

INCERTITUDES DES MÉTHODES D'ÉVALUATION « EAUX LITTORALES » : UTILISATION DE MODÈLES LINÉAIRES DYNAMIQUES POUR L'ÉVALUATION DES INCERTITUDES DES PARAMÈTRES HYDROLOGIQUES

Soudant D., Auby I., Daniel A.

Programme scientifique et technique
Année 2017

Document final

Contexte de programmation et de réalisation

Ce rapport a été réalisé dans le cadre du programme d'activité AQUAREF pour l'année 2017.

Auteur (s) :

Soudant Dominique
Ifremer centre de Nantes
dsoudant@ifremer.fr

Isabelle Auby
Ifremer, laboratoire environnement ressource Arcachon
isabelle.auby@ifremer.fr

Anne Daniel
Ifremer, laboratoire DYNECO/PELAGOS
anne.daniel@ifremer.fr

Relectrice :
Nadine Neaud-Masson
Ifremer centre de Nantes
Nadine.Masson@ifremer.fr

Les correspondants

Onema : Yorick Reyjol

Etablissement Dominique Soudant

Référence du document : Dominique Soudant, Isabelle Auby, Anne Daniel - Incertitudes des méthodes d'évaluation « eaux littorales » : utilisation de modèles linéaires dynamiques pour l'évaluation des incertitudes des paramètres hydrologiques - Rapport AQUAREF 2017 - 71 p.

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>

Remerciements

Les prélèvements, mesures et analyses ont été effectués par Florence D'Amico, Laure Gouriou, Nadine Masson, Claire Meteigner, Myriam Perrière-Rumèbe, Loic Rigouin Marie-Pierre Tournaire et Gilles Trut. Qu'ils trouvent ici l'expression de notre reconnaissance pour leur travail sans lequel les séries temporelles n'existeraient pas.

1. INTRODUCTION.....	7
2. DONNÉES ET MÉTHODES.....	7
2.1 Réseau, lieux, période, prélèvement, paramètres et mesures.....	7
2.2 Méthode d'analyse des séries.....	10
3. RÉSULTATS.....	11
3.1 Température.....	11
3.2 Turbidité.....	16
3.3 Matières en suspension.....	23
3.4 Concentration en oxygène dissous.....	26
3.5 Concentration en (nitrate+nitrite).....	32
3.6 Concentration en ammonium.....	35
3.7 Concentration en phosphate.....	41
3.8 Concentration en silicate.....	46
3.9 Synthèse concernant les variances d'observation.....	53
4. DISCUSSION.....	53
5. CONCLUSION.....	59
6. BIBLIOGRAPHIE.....	60
7. ANNEXE 1 : REPRODUCTION DE LA SECTION MÉTHODE DU PRÉCÉDENT RAPPORT.....	61
8. ANNEXE 2 : PRÉSENTATION DES GRAPHIQUES UTILISÉS.....	68

RESUMÉ

L'incertitude associée à une mesure a pour origine d'une part la variabilité environnementale et d'autre part l'ensemble du processus d'acquisition depuis le prélèvement jusqu'à la saisie de la donnée dans une base. L'estimation de l'ensemble de cette variabilité est un exercice complexe à réaliser dans le cadre d'un plan d'expérience. En revanche, les longues séries temporelles de données présentent la caractéristique d'intégrer toutes les variabilités. L'analyse de ces séries en termes de signal et bruit doit permettre de quantifier l'amplitude des incertitudes. Toutefois, les séries temporelles d'observation présentent un ensemble de caractéristiques les rendant difficiles à analyser. Les modèles linéaires dynamiques constituent une approche adaptée à l'analyse de ces données particulières en faisant l'hypothèse de paramètres variables dans le temps. L'objet du présent travail consiste à estimer les variances liées au processus d'observation à l'aide de modèles linéaires dynamiques. Les données étudiées sont les paramètres physico-chimiques (température, turbidité, matières en suspension, oxygène dissous, nitrate+nitrite, ammonium, phosphate, silicate) enregistrés sur les lieux de surveillance REPHY « Arcachon-Bouée- 7 » et « Teychan bis ».

Les résultats montrent pour la température qu'en dépit d'une mesure très maîtrisée, la variance d'observation, est de l'ordre de $1\text{ }^{\circ}\text{C}^2$. Le signal reste néanmoins très peu bruité comme pour la concentration en oxygène dissous pour laquelle la variance d'observation est de 0.05 (mg/L)^2 . Pour les autres paramètres, les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -20 % à -60 % pour la borne inférieure et de 60 % à 500 % pour la borne supérieure. Les contributions les plus réduites sont le fait des mesures réalisées au lieu « Teychan bis » pour lequel les séries sont plus courtes, la fréquence d'échantillonnage variable dans le temps et le plan déséquilibré sur les saisons. Au regard de la complexité des écosystèmes marins et les interdépendances multiples des phénomènes en jeu, la construction d'un modèle considérant conjointement plusieurs paramètres et leurs interactions apparaît incontournable.

Mots clés (thématique et géographique) :

Incertaince, température, turbidité, matières en suspension, oxygène dissous, nutriments, modèle linéaire dynamique, bassin d'Arcachon, REPHY.

1. INTRODUCTION

Dans le prolongement du précédent travail (Soudant et al., 2016), la question abordée est celle de l'estimation de l'incertitude des mesures réalisées dans le milieu marin à partir des séries temporelles d'observation. L'incertitude de mesure est définie ici comme la variabilité attachée à l'ensemble du processus d'acquisition d'une donnée depuis l'échantillonnage jusqu'à la saisie, y compris la variabilité environnementale. L'approche mise en œuvre est la suivante. D'une part, dans le cadre de l'analyse structurelle d'une série temporelle à l'aide d'un modèle dynamique linéaire (*Dynamic Linear Model*, DLM), une variance dite d'observation est estimée. C'est ce qui n'est pas expliqué par le modèle et qui recouvre en particulier l'incertitude de mesure. D'autre part, les séries temporelles peuvent être affectées par des changements de niveau et des valeurs exceptionnelles (*i.e. outliers*) liés à des événements environnementaux ou aux modalités d'observation (*e.g.* changement de méthodes, d'analystes). Il s'ensuit que la quantification de l'incertitude de mesure à travers la variance d'observation est d'autant plus pertinente que ces événements seront identifiés et pris en compte dans le modèle. Les DLM permettent de suggérer et traiter de manière appropriée ces chocs structurels et valeurs exceptionnelles. Ces suggestions doivent être infirmées ou confirmées par les experts thématiques et les analystes. Ainsi notre proposition consiste à ajuster des DLM à des séries temporelles environnementales marines et à considérer les variances d'observations estimées de manière à évaluer la vraisemblance de leurs amplitudes au titre de variabilité globale du processus d'acquisition de la donnée.

Une première application de l'approche a été réalisée pour la chlorophylle *a* et l'abondance phytoplanctonique aux lieux de surveillance « Arcachon-Bouée - 7 » et « Teychan bis » du réseau d'observation et de surveillance du phytoplancton et de l'hydrologie dans les eaux littorales (REPHY). Cette étude montre que pour la chlorophylle *a*, la variabilité d'observation est responsable de l'ordre de 80 % de la variabilité totale sur les deux lieux de surveillance. Pour l'abondance phytoplanctonique, elle est également de 80 % à « Arcachon-Bouée 7 » mais de l'ordre de 70 % à « Teychan bis ». Ainsi la part de « bruit » est liée au lieu et au paramètre considéré. Exprimée en pourcentage de la médiane de la distribution de la chlorophylle *a*, la variance d'observation place les bornes de l'intervalle de confiance à 90 % des observations à des valeurs de l'ordre de -40 % et +120 % de la médiane, l'intervalle étant sous-estimé car ne prenant pas en compte la variabilité structurelle. Pour l'abondance phytoplanctonique en \log_{10} cell./L, les ordres de grandeur correspondant en pourcentage de la moyenne sont de ± 13.5 %. Pour les deux paramètres, ces valeurs sont compatibles avec l'expérience des experts.

L'objectif du présent travail consiste à étendre les analyses sur les paramètres température, turbidité, matières en suspension, concentration en oxygène dissous et nutriments (*i.e.* (nitrate+nitrite), ammonium, silicate, phosphate).

2. DONNÉES ET MÉTHODES

2.1 RÉSEAU, LIEUX, PÉRIODE, PRÉLÈVEMENT, PARAMÈTRES ET MESURES

Les données utilisées sont celles du REPHY (2017) et sont extraites de la base Quadrige. Les lieux de surveillance sont « Arcachon-Bouée 7 » et « Teychan bis » (*cf.* Figure 1), lieux sous la responsabilité du laboratoire environnement ressource (LER) d'Arcachon. Par homogénéité avec le travail fait précédemment sur la chlorophylle *a* et l'abondance



Figure 1 : Positionnement géographique des lieux de surveillance « Teychan bis » et « Arcachon-Bouée 7 ».

phytoplanctonique (Soudant et al., 2016) la fenêtre temporelle demeure inchangée : [2003 ; 2014].

Tous les prélèvements et mesures sont effectués au plus à deux heures de la marée haute, par excès ou par défaut, conformément au protocole REPHY. Les mesures retenues de concentration en oxygène dissous sont celles qui ont été réalisées au fond de la colonne d'eau^a. Les prélèvements d'eau et mesures pour l'analyse des autres paramètres du lieu « Arcachon-Bouée 7 », ont été effectués en sub-surface^b. En revanche à « Teychan bis », les prélèvements ont été effectués à 3 mètres sous la surface^c jusque fin 2007, puis en sub-surface à partir de 2008. L'absence de stratification dans le bassin d'Arcachon (Neaud-Masson, comm. pers.) permet de supposer une homogénéisation sur l'ensemble de la colonne d'eau et ainsi de traiter les deux profondeurs comme identiques.

Le paramètre salinité n'a pas été retenu. En effet, il présente de nombreuses valeurs exceptionnelles (*i.e.* dessalures) qui mènent à une violation importante de la normalité des résidus, c'est-à-dire au caractère inadapté du modèle. Les principales caractéristiques des séries de données utilisées sont indiquées dans la table 1.

a. Dans Quadrigé, niveau « Fond/sonde-1 m ».

b. Niveau « Surface (0-1 m) ».

c. Niveau « Mi-profondeur »

Table 1 : Caractéristiques des séries temporelles considérées. MES : matières en suspension. LQ : limite de quantification.

Paramètres	Lieux	Premières mesures	Nbre de mesures	Frequence	Laboratoires analystes	Methodes	Mesures < LQ
Température	Bouée 7	2003	286	Bimensuelle	LER Arcachon	Capteur de T°C in situ	0
Température	Teychan Bis	2003	531	Hebdomadaire	LER Arcachon	Capteur de T° C in situ Thermomètre à mercure dans échantillon - °C le 12 juin	0
Turbidité	Bouée 7	fin 2007	174	Bimensuelle	LER Arcachon	« Capteur turbidimètre norme ISO 7027 in situ – FNU »	41
Turbidité	Teychan Bis	2003	416	Bimensuelle à trimensuelle	LER Arcachon	1) « Turbidimètre optique (lumière blanche - TURB) dans échantillon - NTU » jusqu'au 12/04/2010, 2) « Capteur turbidimètre norme ISO 7027 in situ - FNU » à partir du 21/09/2007 3) « Turbidimètre optique (ISO 7027 - TURB FNU) dans échantillon - FNU » à 6 reprises entre janvier 2009 et avril 2009.	28 mesures à partir du 22/02/2010
MES	Bouée 7	2003	286	Bimensuelle	LER Arcachon	Pesée après filtration et séchage (Aminot A. Kérouel R. 2004)	0
Oxygène dissous	Bouée 7	fin 2007	175	Bimensuelle	LER Arcachon	Capteur oxygène à luminescence - mg/l	0
Oxygène dissous	Teychan Bis	fin 2007	174	Bimensuelle	LER Arcachon	Capteur oxygène à luminescence - mg/l	0
NO ₃ +NO ₂	Bouée 7	2003	286	Bimensuelle	1) IRAD-PERSYST-US49 jusqu'à la fin de 2007 2) LER Arcachon à partir de 2008	1) spectrophotométrie flux (Tréguer P., LeCorre P., 1975 - Nitrite + nitrate) 2) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Nitrite + nitrate) à partir de 2008	67
NO ₃ +NO ₂	Teychan Bis	fin 2007	62	Mensuelle, de novembre à février Jusque fin 2010, toute l'année à partir de 2011	LER Normandie en 2007 puis LER Arcachon	Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Nitrite + nitrate) - µmol/l	5
NH ₄ ⁺	Bouée 7	2003	279	Bimensuelle	LER Arcachon	1) Spectrophotométrie manuelle (Aminot et Chaussepied 1983 - Ammonium) jusque mi-juin 2008 2) Fluorimétrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Ammonium) à partir de mi-juin 2008	67 dont 64 à partir de septembre 2008
NH ₄ ⁺	Teychan Bis	fin 2007	62	Mensuelle, de novembre à février Jusque fin 2010, toute l'année à partir de 2011	LER Arcachon	1) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Ammonium) - µmol/l en 2007 2) Fluorimétrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Ammonium) - µmol/l après 2007	5
PO ₄ ³⁻	Bouée 7	2003	224	Bimensuelle jusque début 2010, quasi-mensuelle au-delà.	LER Arcachon	1) Colorimétrie selon Murphy et Riley (3) - AFNOR jusque mi-mai 2008 2) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Phosphate) à partir de mi-mai 2008	31 à partir de 2011
PO ₄ ³⁻	Teychan Bis	fin 2007	54	Mensuelle, de novembre à février Jusque fin 2010, toute l'année à partir de 2011	LER Arcachon	1) Colorimétrie selon Murphy et Riley (3) - AFNOR en 2007 2) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Phosphate) après 2007	23 à partir de 2011
Si(OH) ₄	Bouée 7	2003	286	Bimensuelle	1) CREMA jusqu'en janvier 2007 2) LABOCEA-29P jusque fin 2007 3) LER Arcachon par la suite	1) Spectrophotométrie flux (Tréguer P., LeCorre P., 1975 - Silicate) - µmol/l jusque en 2007 2) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Silicate) - µmol/l après 2007	13
Si(OH) ₄	Teychan Bis	fin 2007	62	Mensuelle, de novembre à février Jusque fin 2010, toute l'année à partir de 2011	1) LABOCEA-29P jusque fin 2007 2) LER Arcachon par la suite	1) Spectrophotométrie flux (NF EN ISO 16264 - Silicate) - µmol/l jusque fin 2007 2) Spectrophotométrie flux (Aminot A. Kérouel R. 2007 - Silicate) - µmol/l après 2007	0

Les matières en suspension ne sont pas mesurées à « Teychan bis » où seule la stratégie REPHY est appliquée, dans laquelle la transparence de l'eau est quantifiée *via* les données de turbidité. Deux méthodes de mesures ont été utilisées pour mesurer ce paramètre, US EPA1980 et norme ISO 7027-1 : la conversion entre les deux types de données est effectuée par une simple division, facteur de 1,35 (Hongve and Åkesson, 1998). La station « Arcachon - Bouée 7 » fait partie des points suivis par le réseau hydrologique ARCHYD, dont la stratégie prévoit également la mesure des matières en suspension. En ce qui concerne les silicates, il faut signaler que le mode de conservation des échantillons a changé au cours du temps : congélation jusqu'à la fin de l'année 2007, stockage au réfrigérateur à partir du début de l'année 2008. En raison du problème de polymérisation du silicate observé lors de la congélation, les données acquises avant 2007 sont vraisemblablement sous-estimées.

2.2 MÉTHODE D'ANALYSE DES SÉRIES

La méthode d'analyse statistique est identique à celle utilisée dans la précédente étude (Soudant et al., 2016). Le paragraphe « méthodes » du premier rapport est reproduit pour information en Annexe 1 (p. 61).

Le modèle pour la température a été modifié pour ne comporter qu'une seule harmonique, soit un modèle avec un maximum et un minimum annuel. Le modèle de base avec deux harmoniques a été utilisé pour tous les autres paramètres. L'expérience du traitement des séries de tous les LERs amène à considérer que les variances des mesures de température et de concentration en oxygène dissous sont constantes : pour cette raison, elles ont été traitées « brutes », *i.e.* sans transformation. Pour les autres paramètres, une transformation logarithmique de base e a été utilisée pour stabiliser la variance.

Les étapes d'expertise et les éléments de diagnostic des modèles des paramètres sont donnés dans la partie résultat. Par rapport à la première étude, en plus des représentations précédemment utilisées, des graphiques concernant les amplitudes saisonnières et les unités temporelles des valeurs maximales et minimales sont ajoutés pour faciliter l'expertise des modèles.

Le choix ayant été fait de ne pas appliquer de transformation logarithmique à la température et à la concentration en oxygène dissous, les distributions de ces paramètres sont supposées gaussiennes et ainsi la variance n'est pas en relation avec la moyenne pour ces variables. La représentation en termes de pourcentage de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance s'est donc avérée peu pertinente. De ce fait, l'appréciation de la part de variabilité d'observation est dérivée de la représentation des observations en fonction des moyennes de leurs distributions sous la forme d'une contribution constante aux bornes de l'intervalle de confiance des observations dans l'unité de la mesure.

Les représentations graphiques utilisées sont présentées en annexe 2 (p. 68).

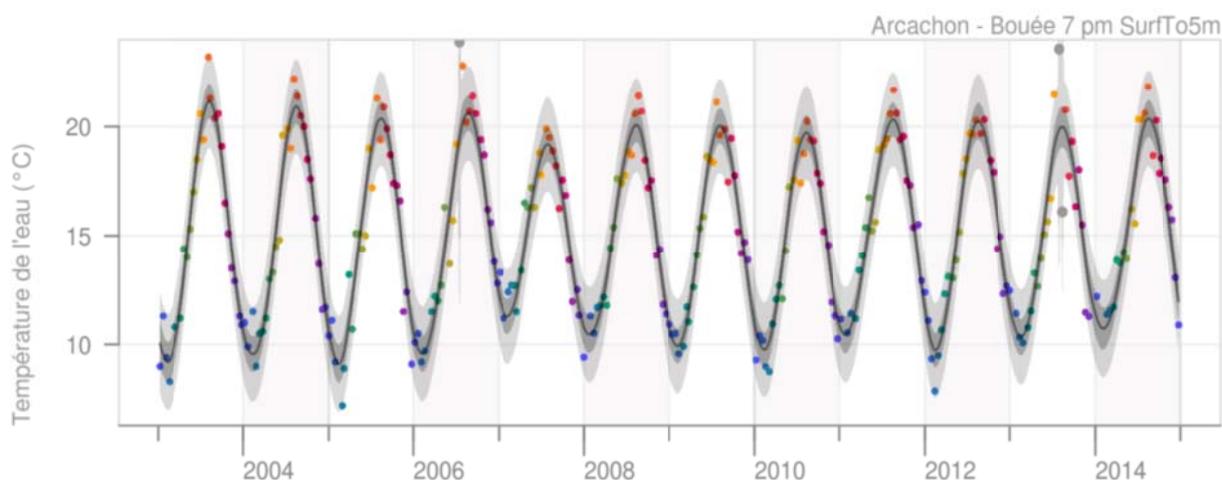
3. RÉSULTATS

3.1 TEMPÉRATURE

Arcachon - Bouée 7

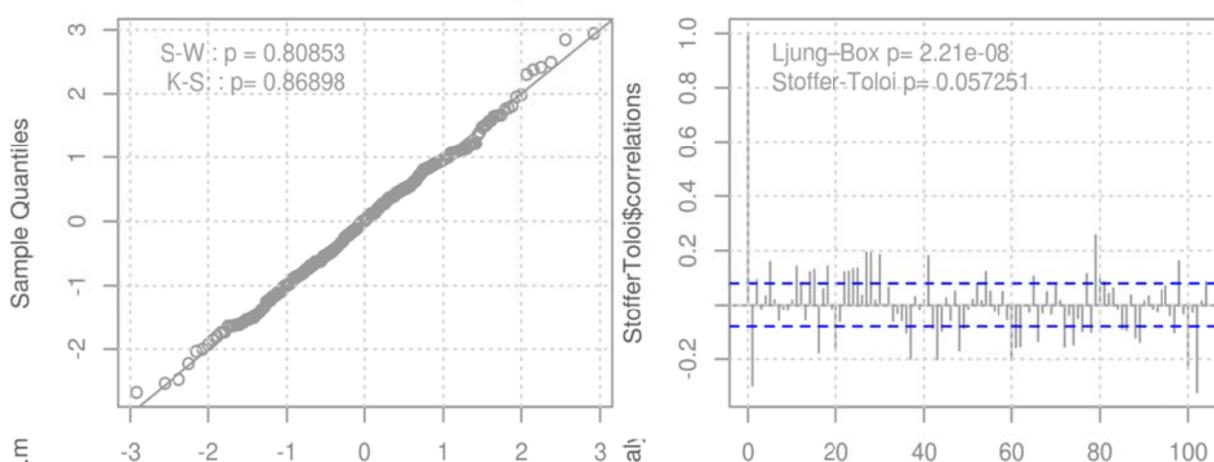
Modèles

Le premier modèle identifie 3 valeurs exceptionnelles : 23.9 °C le 20 juillet 2006, 23.57 °C le premier août 2013 et la mesure suivante le 14/08/2013 avec 16.1 °C. Les deux premières sont confirmées par des températures également élevées à la passe nord du bassin. La troisième est identifiée comme un *upwelling*^d estival. Une fois traitées comme valeurs exceptionnelles, le gain de vraisemblance est significatif. Les éléments diagnostiques de ce second modèle ne suggèrent pas d'autres changements.



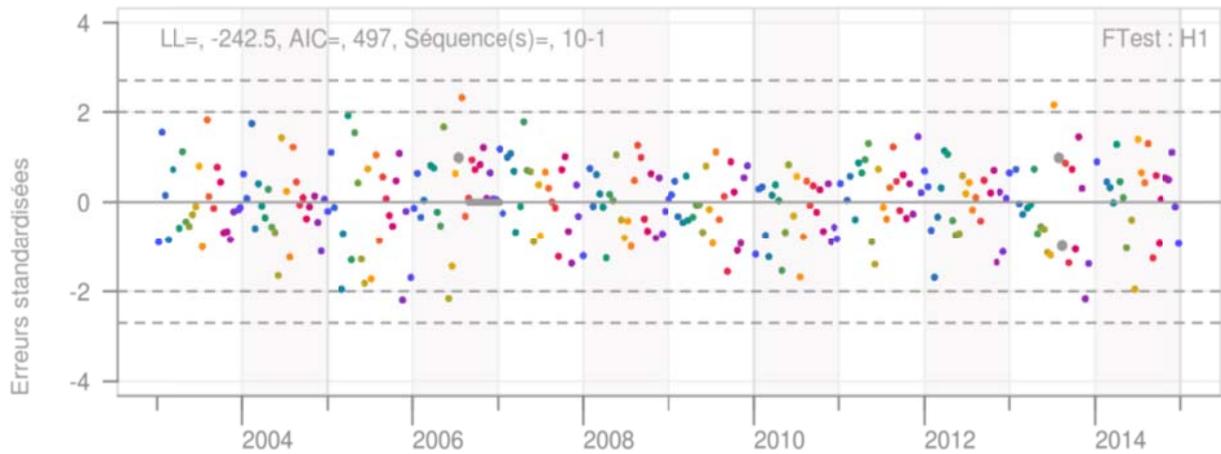
Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.



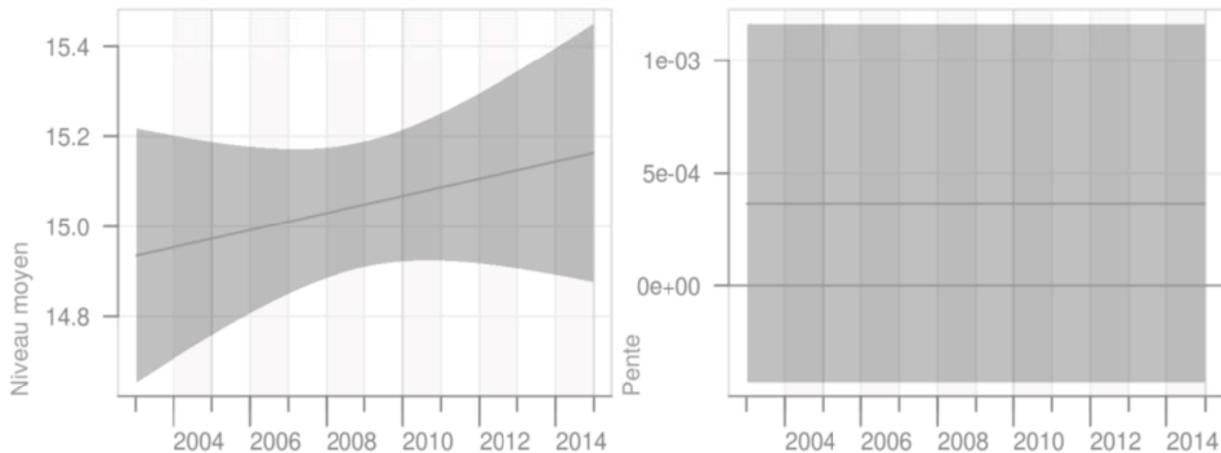
d. La remontée d'eau (*upwelling* en anglais) est un phénomène océanographique qui se produit lorsque de forts vents marins (généralement des vents saisonniers) poussent l'eau de surface des océans laissant ainsi un vide où peuvent remonter les eaux de fond. (source : wikipédia)

Les erreurs standardisées présentent une seule séquence de 10 valeurs positives du 31/08/2006 au 12/01/2007 : 4 erreurs sont très proches de 0 et les autres sont autour de 1. Les valeurs apparaissent supérieures au modèle mais dans la gamme de ce qui est habituellement observé. L'ensemble ne motive donc pas d'intervention particulière.



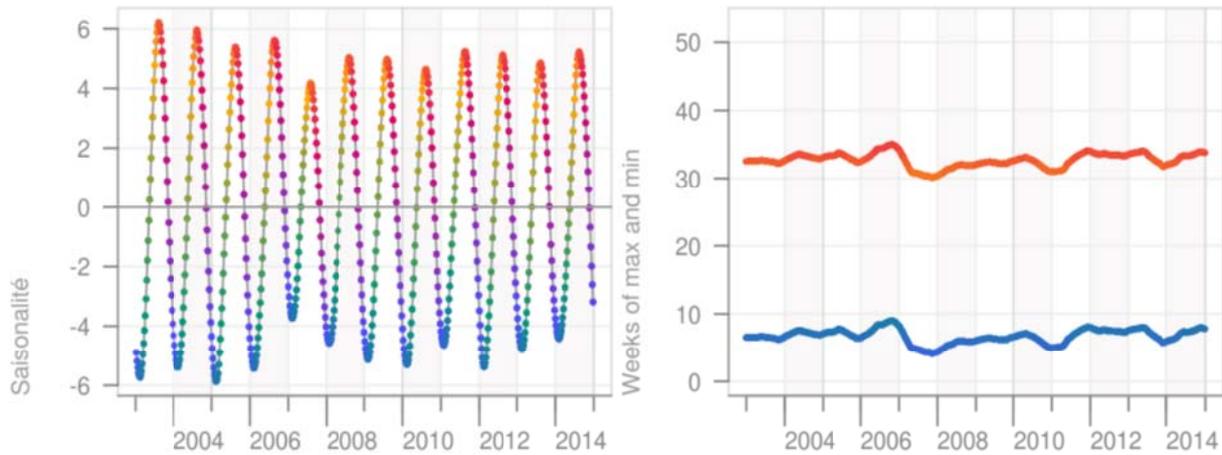
Tendance

La pente est constante et positive, mais non significativement différente de 0. Il s'ensuit un niveau moyen linéaire croissant, dont les intervalles de confiance à 90 % se recouvrent.



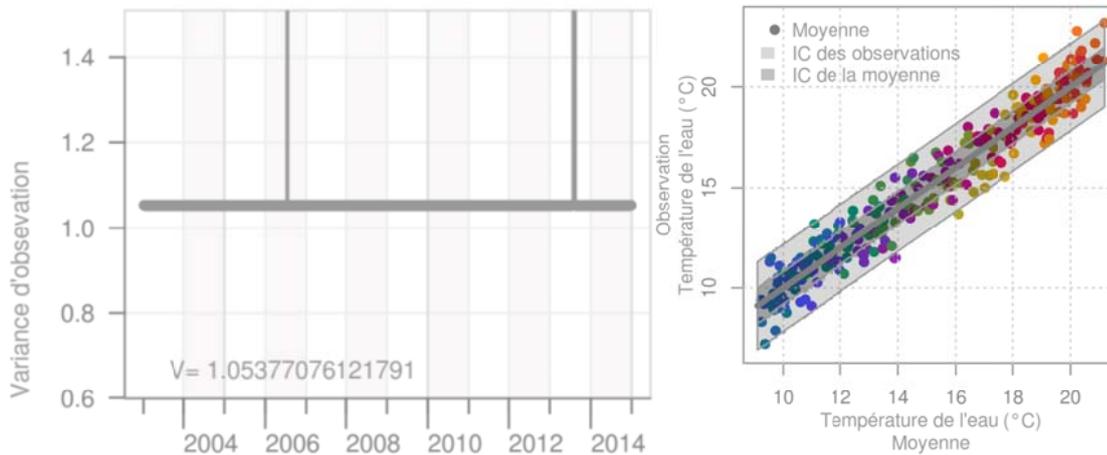
Saisonnalité

Les amplitudes de la saisonnalité montrent un hiver 2006-2007 particulièrement doux et un été 2007 avec des températures en retrait par rapports aux autres années de la fenêtre d'observation. La température minimale est atteinte entre février et la première semaine de mars, la température maximale entre fin juillet et fin août.



Variance d'observation et incertitude

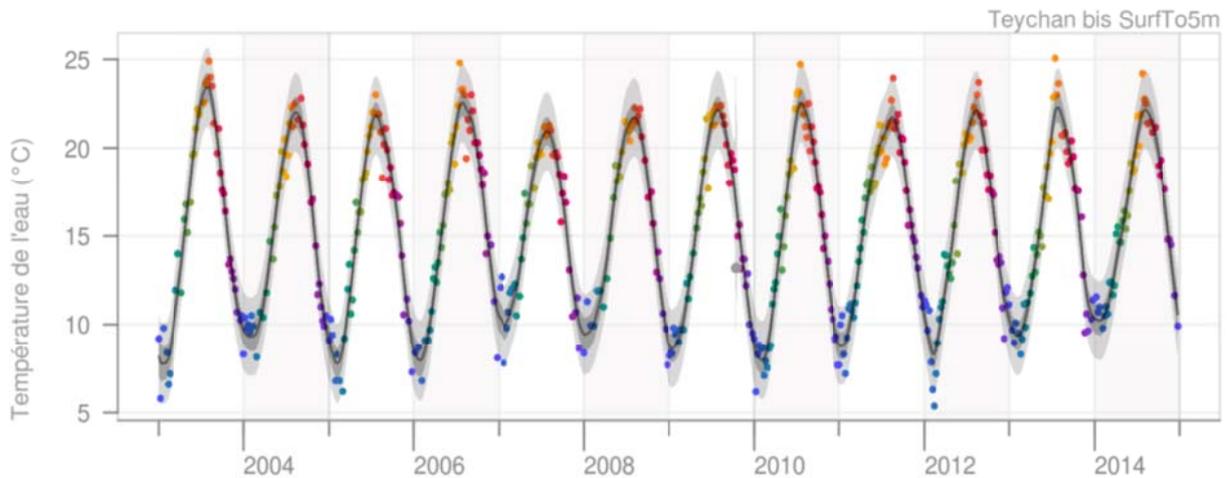
La variance d'observation est de $1.05 \text{ } ^\circ\text{C}^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est $\pm 1.35 \text{ } ^\circ\text{C}$.



