biogeochemistry* 35, 75–139.
- Hug, M., 1975. *Mécanique des fluides appliquée*. Editions Eyrolles.
- Ifremer, juillet 2009. Site internet de l'ifremer.
<http://www.ifremer.fr/delcc/cycleau/reglementation/sequeau.hm>.
- Ivanov, P., Masliev, I., Kularathna, M., De Marchi, C., Somlyody, L., 1996. DESERT User's manual. Tech. rep., International Institute for Applied Systems Analysis, Austria - Institute for Water and Environmental Problems, Russia.
- Journal, A., 1977. *Géostatistique Minière - Tome II*. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Krige, D. G., 1951. A statistical approach to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. *Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa* 52 (6), 119–139.
- Lancelot, C., Veth, C., Mathot, S., 1991. Modelling ice-edge phytoplankton bloom in the scotia-weddell sea sector of the southern ocean during spring 1998. *J. mar. System* 2, 333–346.
- Maldiney, M.-A., 1994. Caractéristiques physiques des particules en suspension dans un fleuve canalisé, exemple de la Seine. Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure des Ponts et Chaussées.
- Maréchal, A., Elf-Aquitaine (Production) 1983. Kriging seismic data in presence of faults. G. Very et al. (eds.), *Geostatistics for Natural Resources Characterization, Part I*, 271–294.
- Martin, L., 2001. Fonctionnement écologique de la seine à l'aval de la station d'épuration d'achères : données expérimentales et modélisation bidimensionnelle. Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Matheron, G., 1962. *Traité de géostatistique appliquée*.
- Matheron, G., 1970. *La théorie des variables régionalisées et ses applications*. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, cahiers du centre de morphologie mathématique, fasc. 5 Edition.
- McCarter, L., 1999. The multiple identities of vibrio parahaemolyticus. *J. Molec. Microbiol. Biotechnol.* 1 (1), 51–57.
- Moatar, F., 1997. Modélisations statistiques et déterministes des paramètres physico-chimiques utilisés en surveillance des eaux des rivières : application à la validation des séries de mesures en continu (cas de la Loire moyenne), unpublished thesis - Institut National Polytechnique.
- Moatar, F., 2006. Variabilités spatio-temporelles dans les systèmes fluviaux : descripteurs et modèles des couplages hydrologie - biogéochimie et hydraulique - morphologie, mémoire d'Habilitation à Diriger les Recherches.
- Monestiez, P., Bailly, J.-S., Lagacherie, P., Voltz, M., 2005. Geostatistical modelling of spatial processes on directed trees : application to fluvisol extent. *Geoderma* 128 (5), 179–191.

- Nash, J., Sutcliffe, J., 1970. River flow forecasting through conceptual models. Part I, a discussion of principles. *Journal of Hydrology* 10, 282–290.
- Polus-Lefebvre, E., de Fouquet, C., Bernard-Michel, C., Flipo, N., Poulin, M., 2008. Geostatistical model for concentrations or flow rates in streams : some results. *Proceedings of the Eighth International Geostatistics Congress 2*, 871–880.
- Poulin, M., 2006. Réalisation de simulations PROSE - Année de référence 2003. Tech. rep., Centre de Géosciences - Mines ParisTech.
- Poulin, M., Even, S., Billen, G., Mouchel, J.-M., Garnier, J., Levassor, A., Leviandier, T., 1998. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Modèles : des processus au bassin versant, pp. 679–720.
- Poulin, M., Even, S., Flipo, N., 2000. Modélisation du fonctionnement hydraulique de la marne entre epernay et la ferté sous jouarre. impact de la ville de troyes sur le fonctionnement écologique de la Seine entre troyes et méry. LHM/RD/00/54. Tech. rep., CIG - DIREN.
- Poulin, M., Flipo, N., Billen, G., Garnier, J., 2009. PROSE, problématiques nouvelles et développements attendus. Tech. rep., PIREN- Seine.
- Poulin, M., Flipo, N., Even, S., Tusseau-Vuillemin, M.-H., Sainte-Laudy, M., Goulette, S., Servais, P., Mouchel, J.-M., 2002. Site atelier du Grand Morin. Tech. rep., PIREN-Seine.
- Prosser, I., Rustomji, P., 2000. Sediment transport capacity relations for overland flow. *Progress in Physical Geography* 24 (2), 179–193.
- Quynh, L., Billen, G., Garnier, J., Théry, S., Fezard, C., Minh, C., 2005. Nutrient (N,P) budgets for the Red River basin (Vietnam and China). *Global Biogeochemical Cycles* 19 (2), GB2002.
- Refsgaard, J., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology* 198, 69–97.
- Reichert, P., 1994. AQUASIM- a tool for simulation and data analysis of aquatic systems. *Water Science and Technology* 30 (2), 21–31.
- Reichert, P., 2001. River Water Quality Model no.1 (RWQM1) : Case study II oxygen and nitrogen conversion processes in the river glatt (Switzerland). *Water Science and Technology* 43 (5), 51–60.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somlyódy, L., Vanrolleghem, P., 2001a. River Water Quality Model no.1. Tech. rep., IWA.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somlyody, L., Vanrolleghem, P., 2001b. River Water Quality Model no. 1 : II. biochemical process equations. *Water Science and Technology* 43 (5), 11–30.
- Rivoirard, J., 1991. Introduction au krigeage disjonctif et à la géostatistique non linéaire. Cours C-139. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Rivoirard, J., 1995. Concepts et méthodes de la géostatistique. Cours C-158. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

- Roué-Le Gall, A., Poulin, M., Debroas, D., Flipo, N., 2009. A physical-microbial food web coupled model to study the evolution of the ecological functioning of a new reservoir after its flooding (Sep, Puy de Dôme). *Ecological Modelling* 220, 841–856.
- Sandre, janvier 2008. Service d'administration nationale des données et référentiels sur l'eau. http://www.sandre.eaufrance.fr/rubrique.php3?id_rubrique=21.
- Seitzinger, S., Styles, R., Boyer, E., Alexander, R., Billen, G., Howarth, R., Mayer, B., Breemen, N. V., 2002. Nitrogen retention in rivers : model development and application to watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 199–237.
- Sferratore, A., Billen, G., Garnier, J., Théry, S., 2005. Modeling nutrient (N,P,Si) budget in the Seine watershed : Application of the Riverstrahler model using data from local to global scale resolution. *Global Biogeochemical Cycles* 19 (4), GB4S07.
- Skøien, J. O., Merz, R., Blöschl, G., 2006. Top-kriging - geostatistics on stream networks. *Hydrology and Earth System Sciences* 10, 277–287.
- Streeter, H., Phelps, E. B., 1925. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Tech. Rep. 146, U.S. Public Health Service, Treasury Department, Washington DC, public Health Bulletin.
- Tayfur, G., 2002. Applicability of sediment transport capacity models for nonsteady state erosion from steep slopes. *Journal of Hydrologic Engineering* 7 (3), 252–259.
- Van Breemen, N., Boyer, E., Goodale, C., Jaworski, N., Paustian, K., Seitzinger, S., Lajtha, K., Mayer, B., Dam, D. V., Howarth, R., and M. Eve, K. N., Billen, G., 2002. Where did all the nitrogen go? Fate of nitrogen inputs to large watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 267–293.
- Vanrolleghem, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Reichert, P., Shanahan, P., Somlyódy, L., 2001. River Water Quality Model no.1 (RWQM1) : III biochemical submodel selection. *Water Science and Technology* 43 (5), 31–40.
- Ver Hoef, J. M., Peterson, E., Theobald, D., 2006. Spatial statistical models that use flow and stream distance. *Environmental and Ecological Statistics* 13 (4), 449–464.
- Wells, S., 2000. Hydrodynamic and water quality river basin modelling using CE-QUAL version3. In : Ibarra-Berastegi, G., Brebbia, C., Zannetti, P. (Eds.), *Development and Application of Computer Technics to Environmental Studies*. WIT Press Boston.
- Wetzel, R. G., 1983. *Limnology*, second edition. Saunders college publishing.
- Wool, T., Ambrose, R., Martin, J., and, E. C., 2001. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) version 6.0 - User's manual. Tech. rep., US EPA.
- Yang, C., 1996. *Sediment transport theory and practice*. McGraw-Hill, New York.

Annexes

Annexe A

Rappels de géostatistique

Cette annexe s'adresse au lecteur inaccoutumé aux méthodes géostatistiques, dont elle présente les principaux concepts. Les développements théoriques que l'on trouve dans de nombreux ouvrages spécialisés (Matheron, 1970; Chilès and Delfiner, 1999; Emery, 2001b) ne sont délibérément pas repris ici, cette annexe synthétique et non exhaustive visant simplement à faciliter la compréhension de la thèse.

A.1 Notions de base

La géostatistique cherche à décrire des phénomènes naturels corrélés dans l'espace ou dans le temps, et à quantifier l'incertitude liée à leur estimation. Apparues dans les années 50, ces méthodes initialement développées pour le domaine minier (Krige, 1951; Matheron, 1962) ont depuis été appliquées à des domaines de plus en plus diversifiés, dont l'environnement, qui nous intéresse plus spécifiquement ici.

A.1.1 Fonction Aléatoire

Intéressons-nous tout d'abord à la concentration d'un polluant en un point x d'une rivière, qui peut être considérée comme une variable aléatoire $Z(x)$. Dès lors, les concentrations $z(x_1)$, $z(x_2)$, ..., $z(x_N)$ en N localisations x_1, \dots, x_N peuvent être considérées comme des réalisations d'un ensemble de variables aléatoires $Z(x_1)$, $Z(x_2)$, ..., $Z(x_N)$. De façon plus synthétique, l'ensemble des valeurs $z(x)$ peut être vu comme une variable régionalisée, c'est-à-dire une réalisation de la fonction aléatoire (FA) $Z(x)$, définie comme une variable aléatoire indexée par la position dans l'espace (Rivoirard, 1995).

Désormais, la notation Z est réservée pour désigner une FA, tandis que la notation z fait référence à une réalisation de cette FA.

Une FA est caractérisée par sa loi spatiale

$$f(x_1, \dots, x_N) = [Z(x_1) \leq z(x_1), \dots, Z(x_N) \leq z(x_N)],$$

connue quel que soit le nombre N de points et leur implantation.

A.1.2 Degré de stationnarité

Une fonction aléatoire est dite **stationnaire** si sa loi spatiale est invariante par translation, c'est-à-dire si

$$[Z(x_1) \leq z(x_1), \dots, Z(x_N) \leq z(x_N)] = [Z(x_1 + h) \leq z(x_1), \dots, Z(x_N + h) \leq z(x_N)]$$

pour tout vecteur \vec{h} . Intuitivement, cela signifie que le phénomène est homogène dans l'espace et oscille autour d'une moyenne constante.

La stationnarité stricte étant une hypothèse extrêmement forte, on se limite usuellement à une **stationnarité d'ordre deux**, c'est-à-dire à l'invariance par translation des moments d'ordre 1 et 2 :

$$\begin{aligned} E[Z(x)] &= m \\ Cov(Z(x), Z(x+h)) &= E[(Z(x) - m)(Z(x+h) - m)] \\ &= E[Z(x), Z(x+h)] - m^2 \\ &= C(h) \end{aligned}$$

pour x et $x+h$ appartenant au champ d'étude. Une fonction aléatoire est donc stationnaire d'ordre deux (FASt2) si son espérance est constante et si la covariance entre deux points séparés d'une distance h est une fonction C dépendant uniquement de cette distance h . En particulier, pour $h = 0$, $Cov(Z(x), Z(x)) = Var[Z(x)] = C(0)$: la variance est constante sur le champ.

Lorsque ces conditions ne sont pas respectées, c'est-à-dire lorsque l'espérance et la covariance de la FA dépendent de la position x considérée, cette FA est dite non-stationnaire.

Il existe toutefois un modèle intermédiaire, à la charnière entre FA stationnaire d'ordre deux et FA non-stationnaire : la FA intrinsèque (FAI), définie par des accroissements (d'espérance nulle) stationnaires d'ordre deux.

La stationnarité est une propriété de la fonction aléatoire. Cependant, en se plaçant au niveau de la variable régionalisée, observée en quelques points d'un champ, on perçoit bien que la stationnarité supposée du modèle associé va dépendre de la taille du champ, ainsi que de la fenêtre d'observation du phénomène.

A.2 Variogramme

En géostatistique, la notion de variabilité spatiale ou temporelle d'une FA est préférée à celle, moins générale, de corrélation. Cette variabilité en fonction de la distance ou du temps est quantifiée par le variogramme spatial ($\gamma(h)$) ou temporel ($\gamma(\tau)$), défini comme l'espérance du demi-écart quadratique entre deux variables aléatoires séparées d'une distance h donnée (Eq. A.1) ou d'un intervalle de temps τ donné, respectivement. Afin d'alléger la lecture et d'éviter les redondances, les développements qui suivent sont limités au cadre spatial.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} E \left[(Z(x+h) - Z(x))^2 \right] \quad (\text{A.1})$$

Par définition, $\gamma(0) = 0$. Généralement, l'amplitude des écarts quadratiques - et donc le variogramme - augmente ensuite avec la distance h , traduisant la détérioration de la corrélation entre deux variables aléatoires de plus en plus éloignées. Si la FA $Z(x)$ est stationnaire d'ordre deux, l'amplitude du variogramme se stabilise autour d'un « palier » c au-delà d'une distance $h = a$ appelée « portée » qui correspond à la notion de « zone d'influence ». Dans ce cas, le variogramme

et la covariance $C(h)$ fournissent une description équivalente de la variabilité spatiale de la FA : $\gamma(h) = C(0) - C(h) \geq 0$.

En revanche, la covariance d'une FAI (trahie par un variogramme linéaire) ne peut s'exprimer simplement en fonction de la distance h , contrairement à leur variogramme. C'est pourquoi le variogramme est préféré à la covariance.

A.2.1 Variogramme expérimental

En pratique, le variogramme théorique n'est pas accessible ; un variogramme expérimental $\gamma^*(h)$ est alors calculé à partir des données $z(x_i)$ disponibles aux points expérimentaux x_i , comme une moyenne des demi-écarts quadratiques (Eq. A.2). $N(h)$ désigne le nombre de couples de points distants de h .

$$\gamma^*(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} \left[(z(x_i + h) - z(x_i))^2 \right] \quad (\text{A.2})$$

Pour les besoins de l'estimation, ce variogramme expérimental est ensuite ajusté par un modèle variographique - une fonction présentant les propriétés mathématiques requises. La figure A.1 présente quelques modèles de variogramme usuels.

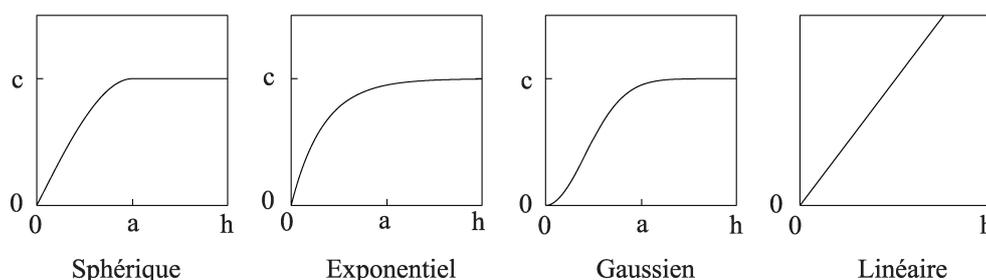


FIGURE A.1 – Exemples de modèles de variogramme courants. c : palier ; a : portée.

Un modèle de variogramme peut combiner différentes structures à différentes échelles : par exemple, $\gamma(h) = \gamma^0(h) + \gamma^1(h) + \gamma^2(h)$, ou γ^0 est de portée nulle (« effet de pépité » : $\gamma^0(h) = c \forall c \neq 0$), γ^1 admet une portée a_1 et γ^2 une portée a_2 supérieure. Si le phénomène présente une périodicité, le variogramme admet une composante sinusoïdale de même période.

A.3 Principe du krigeage

Le krigeage consiste à réaliser une combinaison linéaire des données pour construire un estimateur qui soit :

- sans biais (en moyenne, l'erreur d'estimation est nulle) ;
- optimal, au sens d'une variance d'erreur d'estimation minimale (avec la meilleure précision possible).

Le krigeage comporte quatre étapes. Considérons la FA $Z(x)$, que l'on souhaite estimer au point x_0 à partir de mesures aux n points expérimentaux x_α , $\alpha = 1, \dots, n$.

1. **Construction de l'estimateur linéaire.** L'estimateur de $Z(x_0)$ s'écrit

$$Z(x_0)^* = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha Z(x_\alpha) + \lambda_0 ;$$

2. **Conditions d'autorisation.** Si Z est une FAST2, toute combinaison linéaire est autorisée. Dans les autres cas, il faut s'assurer que la variance de l'erreur d'estimation $VAR[\varepsilon] = VAR[Z^*(x_0) - Z(x_0)]$ existe et est finie ;
3. **Conditions de non-biais.** On impose $E[\varepsilon] = 0$;
4. **Minimisation de la variance de l'erreur d'estimation** sous les contraintes d'autorisation et de non-biais, pour chacune desquelles un paramètre de Lagrange μ_i est introduit. Le système de krigage est obtenu en annulant les dérivées partielles par rapport aux coefficients λ_α et aux paramètres μ_i . La résolution de ce système linéaire fournit les pondérateurs λ_α à appliquer aux mesures pour obtenir l'estimateur $Z^*(x_0)$.

A.3.1 Construction du système de krigage

Pour une FAI de moyenne inconnue, l'erreur d'estimation s'écrit

$$\varepsilon = Z^*(x_0) - Z(x_0) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} Z(x_{\alpha}) - Z(x_0)$$

Les conditions d'autorisation, qui assurent l'existence de sa variance, sont : $\lambda_0 = 0$ et $\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} = 1$. Ces conditions d'autorisation assurent également le non-biais de l'estimation.

La fonction à minimiser pour obtenir le système de krigage est alors

$$\begin{aligned} \Phi &= VAR[Z^*(x_0) - Z(x_0)] - 2\mu(\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} - 1) \\ &= -\sum_{\alpha} \sum_{\beta} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} \gamma(x_{\beta} - x_{\alpha}) - \gamma(x_0 - x_0) + 2\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \gamma(x_0 - x_{\alpha}) - 2\mu(\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} - 1) \end{aligned}$$

L'annulation des dérivées partielles $\partial\Phi/\partial\lambda_{\alpha}$ et $\partial\Phi/\partial\mu$ conduit au système de krigage suivant (Eq. A.3) :

$$\begin{bmatrix} \gamma(x_{\beta} - x_{\alpha}) & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{\alpha} \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(x_0 - x_{\alpha}) \\ 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Pour un krigage ponctuel, la variance (de l'erreur) d'estimation, qui quantifie l'incertitude liée à l'estimation, s'écrit donc $\sigma_E^2 = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \gamma(x_0 - x_{\alpha}) + \mu$. L'écart-type d'estimation relatif, σ_E/Z^* , fournit alors une indication de la qualité *relative* de l'estimation.

Le krigage est un interpolateur exact : aux points points échantillonnés, l'estimateur est égal à la mesure $Z^*(x_{\alpha}) = Z(x_{\alpha})$, et sa variance d'estimation est nulle.

A.3.2 Voisinage de krigage

Pour réaliser une estimation de la FA $Z(x)$ en un point x_0 , on peut être amené à ne pas retenir toutes les données $z(x_{\alpha})$, $\alpha = 1, \dots, n$ disponibles sur le domaine considéré (aussi appelé « champ »), mais un sous-ensemble de ces données. Deux arguments principaux peuvent motiver cette restriction :

- le nombre n de données disponibles : lorsqu'il est très grand, la résolution du système de krigage peut prendre un certain temps, alors que les données éloignées du point x_0 à estimer n'influencent pas vraiment l'estimation ;
- la validité des hypothèses retenues pour la FA $Z(x)$.

Lorsque l'ensemble des n données disponibles est retenu pour l'estimation en tout point x_0 , on dit que le krigeage est effectué en « voisinage unique ».

Lorsque, pour une raison ou l'autre, on souhaite utiliser un sous-ensemble de ces n données, le voisinage de krigeage définit quel sous-ensemble considérer. Par exemple, un « voisinage glissant » consiste à ne retenir que les données les plus proches du point x_0 à estimer : il est défini par une distance maximale (par rapport au point x_0), et éventuellement par un nombre maximal de points à retenir.

A.4 Estimation multivariable

L'estimation multivariable consiste à prendre en compte d'autres informations disponibles pour l'estimation de la FA $Z(x)$. Selon que ces informations auxiliaires sont connues partout (en tout point du champ où l'on souhaite estimer $Z(x)$), où uniquement en certains points, l'estimation multivariable prendra la forme d'un krigeage avec dérive et résidu ou d'un co-krigeage, respectivement. Ces deux méthodes sont décrites ici pour le cas bivariable, en considérant une unique information auxiliaire.

Remarque : lorsque l'information auxiliaire est connue en tout point, l'intérêt du co-krigeage par rapport à un krigeage avec dérive externe est de retenir de cette information auxiliaire uniquement la partie corrélée avec ce que l'on cherche à estimer.

A.4.1 Dérive et résidu

En notant $f(x)$ l'information auxiliaire connue partout, ce modèle suppose que la FA $Z(x)$ se décompose en un terme déterministe appelé « dérive » $m(x)$, fonction de $f(x)$, et un résidu aléatoire $R(x)$ (Eq. A.4).

$$\begin{aligned} Z(x) &= m(x) + R(x) \\ &= a + bf(x) + R(x) \end{aligned} \tag{A.4}$$

Si les coefficients a et b sont connus (généralement issus de la régression linéaire $Z(x)|f(x)$), alors la dérive $m(x)$ est connue en tout point, et le krigeage de la FA $Z(x)$ revient au **krigeage du résidu** $R(x)$. Cette méthode aisée à mettre en oeuvre présente cependant un inconvénient majeur : les coefficients a et b , bien que non biaisés, ne sont pas optimaux. Dès lors, le variogramme calculé à partir des résidus de la régression linéaire est biaisé par rapport à celui des « vrais » résidus (issus d'une décomposition optimale), et la variance d'estimation des résidus ne tient pas compte de l'incertitude d'estimation de la moyenne de $Z(x)$.

Pour pallier ces inconvénients, le **krigeage avec dérive externe** suppose les coefficients a et b inconnus, qui sont automatiquement recalés par voisinage lors du krigeage. Or l'estimation requiert le variogramme des résidus, et ces derniers ne sont pas directement accessibles. Ils sont alors approchés à partir d'une régression linéaire. Notons que pour éviter de privilégier certains points expérimentaux, la fonction de dérive externe $f(x)$ doit être plus régulière que la FA $Z(x)$ (Castelier, 1993).

A.4.2 Co-krigeage

Dans le co-krigeage, les informations auxiliaires sont considérées comme des FA. En notant $Z_1(x)$ la FA que l'on souhaite estimer, et $Z_2(x)$ l'information auxiliaire, le co-krigeage consiste à

estimer $Z_1(x)$ à partir des $Z_1(x_\alpha)$ mais également des $Z_2(x_i)$ (Eq. A.5), ou l'ensemble des x_α est noté S_1 , et celui des x_i , noté S_2 .

