

NIVEAU DE CONFIANCE RELATIF A L'INDICATEUR REGLEMENTAIRE DE L'ETAT CHIMIQUE D'UNE MASSE D'EAU

Recommandation, aide à la décision

JP GHESTEM, A LEYNET (BRGM)
S DEMEYER, N FISHER, B LALERE (LNE)

Septembre 2014

Programme scientifique et technique
Année 2013

Document final

Contexte de programmation et de réalisation

Ce rapport a été réalisé dans le cadre du programme d'activité AQUAREF pour l'année 2013. Il a pour objectif de proposer des pistes pour l'estimation d'un niveau de confiance sur l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau.

Auteur (s) :

JP GHESTEM
BRGM
jp.ghestem@brgm.fr

A LEYNET
BRGM
a.leynet@brgm.fr

S DEMEYER
LNE
Severine.demeyer@lne.fr

B LALERE
LNE
Beatrine.lalere@lne.fr

N FISHER
LNE
Nicolas.fisher@lne.fr

Vérification du document :

B LOPEZ
BRGM
b.lopez@brgm.fr

Les correspondants

Onema : I BARTHE-FRANQUIN, isabelle.barthe-franquin@onema.fr

BRGM : Jean Philippe GHESTEM, Direction des Laboratoires, jp.ghestem@brgm.fr

Référence du document : GHESTEM JP., LEYNET A., DEMEYER S., FISHER N., LALERE B.(2013) - Niveau de confiance relatif à l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau. Rapport final. BRGM/RP-63228-FR, 45 p., 10 ill.

Droits d'usage :	<i>Accès libre</i>
Couverture géographique :	<i>International</i>
Niveau géographique :	<i>National</i>
Niveau de lecture :	<i>Professionnels, experts</i>
Nature de la ressource :	<i>Document</i>

SOMMAIRE

1. Introduction	9
1.1. CONTEXTE	9
1.2. NOTION DE NIVEAU DE CONFIANCE	9
1.3. OBJECTIF	11
2. Définition de l'état d'une masse d'eau et niveau de confiance associé	13
2.1. PRESENTATION SIMPLIFIEE	13
2.2. DEFINITION D'UN NIVEAU DE CONFIANCE	13
2.3. APPLICATION A LA DETERMINATION DE L'ETAT CHIMIQUE D'UNE STATION D'EAU DE SURFACE	15
3. Indicateurs statistiques	17
3.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE	17
3.1.1. Estimation de la moyenne et de l'écart-type	17
3.1.2. Calcul de la probabilité de dépassement du seuil réglementaire	19
3.2. CAS DU MAXIMUM ANNUEL	19
3.2.1. Probabilité de dépassement : méthode de Cyrano	19
3.2.2. Probabilité de dépassement : Méthode « analytique »	19
3.3. REALISATION DES CALCULS	20
4. Applications	21
4.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE	21
4.1.1. Calcul de la moyenne et de l'incertitude sur la moyenne	21
4.1.2. Probabilité de dépassement du seuil réglementaire	26
4.2. CAS DE LA CONCENTRATION MAXIMALE ANNUELLE	27
4.3. APPLICATION GLOBALE POUR UN JEU COMPLET DE DONNEES	30
5. Conclusion	35
6. Bibliographie	37
7. Annexe Description des méthodes statistiques utilisées	39

TITRE : NIVEAU DE CONFIANCE RELATIF A L'INDICATEUR REGLEMENTAIRE DE L'ETAT CHIMIQUE D'UNE MASSE D'EAU

AUTEURS : JP GHESTEM, A LEYNET (BRGM), S DEMEYER, N FISHER, B LALERE (LNE)

RESUME

La Directive Cadre Européenne sur l'Eau (DCE) fixe aux Etats membres des objectifs de bon état chimique des masses d'eau. Cet état chimique réglementaire est défini entre autres grâce à la comparaison entre des concentrations de polluants et des valeurs seuils réglementaires. Ces concentrations sont le résultat d'un processus d'acquisition de mesure incluant des étapes d'échantillonnage et d'analyse qui sont sources d'erreurs et d'incertitudes et entraînent in fine une incertitude sur l'évaluation de l'état chimique.

Le travail proposé s'inscrit dans le programme d'action AQUAREF pour l'année 2013. Il est réalisé en partenariat par le BRGM et le LNE avec la collaboration de l'INERIS et de l'IRSTEA dans le cadre de conventions de partenariat avec l'ONEMA. Il a pour objectif d'initier une démarche méthodologique visant à proposer aux gestionnaires un indicateur du « niveau de confiance » relatif à l'évaluation réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau. Dans le cadre du champ d'action d'AQUAREF, la réflexion proposée s'intéresse principalement à la contribution des incertitudes analytiques à cet indicateur dont l'objectif est d'estimer :

- la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit bien celui qui a été estimé
- et réciproquement, la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit différent de celui qui a été estimé.

L'évaluation de l'état chimique des eaux de surface, en moyenne annuelle (MA) ou en concentration maximale admissible (CMA), a servi de base à la mise en place de l'approche théorique du travail. Les principales étapes de cette approche sont :

- l'estimation de l'incertitude sur la « métrique » retenue comme indicateur réglementaire de l'état (MA ou CMA). Elle prend en compte les données élémentaires de concentration et leurs incertitudes.
- l'estimation du niveau de confiance à partir de la « métrique », de son incertitude et de la position de cette métrique par rapport à la valeur seuil réglementaire ou Norme de Qualité Environnementale (NQE).

Plusieurs méthodes statistiques sont proposées. Quelques conclusions concernant l'applicabilité de ces méthodes sont présentées mais, dans l'hypothèse où ce concept de « niveau de confiance » serait retenu par les gestionnaires, il sera nécessaire de choisir les méthodes statistiques les plus adaptées sur la base de la mise en application de ces méthodes sur de nombreux exemples. Afin d'illustrer l'approche théorique, la méthode de Cyrano (technique du « bootstrap ») a été retenue pour une simulation sur un jeu de données « réelles » (concentrations mensuelles de 41 substances prioritaires). Pour chaque substance et pour la masse d'eau (au niveau de la station) les indicateurs de l'état chimique (en moyenne annuelle et en concentration maximale) sont calculés et un niveau de confiance (en %) leur est associé.

Dans cette étude, les réflexions sont menées sur la base des règles et pratiques actuelles de l'évaluation de l'état chimique d'une masse d'eau de surface, sans remise en cause des fréquences d'échantillonnage, de la représentativité des stations, des périodes d'échantillonnage,.... L'influence de ces paramètres est complexe mais déterminante. Elle devra être prise en compte, en complément des concepts présentés dans ce rapport, dans l'objectif de fiabiliser l'évaluation de l'état chimique des masses d'eau et de préciser les niveaux de confiance associés.

Mots clés (thématique et géographique) : incertitude, masse d'eau, état, fiabilité, statistiques



Niveau de confiance relatif à l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau

Rapport final

BRGM/RP-63228-FR

Septembre 2014

Niveau de confiance relatif à l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau

Rapport final

BRGM/RP-63228-FR

Septembre 2014

Étude réalisée dans le cadre des opérations
de Service public du BRGM 2013

JP GHESTEM, A LEYNET (BRGM), S DEMEYER, N FISHER, B LALERE (LNE)

Vérificateur :

Nom : B LOPEZ

Date : 10/09/14

Signature :



Approbateur :

Nom : H GABORIAU

Date : 20/10/14

Signature :



En l'absence de signature, notamment pour les rapports diffusés en version numérique,
l'original signé est disponible aux Archives du BRGM.

Le système de management de la qualité du BRGM est certifié AFAQ ISO 9001:2008.

Mots-clés : incertitude, masse d'eau, état, fiabilité, statistiques.

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

GHESTEM JP., LEYNET A., DEMEYER S., FISHER N., LALERE B.(2013) – Niveau de confiance relatif à l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau. Rapport final. BRGM/RP-63228-FR, 45 p., 10 ill.

© BRGM, 2013, ce document ne peut être reproduit en totalité ou en partie sans l'autorisation expresse du BRGM.

Synthèse

La Directive Cadre Européenne sur l'Eau (DCE) fixe aux Etats membres des objectifs de bon état chimique des masses d'eau. Cet état chimique réglementaire est défini entre autres grâce à la comparaison entre des concentrations de polluants et des valeurs seuils réglementaires. Ces concentrations sont le résultat d'un processus d'acquisition de mesure incluant des étapes d'échantillonnage et d'analyse qui sont sources d'erreurs et d'incertitudes et entraînent in fine une incertitude sur l'évaluation de l'état chimique.

Le travail proposé s'inscrit dans le programme d'action AQUAREF pour l'année 2013. Il est réalisé en partenariat par le BRGM et le LNE avec la collaboration de l'INERIS et de l'IRSTEA dans le cadre de conventions de partenariat avec l'ONEMA. Il a pour objectif d'initier une démarche méthodologique visant à proposer aux gestionnaires un indicateur du « niveau de confiance » relatif à l'évaluation réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau. Dans le cadre du champ d'action d'AQUAREF, la réflexion proposée s'intéresse principalement à la contribution des incertitudes analytiques à cet indicateur dont l'objectif est d'estimer :

- la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit bien celui qui a été estimé
- et réciproquement, la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit différent de celui qui a été estimé.

L'évaluation de l'état chimique des eaux de surface, en moyenne annuelle (MA) ou en concentration maximale admissible (CMA), a servi de base à la mise en place de l'approche théorique du travail. Les principales étapes de cette approche sont :

- l'estimation de l'incertitude sur la « métrique » retenue comme indicateur réglementaire de l'état (MA ou CMA). Elle prend en compte les données élémentaires de concentration et leurs incertitudes.
- l'estimation du niveau de confiance à partir de la « métrique », de son incertitude et de la position de cette métrique par rapport à la valeur seuil réglementaire ou Norme de Qualité Environnementale (NQE).

Plusieurs méthodes statistiques sont proposées. Quelques conclusions concernant l'applicabilité de ces méthodes sont présentées mais, dans l'hypothèse où ce concept de « niveau de confiance » serait retenu par les gestionnaires, il sera nécessaire de choisir les méthodes statistiques les plus adaptées sur la base de la mise en application de ces méthodes sur de nombreux exemples.

Afin d'illustrer l'approche théorique, la méthode de Cyrano (technique du « bootstrap ») a été retenue pour une simulation sur un jeu de données « réelles » (concentrations mensuelles de 41 substances prioritaires). Pour chaque substance et pour la masse d'eau (au niveau de la station) les indicateurs de l'état chimique (en moyenne annuelle et en concentration maximale) sont calculés et un niveau de confiance (en %) leur est associé.

Dans cette étude, les réflexions sont menées sur la base des règles et pratiques actuelles de l'évaluation de l'état chimique d'une masse d'eau de surface, sans remise en cause des fréquences d'échantillonnage, de la représentativité des stations, des périodes d'échantillonnage,.... L'influence de ces paramètres est complexe mais déterminante. Elle devra être prise en compte, en complément des concepts présentés dans ce rapport, dans l'objectif de fiabiliser l'évaluation de l'état chimique des masses d'eau et de préciser les niveaux de confiance associés.