Teychan bis

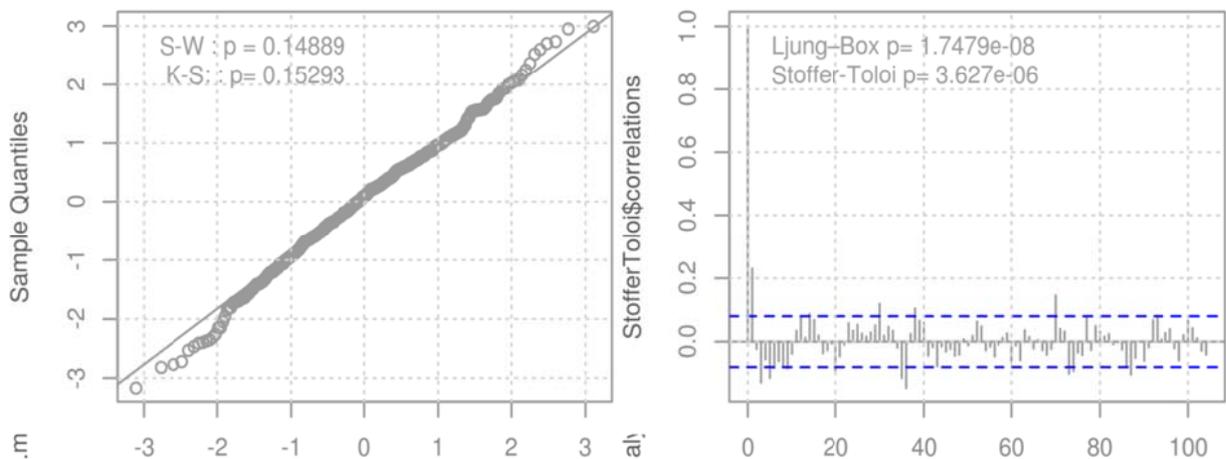
Modèles

Le premier modèle identifie une valeur exceptionnelle le 20/10/2009, 13,2 °C faisant suite (*i.e.* 7 jours avant) à 18,78 °C et précédant (*i.e.* 7 jours plus tard) 15 °C. Cette valeur faible est confirmée par les données horaires mesurées au niveau de la jetée d'Eyrac à Arcachon. L'écart peut ne pas sembler important, mais relativement à notre procédure, la valeur fait partie des 0.35 % des valeurs les plus faibles après ajustement de la saisonnalité et de la tendance. Une fois traitée comme exceptionnelle, le modèle résultant présente un gain significatif de vraisemblance, sans autre suggestion de changement, y compris à l'examen des éléments diagnostiques.

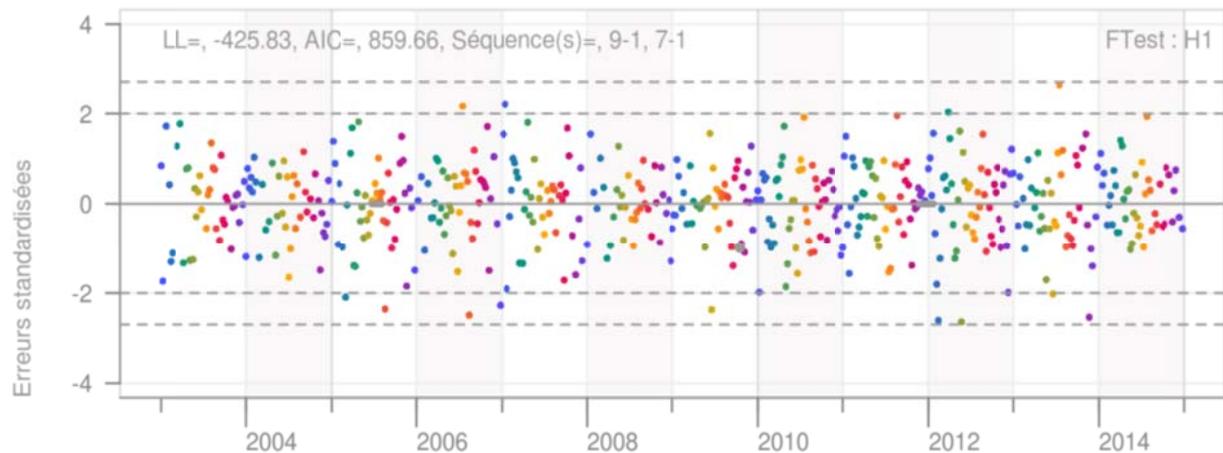


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens, mais pas indépendants.

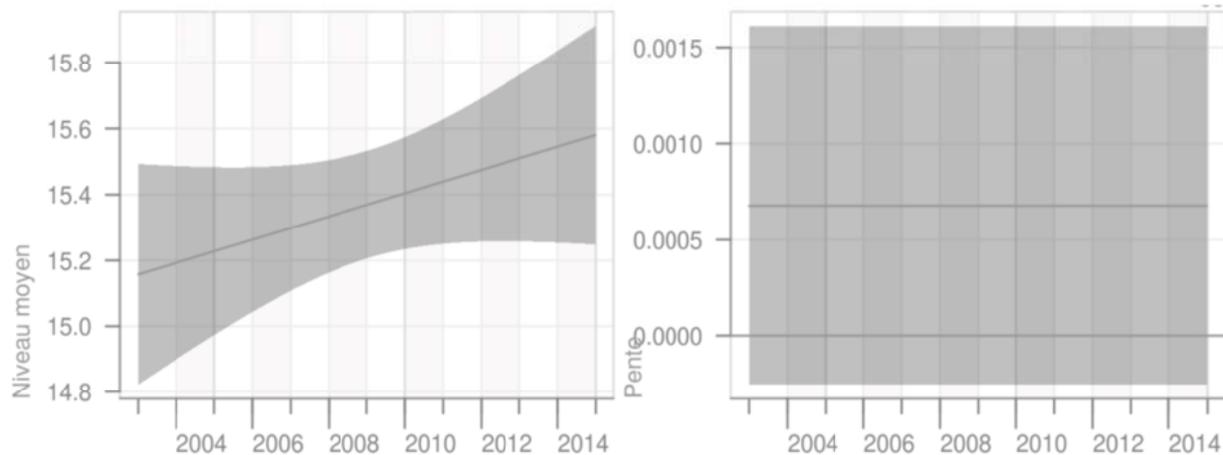


Les erreurs standardisées comptent deux séquences de même signe, l'une de 9 valeurs, fin 2011 début 2012 l'autre de 7 valeurs, pendant l'été 2005. Dans les deux cas, les séquences sont très ramassées temporellement, les erreurs standardisées très proches de 0. L'ensemble ne motive pas d'intervention particulière.



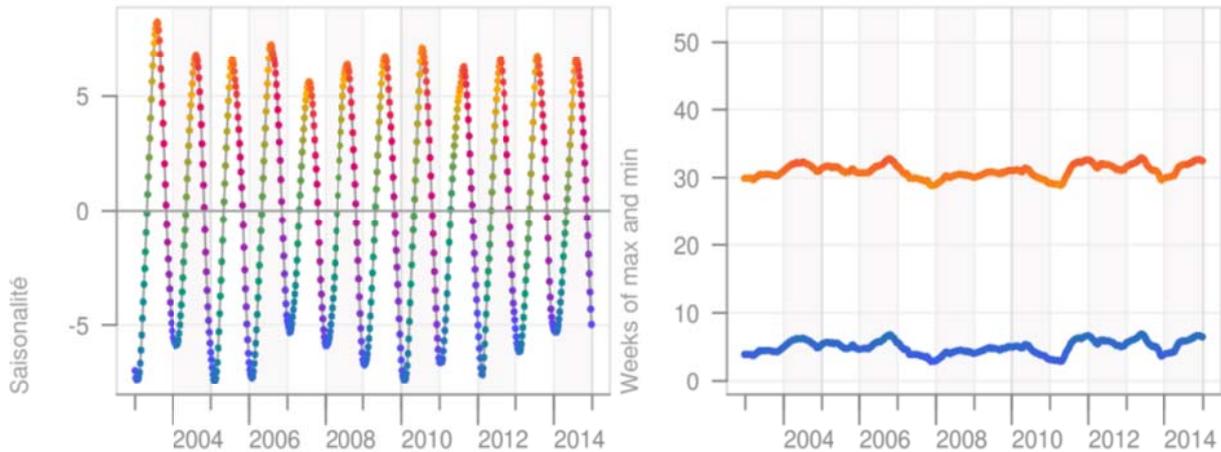
Tendance

La pente est constante et positive, mais non significativement différente de 0. Il s'ensuit un niveau moyen linéaire croissant, dont les intervalles de confiance à 90 % se recouvrent.



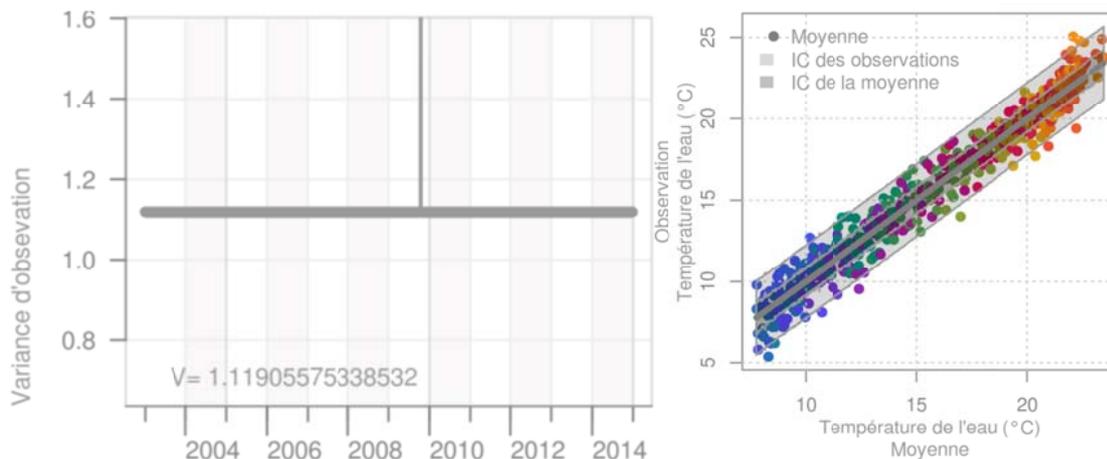
Saisonnalité

Comme précédemment, l'évolution du facteur saisonnier montre un hiver 2006-2007 particulièrement doux et un été 2007 présentant des températures plus fraîches que les autres années. Par ailleurs, l'année 2003 présente le facteur saisonnier estival le plus fort.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de $1.12 \text{ } ^\circ\text{C}^2$. Le processus d'observation contribue pour $\pm 1.41 \text{ } ^\circ\text{C}$ à l'intervalle de confiance des observations.



3.2 TURBIDITÉ

Arcachon - Bouée 7

Modèles

Le premier modèle identifie 4 valeurs exceptionnelles, par ordre chronologique :

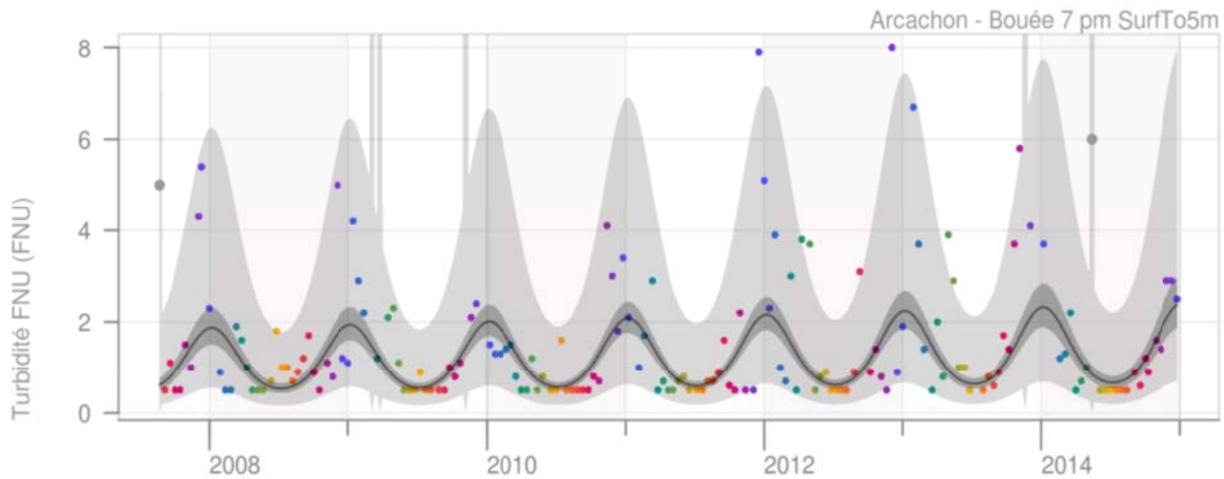
- 22/08/2007, 5 FNU, à une saison pendant laquelle la turbidité est habituellement plus que deux fois plus faible ;
- 06/03/2009, 15.3 FNU ;
- 02/04/2009, 10 FNU ;
- 10/11/2009, 19.5 FNU.

La première fait suite à deux jours de vents supérieurs à 80 km/h. Les trois autres sont confirmées par des valeurs également très élevées à la passe nord du bassin. Lorsque ces

mesures sont traitées comme exceptionnelles, le modèle résultant présente un gain significatif de vraisemblance. Il identifie encore 2 valeurs exceptionnelles :

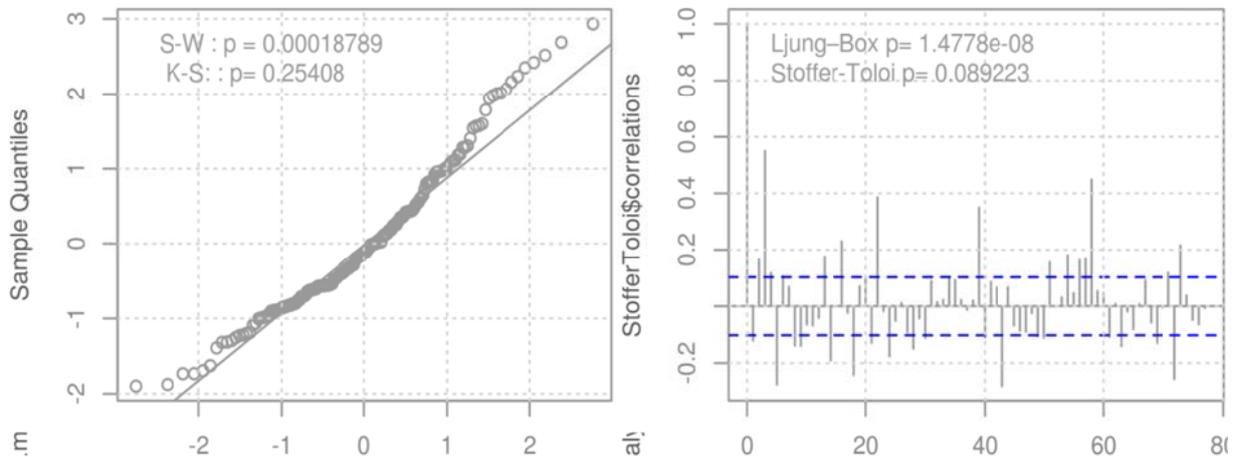
- 26/11/2013, 12.1 FNU, à la passe nord du bassin la valeur à cette date est également forte ;
- 21/05/2014, 6.0 FNU, dans ce dernier cas de l'ordre de 12 fois supérieur à la médiane estimée à cette saison.

Le modèle incluant ces suggestions affiche un gain significatif de vraisemblance et plus de données exceptionnelles.

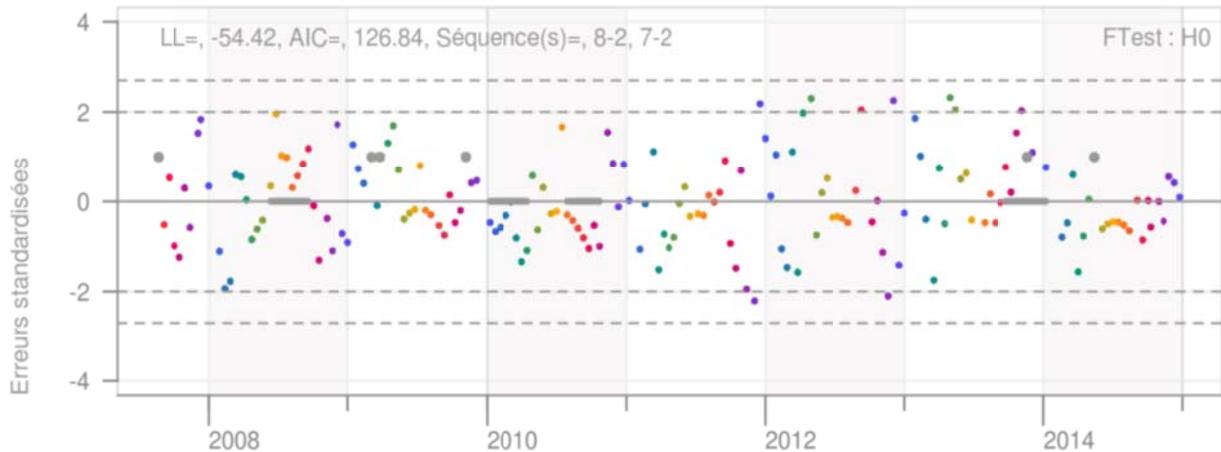


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

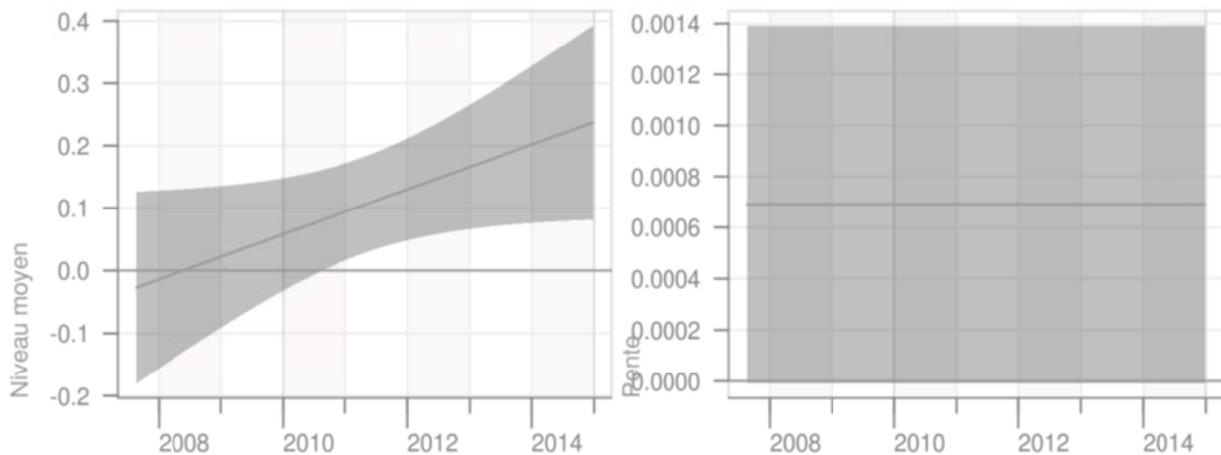


Les erreurs standardisées montrent 4 séquences d'erreurs consécutives de même signe. Pour la première en 2008, il y a une erreur très proche de 2 le 27/06/2008 mais les autres sont plus faibles. Les essais pour dissoudre cette séquence en suggérant des changements de niveau ont été vains. Début 2010, la séquence d'erreurs négatives est très proche de 0 et de ce fait ne motive pas d'intervention. Pour la séquence de fin 2010, un modèle incluant une suggestion de changement de niveau ne s'est pas avéré plus vraisemblable. Par ailleurs, elle apparaît sous la forme d'une section de parabole et est induite par une suite de mesures à la limite de quantification. La même forme est visible pour les mêmes raisons en 2009, 2011, 2012 et 2014. La dernière séquence d'erreurs de même signe se situe fin 2013. Les différents essais tentés pour la traiter ont tous mené à un modèle moins vraisemblable.



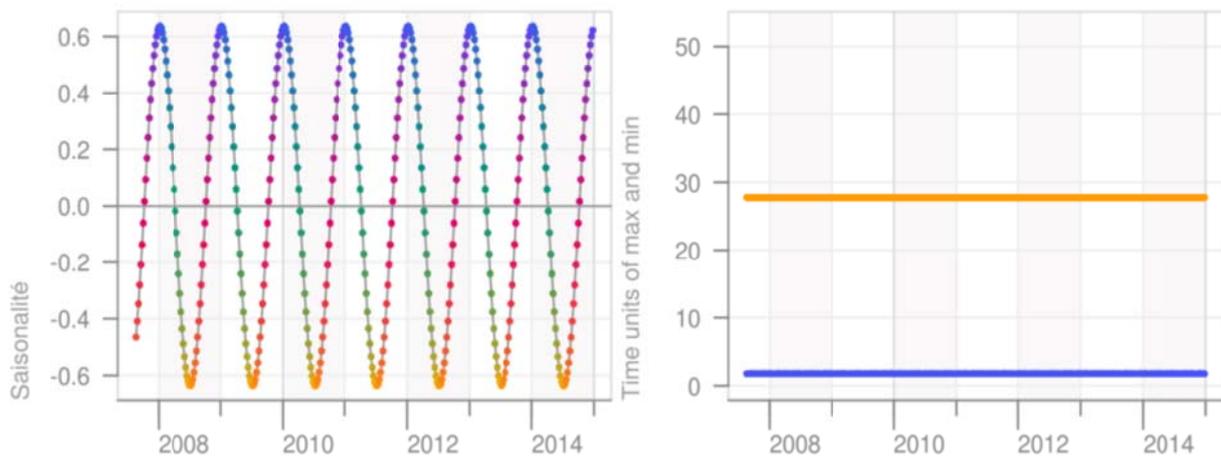
Tendance

La pente est constante et positive, mais non significativement différente de 0. Il s'ensuit un niveau moyen linéaire croissant, dont les intervalles de confiance à 90 % se recouvrent.



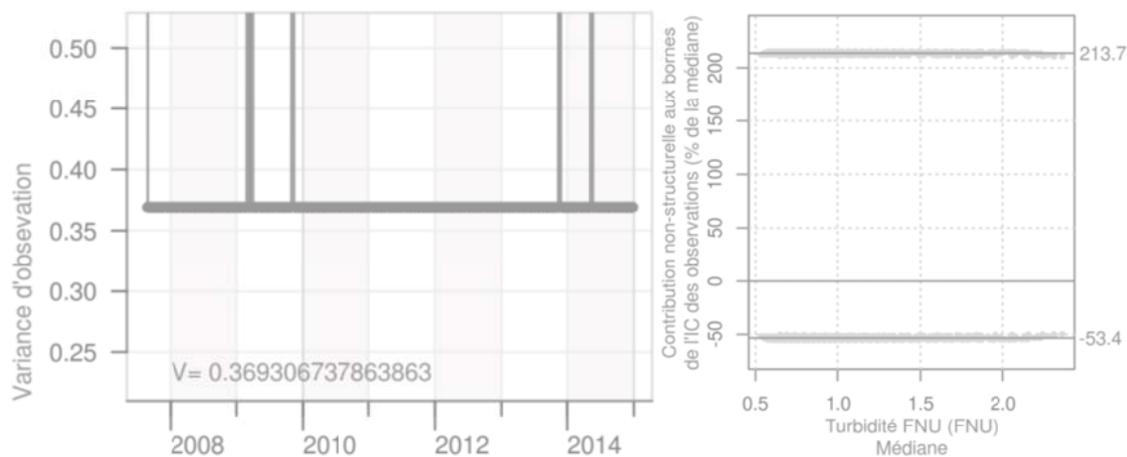
Saisonnalité

L'amplitude ne présente pas de changement au cours du temps, non plus que les dates où le minimum et le maximum sont atteints.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de $0.37 (\log \text{ FNU})^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -53 % et 214 % de la médiane.

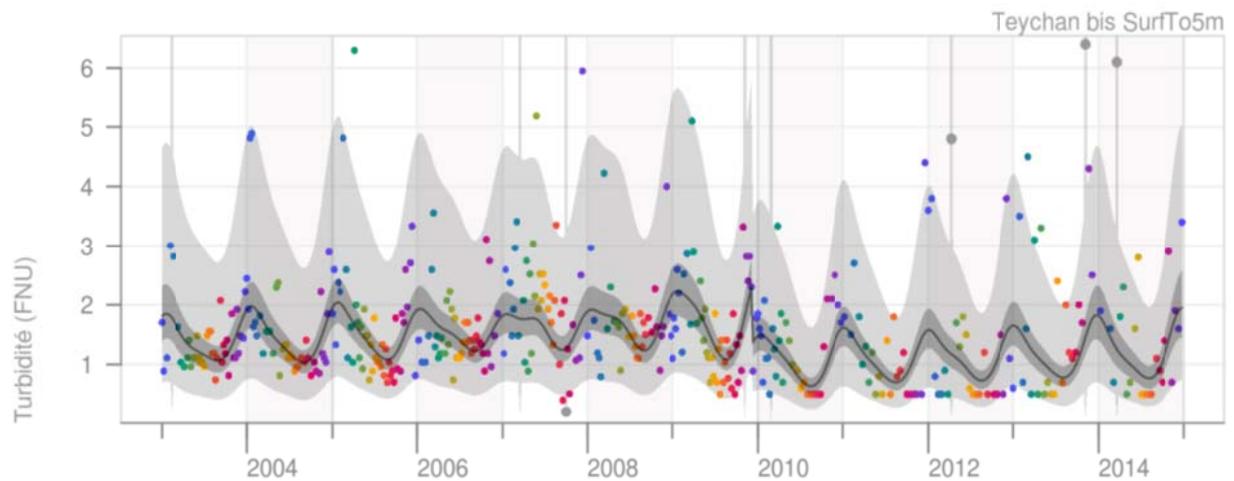


Teychan bis

Modèles

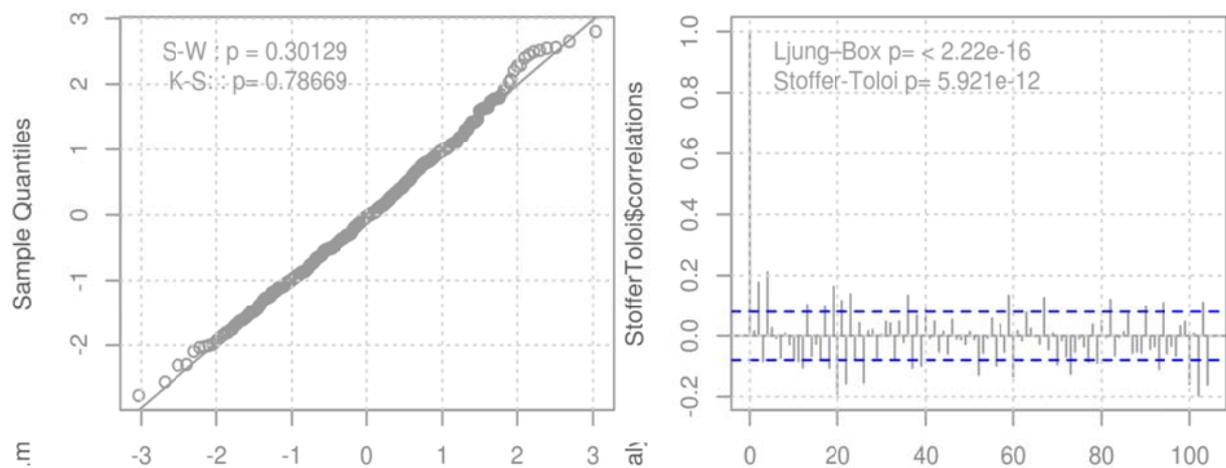
Le premier modèle identifie 5 valeurs exceptionnelles (17/02/2003, 04/10/2007, 10/11/2009, 01/03/2010, 12/11/2013). Une fois que ces valeurs ont été traitées comme exceptionnelles, le second modèle présente un gain significatif de vraisemblance, identifie deux nouvelles valeurs exceptionnelles (26/03/2007, 13/04/2012) et suggère une période de changement de niveau au second semestre 2009. D'une part, cette période correspond à la fin de l'alternance entre les méthodes « Turbidimètre optique (lumière blanche - TURB) dans échantillon - NTU » et « Capteur turbidimètre norme ISO 7027 in situ - FNU » (cf. Tableau 1). D'autre part, la profondeur de prélèvement est passée début 2008 de -3 m à sub-surface. Le modèle incluant le traitement des 2 *outliers* et le changement de niveau est significativement plus vraisemblable. Par ailleurs, après test, c'est bien le changement de niveau qui contribue de manière massive à l'augmentation de vraisemblance. Ce troisième modèle identifie encore une valeur exceptionnelle (26/03/2014) et son traitement augmente significativement la vraisemblance du modèle. Il est à noter que les *outliers* identifiés correspondent à des dates de valeurs élevées de matières en suspension

et/ou de turbidité à d'autres lieux de surveillance du bassin d'Arcachon, notamment le lieu de surveillance « Tés » (réseau ARCHYD), un peu à l'amont de « Teychan bis ». En particulier les dates des 10/11/2009, 01/03/2010 et 26/03/2014 correspondent toutes à des coups de vent.

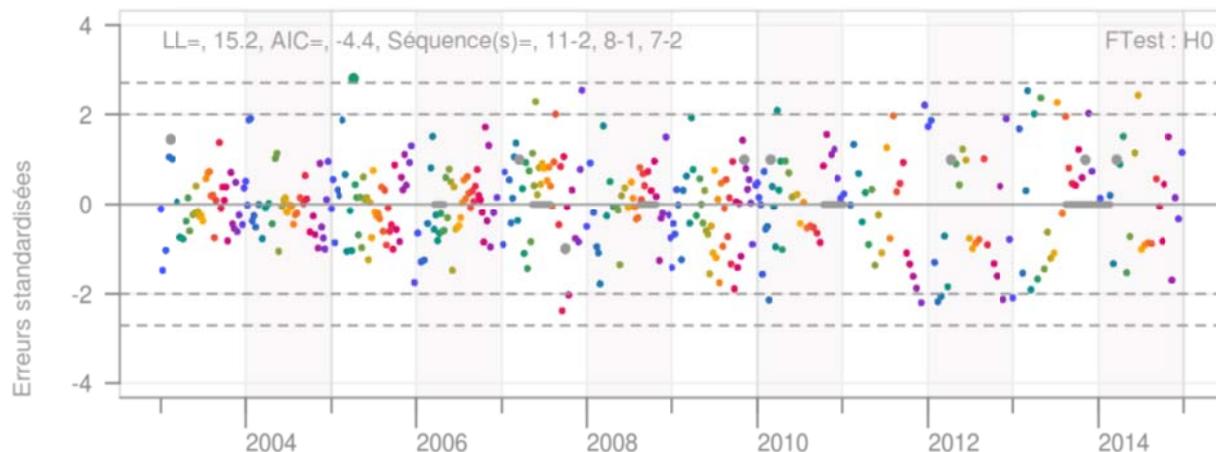


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens mais pas indépendants.