Si Z_1 et Z_2 sont connues aux mêmes points ($S_1 = S_2$), on dit qu'il y a « isotopie », le cas « hétérotopique » se référant à des ensembles S_1 et S_2 différents.

$$Z_1^*(x_0) = \sum_{\alpha \in S_1} \lambda_{1\alpha} Z_1(x_\alpha) + \sum_{i \in S_2} \lambda_{2i} Z_2(x_i) \quad (\text{A.5})$$

Variogramme croisé

Le variogramme croisé décrit la variabilité conjointe des FA $Z_1(x)$ et $Z_2(x)$. A un facteur 1/2 près, il est défini comme la covariance de leurs accroissements (avec un pas égal à h) en fonction de la distance h (Eq. A.6).

$$\gamma_{12}(h) = \frac{1}{2} E [(Z_1(x+h) - Z_1(x)) \cdot (Z_2(x+h) - Z_2(x))] \quad (\text{A.6})$$

Contrairement au variogramme « simple », le variogramme croisé peut être négatif quand $Z_1(x)$ et $Z_2(x)$ (et donc leurs accroissements) sont corrélés négativement. Si les deux FA ne sont pas corrélées spatialement, leur variogramme croisé est nul : $\gamma_{12}(h) = 0$.

Dans un cas hétérotopique, le variogramme croisé ne peut pas toujours être calculé. La structure croisée est alors approchée par le « pseudo-variogramme croisé » (Eq. A.7).

$$\Psi_{12}(h) = \frac{1}{2} E [(Z_2(x+h) - Z_1(x))^2] \quad (\text{A.7})$$

Système de co-krigeage

Le système de co-krigeage se construit en suivant la même démarche que pour le système de krigeage (cf. §A.3.1). L'équation A.8 exprime le système de co-krigeage obtenu pour des FA $Z_1(x)$ et $Z_2(x)$ de moyenne inconnue, qui fait intervenir les structures simples ($\gamma_{11}(h)$ et $\gamma_{22}(h)$) ainsi que la structure croisée ($\gamma_{12}(h)$).

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11}(x_\beta - x_\alpha) & \gamma_{12}(x_i - x_\alpha) & 1 & 0 \\ \gamma_{21}(x_\alpha - x_i) & \gamma_{22}(x_j - x_i) & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{1\alpha} \\ \lambda_{2i} \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{11}(x_0 - x_\alpha) \\ \gamma_{21}(x_0 - x_i) \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.8})$$

La variance d'estimation associée au co-krigeage ponctuel s'écrit selon l'équation A.9.

$$\sigma_E^2 = \sum_{\alpha \in S_1} \lambda_\alpha \gamma_{11}(x_0 - x_\alpha) + \sum_{i \in S_2} \lambda_i \gamma_{12}(x_0 - x_i) + \mu_1 \quad (\text{A.9})$$

A.4.3 Modèles de variogramme bivariable

Le co-krigeage requiert un modèle variographique bivariable valide, pour assurer la cohérence entre les structures spatiales simples et croisée. Trois modèles usuels, caractérisés par une complexité croissante, sont décrits ici pour le cas bivariable ; les deux premiers sont des cas particuliers du troisième, le modèle linéaire de co-régionalisation.

Soient deux fonctions aléatoires $Z_1(x)$ et $Z_2(x)$: le modèle à résidu suppose qu'il existe une relation simple de subordination entre les deux variables, tandis qu'elles sont en corrélation intrinsèque si leurs variogrammes simples et croisé sont tous proportionnels entre eux. Le modèle linéaire de co-régionalisation généralise la corrélation intrinsèque à plusieurs composantes spatiales.

Le modèle à résidu

Le modèle à résidu suppose que la variable $Z_2(x)$ se décompose comme la somme de $Z_1(x)$ et d'un résidu $R(x)$ spatialement non corrélé à $Z_1(x)$:

$$Z_2(x) = aZ_1(x) + b + R(x)$$

où $Cov(R(x), Z_1(x')) = 0 \quad \forall x, x'$.

En notant $\gamma_1(h)$, $\gamma_2(h)$, et $\gamma_R(h)$ les variogrammes simples de $Z_1(x)$, $Z_2(x)$, et $R(x)$, respectivement, les variogrammes simple et croisé relatifs à $Z_2(x)$ se décomposent selon l'équation A.10.

$$\begin{cases} \gamma_2(h) = \gamma_1(h) + \gamma_R(h) \\ \gamma_{12}(h) = \gamma_1(h) \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Le modèle de corrélation intrinsèque

Dans le modèle de corrélation intrinsèque, toutes les structures simples et croisées sont proportionnelles au même variogramme $\gamma(h)$. L'équation A.11 reprend sa forme condensée. Pour un modèle bivariable, $i, j = \{1, 2\}$; les notations plus générales sont cependant conservées dans ce paragraphe pour faciliter la compréhension de la généralisation à $n > 2$ variables.

$$\gamma_{ij}(h) = b_{ij}\gamma(h) \quad (\text{A.11})$$

Les relations entre les structures spatiales des différentes FA, considérées deux à deux, sont alors synthétisées par les paramètres suivants :

- **le coefficient de corrélation** entre deux FA $Z_i(x)$ et $Z_j(x)$ au même point x , ou entre leurs incréments $Z_i(x+h) - Z_i(x)$ et $Z_j(x+h) - Z_j(x)$ (Eq. A.12) ;

$$\rho_{ij} = b_{ij} / \sqrt{b_{ii} \cdot b_{jj}} \quad (\text{A.12})$$

- **le rapport des paliers** de leurs variogrammes (Eq. A.13).

$$\omega_{ij}^2 = b_{jj} / b_{ii} \quad (\text{A.13})$$

Le coefficient de corrélation ρ_{ij} quantifie le lien linéaire entre les deux FA $Z_i(x)$ et $Z_j(x)$, alors que le rapport des paliers ω_{ij}^2 caractérise l'amplitude relative de leurs variations.

Les variogrammes simple et croisé relatifs à $Z_2(x)$, par exemple, peuvent alors s'écrire en fonction des deux paramètres ρ_{12} et ω_{12} et du variogramme de $Z_1(x)$ (Eq. A.14).

$$\begin{cases} \gamma_2(h) = \omega_{12}^2 \gamma_1(h) \\ \gamma_{12}(h) = \rho_{12} \omega_{12} \gamma_1(h) \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

Le modèle linéaire de co-régionalisation

Le modèle linéaire de co-régionalisation généralise le modèle de corrélation intrinsèque à plusieurs *composantes spatiales* u , avec différentes corrélations ou des fluctuations d'amplitude différente. Dans ce modèle, les variogrammes simples et croisés sont des combinaisons linéaires des mêmes composantes $\gamma^u(h)$, une composante présente sur le variogramme croisé étant nécessairement présente sur les deux variogrammes simples correspondants.

Ce modèle peut donc être vu comme une combinaison linéaire de plusieurs composantes spatiales u , mutuellement non corrélées, et chacune en corrélation intrinsèque (Eq. A.15).

$$\gamma_{ij}(h) = \sum_u b_{ij}^u \gamma^u(h) \quad (\text{A.15})$$

A l'instar de ceux définis pour le modèle de corrélation intrinsèque, un coefficient de corrélation et un rapport de paliers peuvent être calculés pour chaque composante u (Eq. A.16 et A.17 pour deux FA $Z_1(x)$ et $Z_2(x)$).

$$\rho_{12}^u = \frac{b_{12}^u}{\sqrt{b_{11}^u \cdot b_{22}^u}} \quad (\text{A.16})$$

$$(\omega_{12}^u)^2 = \frac{b_{22}^u}{b_{11}^u} \quad (\text{A.17})$$

Annexe B

Remarque sur le cadre intrinsèque

Pour des composantes Y_i intrinsèques, quelques précisions sont nécessaires concernant les outils adéquats pour caractériser la variabilité spatiale le long du réseau (Chauvet, 1987).

B.1 Variogramme sur un bief

Considérons la concentration $Z_I(s) = \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s)$ sur le bief I , où les composantes Y_i sont des FAI. La variabilité de ces concentrations sur le bief I peut être appréhendée par leur variogramme $\gamma_I(h) = \frac{1}{2}E [(Z_I(s+h) - Z_I(s))^2]$, qui s'écrit également

$$\gamma_I(h) = \frac{1}{2}E \left[\left(\sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s+h) - \sum_{i \in S_I} W_i^I Y_i(s) \right)^2 \right].$$

La combinaison linéaire $\Delta_h Z_I(s) = Z_I(s+h) - Z_I(s) = \sum_{i \in S_I} W_i^I \Delta_h Y_i(s)$ est une Combinaison Linéaire Autorisée (CLA) dans un cadre non stationnaire : l'écriture sous forme d'accroissement $\Delta_h Y_i(s)$ garantit des coefficients de somme nulle. Ce variogramme (ou la covariance généralisée $K_I(h)$ associée) est donc autorisé ; il se développe selon l'équation B.1, où $\gamma_{ij}(h)$ est le variogramme croisé entre les composantes Y_i et Y_j .

$$\begin{aligned} \gamma_I(h) &= \frac{1}{2} \sum_{i \in S_I} \sum_{j \in S_I} W_i^I W_j^I E [(Y_i(s+h) - Y_i(s)) (Y_j(s+h) - Y_j(s))] \\ &= \sum_{i \in S_I} \sum_{j \in S_I} W_i^I W_j^I \gamma_{ij}(h) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Sous hypothèse d'indépendance des composantes Y_i associées aux filets, $\gamma_{ij}(h) = 0 \forall i \neq j$, et le variogramme des concentrations du bief I s'écrit $\gamma_I(h) = \sum_{i \in S_I} W_i^{I2} \gamma_i(h)$, $\gamma_i(h)$ étant le variogramme associé au filet i .

B.2 Variogramme entre deux biefs connectés

Soient deux biefs I et J , avec I en amont de J . Ces deux biefs n'ayant aucun point commun, le pseudo-variogramme est considéré (Eq. B.2).

$$\begin{aligned} \gamma_{IJ}(h) &= \frac{1}{2}E \left[(Z_J(s+h) - Z_I(s))^2 \right] \\ &= \frac{1}{2}E \left[\left(\sum_{i \in S_J} W_i^J Y_i(s+h) - \sum_{j \in S_I} W_j^I Y_j(s) \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Le bief J étant en aval du bief I , $S_I \subset S_J$; le pseudo-variogramme peut donc également s'écrire

$$\gamma_{IJ}(h) = \frac{1}{2}E \left[\left(\sum_{i \in S_I} (W_i^J Y_i(s+h) - W_i^I Y_i(s)) + \sum_{j \in S_J - S_I} W_j^J Y_j(s+h) \right)^2 \right].$$

En dehors du cadre stationnaire, cette combinaison linéaire des composantes Y_i n'est pas autorisée sans contraintes supplémentaires sur les coefficients W_i^I : elle ne peut s'écrire sous forme d'accroissement des Y_i . Tel quel, ce pseudo-variogramme croisé n'est donc pas approprié pour représenter la variabilité conjointe des concentrations sur deux biefs connectés.

B.3 Covariance d'accroissements entre deux biefs

Une solution pour s'assurer de l'autorisation d'une combinaison linéaire de FAI consiste à en considérer des accroissements. Les accroissements de $Z(s)$ étant également des accroissements de $Y_i(s)$, considérons les accroissements $\Delta_h Z_I(s)$ et $\Delta_h Z_J(s')$ avec le même pas h . Le (pseudo-)variogramme de ces accroissements se décompose en la somme des deux variogrammes sur les biefs considérés et de la covariance des accroissements (Eq. B.3), qui est examinée ici; elle est notée $K_{IJ}^\Delta(h)$.

$$\begin{aligned} \gamma_{IJ}^\Delta(h) &= \frac{1}{2}E \left[(\Delta_h Z_J(s') - \Delta_h Z_I(s))^2 \right] \\ &= \gamma_J(h) + \gamma_I(h) - Cov(\Delta_h Z_J(s'), \Delta_h Z_I(s)) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Sous hypothèse d'indépendance des composantes Y_i associées aux filets, la covariance d'accroissements se développe en fonction des covariances généralisées des filets $K_i(h)$ (Eq. B.4), avec $S_I \subset S_J$.

$$\begin{aligned} K_{IJ}^\Delta(h) &= Cov(Z_I(s+h) - Z_I(s), Z_J(s'+h) - Z_J(s')) \\ &= \sum_{i \in S_I} W_i^I W_i^J (2K_i(s' - s) + K_i(s' - s - h) + K_i(s' + h - s)) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

En résumé, le variogramme « à travers une confluence » - i.e. entre deux points situés sur des biefs différents - n'est pas nécessairement défini en dehors du cadre stationnaire, étant donné qu'il fait intervenir des combinaisons linéaires qui ne sont pas toujours autorisées. L'analyse structurale requerra donc soit des conditions d'autorisation, soit l'usage d'un outil plus adapté tel que la covariance d'accroissements, afin de garantir l'autorisation des combinaisons linéaires impliquées.

Pour l'estimation cependant, l'existence de l'erreur d'estimation et de sa variance étant assurée par les conditions d'autorisation, le recours à l'outil « variogramme des concentrations » n'induit pas de conditions supplémentaires.

Annexe C

Caractérisation de la qualité de l'eau des cours d'eau

Cet article intitulé « Caractérisation spatiale et temporelle de la qualité des Masses d'Eau Cours d'Eau » a été accepté pour publication dans la Revue des Sciences de l'Eau. Il a été co-écrit par quatre auteurs du Centre de Géosciences de MinesParistech : Edwige Polus, Chantal de Fouquet, Nicolas Flipo et Michel Poulin.

Résumé

Focalisé sur les indicateurs physico-chimiques soutenant la biologie des cours d'eau, l'article examine l'interpolation de ce type de mesures dans le temps et l'espace, pour le calcul des indices légaux requis par la Directive Cadre Européenne sur l'Eau. En effet, le calcul d'indicateurs statistiques, à partir d'une information très lacunaire pose problème. Différentes méthodes de calcul du quantile 90 par station sont-elles équivalents ? Comment cet indicateur varie-t-il spatialement ? Le Réseau National de Bassin français fournit-il suffisamment d'information pour une caractérisation pertinente de la qualité des eaux ?

Les sorties du modèle déterministe PROSE appliqué à la Seine, à pas de temps journalier, sont utilisées pour comparer différentes méthodes de calcul des indicateurs. Les résultats déduits du modèle exhaustif sont comparés à ceux calculés après un échantillonnage simulant celui du réseau de surveillance.

Deux calculs du quantile 90 temporel par station sont examinés : le calcul classique fondé sur la fonction de quantile empirique, et une méthode légèrement plus complexe, avec une pondération temporelle et une linéarisation de la fonction de quantile, qui atténue effectivement les biais induits par l'échantillonnage irrégulier durant l'année, ou découlant du nombre restreint de mesures. Trois méthodes de « spatialisation » sont ensuite testées, afin d'obtenir des pourcentages d'occurrence des quantiles par classe de qualité dans chaque « Masse d'Eau Cours d'Eau » : le « principe de défaillance » retient la station la plus défavorable ; la deuxième méthode calcule la proportion des stations par classe de qualité ; la dernière pondère chaque station par son « segment d'influence ». La spatialisation par segments d'influence des quantiles temporels au sein des « Masses d'Eau Cours d'Eau » améliore nettement les estimations des pourcentages d'occurrence, montrant la nécessité de la prise en compte de la localisation des stations lors du calcul d'un indice de qualité.

Abstract

This article aims to understand how to interpolate in space and time discrete measurements in order to calculate physico-chemical indicators in rivers, which are required by the European Water Framework Directive. Linked to this issue, a few questions are addressed. Are the different methods to calculate temporal 90-percentile at a given site equivalent? How does this legal indicator vary in space? Does the French National Basin Network provide enough information to make consistent water quality characterization?

The daily outputs of the PROSE model applied to the Seine River are used as proxies to compare different calculation methods of the 90-percentile. The results deduced from the exhaustive model are compared to those calculated after sampling the outputs according to the monitoring network sampling scheme.

Two calculations of the temporal 90-percentile by site are examined : the classical method based on the empirical percentile function and a method slightly complex that includes temporal weighting and linearization of the empirical percentile function. This second method reduces the estimation bias of the 90 percentile induced by irregular and/or few measurements.

Three methods for spatializing the 90 percentiles have been tested to obtain occurrence percentages of the percentiles for each quality class in each "Stream Water Body" : the "failure principle" consists in keeping only the worst site; the second one calculates the proportion of sites located in each quality class; the third one allocates an influence segment to each measurement site. Spatializing temporal percentiles in "Stream Water Bodies" by influence segments leads to a marked improvement of occurrence percentage estimations and reveals the necessity to take into account the spatial configuration of measurement sites when calculating a quality indicator.

Mots-Clefs

Directive Cadre sur l'Eau, indicateurs physico-chimiques, quantile 90, Masses d'Eau Cours d'Eau, estimation, incertitude, simulation, spatialisation.

Keywords

Water Framework Directive, physico-chemical indicators, 90-percentile, Stream Water Bodies, estimation, uncertainty, simulation, spatialization.

C.1 INTRODUCTION

En réponse à la préoccupation internationale concernant la qualité des eaux, le parlement européen adopte la Directive Cadre sur l'Eau (DCE) le 23 octobre 2000. Celle-ci vise à préserver la qualité des eaux ou à en restaurer le bon état écologique à l'horizon 2015 (Circulaire DCE 2005-12). Dans une étape préalable de caractérisation, la DCE préconise le découpage des eaux superficielles et souterraines européennes en unités d'évaluation nommées « masses d'eau », chaque pays étant responsable de la délimitation de ses « masses d'eau ». En France, les « masses d'eau » se rapportant aux eaux continentales de surface, et plus particulièrement aux rivières ou tronçons de rivières, sont dites « Masses d'Eau Cours d'Eau » ou MECE. Elles ont été délimitées selon un critère d'homogénéité biologique et physico-chimique du milieu (Sandre, 2008).

En attendant les classes de qualité uniformisées en Europe – annoncées pour 2009 –, l'état de ces MECE est actuellement caractérisé selon le Système français d'Evaluation de la Qualité des cours d'eau (SEQ-Eau). Ayant défini seize types d'altération de la qualité physico-chimique de l'eau, et recensé les différents indicateurs impliqués, le SEQ-Eau définit cinq classes de qualité (excellent, bon, moyen, mauvais, et très mauvais état) pour chacun d'eux (Ifremer, 2009). L'appartenance à une classe de qualité est déterminée par la valeur d'un critère statistique : la moyenne si l'on s'intéresse aux indicateurs biologiques, et le quantile 90 (c'est-à-dire la valeur dépassée dans 10% des cas) pour les indicateurs physico-chimiques, par exemple.

Dans ce travail, cinq « indicateurs physico-chimiques soutenant la biologie » sont considérés (nitrates NO_3^- , ammonium NH_4^+ , orthophosphates PO_4^{3-} , oxygène dissous O_{2d} , et matières en suspension MES), pour lesquels l'indice recommandé par la DCE est le quantile 90 annuel, en vertu de la sensibilité du milieu naturel aux pics de concentration. En effet, on cherche à estimer les pourcentages d'occurrence et les concentrations d'épisodes de pollution, qui, même de courte durée, peuvent se révéler très nuisibles pour l'écosystème.

Il a été montré (Bernard-Michel and de Fouquet, 2004; Bernard-Michel, 2006) que par station de mesure, le calcul de ce quantile était très biaisé et très imprécis à partir de prélèvements peu nombreux (moins d'une mesure par mois) ou préférentiels durant l'année (6 mesures en hiver et 12 en été, par exemple). Or la qualité des eaux françaises est surveillée par le Réseau National de Bassins français (RNB), avec généralement dix à douze mesures annuelles par station.

Nous tentons de répondre aux questions pratiques posées par le calcul d'un indice statistique (moyenne, quantile) à partir d'une information très lacunaire : comment le quantile 90 temporel varie-t-il spatialement ? Quelle est l'influence de la méthode de calcul sur les indices de qualité obtenus par MECE ? Les mesures du RNB sont-elles suffisantes pour caractériser adéquatement l'état des eaux ?

Afin de répondre à ces interrogations, une portion du réseau hydrographique de la Seine a été choisie comme site d'étude (Fig. C.1). Pour les masses d'eau correspondantes, nous disposons des mesures aux stations du RNB, ainsi que d'autres mesures hebdomadaires et d'un modèle déterministe qui en simule le fonctionnement écologique. L'idée est d'exploiter la résolution spatio-temporelle très fine des sorties du modèle pour connaître la « qualité réelle » des MECE, et ainsi déterminer le calcul d'indice de qualité le plus adéquat à partir des mesures effectivement disponibles.

Le modèle PROSE (Even et al., 1998, 2004, 2007; Flipo et al., 2004, 2007) est composé de trois modules complémentaires : hydrodynamique, transport et biogéochimie. Le module hydrodynamique est basé sur une formulation longitudinale monodimensionnelle des équations de Saint-Venant, résolues par différences finies (Hug, 1975). Le module de transport simule l'advection et la dispersion des substances conservatives et réactives, qu'elles soient dissoutes ou particulières. Le module biogéochimique consiste en une adaptation du modèle RIVE (Billen et al, 1994; Garnier et al. 1995). Plus de 300 km de la Seine, complétés par quelques dizaines de kilomètres de la Marne à l'amont de sa confluence avec la Seine (Fig. C.1) sont simulés. PROSE fournit des concentrations instantanées et ponctuelles en différentes substances – dénommées « valeurs PROSE » – au pas de temps de 20 minutes et au pas d'espace de 500 mètres environ, soit avec un maillage spatio-temporel très fin en comparaison des données disponibles. Avant d'utiliser les « valeurs PROSE » pour tester un calcul d'indice de qualité, deux vérifications sont nécessaires. La première consiste à comparer visuellement, pour chacune des stations de mesure, les mesures disponibles au pas mensuel et les résultats du modèle PROSE à midi, à la date du prélèvement (Fig. C.2). Cette comparaison entre mesures et résultats de PROSE effectuée pour l'ensemble des stations de mesure nous donne une première indication sur la validité du modèle PROSE comme outil de simulation du fonctionnement biogéochimique de la Seine.

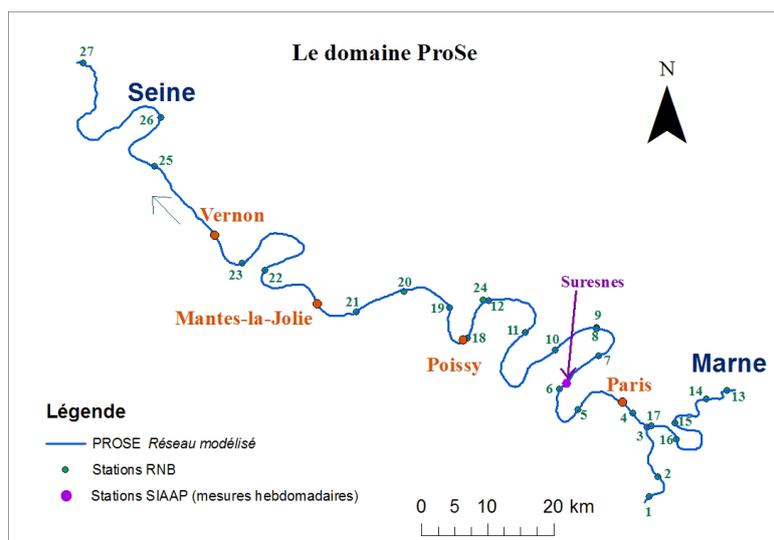


FIGURE C.1 – Réseau modélisé par PROSE et localisation des 27 stations du RNB.

La seconde vérification porte sur la variabilité temporelle au pas de temps hebdomadaire. L'objectif est de s'assurer que la variabilité temporelle des résultats de PROSE est réaliste. Le variogramme temporel des valeurs PROSE échantillonnées à pas hebdomadaire est comparé à celui d'un deuxième ensemble de mesures, au pas de temps hebdomadaire, également disponible sur le domaine. Cette variabilité sera testée pour des intervalles de une à cinq semaines (Fig. C.3). Malgré des écarts notables, notamment pour les orthophosphates (PO_4^{3-}) et les matières en suspension (MES), la concordance de ces variogrammes est jugée suffisante pour valider le modèle PROSE au pas hebdomadaire.