Sommaire

1. Introduction	9
1.1. CONTEXTE	9
1.2. NOTION DE NIVEAU DE CONFIANCE	9
1.3. OBJECTIF	11
2. Définition de l'état d'une masse d'eau et niveau de confiance associé	13
2.1. PRESENTATION SIMPLIFIEE.....	13
2.2. DEFINITION D'UN NIVEAU DE CONFIANCE	13
2.3. APPLICATION A LA DETERMINATION DE L'ETAT CHIMIQUE D'UNE STATION D'EAU DE SURFACE	15
3. Indicateurs statistiques	17
3.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE.....	17
3.1.1. Estimation de la moyenne et de l'écart-type.....	17
3.1.2. Calcul de la probabilité de dépassement du seuil réglementaire	19
3.2. CAS DU MAXIMUM ANNUEL.....	19
3.2.1. Probabilité de dépassement : méthode de Cyrano.....	19
3.2.2. Probabilité de dépassement : Méthode « analytique »	20
3.3. REALISATION DES CALCULS.....	20
4. Applications	21
4.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE.....	21
4.1.1. Calcul de la moyenne et de l'incertitude sur la moyenne.....	21
4.1.2. Probabilité de dépassement du seuil réglementaire	26
4.2. CAS DE LA CONCENTRATION MAXIMALE ANNUELLE	27
4.3. APPLICATION GLOBALE POUR UN JEU COMPLET DE DONNEES	30
5. Conclusion	35
6. Bibliographie	37
7. Annexe Description des méthodes statistiques utilisées	39

Liste des illustrations

- Illustration 1 : représentation schématique de la distribution de la variable Y (en bleu), associée à son incertitude $U(Y)$ et de la valeur seuil réglementaire V_s (zone A : bon état et zone B : mauvais état) 14
- Illustration 2 : représentation schématique de la modélisation utilisée pour simuler des incertitudes analytiques (incertitude élargie $k=2$) 22
- Illustration 3 : données des trois substances sélectionnées utilisées pour les simulations numériques : code SANDRE, limite de quantification de la méthode (LQ), normes de qualité en moyenne annuelle (NQE_{MA}) et en concentration maximale admissible (NQE_{CMA}), concentrations mensuelles et leurs incertitude ($k=2$) associées (pour les concentrations $<LQ$, les incertitudes théoriques sont données au niveau « $LQ/2$ ») ; so = sans objet. 22
- Illustration 4 : résultats obtenus pour la moyenne annuelle et son incertitude ($k=1$) pour trois substances chimiques et 6 méthodes statistiques. (la méthode 3a n'est pas adaptée au cas du naphthalène) 23
- Illustration 5 : représentation graphique des données individuelles pour l'isoproturon et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau $LQ/2$) – (méthode 4 : CIPM B) 24
- Illustration 6 : représentation graphique des données individuelles pour le naphthalène et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau $LQ/2$) – méthode 4 : CIPM A 24
- Illustration 7 : représentation graphique des données individuelles pour la somme benzo(b) et benzo(k) fluoranthène et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau $LQ/2$) – méthode 4 : CIPM B 25
- Illustration 8 : probabilité de dépassement de la valeur réglementaire pour le paramètre « somme benzo(b) benzo(k) fluoranthène » en fonction de la méthode statistique utilisée. 27
- Illustration 9 : résultats obtenus pour trois substances en termes de concentration maximale (pour les méthodes « Cyrano » et « Analytique ») et d'incertitude sur cette valeur maximale (méthode « Cyrano ») 28
- Illustration 10 : simulation du calcul de probabilité de « bon état » (maximum annuel) pour différentes valeurs fictives de NQE_{CMA} (données de l'isoproturon). 29
- Illustration 11 : représentation graphique des données de l'illustration 1010 (en rouge : méthode de Cyrano et en bleu méthode « analytique ») 29
- Illustration 12 : jeu de données utilisé pour appliquer la méthode de Cyrano (concentrations C en $\mu g/l$ et incertitude élargies U en %) – Les cases vides dans les colonnes C1 à C12 correspondent à des résultats inférieurs à la LQ (résultats remplacés par $LQ/2$ lors des calculs de moyenne) 31
- Illustration 13 : résultats obtenus avec la méthode de Cyrano pour le jeu de données présentés à l'illustration 9 (moyenne Cyrano, incertitude sur la moyenne Cyrano, maximum Cyrano et incertitude sur le maximum ainsi que les probabilités de dépassement des valeurs seuils). Les valeurs arithmétiques de la moyenne et du maximum sont rappelées. 32

1. Introduction

1.1. CONTEXTE

Dans un objectif d'amélioration de la qualité des masses d'eau européennes, la directive cadre européenne sur l'eau [1] a défini des concepts et méthodologies à mettre en place par les Etats membres. La notion d'« état d'une masse d'eau » est un des concepts fondamentaux de la directive. Il permet notamment de fixer des objectifs en termes de « bon état » des masses d'eau dans chaque Etat membre. Ainsi, le premier objectif fixé par la directive en 2000 était un objectif de « bon état » de l'ensemble des masses d'eau européennes à l'horizon 2015.

La notion d'« état chimique d'une masse d'eau » est variable suivant le type de masse d'eau auquel on s'intéresse. Les substances qui participent à la définition de l'état d'une masse d'eau souterraine ou d'une masse d'eau de surface, ainsi que les seuils à prendre en compte pour définir le bon ou le mauvais état sont variables. Les méthodologies à appliquer sont décrites dans différents textes réglementaires, pour les eaux souterraines [2] et pour les eaux de surface [3].

Pour chaque type d'eau, ces documents décrivent les différentes méthodes d'agrégation des données permettant d'aboutir à la définition d'un indicateur de l'état chimique d'une masse d'eau. Les données prises en compte sont issues de programmes de surveillance des masses d'eau. Elles correspondent à des campagnes d'échantillonnage et d'analyse permettant de connaître les concentrations de polluants dans le milieu considéré. Ces données sont ensuite exploitées pour définir un indicateur caractérisant l'état chimique des masses d'eau suivant des règles bien définies et harmonisées au niveau national et européen. De façon simplifiée, les masses d'eau sont déclarées en bon état si un certain nombre de valeurs réglementaires (normes de qualité) ne sont pas dépassées.

Suite à ces évaluations d'état des masses d'eau, les gestionnaires de bassin doivent s'attacher à mettre en place des actions (programmes de mesure) permettant de comprendre les situations de « mauvais état » puis, autant que possible, permettre de retourner à une situation de « bon état ». Ceci implique souvent des enjeux financiers très importants. Il semble donc nécessaire de disposer du maximum d'éléments objectifs permettant de prendre des décisions adaptées à partir des données acquises dans les programmes de surveillance des masses d'eau.

1.2. NOTION DE NIVEAU DE CONFIANCE

Afin de prendre des décisions adaptées, par exemple concernant la déclaration de bon ou mauvais état d'une masse d'eau, il peut être utile de disposer dans un premier temps du maximum d'informations concernant la fiabilité des données à prendre en compte.

Comme dans chaque processus d'acquisition de données, des erreurs sont introduites à chaque niveau de l'acquisition. Les processus d'échantillonnage et d'analyse n'échappent pas à cette règle et à chaque donnée des programmes de surveillance est associée une incertitude plus ou moins bien connue. Ces données étant utilisées pour évaluer l'état chimique de la masse d'eau, il est logique de considérer qu'à l'évaluation de cet état chimique est aussi associée une incertitude. On peut ainsi chercher à définir, pour l'évaluation de cet état, un « niveau de confiance », c'est à dire quantifier :

- la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit bien celui qui a été estimé
- et donc ainsi, la probabilité que l'état chimique de la masse d'eau soit différent de celui qui a été estimé.

La DCE introduit elle-même la notion de niveau de confiance. Elle indique par exemple pour les eaux souterraines que « l'évaluation du niveau de confiance et de précision des résultats fournis par les programmes de contrôles (doit) être indiquée dans le plan (de gestion) ».

Le guide européen sur la surveillance des eaux souterraines [4] indique que « lors de la conception d'un programme de surveillance, le niveau de confiance requis sur les résultats de surveillance doit être défini afin de garantir un niveau de confiance suffisant pour l'évaluation ».

De façon générale ce concept de niveau de confiance est repris à de nombreux endroits des guides européens rédigés pour une application harmonisée de la directive [4] [5] [6] et notamment dans le guide n°7 [6] « Monitoring under the Water Framework Directive ». Ce dernier guide indique par exemple que les niveaux de confiance et de précision doivent être définis en lien avec les conséquences de mauvaises évaluations et par exemple des risques de mauvaises classifications d'une masse d'eau.

Ces niveaux de confiance dépendent d'un grand nombre de facteurs qui sont plus ou moins faciles à maîtriser. Il est possible de citer par exemple:

- la représentativité des stations de surveillance par rapport à la masse d'eau
- la fréquence d'échantillonnage et la variabilité du milieu
- les erreurs liées aux opérations techniques d'échantillonnage sur la station
- les incertitudes analytiques
- les incertitudes liées au protocole d'évaluation

Cependant, dans les guides européens cités, aucune recommandation ou règle précise n'existe concernant la façon dont ces niveaux de confiance doivent être définis.

Au niveau national, le document décrivant de façon détaillée les règles d'évaluation de l'état d'une masse d'eau de surface continentale [7] introduit cette notion de niveau de confiance pour l'état chimique et aussi pour l'état écologique. En ce qui concerne l'état chimique, ce niveau de confiance n'utilise pas les incertitudes sur les données de surveillance. Il prend en compte uniquement la quantité d'information existante (par exemple la proportion de substances de l'état chimique sur lesquelles les données disponibles permettent de se prononcer).

Concernant les incertitudes analytiques, ce guide rappelle que le suivi des polluants dans les eaux ne permet pas d'obtenir une valeur exacte de leur concentration mais un encadrement de cette valeur :

- d'une part, parce qu'à toute mesure est liée une incertitude analytique (U)
- d'autre part, parce que la résolution analytique des laboratoires est limitée : en-dessous d'un certain niveau, la concentration d'un polluant ne peut plus être quantifiée, il s'agit de la limite de quantification (LQ).

Incertitude analytique et limite de quantification varient en fonction des capacités des laboratoires mais aussi et surtout en fonction des polluants à analyser. Le guide insiste également sur le fait qu'aujourd'hui l'information relative à l'incertitude analytique n'est pas toujours disponible car pas systématiquement transmise par les laboratoires. En conséquence elle n'est pas prise en compte dans l'évaluation de l'état chimique (elle est par défaut considérée comme inférieure ou égale à 50% - cf. article 2 de l'arrêté du 08/07/10 modifiant

l'arrêté « évaluation » du 25 janvier 2010). **À court terme cependant, le guide indique que cette dimension devra être intégrée dans l'évaluation de l'état des eaux. Il convient donc d'exiger des laboratoires qu'ils transmettent systématiquement l'incertitude associée aux résultats d'analyses.**

Outre les avantages en termes d'informations pour une prise de décision adaptée, la notion de niveau de confiance peut également être utile du point de vue de la communication. En effet, compte tenu des incertitudes sur l'ensemble de la chaîne de mesure, et en fonction de la proximité des résultats avec les valeurs seuils, l'état d'une masse d'eau peut changer du tout au tout d'une année à l'autre uniquement par l'effet de la variabilité inévitable des données. Disposer d'informations indiquant que, compte tenu des incertitudes, l'état d'une masse d'eau est mauvais mais que la probabilité qu'il soit bon n'est pas négligeable permettrait plus facilement d'expliquer d'éventuels futurs changements d'état.

Le « niveau de confiance » considéré dans cette étude correspondra à la probabilité que les concentrations en polluants ne dépassent pas les valeurs seuils réglementaires.

1.3. OBJECTIF

Ce travail est inscrit dans le programme d'action AQUAREF pour l'année 2013. Il est réalisé en partenariat par le BRGM et le LNE avec la collaboration de l'INERIS et de l'IRSTEA dans le cadre de conventions de partenariats avec l'ONEMA.

L'objectif de ce rapport est de proposer aux gestionnaires un outil améliorant l'information disponible sur les données relatives à l'état chimique d'une masse d'eau en introduisant des concepts statistiques simples. Ces nouvelles informations devraient permettre des prises de décision plus fiables et offrir de nouvelles possibilités de communication sur l'état des masses d'eau et l'évolution de cet état. De façon plus précise, il s'agit de proposer une méthodologie de calcul/d'évaluation d'un niveau de confiance sur l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau utilisant notamment l'incertitude sur chaque donnée. L'incertitude minimale prise en compte dans le cadre du champ d'action d'AQUAREF est l'incertitude analytique.

Il est proposé de choisir le contexte des eaux de surface pour développer la méthodologie. Celle-ci devrait pouvoir s'adapter aux autres contextes par la suite.

L'objectif n'est pas de fournir un outil achevé du point de vue statistique et opérationnel. Il s'agit de proposer une méthodologie destinée à être débattue avec les gestionnaires afin de déterminer ses avantages et inconvénients pour la gestion future des masses d'eau.

Dans ce cadre, les réflexions ont été menées sur la base des règles actuelles les plus simples de l'évaluation de l'état chimique d'une masse d'eau de surface sans les remettre en cause, notamment sans remise en cause des fréquences d'échantillonnage, de la représentativité des stations, des périodes d'échantillonnage, ... Ces différents paramètres restent bien évidemment des paramètres très importants pour une détermination fiable de l'état d'une masse d'eau. Leur influence est complexe mais elle semble indispensable à étudier en complément de l'étude proposée dans ce rapport.