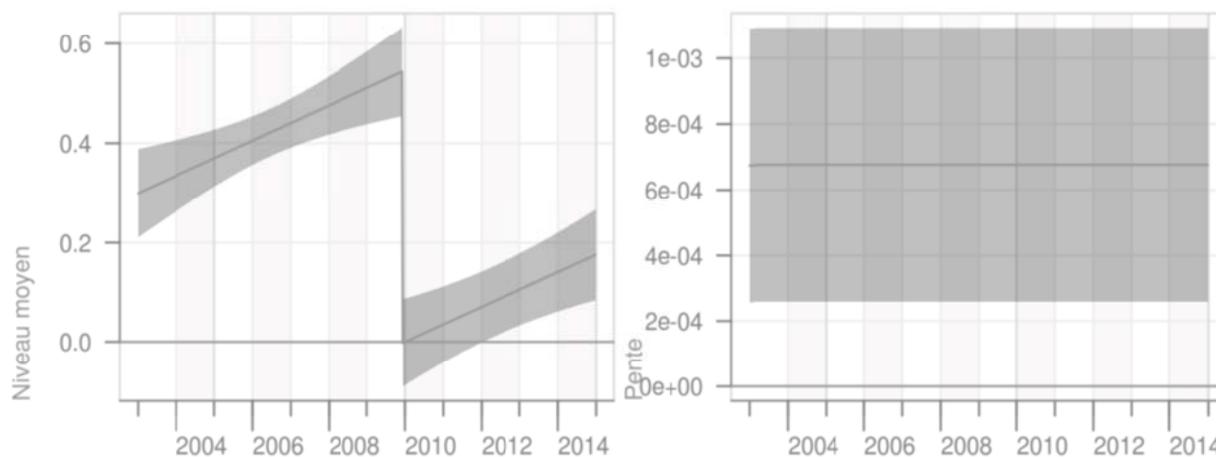


Il reste des séquences d'erreurs consécutives de même signe. Seule la séquence de l'automne 2010 au début de l'hiver suggère l'éventualité d'un changement de niveau. Le test de cette hypothèse conduit à un modèle moins vraisemblable. Après 2010, les saisies dans Quadrigé indiquent la limite de quantification de la méthode. Ces séquences de valeurs égales à la LQ induisent des éléments de dépendances entre les mesures.



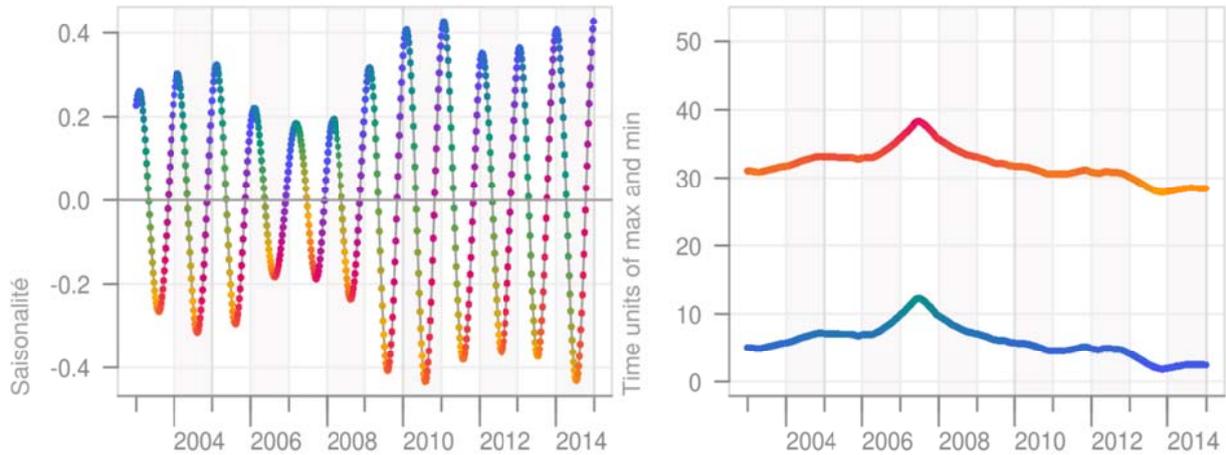
Tendance

La pente est constante, positive et significativement différente de 0. Le niveau moyen présente une croissance linéaire avec une rupture significative.



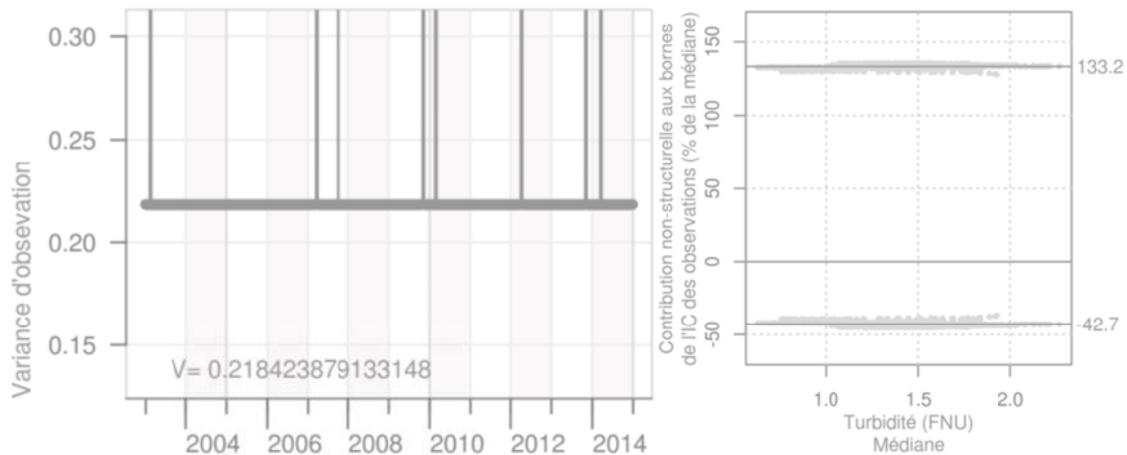
Saisonnalité

Trois séquences peuvent être distinguées : 2003-2005, 2006-2008 et 2009-2014. Les amplitudes sont les plus faibles pour 2007 et 2008, et les plus fortes à partir de 2010. D'un point de vue phénologique, jusqu'en 2007 les dates des maximum et minimum deviennent plus tardives, puis reviennent vers des dates plus précoces.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de $0.22 (\log \text{FNU})^2$, moindre que pour « Arcachon-Bouée 7 ». La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -43 % et 133 % de la médiane. C'est là aussi moins que précédemment, surtout pour la borne supérieure.

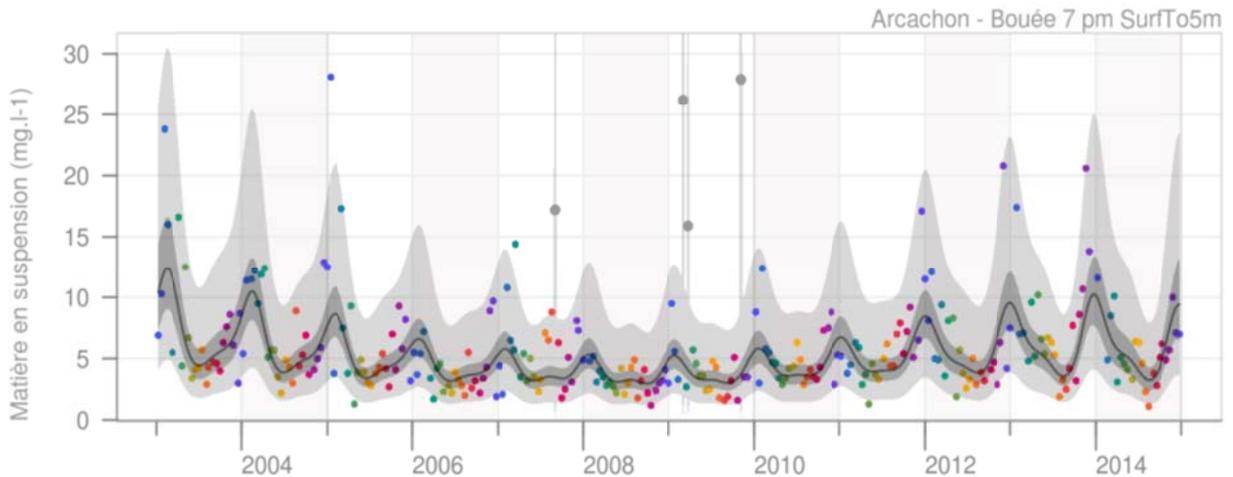


3.3 MATIÈRES EN SUSPENSION

Arcachon - Bouée 7

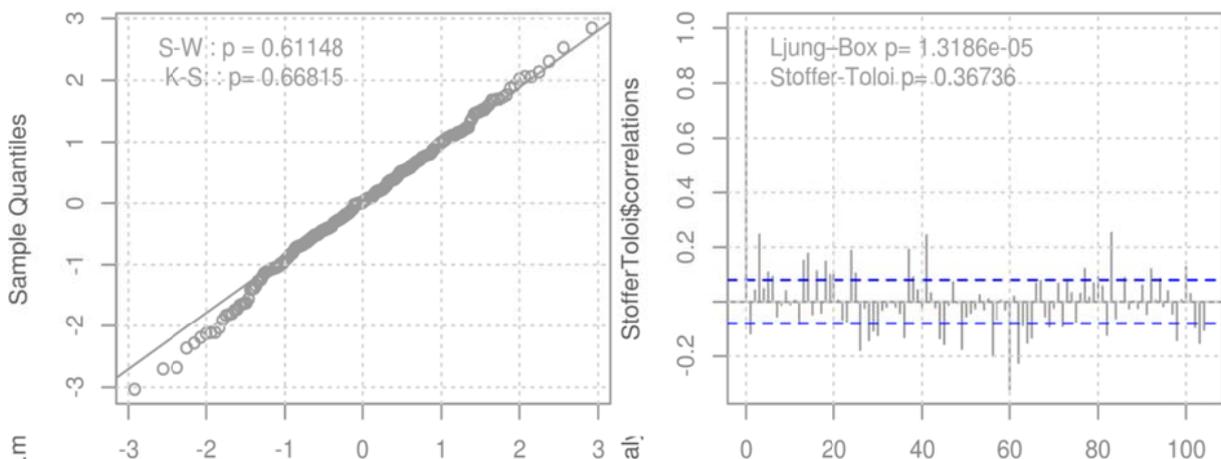
Modèles

Les deux premiers modèles identifient respectivement 3 et 1 valeurs exceptionnelles (06/09/2007, 06/03/2009, 10/11/2009 et 02/04/2009), toutes par excès : dans les deux cas le gain en vraisemblance est significatif. Les valeurs mesurées le 06/03/2009 et 10/11/2009 sont à relier à une remise en suspension causée par à des coups de vents.

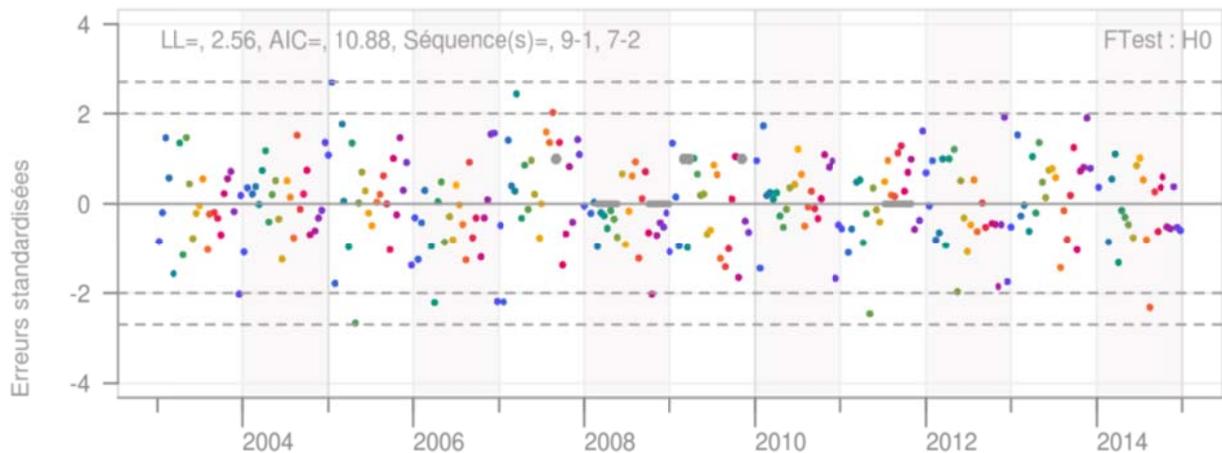


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

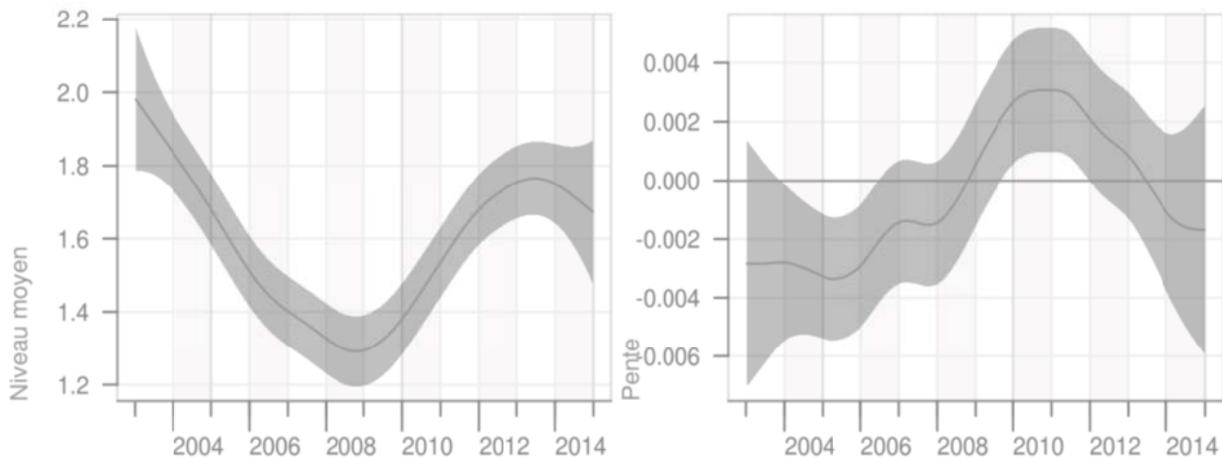


Les erreurs standardisées comptent trois séquences d'erreurs consécutives de même signe. Au printemps et à l'automne 2008 les concentrations sont un peu inférieures au modèle mais sans indice franc de changement. La troisième se situe sur l'été et l'automne 2011 : les valeurs observées sont au-dessus du modèle, sans excès et sans structure identifiée.



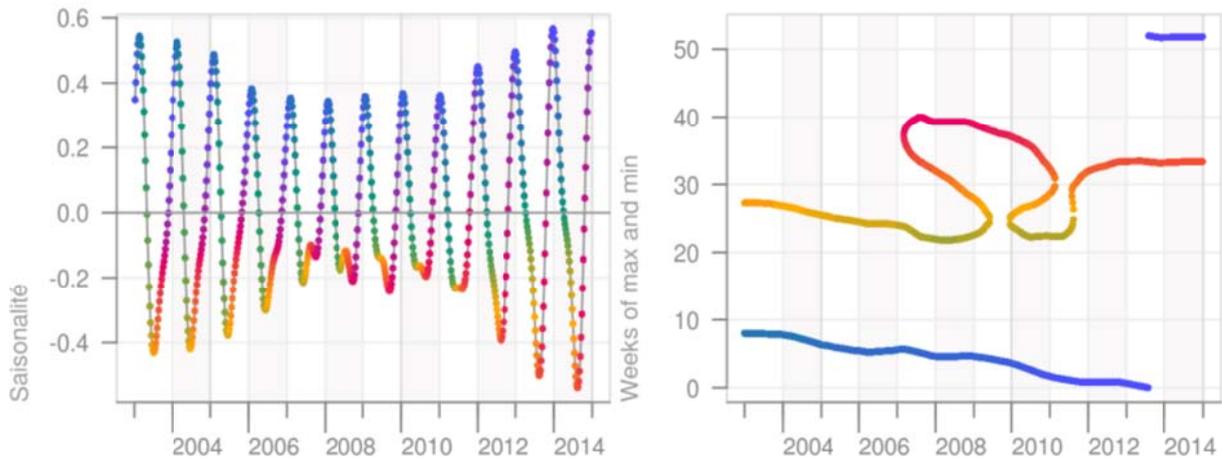
Tendance

La pente présente des changements de signes. D'abord négative et significativement différente de 0 entre 2004 et mi-2006, elle devient positive à la fin de 2008 et significativement différente de 0 de fin 2009 à fin 2011. Elle décroît à la fin de la série et redevient négative et non significativement différente de 0. Il s'ensuit un niveau moyen décroissant jusqu'en 2008 et croissant jusqu'en 2011.



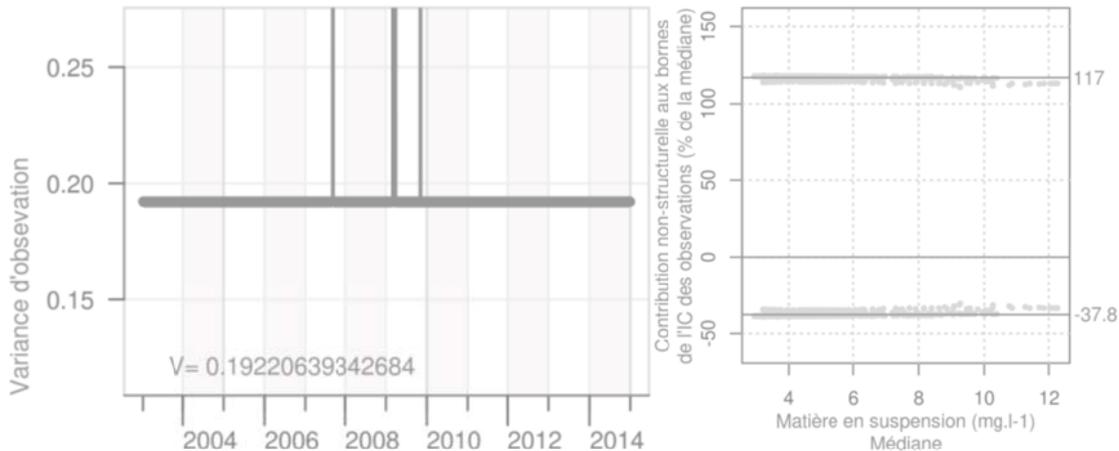
Saisonnalité

Les amplitudes sont moindres au milieu de la série (*i.e.* 2007-2009) mais similaires au début et à la fin. Les années de 2007 à 2010 présentent un régime bimodal, sous la forme d'une remontée de la concentration avant l'automne. Le minimum annuel est alors atteint vers la semaine 40, début octobre au lieu de mi-juin/fin juillet. De 2012 à 2014, le minimum est atteint dans la première quinzaine d'août, plus tardivement qu'au début de la série.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de 0.20 ($\log \text{ mg/L}$)². La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -38% et 120% de la médiane.

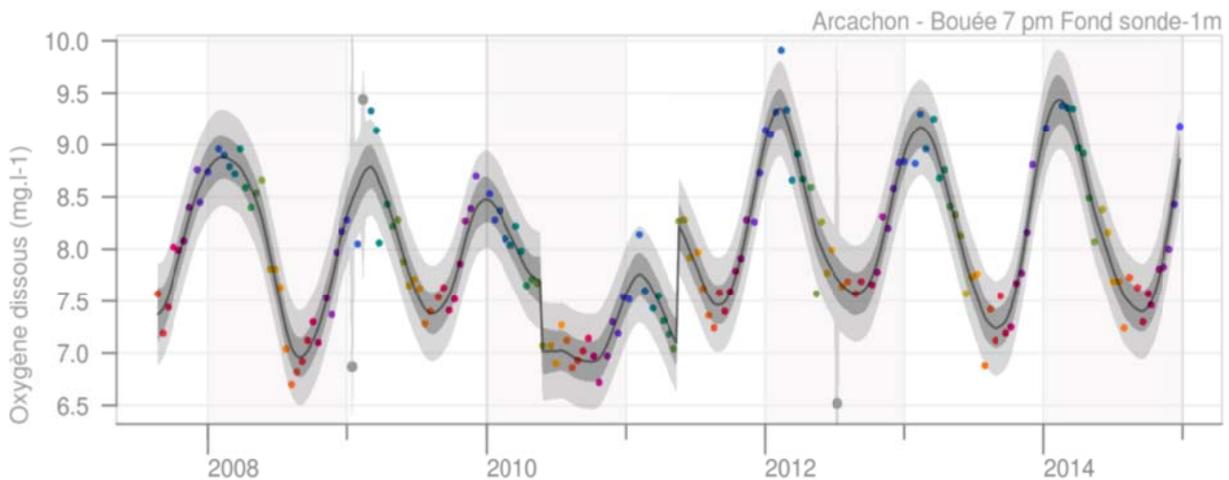


3.4 CONCENTRATION EN OXYGÈNE DISSOUS

Arcachon - Bouée 7

Modèles

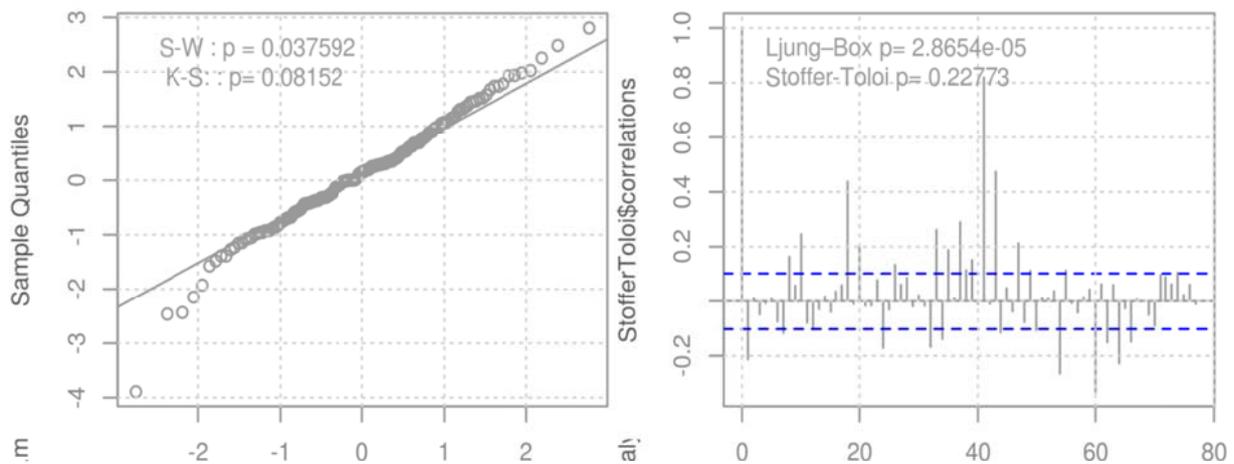
Le premier modèle identifie 3 valeurs exceptionnelles (20/01/2009, 19/02/2009, 12/07/2012) et un changement de niveau au printemps 2011. La prise en compte de ces suggestions augmente de manière très importante la vraisemblance du modèle. Le second modèle n'identifie pas de nouvelles valeurs exceptionnelles mais un changement de niveau mi-2010. La rupture est suggérée au 23/03/2010 mais le modèle obtenu est moins vraisemblable et le changement de niveau de très faible amplitude. Le changement de niveau suggéré pour « Teychan bis » au 04/06/2010 (cf. p. 29) et la variation de concentration de 7.7 mg/L au 20/05/2010 à 7.1 mg/L le 04/06/2010, ont motivé la substitution de la suggestion automatique par un changement au 04/06/2010. Ce dernier modèle est plus vraisemblable que le second, mais le gain n'est pas significatif. Par contre, mécaniquement, le critère d'Akaike (*i.e.* AIC, cf. p. 69) est en diminution. En dépit de l'absence de gain significatif de vraisemblance, ce dernier modèle est retenu au regard de sa cohérence avec celui de Teychan-bis (cf. p. 29).



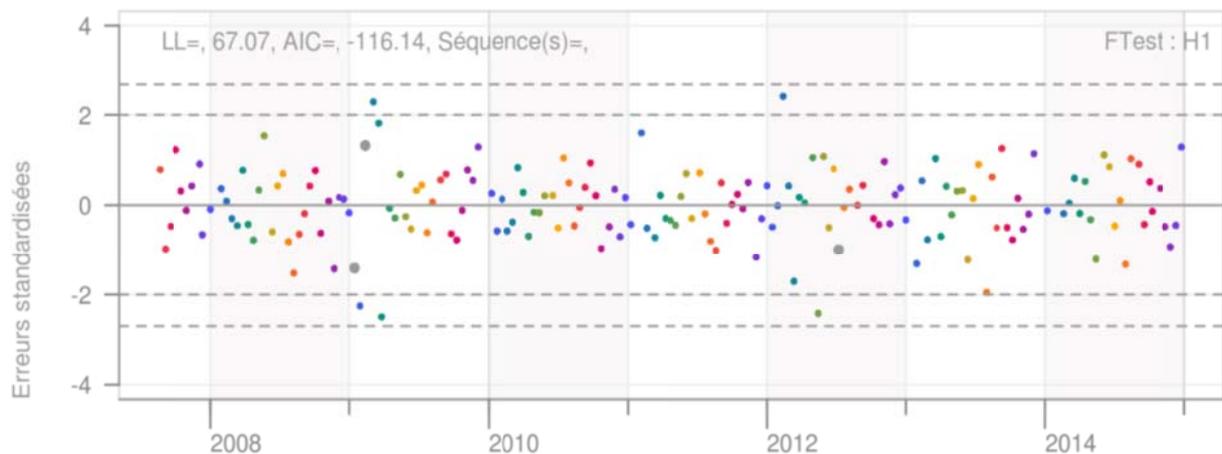
Les sondes utilisées sur le terrain sont vérifiées tous les mois et recalibrées si la dérive est supérieure à 0.5 mg/L. Cette vérification est réalisée en utilisant un oxymètre de référence, lui-même vérifié tous les deux ans environ. Dans ce cadre, l'oxymètre de référence a été expédié pour vérification en octobre 2010 et n'a été restitué qu'en mai 2011. Si bien que les sondes terrain n'ont pas pu être vérifiées pendant cette période. Lors de sa restitution, il a été constaté une dérive négative de la sonde terrain (-1,28 mg/L) qui a été recalibrée. Ceci explique l'augmentation brutale au 20/05/2011. Par contre, les métrologues n'ont aucune explication pour l'éventuel changement de niveau au 04/06/2010 : les vérifications de la sonde terrain effectuées avant et après cette date se sont avérées conformes. Finalement, il n'y a aucune raison biologique pour observer une baisse de la concentration d'oxygène aussi brutalement en période de sursaturation.

Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

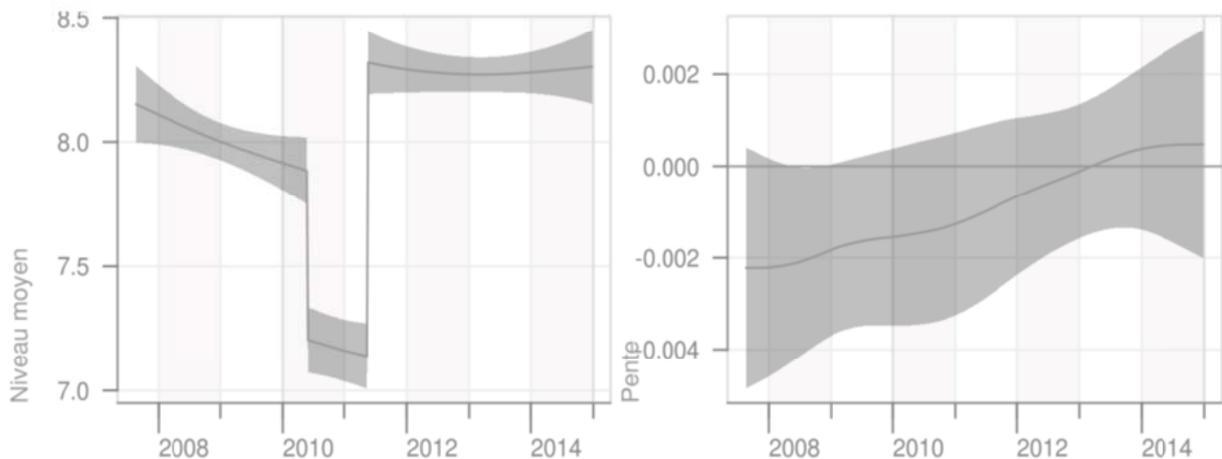


Les erreurs standardisées ne présentent pas de séquence consecutive de même signe.



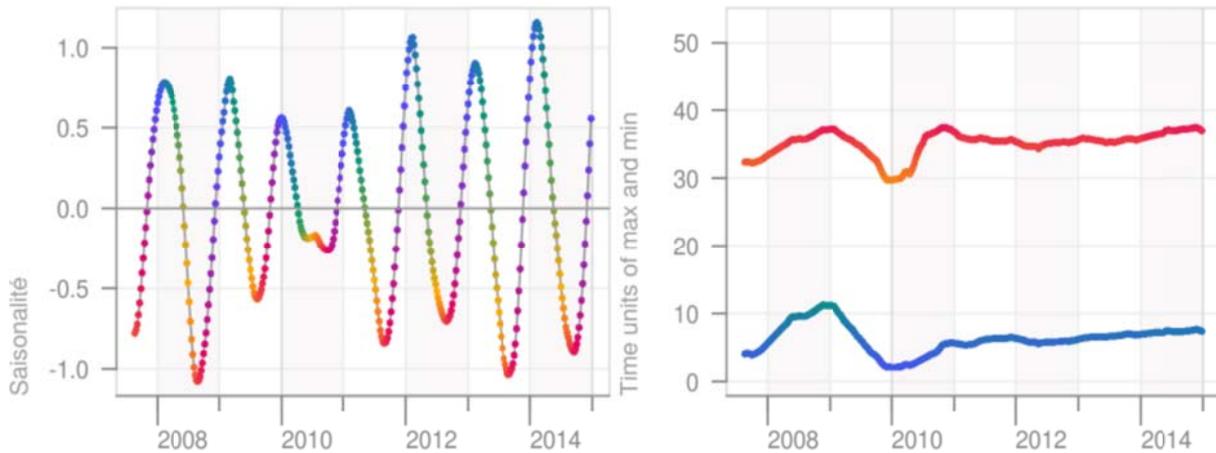
Tendance

La pente est négative jusqu'à début 2013 où elle devient positive. Elle est non significativement différente de 0 sur toute la période. Les deux changements de niveau suggérés induisent une période de concentrations plus faible du printemps 2010 au printemps 2011. La concentration moyenne avant le changement est plus faible que la concentration après le changement.