Nous supposons enfin que la variabilité infra-hebdomadaire des différents indicateurs est également reproduite par PROSE de façon suffisamment réaliste. Ce point a été vérifié pour l'oxygène dissous, variable pour laquelle des mesures au pas de temps 15 minutes sont disponibles (Poulin, 2006), et lors d'études spécifiques locales (Martin, 2001).

Ce qui précède nous conduit à utiliser les résultats de PROSE pour constituer une population statistique de référence. Cet ensemble dit « de référence » est constitué des valeurs journalières calculées à midi pour toutes les mailles de calcul, au pas de 500 mètres environ.

Le deuxième ensemble de valeurs est un sous-échantillonnage des résultats de PROSE au droit des stations du RNB et aux dates de mesure. Deux ensembles de données issus des valeurs PROSE sont donc disponibles : la « référence », au pas de temps journalier et au pas de 500 mètres et l'échantillonnage (spatial et temporel) de ces valeurs aux lieux et dates des mesures du RNB.

Dans la suite, seule la réalité PROSE est désormais considérée, afin de comparer les résultats de différentes méthodes de calcul à une référence parfaitement connue. L'échantillonnage RNB n'intervient plus qu'à travers le lieu et la date des mesures. Deux méthodes de calcul du quantile 90 temporel, et trois méthodes de spatialisation de ce quantile à partir de l'échantillonnage RNB sont comparées, et les écarts par rapport à la « référence PROSE » sont examinés. La précision des indicateurs actuels est ainsi quantifiée empiriquement.

La DCE préconise l'attribution d'un unique indice de qualité à chaque MECE. Pour une étude détaillée des performances des indicateurs, nous préférons indiquer ici un pourcentage d'occurrence spatial dans chaque classe de qualité afin de mettre en évidence la variabilité de l'indice temporel au sein d'une MECE. Le pourcentage d'occurrence de référence est égal à la proportion de points appartenant à chaque classe de qualité. A partir de l'échantillonnage PROSE, le quantile

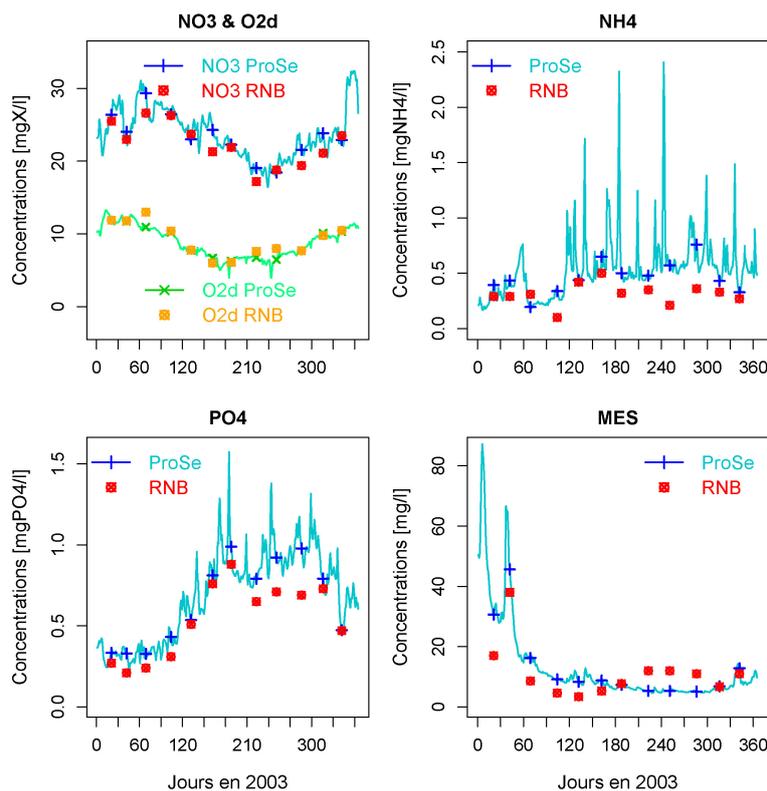


FIGURE C.2 – Comparaison des chroniques fournies par PROSE et mesurées par le RNB pour les différents indicateurs. Exemple de la station 10.

temporel est d'abord calculé par station puis spatialisé selon différentes méthodes, afin d'attribuer un pourcentage d'occurrence dans chaque classe de qualité.

Une étude de sensibilité au nombre de stations par MECE complète cette étude.

C.2 SITE D'ÉTUDE : LA SEINE

Le site d'étude comporte 225 km de cours d'eau le long de la Seine, dont environ 14 km à l'amont de sa confluence avec la Marne, et 36 km le long de la Marne (Fig. C.1). Les limites amont sur la Seine et sur la Marne se situent approximativement à l'entrée de la région parisienne. La longueur totale de la Seine passant par cette grande région urbanisée est d'environ 80 km. La partie centrale du bassin versant de la Seine est constituée des plaines agricoles de l'Île de France, parmi les plus fertiles du territoire français, et de vastes forêts domaniales et privées entourant l'agglomération parisienne. Cette dernière concentre 10 millions d'habitants soit environ 60% de la population du bassin versant de la Seine sur moins de 2% de sa surface. Les efforts accomplis depuis de nombreuses décennies en matière de collecte et de traitement des eaux usées industrielles et urbaines ont permis d'améliorer considérablement la qualité de l'eau de la Seine. Avec un débit moyen de 500 m³/s et un débit d'étiage de 200 m³/s, la capacité de dilution du fleuve Seine est limitée, ce qui contraint les riverains à des niveaux élevés d'épuration de leurs rejets par temps sec et pose de plus le problème des rejets de temps de pluie lorsque le réseau de collecte ne permet plus d'acheminer la totalité des eaux ruisselées vers les stations d'épuration.

La caractérisation objective de la qualité de l'eau de ce système fortement impacté, soumis à des

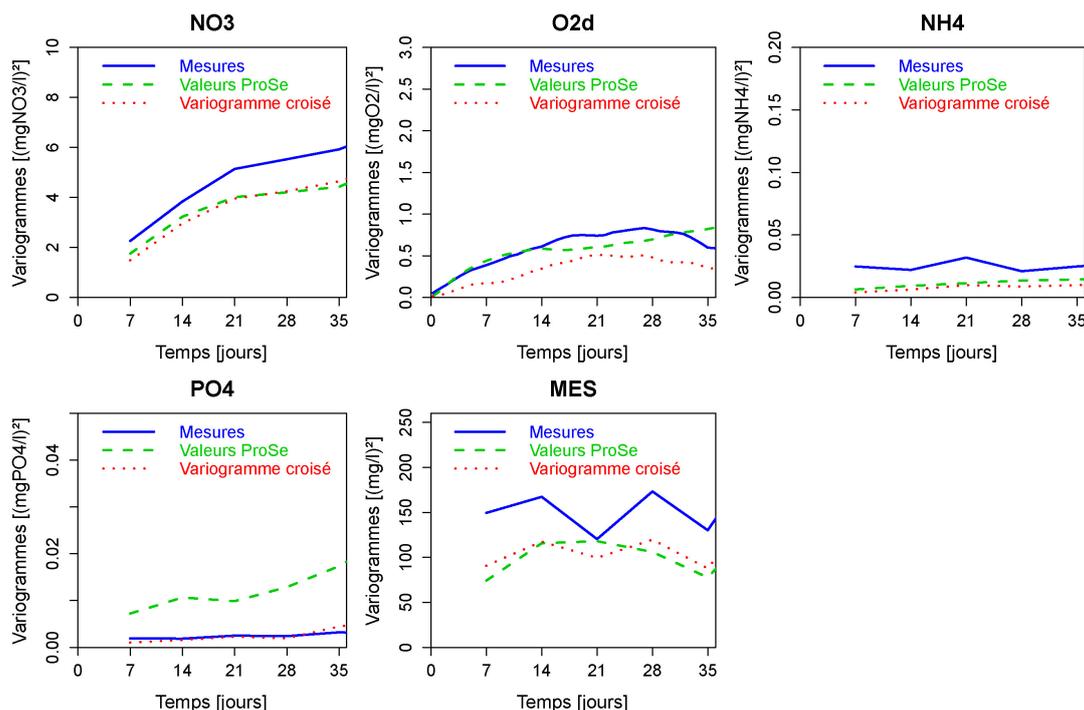


FIGURE C.3 – Comparaison de la variabilité à petit pas de temps des différents indicateurs simulés par PROSE et mesurés. Variogrammes temporels simples et croisés des valeurs instantanées, calculés à pas hebdomadaire, à Suresnes.

apports polluants hautement variables, présente un intérêt majeur pour les scientifiques et les gestionnaires.

Le modèle PROSE a été mis en oeuvre pour simuler la qualité de l'eau des années récentes, bien documentées, parmi lesquelles l'année 2003, sur laquelle cette étude se concentre.

C.3 MÉTHODES

C.3.1 Les méthodes de calcul du quantile 90 temporel

Le quantile k d'une population est défini comme la valeur α telle que $k\%$ de la population lui sont inférieurs, Z désignant le « paramètre » et x la localisation considérés :

$$q_k = \alpha \Leftrightarrow P(Z(x) \leq \alpha) = k \quad (\text{C.1})$$

Dans cet article, seul le quantile 90 est considéré.

Pour l'oxygène dissous, c'est le « quantile 90 après classement des valeurs par ordre décroissant », qui a été considéré (ce qui est équivalent, en statistique, au quantile 10). En effet, contrairement aux autres indicateurs considérés, une MECE est en bon état pour des concentrations élevées en oxygène dissous.

Nous présentons ici deux méthodes de calcul du quantile 90 temporel.

Méthode classique

Pour le calcul du quantile 90 temporel, chaque agence de l'eau utilise actuellement sa propre méthode, essentiellement basée sur les dires d'experts. Nous retenons ici comme « méthode classique » le calcul fondé sur les statistiques classiques. En chaque station, le quantile 90 temporel est obtenu par inversion de la fonction de quantile empirique, qui est une fonction en escalier. En pratique, les n valeurs mesurées durant l'année sont classées par ordre croissant (deux mesures identiques comptant comme deux valeurs différentes). Le quantile 90 est alors la valeur de rang i tel que $(i - 1)/n \leq 0.9 \leq i/n$, ce qui revient à attribuer un poids égal à $1/n$ à chaque mesure. Par exemple, avec $n = 11$ mesures dans l'année, le quantile 90 est la valeur de rang i tel que $(i - 1) \leq 0.9n \leq i$, soit $i = 10$. Après classement par ordre croissant, l'avant-dernière valeur est retenue comme quantile 90.

Méthode améliorée

Ce calcul par station peut être amélioré pour tenir compte des irrégularités et des lacunes de l'échantillonnage temporel (Bernard-Michel, 2006). La « méthode améliorée » comprend deux étapes illustrées par la figure C.4.

Tout d'abord, les données sont pondérées par des segments d'influence qui représentent la « durée d'influence » de chaque point. Les limites des segments sont les dates de début et de fin de l'année considérée, ainsi que les médiatrices entre dates de mesures consécutives. Le poids de chacune des n mesures ne vaut plus $1/n$, mais est égal à la longueur de son segment d'influence rapportée à l'année considérée. La pondération par segments d'influence revient à une simplification du krigeage temporel, qui suffit en pratique pour des calculs à une dimension (Bernard-Michel et al., 2005). Cette pondération temporelle permet d'atténuer les effets des lacunes ou du caractère préférentiel de l'échantillonnage temporel (Eq. C.2). La fonction de quantile empirique est calculée à partir des données pondérées, puis linéarisée par morceaux (Eq. C.3 et C.4).

Remarque : afin de diminuer le biais dû au faible nombre de mesures (le quantile étant une statistique basée sur la loi des grands nombres), la fonction de linéarisation permet de fixer arbitrairement un minimum et maximum auxquels un segment d'influence de longueur nulle est associé. En l'absence de bornes spécifiées par l'utilisateur, le minimum est fixé à 0 et le maximum est ici calculé arbitrairement à partir du plus grand écart observé entre deux valeurs successives supérieures à la médiane : $max = Z_{(x)} + \alpha * \underbrace{max}_{i \geq n/2} (Z_{(i+1)} - Z_{(i)})$, avec $\alpha = 1.5$.

Cependant, le nombre de mesures étant ici supérieur ou égal à 10 pour toutes les stations, les minimum et maximum n'interviennent pas dans le calcul du quantile 90 (Eq. C.2, C.3 et C.4), où

- p_i sont les probabilités associées aux données $Z_{(i)}$;
- c_i sont les probabilités cumulées associées aux données $Z_{(i)}$;
- l_i sont les « durées d'influence » associées aux données $Z_{(i)}$;
- n est le nombre de mesures ;
- q_k est le quantile k .

$$p_0 = p_n = \frac{1}{2 * n} \quad p_i = \frac{l_i}{l_{tot}} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad (C.2)$$

$$c_0 = \frac{1}{2n} \quad c_n = 1 - \frac{1}{2n} \quad c_i = \frac{1}{2n} + \frac{1 - \frac{1}{n}}{l_{tot}} \sum_{j=1}^i l_j \quad (C.3)$$

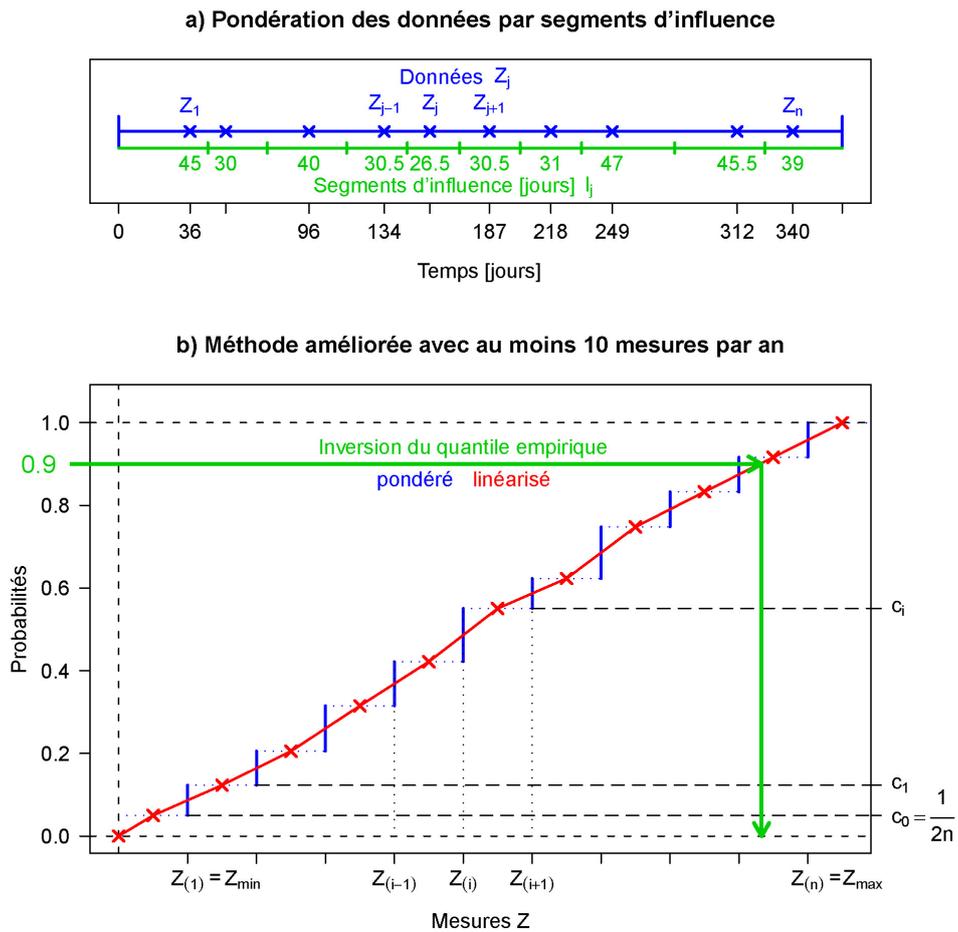


FIGURE C.4 – Principe de calcul du quantile 90 selon la « méthode améliorée ». a) Définition des segments d'influence à partir des mesures. b) Pondération et linéarisation du quantile empirique ; $Z_{(i)}$ désigne la valeur de rang i , après classement des mesures Z_j par ordre croissant.

$$q_k = \frac{Z_{(i-1)} + Z_{(i)}}{2} + \left(\frac{Z_{(i+1)} - Z_{(i-1)}}{2} \right) \frac{c_k - c_{i-1}}{c_i - c_{i-1}} \quad \text{pour } c_k \in [c_{i-1}; c_i] \quad (\text{C.4})$$

Si la « méthode classique » présente le grand avantage d'être simple et donc facilement applicable par tout acteur de la qualité de l'eau, elle n'en présente pas moins plusieurs inconvénients auxquels la « méthode améliorée » permet de remédier, moyennant une mise en œuvre un peu plus complexe. C'est par exemple le cas des données irrégulières (échantillonnage préférentiel, lacunes, etc.) ou peu nombreuses, pour lesquelles les biais importants induits par la « méthode classique » sont réduits par la « méthode améliorée » (Bernard-Michel, 2006).

C.3.2 Méthodes de spatialisation des quantiles 90

Afin d'attribuer, par MECE, un pourcentage d'occurrence des quantiles 90 dans chaque classe de qualité, il est nécessaire de spatialiser les quantiles calculés aux stations du RNB. En d'autres termes, les quantiles 90 obtenus aux stations du RNB doivent être étendus à l'ensemble de la MECE. Nous proposons trois méthodes de spatialisation de complexité croissante (Fig. C.5), applicables quel que soit l'ordre ou la méthode de calcul du quantile considéré.

La première méthode, fondée sur un « principe de défaillance », étend à toute la masse d'eau le quantile 90 le plus défavorable des stations de cette masse d'eau ; elle est dite « méthode **pénalisante** » (Fig. C.5a).

En référence aux calculs statistiques usuels, la seconde méthode attribue un même poids à toutes les stations d'une masse d'eau, qu'elles soient proches ou éloignées : c'est la « méthode **équi-pondérée** ». Le pourcentage d'occurrence dans une classe de qualité est égal à la proportion de stations (dans la MECE considérée) pour lesquelles le quantile 90 appartient à cette classe (Fig. C.5b).

Enfin, la « méthode **pondérée** » généralise la pondération par segment d'influence. Un segment d'influence (une longueur d'influence, cette fois) est associée à chaque station, afin d'intégrer la distance – variable – entre stations au calcul du pourcentage d'occurrence par classe de qualité. Le pourcentage d'occurrence dans une classe de qualité est alors égal à la longueur totale des segments d'influence appartenant à cette classe divisée par la longueur de la MECE (Fig. C.5c).

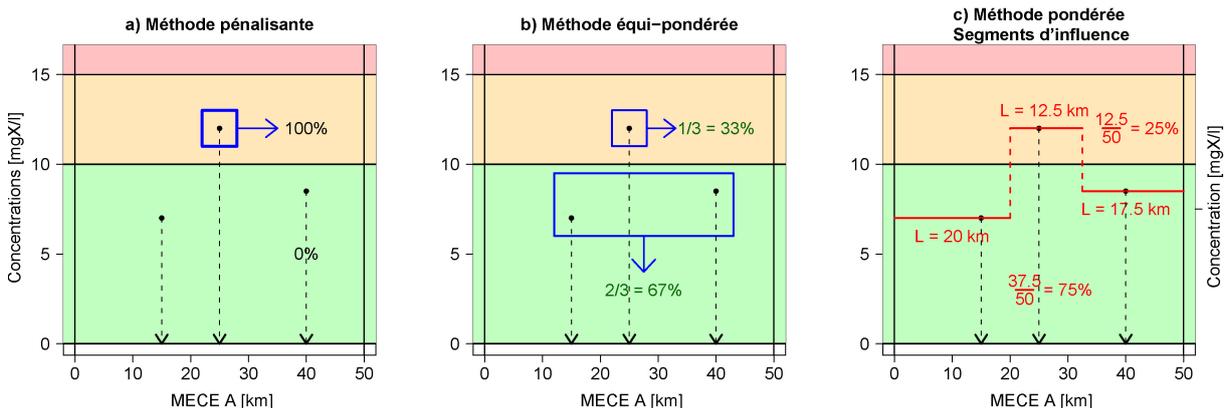


FIGURE C.5 – Les différentes méthodes de spatialisation des quantiles 90 pour obtenir les pourcentages d'occurrence dans chaque classe de qualité.

Remarque : Une pondération spatio-temporelle pourrait être définie pour des stations irrégulièrement espacées et des mesures non nécessairement synchrones. Cette généralisation n'a pas été examinée.

C.4 RÉSULTATS & DISCUSSION

Le modèle PROSE est utilisé comme maquette pour tester le calcul du quantile 90 temporel proposé par Bernard-Michel (2006) et sa spatialisation. A partir de l'échantillonnage PROSE qui reproduit l'échantillonnage aux stations du RNB, les résultats obtenus par les deux méthodes de calcul, « méthode classique » et « méthode améliorée » (cf. §C.3.1), sont comparés et confrontés aux quantiles calculés à l'aide de la population (au sens statistique d'ensemble de valeurs) de référence des valeurs PROSE (pas journalier, pas d'espace 500 mètres). Les quantiles 90 calculés selon la « méthode améliorée » sont toujours spatialisés suivant la « méthode pondérée » (cf. §C.3.2). Par souci de clarté, la « méthode améliorée pondérée » est simplement désignée comme « méthode améliorée » dans la suite.

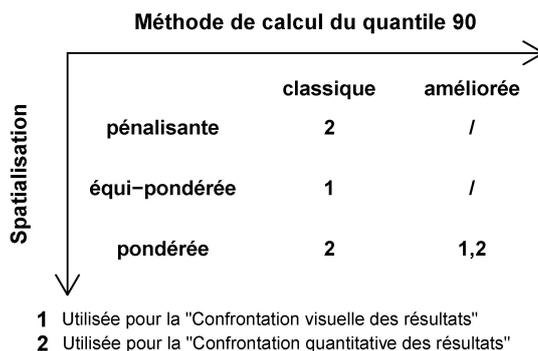


FIGURE C.6 – Méthodes de calcul du quantile 90 et de spatialisation de ce quantile.

C.4.1 Confrontation visuelle des résultats

Les illustrations se présentent de manière identique pour toutes les variables. Les pourcentages d'occurrence sont indiqués pour chacune des classes du SEQ-Eau, illustrées par les couleurs conventionnelles (bleu : excellent état, vert : bon état, jaune : état moyen, orange : mauvais état, rouge : très mauvais état, selon les limites de classes réglementaires). Afin de visualiser la variabilité spatiale du quantile 90 au sein d'une MECE, les limites des six MECE concernées sont matérialisées par des lignes verticales tout au long du domaine modélisé. Les lignes verticales en tirets représentent les limites amont de chacune des deux MECE situées respectivement sur la Marne et sur la Seine à l'amont de leur confluence (cf. Fig. C.1). Cette dernière correspond à la première ligne verticale continue (cf. Fig. C.7, $pk \approx 650$).

Pour chaque classe de qualité, le pourcentage d'occurrence obtenu par la « méthode classique équi-pondérée » est indiqué en noir, et celui fourni par la « méthode améliorée » en vert, le pourcentage d'occurrence de référence étant reporté en bleu.

Pour les nitrates (Fig. C.7), tous les quantiles 90 temporels se situent dans une même classe de qualité, et affichent une très faible variabilité spatiale. La « méthode classique équi-pondérée » ainsi que la « méthode améliorée » fournissent un pourcentage d'occurrence égal au pourcentage de référence.