2. Définition de l'état d'une masse d'eau et niveau de confiance associé

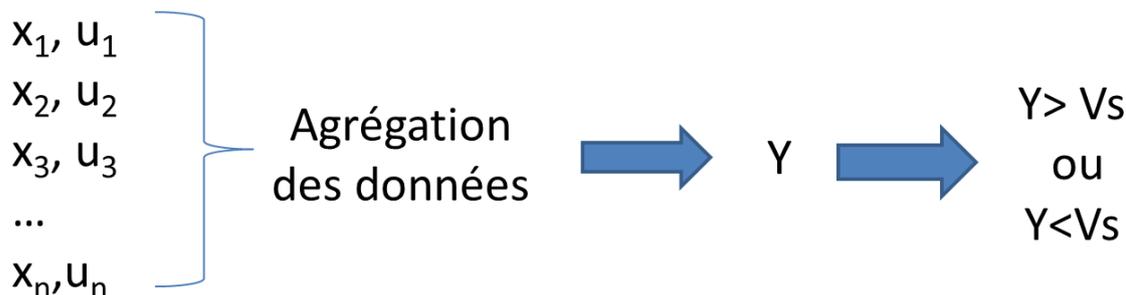
2.1. PRESENTATION SIMPLIFIEE

De façon schématique, le problème posé est le suivant.

A chaque résultat d'analyse environnementale (x_i), est associée une incertitude de mesure (u_i). Dans le cadre de ce rapport il est considéré que l'incertitude est seulement due à l'incertitude analytique (cf remarque ci-dessous).

Des règles sont fixées au niveau national ou européen afin de prendre des décisions à partir de ces données environnementales. Par exemple dans le contexte DCE, il peut s'agir de déterminer un indicateur de l'état chimique de la masse d'eau.

Pour cela, les données individuelles (x_i, u_i) sont agrégées suivant des règles précises [7] (il peut s'agir par exemple d'effectuer la moyenne des données). Le résultat Y de cette agrégation de données est comparé à une valeur seuil réglementaire V_s . Le résultat de cette comparaison permet de définir un « bon » ou un « mauvais » état.



Remarque : le choix de ne considérer dans un premier temps que l'incertitude analytique est une simplification. On pourrait considérer que l'incertitude associée au résultat intègre d'autres sources d'incertitude (échantillonnage par exemple). Ceci ne modifierait rien au raisonnement. Cependant, et malgré les gros efforts mis ces dernières années sur la qualité des opérations d'échantillonnage, la détermination des incertitudes liées à ces données reste un exercice très difficile et les données disponibles sont, à ce jour, rares.

2.2. DEFINITION D'UN NIVEAU DE CONFIANCE

Compte tenu des incertitudes u_i qui affectent les données individuelles x_i , Y n'est pas une valeur déterminée mais une variable qui suit une loi de distribution (gaussienne ou autre) et dont on peut chercher à donner une représentation via le calcul de statistiques (ou de métriques).

Dans ce schéma conceptuel et afin de définir des niveaux de confiance, les deux principales questions qui se posent sont les suivantes :

1. Estimer Y (suivant les règles fixées par les textes réglementaires, par exemple moyenne, maximum, ...) et son incertitude $U(Y)$ en utilisant les résultats individuels x_i et leurs incertitudes u_i . La détermination de U constitue le point le plus délicat du point de vue statistique.
2. Connaissant Y et son incertitude $U(Y)$, déterminer les niveaux de confiance relatifs au dépassement ou non de la valeur seuil réglementaire

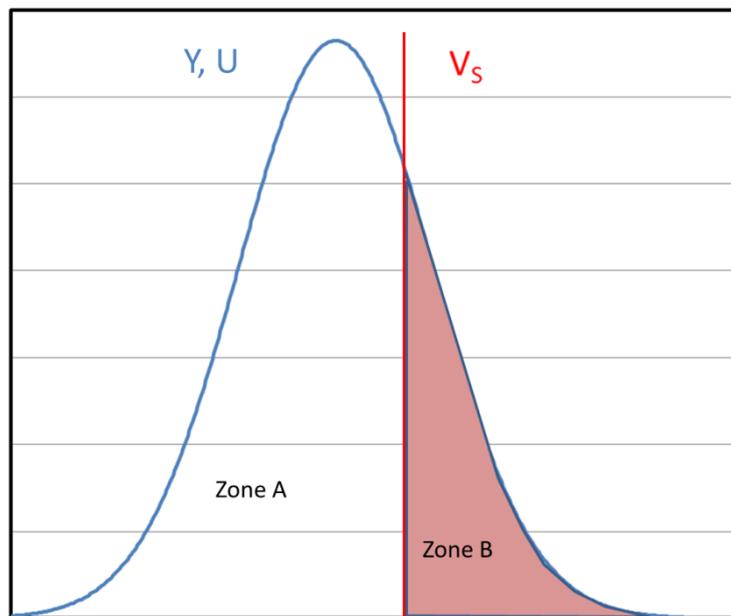


Illustration 1 : représentation schématique de la distribution de la variable Y (en bleu), associée à son incertitude $U(Y)$ et de la valeur seuil réglementaire V_s (zone A : bon état et zone B : mauvais état)

En utilisant l'illustration 1, les deux objectifs principaux se résument à :

1. Estimer Y et $U(Y)$. L'estimation de Y est déjà classiquement faite par les Etats membres et, en France par les gestionnaires de bassin pour estimer l'état des masses d'eau. Cette estimation sera cependant effectuée aussi dans ce rapport avec les méthodes statistiques retenues.
2. Estimer la probabilité de dépassement de la valeur seuil : connaissant Y et U , calculer le rapport $B/(A + B)$ (où A et B sont les aires des zones A et B). Ce rapport donnera la probabilité que la variable Y dépasse la valeur seuil V_s . Dans le cas présenté ci-dessus la variable Y est en moyenne inférieure à V_s . En faisant l'hypothèse que ceci correspond à une situation de conformité, le rapport $A/(A + B)$ fournit un niveau de confiance (probabilité de « non dépassement ») associé à cette situation de conformité. A l'inverse, $B/(B + A)$ donne la probabilité que la situation soit non conforme alors que la conclusion réglementaire est la conformité.

Attention : le graphique ci-dessus présente un modèle gaussien (loi normale) pour la variable Y. Il s'agit d'une hypothèse simplificatrice. La loi de distribution de la variable Y peut suivre d'autres modèles.

2.3. APPLICATION A LA DETERMINATION DE L'ETAT CHIMIQUE D'UNE STATION D'EAU DE SURFACE

Les données de surveillance environnementale, les fréquences d'acquisition et les modes d'agrégation de données sont variables en fonction du type de masse d'eau auquel on s'intéresse. Dans ce rapport, nous prendrons comme exemple le cas de l'évaluation de l'état chimique d'une station d'eau de surface continentale pour appliquer les concepts statistiques retenus.

Il ne s'agit pas d'entrer dans tous les détails de l'évaluation de l'état. Nous avons choisi de nous baser sur quelques règles simples qui permettent d'illustrer les méthodes et principes proposés. Le cas de l'évaluation de l'état chimique d'une masse d'eau de surface sur une station définie peut se résumer de la façon suivante :

- Sur cette station, acquisition tous les mois sur une année des concentrations de n substances prioritaires (par exemple $n=41$ soit 41×12 résultats individuels)
- A chaque concentration doit être associée une incertitude de mesure u_i

Avec ces données, deux évaluations sont réalisées afin de définir l'état chimique de la masse d'eau. Une évaluation concerne la moyenne des concentrations et l'autre, le maximum. Ces évaluations sont résumées dans le tableau ci-dessous.

Moyenne annuelle (MA)	Concentration maximale (CMA)
<p>Pour chaque substance :</p> <ul style="list-style-type: none"> - remplacement des concentrations inférieures à LQ par LQ/2 - calcul de la moyenne annuelle Y des 12 données 	<p>Pour chaque substance :</p> <ul style="list-style-type: none"> - recherche de la concentration maximale Y sur l'année
<p>Pour chaque substance : comparaison de la moyenne annuelle Y avec la valeur réglementaire appelée NQE_{MA}</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si $Y < NQE_{MA}$: bon état pour la substance • Si $Y > NQE_{MA}$: mauvais état pour la substance 	<p>Pour chaque substance : comparaison de la valeur maximale avec la valeur réglementaire appelée NQE_{CMA}</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si $Y < NQE_{CMA}$: bon état pour la substance • Si $Y > NQE_{CMA}$: mauvais état pour la substance
<p>La station est déclarée en bon état si les états sont bons pour les n substances</p>	<p>La station est déclarée en bon état si les états sont bons pour les n substances</p>
<p>Elle est en mauvais état si l'état est mauvais pour au moins une substance</p>	<p>Elle est en mauvais état si l'état est mauvais pour au moins une substance</p>

Dans la suite du rapport seules ces deux situations seront étudiées.

Les règles détaillées d'évaluation de l'état d'une masse d'eau de surface sont décrites dans le « Guide technique Évaluation de l'état des eaux de surface continentales (cours d'eau, canaux, plans d'eau) » de décembre 2012. [7].

3. Indicateurs statistiques

3.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE

3.1.1. Estimation de la moyenne et de l'écart-type

Comme indiqué précédemment le point le plus délicat de la méthode consiste à déterminer l'incertitude sur la variable Y , moyenne des 12 données acquises sur une année.

A partir des 12 données x_i disponibles dans le cas d'un suivi mensuel sur une année, il existe plusieurs méthodes possibles d'estimation de Y et de son incertitude U .

Les méthodes testées dans ce rapport pour calculer la moyenne et lui associer une incertitude sont les suivantes. De façon volontaire elles couvrent une gamme variée allant de méthodes arithmétiques simples, en passant par des méthodes issues de documents normalisées (même si utilisées ici en dehors de leur strict domaine d'application) et des méthodes statistiques plus élaborées.

- 1a - Moyenne arithmétique simple sans prise en compte de la dispersion « inter-mensuelle » des données dans l'incertitude : dans cette méthode, l'incertitude associée à la moyenne est estimée en combinant les incertitudes associées à chaque donnée sans prendre en compte la dispersion entre les données. Ainsi, dans un cas idéal pour lequel les 12 résultats seraient très dispersés mais connus de façon sûre (incertitude analytique quasiment nulle), l'incertitude sur la moyenne serait également quasiment nulle. L'indicateur de l'état serait connu avec une très grande précision.
- 1b- Moyenne arithmétique simple avec prise en compte de la dispersion « inter-mois » des données dans l'incertitude : dans cette méthode, l'incertitude associée à la moyenne est estimée en combinant les incertitudes associées à chaque donnée et en tenant compte de la dispersion entre les données.
- 2 - Médiane : il s'agit d'un estimateur robuste de la moyenne qui ne présuppose pas d'hypothèse concernant une distribution gaussienne (normale) des résultats. La formule de l'incertitude sur la médiane suppose à l'inverse une distribution gaussienne des résultats.
- 3 - Algorithme A de la norme NF ISO 13528 [8] : cette norme décrit les méthodes statistiques de traitement des essais interlaboratoires (problématique proche d'un point de vue mathématique). A partir des 12 données annuelles la moyenne des résultats et l'incertitude sur la moyenne sont définies. Ce sont également des objectifs de comparaison interlaboratoires. Cependant, dans le cas d'analyses environnementales, les variations des résultats peuvent être beaucoup plus importantes que dans le cas d'un essai interlaboratoires pour lequel tous les laboratoires travaillent sur un même échantillon. L'algorithme A fournit un estimateur robuste de la moyenne des résultats, alternatif à la médiane, qui repose sur l'hypothèse de normalité et d'indépendance des données. Deux méthodes sont utilisées pour déterminer l'incertitude sur cette moyenne : l'une utilise les incertitudes individuelles sur les résultats (méthode 3b) et l'autre ne les utilise pas (3a).
- 4 - Procédures A et B du CIPM : Le Comité International des Poids et Mesures s'occupe notamment de comparaisons internationales de haut niveau métrologique. Il applique pour ces comparaisons des méthodes statistiques permettant d'accéder à la valeur moyenne et à l'incertitude sur cette valeur.