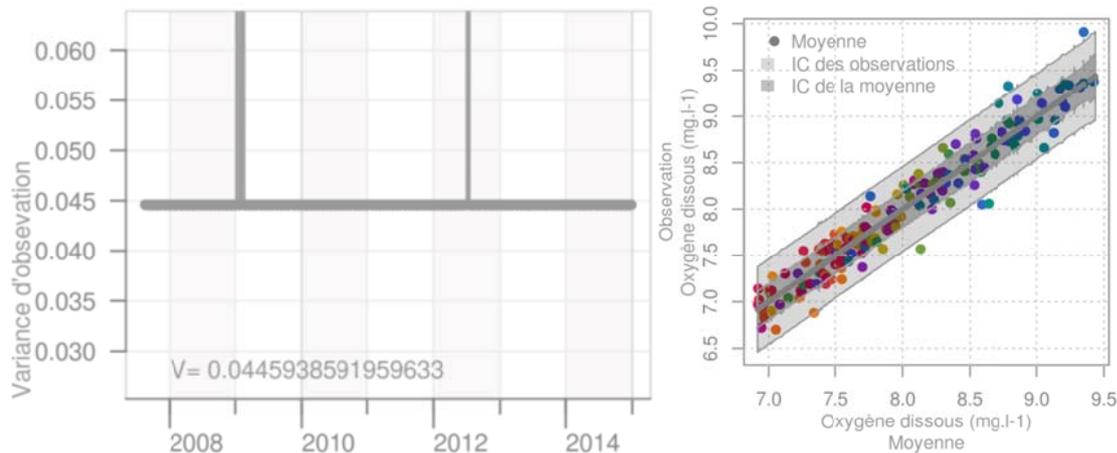
Saisonnalité

L'amplitude des hivers du premier segment (*i.e.* jusqu'au printemps 2010) apparaît moindre que celle du dernier segment (*i.e.* à partir de 2011). La valeur du paramètre saisonnier de l'été 2010 est très en retrait par rapport à toutes les années de la série. La valeur maximale est toujours atteinte dans les 10 premières semaines de l'année (*i.e.* seconde semaine de mars) et la valeur minimale entre les semaines 30 et 40 (*i.e.* fin juillet à première semaine de septembre). Ces moments connaissent des variations avant 2011, après quoi elles apparaissent stables.



Variance d'observation et incertitude

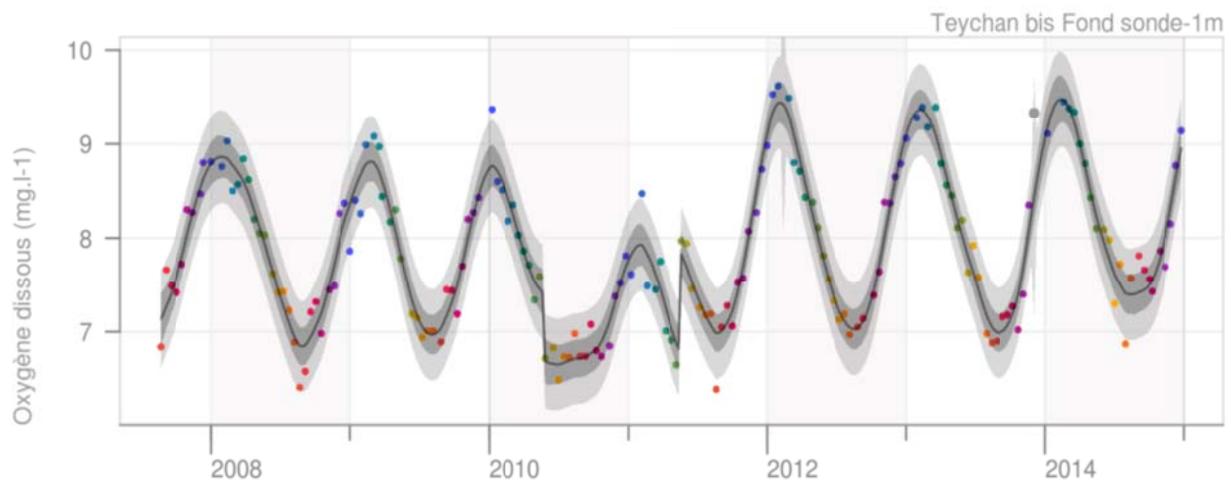
La variance d'observation est de 0.05 (mg/L)^2 . Comme pour la température, l'absence de transformation logarithmique amène à considérer un écart quasi-constant. Ici, le processus d'observation contribue pour $\pm 0.26 \text{ mg/L}$ à l'intervalle de confiance des observations.



Teychan bis

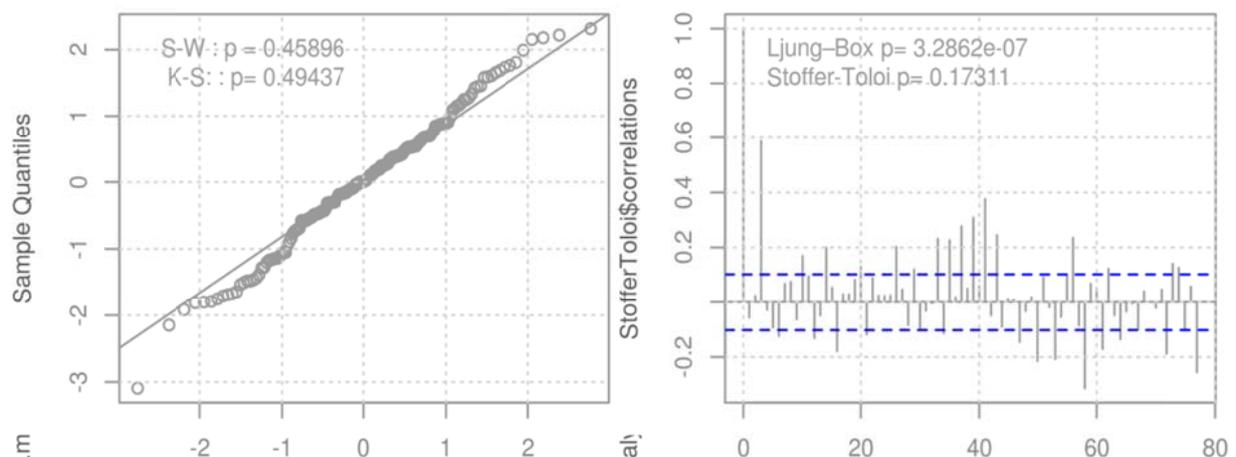
Modèles

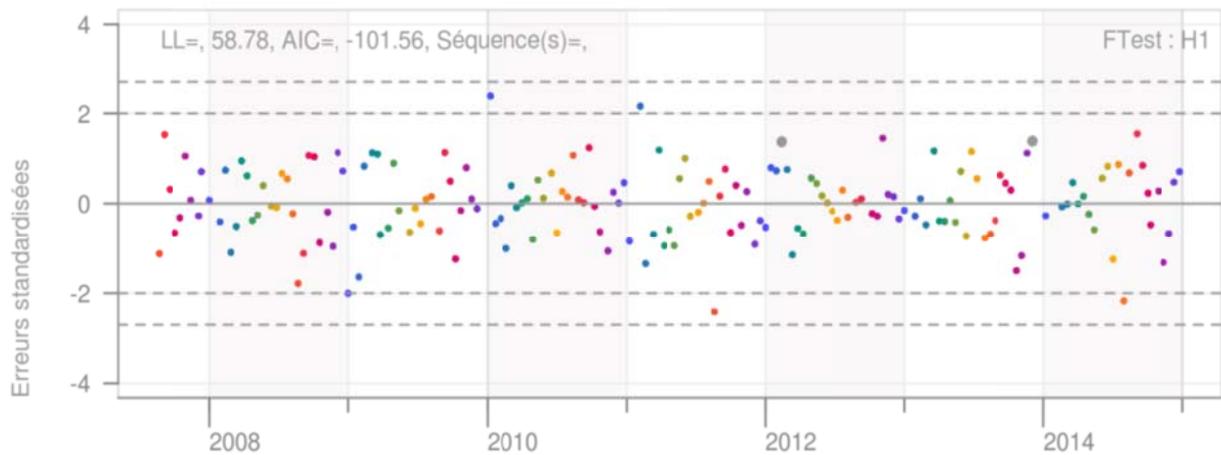
Le premier modèle suggère une valeur exceptionnelle (16/02/2012) et un changement de niveau à l'augmentation (26/05/2011). Une fois ces 2 suggestions prises en compte, le modèle résultant est beaucoup plus vraisemblable. Le changement suggéré intervient au printemps 2011, avec un passage brutal de 6.7 mg/L à 8.0 mg/L. Ce nouveau modèle suggère à nouveau une valeur exceptionnelle (10/12/2013) et un changement de niveau (04/06/2010). Là encore la prise en compte de ces changements augmente de manière significative la vraisemblance du modèle. Les éléments diagnostiques de ce modèle n'ouvrent pas sur de nouvelles suggestions d'intervention. Le problème métrologique observé sur les sondes de mesure à « Arcachon - Bouée 7 » explique également ici les deux ruptures.



Diagnostic

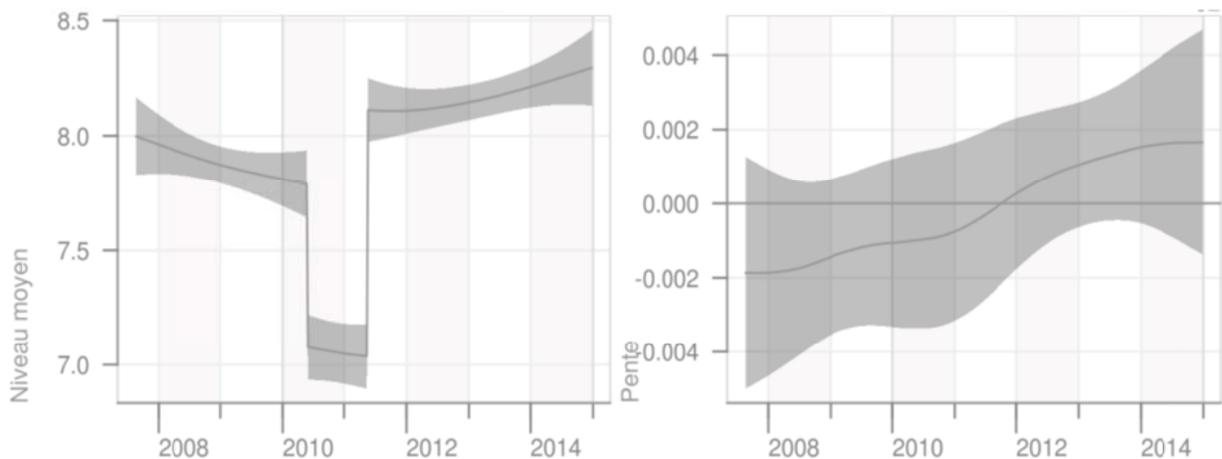
Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants et ne présentent pas de séquence d'erreurs consécutives de même signe.





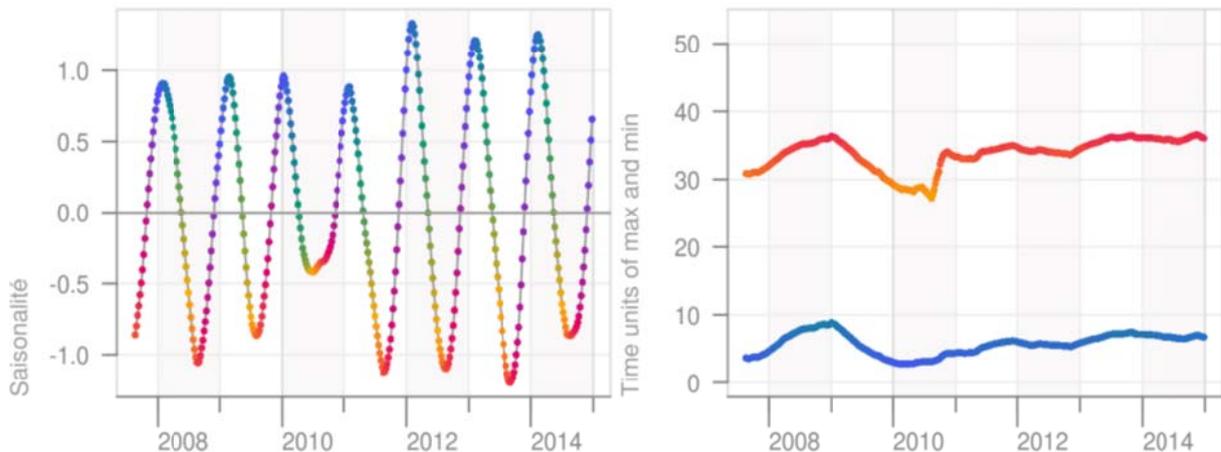
Tendance

La pente est négative jusque mi-2011 où elle devient positive. Elle est non significativement différente de 0 sur toute la période. Les deux changements de niveau suggérés induisent une période de concentrations plus faibles du printemps 2010 au printemps 2011. La concentration moyenne avant le changement est plus faible que la concentration après le changement.



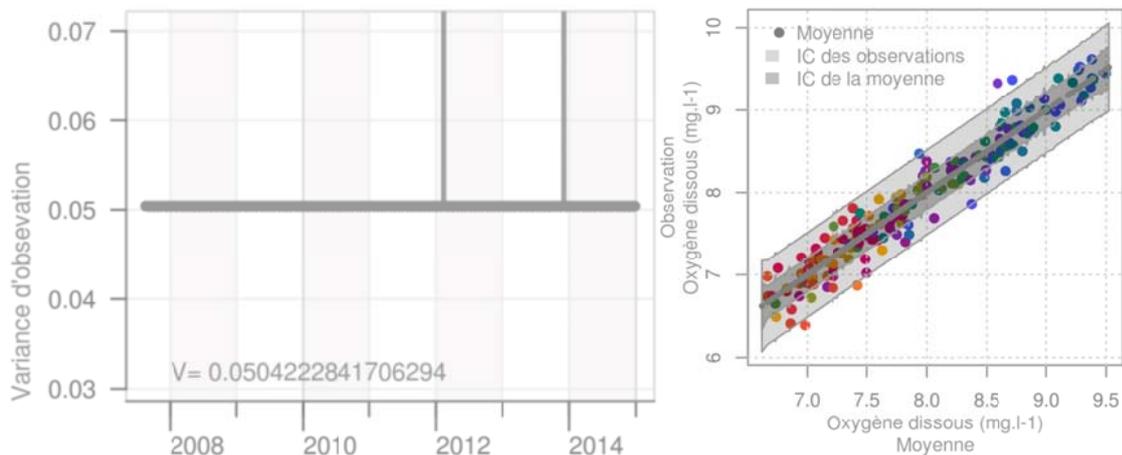
Saisonnalité

L'amplitude du premier segment (*i.e.* jusqu'au printemps 2010) apparaît moindre que celle du dernier segment (*i.e.* à partir de 2011). La période de moindre concentration s'étend sur un an : 04/06/2010 au 26/05/2011. La valeur du paramètre saisonnier de l'été 2010 est très en retrait par rapport à toutes les années de la série. La valeur maximale est toujours atteinte dans les 10 premières semaines de l'année (*i.e.* seconde semaine de mars) et la valeur minimale entre les semaines 30 et 40 (*i.e.* fin juillet à première semaine de septembre). Ces moments connaissent des variations avant 2011, après quoi elles apparaissent stables.



Variance d'observation et incertitude

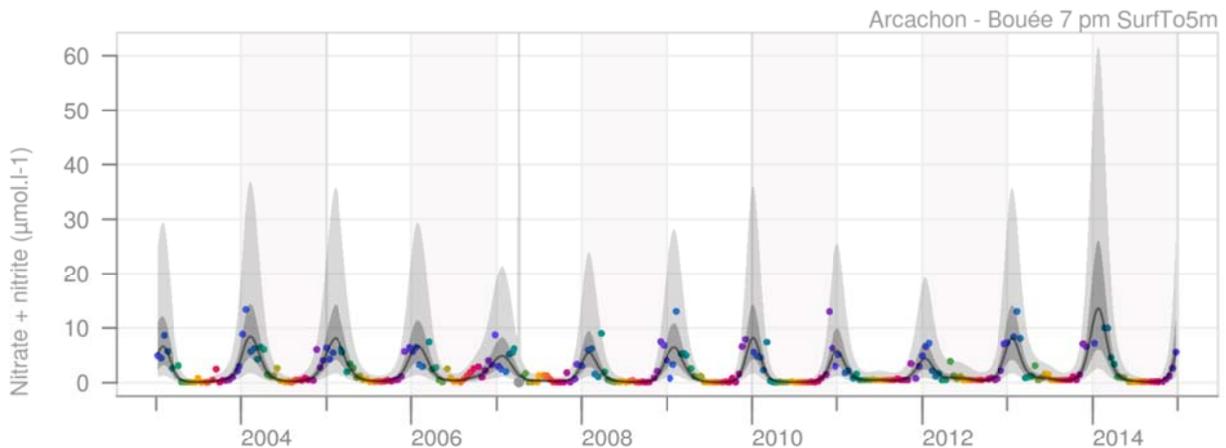
La variance d'observation est de 0.05 (mg/L)^2 . Le processus d'observation contribue pour $\pm 0.31 \text{ mg/L}$ à l'intervalle de confiance des observations.



3.5 CONCENTRATION EN (NITRATE+NITRITE)

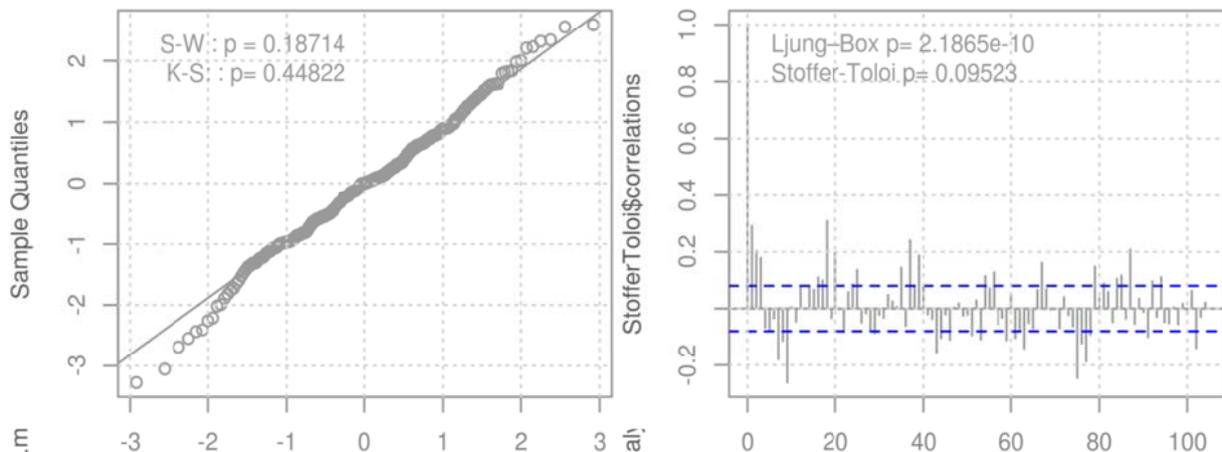
Arcachon - Bouée 7
Modèles

Le premier modèle suggère une valeur exceptionnelle au 10/04/2007. À l'issue de son traitement comme valeur exceptionnelle, le modèle correspondant présente un gain significatif en vraisemblance. Il n'y a pas d'autres suggestions de changement ou de valeur exceptionnelle.

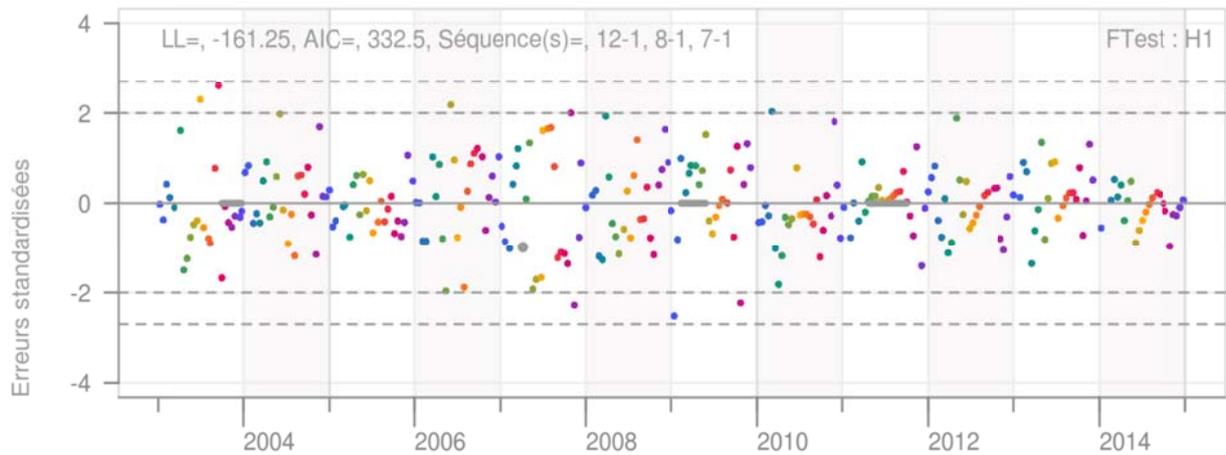


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

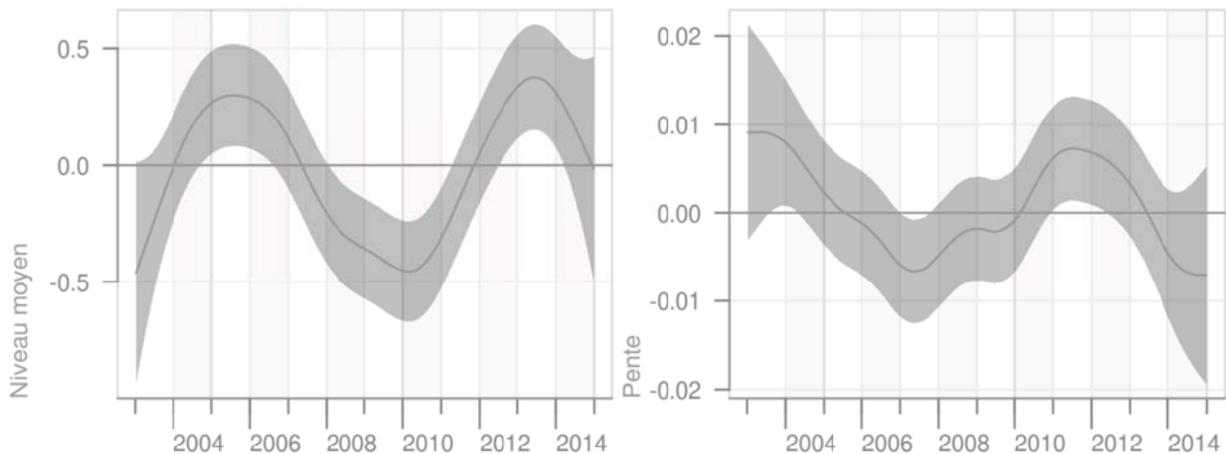


Les erreurs standardisées comptent deux séquence de mêmes signes mais ne justifient pas d'intervention spécifique. En fin de série, en particulier à partir de 2012, des formes de type quadratique sont symptomatiques de l'atteinte d'une limite de quantification, ce qui est confirmé par l'examen des données.



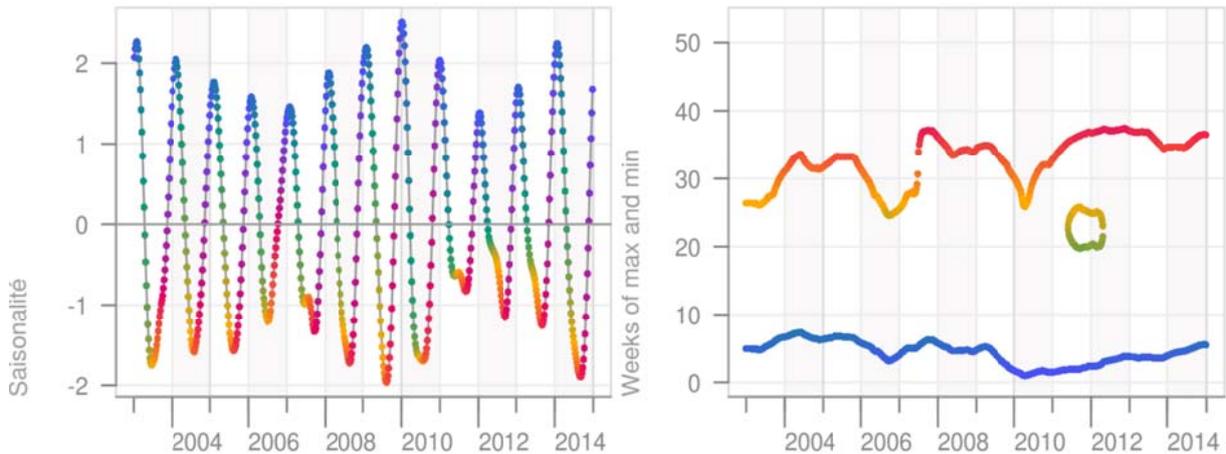
Tendance

Le niveau moyen présente des variations sur les 12 années sans présenter de tendance marquée. La pente est positive (*i.e.* niveau moyen croissant) jusque mi-2005, significativement différente de 0 de mi-2003 à mi-2004. Puis elle est négative jusqu'au début de 2010, significativement différente de 0 seulement en 2007. La période positive s'étend jusqu'à mi-2013, avec une période de significativité de 2011 à mi-2012. À ce moment elle redevient négative et reste non significativement différente de 0 jusqu'à la fin de la série.



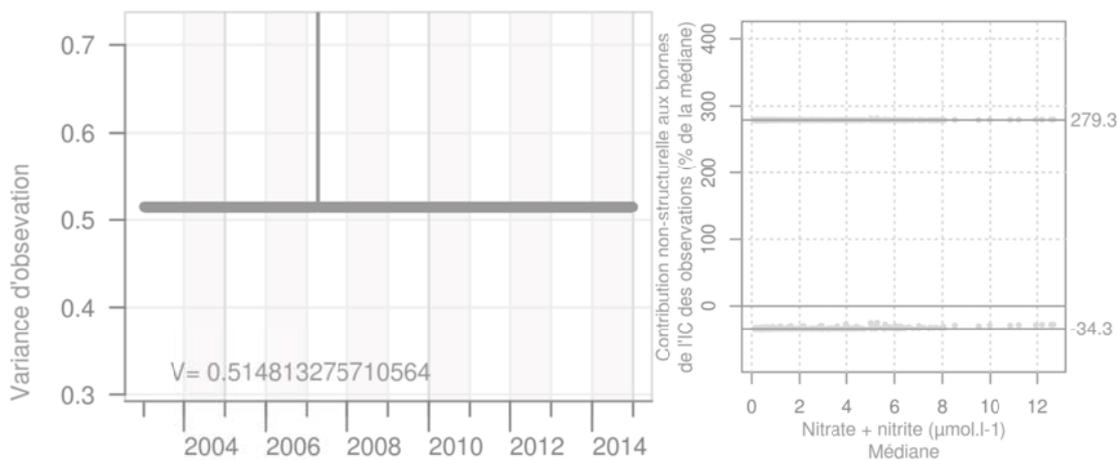
Saisonnalité

Les amplitudes sont variables, importantes de 2008 à 2010. Les concentrations les plus fortes deviennent plus précoces de 2009 à 2010, mais reviennent lentement vers la cinquième semaine de l'année à la fin de la période. La semaine de concentration minimale oscille entre la 25e (*i.e.* fin juin) et la 35e (*i.e.* fin août) semaine de l'année en constituant des intervalles homogènes.

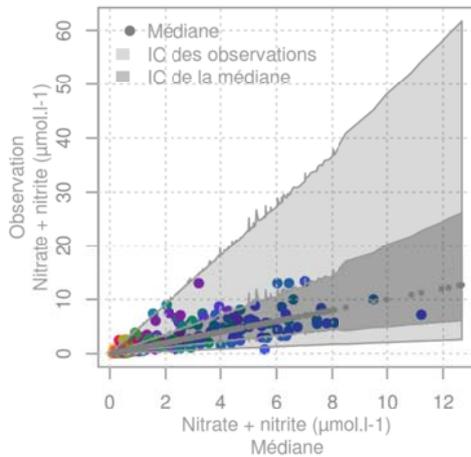


Variance d'observation et incertitude

La valeur de la variance d'observation est de $0.52 \text{ (log } \mu\text{mol/L)}^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -34 % et 279 % de la médiane.



Il faut noter que si les concentrations les plus faibles s'inscrivent de manière homogène dans le triangle de l'intervalle de confiance des observations (cf. ci-dessous), les valeurs les plus élevées sont plus resserrées autour de l'intervalle de confiance de la médiane des concentrations.



Teychan bis

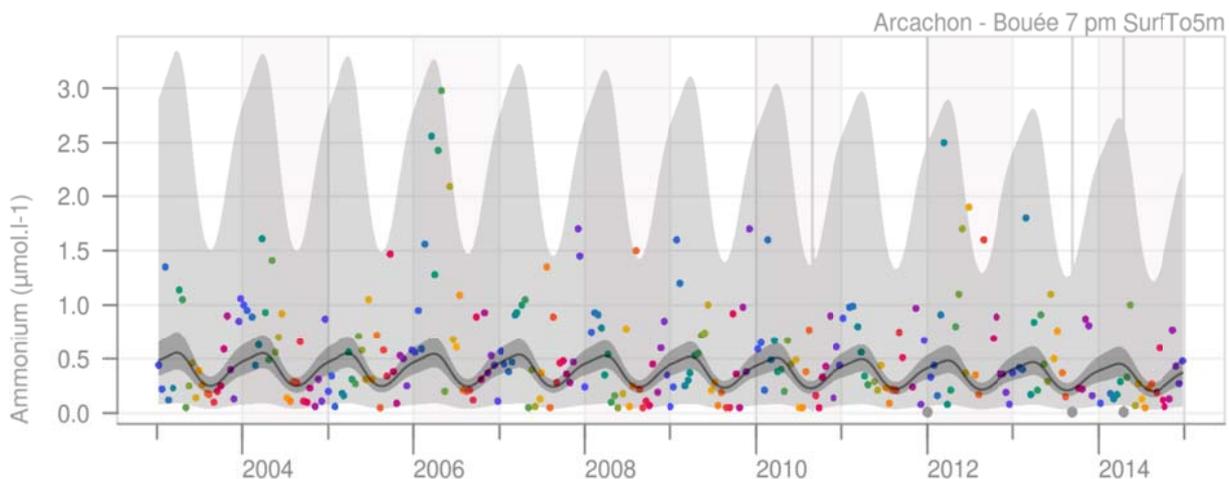
Les modèles obtenus souffrent d'un défaut d'optimisation qui ne les rendent pas exploitables. Spécifiquement, la procédure a abouti à un optimum local présentant une variance d'observation surestimée ce que ce traduit par des erreurs standardisées très proches de 0, non-compatibles avec l'hypothèse d'une loi normale centrée-réduite, et induisant un modèle sur-adaptatif.