Pour les paramètres variant de manière significative sur le domaine, tels l'ammonium, l'oxygène dissous et les matières en suspension, les résultats sont quelque peu différents.

Pour l'ammonium, les pourcentages d'occurrence calculés via la « méthode améliorée » sont généralement plus proches des pourcentages de référence (Fig. C.8a). C'est par exemple le cas

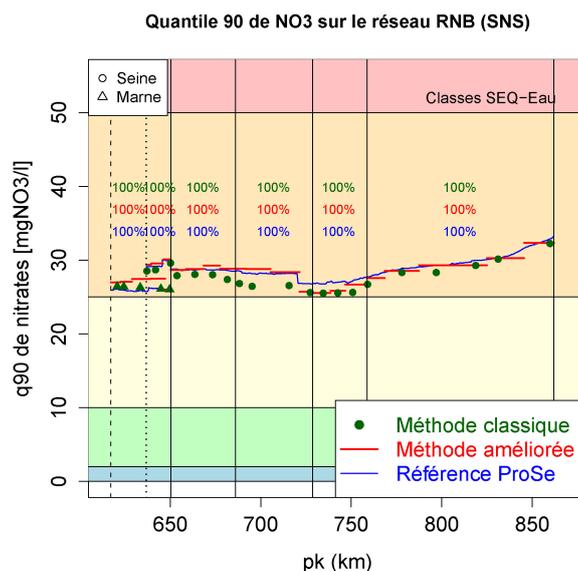


FIGURE C.7 – Caractérisation de l'état des eaux selon le SEQ-Eau pour les nitrates ; les pourcentages d'occurrence des quantiles 90 temporels dans chaque classe de qualité sont indiqués par MECE, délimitées suivant les pk [km].

de la MECE la plus en aval : selon la « méthode classique équi-pondérée », 33% de la MECE présentent un très mauvais état écologique, contre 48% suivant la « méthode améliorée », alors que le pourcentage d'occurrence de référence dans cette classe de qualité est de 45%. Le gain de précision de la « méthode améliorée » n'est donc pas négligeable par rapport à la « méthode classique équi-pondérée ».

La même observation peut être effectuée globalement pour l'oxygène dissous ; les écarts entre les pourcentages d'occurrence obtenus par les méthodes « classique » et « améliorée » étant toutefois moindres (Fig. C.8b).

Cette observation est également valable pour les matières en suspension, lorsque le quantile 90 ne varie que légèrement au sein de la MECE (Fig. C.9a). Dans le cas contraire, c'est la « méthode classique équi-pondérée » qui fournit des pourcentages d'occurrence plus proches des pourcentages de référence.

Pour les orthophosphates, l'allure générale du quantile 90 de référence est relativement bien approchée par les deux méthodes, et il en est de même des pourcentages d'occurrence par classe de qualité (Fig. C.9b).

Cependant, aucune de ces deux méthodes ne reproduit correctement les changements de classe du quantile 90. Or ce sont justement ces changements de classe, jusqu'alors déterminés principalement par expertise, qu'il est important de positionner le plus fidèlement possible par rapport à la réalité. La « méthode améliorée » fournit toutefois des pourcentages d'occurrence plus proches de la référence, ce qui témoigne de l'intérêt de cette méthode par rapport à la « méthode classique ».

Cette première analyse montre donc que les résultats sont analogues (NO_3^-), ou quand ils sont différents (NH_4^+ , O_{2d} , PO_4^{3-} , MES), c'est globalement la « méthode améliorée » qui donne des pourcentages d'occurrence plus proches de la référence.

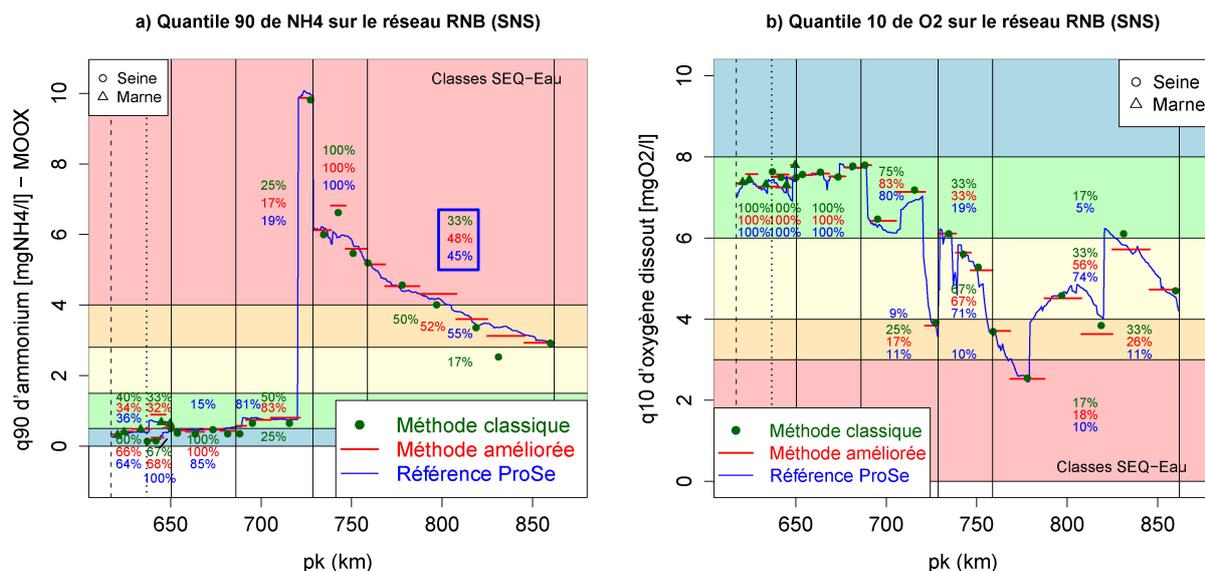


FIGURE C.8 – Caractérisation de l'état des eaux selon le SEQ-Eau pour l'ammonium (a) et l'oxygène dissous (b); les pourcentages d'occurrence des quantiles 90 temporels dans chaque classe de qualité sont indiqués par MECE, délimitées suivant les pk [km].

C.4.2 Confrontation quantitative des résultats

Afin d'affiner l'analyse, le tableau C.1 présente la comparaison quantitative des quantiles 90 obtenus à l'aide des deux méthodes de calcul par rapport au quantile de référence. Outre les différences par rapport à la référence, ce tableau reprend également les écarts (valeur absolue des différences) relatifs au quantile 90 de référence ainsi que les écarts quadratiques absolus.

[X]	Méthode classique pénalisante			Méthode classique pondérée			Méthode améliorée pondérée		
	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]
NO ₃ ⁻	0.036	0.017	2.073	0.023	-0.014	0.676	0.027	0.016	0.808
NH ₄ ⁺	1.449	1.438	6.812	0.142	-0.032	0.271	0.149	0.089	0.240
PO ₄ ³⁻	0.496	0.491	0.132	0.072	-0.023	0.008	0.098	0.060	0.010
O _{2d}	0.142	0.119	1.749	0.058	0.025	0.276	0.057	0.019	0.278
MES	0.091	0.001	10.536	0.203	-0.139	45.065	0.199	0.058	41.669

TABLE C.1 – Ecarts relatifs (E rel.), différences relatives (D rel.) et écarts quadratiques absolus (E^2 abs.) moyens entre quantiles 90 calculés et quantiles de référence.

Ces statistiques sont calculées en moyenne sur tout le domaine. Pour garantir la pertinence de la comparaison, les quantiles calculés par les deux méthodes sont spatialisés, étant donné le faible nombre de stations par MECE. Si les quantiles calculés à l'aide de la « méthode améliorée pondérée » sont connus en tout point via les segments d'influence spatiaux, ce n'est pas le cas des quantiles fournis par la « méthode classique », uniquement disponibles aux stations. Deux méthodes de spatialisation de ces derniers quantiles ont été testées : la « méthode pénalisante » et la « méthode pondérée » (cf. Fig. C.5).

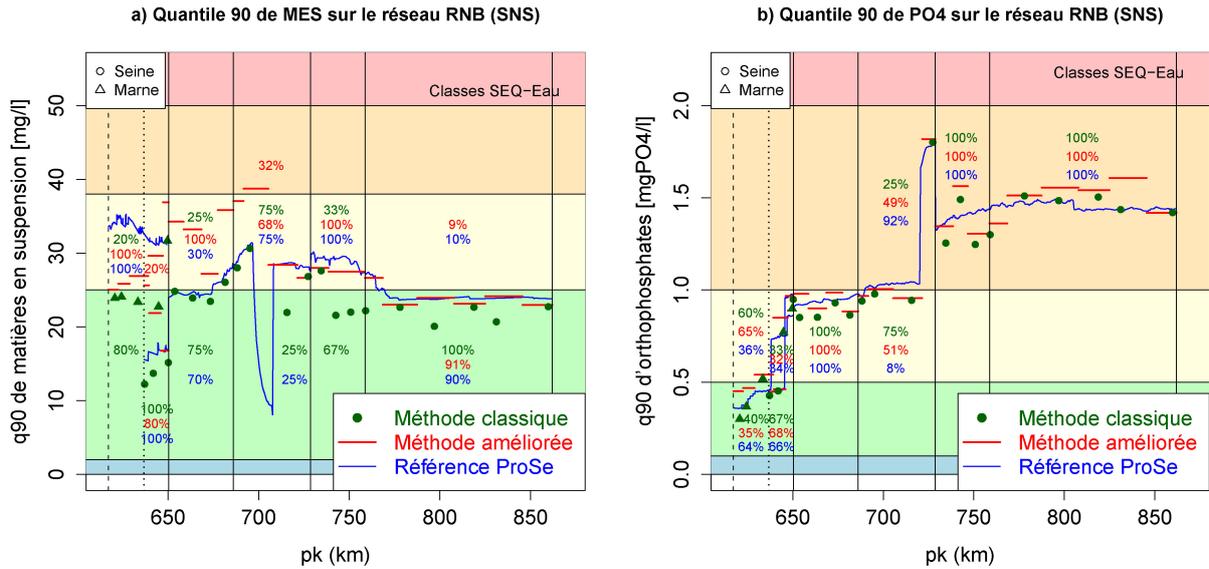


FIGURE C.9 – Caractérisation de l'état des eaux selon le SEQ-Eau pour les matières en suspension (a) et les orthophosphates (b); les pourcentages d'occurrence des quantiles 90 temporels dans chaque classe de qualité sont indiqués par MECE, délimitées suivant les pk [km].

La comparaison des deux premières colonnes (« méthode classique pénalisante » vs. « méthode classique pondérée ») permet de juger de l'importance de la spatialiséation des quantiles 90, tandis que la confrontation des deux dernières (« méthode classique pondérée » vs. « méthode améliorée pondérée ») traduit l'influence de la pondération des données et de la linéarisation de la fonction de quantile empirique.

Toutes variables confondues, la « méthode pondérée » donne généralement de meilleurs résultats en termes d'écart au quantile de référence, même si l'amélioration reste modeste lorsque la « méthode pénalisante » fournit déjà de faibles écarts. C'est par exemple le cas des nitrates, variable qui, rappelons-le, fluctue peu sur le domaine. En revanche, pour des indicateurs présentant une forte variabilité spatiale, tels que l'oxygène dissous, les orthophosphates ou l'ammonium, les écarts relatifs sont plus importants, et l'apport de la « méthode pondérée » devient plus tangible : les écarts sont réduits d'un ordre de grandeur. Pour l'ammonium par exemple, l'écart relatif moyen égal à 145% avec la « méthode classique pénalisante », ne vaut plus que 14% avec la « méthode classique pondérée » (cf. Tab. C.1).

Ces observations montrent la grande importance de la spatialiséation des indices temporels.

Pour les matières en suspension, les quantiles 90 sont plus proches des quantiles de référence lorsqu'ils sont calculés par la « méthode classique pénalisante ». Ceci pourrait s'expliquer par la dynamique contrastée des matières en suspension, qui présentent une concentration faible la plupart du temps, mais des concentrations très élevées épisodiquement, notamment lors d'évènements pluvieux. Pour que le quantile 90 calculé soit représentatif du quantile de référence, il faudrait que ces épisodes aient été échantillonnés, ce qui n'est pas nécessairement le cas avec une seule mesure par mois – la fréquence d'échantillonnage moyenne du RNB. Dès lors, contrairement à la « méthode pondérée », qui combine des quantiles 90 (temporels) sous-estimés lorsqu'un épisode n'a pas été échantillonné, la « méthode pénalisante », qui retient le quantile 90 le plus dégradant, a plus de chances de se rapprocher du quantile de référence, ce dernier étant influencé par de plus nombreux pics de concentrations.

Enfin, les écarts par rapport à la référence obtenus respectivement à l'aide des méthodes « classique » et « améliorée » présentent approximativement le même ordre de grandeur. Les matières en suspension mises à part, c'est généralement la « méthode classique » qui fournit des écarts légèrement plus faibles.

En conclusion, ces résultats quantitatifs montrent l'adéquation de la « méthode pondérée » pour la spatialisation du quantile 90. Bien que la « méthode améliorée » soit théoriquement la mieux adaptée (Bernard-Michel, 2006), l'amélioration induite par la linéarisation et la pondération du quantile empirique n'est pas flagrante ici, du fait de la régularité de l'échantillonnage temporel du RNB – malgré quelques lacunes. Avec 10 mesures ou plus par an, l'irrégularité des dates de prélèvement (ce qui n'est pas le cas pour les stations retenues et l'année 2003) engendre des conséquences beaucoup plus graves sur le calcul du quantile que leur effectif réduit. La pondération apparaît donc plus importante que la linéarisation.

Cette analyse montre également l'importance de la localisation spatiale des stations, avec comme corollaire la nécessité de spatialiser les quantiles 90.

Par ailleurs, la forte variabilité spatiale de certains quantiles 90 temporels mérite d'être notée étant donné le critère d'homogénéité sur lequel est basé le découpage des MECE. Un découpage évolutif des MECE est-il envisageable, pour s'adapter à l'apparition ou à la disparition de singularités ? La station d'épuration Seine Aval, par exemple, mériterait d'être considérée comme une discontinuité en raison de la variation abrupte des concentrations en ammonium, oxygène dissous et orthophosphates qu'elle provoque (cf. Fig. C.8 et C.9b, $pk \approx 720$).

C.4.3 Sur un réseau moins informé

Le RNB étant particulièrement dense aux alentours de Paris sur le domaine modélisé par PROSE, il est intéressant de se ramener au cas d'un réseau plus clairsemé, plus proche des conditions habituelles de calcul d'un indice de qualité d'une MECE. La plupart des masses d'eau ne comportant en effet qu'une ou deux stations informées mensuellement, nous avons arbitrairement « écarté » la moitié des stations du domaine d'étude.

Le tableau C.2 présente les moyennes des différences, des écarts et des écarts quadratiques obtenus à partir de ce réseau moins informé, pour les deux méthodes de calcul du quantile 90 (« classique » et « améliorée ») et pour deux méthodes de spatialisation (« pénalisante » et « pondérée », cf. Fig. C.5).

[X]	Méthode classique pénalisante			Méthode classique pondérée			Méthode améliorée pondérée		
	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]	E rel. [mg _X /l]	D rel. [mg _X /l]	E^2 abs. [mg _X /l]
NO ₃ ⁻	0.028	-0.001	0.946	0.028	-0.018	1.047	0.028	0.008	1.014
NH ₄ ⁺	1.442	1.375	6.779	0.441	0.240	1.854	0.410	0.311	1.841
PO ₄ ³⁻	0.495	0.479	0.131	0.133	0.022	0.025	0.147	0.107	0.029
O _{2d}	0.036	0.024	0.224	0.024	0.006	0.097	0.046	0.039	0.383
MES	0.109	-0.017	14.394	0.202	-0.123	43.63	0.229	0.093	52.095

TABLE C.2 – *Écarts relatifs (E rel.), différences relatives (D rel.), et écarts quadratiques absolus (E^2 abs.) moyens entre quantiles 90 calculés et quantiles de référence en conservant une station du RNB sur deux.*

Concernant le calcul du quantile 90 temporel aux stations, les méthodes « classique » et « améliorée » fournissent des résultats quasiment semblables et très proches de la référence, qui s'expliquent comme précédemment par la régularité temporelle des mesures.

Par rapport à l'échantillonnage spatial effectivement disponible, la dégradation des résultats est sensible, excepté pour la « méthode classique pénalisante », qui fournit des écarts très semblables à ceux obtenus en considérant toutes les stations. La suppression de la moitié des stations de mesures augmente considérablement les écarts à la référence, notamment pour l'ammonium et les orthophosphates ; autrement dit, augmenter le nombre de stations de mesures peut modifier sensiblement les résultats. Par exemple, par rapport au quantile de référence, l'écart relatif moyen du quantile 90 d'ammonium obtenu avec la « méthode classique pondérée » est de 44% en considérant une station sur deux (cf. Tab. C.2), contre 14% avec la totalité des stations (cf. Tab. C.1). Pour l'ammonium et les orthophosphates, les écarts sont nettement plus réduits en spatialisant par la « méthode pondérée » plutôt que par la « méthode pénalisante ». Ainsi, l'écart relatif moyen du quantile 90 d'orthophosphates (par rapport au quantile de référence), qui vaut 50% avec la « méthode pénalisante », est réduit à 13% en spatialisant selon la « méthode pondérée ». Dans une moindre mesure, cette méthode de spatialisation permet également d'atténuer l'écart relatif moyen du quantile 90 d'oxygène dissous (par rapport au quantile de référence).

En revanche, c'est encore une fois l'inverse pour les matières en suspension, la « méthode pénalisante » conduisant à des quantiles 90 plus proches de la référence.

La méthode de spatialisation a peu d'influence sur les quantiles 90 de nitrates, ces derniers étant très peu variables.

C.5 CONCLUSION

Deux méthodes de calcul du quantile 90 temporel ont été comparées, une « méthode classique » et une « méthode améliorée », cette dernière permettant de prendre en compte un pas d'échantillonnage variable des observations.

Différentes méthodes de spatialisation des quantiles 90 temporels ont été testées pour tenter de reconstituer au mieux l'évolution spatiale des indicateurs le long d'un cours d'eau. Sur le domaine étudié, la « méthode pondérée » conduit le plus souvent à des écarts par rapport à la référence sensiblement inférieurs à ceux de la « méthode pénalisante ». Cette méthode (« méthode pondérée ») peut être de plus améliorée (« méthode améliorée ») pour tenir compte d'éventuelles irrégularités de l'échantillonnage (Bernard-Michel, 2006).

Par ailleurs, sur la portion de réseau hydrographique modélisée par ProSe, le quantile 90 temporel fluctue entre différentes classes de qualité à l'intérieur de certaines MECE comprenant plusieurs sites de surveillance de la qualité de l'eau. Or la DCE demande de caractériser chaque MECE par un indice unique de qualité. Se pose alors la question de l'indice à choisir pour synthétiser cette information spatiale. Faut-il retenir la moyenne spatiale de tous les quantiles temporels d'une MECE, ou la moyenne temporelle des quantiles spatiaux de cette MECE, ces deux résultats étant généralement différents ? Une autre possibilité serait d'appliquer le « principe de défaillance » en calculant un quantile spatio-temporel sur l'ensemble des données disponibles pour une masse d'eau.

Finalement, il serait également possible de calculer, pour chaque masse d'eau, des pourcentages d'occurrence dans les différentes classes de qualité, cette information étant plus riche de sens qu'un unique indice par MECE. L'évolution historique d'une masse d'eau perturbée pourrait alors être suivie, afin de caractériser la diminution de son taux de défaillance par rapport au bon état ou au très bon état au fur et à mesure que des travaux destinés à améliorer sa qualité seraient

réalisés. Il a été montré que ces pourcentages sont mieux évalués (par rapport à la référence exhaustive) s'ils sont calculés par la « méthode améliorée » consistant en une pondération spatiale, qui est d'autant plus sensible que les quantiles 90 sont variables au sein d'une MECE.

C.6 REMERCIEMENTS

Les auteurs expriment leur gratitude au Syndicat Interdépartemental d'Assainissement de l'Agglomération Parisienne (SIAAP), au Service de Navigation de la Seine (SNS), ainsi qu'au Syndicat des Eaux d'Ile de France, pour la mise à disposition des données nécessaires à ce travail.

C.7 RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- BERNARD-MICHEL C. et C. de FOUQUET (2005) Geostatistical indicators of waterway quality for nutrients, VIIIth Congress of Geostatistics, du 26 septembre au 1 octobre 2004, Banff, Alberta, Canada, Compte rendu, 2, p. 907-912.
- BERNARD-MICHEL C. (2006) Indicateurs géostatistiques de la pollution dans les cours d'eau. Thèse de Doctorat, spécialité géostatistique, ENSMP, 161 pages.
- BILLEN G., J. GARNIER et P. HANSET (1994) Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : the RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system, *Hydrobiologia*, 289, p. 119–137.
- EVEN S., M. POULIN, J. GARNIER, G. BILLEN, P. SERVAIS, A. CHESTERIKOFF et M. COSTE (1998) River ecosystem modeling : application of the PROSE model to the Seine River (France), *Hydrobiologia*, 373/374, p. 27-45.
- EVEN S., M. POULIN, J.-M. MOUCHEL, M. SEIDL et P. SERVAIS (2004) Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecol. Model.* 173, p. 177-196.
- EVEN S., J.-M. MOUCHEL, P. SERVAIS, N. FLIPO, M. POULIN, S. BLANC, M. CHABANEL et C. PAFFONI (2007) Modeling the impacts of Combined Sewer Overflows on the river Seine water quality. *Sci. Total. Environ.*, 375, p.140–151.
- FLIPO N., S. EVEN, M. POULIN, M.-H. TUSSEAU-VUILLEMIN, T. AMEZIANE et A. DAUTA (2004). Bio-geochemical modelling at the river scale : plankton and periphyton dynamics (Grand Morin case study, France), *Ecol. Model.*, 176(3-4), p. 333-347.
- FLIPO N., C. RABOUILLE, M. POULIN, S. EVEN, M.-H. TUSSEAU-VUILLEMIN et M. LALANDE (2007) Primary production in headwater streams of the Seine basin : the Grand Morin river case study, *Sci. of Total. Environ.*, 375, p. 98-109.
- GARNIER J., G. BILLEN et M. COSTE (1995) Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine : observations and modelling, *Limnol. Oceanogr.*, 40(4), p. 750–765.
- HUG M., 1975, Mécanique des fluides appliquée, Editions Eyrolles.
- MARTIN L., 2001, Fonctionnement écologique de la Seine à l'aval de la station d'épuration d'Achères : données expérimentales et modélisation bidimensionnelle, Thèse de l'Ecole des Mines de Paris soutenue le 6 Décembre 2001, 279 pages.
- POULIN M. (2006) Réalisation de simulations PROSE, Année de référence 2003, rapport de l'Ecole des Mines de Paris pour le Syndicat Interdépartemental d'Assainissement de l'Agglomération Parisienne, Référence R060629, 83 pages.
- INERIS, Circulaire DCE 2005-12 : http://www.ineris.fr/aida/?q=consult_doc/consultation/2.250.190.28.8.2901, consultation en avril 2009.
- Service d'Administration Nationale des Données et Référentiels sur l'Eau (Sandre), Directive Cadre Eau : http://sandre.eaufrance.fr/rubrique.php3?id_rubrique=21, consultation en janvier 2008.
- Site de l'Ifremer : <http://www.ifremer.fr/delcc/cycleau/reglementation/sequeau.htm>, consultation en juillet 2009.

Annexe D

La géostatistique pour ausculter une simulation déterministe

Cet article intitulé « Geostatistics for assessing the efficiency of a distributed physically-based water quality model : application to nitrate in the Seine River » a été publié dans Hydrological Processes (DOI :10.1002/hyp.7838). Il a été co-écrit par quatre auteurs du Centre de Géosciences de MinesParistech : Edwige Polus, Nicolas Flipo, Chantal de Fouquet et Michel Poulin.