- 5 - Procédure bayésienne : cette procédure fournit une estimation des paramètres recherchés (moyenne annuelle, maximum) sous forme de distribution de probabilités. Elle consiste en la mise à jour de la connaissance a priori sur ces paramètres à partir des données nouvellement acquises. Elle suppose la normalité et l'indépendance des résultats. Elle fournit la formulation analytique de la distribution de Y en plus des deux premiers moments (moyenne et variance). Cette méthode d'estimation assure de plus la positivité du mesurande (contrainte introduite dans l'algorithme d'estimation)..
- 6 - Méthode de Cyrano (« bootstrap » [9]) : les techniques de bootstrap estiment une statistique (par exemple moyenne ou dispersion) à partir de la seule information des données, et avec un minimum d'hypothèses. Elles sont basées sur des simulations engendrant de « nouveaux échantillons » obtenus par « tirage avec remise » à partir de l'échantillon initial (on parle de rééchantillonnage). Cette méthode permet dans notre cas de traiter de façon relativement simple les aspects d'estimation de la moyenne, de l'incertitude sur la moyenne, de proportion de dépassement d'une valeur seuil et aussi de traiter les aspects liés au dépassement du maximum.

L'objectif de ce rapport n'est pas de présenter ces approches statistiques dans le détail. En annexe 1, sont décrits les principes de base de ces méthodes. Les valeurs moyennes Y et leurs incertitudes sont calculées suivant ces méthodes. Seules les méthodes 1 (a et b) , 3, 4 et 6 utilisent les incertitudes u_i des valeurs individuelles. Les méthodes 2 et 5 n'utilisent pas ces données pour évaluer l'incertitude sur la valeur moyenne.

Ces méthodes statistiques présentent des caractéristiques très diverses. Elles reposent sur des hypothèses. Par exemple, elles supposent toutes l'indépendance des mesures. Toutes les méthodes sauf la méthode 6 (bootstrap) supposent la normalité des résultats (résultats distribués suivant une loi normale). Ces hypothèses sont des hypothèses simplificatrices. La dernière hypothèse est souvent faite par les laboratoires pour l'estimation des incertitudes de mesure. Cette hypothèse de normalité pourrait être supprimée en remplaçant par une loi gaussienne tronquée ou bien par une loi lognormale.

Le Tableau 1 présente de façon synthétique les méthodes statistiques proposées ainsi que les hypothèses faites et le caractère robuste ou pas du résultat de la méthode.

Méthodes		Hypothèses					Résultat
		Indépendance des mesures	Mesures identiquement distribuées	Normalité	Prise en compte de l'incertitude sur chaque résultat	Prise en compte de la variabilité inter mois dans l'estimation de l'incertitude	Robustesse
1a	Moyenne	O	N	N	O	N	N
1b	Moyenne	O	O	N	O	O	N
2	Médiane	O	N	N	N	N	O
	Incertitude sur la médiane	O	O	O	N	O	O
3	3a Algorithme A	O	O	O	N	O	O
	3b Algorithme A	O	O	O	O	N	O
4	CIPM A	O	N	O	O	N	N
	CIPM B	O	N	O	O	O	N
5	Procédure bayésienne	O	O	O	N	O	N
6	Cyrano (bootstrap)	O	O	N	O	O	N

Tableau 1 : hypothèses statistiques pour les méthodes proposées.

3.1.2. Calcul de la probabilité de dépassement du seuil réglementaire

A partir de l'estimation de la moyenne, de son incertitude et de la valeur seuil, et en fonction de la méthode statistique choisie, les calculs de probabilité de dépassement du seuil réglementaire (NQE_{MA}) sont différents.

- Pour la moyenne (1a et 1b), la médiane, la méthode CIPM (A et B), l'algorithme A, une méthode consiste à réaliser des tirages aléatoires dans la distribution normale que l'on peut affecter à la valeur moyenne (centrée en la valeur estimée de la moyenne et dont l'écart-type est l'incertitude-type associée à cette estimation). La probabilité de dépassement du seuil est calculée comme la proportion de tirages au-dessus du seuil. Si la valeur tirée est supérieure au seuil on la convertit en la valeur 1, si elle est inférieure au seuil on la convertit en la valeur 0. La proportion de 1 sur un échantillon suffisamment grand de taille M fournit une estimation de Monte-Carlo, notée P dans ce document, de la probabilité de dépasser le seuil. Il est également possible, connaissant la valeur moyenne de la distribution ainsi que son écart-type, d'utiliser la distribution cumulée d'une loi normale (fonction Excel : LOI.NORMALE.N). Dans les deux cas on présuppose une distribution normale/gaussienne pour la variable Y .
- Pour la méthode bayésienne, la probabilité est obtenue directement comme la proportion de valeurs de la distribution supérieure au seuil. La démarche bayésienne conduit en particulier à une distribution de Student et ne requiert pas l'approximation gaussienne.
- Pour la méthode de Cyrano, la proportion de dépassement est définie par la proportion de tirages (parmi les 10 000 tirages réalisés, tirages vectoriels avec remise et bruit « analytique » gaussien) qui conduisent à une moyenne annuelle supérieure à la NQE_{MA} . La méthode ne présuppose pas de distribution (normale par exemple) pour la moyenne. Elle fournit en outre une distribution graphique de cette moyenne.

3.2. CAS DU MAXIMUM ANNUEL

3.2.1. Probabilité de dépassement : méthode de Cyrano

La méthode est identique à celle développée pour la moyenne annuelle (cf annexe 1). Pour chacun des 10 000 tirages simulés de 12 valeurs (12 valeurs « tirées avec remise » parmi le jeu de 12 résultats d'analyses, auxquelles on ajoute un bruit analytique basé sur l'incertitude de mesure), le maximum de concentration est déterminé. Le maximum Y est ensuite estimé comme la moyenne des 10 000 maximums. Cette méthode permet également d'estimer une incertitude sur ce maximum annuel (écart-type sur les 10 000 résultats).

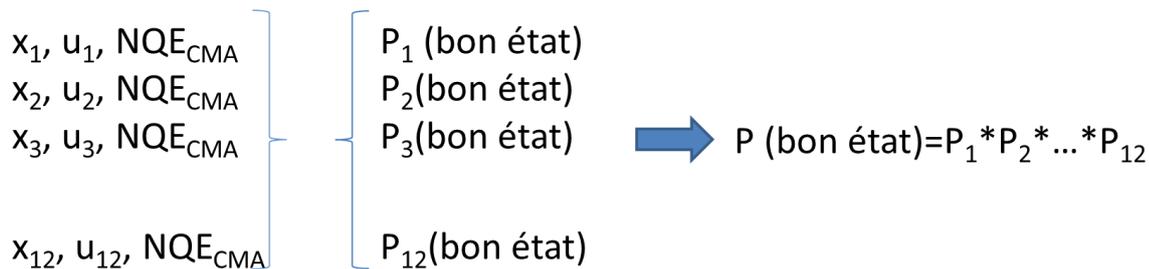
La probabilité de dépassement de la valeur seuil NQE_{CMA} peut être définie de façon très simple comme la proportion des 10 000 tirages pour lesquels la valeur seuil (NQE_{CMA}) est dépassée.

Remarque : la technique du bootstrap aurait également pu s'envisager « sans remise ». Dans ce cas, en faisant l'hypothèse que l'incertitude analytique est nulle, il faudrait considérer que la concentration moyenne annuelle est connue de façon sûre sans aucune incertitude. Il s'agit d'un choix qui devra être validé lors des discussions sur la méthode avec les gestionnaires. La position prise ici (en adoptant un tirage avec remise) est de considérer que la méthode doit

rendre compte non seulement des incertitudes analytiques mais aussi des incertitudes sur la concentration moyenne calculée, en utilisant uniquement les 12 données disponibles.

3.2.2. Probabilité de dépassement : Méthode « analytique »

Pour chaque substance et pour chacun des 12 résultats x_i associé à son incertitude u_i cette méthode simple prend en compte la probabilité de dépassement de la valeur maximale NQE_{CMA} . Elle considère ensuite que, pour que la masse d'eau soit en bon état pour la substance considérée, il faut que le bon état soit assuré pour les 12 résultats. En supposant l'indépendance des 12 mesures, on calcule le produit de chacune des 12 probabilités de « bon état » (P_1 à P_{12}) pour obtenir la probabilité P de bon état de la masse d'eau pour la substance considérée.



3.3. REALISATION DES CALCULS

Les calculs ont été menés de la façon suivante :

- Moyenne : Tableur Excel
- Médiane : Tableur Excel
- Algorithme A : calcul avec le logiciel «R » disponible gratuitement sur internet (<http://www.r-project.org>)
- Procédure BIPM : Logiciel R
- Méthode Bayésienne : logiciel R
- Méthode de Cyrano : code de calcul développé sous R pour les calculs sur des jeux de données complets et calculs effectués avec tableur Excel pour des tests sur jeu limité de données.
- Approche analytique des concentrations maximales : Tableur excel

4. Applications

4.1. CAS DE LA MOYENNE ANNUELLE

4.1.1. Calcul de la moyenne et de l'incertitude sur la moyenne

Les différentes méthodes statistiques décrites au chapitre 3 ont été appliquées sur 3 jeux de données issues de programmes de surveillance (données « réelles »). Ces jeux de données concernent les trois substances suivantes choisies de façon à proposer des situations différentes.

- Isoproturon : substance quantifiée de temps en temps mais ne dépassant pas la NQE
- Naphtalène : substance peu quantifiée mais lorsqu'elle est présente sa concentration dépasse la NQE
- Somme Benzo(b) benzo(k) fluoranthène : « substance » toujours quantifiée et NQE fréquemment dépassée.

Il est à noter que les résultats présentés ont comme objectif d'illustrer la faisabilité de la méthode et notamment la faisabilité de définir les estimateurs de moyenne et d'incertitude. Les substances choisies n'ont donc aucune importance dans le raisonnement et pourraient être remplacées par d'autres substances pour cette démonstration.

Les données prises en compte sont présentées dans l'illustration 3. Pour ces données issues de programmes de surveillance, les incertitudes n'étaient pas disponibles. Aussi, afin de pouvoir réaliser les simulations, des incertitudes « théoriques » ont donc été établies par modélisation. Le modèle choisi est de type « puissance » présentant au niveau de la limite de quantification une incertitude de l'ordre de 75% ($k=2$) et une incertitude de l'ordre de 30% ($k=2$) à partir de 10 fois la limite de quantification. Cette approche par modèle, même si elle est très simplificatrice, permet d'obtenir des incertitudes dont les ordres de grandeur sont proches des ordres de grandeur attendus classiquement pour des analyses de micropolluants. Cette modélisation a été effectuée uniquement dans un objectif de disposer d'incertitudes afin de poursuivre les simulations et pallier l'absence de données relatives aux incertitudes ou leur caractère inexploitable. Elle ne serait pas nécessaire dès lors que les données de surveillance bancarisées seraient systématiquement accompagnées de leur incertitude. L'illustration 2 représente schématiquement l'incertitude modélisée en fonction de la position de la concentration par rapport à la limite de quantification.

Dans les règles d'évaluation les calculs de la moyenne sont effectués en considérant les résultats inférieurs à la LQ comme étant égaux à $LQ/2$. La modélisation d'incertitude aboutit pour les résultats inférieurs à la limite de quantification à des incertitudes théoriques de l'ordre de 106%. Les incertitudes sont données avec un facteur d'élargissement égal à 2.