3.6 CONCENTRATION EN AMMONIUM

Arcachon - Bouée 7

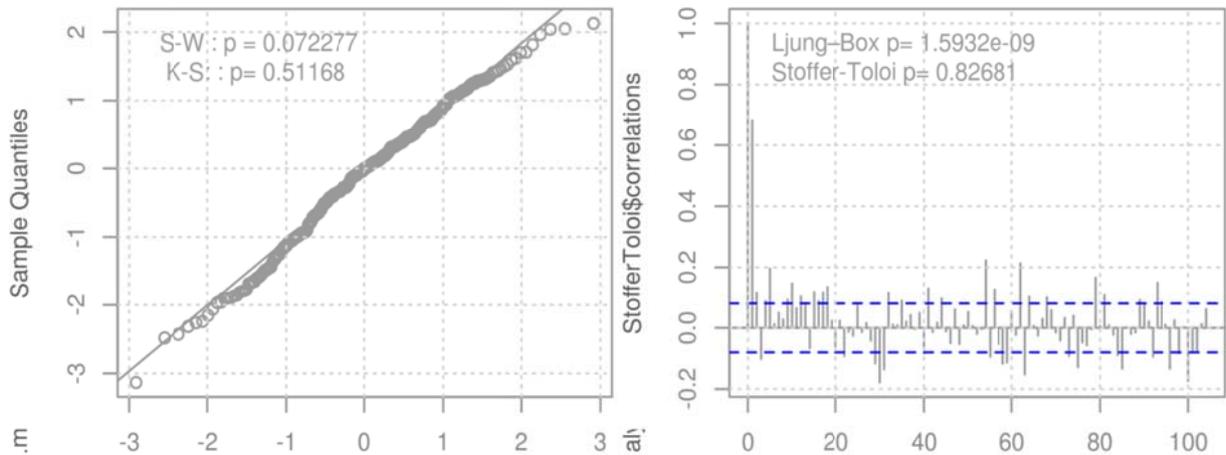
Modèles

Le premier modèle suggère 4 valeurs exceptionnelles au 02/09/2010, 03/01/2012, 13/09/2013 et 22/04/2014. Une fois ces valeurs traitées comme exceptionnelles, le modèle résultant présente une vraisemblance significativement plus grande et aucune suggestion de changement de niveau ou d'*outlier*. D'autres essais ont été tentés au regard des éléments diagnostiques sans aboutir à de meilleurs résultats.

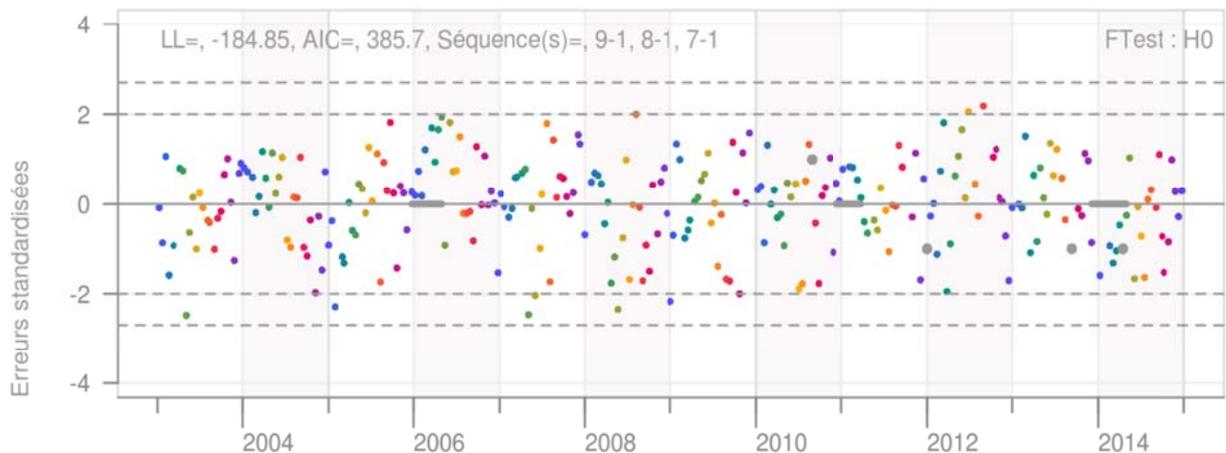


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

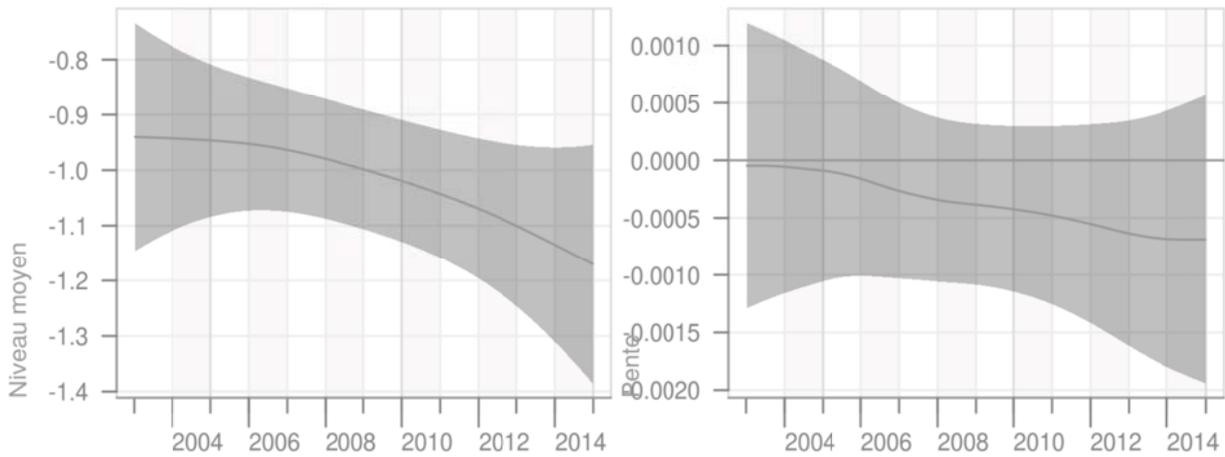


Il y a 3 séquences d'erreurs standardisées de même signe. La première en 2006 montre une augmentation très importante des concentrations de février à mai, et un retour à la « normale » début août. La seconde séquence se situe du 13/12/2010 au 28/03/2011, soit l'hiver 2010-2011 pendant lequel les concentrations sont certes élevées, mais sans excès. Finalement les 8 concentrations du 10/12/2013 au 06/05/2014 génèrent une séquence d'erreurs standardisées négatives convexe en opposition à une saisonnalité concave sur cette période. Par ailleurs, toutes ces mesures sont identifiées comme inférieures à la limite de quantification.



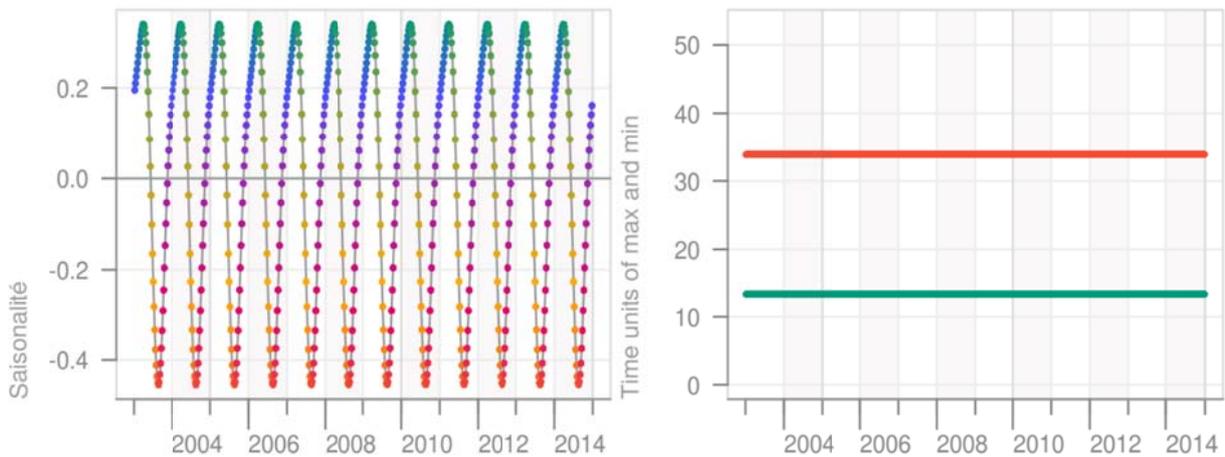
Tendance

Le niveau moyen apparaît décroissant, la pente négative et non-significativement différente de 0.



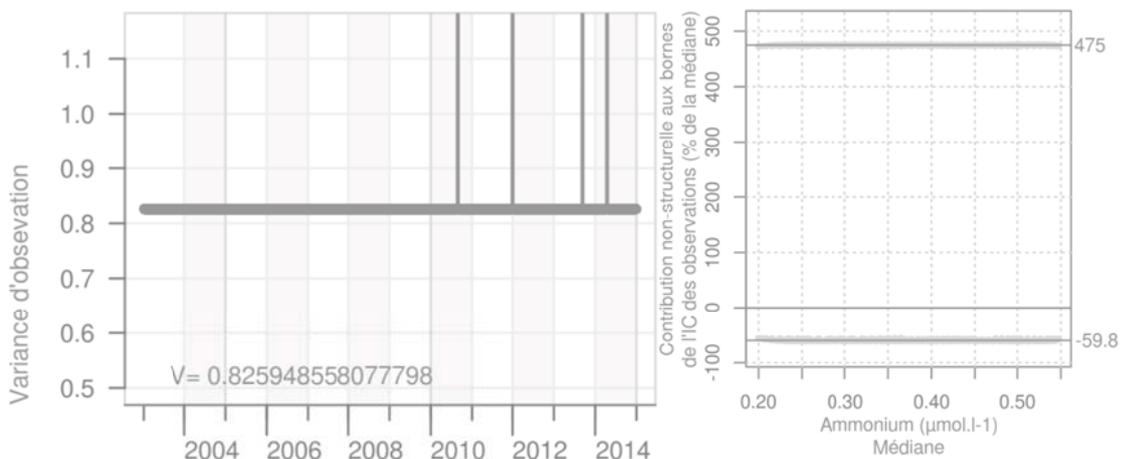
Saisonnalité

La saisonnalité est constante dans ces amplitudes et dans le positionnement des maxima et minima.

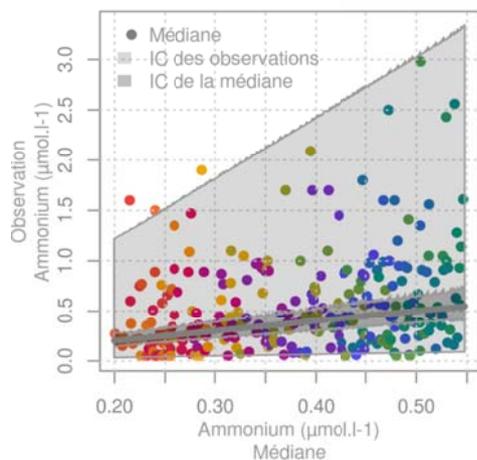


Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de $0.83 (\log \mu\text{mol/L})^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -60 % et 475 % de la médiane.

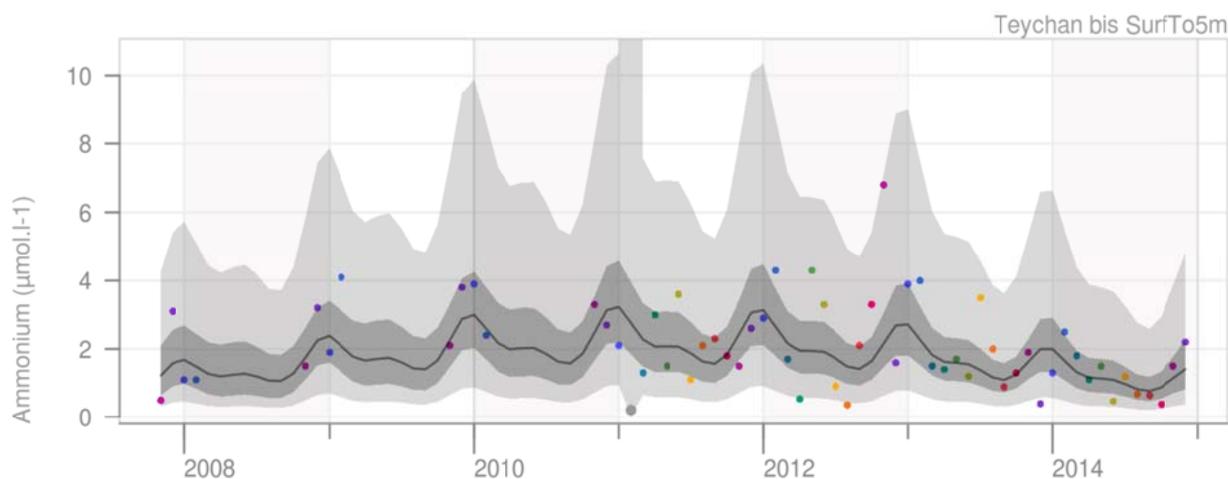


L'homogénéité de la répartition des observations dans le trapèze de l'intervalle de confiance est satisfaisante.



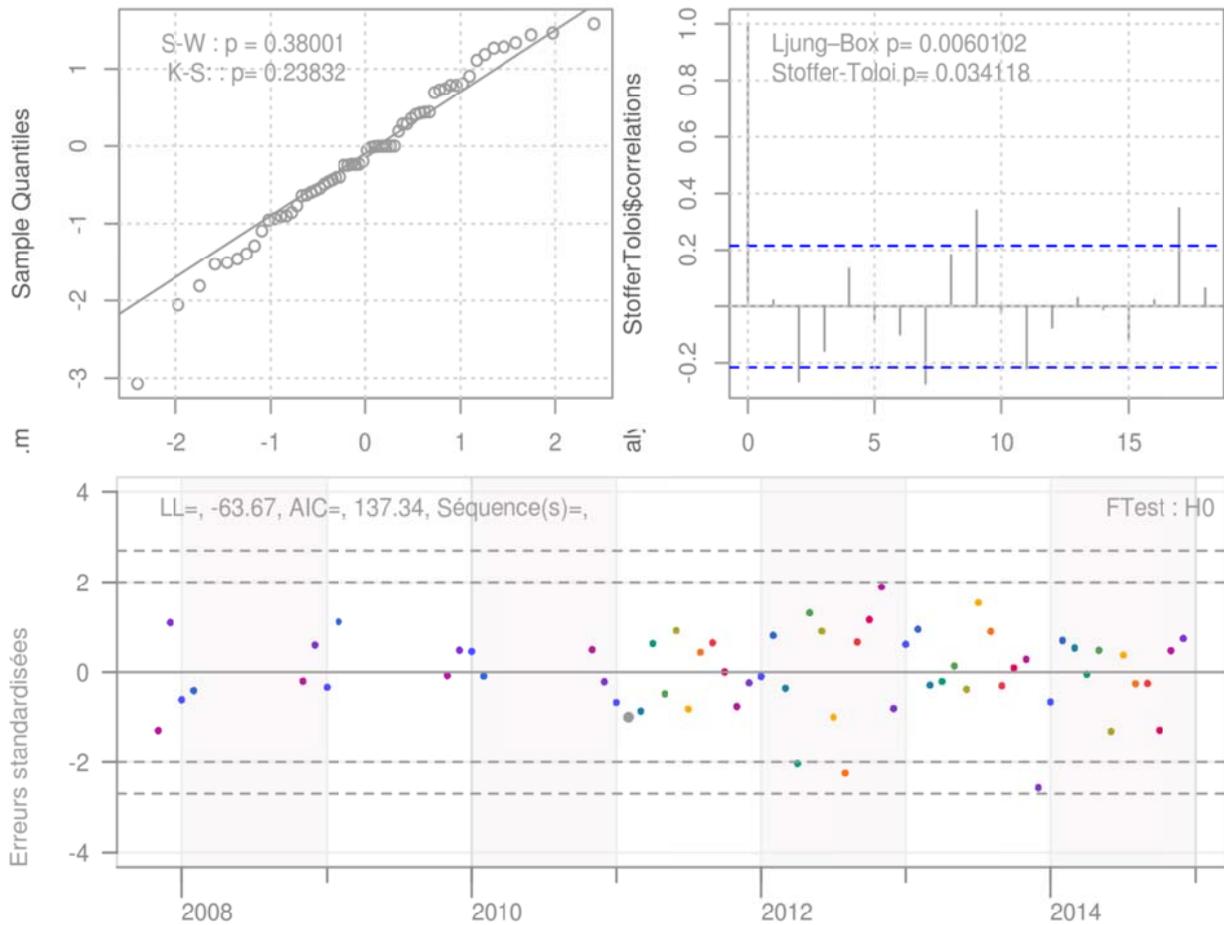
Teychan bis Modèles

Le premier modèle identifie la valeur du 11/02/2011 comme exceptionnelle : c'est la plus faible de la série et elle est identifiée comme inférieure à la limite de quantification. Son traitement comme *outlier* conduit à un gain significatif de vraisemblance. Les éléments diagnostiques de ce dernier modèle ne suggèrent pas d'autres changements.



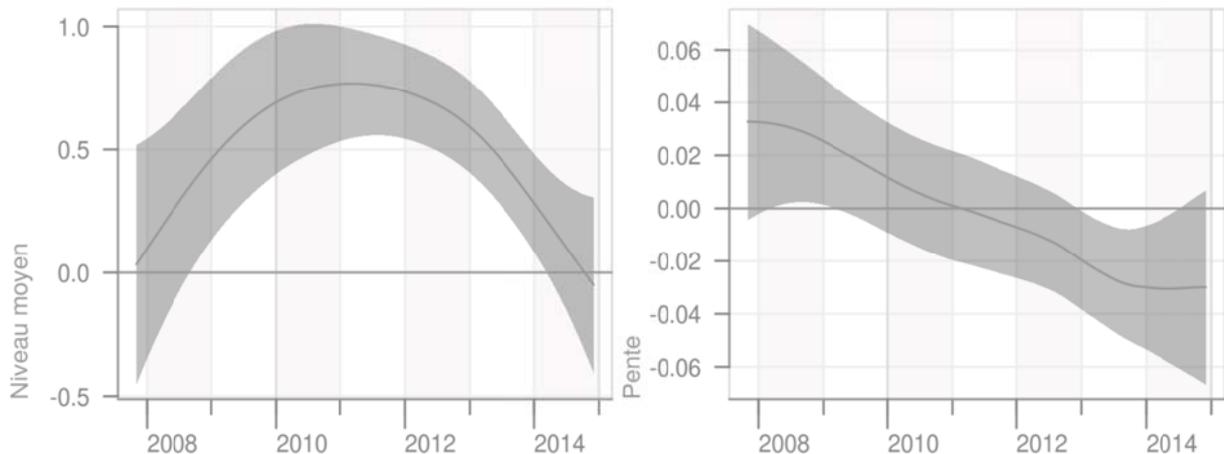
Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens, non-indépendants et sans séquence d'erreurs de même signe.



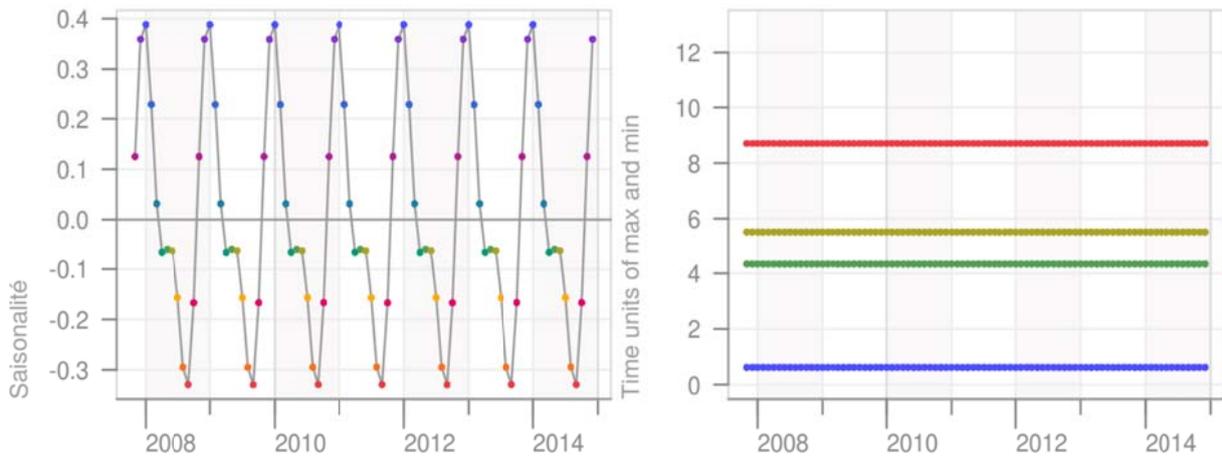
Tendance

La fréquence d'échantillonnage plus faible en début de série induit un écart type plus important. La pente initialement positive entraîne une augmentation du niveau moyen. Par la suite, elle devient négative au début de 2011 et significativement différente de 0 durant 2013, soit une diminution significative du niveau moyen entre début 2011 et fin 2014.



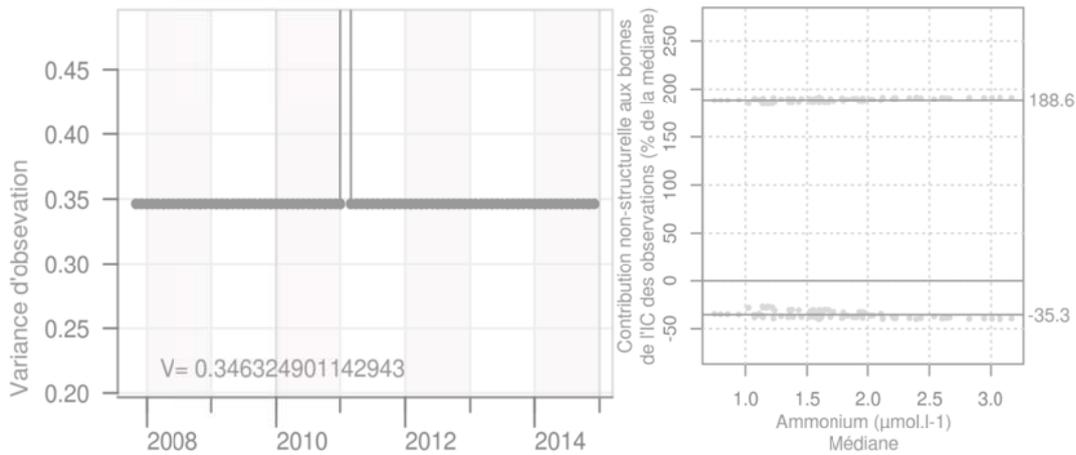
Saisonnalité

Le cycle saisonnier est constant avec un maximum en hiver et un minimum en septembre. Au printemps, la diminution de la concentration marque une pause.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation estimée est de 0.35 (log $\mu\text{mol/L}$)². La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -35 % et 189 % de la médiane.

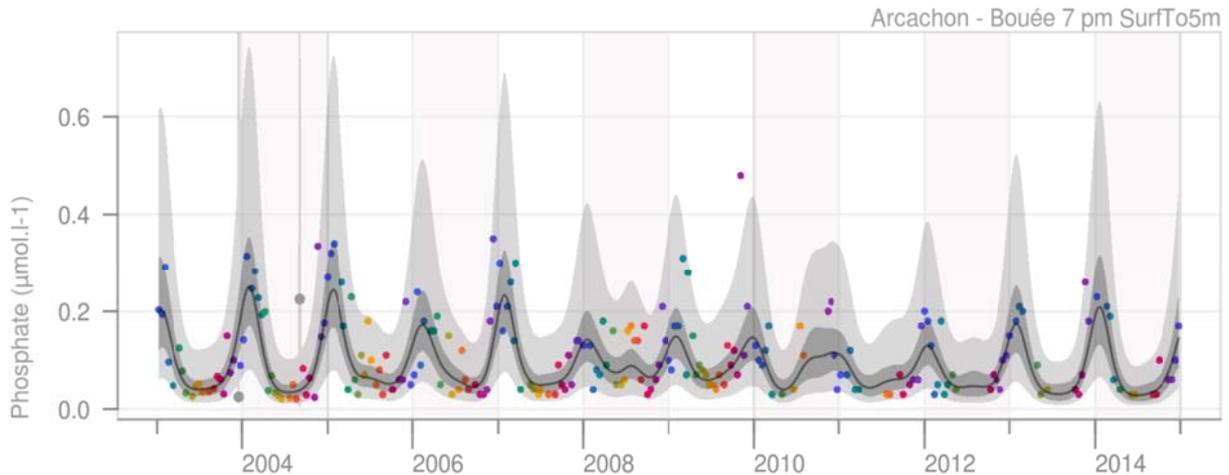


3.7 CONCENTRATION EN PHOSPHATE

Arcachon - Bouée 7

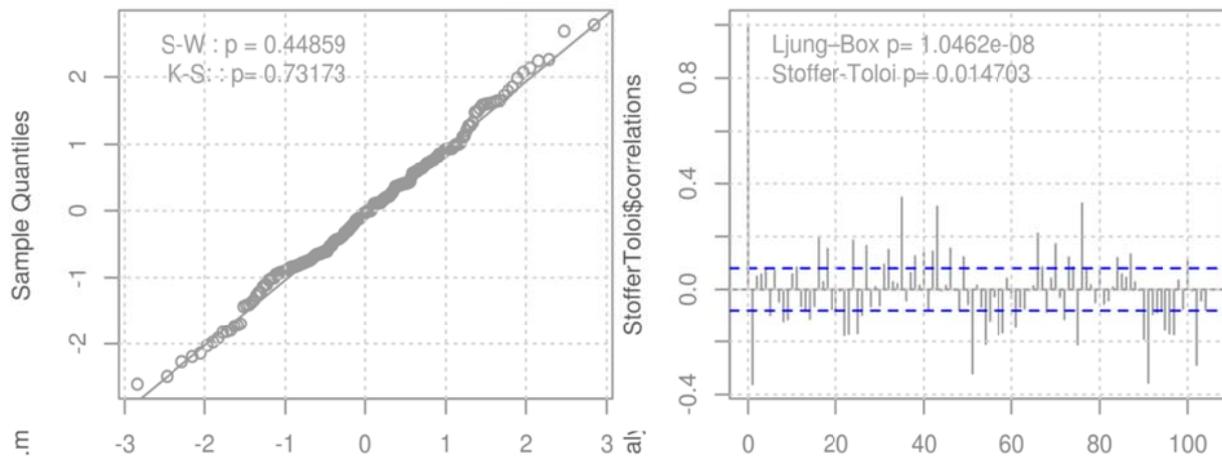
Modèles

L'approche identifie et traite successivement deux valeurs exceptionnelles, fin 2003 puis à l'été 2004. Dans les deux cas le gain de vraisemblance est significatif. Aucun autre changement n'est suggéré et les éléments diagnostiques ne motivent pas d'autres interventions.

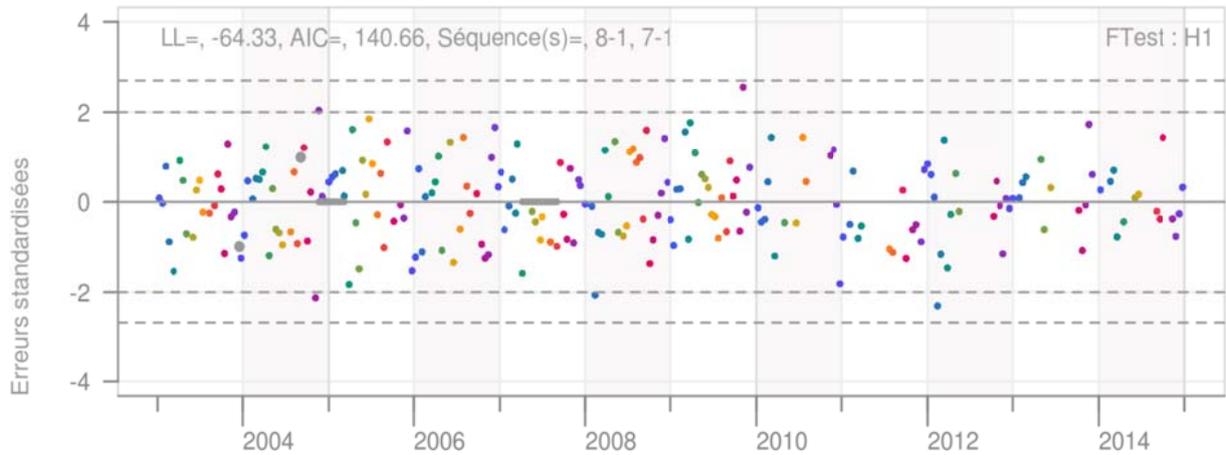


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens mais pas indépendants.

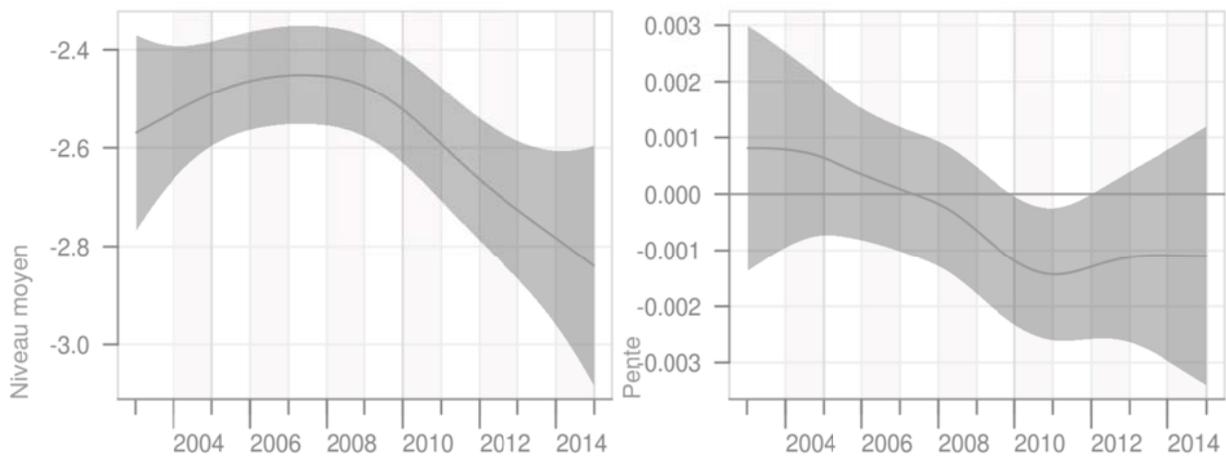


Deux séquences d'erreurs standardisées de même signe de faible amplitude ne motivent pas d'intervention.



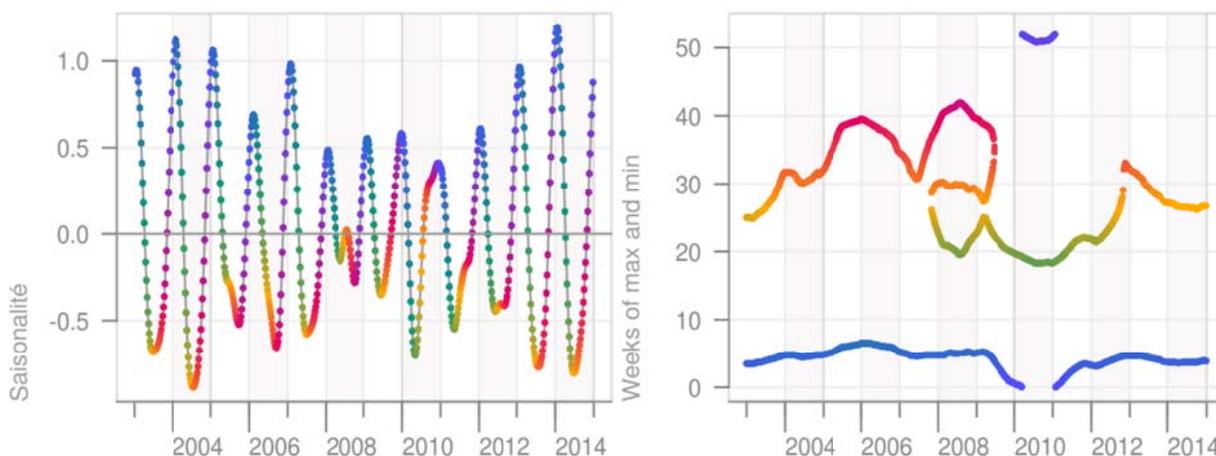
Tendance

La pente positive au début de la série induit un accroissement non significatif. La pente devient négative au milieu de 2007 et significativement différente de 0 de fin 2009 à fin 2011, soit une diminution significative de la concentration entre mi-2007 et fin 2014. La fréquence d'échantillonnage plus faible en fin de série induit des écart-types plus importants.