Abstract

This paper shows how geostatistics can be used to reduce distributed physically-based model uncertainties when assessing nitrate concentrations along a 250 km stretch of the Seine River. First of all, co-kriging is used to build a set of boundary conditions (inlet concentrations from major tributary rivers) consistent with validation data. It partially addresses the issues of errors in data used as model input and errors in data to be compared with model outputs. Then the analysis of temporal variograms (simple variograms of observed and simulated concentrations, and their cross-variogram) reveals a clear mismatch between simulated and observed values that was not detected by classical objective functions (root mean squared error, . . .). Variograms appear to include three components representing three different time scales : sub-weekly, monthly and annual scales. Mismatches between simulated and observed values are analysed as i) wrong quantification of inputs to the river (especially during the rainy period : combined sewer overflow, waste water treatment plant and tributary contributions to the nitrate fluxes in the Seine River) and ii) wrong description of physical processes within the river. Finally, the modelling of simple and cross variograms appears to be a sensitive analysis tool which can be used to describe and reduce modelling uncertainties.

Keywords

River water quality, Distributed physically-based model, Geostatistics, Variogram, Cross-variogram, Uncertainty, Validation, Nitrate.

D.1 Introduction

The quantitative modelling of in-stream water quality began with a simple conceptual model (Streeter and Phelps, 1925), which was based on oxygen. After this initial step, carbon cycle and then nutrients were added, leading to modern water quality models (Ambrose et al., 1988, 1996; Barnwell et al., 1987; Billen et al., 1994; Brown and Barnwell, 1987; Crabtree et al., 1994; Even et al., 1998, 2004; Garnier et al., 1995; Ivanov et al., 1996; Reichert, 1994; Wells, 2000; Wool et al., 2001). Contrary to Streeter and Phelps (1925) conceptual model, the biogeochemical processes are nowadays physically-based and the transport is based on hydraulic fluxes. Hydraulics can be physically-based or conceptual. Reichert et al. (2001a) and Arheimer and Olsson (2003) reviewed many of these models.

Even though all these models are more detailed, the distribution through space and the way in which phenomena are described lead to fit a large number of parameters. If the model is based on physical (elementary) processes, some parameter values can be obtained through *in situ* or lab experiments and then physiological parameters are set to these values (Flipo et al., 2007c; Garnier et al., 1995). But modern biogeochemical models are so complex that they remain difficult to fit and validate (Arhonditsis and Brett, 2004).

The main problem with validating a distributed physically-based model (DPBM) is summarized by the equifinality concept (Beven, 1989). As stated by Ebel and Loague (2006) the equifinality is, in the most general sense, the case where quite different processes produce a similar effect. This is because too few measurements are available to mathematically close the system of equations that describes the behaviour of the system. As a consequence, not all unknowns can be identified. This has motivated authors to investigate uncertainty sources which are usually identified as being :

- errors in data used as model inputs,
- errors in validation data, compared with model outputs,
- uncertainties due to sub-optimal parameter values,
- uncertainties due to internal model variability.

Today none of these problems are solved even if many studies were carried out, leading to interesting uncertainty assessment tools (Anderton et al., 2002a,b; Butts et al., 2004; Refsgaard, 1997). But, as stated by Beven (2006b) : "*there are different philosophies about how to estimate uncertainties and take into account input, measurement and model structural error. These will be difficult to resolve in the near future because we do not actually have the data to properly test the different methodologies*". Even worse, Beven (2006b) goes on with : "*it is simply not possible to evaluate the statistical characteristics of input data errors or parameter estimation errors*".

To summarize the issue in environmental sciences, on one hand, at the hydrological network scale, too few measurements are available to estimate all the variables of the system of equations and to identify all calibration parameters (those which are not easily measured). On the other hand, the system of equations is physically-based, describing the behaviour of variables as best as possible. Instead of rejecting this formalism because of mathematical problems, we propose a new methodology for validating in-stream water quality models, based on observations : geostatistics is used to analyse the spatial and temporal behaviour of the observations and to compare the variability of the observations with that of the simulations. Three arguments motivate this approach.

First, the coupling between geostatistics and the process-based modelling was discussed by de Fouquet (2006) and successfully applied by Flipo et al. (2007b) to the case of nitrate contamination at the basin scale. It was also used by Casper and Vohland (2008), for assessing spatially distributed evaporation.

Then, combining geostatistics and process-based approaches is much more powerful than using a single objective function usually based on RMSE (Root Mean Squared Error) or Nash-Sutcliffe efficiency (Nash and Sutcliffe, 1970) for hydrologists. Using only statistical criteria will conceal many spatial and time mismatches between simulations and observations. One classical way to assess model stability based on a single criterion is to make Monte Carlo simulations which have a high computer cost especially when using a distributed process-based model. This limitation is even worse when using multiple criteria but it is a valuable tool for identifying relevant model components (Güntner et al., 1999). In the particular case of hydrology, although a multi-criteria approach can help to better understand what processes need to be further investigated, it is shown that no part of the parameter space yields optimal simulations for all criteria (Anderton et al., 2002a,b).

Finally, combining geostatistics and process-based approaches partially addresses the equifinality problem (Beven, 1993, 2006a) in that it directly compares the variabilities (and not the variables themselves) of observations and simulations. But it is clear that this technique does not address the *incommensurability* problem (Beven, 1989), which means that parameters and state variables at the grid points of the model often do not correspond to field-based estimates or observations (Ebel and Loague, 2006). As discussed in this paper, it also allows boundary condition issues to be identified and provides a framework where measurement errors and model errors can be addressed together through summarizing tools : temporal variograms of both observed and simulated data.

First, the site of interest (250 km in the downstream part of the Seine River) is briefly described. Then theoretical principles are summarized for a process-based modelling of river water quality, as well as geostatistical tools such as variogram and co-kriging. Afterwards a method based on multiple variogram analysis, aiming at assessing the consistency of process-based model outputs with regards to data, is presented and applied to nitrate transfer in the Seine River. Finally the contribution of this work for reducing model uncertainties is summarized.

D.2 Model and data of the downstream part of the Seine River

D.2.1 Modelled Area : The Seine River

The studied domain consists in 225 kilometres along the Seine River and 36 kilometres along the Marne River. The length of the Seine River upstream of its confluence with the Marne River is approximately 14 kilometres (Fig. D.1). The Seine and Marne upstream limits are located approximately at the entrance of the Greater Paris while the downstream limit is the entrance of the Seine estuary. Two Waste Water Treatment Plants (WWTP), namely Seine Amont and Marne Aval, are located at the upstream limit of the Greater Paris whereas the Seine Aval WWTP is located close to the downstream limit of the Greater Paris.

The Seine Amont WWTP treats the waste waters from 1 800 000 inhabitants. Its usual discharge is $7 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ and up to $17 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ during rainy periods. The Marne Aval WWTP treats the waste waters from 220 000 inhabitants. Its usual discharge is $0.9 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Seine Aval WWTP treats the waste waters from 5 000 000 inhabitants. Its usual discharge is $20 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ and up to $50 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ during rainy periods. In order to characterize dilution, these WWTP discharge values have to be compared with the Seine discharge in Paris city and at the output of the Seine River when it reaches the Seine estuary. The Seine River mean discharge in Paris is $280 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$,

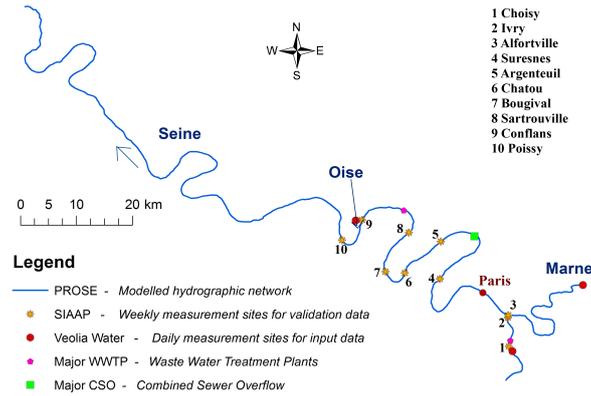


FIGURE D.1 – Modelled area and location of different measurement sites.

decreasing to $60 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ in summer with a five-year return period. At the entrance of the estuary, the Seine River mean discharge is $540 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ decreasing to $180 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ in summer with a five-year return period.

The total length of the Seine River in this large urban area is approximately 80 kilometres. Recently, the PROSE model was used to simulate the water quality for the 2003-2008 period. The present study focuses on the year 2003, and on nitrate.

D.2.2 The PROSE model

The PROSE model (Even et al., 1998, 2004; Flipo et al., 2004) is composed of three modules (Fig. D.2a) : hydrodynamic, transport and biogeochemical modules.

The hydrodynamic module is based upon a longitudinal 1D form of the Saint-Venant equations, solved by the finite difference method. The transport module simulates the advection and dispersion of conservative and reactive substances, both particulate and dissolved.

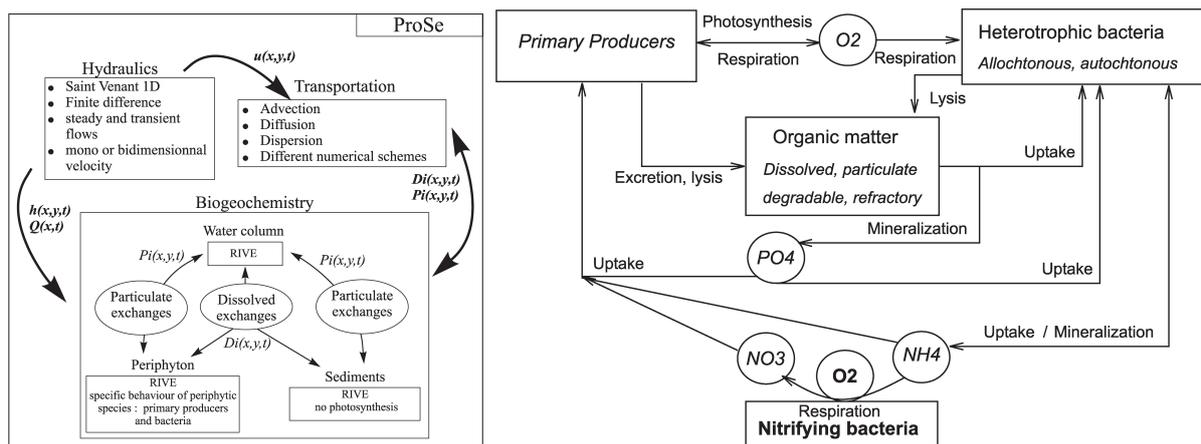


FIGURE D.2 – a) Simplified scheme of the PROSE model. h is the water depth, u the velocity, Q the discharge, D_i and P_i are dissolved and particulate phases of the i -species. b) Simplified scheme of the RIVE model. Carbon, oxygen and nutrient cycles are represented.

The biogeochemical model is an adaptation of the RIVE model (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995) (Fig. D.2b); it is described in appendix D.8. For modelling purposes, the river is

divided into three compartments (Fig. D.2a) : the water column, the sediments and the periphyton, integrating both the epilithon and the epipelon. The water column can, through sedimentation, erosion, permanent losses and scouring, exchange suspended matter with sediment and periphytic layers (Flipo et al., 2004). Two compartments were simulated (water column and sediments) since biogeochemical reactions due to periphyton are less important in large rivers than in headwater streams (Flipo et al., 2004, 2007c).

As the aim of this study is to simulate nitrate concentrations in the water column, we focus only on processes affecting the nitrogen concentration hereafter. PROSE outputs are instantaneous values of local nitrate concentrations at each cell center.

Model calibration and validation

The conceptual scheme of RIVE is based on a macroscale simulation of the micro-organism dynamics that govern the transformation of many constituents (organic matter, nutrients, oxygen). The main idea is that the biological processes are always the same but stimulated differently according to different environmental conditions, which leads to different states of the hydrosystem (Billen et al., 2005; Reichert et al., 2001a,b). The main part of the physiological parameters of primary producers and bacteria has been determined experimentally on natural assemblages of phytoplankton or bacterioplankton (Billen et al., 1990; Garnier et al., 1995, 1998), or based on a literature review, or fitted by trials-errors in previous studies (Even et al., 1998, 2004; Flipo et al., 2004; Garnier et al., 1995, 2000). Hydrodynamical and transport parameters have also been fitted by trial-errors for PROSE (Even et al., 1998, 2004) or for other models (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995, 2000). Then the RIVE model has been successfully applied to many rivers of the Seine basin (Billen et al., 1998, 2001; Even et al., 1998, 2007; Flipo et al., 2007c,a; Garnier et al., 1995, 2005; Sferratore et al., 2005) and of other basins, including the Danube (Garnier et al., 2002), the Schelde (Billen et al., 2005) and the Red River (Quynh et al., 2005).

Boundary conditions and model parameterization are briefly commented hereafter. They are described in detail by Poulin (2006).

D.2.3 Measurements

The two data sets of nitrate concentrations used in this study were obtained from different measurement techniques.

Input Data

The Veolia Water water supplier provides data sets which consist in daily concentrations averaged from hourly measurements for some of them. Three measurement sites (Fig. D.1) are located at the upstream part of each modelled river (Seine and Marne) and at the confluence of the Seine River with the Oise River, which is not modelled by PROSE. These three data sets are used as upstream boundary conditions.

Validation Data

For the year 2003, the Sewage Public Company of the Greater Paris (SIAAP) provides weekly measurements at ten sampling sites (Fig. D.1) : one on the Marne River and nine on the Seine River. For the sites where a lateral heterogeneity is observed, a measurement value consists in the average of three samples taken from the left side to the right side of the river. This average value on a cross-section allows a longitudinal 1D description to be made.

D.3 Combining geostatistics and physically-based modelling

D.3.1 Geostatistical tools : variogram and bivariate model

Some basic principles of geostatistics used in the following are briefly given in the temporal context (1D). For further developments (and the usual spatial case), one may consult Chilès and Delfiner (1999).

Temporal variogram

The variogram quantifies the temporal variability of a variable. Let $Z(t)$ be the value of the Z variable at the instant t . The temporal variogram $\gamma(\tau)$ is defined as half the probabilistic mean (or mathematical expectation, noted E) of the squared differences between $Z(t + \tau)$ and $Z(t)$, as a function of the time interval τ (Eq. D.1).

$$\gamma(\tau) = \frac{1}{2}E \left[(Z(t + \tau) - Z(t))^2 \right] \quad (\text{D.1})$$

By definition, $\gamma(0) = 0$. Generally the magnitude of the increment $Z(t + \tau) - Z(t)$ increases with τ . If Z fluctuates around a constant mean, the mean of these increments is zero, which is the reason why squared differences $(Z(t + \tau) - Z(t))^2$ are used. If the fluctuations amplitude is almost constant, then the random function Z is stationary (of order 2) and variogram stabilizes around a “sill” beyond a maximal correlation distance called “range”.

In practice, data are available only at experimental points, from which an experimental variogram $\gamma^*(\tau)$ is calculated (cf. appendix D.9.1). This experimental variogram is then fitted by a theoretical variogram function, with the appropriate mathematical properties (Chilès and Delfiner, 1999).

Typically, variogram $\gamma(\tau)$ can be decomposed as the sum of several components, for example $\gamma(\tau) = \gamma^0(\tau) + \gamma^1(\tau) + \gamma^2(\tau)$, where γ^0 admits a null range (nugget effect), γ^1 admits a range a_1 and γ^2 admits a greater range a_2 . For a phenomenon presenting a periodical component, the variogram admits a sinusoidal component with the same period as the phenomenon.

The cross-variogram describes the joint variability of two variables Z_1 and Z_2 . It is defined as half the covariance of increments according to the time interval τ :

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{1}{2}E [(Z_1(t + \tau) - Z_1(t)) \cdot (Z_2(t + \tau) - Z_2(t))] \quad (\text{D.2})$$

Unlike “simple” variogram, cross-variogram can be negative when both variables, and thus their increments, are negatively correlated. When there is no temporal cross-correlation between Z_1 and Z_2 (they are temporally cross-uncorrelated), then their cross-variogram is null : $\gamma_{12}(\tau) = 0$.

Estimation : kriging and its variants

Among estimators built as a linear combination of data, kriging is defined by the following properties :

- no bias (on average, the estimation error is null)
- “optimality” : the variance of the estimation error is minimal (in other words, the precision is as best as possible)

The multivariate version of kriging is co-kriging, which consists in estimating Z_1 from measurements of Z_1 and Z_2 . Let's assume that $\gamma_{12}(\tau) \neq 0$ and thus that Z_1 and Z_2 are temporally cross-correlated. If Z_2 is denser sampled than Z_1 , then data of Z_2 can be used to interpolate the missing values of Z_1 , with respect to the probabilistic relationship between Z_1 and Z_2 . The minimization of the estimation error variance under non-bias conditions leads to a linear system that involves simple and cross variograms of the different variables : $\gamma_1(\tau)$, $\gamma_2(\tau)$ and $\gamma_{12}(\tau)$ (appendix D.9.3).

Geostatistical bivariate model : understanding how variables are linked

Fitting simple and cross variograms is a way to model the link between variables. One way to understand the differences between simulations and observations is thus to analyze the fitting of their simple and cross variograms. The geostatistical bivariate model used in this paper is a very general one, the linear model of co-regionalization.

Let $O(t)$ be the observations and $S(t)$ the simulated values. In this model, both variables can be divided into n components $O_i(t)$ and n components $S_i(t)$ (Eq. D.3).

$$\begin{cases} O(t) = \sum_{i=1}^n O_i(t) \\ S(t) = \sum_{i=1}^n S_i(t) \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

$\forall i \neq j, O_i \perp O_j, S_i \perp S_j, O_i \perp S_j$, where \perp means that the different components are temporally uncorrelated, i.e. their temporal cross-covariance (or variogram) is zero :

$$\forall i \neq j, \forall t, \forall t', \text{Cov}(O_i(t), O_j(t')) = 0,$$

written $O_i \perp O_j$.

The link between variables is described by the correlation between the n couples of components O_i and S_i . For a given i , O_i and S_i are possibly correlated, which can be written :

$$\exists \omega_i, \rho_i, \text{ and } R_i \perp S_i \mid O_i(t) = \rho_i \omega_i S_i(t) + \omega_i \sqrt{1 - \rho_i^2} R_i(t), \quad (\text{D.4})$$

where ω_i^2 is the ‘‘sill ratio’’ of $\gamma_O^i(\tau)$ and $\gamma_S^i(\tau)$, ρ_i is the correlation coefficient between O_i and S_i at the same instant t , and $R_i(t)$ is a random function temporally uncorrelated to $S_i(t)$, with a variogram proportional to the one of S_i .

Eq. D.4 implies that $\gamma_O^i(t) = b_{OO}^i \gamma_i(t)$, $\gamma_S^i(t) = b_{SS}^i \gamma_i(t)$ and $\gamma_{OS}^i(t) = b_{OS}^i \gamma_i(t)$, with $b_{OS}^i \leq \sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}$.

Thus $\omega_i^2 = \frac{b_{OO}^i}{b_{SS}^i}$ and $\rho_i = \frac{b_{OS}^i}{\sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}}$

Figure D.3 illustrates three specific versions of the linear model of co-regionalization (cf. appendix D.9.2) that will be found hereafter.

1. The residual model : the observations are the sum of the simulations and of another term R , which is independent of these simulations : $S \perp R$.
2. The intrinsic correlation model : simple and cross variograms are proportional to each other. The strength of the correlation between simulations and observations is given by the sill of the cross-variogram : the higher it is, the stronger is the correlation. This model was already used by Chilès et al. (2008) to compare measurements to a physically-based model of air pollution.

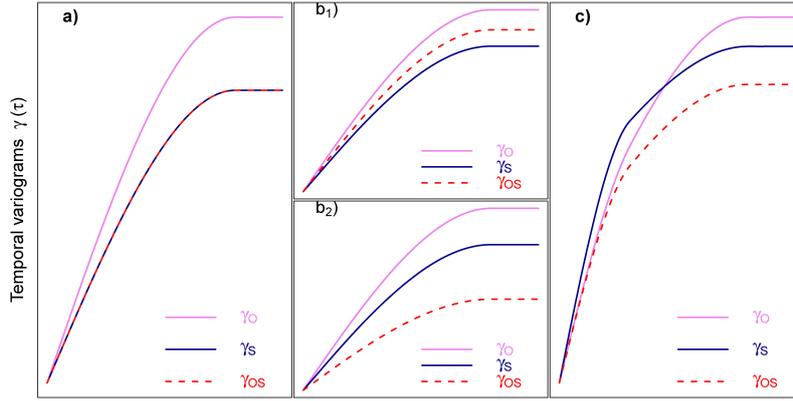


FIGURE D.3 – Possible relationships between temporal simple and cross variograms of observations O and simulations S . a) Residual model; b) Intrinsic correlation model; c) Linear model of co-regionalization (cf. Appendix D.9.2 for more details).

3. The linear model of co-regionalization : each component i corresponds to the intrinsic correlation, but the combination of these components does not correspond to an intrinsic correlation (i.e. for $i \neq j$, $\rho_i \neq \rho_j$ or $\omega_i \neq \omega_j$). The analysis of relationships between variables must then be performed for each component separately.

D.3.2 Physics-based simulations

For this work, PROSE was run for the whole year 2003, simulating water quality on the domain (cf. section D.2.1) from the 1st of January to the 31st of December.

River discharges and urban hydrology

Daily river discharges were used for the Seine, Marne and Oise Rivers and for the minor tributaries. For the Seine and Marne Rivers, the upstream discharges are available. For the other tributaries, the discharge is measured or estimated close to their confluence with the Seine River. Waste Water Treatment Plant (WWTP) outflows and Combined Sewer Overflows (CSO) are measured values or estimates provided by the Sewage Public Company of Greater Paris (SIAAP). The hydraulic model describes the variation of discharge along the domain. During low discharge periods, the residence time of water might be as long as one month since the Seine and Marne Rivers are regulated for navigation purposes by 14 dams. At the outlet of the modelled domain, the comparison of the calculated and measured downstream discharges demonstrates that the transient water balance is estimated with a good precision for the whole domain as well as the residence time for low or high discharges (Polus-Lefebvre et al., 2008).

Boundary conditions

The model requires boundary conditions (BC) for each major tributary. For the Seine and the Marne Rivers, BC are necessary at the upstream point of the modelled domain. The third river (the Oise River) and the four minor tributaries are not modelled so BC are defined at their confluence with the Seine River. BC for minor tributaries are composed of daily mean values of discharge and monthly values (one sample per month) of water quality variables. The Seine, Marne and Oise BC are daily concentrations of all modelled variables provided by Veolia Water (cf. section D.2.3). They are called *Initial BC* in the remaining of the paper.

D.3.3 Statistical and geostatistical criteria for comparison

Validation data ($O(t_i)$) and PROSE outputs ($S(t_i)$) are compared for both simulations. Statistical criteria are first calculated : average, standard deviation on variables and on residuals ($\epsilon(t_i) = S(t_i) - O(t_i)$) (Eq. D.5), and as Root Mean Square Error (RMSE) between time series $O(t_i)$ and $S(t_i)$ (Eq. D.6). RMSE quantifies averaged squared differences between model and data "point by point", at the same days.

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\epsilon(t_i) - \bar{\epsilon})^2} \quad (\text{D.5})$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \epsilon^2(t_i)} \quad (\text{D.6})$$

In addition temporal simple and cross variograms are used to compare the variability of modelled and measured nitrate concentrations. Simple variograms indicate if the modelled variability is consistent with the experimental data variability. Cross-variogram between modelled and data time series shows how they are temporally correlated. A particular attention is given to the coefficients ρ_i and ω_i for each variogram component (see paragraph D.3.1).