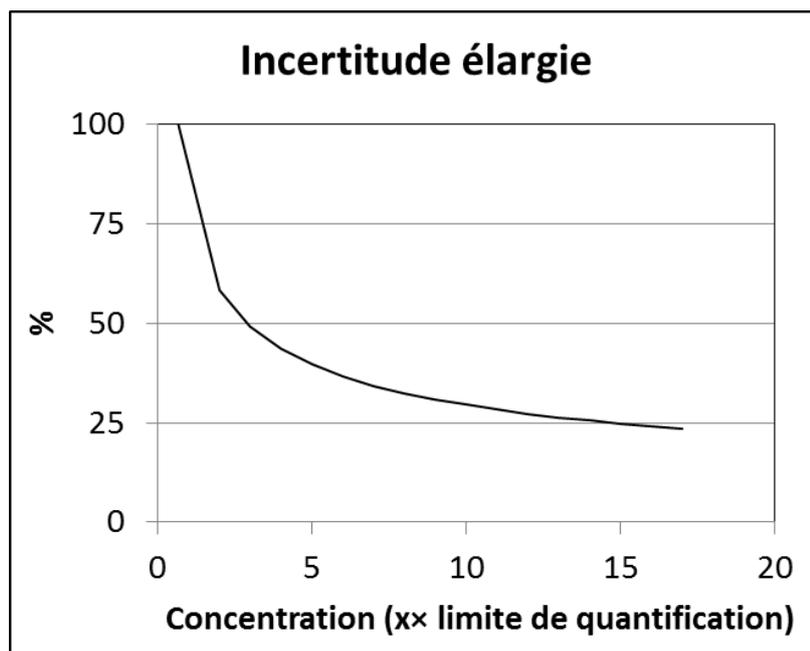


Illustration 2 : représentation schématique de la modélisation utilisée pour simuler des incertitudes analytiques (incertitude élargie $k=2$)

Paramètre	Isoproturon		Naphtalène		Somme benzo b benzo k fluo.	
SANDRE	1208		1517		5535	
LQ ($\mu\text{g/l}$)	0,02		0,01		0,006	
NQE MA ($\mu\text{g/l}$)	0,3		2,4		0,03	
NQE CMA ($\mu\text{g/l}$)	1		so		so	
	Conc. ($\mu\text{g/l}$)	Incertitude (%)	Conc. ($\mu\text{g/l}$)	Incertitude (%)	Conc. ($\mu\text{g/l}$)	Incertitude (%)
1	0,05	53	0,01	79	0,04	35
2	0,1	40	0,02	58	0,04	35
3	0,27	26	<	106	0,012	58
4	0,11	38	<	106	0,027	41
5	0,04	58	<	106	0,01	63
6	<	106	<	106	0,029	40
7	<	106	<	106	0,028	41
8	<	106	<	106	0,012	58
9	<	106	<	106	0,029	40
10	<	106	0,02	58	0,07	28
11	0,11	38	<	106	0,013	57
12	0,24	27	<	106	0,015	53

Illustration 3 : données des trois substances sélectionnées utilisées pour les simulations numériques : code SANDRE, limite de quantification de la méthode (LQ), normes de qualité en moyenne annuelle (NQE_{MA}) et en concentration maximale admissible (NQE_{CMA}), concentrations mensuelles et leurs incertitude ($k=2$) associées (pour les concentrations $<LQ$, les incertitudes théoriques sont données au niveau « $LQ/2$ ») ; so = sans objet.

Les 6 méthodes statistiques décrites au chapitre 3 ont été appliquées sur ce jeu de données afin de déterminer la moyenne annuelle et l'incertitude sur cette moyenne (Illustration 4). L'ensemble des données et des résultats des méthodes statistiques est présenté dans les illustrations 5, 6 et 7 (les numéros des méthodes sont donnés dans l'illustration 4).

Méthode	Isoproturon		Naphtalène		Somme benzo b benzo k fluo.	
	Moy. (µg/l)	Inc. (%)	Moy. (µg/l)	Inc. (%)	Moy. (µg/l)	Inc. (%)
Moyenne (1a)	0,081	6	0,0079	11	0,02708	6
Moyenne (1b)	0,081	33	0,0079	25	0,02708	19
Médiane (2)	0,045	44	0,0050	0	0,02750	25
Algorithme A (3a)	0,052	24	na	na	0,02510	18
Algorithme A (3b)	0,052	12	0,0050	23	0,02510	8
CIPM (4)	0,045	19	0,0055	11	0,02440	12
M Bayésienne (5)	0,080	29	0,0078	75	0,02680	27
Cyrano (6)	0,081	32	0,0079	24	0,02705	19

Illustration 4 : résultats obtenus pour la moyenne annuelle et son incertitude (k=1) pour trois substances chimiques et 6 méthodes statistiques. (la méthode 3a n'est pas adaptée au cas du naphtalène)

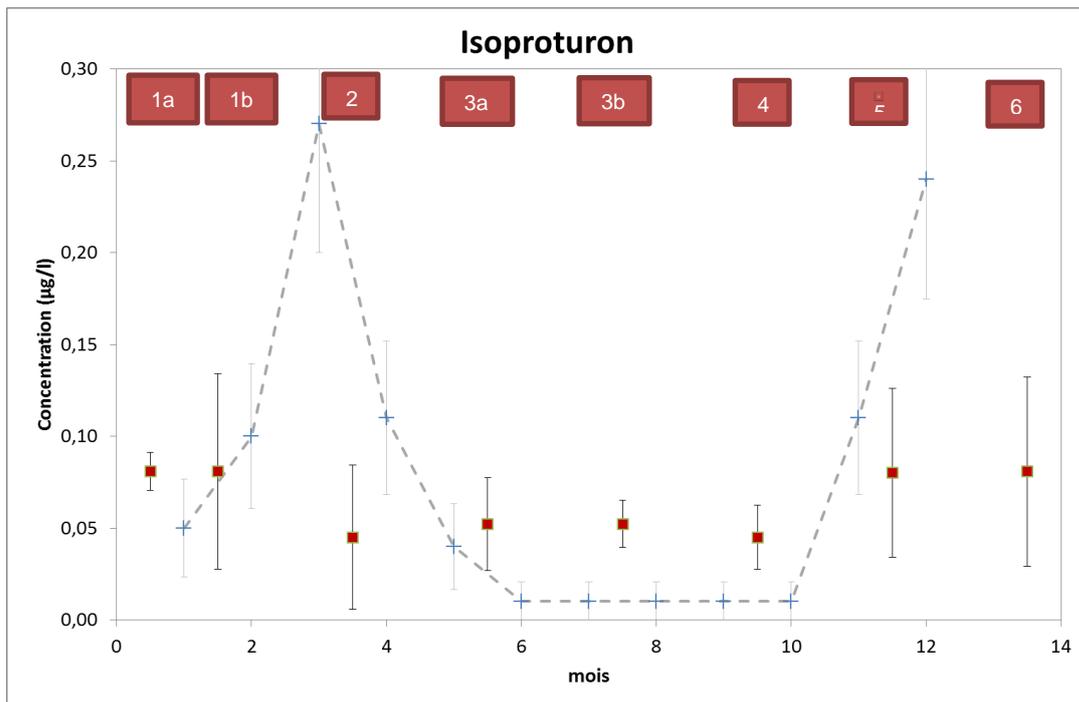


Illustration 5 : représentation graphique des données individuelles pour l'isoproturon et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau LQ/2) – (méthode 4 : CIPM B)

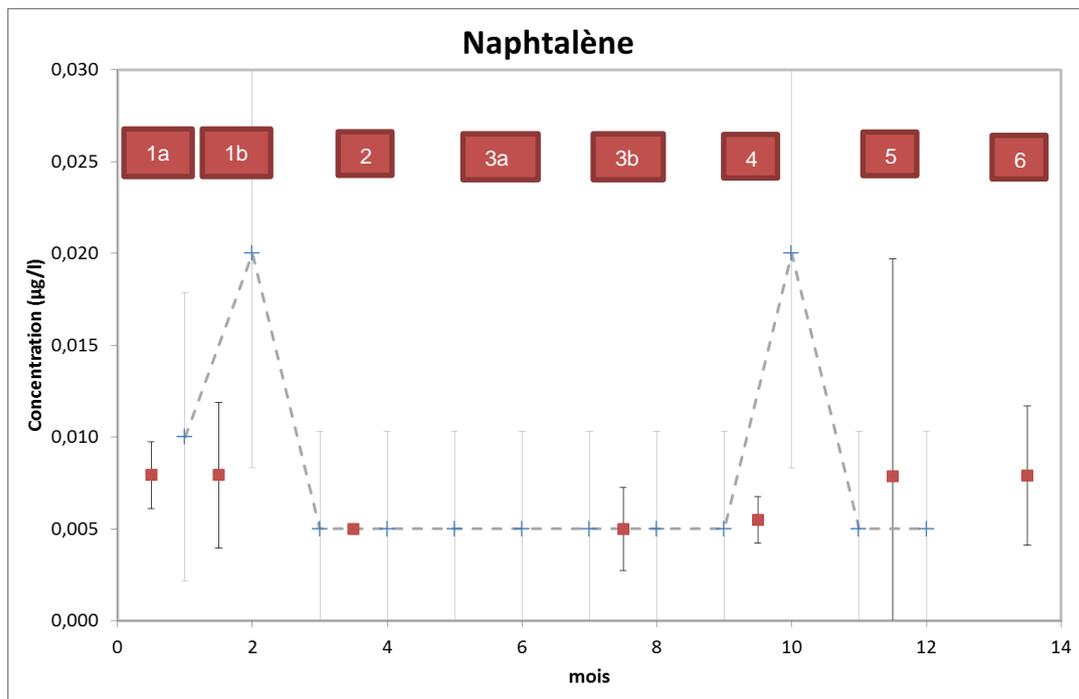


Illustration 6 : représentation graphique des données individuelles pour le naphthalène et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau LQ/2) – méthode 4 : CIPM A

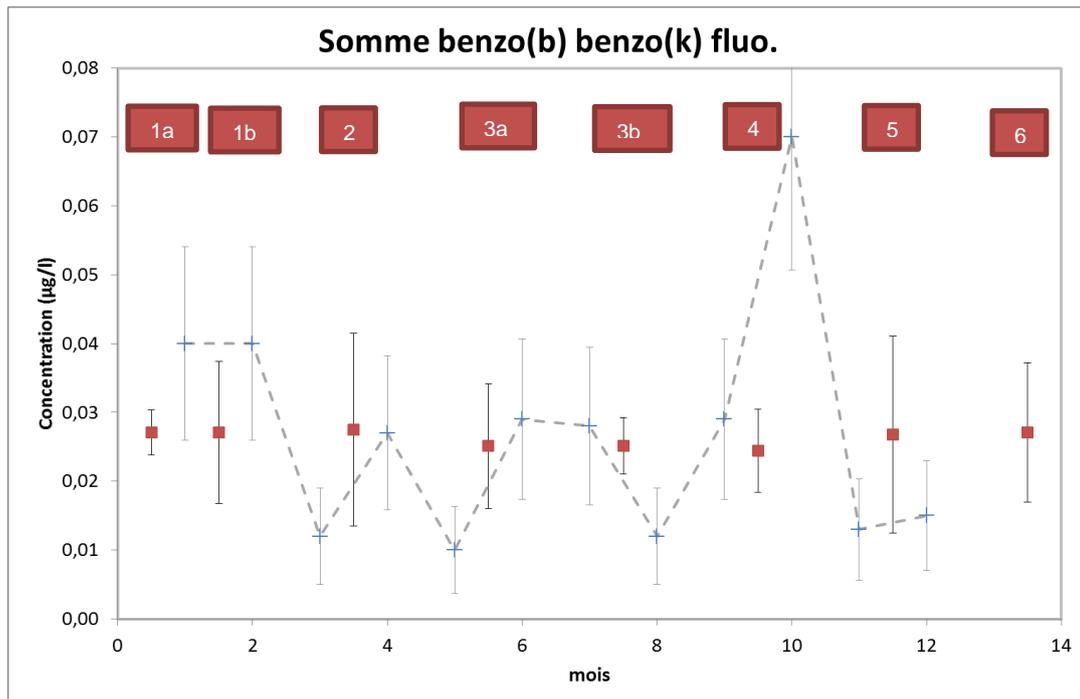


Illustration 7 : représentation graphique des données individuelles pour la somme benzo(b) et benzo(k) fluoranthène et des moyennes annuelles (carrés rouges) avec leurs incertitudes ($k=2$) en fonction des 6 méthodes statistiques appliquées (les résultats inférieurs à LQ sont représentés au niveau LQ/2) – méthode 4 : CIPM B

Ces résultats amènent aux quelques constats factuels suivants concernant les méthodes utilisées.

Les méthodes

La médiane n'est pas adaptée dans le cas du Naphtalène car l'incertitude associée est ramenée à 0, due au fait que plus de la moitié des résultats sont identiques.

L'algorithme 3.a (sans utilisation des incertitudes individuelles) n'est pas adapté non plus dans le cas du Naphtalène car tous les résultats sont ramenés à 0,005 (LQ/2) par la procédure et conduit ainsi à une incertitude nulle sur la moyenne robuste. On lui préférera dans ce cas, la version 3.b qui prend en compte les incertitudes sur chaque donnée.