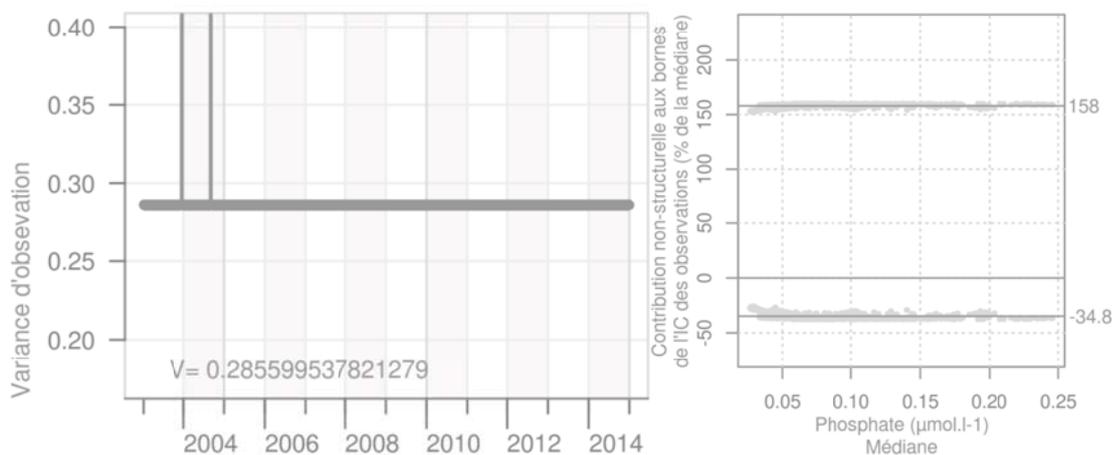
Saisonnalité

Le maximum de concentration est toujours observé en hiver avec des amplitudes variables, en particulier moins prononcées entre 2008 et 2012. Pendant cette même période les minimums atteints sont plus élevés, sauf en 2010. La date à laquelle le minimum a été atteint a beaucoup varié : partant de la 25^e semaine (*i.e.* mi-juin), elle recule jusque fin septembre début octobre en 2006, puis devient plus précoce jusqu'à mi-mai en 2008. Cette année est singulière en ce que la concentration présente un second maximum durant l'été avant d'atteindre son second minimum début octobre. La période de minimum précoce unique persiste de 2009 à 2012, puis la date recule pour revenir entre mi-juin et fin juillet.



Variance d'observation et incertitude

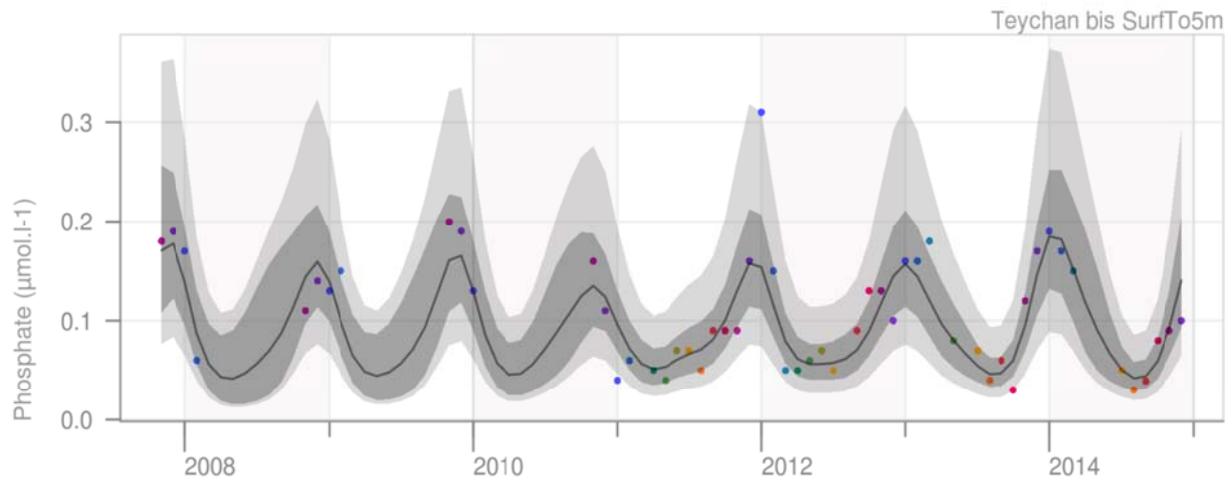
La variance d'observation est de 0.29 ($\log \mu\text{mol/L}$)². La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -35 % et 158 % de la médiane.



Teychan bis

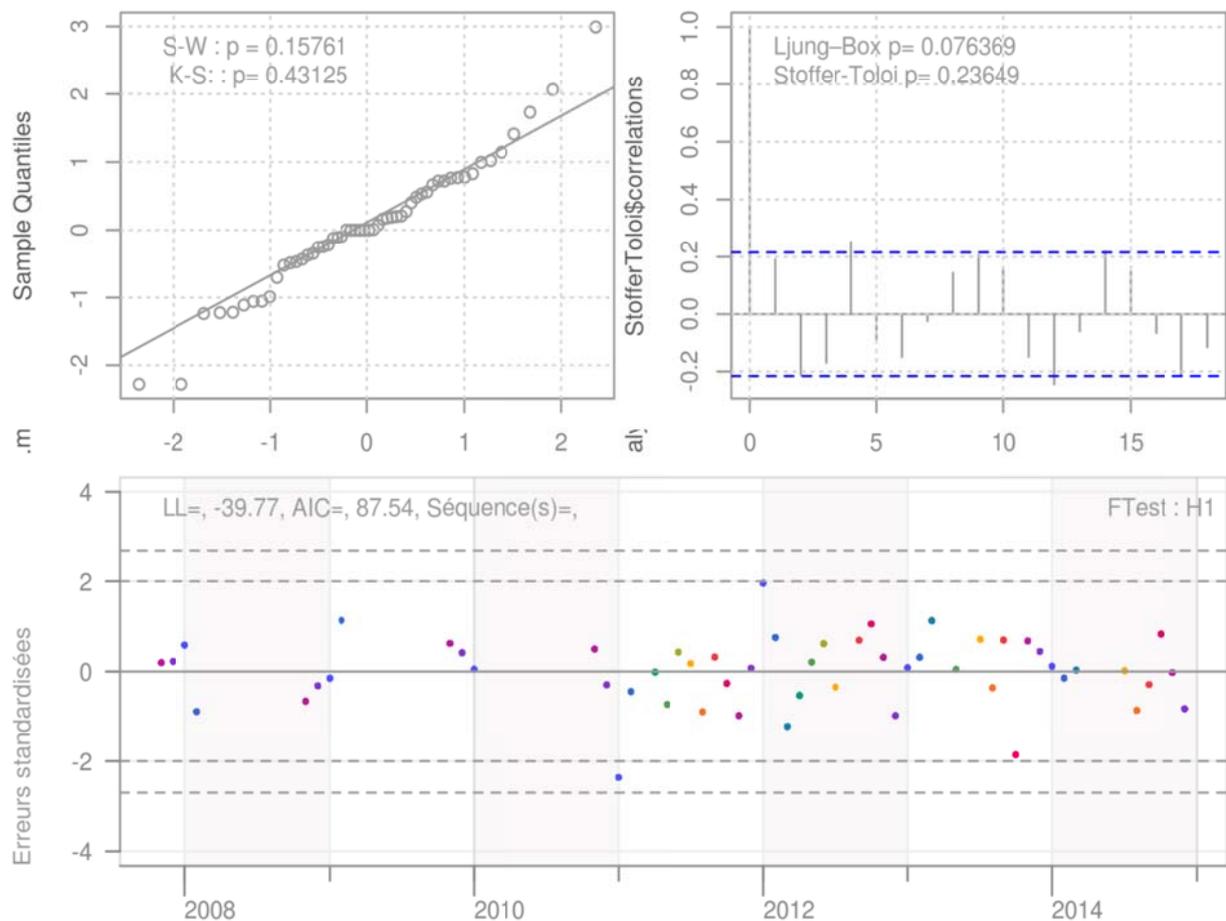
Modèles

Le premier modèle ne suggère ni changement de niveau ni *outlier* ; il n'y a pas d'éléments diagnostiques pour la suggestion d'autres changements.



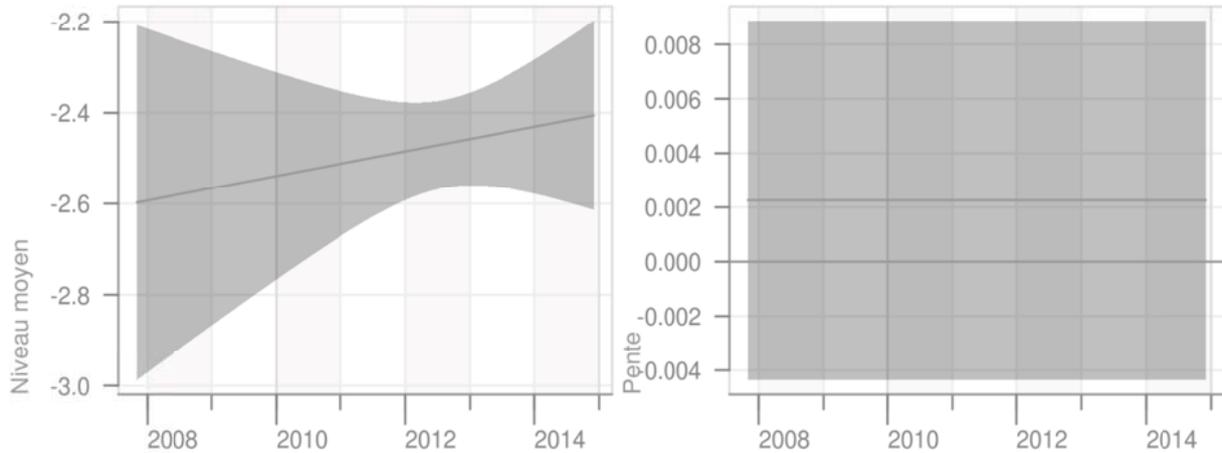
Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants et ne présentent pas de séquence d'erreurs de même signe.



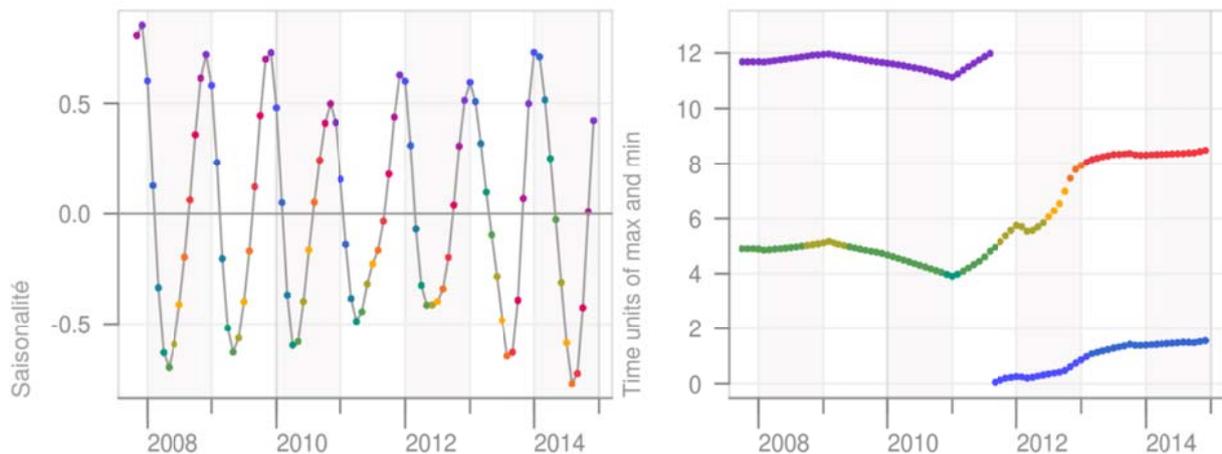
Tendance

La pente est positive mais non significativement différente de 0. Il s'ensuit un niveau moyen croissant mais non significativement différent sur toute la période observée. L'intervalle de confiance est plus important lorsque la fréquence d'échantillonnage est moindre.



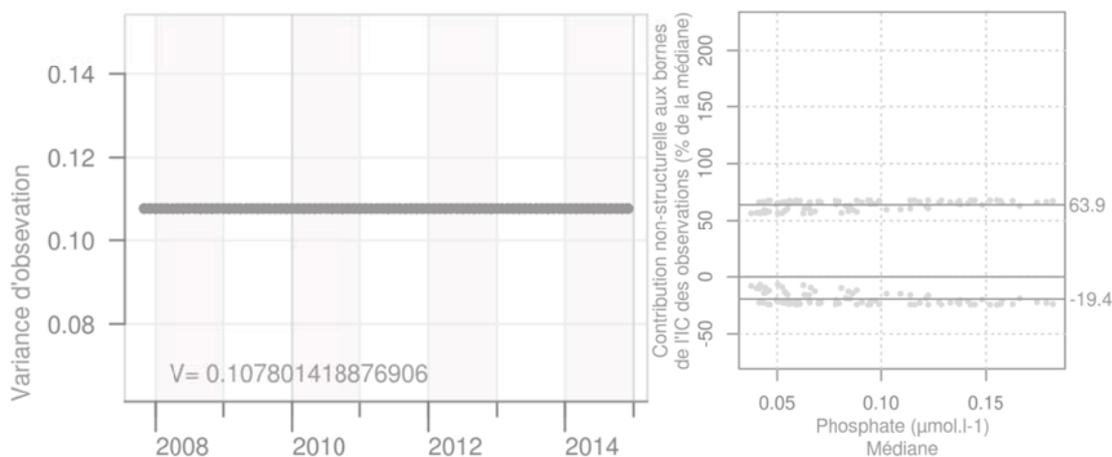
Saisonnalité

Les amplitudes sont variables et moindre de l'automne 2010 à l'automne 2012. Le maximum de concentration est observé pendant l'hiver. Le maximum de concentration initialement atteint fin décembre, glisse en 2014 jusque fin février. Le minimum apparaît en avril-mai jusqu'en 2011, puis il devient plus tardif jusqu'en août pour la fin de la série.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est de $0.11 \text{ (log } \mu\text{mol/L)}^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -19 % et 64 % de la médiane.

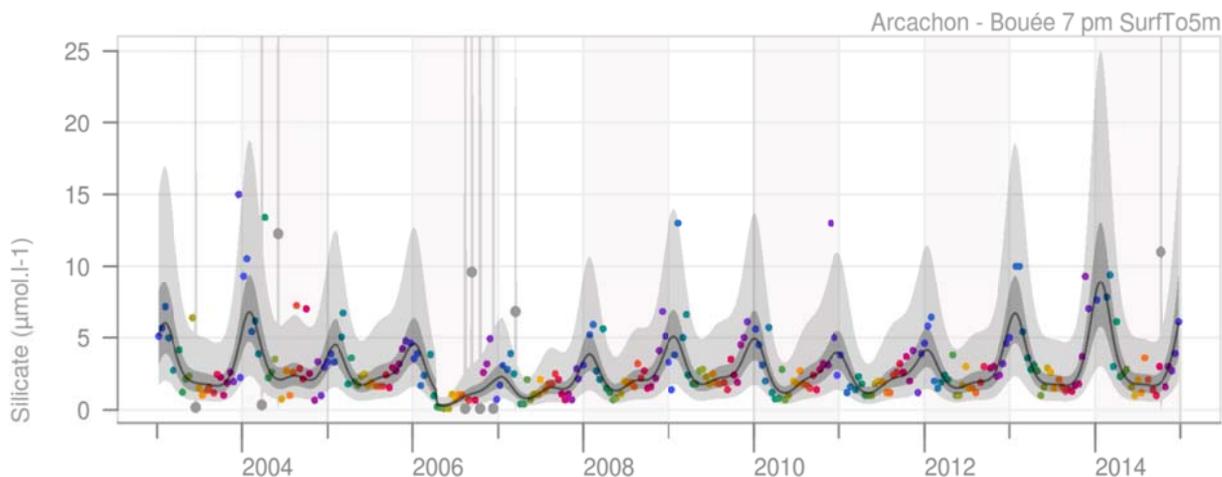


3.8 CONCENTRATION EN SILICATE

Arcachon - Bouée 7

Modèles

Le premier modèle suggère un changement de niveau au printemps 2006 et 6 valeurs exceptionnelles. Le second modèle suggère 2 nouveaux *outliers*, la procédure automatique prend fin avec le troisième modèle.

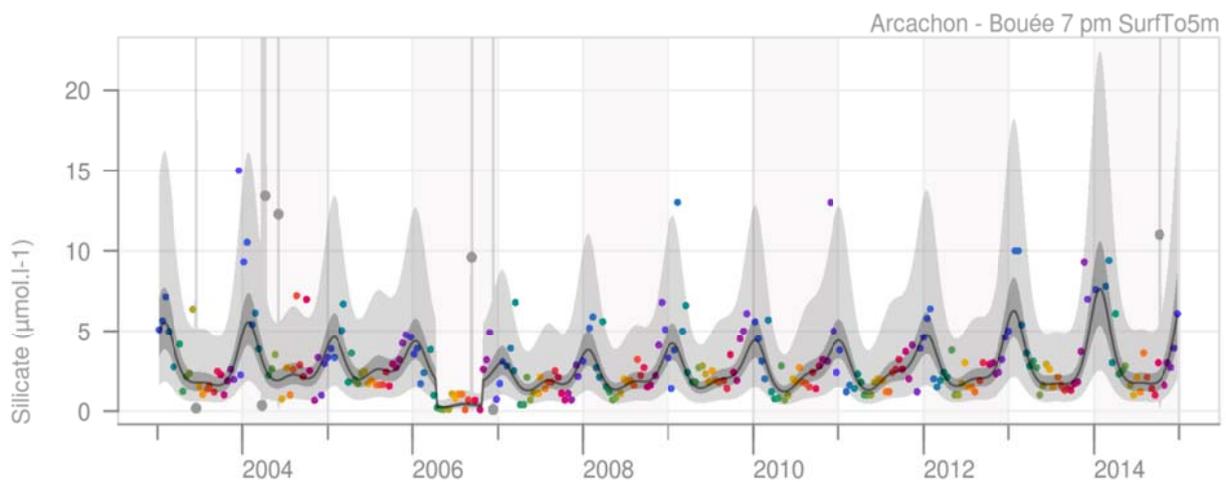


L'examen attentif de la série permet de relever une année 2006 présentant des concentrations particulièrement faibles. Le modèle identifie 3 valeurs faibles comme exceptionnelles, alors que la norme de cette année pourrait être ces concentrations peu élevées. Cette hypothèse est la base d'une expertise « manuelle » :

1. Le premier changement à la diminution de niveau suggéré est conservé seul et induit un gain significatif de vraisemblance. Une date de changement de niveau à l'augmentation est recherchée. La date la plus proche de 2007, présentant une augmentation en log de concentration au moins égale à celle du premier changement de niveau est identifiée : 28/12/2006. Une autre date est également testée au 31/10/2010, où le changement est plus important.

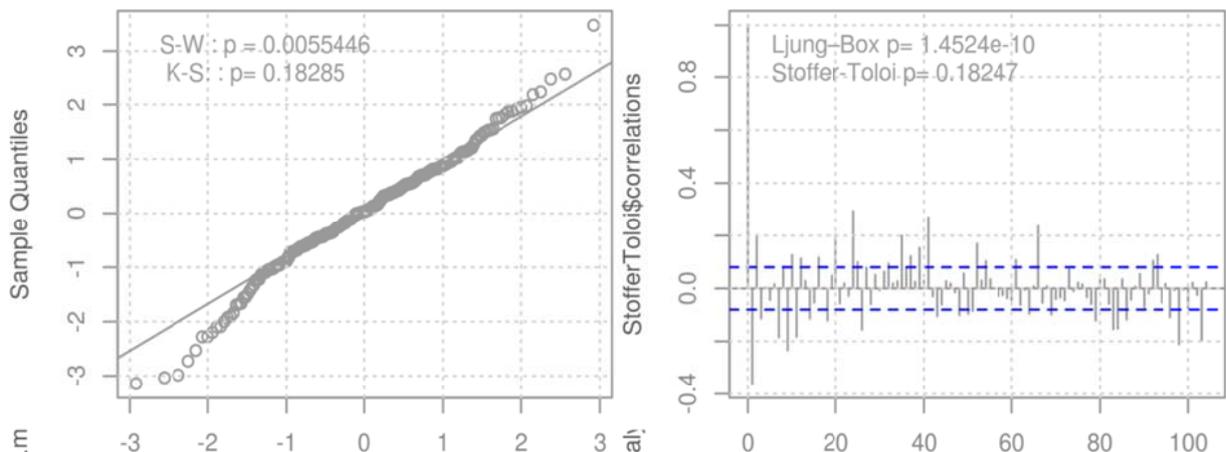
2. Le modèle avec la seconde date est plus vraisemblable et la différence est significative. Cinq valeurs exceptionnelles sont suggérées.
3. Une fois traitées de manière appropriée, le modèle résultant présente un gain de vraisemblance très significatif. Deux nouvelles valeurs exceptionnelles sont identifiées.
4. Le modèle prenant en compte ces dernières suggestions affiche une vraisemblance significativement en augmentation et aucune autre suggestion de changement.

Les vraisemblances de ce dernier modèle (*i.e.* -68.3) et de celui obtenu par le processus automatique (*i.e.* -69.0) ne peuvent pas faire l'objet d'un test statistique de comparaison parce que les deux modèles ne sont pas emboîtés. Néanmoins, le modèle « manuel » ne comporte que 9 paramètres contre 10 pour le premier modèle. De ces éléments, il s'ensuit que le modèle « manuel » possède un critère d'Akaike (cf. p 69) plus petit, le désignant ainsi comme le modèle numériquement préférable, à la fois plus vraisemblable et plus parcimonieux.

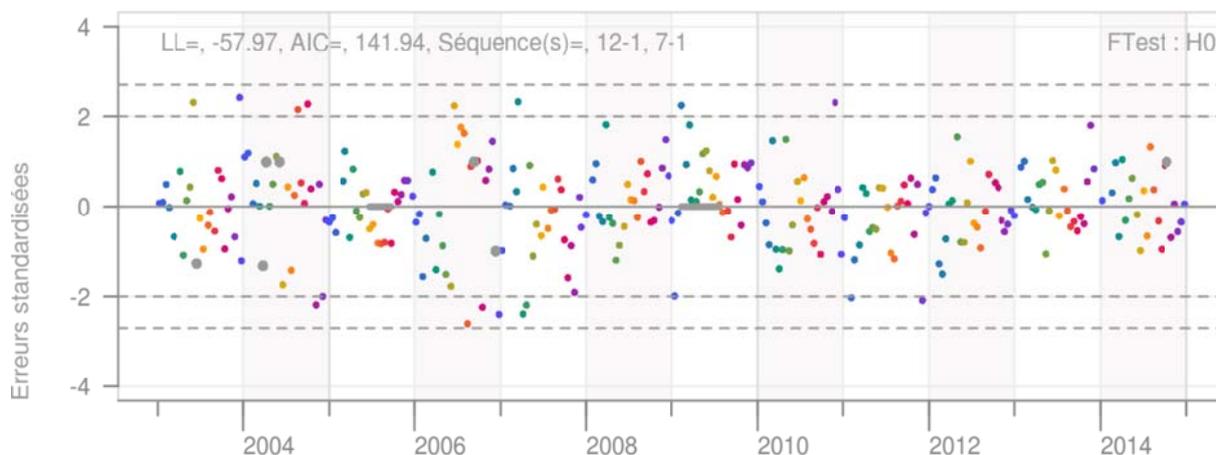


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens et indépendants.

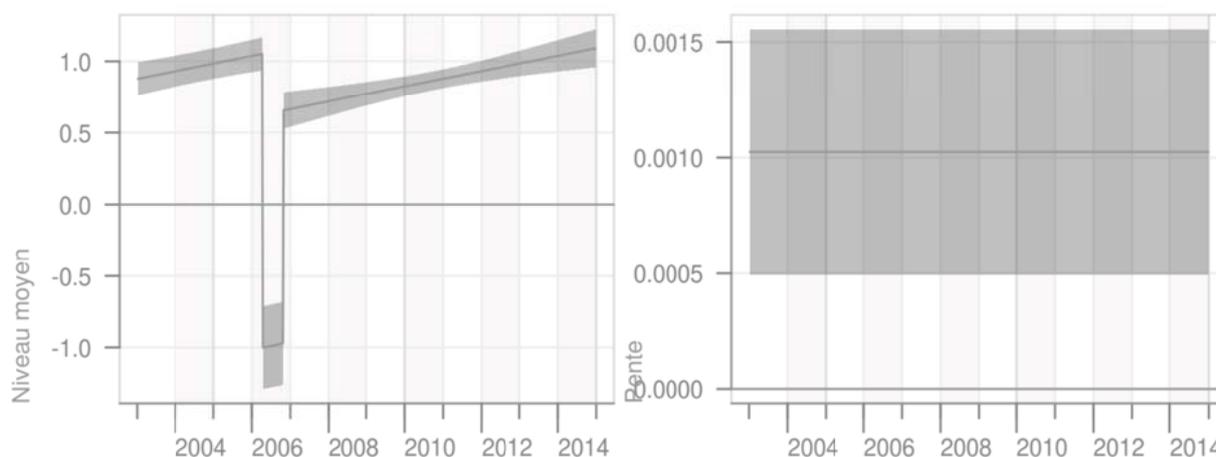


Ils comportent deux séquences d'erreurs de même signe. La plus longue, en 2009 (12 valeurs - environ 6 mois), montre des erreurs sans structure particulière ne permettant pas de justifier de changement de niveau. La seconde, en 2005, montre des erreurs d'amplitude faible. La suggestion d'un changement de niveau à l'entrée de l'automne a été tentée sans aboutir à un modèle plus vraisemblable.



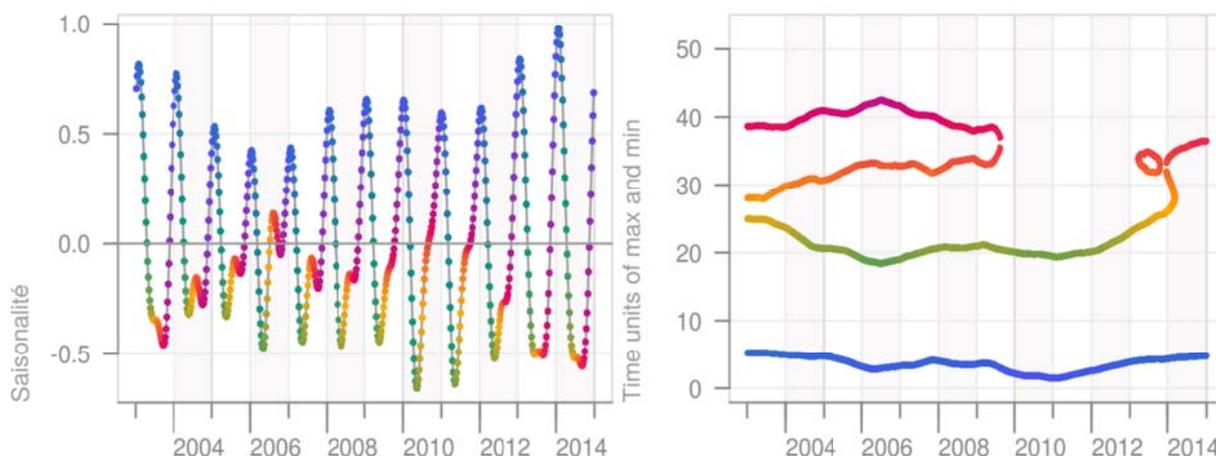
Tendance

La pente est constante, positive et significativement différente de 0. Le niveau moyen est croissant et présente un changement de niveau en 2006.



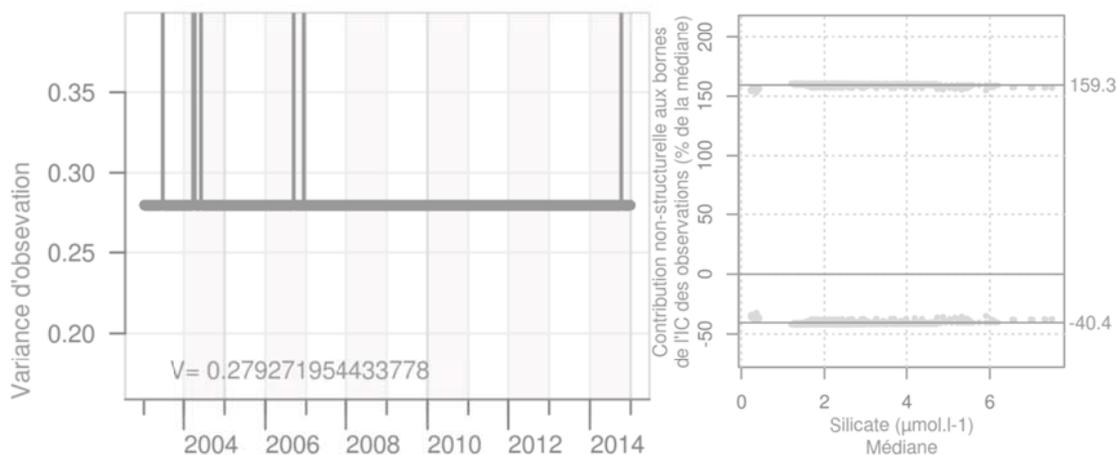
Saisonnalité

Les amplitudes sont variables, plus faibles en particulier entre 2005 et 2007. Les valeurs maximales sont toujours atteintes durant le mois de janvier. Jusqu'en 2009, la saisonnalité apparaît bimodale. La première date de valeur minimum est à la 25^e semaine (*i.e.* mi-juin) au début de la série et glisse autour de la 20^e (mi-mai) jusqu'en 2012, après quoi elle devient plus tardive, jusqu'à fin-août (*i.e.* 35^e semaine). Ce recul lors des deux dernières années résulte en fait d'une décroissance lente entre le printemps et la fin de l'été, la plus grande décroissance de concentration restant pendant le printemps. Avant 2009, le second minimum est toujours atteint fin septembre début octobre. Le maximum intermédiaire est devenu plus tardif, glissant de fin juillet à fin août.