In order to calculate simple and cross variograms in the same conditions, PROSE outputs are sampled according to SIAAP measurement days ; it means a weekly sampling, assuming that measurements are made at noon. All presented variograms are thus calculated from instantaneous weekly sampled concentrations.

D.4 Reconstructing BC by co-kriging

D.4.1 Preliminary exploratory analysis

First comparison concerns PROSE values and SIAAP measurements of nitrate concentrations. Most of the year, measured nitrate appear to be lower than PROSE values at almost all sites. Fig. D.4a summarizes this analysis by presenting the evolution along the Seine River of average differences at each site between simulated and measured nitrate concentrations over the whole year. A systematic deviation is pointed out from upstream of the domain to at least the Sartrouville site.

Two nitrate time series are available upstream of the Seine River : daily VEOLIA WATER measurements used as input data and weekly SIAAP measurements at Choisy (cf. section D.2.3). Both time series are compared visually (Fig. D.4b) and statistically (Tab. D.1) ; both present an annual periodicity and a high temporal correlation (cf. Fig. D.4b, correlation coefficient = 0.89). But most of nitrate concentrations measured by the SIAAP appear to be lower than those measured by Veolia Water. More specifically discrepancies are close to zero in summer (days 170 to 240) but during the rest of the year they are more significant and can reach $7 \text{ mgNO}_3 \cdot \text{l}^{-1}$, i.e. a relative deviation of more than 20%.

Discrepancies between VEOLIA WATER and SIAAP measurements can be explained by different measurement protocols and sampling strategies (cf. section D.2.3). Nevertheless it is difficult to know which values are closer to reality. We decided to give the preference to SIAAP measurements because they are consistent with downstream measured values and with the monthly values given by the administration in charge of water quality control.

	m	σ^2	σ	Min.	Max.
Observed nitrates (SIAAP)	23.6	20.2	4.5	15.5	32.8
Initial BC (Veolia Water)	25.5	23.3	4.8	16.0	36.0
Discrepancies	1.6	2.8	1.7	-2.0	7.1
Modified BC	23.7	19.0	4.4	15.5	33.0

TABLE D.1 – *Statistics on nitrate concentrations [mgNO₃.l⁻¹] in Choisy : validation data (SIAAP), input data (Veolia Water), and discrepancies between both time series; the correlation coefficient between time series is 0.89. m stands for the average, σ^2 for the variance and σ for the standard deviation. Comparison of initial ('1') and modified ('2') boundary conditions (BC).*

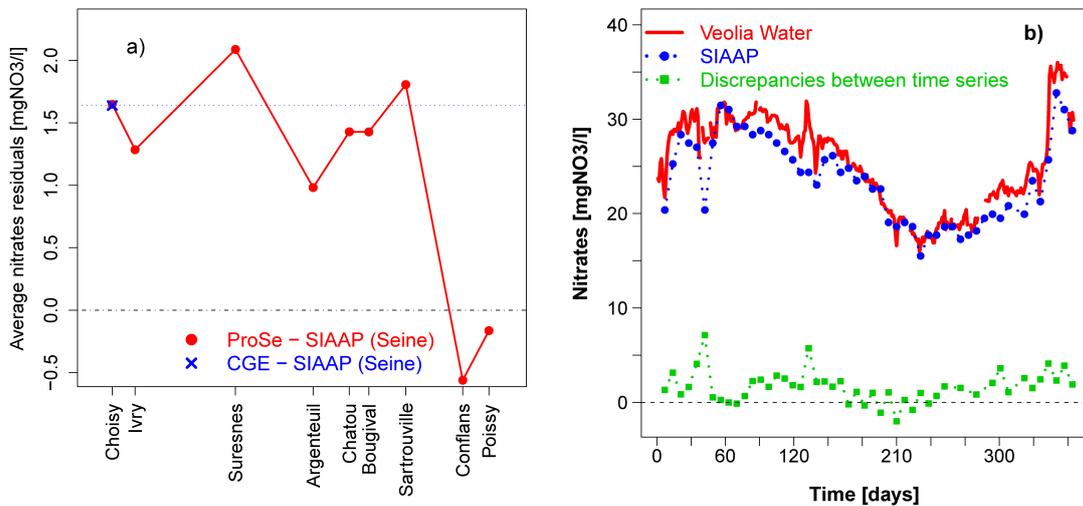


FIGURE D.4 – *a) Average deviations of nitrate concentrations between PROSE values and SIAAP measurements. b) Comparison of nitrate concentrations upstream of the Seine River : validation data (SIAAP), input data (VEOLIA WATER), and discrepancies between both time series.*

D.4.2 Reconstruction principle

In order to avoid deviations due to sampling and methodology differences and to improve the consistency between PROSE outputs and observed (SIAAP) nitrate concentrations, we decided to modify the nitrate Seine BC. Instead of daily measurements operated by VEOLIA WATER, SIAAP measurements at Choisy are considered for BC in the Seine River. But anyhow, boundary conditions must be daily concentrations whereas SIAAP data are weekly available.

The temporal co-kriging (cf. section D.3.1 and appendix D.9.3) of weekly SIAAP measurements by daily Veolia Water measurements uses at best the cross-correlation between both time series to provide a daily time series :

- that perfectly fits SIAAP measurements,
- with the daily variability of VEOLIA WATER measurements.

The co-kriging is thus performed assuming that the temporal variability of daily values is identical at both SIAAP (Choisy) and VEOLIA WATER sites, located 9 km from each other. The approximation which consists in neglecting this distance seems reasonable since the spatial

variability of nitrate concentrations is much lower than their temporal variability (Polus-Lefebvre et al., 2008).

D.4.3 Co-kriging

First a bivariate linear model of co-regionalization is fitted to simple and cross variograms of SIAAP and VEOLIA WATER measurements (Fig. D.5a). The resolution of the linear system developed in appendix D.9.3 gives the co-kriging weights. The resulting time series (Fig. D.5b) exactly fits the experimental SIAAP measurements and its variability is similar to that of VEOLIA WATER measurements.

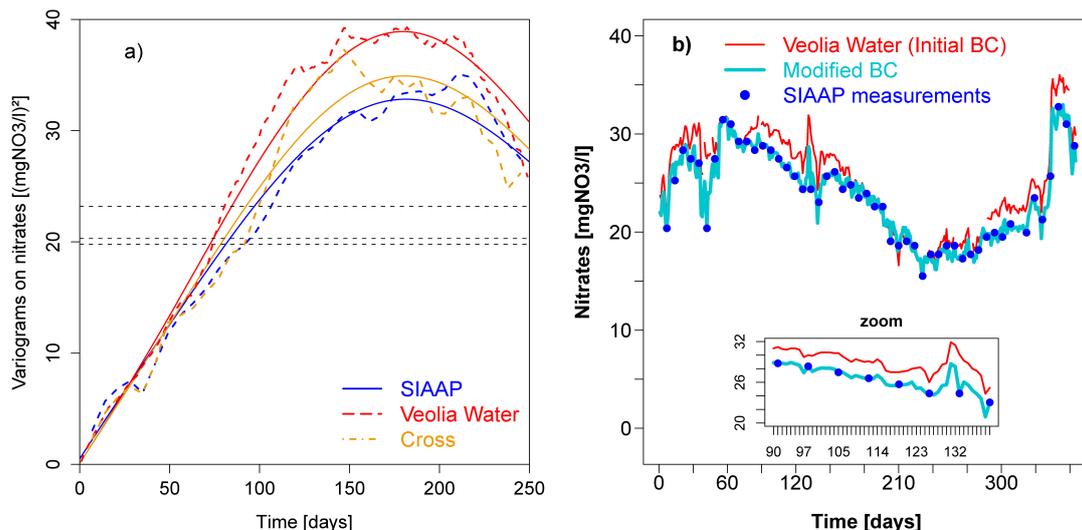


FIGURE D.5 – a) *Experimental and fitted variograms of nitrate concentrations upstream of the Seine River.* b) *Comparison of nitrate time series used as BC : VEOLIA WATER data for simulation 1 (Initial BC) and time series reconstructed by co-kriging for simulation 2 (Modified BC).*

The same method was applied to the Oise River (cf. Fig. D.1), given that SIAAP measurements are available downstream of the Oise River. From now on, these two reconstructed daily time series are called *Modified BC*.

It was not possible to reconstruct consistent BC for the Marne River. Indeed the unique measurement site providing validation data is located more than 30 kilometres downstream of the upper limit where daily input data are needed. We have considered that it would not be consistent to use a reconstructed time series passing through experimental points being too far. Thus Marne River BC remained unchanged.

A second PROSE simulation was run with the *modified BC* obtained from co-kriging for nitrate concentrations upstream of the Seine and the Oise Rivers. All others BC remain unchanged.

D.4.4 Comparing simulations with initial and modified BC to measured nitrate

With modified BC, simulated nitrate concentrations are more consistent with validation data (Fig. D.5b and D.6). The averaged deviation on the domain drops from $1.1 \text{ mgNO}_3 \cdot \text{l}^{-1}$

to $0.1 \text{ mgNO}_3\cdot\text{l}^{-1}$ (Tab. D.2). The average RMSE was also reduced from $2.3 \text{ mgNO}_3\cdot\text{l}^{-1}$ to $1.8 \text{ mgNO}_3\cdot\text{l}^{-1}$ when considering the modified BC (Tab. D.2).

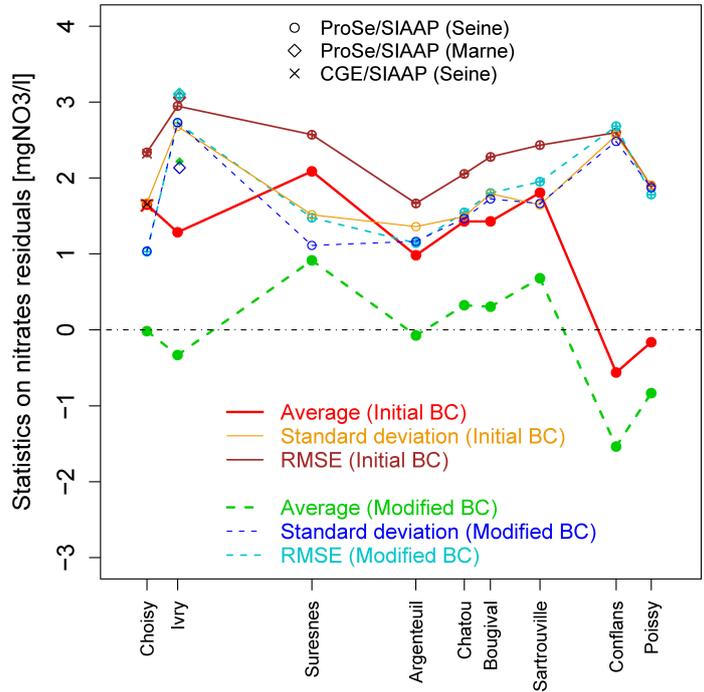


FIGURE D.6 – *Statistics on deviations of nitrate concentrations between PROSE values and SIAAP measurements from upstream to downstream ; comparison of initial and modified BC.*

In general, the simulation with modified BC gives better results than the one with the initial BC (Tab. D.2 and Fig. D.7). This is the case for all SIAAP sites up to the junction with the Oise River. From there, statistical criteria are better for the simulation with initial BC, and PROSE slightly underestimates nitrate concentrations at Conflans and Poissy where the average errors of estimate are $-1.2 \text{ mgNO}_3\cdot\text{l}^{-1}$ and $-0.7 \text{ mgNO}_3\cdot\text{l}^{-1}$, respectively for the simulation with modified BC (Tab. D.2). Based only on statistics, one could guess that this is due to underestimated fluxes in the Oise River. But looking more carefully at time series (Fig. D.7), one can see that PROSE outputs start to slightly diverge from observations from day 150. One explanation might be that either denitrifying bacteria dependency on temperature is overestimated in the model (the summer of 2003 was unusually dry and warm in France) or that sediment accumulation is overestimated by the model in this part of the network.

In the remaining of the paper, we will thus analyze simulation outputs obtained with modified BC, which show a better agreement with observed data.

D.5 Results and discussion

First, PROSE outputs are compared to validation data using usual statistical tools, then a more detailed analysis involving geostatistical tools is presented.

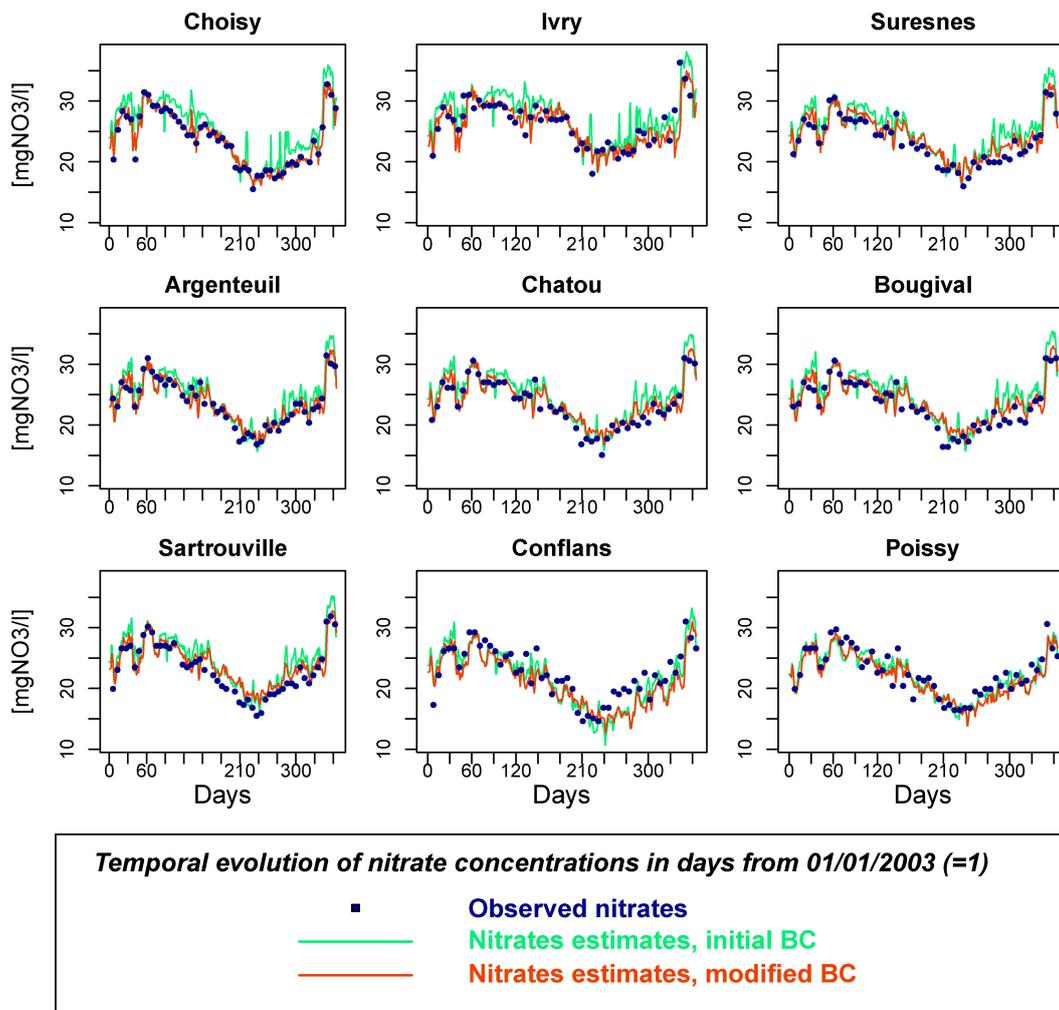


FIGURE D.7 – Comparison of modelled (PROSE) and measured (SIAAP) nitrate concentrations in 2003 at each measurement site. The two simulations with different BC are also compared. All sites are presented from upstream (Choisy) to downstream (Poissy) along the Seine River.

	m_1	m_2	σ_1	σ_2	$RMSE_1$	$RMSE_2$
Choisy	1.7	-0.0	1.7	1.0	2.3	1.0
Ivry	1.3	-0.3	2.7	2.7	2.1	2.7
Suresnes	2.1	1.0	1.5	1.1	2.6	1.5
Argenteuil	1.0	0.0	1.4	1.2	1.7	1.1
Chatou	1.4	0.5	1.5	1.5	2.1	1.6
Bougival	1.4	0.5	1.8	1.8	2.3	1.8
Sartrouville	1.8	0.9	1.7	1.8	2.4	2.0
Conflans	-0.6	-1.2	2.6	2.4	2.6	2.7
Poissy	-0.2	-0.7	1.9	1.7	1.9	1.8
Average	1.1	0.1	1.9	1.7	2.3	1.8

TABLE D.2 – *Statistics on deviations of nitrate concentrations [mgNO₃.l⁻¹] between PROSE values and validation data (SIAAP), and RMSE (Root Mean Squared Error) between both time series. m stands for the average and σ for the standard deviation. Comparison of simulations with initial ('1') and modified ('2') boundary conditions at all validation site.*

D.5.1 Classical result analysis

First, statistical criteria (cf. section D.3.3) are used to compare PROSE values to SIAAP measurements at each validation site (Tab. D.3), complementary to visual comparison that can be made on Fig. D.7. As seen when comparing initial and modified BC, the annual mean nitrate concentration is well estimated by PROSE at each validation site, with small differences, either positive or negative. The temporal variability is slightly underestimated by the model at almost all sites, PROSE values presenting standard deviations ranging from 3.3 to 4.5 mgNO₃.l⁻¹ against a range from 3.7 to 4.5 mgNO₃.l⁻¹ for SIAAP measurements. Moreover, the correlation coefficients are very high ($\rho > 0.9$) and RMSE (cf. Eq. D.6) are close to one, except at Ivry ($\rho = 0.74$ and $RMSE = 2.7$ mgNO₃.l⁻¹) and Conflans ($\rho = 0.84$ and $RMSE = 2.7$ mgNO₃.l⁻¹).

The statistical criteria and the visual comparison of simulated and observed nitrate concentrations lead to the same conclusion : nitrate seems well simulated by the PROSE model for the year 2003.

D.5.2 Result analysis using fitted variograms

The observed and the PROSE simple and cross experimental variograms are fitted at each gauging site with a linear model of co-regionalization. The corresponding simple and cross modelled variograms are called γ_O , γ_S and γ_{OS} , respectively (Fig. D.8 and Tab. D.4).

The linear model of co-regionalization is a combination of the following three components :

- a nugget effect which integrates sub-weekly variability and sampling uncertainty. It accounts for less than 5 % of the total variance at each gauging station ;
- an exponential variogram which corresponds to a decreasing correlation with time increase. For every site, a range of about one month is observed. It accounts for around 20 % of the total variance ;
- a periodic component with an annual period. This is the major component since it accounts for around 75 % of the total variance. This periodical structure is consistent with the seasonal variability observed on time series (Fig. D.7), which might be related to

Site	SIAAP		PROSE			RMSE
	m	σ	m	σ	ρ	
Choisy	23.6	4.5	23.6	4.5	1.0	1.0
Ivry	26.2	3.7	25.8	3.7	0.7	2.7
Suresnes	23.5	3.8	24.3	3.3	1.0	1.5
Argenteuil	23.6	3.9	23.6	3.8	1.0	1.1
Chatou	23.4	4.0	23.7	3.7	1.0	1.6
Bougival	23.4	3.9	23.8	3.6	0.9	1.8
Sartrouville	23.1	4.2	23.8	3.5	0.9	2.0
Conflans	22.4	4.1	20.8	4.4	0.8	2.7
Poissy	22.6	3.7	21.7	3.7	0.9	1.8

TABLE D.3 – *Statistics on nitrate concentrations [mgNO₃.l⁻¹] in all validation sites : comparison of PROSE values and SIAAP measurements. m, σ , ρ , and RMSE respectively stand for mean, standard deviation, correlation coefficient and root mean squared error.*

bacterial activity and temperature annual variations : denitrification activity is the highest in late summer due to high water temperature. The annual minimum observed for nitrate concentrations might also be related to river discharge which produces dilution. During low water season, nitrate are mainly brought to the rivers from aquifers (where the concentration is stable or in slow evolution), the surface runoff contribution, with higher nitrate concentrations, being negligible at this time. This periodical structure was confirmed at each SIAAP sampling sites on three-year records (from 2001 to 2003) (Fig. D.9).

Globally, PROSE variograms present similar patterns than the observed ones, but PROSE always underestimates the nitrate temporal variability, with a global sill ratio ranging from 0.57 to 0.94 (Tab. D.5). It confirms and reinforce the slight underestimation highlighted in the previous section based on classical statistics.

Fitting a variogram model to experimental variograms provides information about the link between simulated and observed values. Pointing out changes in variogram patterns from upstream to downstream allows modifications of the link between model and measurements to be located. Then the “approximation” (either in processes, parameters or data) responsible for each change can be characterised through the joint analysis of the different components, the time series and the classical statistics.

Before analysing further the variogram changes from upstream to downstream, it is important to keep in mind that for each component of the fitted variograms, the sill ratio between simple variograms gives an indication about the ratio of the fluctuation amplitude. A sill ratio equals to one indicates that the amplitude of PROSE temporal fluctuations is similar to that observed. Otherwise this amplitude is either over (>1) or underestimated (<1). Conversely the correlation coefficient provides information on the similarity of both series. $\rho = 1$ indicates that both time series evolve similarly, whereas $\rho = 0$ indicates that time series are not correlated at all.