Les moyennes des méthodes 1 (a et b), 5 et 6 sont identiques (aux erreurs d'échantillonnage près pour les méthodes 5 et 6). En effet l'estimateur « moyenne arithmétique » est commun à ces trois méthodes. L'incertitude estimée par la méthode 1a est beaucoup plus faible que l'incertitude estimée par les méthodes 5 et 6. Cette méthode 1a ne prend pas en compte la dispersion « inter-mensuelles » des données. Elle ne considère que les incertitudes analytiques sur chaque donnée. A l'inverse, la méthode 1b tient compte de la dispersion des données sur l'année pour l'évaluation de l'incertitude sur la moyenne. Les évaluations d'incertitudes sur la moyenne sont alors très cohérentes avec les évaluations des méthodes 5 et surtout 6.

Les incertitudes des méthodes 1a, 3, 4 sont systématiquement plus faibles que les incertitudes fournies par les autres méthodes.

Isoproturon et naphthalène: les moyennes des méthodes 2, 3, 4 sont inférieures aux autres méthodes. Ceci est dû à la surreprésentation des résultats en dessous de la LQ (pour la médiane en particulier) et au poids fort associé aux résultats en dessous de la LQ (incertitudes analytiques très faibles)

Somme benzo b/benzo k: toutes les méthodes fournissent des résultats très proches en moyenne (proches de la moyenne arithmétique). Les méthodes 1a, 3b, 4 fournissent des incertitudes très faibles. Les estimations d'incertitude sont proches pour les méthodes 1b, 2, 3a, 5 et 6.

Conclusion

Les résultats des différentes méthodes sur les 3 analytes permettent de dégager les conclusions suivantes :

- La médiane et l'algorithme A (version 3.a) ne sont pas des méthodes adaptées lorsque plus de la moitié des résultats sont identiques. Ce cas étant assez fréquent dans les programmes de surveillance pour un certain nombre de substances, ces deux méthodes ne seront pas privilégiées.
- Les résultats mensuels dont les incertitudes sont les plus faibles ont les poids les plus forts dans le calcul de la valeur moyenne. Pour cette raison, les méthodes 1a, 3.a, 4, ne prenant pas en compte la variabilité des mesures et ne pondérant pas par l'incertitude individuelle, au vue des données observées, ont tendance à fournir des incertitudes trop faibles sur la valeur moyenne. Ainsi, si les incertitudes faibles sont associées à des résultats non critiques (par exemple en dessous de la LQ) alors la valeur moyenne peut être sous-estimée. Dans ce cas les méthodes 1b, 5 et 6 pourraient être préférées
- De façon générale, ces données montrent que les méthodes 1b (moyenne avec prise en compte de la dispersion), 5 (Bayes) et 6 (Cyran) donnent des résultats cohérents en ce qui concerne les valeurs moyennes annuelles et les incertitudes associées. Pour les deux dernières méthodes, les estimations d'incertitude sont soit proches (cas de l'isoproturon et de la somme benzo(b) benzo(k)) soit nettement supérieure pour la méthode 5 (cas du naphthalène : 75% pour la méthode 5 et 24% pour la méthode 6). Les méthodes 1b et 6 donnent systématiquement des résultats très proches, que ce soit en moyenne annuelle ou pour l'incertitude sur la moyenne.

Les autres méthodes (2, 3 et 4) donnent des résultats plus faibles pour la moyenne annuelle pour isoproturon et naphthalène et donnent des résultats identiques aux méthodes 1, 5, 6 pour la somme benzo(b) benzo(k). De façon générale, les méthodes 2, 3 et 4 semblent moins adaptées sur les cas étudiés mais cela sera à confirmer sur un nombre de cas plus significatif.

4.1.2. Probabilité de dépassement du seuil réglementaire

Pour l'isoproturon et pour le naphthalène, les valeurs seuils sont bien au-dessus des moyennes estimées donc les probabilités de dépassement sont nulles. L'indice de confiance de l'état est de 100%. Pour le paramètre « somme benzo(b) benzo(k) fluoranthène » des probabilités de dépassement peuvent être calculées sur la base des méthodes décrites au §3.2 (Illustration 8).

Méthode	Somme benzo b benzo k fluoranthène		
	Moyenne (µg/l)	Incertitude (% k=1)	Probabilité de dépassement (%)
Moyenne (1a)	0,02708	6	4
Moyenne (1b)	0,02708	19	29
Médiane (2)	0,02750	25	36
Algorithme A (3a)	0,02510	18	17
Algorithme A (3b)	0,02510	8	0.8
CIPM (4)	0,02440	12	3
M Bayésienne (5)	0,02680	27	33
Cyrano (6)	0,02705	19	28

Illustration 8 : probabilité de dépassement de la valeur réglementaire pour le paramètre « somme benzo(b) benzo(k) fluoranthène » en fonction de la méthode statistique utilisée.

Ainsi sur la base de ces informations, pour la moyenne annuelle et en prenant l'exemple de la méthode Cyrano, les résultats de surveillance de la somme benzo b/benzo k fluoranthène sur la station choisie pourraient être présentés de la façon suivante :

Etat chimique	BON (moyenne annuelle)
Niveau de confiance sur la détermination de l'état	72 %

Note : l'appellation « niveau de confiance » n'est pas à considérer au sens statistique.

4.2. CAS DE LA CONCENTRATION MAXIMALE ANNUELLE

Dans le chapitre 3, deux méthodes sont décrites pour estimer la probabilité de dépassement de la valeur seuil en concentration maximale pour chacun des 12 points : méthode Cyrano et méthode analytique. Sur les exemples choisis, seul l'isoproturon dispose d'une valeur de NQE_{CMA} (1 µg/l). Compte tenu de cette valeur, et des valeurs de concentrations étudiées, la probabilité de dépassement est nulle pour les 2 méthodes proposées. L'état chimique de la masse d'eau sur ce point est donc bon avec un niveau de confiance de 100%. Les

concentrations maximales estimées par les deux méthodes sont de 0,27 (max des 12 valeurs) et de 0,247 (valeur maximale estimée par la méthode de Cyrano).

L'illustration 9 présente les résultats obtenus par les 2 méthodes.

	Isoproturon		Naphtalène		Somme benzo b benzo k fluo.	
Méthode	Max. (µg/l)	Inc. (%)	Max. (µg/l)	Inc. (%)	Max. (µg/l)	Inc. (%)
Analytique	0,270		0,0200		0,070	
Cyrano	0,247	21	0,0180	27	0,055	27

Illustration 9 : résultats obtenus pour trois substances en termes de concentration maximale (pour les méthodes « Cyrano » et « Analytique ») et d'incertitude sur cette valeur maximale (méthode « Cyrano »).

Les résultats de concentration maximale obtenus par les deux méthodes proposées sont très proches mais il faut noter que la méthode de Cyrano a tendance à légèrement minimiser la concentration maximale. C'est notamment le cas pour le calcul effectué pour la somme benzo b benzo k fluoranthène où le maximum estimé suivant la méthode de Cyrano n'est que de 0,055 contre un maximum arithmétique de 0,07 µg/l. Seule la méthode de Cyrano fournit une estimation d'incertitude sur la concentration maximale. Cette notion n'est pas utile dans le cas de la méthode « analytique ».

Afin de comparer les méthodes et illustrer globalement la notion de niveau de confiance de l'état, des simulations sont faites à partir des données de l'isoproturon en modifiant de façon théorique la valeur seuil NQE_{CMA} depuis une valeur de 0,12 jusqu'à une valeur de 0,35 µg/l. Les résultats sont présentés dans l'illustration 10 et graphiquement à l'illustration 11.

NQE _{CMA} (µg/l)	Probabilité bon état (méthode analytique) en %	Probabilité bon état (Cyrano) en %
0,12	0	11
0,15	0	11
0,18	0	11
0,2	0	11
0,21	1	11
0,22	2	11
0,23	5	13
0,24	10	20
0,25	18	32
0,26	28	40
0,27	41	61
0,28	54	86
0,29	67	98
0,3	78	100
0,31	86	100
0,32	92	100
0,33	95	100
0,34	98	100
0,35	99	100

Illustration 10 : simulation du calcul de probabilité de « bon état » (maximum annuel) pour différentes valeurs fictives de NQE_{CMA}. (données de l'isoproturon).

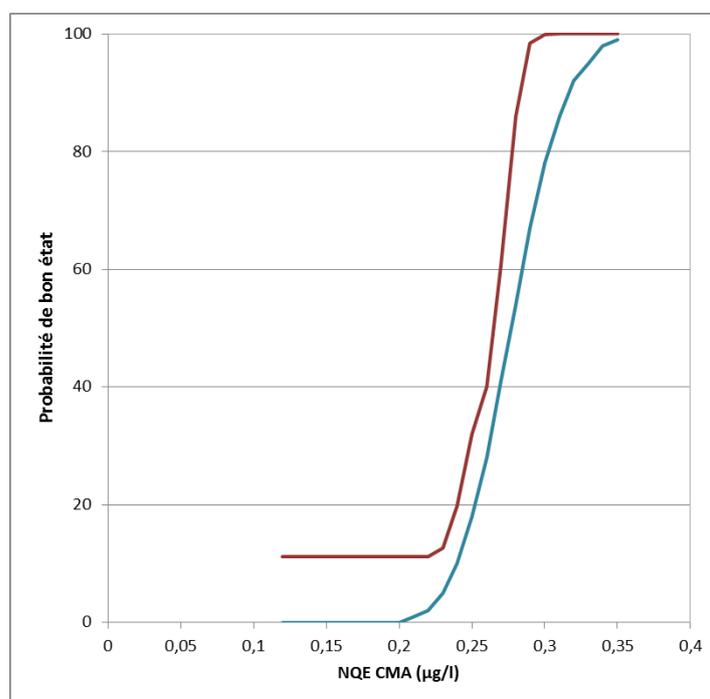


Illustration 11 : représentation graphique des données de l'illustration 1010 (en rouge : méthode de Cyrano et en bleu méthode « analytique »)

Ces résultats illustrent une nouvelle fois le fait que la méthode de Cyrano a tendance à minimiser les effets de fortes concentrations maximales. En minimisant cette valeur, cette méthode a tendance à fournir des probabilités de « bon état » supérieures par rapport à la méthode « analytique ». Cette dernière méthode considère chaque résultat de façon équivalente y compris les valeurs les plus fortes. Même si les écarts ne sont pas toujours importants, il s'agit là d'une différence de principe entre les deux méthodes sur laquelle un choix devrait être fait. Cette discussion pourrait rejoindre les discussions qui avaient eu lieu il y a quelques années au niveau européen concernant le prise en compte non pas du maximum annuel mais plutôt d'un percentile (90) des données. En France, la décision avait été prise de considérer le maximum des données et non un percentile.

Il faut noter que dans certains cas, la méthode Cyrano fournit des résultats de valeur maximale supérieurs au maximum de la série de données (cf §4.3 cas du nickel). Cela est dû à la prise en compte de l'incertitude de mesure et au fait que les données sont très proches les unes des autres.

4.3. APPLICATION GLOBALE POUR UN JEU COMPLET DE DONNEES

Pour cette application sur un jeu complet de données, nous avons choisi de retenir la méthode de Cyrano qui permet à la fois de traiter la question de la moyenne annuelle et du maximum, et qui prend en compte les incertitudes de mesure individuelles. Cette méthode a donc été appliquée sur un jeu complet de données concernant 41 substances prioritaires. Comme dans les exemples précédents, les incertitudes ont été simulées sur les mêmes bases que celles qui sont décrites en 4.1.1.

Le jeu complet de données utilisé est présenté dans l'illustration 12. Il est constitué de résultats obtenus pour 41 substances (12 valeurs mensuelles et 12 incertitudes associées). Les paramètres LQ, NQE_{MA} et NQE_{CMA} sont rappelées dans le tableau.