Variance d'observation et incertitude

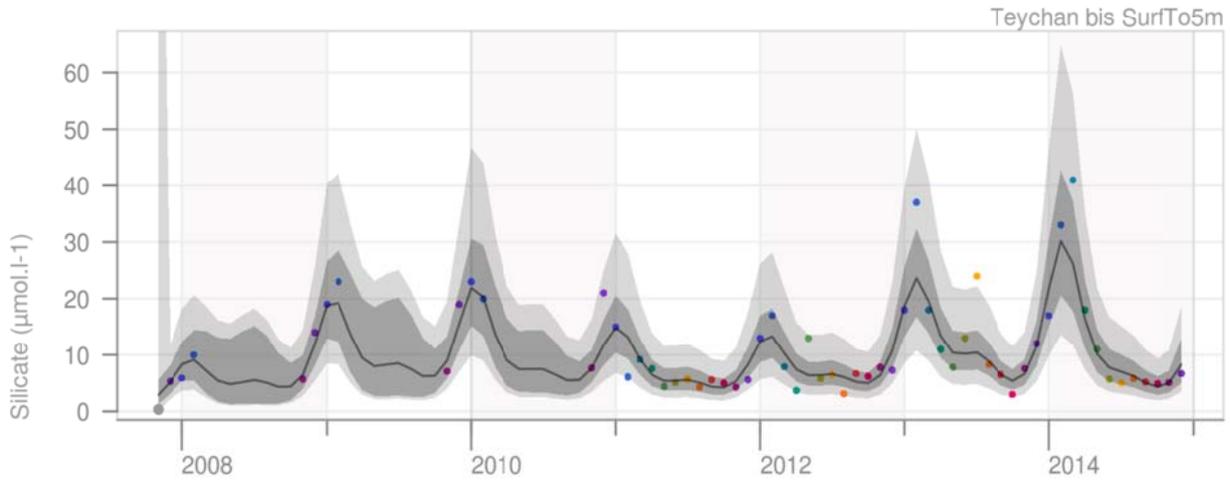
La variance d'observation estimée est de 0.28 ($\log \mu\text{mol/L}$)². La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -40 % et 159 % de la médiane.



Teychan bis

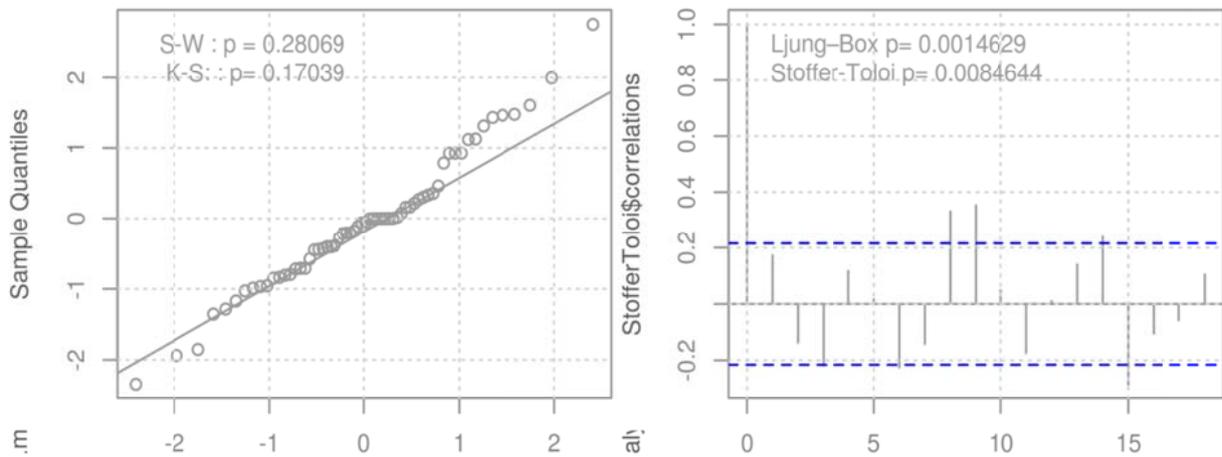
Modèles

Le premier modèle identifie un changement de niveau en début de série. Le processus automatique le place à la seconde observation. L'examen des mesures révèle que la première valeur (i.e 0.36) est la plus faible de la série et est de l'ordre de 10 fois plus petite que la seconde plus petite valeur. Par voie de conséquence un traitement alternatif consiste à suggérer et traiter cette mesure comme exceptionnelle. Le modèle résultant présente les mêmes évolutions et résultats à 10^{-4} près que le modèle avec changement de niveau, à l'évolution du niveau près. Ce modèle ne suggère pas de changement de niveau ou de valeur exceptionnelle.

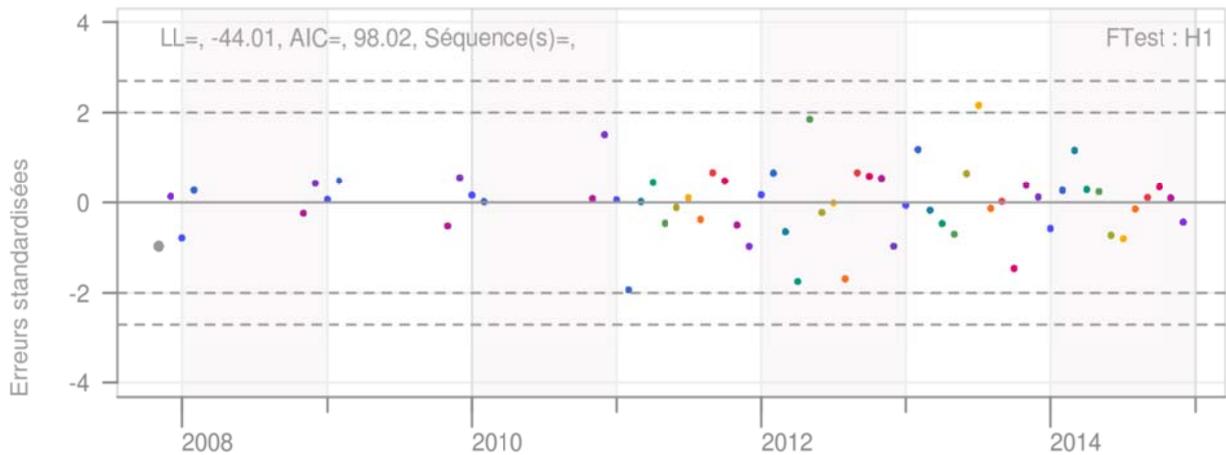


Diagnostic

Les résidus standardisés apparaissent gaussiens mais pas indépendants.



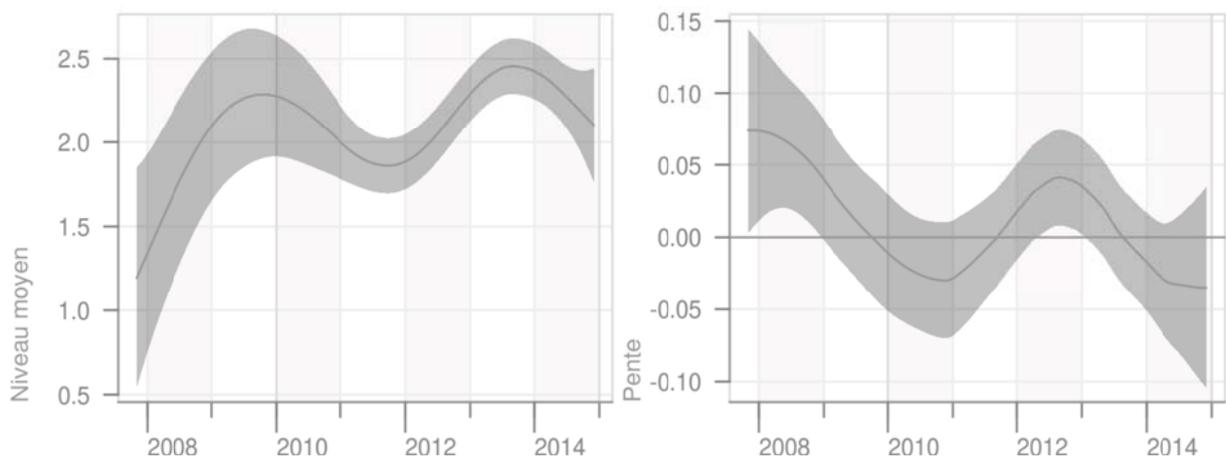
Ils ne montrent pas de séquence d'erreur de même signe.



Lorsque précédemment le test de Stoffer-Toloi s'est avéré significatif, c'est-à-dire conduisant au rejet de l'absence d'autocorrélation, les séries concernées présentaient un grand nombre de données, des autocorrélations faibles et ne présentant pas de cycle particulier. Dans ce cas, la puissance conférée par le nombre de données peut conduire à la mise en évidence par le test d'un écart très faible à la situation d'indépendance. Il s'ensuit que l'importance accordée au résultat du test est moindre. En revanche dans la situation présente, le nombre de données (*i.e.* 62) est plus réduit et le rejet de la situation d'indépendance par le test de Stoffer-Toloi constitue une alerte quant à la validité du modèle, en dépit d'autocorrélations très souvent inférieures aux valeurs critiques telles que définies par Hyndman et Athanasopoulos (2013a).

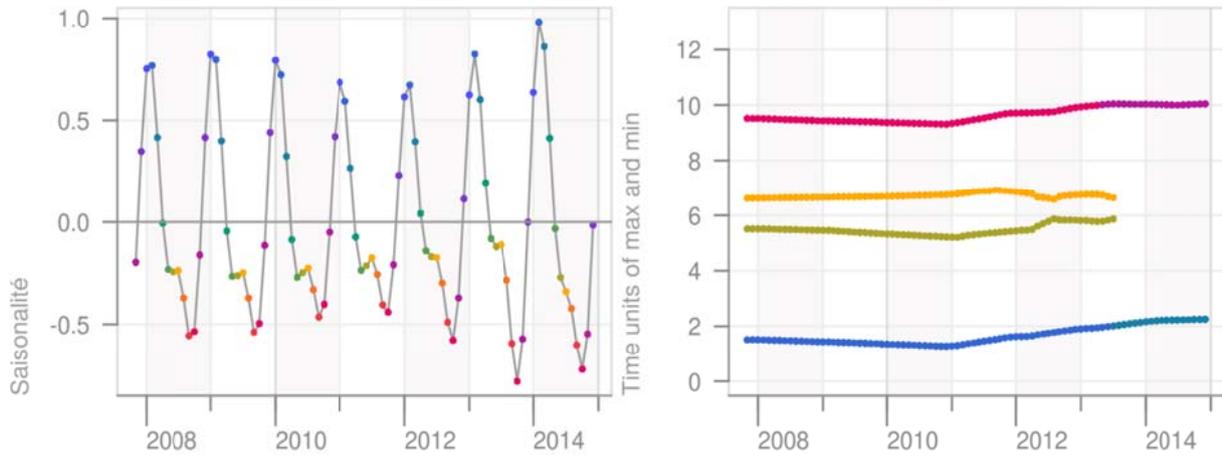
Tendance

La pente présente des variations et des alternances de signe. Elle est significativement différente de 0 et positive en 2008 et 2012. Globalement, le niveau moyen a augmenté sur la période considérée. Son intervalle de confiance est plus important en début de série pendant la période où la fréquence d'échantillonnage est plus faible.



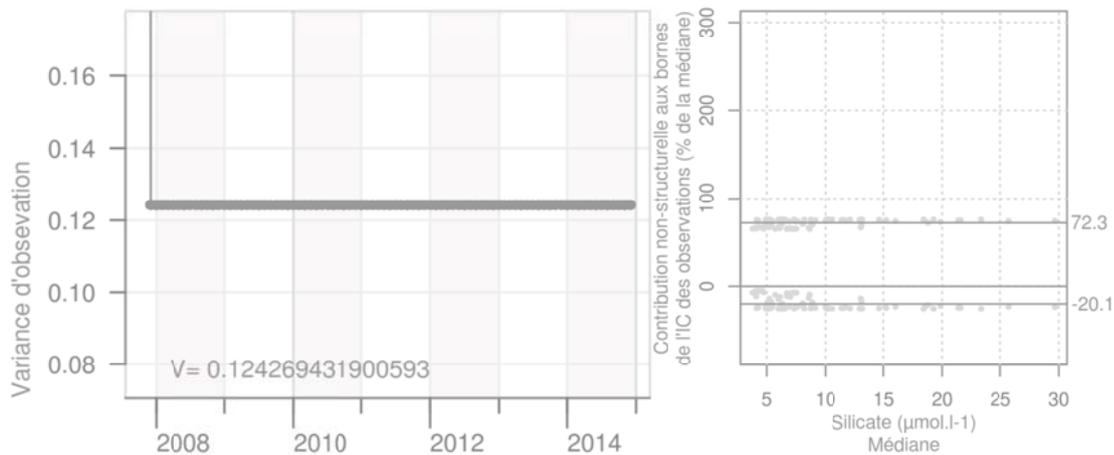
Saisonnalité

L'amplitude a présenté des variations faibles, en augmentation à la fin de la série. Le minimum est toujours atteint au mois de février, le minimum fin septembre à début octobre. Jusqu'en 2011, un minimum et un maximum intermédiaires sont observés, respectivement en juin et en juillet jusqu'au milieu de 2013.



Variance d'observation et incertitude

La variance d'observation est estimée à $0.12 \text{ (log } \mu\text{mol/L)}^2$. La contribution non-structurale aux bornes de l'intervalle de confiance des observations est en moyenne de -20 % et 72 % de la médiane.



3.9 SYNTHÈSE CONCERNANT LES VARIANCES D'OBSERVATION

La table 2 rassemble les estimations des variances d'observation des paramètres ainsi que leurs contributions non structurelles aux bornes des intervalles de confiance.

Table 2: Estimations des variances d'observation et contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance.

		Arcachon-Bouée 7	Teychan bis
Température	Variance	1.05 °C ²	1.12 °C ²
	Contribution	± 1.35 °C	± 1.41 °C
Turbidité	Variance	0.37 (log FNU) ²	0.22 (log FNU) ²
	Contribution	– 53 %, 214 %	– 43 %, 133 %
Matière en suspension	Variance	0.20 (log mg/L) ²	non mesuré
	Contribution	– 38 %, 120 %	
Concentration en oxygène dissous	Variance	0.05 (mg/L) ²	0.05 (mg/L) ²
	Contribution	± 0.26 mg/L	± 0.31 mg/L
NO ₃ ⁻ +NO ₂ ⁻	Variance	0.52 (log µmol/L) ²	défaut d'optimisation
	Contribution	– 34 %, 279 %	
NH ₄ ⁻	Variance	0.83 (log µmol/L) ²	0.35 (log µmol/L) ²
	Contribution	– 60 %, 475 %	– 35 %, 189 %
PO ₄ ³⁻	Variance	0.29 (log µmol/L) ²	0.11 (log µmol/L) ²
	Contribution	– 35 %, 158 %	– 19 %, 64 %
Si(OH) ₄	Variance	0.28 (log µmol/L) ²	0.12 (log µmol/L) ²
	Contribution	– 40 %, 159 %	– 20 %, 72 %

4. DISCUSSION

Température

Les modèles obtenus sur les deux sites sont très similaires. Ils présentent des pentes positives mais non significativement différentes de 0, induisant des niveaux moyens croissants mais ne permettant pas de conclure à une augmentation de la température. Le facteur saisonnier montre dans les deux cas un hiver 2006-2007 particulièrement doux et un été 2007 moins chaud que ceux des autres années de la période considérée. Ce schéma est compatible avec le bilan de Météo France pour l'année 2007^e. Par ailleurs, l'été 2003, caractérisé par une canicule européenne de juin à août, est également identifiée comme année particulièrement chaude.

Les variances d'observation, 1.05 °C² et 1.12 °C², sont du même ordre de grandeur, de même que les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance : ± 1.35 °C et ± 1.41 °C. C'est à la fois peu, relativement aux variabilités constatées pour la presque totalité des autres variables, et beaucoup pour une mesure très maîtrisée techniquement. Mais la variance d'observation ne témoigne pas seulement de la variabilité de mesure. Elle intègre des éléments contextuels, par exemple l'heure de mesure (*e.g.* matin ou après midi), les spécificités météorologiques de la journée de la mesure dans la semaine, de cette semaine dans le mois, etc. Ainsi, pour une semaine donnée dans l'année, il s'agit donc bien de l'intégration des variabilités de cette semaine dans l'année standard à travers les années particulières. Ceci est vrai pour tous les paramètres.

e. <http://www.meteofrance.fr/climat-passe-et-futur/bilans-climatiques/bilan-2007/bilan-de-lannee-2007>

Turbidité

Pour les deux lieux, la pente du niveau moyen est positive, significativement différente de 0 à « Teychan bis » et très proche de cette significativité à « Arcachon-Bouée 7 ». À « Teychan bis », le changement de méthode suggéré intervient à l'issue d'une période d'utilisation alternée de deux méthodes différentes. En dépit de la transformation de variable appliquée pour uniformiser les unités de mesures, il est visible que les niveaux médians des deux méthodes ne sont pas les mêmes. Il s'ensuit que la comparaison des niveaux de turbidité est rendue difficile. Mais, à partir de 2010 la même méthode est utilisée pour les deux lieux, et sur cette période l'évolution et les niveaux médians apparaissent très similaires. À « Arcachon-Bouée 7 », amplitude et phase estimées de la saisonnalité sont constantes au cours du temps. Cette absence d'adaptation du modèle est liée à un ratio signal sur bruit dans lequel la part de bruit est dominante. En revanche à « Teychan bis », les amplitudes sont moindres sur la période 2006-2008, et maxima et minima ont été plus tardifs. D'une part, la singularité de l'année 2007, avec un premier semestre exceptionnellement chaud et un second semestre en dessous des normales saisonnières et très pluvieux a déjà été relevé. Ce point pose la question d'un caractère artificiel du mouvement phénologique relevé sur l'ensemble de la période résultant uniquement d'une adaptation du modèle à la particularité de l'année 2007. D'autre part, cette année est également celle à la charnière des prélèvements à -3 mètres et en sub-surface.

Une grande part de la variabilité est liée à l'observation. Cela se traduit par des contributions non-structurelles importantes sur les deux lieux de surveillance. Elles sont notablement plus grandes à « Arcachon-Bouée 7 », située à l'embouchure du bassin. Pour les deux lieux, l'atteinte de la limite de quantification pour des périodes de plusieurs semaines contribue à une sous-estimation des variances d'observation. Elles sont du même ordre de grandeur, mais celle de « Arcachon-Bouée 7 » est plus importante. Ce constat est surprenant au regard du positionnement de ces points de mesure : Bouée 7 situé à la sortie du bassin d'Arcachon sous l'influence des eaux océaniques et Teychan bis situé dans le bassin soumis plus fortement à l'influence des apports anthropiques.

Matières en suspension

Cette mesure est liée à la turbidité sans être redondante avec elle (Jafar-Sidik et al., 2017). Sur « Arcachon-Bouée 7 », seul lieu pour lequel la mesure est disponible, le niveau médian de concentration diminue jusqu'à la fin de 2008 puis augmente jusqu'à atteindre un plateau en 2011. Cette augmentation est cohérente avec la pente positive de la turbidité observée sur ce même lieu. D'un point de vue phénologique, les amplitudes saisonnières sont plus réduites sur 2007-2010. En revanche, les maxima et minima sont plus précoces et les années 2008 à 2009 en particulier, et ont présenté des maxima estivaux intermédiaires.

Les contributions non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont plus petites que celles de la turbidité.

Pour ces paramètres, turbidité et matières en suspension, il faut noter qu'ils sont très sensibles aux phénomènes météorologiques ponctuels (*e.g.* coups de vent, précipitations). Les opérations de prélèvements ne peuvent techniquement être effectuées si les conditions météorologiques sont mauvaises. Par ailleurs, la fréquence d'échantillonnage n'est pas à même de capturer les événements transitoires. Ainsi, ces contraintes techniques et le plan d'échantillonnage sont susceptibles d'affecter l'identification des valeurs exceptionnelles et l'estimation des niveaux médians, sans doute plus que pour les autres variables.

Concentration en oxygène dissous

Le fait le plus remarquable concernant les tendances de cette variable est l'identification d'un décrochement des médianes de mi-2010 à mi-2011. L'hypothèse la plus vraisemblable est celle d'un problème de calibration de sonde. Cette singularité pose la question de la significativité de la différence de niveau médian avant et après cet événement, la pente étant continûment non significativement différente de 0 sur toute la période. Il en va de même en ce qui concerne l'estimation des paramètres saisonniers.

Cette variable apparaît comme peu bruitée relativement aux variables déjà examinées. La variance structurelle (*i.e.* tendance+saisonnalité) et la variance d'observation montrent des amplitudes similaires. Les variances d'observation sur les deux lieux sont égales à 10^{-2} près. Lorsque ces variations sont traduites en contributions non-structurelles à l'intervalle de confiance des observations, « Teychan bis » apparaît un peu plus variable.

Concentration en (nitrate+nitrite)

Les résultats concernent uniquement « Arcachon-Bouée 7 ». Les niveau moyen, pente, amplitude et phase de la saisonnalité présentent des changements sur toute la période. Relativement aux commentaires précédents, en 2008-2010 les concentrations ont été moindres et les amplitudes saisonnières importantes.

La variance d'observation et les contributions à l'intervalle de confiance des observations sont importantes. Par ailleurs, sur le graphique des observations en fonction des médianes de leurs distributions, les concentrations les plus faibles s'inscrivent de manière homogène dans le triangle de l'intervalle de confiance des observations (*cf.* p 35), mais les valeurs les plus élevées sont plus resserrées autour de l'intervalle de confiance de la médiane des concentrations. Ceci peut être le symptôme d'une relation moyenne-variance impliquant, en première analyse, une variance plus réduite (proportionnellement) pour les concentrations élevées. Mais, attendu que d'un point de vue méthodologie de mesure, ce sont les valeurs proches de la limite de quantification qui présentent une variabilité importante, le diagnostic est sans doute celui de valeurs faibles présentant une variabilité élevée.

Concentration en ammonium

La pente diminue sur les deux lieux, continûment négative à « Arcachon-Bouée 7 » et non significativement différente de 0, initialement positive à « Teychan bis », significative en début et fin de série. Il s'ensuit un niveau moyen visuellement décroissant mais statistiquement constant à « Arcachon-Bouée 7 », alors que sur « Teychan bis », il présente une évolution en cloche concave. Sur les deux lieux, les amplitudes et phases des saisonnalités sont constantes. les maxima et minima sont atteints, respectivement, en mars et août à « Arcachon-Bouée 7 » et en janvier et septembre à « Teychan bis ».

Pour les deux lieux, les variabilités d'observation apparaissent supérieures aux structurelles, en particulier à « Arcachon-Bouée 7 ». Pour « Teychan bis », il faut noter que :

1. la série est plus courte et ainsi les événements susceptibles d'avoir un effet sur la variance sont potentiellement plus nombreux à « Arcachon-Bouée 7 ».
2. la fréquence d'échantillonnage est moindre : le simple fait de souligner ce fait pose la question de l'influence de ce paramètre sur l'estimation de la variance d'observation ;
3. les mesures ont été effectuées seulement pendant la fin de l'automne et l'hiver pendant 3 années sur les 7 que compte la série : il y a sans doute ici un biais à la sous-estimation de la variance d'observation de la série.

Sur le graphique des observations en fonction des médianes de leurs distributions (cf. p. 38), le trapèze formé par l'intervalle de confiance des observations encadre sans excès les observations, contrairement à la situation constatée pour $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$. Mais les concentrations de ce dernier paramètre sont jusqu'à 24 fois supérieures à celles du NH_4^- ; autrement dit, pour ce dernier les concentrations sont souvent beaucoup plus proches de la limite de quantification, pour lesquelles la stabilisation de la variance par la transformation logarithmique apparaît pertinente et adaptée.

Concentration en phosphate

À « Arcachon-Bouée 7 », le niveau moyen montre une décroissance significative à partir de 2010, la pente redevenant non significativement différente de 0 à partir de 2012. Les amplitudes saisonnières sont moindres entre 2008 et 2011. C'est également une période pendant laquelle le minimum de concentration est atteint plus précocement. Pour « Teychan bis », pour laquelle les données sont disponibles à partir de fin 2007, les concentrations apparaissent stationnaires et le minimum annuel glisse d'avril à août en 2012.

En matière de variance d'observation, les constats sont très similaires à ceux décrits pour le NH_4^- : supériorité de la variance d'observation sur la variance structurelle à « Arcachon-Bouée 7 » et impact très probable de la fréquence et des périodes d'échantillonnage pour « Teychan bis » pour lequel la variance d'observation est moins importante.

Concentration en silicate

À « Arcachon-Bouée 7 » la pente est positive et significativement différente de 0 induisant un niveau moyen croissant. Mais l'élément le plus marquant est constitué par la baisse importante de niveau en 2006, depuis le 20 avril et jusqu'au 31 octobre, mis à part une valeur exceptionnelle observée le 14 septembre à $9.6 \mu\text{mol/L}$. L'éventualité d'un problème dans le processus de mesure devrait être examiné en premier lieu. Météo France relève une situation de sécheresse en 2006 :

Météo France : Comparaison des sécheresses de 1976 et 2006 :

La sécheresse de 2006 présente un scénario similaire à celle de 1976 :

- Le faible niveau des précipitations automnales et hivernales n'a pas permis la reconstitution des réserves dans les nappes souterraines, réserves déjà entamées par une année 2004-2005 très sèche.
- Les ressources en eau des sols superficiels ont été appauvries par un printemps et un début d'été secs.
- Les fortes chaleurs de juin et surtout de juillet 2006 (canicule) contribuent, comme en 1976, à l'assèchement des sols superficiels.

Cependant, les déficits de précipitations observés sont globalement plus marqués en 1976 qu'en 2006.

Ces éléments contextuels suggèrent l'hypothèse d'un apport limité en silicate. Mais il faut noter que les autres nutriments ne présentent pas ce même profil d'évolution. Par ailleurs, entre le 19 juin et le 3 août les concentrations sont plus élevées. Cette période de juillet 2006 est identifiée comme caniculaire par Météo France :

Météo France : Retour sur la canicule de juillet 2006

Juillet 2006 est le mois de juillet le plus chaud en France depuis 1950, devant juillet 1983. [...] Cet épisode de canicule a touché une large partie de la France durant 19 jours, du 10 au 28 juillet. [...] Les 4 jours les plus chauds au cours de l'épisode ont été les 19, 21, 25 et 26 juillet.

Les amplitudes de la saisonnalité sont plus faibles en 2006 et 2007. Les concentrations minimales ont été plus précoces de 2005 à 2011, mi-mai au lieu de mi-juin. La série à « Teychan bis » commence fin 2007. Le niveau moyen apparaît globalement en augmentation sur la période, comme pour « Arcachon-Bouée 7 », bien que le faible nombre de données jusqu'en 2010 induise une variabilité plus importante au début de la série.

Comme pour les autres nutriments, la variabilité d'observation est plus importante à « Arcachon-Bouée 7 » à la fois pour la variance estimée et les contributions non structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance.

Synthèse et remarques méthodologiques

La période de 2005 à 2010 concentre plusieurs singularités : la canicule de 2006, l'hiver et le printemps doux de 2006-2007, identifiés dans les analyses des séries temporelles, des amplitudes de saisonnalité amorties pour la turbidité, les matières en suspension, le $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$ et le $\text{Si}(\text{OH})_4$, des concentrations en baisse pour les matières en suspension et le $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$, des concentrations très faibles en $\text{Si}(\text{OH})_4$ en 2006. Ces remarques constituent des fragments non-exhaustifs de l'histoire hydrologique et biologique des deux lieux de surveillance pendant la période considérée. Ils renforcent la conviction que l'approche méthodologique utilisée est pertinente. L'examen des variances d'observation comme approche de l'incertitude en est d'autant plus légitime. La variabilité d'observation apparaît faible pour la température, qui est une mesure très maîtrisée et pour la concentration en oxygène dissous, qui est une mesure effectuée par sonde. Les mesures de nutriments sont caractérisées par des variances d'observation importantes, supérieures à la variabilité structurelle (*i.e.* niveau moyen et saisonnalité), mais des signaux non triviaux sont présents dans les séries. La turbidité présente une variabilité plus importante que la mesure de matières en suspension.

Pour la température, les résultats obtenus se sont avérés très similaires pour les deux lieux. Mais pour les nutriments, les mesures prises à « Teychan bis » ont une variabilité moindre que celles prises à « Arcachon-bouée 7 ». Pour ces paramètres, les séries du premier lieu sont également plus courtes et présentent une fréquence d'échantillonnage plus faible et centrée sur l'hiver jusqu'en 2010. Sans surprise, ces caractéristiques ont une influence sur la variance estimée. Dans ce type de contexte, l'utilisation de modèle permettant la modélisation jointe des deux séries (*e.g.* via un modèle *Seemingly Unrelated Time Series Equation (SUTSE)*) permettrait d'améliorer l'estimation des paramètres (Petris et al., 2009).

Pour le $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$, le graphique p 35 a montré que la transformation logarithmique ne permettait sans doute pas de complètement se ramener à une situation d'homoscédasticité, la variabilité étant plus grande pour les mesures plus proches de la limite de quantification. Une manière de traiter ce problème serait de basculer vers des modèles à variances variables dans le temps. L'approche permettrait tout à la fois de s'adapter aux variations liées, par exemple, à des changements de méthodes ou de laboratoire analyste, tout en offrant une grande souplesse dans la relation entre la variance et la concentration. Ce changement suppose de passer à un formalisme entièrement bayésien, en particulier en ce qui concerne l'estimation des paramètres qui devrait se faire à l'aide de méthodes de simulation (*e.g.* Metropolis-Hastings) voire en utilisant l'approche *Integrated Nested Laplacian Equation (INLA)*.

Le tableau résumant les caractéristiques des données utilisées pour cette étude (table 1, p. 9) souligne que la plupart des paramètres sont susceptibles de présenter un nombre variable de résultats inférieurs à la limite de quantification. Ceci est également vrai pour les comptages phytoplanctoniques. Par ailleurs, comme les méthodes changent au cours du temps, les limites de quantifications peuvent varier pour une série donnée. Ces caractéristiques sont très importantes et peuvent avoir un impact tout à la fois sur l'indice de position (*e.g.* moyenne, médiane) mais aussi sur la variance, de la distribution estimée.

C'est-à-dire que non seulement les paramètres de position estimés des distributions des concentrations peuvent être biaisés mais également que le rapport signal sur bruit peut être affecté et avec lui la capacité d'adaptation du modèle c'est-à-dire la trajectoire temporelle des concentrations. Récemment, des travaux ont adressé cette question méthodologique dans le contexte du filtre de Kalman et dans un objectif de prédiction (Allik et al., 2016). Il existe par ailleurs des formulations bayésiennes de ce problème. Quelle que soit l'approche choisie, il s'agit d'un investissement méthodologique important pour un gain en généralité et en pertinence. Enfin, la question se pose de savoir ce qui doit être bancarisé : la limite de quantification, la valeur mesurée même si elle est inférieure à la limite de quantification, ou les deux.

Le changement de niveau qui affecte la concentration en oxygène dissous induit un impact sur l'estimation de la saisonnalité. De la même manière, le changement de niveau pour le Si(OH)_4 est accompagné d'une diminution des amplitudes de la saisonnalité. Ces modifications de la saisonnalité sont-elles des conséquences « mécaniques » ou continuent-elles à porter une information pertinente relativement à la série ? Petris et al. (2009) proposent un modèle « *for outliers and structural breaks* » qui intègre la possibilité d'interventions sur les paramètres de la saisonnalité. Plus globalement, le point abordé ici concerne le caractère approprié de la modélisation de la saisonnalité dans la forme actuelle du modèle et en particulier dans le contexte d'interventions concernant le niveau moyen. Au-delà du modèle proposé par Petris, il s'agit de la mise en œuvre de modèles robustes (Fúquene et al., 2015).