As BC were modified to build a consistent dataset, the differences between γ_O and γ_S , as well as the position of γ_{OS} , are due to an inadequate quantification of inputs to the river and to approximations into the description of physical processes within the river (i.e. an approximate description of phenomenon and/or an approximate parameterization of the model, 1D modelling). From upstream to downstream of the modelled area, the variogram patterns evolve as follows (Tab. D.4 and D.5) :

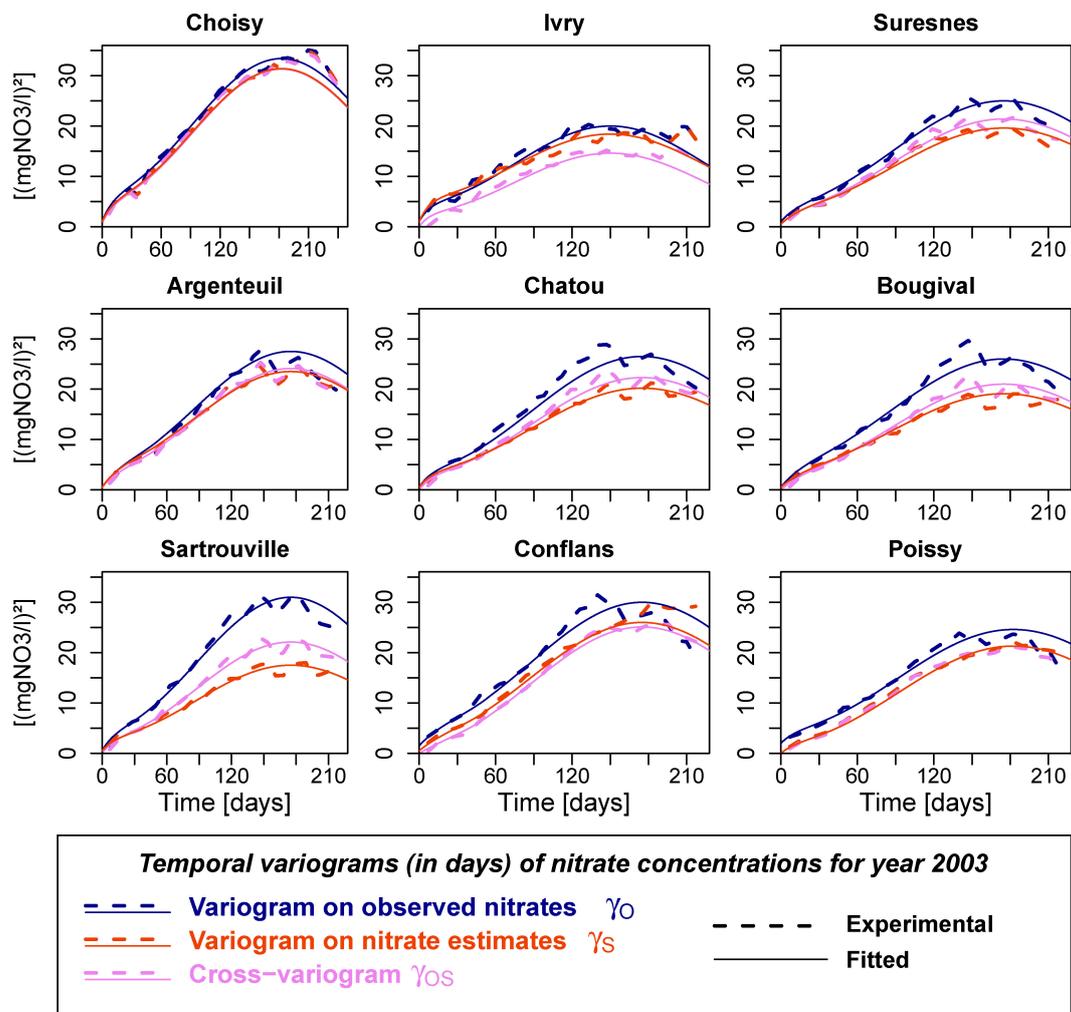


FIGURE D.8 – Fitted temporal simple and cross (γ_{OS}) variograms of measured (SIAAP, γ_O) and modelled (PROSE, γ_S) nitrate concentrations at each measurement site, with a linear model of coregionalization.

gauging station	nugget effect		exponential		periodic (cosinus)		global sill					
	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}			
Choisy	1	1	0.7	6	5	5	26.4	25.4	25.6	33.4	31.4	31.3
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode* [d]											
Ivry	1	1	0	4	5	3	15	12.4	11.6	20	18.4	14.6
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Suresnes	1	0.5	0.5	4	3.5	3.5	20	15.6	17.4	25	19.6	21.4
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Argenteuil	0.5	0.5	0.5	5	5	4	22	18	19.6	27.5	23.5	24.1
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Chatou	0.5	0.5	0	4	3.5	3.5	22	16.2	18.8	26.5	20.2	22.3
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Bougival	0.5	0.5	0	5.5	5.5	4	20	14.6	17	26	19.1	21
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Sartrouville	0.5	0.5	0	4.5	3	3.5	26	14	18.6	31	17.5	22.1
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Conflans	1.5	0.5	0	4.5	3.5	2.5	24	22	22.6	30	26	25.1
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											
Poissy	2	0	0	3	2.5	2.5	19.6	18.8	18.8	24.6	21.3	21.3
	sill $[(mg.L^{-1})^2]$ range or periode [d]											

TABLE D.4 – Fitting of variograms composed of three terms : nugget effect, exponential component and periodic component. γ_{obs} : variogram of measurements ; γ_{prose} : variogram of simulated values ; γ_{cross} : cross variogram. * Range for the exponential component and period for the cosinus component.

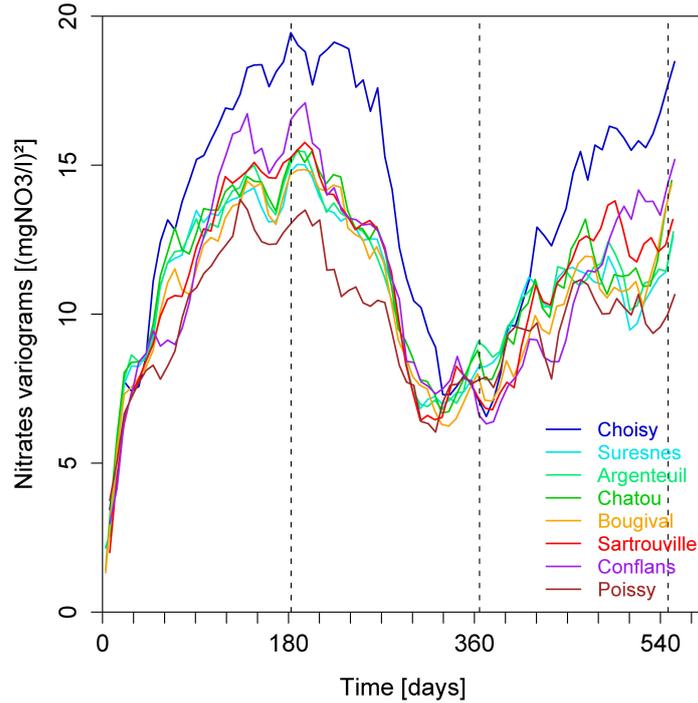


FIGURE D.9 – Temporal simple variograms of weekly measured nitrate concentrations by the SIAAP, for the three years 2001 to 2003.

From Choisy to Ivry. At Choisy, upstream of the domain, the model works properly : $\gamma_{OS} \approx \gamma_S \approx \gamma_O$. But at Ivry $\gamma_{OS} < \gamma_S < \gamma_O$ and the determination coefficient ρ^2 is only 0.5 ($\rho = 0.71$ in Tab. D.5). The temporal correlation is the weakest overall the modelled area, especially for the exponential component and the nugget effect. Among all sites, the sill of γ_O is here the lowest one because of the low sill of the periodic component which is only $15 \text{ (mgNO}_3\text{.l}^{-1}\text{)}^2$. PROSE also reproduces the reduction of the global and periodic sills but it overestimates this reduction (Tab. D.4). At Ivry, the range of the exponential component is the lowest one as well (25 days). During spring and winter (around 150 days), nitrate concentrations vary between 26 and 31 $\text{mgNO}_3\text{.l}^{-1}$, which induces a reduction of the global sill. Simulated and observed values seem in agreement : Fig. D.7 indicates that γ_O and γ_S do represent the same process. But Fig. D.8 shows that the two variables are poorly correlated (the cross-variogram is lower than the simple ones). This discrepancy between the PROSE values and the observed values might be due to a wrong quantification of the outflow either of the Seine Amont WWTP located in the city of Valenton or of an important CSO located in this river section. The Seine Amont WWTP treats the waste water of 1.8 M inhabitants and the mean concentration of nitrate in its outflow is $102 \text{ mgNO}_3\text{.l}^{-1}$, while the discharge of the CSO varies between 0.5 and $6 \text{ m}^3\text{.s}^{-1}$ and its nitrate concentration is poorly known.

From Ivry to Suresnes. At Suresnes, the variogram pattern changes to $\gamma_S < \gamma_{OS} < \gamma_O$. The discontinuity between Ivry and Suresnes is due to the Marne River, which represents a significant contribution to the Seine discharge after the confluence of the two rivers.

From Suresnes to Sartrouville. From Suresnes to Sartrouville, PROSE does not simulate in a satisfactory way the periodic component of γ_O (sill ratio ω_{perio} ranging between 0.54 and 0.82) even if the correlation coefficients are good (between 0.97 and 1). This is almost the same for the exponential component, except for Argenteuil where the sill ratio equals 1. For this group of sites, the variogram analysis reveals that PROSE reproduces more or less the nitrate fluctuations but reduces the temporal variability. Between Suresnes and Argenteuil, there is almost no difference

gauging station	ρ				sill ratio			
	nug	exp	perio	global	nug	exp	perio	global
Choisy	0.7	0.91	0.99	0.97	1	0.83	0.96	0.94
Ivry	0	0.67	0.85	0.71	1	1.25	0.83	0.92
Suresnes	0.71	0.94	0.99	0.96	0.5	0.88	0.78	0.78
Argenteuil	1	0.8	0.98	0.95	1	1	0.82	0.86
Chatou	0	0.94	1	0.93	1	0.88	0.74	0.76
Bougival	0	0.85	0.99	0.9	1	0.73	0.73	0.74
Sartrouville	0	0.95	0.97	0.92	1	0.67	0.54	0.57
Conflans	0	0.63	0.98	0.83	0.33	0.78	0.92	0.87
Poissy	0	0.91	0.98	0.90	0	0.83	0.96	0.87

TABLE D.5 – Variogram analysis. ρ : correlation coefficient between measurements and PROSE outputs. Sill ratio : $\text{sill}\gamma_{\text{prose}}/\text{sill}\gamma_{\text{obs}}$. nug, exp, and perio stand for the nugget effect, the exponential and the periodical component, respectively.

between the variogram patterns though a major CSO is located in this river section. The CSO seems to be properly characterized (in time, discharge and concentrations) since, in Argenteuil, the three variograms are very similar (Fig. D.8). There are no significant inputs (WWTP, confluence or CSO) between Argenteuil and Sartrouville, but discrepancies between variogram sills increase from upstream to downstream. Thus this discrepancy between γ_O and γ_S can be explained by the fact that the physical processes are not modelled properly and/or that the parameter values are not well calibrated. Fig. D.7 suggests an explanation for the source of this discrepancy. Indeed for Chatou, Bougival and Sartrouville, the simulated concentrations are overestimated from the day 150 to the end of the simulation. This can be explained by an overestimation of the nitrification or an underestimation of the denitrification within sediments that affects the nitrate concentrations in the water column due to diffusion at the sediment-water interface. This is confirmed by the fact that temporary inputs as CSO do have a significant effect on the long-term variability of the nitrate concentrations in the river (Even et al., 2007) due to sedimentation processes.

From Sartrouville to Conflans. At Conflans, the experimental variograms are crossing each other. This indicates that the three components of the linear model of co-regionalization interact in a complex way, but $\gamma_{OS} < \gamma_S$ for the first four months (< 120 days, Fig. D.8). Fig. D.7 indicates that the nitrate concentrations simulated by PROSE are underestimated from the late summer to the end of the year. The global determination coefficient ρ^2 is only 0.69 ($\rho = 0.83$ in Tab. D.5). The periodic component is consistent between γ_O and γ_S . The main issue is due to the exponential component and the nugget effect : the components corresponding to sub-weekly (nugget effect) and monthly (exponential component) variabilities are not well reproduced by PROSE. In addition, contrary to the other sites, most of the simulated values are underestimated (Fig. D.7). This might be explained by an overestimation of the denitrification by the model in the Seine River. An overestimation of the denitrification process seems realistic since an important sedimentation prevails in this area and denitrification in this context is difficult to simulate accurately.

From Conflans to Poissy. At Poissy, the periodic component of γ_S is consistent with the observed one with $\rho = 0.98$ and a sill ratio of 0.96 (Tab. D.5). For the exponential component, the sill ratio is only 0.83, but the determination coefficient ρ^2 is 0.83 ($\rho = 0.91$). The main point at Poissy is revealed by the nugget effect ($2 \text{ (mgNO}_3\text{.l}^{-1})^2$ in Tab. D.4). It is the highest observed nugget effect among those calculated at the measurement sites, while it is null when calculated from the PROSE results. The change in the variogram pattern might be due to the confluence

of the Seine and the Oise Rivers. The fact that γ_O and γ_S are not equal also results from all modelling approximations previously mentioned.

D.6 Conclusion

The exploratory geostatistical analysis enables us to point out and to better understand errors in data used as model inputs and errors in data used to compare model outputs with.

Co-kriging made possible the building of a consistent homogeneous dataset of upstream boundary conditions (BC, input data) and of data validation.

After this data processing, the PROSE model was run to simulate water quality in the river. The comparison of the simulated values with the observed ones leads to the conclusion that nitrate are rather well simulated by the model. The statistical single criteria (average values, standard deviation and RMSE) seem to be also good.

But the analysis of simple variograms of observed and simulated nitrate, and their cross variogram reveals a clear mismatch between the simulated values and the observed ones that was not revealed by the other objective functions. It also makes it possible to analyse the model response with regards to measurements in terms of three different time step responses (sub-weekly, monthly and annual). Moreover, as BC were processed in order to obtain a consistent dataset, mismatches were analysed as inadequate quantification of inputs to the river and an approximated description of the physical processes within the river. This analysis results in pointing out i) model inconsistencies in terms of input data (tributary, CSO, WWTP contributions to the nitrate fluxes in the Seine River) and ii) wrong descriptions of the physical processes, either conceptual or due to the parameter calibration. It hence helps to identify more precisely uncertainty sources due to sub-optimal parameter values and to internal model structure, and to locate them in the modelled area.

Finally, this type of analysis should be developed in distributed modelling more widely in order to improve model quality by understanding and characterizing different types of uncertainty sources.

D.7 Acknowledgments

This research project was granted by the Carnot MINES institute, and part of the PIREN Seine research program on the Seine Basin. The authors are grateful to SIAAP (Sewage Public Company of the Greater Paris), to VNF (National Organisation for River Navigation, in charge of Surface Water Quality Control) and Veolia Water for the data they supplied and the interesting discussions concerning the Seine River water quality. The authors are also grateful to the reviewers for their attentive reading and their useful comments.

Bibliographie

- Ambrose, R., Barnwell, T., McCutcheon, S., Williams, J., 1996. Water Resources Handbook. McGraw-Hill, New York, Ch. Chapter 14 : Computer models for water quality analysis.
- Ambrose, R. B., Wool, T. A., Wool, J. P., Schanz, R. W., 1988. WASP4, A hydrodynamic and water quality model. Model theory, user's manual guide and programmer's guide. US Environmental Protection Agency.
- Anderton, S., Latron, J., Gallart, F., 2002a. Sensitivity analysis and multi-response, multi-criteria evaluation of a physically based distributed model. *Hydrological Processes* 16, 333–353.
- Anderton, S., Latron, J., White, S., Llorens, P., Gallart, F., Salvany, C., O'Connell, P., 2002b. Internal evaluation of a physically based distributed model using data from a Mediterranean mountain catchment. *EGS* 6 (1), 67–83.
- Arheimer, B., Olsson, J., 2003. Integration and coupling of hydrological models with water quality models : Applications in Europe. Tech. rep., Workgroup Report, WMO RA VI (K55.1.02).
- Arhonditsis, G., Brett, M., 2004. Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Marine Ecology Progress Series* 271, 13–26.
- Bagnold, R., 1966. An Approach to the Sediment Transport Problem from General Physics. *Physiographic and Hydraulic Studies of Rivers*. Tech. rep., Geological Survey Professional paper 422-I.
- Barnwell, T., Brown, L., Whittemore, R., 1987. Systems Analysis in Water Quality Management. Pergamon Press New York, Ch. QUAL2E - A Case Study in Water Quality Modelling Software, pp. 377–387.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model. *Journal of Hydrology* 105, 157–172.
- Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Water Resources* 16, 41–51.
- Beven, K., 2006a. A manifesto for the equifinality thesis. *Journal of Hydrology* 320, 18–36.
- Beven, K., 2006b. On undermining science ? *Hydrological Processes* 20, 3141–3146.
- Billen, G., Garnier, J., Ficht, A., Cun, C., 2001. Ecological modeling of the 50 last years of anthropogenic impact in the seine estuary. *Estuaries* 24 (6), 977–993.

- Billen, G., Garnier, J., Hanset, P., 1994. Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : The RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia* 289, 119–137.
- Billen, G., Garnier, J., Meybeck, M., 1998. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Les sels nutritifs : l'ouverture des cycles, pp. 531–5.
- Billen, G., Garnier, J., Rousseau, V., 2005. Nutrient fluxes and water quality in the drainage network of the scheldt basin over the last 50 year. *Hydrobiologia* 540 (1-3), 47–67.
- Billen, G., Servais, P., 1989. Modélisation des processus de dégradation bactérienne de la matière organique en milieu aquatique. In : Bianchi et al. (Ed.), *Micro-organismes dans les écosystèmes océaniques*. Masson Paris, pp. 219–245.
- Billen, G., Servais, P., Becquevort, S., 1990. Dynamics of bacterioplankton in oligotrophic and eutrophic aquatic environments : bottom-up or top-down control ? *Hydrobiologia* 207 (1), 37–42.
- Boudreau, B. P., 1997. *Diagenetic Models and their Implementation*. Springer.
- Brown, L. C., Barnwell, T. O., 1987. Enhanced stream water quality models, QUAL2E and QUAL2E UNCAS — Documentation and user's TechReport. US EPA.
- Butts, M., Payne, J., Kristensen, M., Madsen, H., 2004. An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *Journal of Hydrology* 298, 242–266.
- Casper, Vohland, 2008. Validation of a large scale hydrological model with data fields retrieved from reflective and thermal optical remote sensing data - a case study for the upper rhine valley. *Physics and Chemistry of the Earth* 33, 1061–1067.
- Chilès, J.-P., Delfiner, P., 1999. *Geostatistics : modeling spatial uncertainty*. Wiley, New-York.
- Chilès, J.-P., Séguret, S., Riboud, P.-M., 2008. Geostatistical analysis of validation data of an air pollution simulator. *Proceedings of the Eighth International Geostatistics Congress* 2, 861–870.
- Crabtree, R., Gent, R., Clifford, I., 1994. Controlling pollution from combined sewer overflows : Practical experience of applying an integrated approach in the UK. *Genie-Urbain-Genie Rural* 5, 269–272.
- de Fouquet, C., 2006. *La modélisation géostatistique des milieux anthropisés*. Académie de Paris, Université Pierre et Marie Curie, mémoire des sciences de la Terre.
- Ebel, B., Loague, K., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation : Seeing through the fog of equifinality. *Hydrological Processes* 20, 2887–2900.
- Even, S., Mouchel, J.-M., Servais, P., Flipo, N., Poulin, M., Blanc, S., Chabanel, M., Paffoni, C., 2007. Modeling the impacts of Combined Sewer Overflows on the river Seine water quality. *Science of the Total Environment* 375 (1-3), 140–151.
- Even, S., Poulin, M., Garnier, J., Billen, G., Servais, P., Chesterikoff, A., Coste, M., 1998. River ecosystem modelling : Application of the PROSE model to the Seine river (France). *Hydrobiologia* 373, 27–37.

- Even, S., Poulin, M., Mouchel, J.-M., Seidl, M., Servais, P., 2004. Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecological Modelling* 173, 177–196.
- Fischer, H., Pusch, M., 2001. Comparison of bacterial production in sediments and epiphyton and the pelagic zone of a lowland river. *Freshwater Biology* 46, 1335–1348.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Théry, S., Ledoux, E., 2007a. Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Science of the Total Environment* 375, 69–79.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Tusseau-Vuillemin, M.-H., Améziane, T., Dauta, A., 2004. Biogeochemical modelling at the river scale : Plankton and periphyton dynamics - Grand Morin case study, France. *Ecological Modelling* 176, 333–347.
- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France) : combined use of geostatistics and physically-based modeling. *Environ Pollut* 146 (1), 241–256.
- Flipo, N., Rabouille, C., Poulin, M., Even, S., Tusseau-Vuillemin, M., Lalande, M., 2007c. Primary production in headwater streams of the Seine basin : the Grand Morin case study. *Science of the Total Environment* 375, 98–109.
- Garnier, J., Billen, G., Coste, M., 1995. Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine : Observations and modelling. *Limnology and Oceanography* 40 (4), 750–765.
- Garnier, J., Billen, G., Hannon, E., Fonbonne, S., Videnina, Y., Soulie, 2002. Modeling transfer and retention of nutrients in the drainage network of the danube river. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 54, 285–308.
- Garnier, J., Billen, G., Hanset, P., Testard, P., Coste, M., 1998. Développement algal et eutrophisation dans le réseau hydrographique de la Seine. In : Meybeck, M., de Marsily, G., Fustec, E. (Eds.), *La Seine en son bassin-Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé*. Elsevier, pp. 593–626.
- Garnier, J., Billen, G., Sanchez, N., Leporcq, B., 2000. Ecological functioning of the Marne reservoir (upper Seine basin, France). *Regulated Rivers : Research Management*. 16, 51–71.
- Garnier, J., Némery, J., Billen, G., Théry, S., 2005. Nutrient dynamics and control of eutrophication in the Marne river system : modelling the role of exchangeable phosphorus. *Journal of Hydrology* 304, 397–412.
- Güntner, A., Uhlenbrook, S., Seibert, J., Leibundgut, C., 1999. Multi-criterial validation of TOP-MODEL in a mountainous catchment. *Hydrological Processes* 13, 1603–1620.
- Ivanov, P., Masliev, I., Kularathna, M., De Marchi, C., Somlyody, L., 1996. DESERT User's manual. Tech. rep., International Institute for Applied Systems Analysis, Austria - Institute for Water and Environmental Problems, Russia.
- Lancelot, C., Veth, C., Mathot, S., 1991. Modelling ice-edge phytoplankton bloom in the scotia-weddell sea sector of the southern ocean during spring 1998. *Journal of Marine Systems* 2, 333–346.

- Maldiney, M.-A., 1994. Caractéristiques physiques des particules en suspension dans un fleuve canalisé, exemple de la Seine. Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- McCarter, L., 1999. The multiple identities of vibrio parahaemolyticus. *Journal of Molecular Microbiology Biotechnology* 1 (1), 51–57.
- Nash, J., Sutcliffe, J., 1970. River flow forecasting through conceptual models. Part I, a discussion of principles. *Journal of Hydrology* 10, 282–290.
- Polus-Lefebvre, E., de Fouquet, C., Bernard-Michel, C., Flipo, N., Poulin, M., 2008. Geostatistical model for concentrations or flow rates in streams : some results. *Proceedings of the Eighth International Geostatistics Congress 2*, 871–880.
- Poulin, M., 2006. Réalisation de simulations PROSE - Année de référence 2003. Tech. rep., Centre de Géosciences - Mines ParisTech.
- Prosser, I., Rustomji, P., 2000. Sediment transport capacity relations for overland flow. *Progress in Physical Geography* 24 (2), 179–193.
- Quynh, L., Billen, G., Garnier, J., Théry, S., Fezard, C., Minh, C., 2005. Nutrient (N,P) budgets for the Red River basin (Vietnam and China). *Global Biogeochemical Cycles* 19 (2), GB2002.
- Refsgaard, J., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology* 198, 69–97.
- Reichert, P., 1994. AQUASIM- a tool for simulation and data analysis of aquatic systems. *Water Science and Technology* 30 (2), 21–31.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somlyódy, L., Vanrolleghem, P., 2001a. River Water Quality Model no.1. Tech. rep., IWA.
- Reichert, P., Borchardt, D., henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somlyody, L., Vanrolleghem, P., 2001b. River Water Quality Model no. 1 : II. biochemical process equations. *Water Science and Technology* 43 (5), 11–30.
- Sferratore, A., Billen, G., Garnier, J., Théry, S., 2005. Modeling nutrient (N,P,Si) budget in the Seine watershed : Application of the Riverstrahler model using data from local to global scale resolution. *Global Biogeochemical Cycles* 19 (4), GB4S07.
- Streeter, H., Phelps, E. B., 1925. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Tech. Rep. 146, U.S. Public Health Service, Treasury Department, Washington DC, public Health Bulletin.
- Tayfur, G., 2002. Applicability of sediment transport capacity models for nonsteady state erosion from steep slopes. *Journal of Hydrologic Engineering* 7 (3), 252–259.
- Wells, S., 2000. Hydrodynamic and water quality river basin modelling using CE-QUAL version3. In : Ibarra-Berastegi, G., Brebbia, C., Zannetti, P. (Eds.), *Development and Application of Computer Technics to Environmental Studies*. WIT Press Boston.
- Wool, T., Ambrose, R., Martin, J., and, E. C., 2001. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) version 6.0 - User's manual. Tech. rep., US EPA.
- Yang, C., 1996. Sediment transport theory and practice. McGraw-Hill, New York.