Niveau de confiance relatif à l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau

SAN DRE	Paramètre	LQ (µg/l)	NQE MA (µg/l)	NQE CMA (µg/l)	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	U1	U2	U3	U4	U5	U6	U7	U8	U9	U10	U11	U12
1083	Chlorpyrifos-éthyl	0,009	0,03	0,1													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	
1101	Alachlore	0,03	0,3	0,7													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	
1107	Atrazine	0,03	0,6	2													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	
1114	Benzène	0,5	10	50													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	
1115	Benzo(a)pyrène	0,001	0,05	0,1	0,02	0,02	0,006	0,01	0,007	0,01	0,01	0,006	0,02	0,04	0,008	0,009	22	22	37	29	34	29	29	37	22	16	32	31
1135	Chloroforme	0,5	2,5	so												0,8	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	64
1148	DDT 44'	0,008	0,01	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1161	Dichloroéthane-1,2	0,5	10	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1168	Dichlorométhane	5	20	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1177	Diuron	0,02	0,2	1,8			0,03	0,03	0,04	0,04	0,04	0,06	0,05	0,06	0,03	0,04	106	106	66	66	58	58	58	49	53	49	66	58
1191	Fluoranthène	0,005	0,1	1	0,05	0,05		0,04	0,03	0,06	0,06	0,04	0,06	0,09	0,03	0,01	29	29	106	32	37	27	27	32	27	23	37	58
1199	Hexachlorobenzène	0,003	0,01	0,05													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1208	Isoproturon	0,02	0,3	1	0,05	0,1	0,27	0,11	0,04							0,11	0,24	53	40	26	38	58	106	106	106	106	38	27
1235	Pentachlorophénol	0,06	0,4	1													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1263	Simazine	0,02	1	4													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1272	Tétrachloréthène	0,5	10	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1276	Tétrachlorure de carbone	0,5	12	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1286	Trichloroéthylène	0,5	10	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1289	Trifluraline	0,009	0,03	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1382	Plomb	0,4	7,2	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1386	Nickel	1	20	so	2	1,9	2	2,1	1,9	2,3	1,9	2	2,3	2,4	2	2	58	60	58	57	60	55	60	58	55	54	58	58
1387	Mercure	0,02	0,05	0,07													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1388	Cadmium	0,03	0,08	0,45													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1458	Anthracène	0,005	0,1	0,4										0,01			106	106	106	106	106	106	106	106	106	58	106	106
1464	Chlorovinphos	0,02	0,1	0,3													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1517	Naphtalène	0,01	2,4	so	0,01	0,02								0,02			79	58	106	106	106	106	106	106	106	58	106	106
1652	Hexachlorobutadiène	0,03	0,1	0,6													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1743	Endosulfan	0,002	0,005	0,01													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1774	Somme des Trichlorobenzènes	0,1	0,4	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1888	Pentachlorobenzène	0,002	0,007	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1955	C10-C13-CHLOROALCANES	0,1	0,4	1,4													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
1959	4-tert-Octylphenol	0,03	0,1	so		0,1											106	47	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
2879	TBT	0,00006	0,0002	0,0015													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
3268	DDT (Dichlorodiphényltrichloréthane)	0,008	0,025	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
5474	4-n-nonylphénol	0,09	0,3	2													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
5535	Somme benzo b benzo k fluo.	0,006	0,03	so	0,04	0,04	0,012	0,027	0,01	0,029	0,028	0,012	0,029	0,07	0,013	0,015	35	35	58	41	63	40	41	58	40	28	57	53
6616	Di(2-ethylhexyl)phtalate	0,39	1,3	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
5536	Somme benzo ghi et indeno pyrène	0,0056	0,002	so	0,04	0,04	0,012	0,02	0,01	0,02	0,02	0,016	0,03	0,01	0,015	0,015	34	34	57	46	61	46	46	50	38	61	52	52
	Somme BDE	0,0009	0,0005	so		4E-04				4E-04							106	111	106	106	106	111	106	106	106	106	106	106
	Sommes pesticides cyclodiènes	0,12	0,01	so													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
5537	Hexachlorocyclohexane	0,006	0,02	0,04													106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106

Illustration 12 : jeu de données utilisé pour appliquer la méthode de Cyrano (concentrations C en µg/l et incertitude élargies U en %) – Les cases vides dans les colonnes C1 à C12 correspondent à des résultats inférieurs à la LQ (résultats remplacés par LQ/2 lors des calculs de moyenne)

SANDRE	Paramètre	LQ (µg/l)	NQE MA (µg/l)	NQE CMA (µg/l)	Moyenne arithmétique (µg/l)	Moyenne Méthode Cyrano (µg/l)	Incertitude sur la moyenne Cyrano (k=2; %)	Probabilité de dépassement de la NQE _{MA} (Cyrano) en %	Maximum (µg/l)	Maximum Méthode Cyrano (µg/l)	Incertitude sur le max Cyrano (k=2; %)	Probabilité de dépassement de la NQE _{CMA} (Cyrano) en %
1083	Chlorpyrifos-éthyl	0,009	0,03	0,1								
1101	Alachlore	0,03	0,3	0,7								
1107	Atrazine	0,03	0,6	2								
1114	Benzène	0,5	10	50								
1115	Benzo(a)pyrène	0,001	0,05	0,1	0,014	0,014	39	0	0,040	0,033	58	0
1135	Chloroforme	0,5	2,5	so	0,296	0,296	33	0	0,80	0,66	94	0
1148	DDT 44'	0,008	0,01	so								
1161	Dichloroéthane-1,2	0,5	10	so								
1168	Dichlorométhane	5	20	so								
1177	Diuron	0,02	0,2	1,8	0,037	0,037	24	0	0,06	0,06	15	0
1191	Fluoranthène	0,005	0,1	1	0,044	0,044	30	0	0,09	0,08	36	0
1199	Hexachlorobenzène	0,003	0,01	0,05								
1208	Isoproturon	0,02	0,3	1	0,081	0,080	63	0	0,27	0,25	42	0
1235	Pentachlorophénol	0,06	0,4	1								
1263	Simazine	0,02	1	4								
1272	Tétrachloréthène	0,5	10	so								
1276	Tétrachlorure de carbone	0,5	12	so								
1286	Trichloroéthylène	0,5	10	so								
1289	Trifluraline	0,009	0,03	so								
1382	Piomb	0,4	7,2	so								
1386	Nickel	1	20	so	2,067	2,065	35	0	2,4	4,16	38	0
1387	Mercure	0,02	0,05	0,07								
1388	Cadmium	0,03	0,08	0,45								
1458	Anthracène	0,005	0,1	0,4	0,003	0,003	38	0	0,010	0,007	96	0
1464	Chlorfenvinphos	0,02	0,1	0,3								
1517	Naphtalène	0,01	2,4	so	0,008	0,007	43	0	0,020	0,018	52	0
1652	Hexachlorobutadiène	0,03	0,1	0,6								
1743	Endosulfan	0,002	0,005	0,01								
1774	Somme des Trichlorobenzenes	0,1	0,4	so								
1888	Pentachlorobenzene	0,002	0,007	so								
1955	C10-C13-CHLOROALCANES	0,1	0,4	1,4								
1959	4-tert-Octylphenol	0,03	0,1	so	0,022	0,022	62	0	0,10	0,07	117	0
2879	TBT	0,00006	0,0002	0,0015								
3268	DDT (Dichlorodiphényltrichloréthane)	0,008	0,025	so								
5474	4-n-nonylphénol	0,09	0,3	2								
5535	Somme benzo b benzo k fluo.	0,006	0,03	so	0,027	0,027	35	26	0,070	0,060	50	0
6616	Di(2-ethylhexyl)phtalate	0,39	1,3	so								
5536	Somme benzo ghi et indeno pyrène	0,0056	0,002	so	0,021	0,021	28	100	0,040	0,039	23	0
5537	Hexachlorocyclohexane	0,006	0,02	0,04								

Illustration 13 : résultats obtenus avec la méthode de Cyrano pour le jeu de données présentés à l'illustration 9 (moyenne Cyrano, incertitude sur la moyenne Cyrano, maximum Cyrano et incertitude sur le maximum ainsi que les probabilités de dépassement des valeurs seuils). Les valeurs arithmétiques de la moyenne et du maximum sont rappelées.

Dans un objectif d'illustrer ce que pourrait apporter une telle méthode de traitement des données, les résultats présentés dans l'illustration 13 peuvent être résumés de la façon suivante :

- Du point de vue du maximum annuel, les données conduisent à déclarer un « bon état » de cette station (probabilité de dépassement de la NQE_{CMA} nulle pour toutes les substances avec une probabilité de 100%.
- Du point de vue de la moyenne annuelle, les données conduisent à déclarer un mauvais état de la station avec une probabilité de 100% également compte tenu du dépassement pour le paramètre 5536.

	Moyenne Annuelle (MA)	Concentration Maximale (CMA)
Etat chimique	MAUVAIS	BON
Niveau de confiance	100%	100%

Pour illustrer un peu plus la méthode et montrer que des niveaux de confiance différents de 100% sont bien sûr possibles, on peut réaliser l'exploitation théorique suivante en faisant l'hypothèse que le paramètre 5536 ne provoque pas de dépassement de la NQE_{MA} . Dans ce cas, le raisonnement concernant la moyenne annuelle conduirait à déclarer un bon état pour la station mais uniquement avec une probabilité de 74%. En effet c'est alors seulement le paramètre 5535 qui induit un dépassement de valeur seuil avec une probabilité de 26%.

	Moyenne Annuelle (MA)	Concentration Maximale (CMA)
Etat chimique	BON	BON
Niveau de confiance	74%	100%

Pour obtenir le niveau de confiance global sur le bon état d'une station connaissant les niveaux de confiance par substance, le produit des niveaux de confiance sur le bon état pour chaque substance est effectué. Le niveau de confiance sur le mauvais état est obtenu en prenant le complément à 100%. Pour cela on suppose que les probabilités pour les différentes substances sont indépendantes. Cette hypothèse n'est pas obligatoirement vérifiée. Il faut noter que la méthode de Cyrano permet de prendre en compte d'éventuelles corrélations entre substances en ne considérant pas les substances de façon individuelle mais en réalisant des tirages aléatoires sur l'ensemble des 41 substances, donc en conservant la concomitance, par mois, des mesures sur ces substances.

5. Conclusion

Ce rapport propose des pistes de réflexion et des méthodologies dans l'objectif de fournir aux gestionnaires de bassin un niveau de confiance sur l'indicateur réglementaire de l'état chimique d'une masse d'eau.

Pour tester les méthodes, des exemples sont pris sur des jeux de données « réelles » issus de programmes de surveillance d'eau de surface. Ces jeux de données comprennent 12 données mensuelles et les incertitudes associées. Compte tenu de l'absence d'incertitudes fournies par les laboratoires, les incertitudes considérées dans le cadre de ce rapport sont des incertitudes « modélisées ».

Les statistiques (valeurs et incertitudes) relatives à la moyenne annuelle ainsi qu'au maximum annuel sont étudiées afin de déterminer les probabilités de dépassement des valeurs seuils réglementaires associées (NQE_{MA} et NQE_{CMA}). Pour cela, plusieurs méthodes statistiques sont proposées. Elles sont toutes des méthodes connues et validées mais parfois appliquées classiquement dans des situations peu transposables aux présents jeux de données environnementaux.

Pour ce qui concerne la moyenne annuelle, les méthodes qui semblent donner satisfaction sont les méthodes bayésienne, la méthode de Cyrano (technique du « bootstrap ») et une méthode arithmétique « classique » de calcul des incertitudes. Pour le maximum annuel, deux méthodes sont testées qui donnent des résultats proches: la méthode de Cyrano et une méthode « arithmétique » calculant pour chaque résultat (et son incertitude associée) la probabilité de dépassement de la NQE_{CMA} .

Les conclusions concernant l'applicabilité des méthodes statistiques présentées sont partielles. Dans l'hypothèse où le concept de « niveau de confiance » serait retenu par les gestionnaires, il sera nécessaire de choisir les méthodes statistiques les plus adaptées sur la base de la mise en application de ces méthodes sur de nombreux exemples.

Afin d'illustrer l'approche théorique, la méthode de Cyrano a été retenue pour une simulation sur un jeu de données « réelles » (concentrations mensuelles de 41 substances prioritaires). Pour chaque substance et pour la masse d'eau (au niveau de la station) les indicateurs de l'état chimique (en moyenne annuelle et en concentration maximale) sont calculés et un niveau de confiance (en %) leur est associé.