D.8 Appendix 1 : Description of the PROSE model

In the following paragraphs, the biogeochemical part of PROSE is summarized. A few parameters are temperature dependent (i.e. they are multiplied by a function of the water temperature expressed in °C, $f(T)$) as follows :

$$f(T) = f(T_{\text{opt}})e^{-(T-T_{\text{opt}})^2/\sigma^2} \quad (\text{D.7})$$

where T_{opt} is the optimal temperature (maximum of f), and σ is the standard deviation of T time series. In the remaining, those parameters are represented with the symbol T .

D.8.1 Primary producers

The conceptual scheme used to model the dynamics of primary producers was developed by Lancelot et al. (1991). It is based on the interpretation of experiments incorporating marked carbon into various cell constituents. Primary producer (PP) growth follows a photosynthesis-irradiance law :

$$P(z) = P_{\text{max}}^T(1 - e^{-\alpha I(z)/P_{\text{max}}^T}) e^{-\beta I(z)/P_{\text{max}}^T} \quad (\text{D.8})$$

where P_{max}^T is the maximum photosynthesis production rate ($[\text{T}^{-1}]$), $P(z)$ the actual growth rate at z ($[\text{T}^{-1}]$), $I(z)$ the actual irradiance at z ($[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$), α the slope of the light-limited portion of $P-I$ curve or the photosynthesis capacity ($[\text{L}^2]$), and β the photoinhibition coefficient ($[\text{L}^2 \mu\text{E}^{-1}]$).

The actual irradiance at z follows a Beer-Lambert law :

$$I(z) = I_0 e^{-\eta z} \quad (\text{D.9})$$

where I_0 is the light intensity at the water surface ($[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$), η is the actual light extinction ($[\text{L}^{-1}]$) depending on suspended matter concentration (SM, $[\text{ML}^{-3}]$) :

$$\eta = \eta_{\text{const}} + \eta_{\text{SM}} \text{SM} \quad (\text{D.10})$$

with η_{const} the water light extinction coefficient ($[\text{L}^{-1}]$) and η_{SM} the light extinction due to SM ($[\text{L}^{-1}]$).

The maximum rate of growth for primary producers ($\mu_{\text{max,PP}}$, $[\text{T}^{-1}]$) is then calculated by integrating $P(z)$ over the water column depth (h , $[\text{L}^{-1}]$) :

$$\mu_{\text{max,PP}} = \frac{1}{h} \int_0^h P(z) dz \quad (\text{D.11})$$

The actual growth rate (μ_{PP} , $[\text{T}^{-1}]$) is weighted by nutrient concentrations in the following way :

$$\mu_{\text{PP}} = \mu_{\text{max,PP}} \frac{N}{N + K_N} \frac{PO_4}{PO_4 + K_{PO_4}} \quad (\text{D.12})$$

where N is the concentration of nitrogen (either ammonium or nitrate) that is consumed by PP ($[\text{ML}^{-3}]$), PO_4^{3-} is orthophosphate concentration ($[\text{ML}^{-3}]$), K_i is the half saturation constant for the i^{th} species ($[\text{ML}^{-3}]$).

Losses (L in Eq. D.13, $[\text{T}^{-1}]$) are due to respiration (R_{tot} in Eq. D.14, $[\text{T}^{-1}]$), mortality (Mort_{PP}^T , $[\text{T}^{-1}]$) and sedimentation :

$$L = R_{tot} + \text{Mort}_{PP}^T + \frac{V_{sed,PP}}{h} \quad (\text{D.13})$$

$$R_{tot} = R_M^T + R_\mu \mu \quad (\text{D.14})$$

where R_M^T is the basic respiration rate ($[\text{T}^{-1}]$), R_μ is the respiration rate due to growth (without dimension), and $V_{sed,i}$ the sedimentation velocity of the i^{th} species ($[\text{LT}^{-1}]$).

Finally the variation of the PP concentration ($[\text{ML}^{-3}]$) over a time step dt is given by :

$$\frac{dPP}{dt} = (\mu_{PP} - R_{tot} - \text{Mort}_{PP}^T - \frac{V_{sed,PP}}{h})PP \quad (\text{D.15})$$

D.8.2 Bacteria

The evolution of organic matter (particulate and dissolved) and heterotrophic bacteria populations is based on the HSB model (Billen and Servais, 1989). The variation of heterotrophic bacteria (HB) concentration ($[\text{ML}^{-3}]$) is represented by :

$$\frac{dHB}{dt} = (\mu_{max,HB}^T \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \frac{DOM}{K_{DOM} + DOM} - \frac{V_{sed,HB}}{h} - \text{Mort}_{HB}^T)HB \quad (\text{D.16})$$

where DOM is the concentration of dissolved organic matter ($[\text{ML}^{-3}]$). If the oxygen concentration is lower than $O_{2,denit}$ (fitted at $1 \text{ mgO}_2.\text{L}^{-1}$), then HB use nitrates to oxidize the dissolved organic matter. The O_2 threshold represents the denitrifying process.

The variation of nitrifying bacteria concentration (NB, $[\text{ML}^{-3}]$) is represented by :

$$\frac{dNB}{dt} = (\mu_{max,NB}^T \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \frac{NH_4}{K_{NH_4} + NH_4} - \frac{V_{sed,NB}}{h} - \text{Mort}_{NB}^T)NB \quad (\text{D.17})$$

D.8.3 Difference between sediments and water column

All processes presented above occur in the water column. In sediments, PP do not grow and there is no sedimentation for any species. It is also possible to define different kinetics parameter values in water column and in sediment for bacteria, even heterotrophic or nitrifying, which was not the case in this study. Indeed Fischer and Pusch (2001) observed that bacteria are smaller in the pelagic zone than in sediments. McCarter (1999) showed that multicellular behavior and growth is complex in organized communities and that it could differ from those of single cells.

D.8.4 Exchanges between water column and sediments

The exchange flux between the water column and the sediments of the i^{th} dissolved species ($\Phi_{d,i}$, $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$) is calculated by considering the diffusion through the limit layer (Boudreau, 1997) :

$$\Phi_{d,i} = \beta(C_{s,i} - C_{w,i}) \quad (\text{D.18})$$

where β is the mass transfer coefficient ($[\text{MT}^{-1}]$), $C_{s,i}$ is the concentration of the i^{th} species in sediments ($[\text{ML}^{-3}]$) and $C_{w,i}$ the concentration of the i^{th} species in the water column ($[\text{ML}^{-3}]$). In PROSE, the formulation $\beta = E_s u_*$ is used where E_s is a fitted coefficient (without dimension and theoretically proportional to the Schmidt number), and $u_* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}}$ is the shear velocity ($[\text{LT}^{-1}]$), where τ is the mean shear stress ($[\text{ML}^{-1}\text{T}^{-3}]$) and ρ is the water volumic mass ($[\text{ML}^{-3}]$).

At each time step and in each cell of the simulated domain, PROSE calculates a total flux of particulate exchange between the water column and the sediments (Φ_d , $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$), which is the sum of an erosion flux (Φ_{ero} , $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$) and a sedimentation flux (Φ_{sed} , $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$) :

$$\Phi_p = \Phi_{ero} + \Phi_{sed} \quad (\text{D.19})$$

For the i^{th} particulate species, the erosion flux ($\Phi_{ero,i}$, $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$) is calculated based on the transport capacity theory (Bagnold, 1966; Prosser and Rustomji, 2000; Tayfur, 2002; Yang, 1996). A multi-species approach leads to the formulation (Maldiney, 1994) :

$$\Phi_{ero,i} = \chi_i \zeta \frac{1}{\sum_j \chi_j (\rho_j - \rho_w) / \rho_j} \frac{\rho_w g J U}{g} \quad (\text{D.20})$$

where χ_i is the mass fraction of the i^{th} species in sediments (without dimension), ζ is the percentage of hydraulic power used to maintain all the particles in suspension (without dimension), ρ_j the volumic mass of the j^{th} species ($[\text{ML}^{-3}]$), ρ_w the water volumic mass ($[\text{ML}^{-3}]$), g the acceleration due to gravity ($[\text{LT}^{-2}]$), J the friction slope (without dimension) and U the mean water velocity ($[\text{LT}^{-1}]$).

For the i^{th} particulate species, the sedimentation flux ($\Phi_{sed,i}$, $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$) is calculated based on :

$$\Phi_{sed,i} = V_{sed,i} C_{w,i} \quad (\text{D.21})$$

where $V_{sed,i}$ is the sedimentation velocity of the i^{th} species ($[\text{LT}^{-1}]$) and $C_{w,i}$ the concentration of the i^{th} species in the water column ($[\text{ML}^{-3}]$).

D.9 Appendix 2 : Geostatistics

Some basics of geostatistics are developped in the temporal context (1D). First theoretical and experimental variograms are presented, then geostatistical bivariate models are summarized, and finally co-kriging is tackled. For further details, one may consult Chilès and Delfiner (1999).

D.9.1 Introduction to geostatistics

A Random Function (RF) $Z(t)$ is stationary of order two if its expectation (probabilistic average) and its covariance exist and are invariant by translation :

$$E[Z(t)] = m$$

$$Cov(Z(t), Z(t + \tau)) = E[(Z(t) - m)(Z(t + \tau) - m)] = C(|\tau|)$$

The RF variance is then $Var(Z(t)) = E[(Z(t) - m)^2] = C(0)$.

The correlogram, the correlation coefficient between $Z(t)$ and $Z(t + \tau)$ as a function of the time interval τ , is the ratio between covariance and variance : $r(\tau) = \frac{C(\tau)}{C(0)}$. It can vary between 1 (for $\tau = 0$) and -1. Without any periodic component, it usually decreases and tends to zero when $|\tau|$ tends to the infinite : $r(\tau) \xrightarrow{|\tau| \rightarrow \infty} 0$.

The theoretical variogram

For RF stationary of order two, the variogram and the covariance provide an equivalent description of the temporal variability ; the variogram is written $\gamma(\tau) = C(0) - C(\tau)$.

For two main reasons, variograms are preferred to covariances or correlogram in geostatistics :

- it remains defined for “intrinsic” RF, when the covariance is not stationary or not even defined. This is the case when the variogram does not stabilize around a “sill”, as for instance for the linear variogram. Thus variogram is more general than the covariance ;
- it has interesting properties for inference, i.e. its calculation from data (Chilès and Delfiner, 1999).

The experimental variogram

Practically data are available only at experimental points ; an experimental variogram is then calculated as an average of squared differences :

$$\gamma_{exp}(\tau) = \frac{1}{2.n(\tau)} \sum_{i=1}^{n(\tau)} \left[(Z(t_i + \tau) - Z(t_i))^2 \right], \quad (D.22)$$

$n(\tau)$ designating the number of pairs of experimental instants separated from τ .

Since it is calculated on a single realization of the random function, the experimental variogram cannot be considered as a discretization of the “theoretical” variogram of variable Z (Chilès and Delfiner, 1999). In the monivariate case, experimental simple variogram is then fitted by a function $\gamma(\tau)$ admitting the required mathematical properties. In a similar way, for a bivariate (or multivariate) case, all experimental simple and cross variograms are fitted by a bivariate (or multivariate) model, in order to ensure consistency between simple and cross variograms. These fitted (also called modelled) variograms are required for estimation.

D.9.2 Geostatistical bivariate models

Let Z_1 and Z_2 be two stationary RF of order two (StRF), and m_1 and m_2 their expectation, respectively. The couple (Z_1, Z_2) is stationary of order two if the cross-covariance is stationary :

$$Cov(Z_1(t), Z_2(t + \tau)) = E[(Z_1(t) - m_1)(Z_2(t + \tau) - m_2)] = C_{12}(\tau).$$

Two RF are cross-uncorrelated (i.e. they do not have any temporal cross-correlation : $Z_1 \perp Z_2$) if $C_{12}(\tau) = 0$. The cross-variogram between two RF is defined as half the covariance of their increments :

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{1}{2} E[(Z_1(t + \tau) - Z_1(t))(Z_2(t + \tau) - Z_2(t))].$$

If Z_1 and Z_2 are cross-uncorrelated, then $\gamma(\tau) = 0$; if their cross-covariance is symmetric ($C_{12}(-\tau) = C_{12}(\tau)$), then the cross-variogram is written $\gamma_{12}(\tau) = C_{12}(0) - C_{12}(\tau)$.

The following three bivariate models present an increasing complexity. In the first model (“residual model”), simple relationships exist between two variables Z_1 and Z_2 . As this is not necessarily the case experimentally, two other bivariate models are widely used : the “intrinsic correlation model” and the “linear model of co-regionalization”. The first two models are simplifications of the third one.

The residual model

$$Z_2(t) = Z_1(t) + R(t) \quad (\text{D.23})$$

with $Z_1 \perp R$, and γ_1 , γ_2 , and γ_R respectively designating the simple variograms of Z_1 , Z_2 and R . Simple and cross variograms of Z_1 and Z_2 are thus written as :

$$\begin{cases} \gamma_2(\tau) = \gamma_1(\tau) + \gamma_R(\tau) \\ \gamma_{12}(\tau) = \gamma_1(\tau) \end{cases}$$

In this model, the cross-variogram between Z_1 and Z_2 and the variogram of Z_1 are equal and lower than the variogram of Z_2 .

The intrinsic correlation model

Definition. Two RF Z_1 and Z_2 are in intrinsic correlation if their simple and cross covariances are proportional to each other : $C_{ij}(\tau) = b_{ij}K(\tau)$, where K is a covariance function and $i, j = 1, 2$. To simplify, let's assume that $K(0) = 1$, $b_{11} \neq 0$ and $b_{22} \neq 0$ (a RF with nil variance is a constant).

Properties.

- The cross-covariance of two RF in intrinsic correlation is proportional to one of the simple stationary covariances, and is symmetric. Thus $C_{12}(-\tau) = C_{12}(\tau)$ and $b_{12} = b_{21}$.
- Simple and cross variograms also are proportional to each other : $\gamma_{ij}(\tau) = b_{ij}\gamma(\tau)$ with $\gamma(\tau) = K(0) - K(\tau)$.
- Since $Var(Z_1(t)) = C_{11}(0)$ and $Var(Z_2(t)) = C_{22}(0)$, then $b_{11} = Var(Z_1(t))$ and $b_{22} = Var(Z_2(t))$.
- If ρ denotes the correlation coefficient between $Z_1(t)$ and $Z_2(t)$ at the same instant t , their cross-covariance is written

$$Cov(Z_1(t), Z_2(t)) = \rho\sqrt{Var(Z_1(t))Var(Z_2(t))}.$$

Thus $b_{12} = \rho\sqrt{b_{11}b_{22}}$ and $C_{12}(\tau) = C_{12}(0)K(\tau)$.

Model. Let's consider Z_1 and Z_2 , two StRF : Eq. D.24 summarizes the model ; demonstrations is given hereafter.

$$\forall i, j : C_{ij}(\tau) = b_{ij}K(\tau) \Leftrightarrow \exists R \mid \begin{cases} Z_1 \perp R \text{ and } C_R(\tau) = C_1(\tau) \\ Z_2(t) = \rho\omega Z_1(t) + \omega\sqrt{1 - \rho^2}R(t) \end{cases} \quad (\text{D.24})$$

\Rightarrow Let's assume that $\omega^2 = \frac{b_{22}}{b_{11}}$, with $\omega > 0$: then $Var(Z_2) = \omega^2 b_{11}$.

If $|\rho_{12}| \neq 1$, the two StRF constitute a free system : $Z_2 = \alpha Z_1 + \beta R$, where $R \perp Z_1$. Then $Cov(Z_1(t), Z_2(t)) = \alpha Var(Z_1(t))$ and $\alpha = \rho\sqrt{\frac{b_{22}}{b_{11}}} = \rho\omega$.

One can deduce that $Z_2 = \rho\omega Z_1 + \beta R$; thus the covariance of RF R is stationary and proportional to $K(\tau)$: $\beta^2 C_R(\tau) = C_2(\tau) - \rho^2 \omega^2 C_1(\tau)$.

Assuming that $Var(R) = Var(Z_1)$, $\beta^2 C_1(\tau) = \omega^2 C_1(\tau) - \rho^2 \omega^2 C_1(\tau)$, thus

$$\beta^2 = \omega^2(1 - \rho^2) \text{ and } Z_2 = \rho\omega Z_1 + \omega\sqrt{1 - \rho^2}R,$$

with $R \perp Z_1$ and $C_R = C_1$.

Let's notice that if $|\rho_{12}| = 1$, Z_1 and Z_2 are linearly linked : $Z_2 = \omega Z_1 + a$.

\Leftarrow If $Z_2 = \rho\omega Z_1 + \omega\sqrt{1 - \rho^2}R$ with $R \perp Z_1$ and $C_R = C_1$, then :

- R is StRF, because its temporal covariance is equal to the one of Z_1 ;

- the temporal covariance of Z_2 is $C_2 = \rho^2\omega^2C_1 + \omega^2(1 - \rho^2)C_R = \omega^2C_1$;
- the temporal cross-covariance between Z_1 and Z_2 is written

$$C_{12} = \rho\omega C_1 + \omega\sqrt{1 - \rho^2}C_{1R}.$$

But as $R \perp Z_1$, their temporal cross-covariance is null : $C_{1R} = 0$ and thus $C_{12} = \rho\omega C_1$. In conclusion, given that simple and cross covariances of Z_1 and Z_2 are proportional to each other, Z_1 and Z_2 are in intrinsic correlation.

The two coefficients ρ and ω have different meanings. The correlation coefficient ρ quantifies the linear link between the variables Z_1 and Z_2 which is maximum if $|\rho| = 1$. The ‘‘sill ratio’’ ω^2 characterizes the relative amplitude of the fluctuations of both variables. If $\omega = 1$, the simple variograms of both variables are equal.

Note that if $\rho\omega = 1$, then the intrinsic correlation model corresponds to a particular case of the residual model, with γ_R proportional to γ_1 .

The linear model of co-regionalization

It generalizes the intrinsic correlation model to several temporal components k with different correlations or different fluctuation amplitudes. In this model, the simple and cross variograms are linear combinations of the same components $\gamma^k(\tau)$, a component present in the cross-variogram being necessarily present in both simple associated variograms. The model can be seen as a linear combination of several intrinsic correlation models, which can be written as Eq. D.25. Note that k describes a temporal component and not an exponent.

$$\gamma_{ij}(\tau) = \sum_k^N b_{ij}^k \gamma^k(\tau) \quad (\text{D.25})$$

D.9.3 Estimation by co-kriging (Chilès and Delfiner, 1999)

Kriging of Z_1 at a given instant t_0 is an optimal linear estimator from experimental values $Z_1(t_\alpha)$; it is written $Z^*(t_0) = \sum_\alpha \lambda_\alpha Z(t_\alpha)$.

Co-kriging consists in estimating the value of variable Z_1 at the instant t_0 thanks to the experimental values of Z_1 and to another variable Z_2 correlated to Z_1 (with for example Z_2 denser sampled than Z_1). The co-kriging of Z_1 by Z_2 at an instant t_0 is written as Eq. D.26.

$$Z_1^*(t_0) = \sum_{\alpha \in S_1} \lambda_{1\alpha} Z_1(t_{1\alpha}) + \sum_{\alpha \in S_2} \lambda_{2\alpha} Z_2(t_{2\alpha}) \quad (\text{D.26})$$

The weights $\lambda_{1\alpha}$ and $\lambda_{2\alpha}$ are obtained by minimizing the estimation error variance under non-bias conditions. For unknown and unlinked means of Z_1 and Z_2 , this is performed via the linear system presented by Eq. D.27, which involves simple and cross variograms $\gamma_{11}(\tau)$, $\gamma_{22}(\tau)$, and $\gamma_{12}(\tau)$.

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11}(t_{1\beta} - t_{1\alpha}) & \gamma_{12}(t_{2\alpha} - t_{1\alpha}) & 1 & 0 \\ \gamma_{21}(t_{1\alpha} - t_{2\alpha}) & \gamma_{22}(t_{2\beta} - t_{2\alpha}) & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{1\alpha} \\ \lambda_{2\alpha} \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{11}(t_0 - t_{1\alpha}) \\ \gamma_{21}(t_0 - t_{2\alpha}) \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{D.27})$$

Co-kriging is an exact interpolator, i.e. it goes through the experimental points $Z_1(t_{1\alpha})$: $Z_1^*(t_{1\alpha}) = Z_1(t_{1\alpha})$.

Apports croisés de la modélisation géostatistique et déterministe

Exemple des nitrates et de l'oxygène dissous dans un réseau hydrographique

Résumé : L'état des cours d'eau est caractérisé à partir des réseaux de mesure, qui comportent un nombre réduit de stations par bief, ou à l'aide de modèles déterministes, qui simulent les processus physiques de façon approchée. La thèse explore les solutions offertes par la géostatistique pour améliorer l'estimation des concentrations le long d'un réseau hydrographique à partir des mesures aux stations, puis pour combiner ces mesures à la modélisation déterministe. Un modèle variographique valide sur un arbre a été développé par C. Bernard-Michel (2006), mais l'inférence n'avait pu être réalisée, les stations de mesure s'avérant trop peu nombreuses. Pour remédier à ce manque de données, la démarche consiste à utiliser le modèle déterministe ProSe (Even et al, 1998, 2004, Flipo et al, 2004) comme maquette. Pour les nitrates et l'oxygène dissous, les résultats du modèle ProSe sont d'abord comparés à différents ensembles de mesures, révélant des discordances. Des conditions aux limites amont combinant ces différents types de mesure sont reconstruites par co-krigeage, ce qui améliore la concordance entre ProSe et les mesures. Par ailleurs, la modélisation conjointe des variogrammes des mesures et des résultats de ProSe s'avère être un outil efficace de diagnostic des imperfections du modèle déterministe. Jugée admissible comme maquette, la simulation ProSe est utilisée pour tester les hypothèses de la modélisation géostatistique et en réaliser l'inférence. Différents modèles géostatistiques permettant d'estimer les concentrations entre stations à partir des mesures sont alors comparés. Enfin, la simulation ProSe est recalée aux mesures via une estimation géostatistique bivariable.

Mots clés : Géostatistique, Qualité de l'eau, Simulation déterministe, Réseau hydrographique, Nitrates, Oxygène dissous.

Cross-benefits of geostatistical and physics-based modelling Example of nitrates and dissolved oxygen in a river network

Abstract: The river water quality is characterized either from measurement networks with a few sites by edge or thanks to physics-based models that simulate physical processes approximately. This thesis explore the solutions that geostatistics offer to improve the estimation of concentrations along a river network based on measurements, and then to combine these measurements with the physics-based simulation. A variographic model valid on a tree was developed by C. Bernard-Michel (2006), but its inference was made impossible by the too small account of measurement sites. To remedy this lack of data, the idea consists in considering the physics-based model ProSe (Even et al, 1998, 2004, Flipo et al, 2004) as a replica of reality. For nitrates and dissolved oxygen, the ProSe model outputs are first compared to different measurement sets, revealing discordances. Upstream boundary conditions combining these different kinds of measurement are reconstituted by co-kriging, what improve the agreement between ProSe outputs and measurements. Besides, the joint modelling of variograms of ProSe outputs and measurements turns out to be an efficient tool for diagnosing the physics-based model imperfections. Admitted as a replica of reality, the ProSe simulation is then used to test the hypotheses of the geostatistical modelling and to perform its inference. Different geostatistical models for the estimation of concentrations based on measurements are then compared. Finally a geostatistical estimation combining the ProSe simulation with measurements is carried out, with promising results.

Keywords: Geostatistics, Water quality, Process-based modelling, Hydrographic network, Nitrate, Dissolved oxygen.