Il est important de préciser, que compte tenu du nombre de données disponibles, la robustesse des niveaux de confiance reste limitée. Ceux-ci doivent être considérés comme des ordres de grandeur. Pour une meilleure robustesse de ces indicateurs, il serait nécessaire d'acquérir plus d'informations ou de données sur les paramètres surveillés.

Dans cette étude, les réflexions sont menées sur la base des règles et pratiques actuelles de l'évaluation de l'état chimique d'une masse d'eau de surface, sans remise en cause des fréquences d'échantillonnage, de la représentativité des stations, des périodes d'échantillonnage,... L'influence de ces paramètres est complexe mais déterminante. Elle devra être prise en compte, en complément des concepts présentés dans ce rapport, dans l'objectif de fiabiliser l'évaluation de l'état chimique des masses d'eau et de préciser les niveaux de confiance associés.

6. Bibliographie

- [1] Directive Cadre Européenne sur l'Eau (DCE) 2000/60/CE.
- [2] Arrêté du 17 décembre 2008 établissant les critères d'évaluation et les modalités de détermination de l'état des eaux souterraines et des tendances significatives et durables de dégradation de l'état chimique des eaux souterraines
- [3] Arrêté du 25 janvier 2010 relatif aux méthodes et critères d'évaluation de l'état écologique, de l'état chimique et du potentiel écologique des eaux de surface pris en application des articles R. 212-10, R. 212-11 et R. 212-18 du code de l'environnement
- [4] Common Implementation Strategy for the WFD (2000/60/EC) - Guidance Document No. 15 - Guidance on Groundwater Monitoring
- [5] Common Implementation Strategy for the WFD (2000/60/EC) - Guidance Document No. 19 – Guidance on surface water chemical monitoring under WFD
- [6] Common Implementation Strategy for the WFD (2000/60/EC) - Guidance document n.o 7 - Monitoring under the Water Framework Directive
- [7] Guide technique Évaluation de l'état des eaux de surface continentales (cours d'eau, canaux, plans d'eau)-Décembre 2012 MEDDE.
- [8] Afnor (2005). Méthodes statistiques utilisées dans les essais d'aptitude par comparaisons interlaboratoires. NF ISO 13528.
- [9] Efron, B. (1979). "Bootstrap methods: Another look at the jackknife". The Annals of Statistics 7 (1): 1–26. doi:10.1214/aos/1176344552.

7. Annexe Description des méthodes statistiques utilisées

Méthodes d'estimation de la moyenne et de l'incertitude sur la moyenne

On note respectivement x_i et u_i le résultat de la mesure i et l'incertitude-type associée pour $i = 1, \dots, n$ et $n = 12$.

1 - La moyenne

1a – sans pris en compte de la dispersion des résultats

A chaque résultat de mesure on associe la variable aléatoire X_i dont la valeur centrale est le résultat de mesure x_i et dont l'étendue des valeurs possibles est déterminée par l'incertitude-type u_i . En supposant que les variables X_i sont indépendantes et identiquement distribuées (iid) on a :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad u(\bar{x}) = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n u_i^2}$$

Remarque : l'incertitude de la moyenne prend en compte ici les incertitudes de chaque résultat de mesure mais pas la dispersion des résultats.

1b – avec prise en compte de la dispersion des résultats

Dans cette méthode, on prend en compte la dispersion des données en plus de l'incertitude analytique sur chaque donnée. De façon simplifiée, cette dispersion est prise en compte dans le calcul en ajoutant un terme issu d'une estimation d'un intervalle de confiance sur une moyenne.

$$u(\bar{x}) = \sqrt{\frac{\sum u_i^2}{n^2} + \frac{s^2}{n}}$$

Avec s écart-type des n résultats pris en compte.

2 - La médiane

On note $x_{[1]}, \dots, x_{[n]}$ l'échantillon ordonné tel que $x_{[1]} \leq \dots \leq x_{[n]}$.

La médiane de l'échantillon x_1, \dots, x_n est un estimateur robuste de la moyenne des résultats de mesure, définie par

$$m = \begin{cases} x_{[k+1]}, & k = \frac{n-1}{2} \text{ pour } n \text{ impair} \\ 0.5(x_{[k]} + x_{[k+1]}), & k = \frac{n}{2} \text{ pour } n \text{ pair} \end{cases}$$

Un indicateur robuste de la dispersion de l'échantillon est donnée par le MAD (median of absolute deviation)

$$MAD = med(|x_i - m|), i = 1..n$$

L'incertitude de la médiane s'exprime alors en fonction du MAD [1]

$$s(m) = \frac{1.858}{\sqrt{n-1}} MAD$$

Remarques : - la médiane n'est plus robuste dès que la moitié des résultats sont identiques.
- la formule de l'incertitude de la médiane repose sur l'hypothèse de normalité des résultats.

3 - L'algorithme A [NF ISO 13528]

L'algorithme A [2] fournit un estimateur robuste de la moyenne des résultats, alternatif à la médiane, qui repose sur l'hypothèse de normalité des données.

L'incertitude type de la valeur assignée est donnée par (NF ISO 13528, § 5.3.2)

$$u_x = 1.25 \frac{s^*}{\sqrt{n}} \text{ où } s^* \text{ est l'écart-type robuste des résultats de mesure}$$

Dans le cas où l'on dispose également des incertitudes-type des résultats de mesure l'incertitude-type de la valeur assignée peut être obtenue en combinant les incertitudes-type des résultats individuels (NF ISO 13528 §5.5.2)

$$u_x = \frac{1.25}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n u_i^2}$$

Remarque : l'incertitude obtenue en prenant en compte les incertitudes-types correspond à 1.25 fois l'incertitude de la moyenne. Ce facteur permet de prendre en compte la dispersion des résultats.

Dans le rapport, ce sont les incertitudes prenant en compte les incertitudes de mesures individuelles qui ont été prises en compte.

4 - Les procédures A et B du CIPM

La procédure B est utilisée en alternative à la procédure A. Dans les deux cas les résultats sont supposés indépendants. Lorsque les résultats sont homogènes par rapport aux incertitudes associées on utilise la procédure A qui renvoie une expression analytique de Y et U. Dans le cas contraire, la procédure B met en œuvre une méthode de simulation.

La **procédure A** du CIPM suppose que les résultats x_i, u_i peuvent être modélisés par la relation $x_i = \mu + \varepsilon_i$ où μ est une constante et les erreurs ε_i sont indépendantes et ε_i suit la loi normale de moyenne 0 et d'écart-type u_i .

Sous ces hypothèses (dites d'homogénéité des résultats), la concentration moyenne μ est

estimée par la moyenne pondérée des résultats $x_w = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{u_i^2}}$ et son incertitude associée est

$$u(x_w) = \sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{u_i^2}}}$$

L'hypothèse d'homogénéité est vérifiée par un test du Chi2 dont la statistique est donnée par

$$Chi_{obs}^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_w)^2}{u_i^2} ; \text{ si } \text{Prob}(Chi_{n-1}^2 > Chi_{obs}^2) < 5\% \text{ alors l'hypothèse}$$

d'homogénéité des résultats est rejetée au niveau 5%.

Si l'hypothèse d'homogénéité est rejetée alors on applique la **procédure B**.

La procédure B suppose qu'on peut affecter à chaque laboratoire une distribution gaussienne centrée en x_i et d'écart-type u_i . On réalise M tirages dans les lois de chacun des laboratoires et on calcule la médiane des résultats des laboratoires obtenus à chaque tirage, comme présenté au **Tableau 2**.

Tirages	Labo 1	Labo 2	• • •	Labo p	Médiane
1	$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$	• • •	$x_p^{(1)}$	$m^{(1)} = \text{med}(x_1^{(1)}, \dots, x_p^{(1)})$
• •			• • •		• •
M	$x_1^{(M)}$	$x_2^{(M)}$	• • •	$x_p^{(M)}$	$m^{(M)} = \text{med}(x_1^{(M)}, \dots, x_p^{(M)})$

Tableau 2 Procédure B

La valeur de consensus et son incertitude associée sont alors respectivement données par la moyenne et l'écart-type empiriques de cette distribution :

$$y_{ref} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M m^{(k)}$$

$$u(y_{ref}) = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{k=1}^M (m^{(k)} - y_{ref})^2}$$

Remarque : Le poids associé à un résultat de mesure dépend de la valeur de l'incertitude associée. En particulier la procédure A donne beaucoup de poids aux résultats accompagnés d'une petite incertitude.

5 - Méthode bayésienne

Un modèle bayésien a été développé par Demeyer & Fischer [3] pour traiter le cas particulier d'un résultat par laboratoire lorsque l'incertitude associée n'est pas disponible ou non fiable, en incorporant de l'information auxiliaire de type binaire ou catégoriel y_i sur les laboratoires. Cette information est convertie en une composante de variance du biais du laboratoire σ_i^2 . Un paramètre d'échelle τ permet d'ajuster la composante de variance à l'échelle des données :

$$\begin{aligned}x_i &= \mu + \tau b_i \\ b_i \mid \sigma_i^2 &\sim N(0, \sigma_i^2) \\ \sigma_i^2 \mid y_i &\sim \pi_{aux}(\sigma_i^2 \mid y_i)\end{aligned}$$

Cette méthode s'applique aussi dans le cas particulier où on ne dispose pas de cette information auxiliaire sur les laboratoires ; auquel cas on pose $\sigma_i^2 = n$, $i = 1, \dots, n$ et on obtient, sous la distribution *a priori* non informative de Jeffreys $\pi(\mu, \tau^2) \propto \frac{1}{\tau^2}$, le résultat classique suivant pour la distribution *a posteriori* de μ :

$$\mu \mid x_1, \dots, x_n \sim t_{n-1}\left(\bar{x}, \frac{s_n^2}{n}\right) \text{ où } \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \text{ et } s_n^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

La moyenne *a posteriori* et l'écart-type *a posteriori* de μ fournissent respectivement une estimation de la valeur de consensus et de son incertitude type associée.

6 - Méthode de Cyrano (« bootstrap »)

On considère une série de 12 mesures mensuelles sur une liste de $N=41$ éléments, avec les incertitudes de mesure associées (u_i). Les hypothèses faites sont principalement :

- Mesures mensuelles régulières, indépendantes et identiquement distribuées
- Incertitudes de mesure de type gaussien

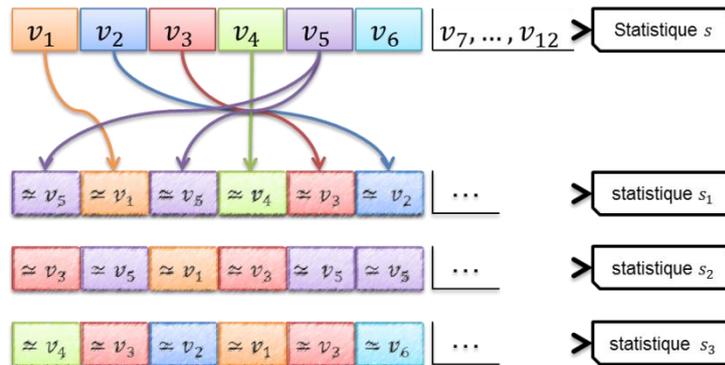
Afin de prendre en compte les éventuelles corrélations entre éléments, le choix a été fait de considérer non pas les valeurs individuelles, substance par substance, mais de considérer des vecteurs de N valeurs pour chaque mois. Les mesures sont donc les 12 vecteurs de N valeurs v_1 à v_{12} .

La méthode consiste à réaliser 10 000 tirages aléatoires (avec remise) de 12 vecteurs. « Avec Remise » signifie que pour un tirage, il est possible de trouver plusieurs fois le même vecteur. À chaque tirage, l'incertitude analytique est prise en compte par application d'un bruit gaussien. Pour chaque tirage k des 10 000, la statistique recherchée $s_{k, \text{substance}}$ (la moyenne ou le

maximum) sur les 12 valeurs est calculée pour chaque substance. On calcule enfin les paramètres :

- moyenne pour la statistique = $\text{moy}(s_1, \dots, s_{10\,000})$
- écart-type pour la statistique = $\sigma(s_1, \dots, s_{10\,000})$

La méthode est présentée schématiquement ci-dessous.



Il faut noter que cette méthode permet d'aborder à la fois la problématique des moyennes annuelles et celle des maximums annuels.



Centre scientifique et technique
Direction des Laboratoires
3, avenue Claude-Guillemin
BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34
www.brgm.fr