Parmi les 14 modèles réalisés, tous respectent l'hypothèse de normalité des résidus au regard du test de Kolmogorov-Smirnov et 9 respectent l'hypothèse d'indépendance pour le test de Stoffer-Toloi. L'ensemble de la méthode DLM utilisée repose sur ces hypothèses : d'un point de vue méthodologique cette opération logique est l'inférence, qui consiste à tenir pour vraies des propositions et conclure à la vérité de nouvelles propositions en vertu de leurs liaisons avec les premières. Paradoxalement, les causes du non-respect des hypothèses de normalité et d'indépendance, les procédures pour les évaluer et les conséquences de la violation de ces hypothèses font l'objet d'une littérature peu abondante. Pour ce qui est de l'indépendance des résidus dans l'analyse des séries temporelles, elle peut être causée par un modèle mal spécifié ou qui pourrait être amélioré par l'adjonction de termes supplémentaires, en général auto-régressifs. Sur ce point particulier, nous nous rapprochons de la position de West et Harrison (1997, p. 349) :

It is sometimes tempting to explain more global movement in the series by such noise models when in fact they should be attributed to changes in trend or other components of the basic DLM.

Les conséquences généralement évoquées de l'absence d'indépendance relèvent des biais d'estimation des paramètres (*i.e.* position et variabilité) pouvant mener en particulier à des tests de significativité erronés. L'évaluation du respect des hypothèses fait souvent référence aux méthodes graphiques mais également à des tests formels, qui eux même reposent souvent sur des hypothèses. Ici, les 5 séries pour lesquelles l'indépendance n'est pas vérifiée concernent toutes « Teychan bis », pour les paramètres température, turbidité, NH_4^- , PO_4^{3-} et Si(OH)_4 . Visuellement, les graphiques d'autocorrélation présentent des situations très contrastées et qu'il est intéressant de comparer avec les cas pour lesquels le test de Stoffer-Toloi n'a pas permis de rejeter l'hypothèse d'indépendance. Ainsi, à « Teychan Bis » la température apparaît proche d'une situation d'indépendance avec des autocorrélations très souvent inférieures à l'intervalle de confiance mais le test est positif, alors que les autocorrélations pour le modèle du $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$ apparaissent plus importantes, mais le test est négatif. Il faut également noter que le nombre de mesures pour la température est de 531 alors qu'il est de 62 pour le $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^-$. Le problème qui est soulevé ici est celui de la capacité du test à mettre en évidence un écart à l'hypothèse

nulle, capacité qui est d'autant plus importante que le nombre de données est grand. Autrement dit, plus la série comporte un grand nombre de données et plus il est probable de conclure à la dépendance des résidus. En substance, il apparaît qu'il y a là une question méthodologique qui mériterait de plus amples développements.

5. CONCLUSION

Les écosystèmes marins sont des milieux complexes. Ils sont influencés par des phénomènes météorologiques, hydrodynamiques, écologiques, biologiques et anthropiques. Tous interagissent les uns avec les autres. Par voie de conséquence, établir l'histoire d'un paramètre pour un lieu et une période donnée à partir de sa série temporelle est un exercice difficile. Cela implique de se mettre en butte de manière récurrente à la frustration de ne pas disposer de l'ensemble des informations dont l'examen pourrait expliquer changements et singularités. Il n'en reste pas moins que les séries temporelles étudiées contiennent un signal et que les informations exogènes accessibles sont éclairantes quant aux chocs et valeurs exceptionnelles. Il s'ensuit que les résultats issus des modèles permettent d'appréhender des caractéristiques non-triviales de ces données. Il en va ainsi de la variance d'observation des DLM en tant que proxy^f de l'incertitude du processus d'acquisition de la donnée.

Les résultats montrent pour la température qu'en dépit d'une mesure très maîtrisée, la variance d'observation, tel que définie ci-dessus, est de l'ordre de $1\text{ }^{\circ}\text{C}^2$. Le signal reste néanmoins très peu bruité comme pour la concentration en oxygène dissous pour laquelle la variance d'observation est de 0.05 (mg/L)^2 . Pour les autres paramètres, les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -20 % à -60 % pour la borne inférieure et de 60 % à 500 % pour la borne supérieure. Les contributions les plus réduites sont le fait des mesures réalisées au lieu « Teychan bis » pour lequel les séries sont plus courtes, la fréquence d'échantillonnage variable dans le temps et le plan déséquilibré sur les saisons.

De nombreuses améliorations du modèle sont possibles et envisagées. Le traitement joint des séries de différents lieux d'un même paramètre est un premier pas vers une intégration multivariée. Mais au regard de la complexité des écosystèmes marins et les interdépendances multiples des phénomènes en jeu, la construction d'un modèle considérant conjointement plusieurs paramètres et leurs interactions apparaît incontournable.

f. Un proxy ou une variable proxy est une variable qui n'est pas significative en soi, mais qui sert en lieu et place d'une variable non observable ou non mesurable.

6. BIBLIOGRAPHIE

- Allik, B., Miller, C., Piovoso, M.J., Zurakowski, R., 2016. The Tobit Kalman Filter : An Estimator for Censored Measurements. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* 24, 365-371. <https://doi.org/10.1109/TCST.2015.2432155>
- Aminot, A., K erouel, R., 2004. Hydrologie des  cosyst mes marins : param tres et analyses, M thodes d'analyse en milieu marin. Ifremer.
- Brown, C.D., Canfield, D.E., Bachmann, R.W., Hoyer, M.V., 1998. Seasonal Patterns of Chlorophyll, Nutrient Concentrations and Secchi Disk Transparency in Florida Lakes. *Journal of Lake and Reservoir Management* 14, 60-76.
- F quene, J.,  lvarez, M., Ra l Pericchi, L., 2015. A robust Bayesian dynamic linear model for Latin-American economic time series : "the Mexico and Puerto Rico cases." *Latin American Economic Review* 24, 1-17. <https://doi.org/10.1007/s40503-015-0020-z>
- Harvey, A., Koopman, S.J., Penzer, J., 1998. Messy time series : a unified approach. *Advances in Econometrics* 13, 103-143.
- Hongve, D.,  kesson, G., 1998. Comparison of nephelometric turbidity measurements using wavelengths 400-600 and 860 nm. *Water Research* 32, 3143-3145. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(98\)00051-7](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(98)00051-7)
- Hyndman, R.J., Athanasopoulos, G., 2013a. ARIMA models, in : *Forecasting : Principles and Practice*. OTexts, Melbourne, Australia. Section 8/5. <http://otexts.org/fpp/8/5>. Accessed 13/10/2017.
- Hyndman, R.J., Athanasopoulos, G., 2013b. The forecaster's toolbox, in : *Forecasting : Principles and Practice*. OTexts, Melbourne, Australia. Section 2/6. <https://www.otexts.org/fpp/2/6>. Accessed 09/02/2018.
- Jafar-Sidik, M., Gohin, F., Bowers, D., Howarth, J., Hull, T., 2017. The relationship between Suspended Particulate Matter and Turbidity at a mooring station in a coastal environment : consequences for satellite-derived products. *Oceanologia* 59, 365-378. <https://doi.org/10.1016/j.oceano.2017.04.003>
- Petris, G., Petrone, S., Campagnoli, P., 2009. *Dynamic linear models with R, Use R !* Springer.
- R Development Core Team, 2008. *R : A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.
- REPHY - French Observation And Monitoring Program For Phytoplankton And Hydrology In Coastal Waters, 2017. REPHY dataset - French Observation and Monitoring program for Phytoplankton and Hydrology in coastal waters. 1987-2016 Metropolitan data. <https://doi.org/10.17882/47248>
- Soudant, D., Miossec, L., Neaud-Masson, N., Auby, I., Maurer, D., Daniel, A., 2016. Incertitudes des m thodes d' valuation « eaux littorales » : utilisation de mod les lin aires dynamiques pour l' valuation des incertitudes (chlorophylle a, phytoplancton), Rapport Aquaref 2015.
- Stoffer, D.S., Tolo, C.M.C., 1992. A note on the Ljung-Box-Pierce portmanteau statistic with missing data. *Statistics and probability letters* 13, 391-396.
- West, M., Harrison, J., 1997. *Bayesian forecastind and dynamic models*. Springer-Verlag.

7. ANNEXE 1 : REPRODUCTION DE LA SECTION MÉTHODE DU PRÉCÉDENT RAPPORT.

Modèle

Un DLM peut contenir différents composants tels qu'une tendance, un terme saisonnier ou certaines variables indépendantes et leurs coefficients. La forme générale du modèle utilisé ici comporte deux parties : une tendance linéaire locale, sous la forme d'un DLM de série temporelle (TSDLM) d'ordre 2, et une composante saisonnière. Les données sont décrites par l'équation d'observation :

$$Y_t = \mu_t + \mathbf{F}S_t + v_t, \quad v_t \sim N(0, V)$$

avec

Y_t , observation

μ_t , niveau moyen ou tendance

$\mathbf{F}S_t$, saisonnalité

v_t , terme d'erreur ou innovation

V , variance d'observation

Ici et par la suite, les caractères gras représentent des vecteurs et des matrices. Le signal observé est décomposé en un niveau moyen et une saisonnalité. Le vecteur \mathbf{F} dépend de la forme, factorielle ou trigonométrique, et l'unité de temps de la saisonnalité. Enfin, un terme d'erreur v_t , distribué selon une loi normale de moyenne 0 et de variance V est ajouté pour représenter le bruit venant de toute la variabilité du processus d'acquisition des données du prélèvement, incluant la variabilité de l'environnement, à la saisie de données et à des facteurs qui ne sont pas pris en compte dans le modèle. La variance V est la variance d'observation qui fait l'objet de notre attention dans cette étude. La somme du niveau moyen et de la saisonnalité représente un processus inobservable sous-jacent. Ces composants sont indicés par le temps, ce qui souligne qu'ils peuvent évoluer avec le temps. L'équation d'évolution décrit cette évolution :

$$\begin{aligned} \mu_t &= \mu_{t-1} + \beta_{t-1} + \omega_{\mu,t}, & \omega_{\mu,t} &\sim N(0,0) \\ \beta_t &= \beta_{t-1} + \omega_{\beta,t}, & \omega_{\beta,t} &\sim N(0, \mathbf{W}_{\beta,t}) \\ \mathbf{S}_t &= \mathbf{G} \mathbf{S}_{t-1} + \omega_{S,t}, & \omega_{S,t} &\sim N(0, \mathbf{W}_{S,t}) \end{aligned}$$

A l'instant t , le niveau moyen est égal à sa valeur au temps $t-1$ additionné à β_{t-1} . Cela signifie aussi que $\mu_t - \mu_{t-1} = \beta_{t-1}$, *i.e.* la différence de niveau moyen entre deux unités de temps, *i.e.* β_{t-1} est la pente. En résumé, le niveau moyen au temps t est égal au niveau moyen au temps $t-1$ additionné à la pente au temps $t-1$. En outre, un terme d'erreur $\omega_{\mu,t}$ est ajouté. Comme l'équation d'évolution décrit le processus sous-jacent réel et inobservable, ce terme d'erreur est parfois appelé l'innovation, en tant que source de changements. Mais ici, sa variance est égale à zéro, ce qui induit que la seule source de variation dans le niveau moyen est la pente. Ce cas particulier de modèle est appelé *Integrated Random Walk*. Les deux dernières équations décrivent, respectivement, les évolutions de la pente et de la saisonnalité égaux à ceux de $t-1$ avec des termes d'innovation, $\omega_{\beta,t}$ et $\omega_{S,t}$ de variance non nulles. La matrice \mathbf{G} dépend de la forme et de l'unité de temps de la saisonnalité. L'équation d'évolution peut prendre une forme matricielle dans laquelle les termes d'erreurs constituent un vecteur multinormale de moyenne 0 et de variance \mathbf{W}_t : cette dernière est appelée variance d'évolution.

Le TSDLM d'ordre 2 a été choisi pour sa capacité à prendre en charge les tendances constantes, linéaires et quadratique ce qui, *a priori*, semble suffisant pour capturer tout type d'évolution dans les séries chronologiques environnementales. Comme indiqué précédemment, la saisonnalité peut être spécifiée sous deux formes : factorielle et trigonométrique. Dans le premier cas, un paramètre est estimé pour chaque unité de temps (*e.g.* mois). Si la saisonnalité est supposée être constante dans le temps (c.-à-d. variance d'innovation égale à 0) alors les mêmes estimations sont utilisées pour chaque unité de temps au fil des ans. A l'inverse, le paramètre de saison peut être estimé à chaque unité de temps reflétant une saisonnalité variable dans le temps. Si la saisonnalité est modélisée sous forme trigonométrique, en substance, une phase et une amplitude sont estimées qui peuvent être constantes ou variables dans le temps en fonction de la spécification de $W_{s,t}$. Si la saisonnalité est soupçonnée être bi-modale, c'est-à-dire présenter deux épisodes de valeurs élevées, deux harmoniques doivent être précisées de sorte que deux phases et deux amplitudes soient estimées. Indiquer deux harmoniques n'induit pas nécessairement un modèle présentant deux modes mais permet de modéliser un système présentant au plus deux modes.

Dans le choix de la forme de la saisonnalité, l'approche trigonométrique, impliquant une évolution sinusoidale, peut être vue comme une hypothèse trop forte et ainsi la forme factorielle pourrait être toujours préférée. Toutefois, le principe de parcimonie incline à choisir, à performance égale, les modèles présentant le moins de paramètres. Or dans la forme factorielle, le nombre de paramètres de saisonnalité est égal au nombre de « saisons » moins 1. Pour les unités allant du trimestre au jour, le nombre de paramètres augmente de 3 à 364 pour la forme factorielle tandis que la forme trigonométrique ne nécessite que deux paramètres par harmonique. Au regard d'une fréquence de prélèvement théorique bimensuelle et de l'observation habituelle d'un bloom printanier et d'un bloom automnal, en respect du principe de parcimonie une forme trigonométrique avec deux harmoniques a été choisie.

Lorsque les composantes du modèle ont été choisies, les paramètres du modèle, c'est-à-dire les variances d'observations et d'évolutions, peuvent être estimées par la méthode du maximum de vraisemblance. Pour ce processus d'optimisation, les valeurs initiales ont été choisies égales à la variance de la série temporelle modélisée. Les variances d'observation et d'innovation jouent un rôle central en estimant la part de signal et la part de bruit dans les observations. Le ratio signal sur bruit détermine la mémoire du processus et la quantité d'informations contenue dans les observations utilisées pour le filtrage et lissage des observations. Ces dernières étapes sont prises en charge par un filtre de Kalman. Enfin, comme le processus est défini de façon récursive, avec la première observation à $t=1$, des valeurs *a priori* à $t=0$ pour le niveau moyen, la pente et la saisonnalité et leurs variances doivent être spécifiées. Des valeurs très peu informatives sont choisies : toutes les moyennes sont mises à 0 et toutes les variances à 10^7 . Ces valeurs sont celles utilisées par défaut (Petris et al., 2009).

Interventions

Une intervention est le nom donné à une modification d'un paramètre du modèle afin de prendre en compte une information exogène. Ici, seuls les changements de niveau moyen et la prise en compte des valeurs exceptionnelles sont considérés. Précédemment, il a été souligné que la pente est le seul facteur de l'évolution de la tendance, car la variance d'évolution du niveau moyen est fixée à 0. Quand un changement dans le niveau moyen est suspecté à l'instant t , une variance d'évolution du niveau moyen non nulle est spécifiée pour cette unité de temps et estimée par maximum de vraisemblance. Pour ce processus d'optimisation, la valeur initiale est la variance de la série temporelle modélisée. Il peut y avoir autant de variances d'évolution non nulles du niveau moyen que de changements de niveau soupçonnés. Ces spécifications n'induisent pas nécessairement un modèle montrant des changements de niveau mais les probabilités de changement seront évaluées et, si

certaines d'entre eux sont vraisemblables d'un point de vue numérique, le modèle présentera des changements de niveau. Les experts restent juges ultimes de la pertinence de ces interventions.

Les valeurs exceptionnelles sont définies comme des mesures avec des variances d'observation inhabituellement élevées, quelle que soit leur source (*e.g.* événements inhabituels). Si une valeur exceptionnelle est suspectée à l'instant t , alors un paramètre d'augmentation de la variance d'observation est ajouté au modèle. Il s'agit d'une quantité supérieure ou égale à 1 qui intervient comme multiplicateur de la variance d'observation de routine. Chaque valeur exceptionnelle peut être traitée de cette façon. Comme auparavant, la pertinence numérique de ces spécifications est évaluée par maximum de vraisemblance, la valeur initiale pour le processus d'optimisation étant 1, et les experts ont le dernier mot quant à l'identification effective des valeurs exceptionnelles.

Identification des valeurs exceptionnelles et des changements dans la tendance

Trois possibilités étaient envisageables pour l'identification des points de changement et des valeurs exceptionnelles. La première était d'avoir recours exclusivement à des approches statistiques. De cette manière, les résultats présenteraient un caractère d'optimalité d'un point de vue numérique mais le cas échéant aux dépens de l'interprétation écologique. La seconde option était de se fonder uniquement sur l'information exogène. Ainsi chaque changement est motivé par une causalité préexistante ; cependant il n'existe pas de série pour laquelle une telle information existe de manière exhaustive, qui au demeurant, rendrait l'analyse inutile. La dernière approche consiste à s'appuyer sur des méthodes statistiques et la connaissance des experts. C'est celle qui est mise en œuvre ici.

L'approche statistique utilisée pour la détection des changements et valeurs exceptionnelles s'appuie sur la définition des valeurs exceptionnelles dans la représentation boîte-à-moustaches (*Box-and-whiskers plot*). Dans cet outil, les valeurs exceptionnelles d'une loi normale centrée-réduite sont les valeurs supérieures à 2.7 ou inférieures à -2.7, ce qui correspond, respectivement, aux 0.35 % valeurs les plus élevées et les 0.35 % valeurs les plus faibles pour un total de 0.7 % de la distribution dans son ensemble. Ces valeurs seuils, -2.7 et 2.7, sont utilisées en conjonction avec les résultats d'un modèle. Pour les valeurs exceptionnelles, les erreurs standardisées sont examinées. Il s'agit des écarts entre les observations et les valeurs lissées du modèle, divisées par la racine carrée des variances des valeurs lissées. La distribution des erreurs standardisées est supposée être une loi normale centrée-réduite. De ce fait, les valeurs supérieures à 2.7 ou inférieures à -2.7 correspondent à des observations potentiellement exceptionnelles et ainsi candidates à un traitement approprié.

La même démarche est mise en œuvre pour les changements de niveau. Les valeurs examinées sont appelées résidus auxiliaires (*auxiliary residuals*) (Harvey et al., 1998). Pour les changements de niveaux, il faut considérer les résidus auxiliaires du niveau moyen c'est-à-dire les valeurs lissées du terme d'erreur du niveau moyen $\omega_{\mu,t}$. Dans le cas particulier de l'*Integrated Random Walk* utilisé ici, comme la variance de son terme d'erreur est nulle, ses valeurs lissées sont également nulles et ainsi non-informatives sur les changements de niveau. Cependant, l'idée des *auxiliary residuals* est d'examiner les innovations lissées, c'est-à-dire les changements d'une unité de temps à l'autre, c'est-à-dire les différences premières du niveau moyen, $\mu_t - \mu_{t-1}$. Or comme $\mu_t - \mu_{t-1} = \beta_{t-1}$, les valeurs lissées de β_{t-1} standardisées par leurs variances lissées et centrées sur leur moyenne portent une information similaire. Par convention et pour la clarté du propos à venir, ces valeurs sont désignées ci-après par l'expression « résidus auxiliaires du niveau ». Elles peuvent être comparées aux valeurs seuils 2.7 et -2.7 au-delà desquelles s'impose le diagnostic de valeurs de pentes exceptionnelles, c'est-à-dire que l'évolution des données pousse le modèle dans les limites de son adaptation, et suggère un

changement dans le niveau. Contrairement au cas des valeurs exceptionnelles pour lequel une erreur standardisée est associée à une mesure, les résidus auxiliaires exceptionnels de la pente constituent souvent des séquences : la mesure pour laquelle il convient de suggérer un changement de niveau n'est pas unique. L'expérience a montré qu'utiliser la valeur la plus élevée n'est pas toujours pertinent dans la mesure où l'événement induisant l'adaptation exceptionnelle peut avoir eu lieu avant ou après la valeur la plus élevée, et peut même s'être produit avant ou après la séquence de résidus auxiliaires exceptionnels de la pente. Compte tenu de cela, la procédure opérationnelle d'identification de la mesure candidate pour une suggestion de changement de niveau est définie comme suit. Lorsque les résidus auxiliaires de la pente constituent une séquence exceptionnelle (*i.e.* supérieures à 2.7 ou inférieures à -2.7), la séquence est étendue aux valeurs voisines supérieures à 2 ou inférieures à -2^g et, dans cette nouvelle séquence, la mesure présentant l'erreur standardisée la plus élevée en valeur absolue est utilisée pour porter la suggestion de changement de niveau.

Stratégie d'analyse semi-automatisée

L'ensemble des éléments de méthode décrits ci-avant ne définissent pas une approche dans laquelle l'estimation des paramètres et l'identification des changements et valeurs exceptionnelles sont réalisées conjointement. Par voie de conséquence, une stratégie d'analyse doit être définie. Comme l'identification statistique des valeurs exceptionnelles et des changements de niveau s'appuie sur les résultats d'un modèle, il y a nécessité d'ajuster les paramètres du modèle une première fois. Les changements et *outliers* suggérés définissent un second modèle, *etc.* Ainsi, potentiellement, le premier modèle constitue l'amorce d'une procédure itérative conduisant à d'autres modèles, le cas échéant de manière infinie. Cet écueil est évité du fait de l'identification des *outliers* et changements de niveaux avec les seuils (-2.7, 2.7) correspondant à 0.7 % des distributions. De cette manière, et par expérience, il n'est pas rare que le premier modèle ne présente pas de suggestion d'intervention tandis que, le plus souvent, la stabilité est obtenue au second modèle ou au troisième modèle. Ainsi, le nombre par défaut d'itération a été limité à trois. Plus rarement le troisième modèle suggère encore des changements. Il est alors possible de les prendre en compte « manuellement ».

Diagnostic des modèles

Les deux hypothèses à vérifier sont la normalité et l'indépendance des résidus standardisés. La première est traditionnellement appréciée à l'aide d'un diagramme quantile-quantile ou Q-Q plot : les quantiles théoriques de la loi normale centrée-réduite sont portés en abscisse et les valeurs correspondantes des quantiles de la distribution observée centrée-réduite en ordonnée. Lorsque les points ne présentent pas de déviation majeure à la première bissectrice, alors la distribution observée suit probablement une loi normale. Cette approche peut être complétée par un test statistique formel. Le test de Shapiro-Wilk est considéré comme le plus puissant, c'est-à-dire le moins enclin à conclure à la normalité en son absence. Toutefois, sa sensibilité aux déviations dans les queues de distribution et son utilisation pour des échantillons de taille inférieure à 50 sont souvent relevés. Le test de Kolmogorov-Smirnov est réputé moins puissant mais également moins sensible aux faibles écarts à la normalité. L'approche graphique et ces deux tests sont utilisés ici pour apprécier la normalité des résidus.

L'indépendance des résidus est fréquemment évaluée à l'aide du test de Ljung-Box. En présence d'une série temporelle comportant des données manquantes, l'implémentation de ce test dans R^h (R Development Core Team, 2008) produit un résultat bien qu'officiellement, il ne les prenne pas en charge : les calculs élémentaires impliquant une donnée manquante sont ignorés. Si cette approche peut être d'un impact minimal lorsque

g. Les valeurs 2 et -2 d'une loi normale centrée réduite correspondent aux quantiles 2.5 % et 97.5 % classiquement utilisés en statistique inférentielle.

h. R est un environnement logiciel libre pour le calcul statistique et la production de graphiques.

Le pourcentage de données manquantes est très réduit, intuitivement, il sera d'autant plus important que ces proportions seront plus élevées. Or, les séries temporelles de cette étude peuvent comporter plus de 50 % de données manquante. Stoffer et Toloï (1992) ont proposé une version modifiée du Ljung-Box pour prendre en charge les données manquantes. C'est cette version qui a été programmée et est ici utilisée.

Pertinence des interventions, prolongement de l'analyse et intégration de l'expertise

La qualité de l'ajustement d'un modèle est appréciée à l'aide de la log-vraisemblance (*i.e.* *log-likelihood*, LL) qui est d'autant plus élevée que le modèle est numériquement vraisemblable. Le caractère significatif de la différence de log-vraisemblance entre deux modèles emboîtés peut être testé. Deux modèles sont emboîtés si l'ensemble des paramètres de l'un est inclus dans l'ensemble des paramètres de l'autre. Dans ce cas, la différence des log-vraisemblances multipliée par deux suit une loi du Chi² dont le nombre de degrés de liberté est la différence du nombre de paramètres entre les deux modèles. Par ailleurs, les comparaisons entre modèles sont réalisées à l'aide du critère d'information d'Akaike (*i.e.* *Akaike Information Criterion*, AIC) qui pénalise les modèles en fonction du nombre de paramètres afin de satisfaire le critère de parcimonie : le meilleur modèle est celui avec le plus faible AIC. Ces deux approches peuvent être utilisées conjointement dans la mesure où un nouveau modèle peut présenter un gain significatif de log-vraisemblance et une augmentation du critère d'Akaike.

Les mesures précédentes peuvent être utilisées pour évaluer rétrospectivement les modèles de l'analyse semi-automatisée. Le cas échéant, cela peut conduire à ne pas identifier l'ultime modèle comme le plus pertinent. Il est également possible d'exclure certaines interventions considérant que, si elles présentent un caractère vraisemblable d'un point de vue numérique, leur contribution est limitée d'un point de vue explicatif. Il est par ailleurs souhaitable, bien que pas indispensable, de pouvoir justifier les interventions conservées dans le modèle. Inversement, une information exogène ne correspondant à aucune des interventions conservées peut être utilisée pour suggérer un nouveau changement.

Finalement, l'examen des résidus standardisés est également une source d'identification de changement dans la série. En effet, comme ils sont supposés être distribués indépendamment et identiquement selon une loi normale centrée réduite, la probabilité pour un résidu d'être positif ou négatif est 0.5. Il s'ensuit que la probabilité d'avoir deux résidus consécutifs de même signe est $0.5^2 = 0.25$, trois résidus consécutifs de même signe $0.5^3 = 0.125$, etc. La probabilité d'observer une séquence de 7 valeurs consécutives du même signe est de 0.0078125 soit 0.78 %. Ainsi en référence à l'outil « Boîte à moustache », une séquence de 7 résidus consécutifs de même signe présente un caractère exceptionnel qui témoigne d'une inadaptation locale du modèle aux données et peut être un indice d'un changement de niveau. Plus les valeurs de la séquence sont éloignées de 0 en valeur absolue, plus la probabilité d'un changement de niveau est élevée. Les changements envisagés peuvent être suggérés au modèle et leurs vraisemblances numériques évaluées. Si les changements suggérés apparaissent pertinents, alors il est très souhaitable de pouvoir les relier explicitement à des informations exogènes.

Représentations et expressions de la variance d'observation

Lorsqu'un modèle est considéré comme final, la question du caractère vraisemblable de sa valeur estimée de la variance d'observation peut être posée. Mais d'une part, la variance d'une distribution est une quantité abstraite, d'autre part, les modélisations réalisées concernent une transformée logarithmique de la variable d'intérêt. Il y a donc lieu d'effectuer un travail autour de l'expression et de la représentation de la variance d'observation.

À chaque instant t de la série temporelle, le DLM fournit la moyenne et la variance de la distribution normale de la variable d'intérêt modélisée. Pour la chlorophylle a , cette dernière est le logarithme des concentrations. L'exponentielle de la moyenne du logarithme de la concentration n'est pas la moyenne de la concentration mais la médiane de la concentration. Les moyennes et les variances des distributions log-normales des concentrations peuvent être obtenues à partir des formules suivantes :

$$\begin{aligned} \text{Si } Y = \ln(X) \text{ alors} \\ E(X) &= e^{E(Y)+V(Y)/2} \\ V(X) &= e^{2E(Y)}(e^{2V(Y)} - e^{V(Y)}) \end{aligned}$$

avec $E(X)$ et $V(X)$, respectivement, la moyenne et la variance de X . Le graphique de ces variances en fonction des moyennes est une courbe quadratique typique des lois log-normales. Ce résultat est induit par la transformation logarithmique utilisée. Pour la même raison, la figure des logarithmes décimaux des variances en fonction des logarithmes décimaux des moyennes représente une droite dont la pente est très proche de 2. Ce résultat mécanique mis à part, l'ordonnée à l'origine est la seconde caractéristique de la droite. Elle peut être comparée à une valeur de référence. Brown et al. (1998) ont calculé les paramètres d'une telle droite à partir de mesures de chlorophylle a réalisées dans 209 lacs de Floride durant au moins un an à raison de 11 à 13 mesures par an. C'est une référence à laquelle on peut comparer les droites obtenues avec les résultats des modèles. Pour les comptages phytoplanctoniques, la variable d'intérêt est le logarithme décimal des abondances. Comme c'est l'unité adaptée de représentation de ces quantités, les considérations précédentes concernant la chlorophylle a ne s'appliquent pas.

Une seconde représentation pour appréhender la variabilité pour la chlorophylle a consiste à porter en abscisse les médianes des distributions des concentrations (*i.e.* les exponentielles des moyennes des logarithmes des concentrations), en ordonnée les valeurs observées et d'ajouter les enveloppes de confiance des observations et de la médiane. La surface définie par l'enveloppe de confiance des observations est une expression de la variabilité totale des mesures. La surface délimitée par l'enveloppe de confiance de la médiane est une expression de la variabilité liée à l'évolution de la somme de la tendance et de la saisonnalité. Le même type de représentation peut être réalisé pour les logarithmes décimaux des abondances phytoplanctoniques, les moyennes des distributions se substituant aux médianes.

Ainsi dans la variabilité totale, une part concerne l'évolution structurelle, *i.e.* la somme de la saisonnalité et de la tendance. Cette part peut être exprimée par le rapport de l'étendue de l'intervalle de confiance de la médiane de la concentration en chlorophylle a à celui des observations, rapport qui peut également prendre la forme d'un pourcentage. Le pourcentage complémentaire concerne la surface entre l'enveloppe de confiance des médianes et celui des observations. Dans le cadre de la question sur les incertitudes, c'est cette dernière qui est l'objet d'intérêt et c'est celle qui est estimée par la variance d'observation vue précédemment. Ces pourcentages constituent une autre forme de représentation des variabilités.

Une dernière expression de la variabilité consiste à définir la précision en pourcentage de la mesure effectuée. Typiquement, la mesure X réalisée à la précision P % signifie que l'intervalle de confiance à 95 % de la mesure X est $[X-X.P/100 ; X+X.P/100]$ (Aminot and Kérouel, 2004). Ainsi, l'intervalle de confiance à 95 % d'une valeur permet de calculer les distances aux bornes en pourcentages de la valeur. Ces pourcentages à la borne supérieure et à la borne inférieure sont les mêmes pour les distributions symétriques (*e.g.* gaussiennes) mais sont différents pour les distributions asymétriques (*e.g.* log-normales). Ces calculs peuvent être réalisés avec les intervalles de confiance des observations. Mais comme précédemment, c'est l'écart entre l'enveloppe de confiance des observations et

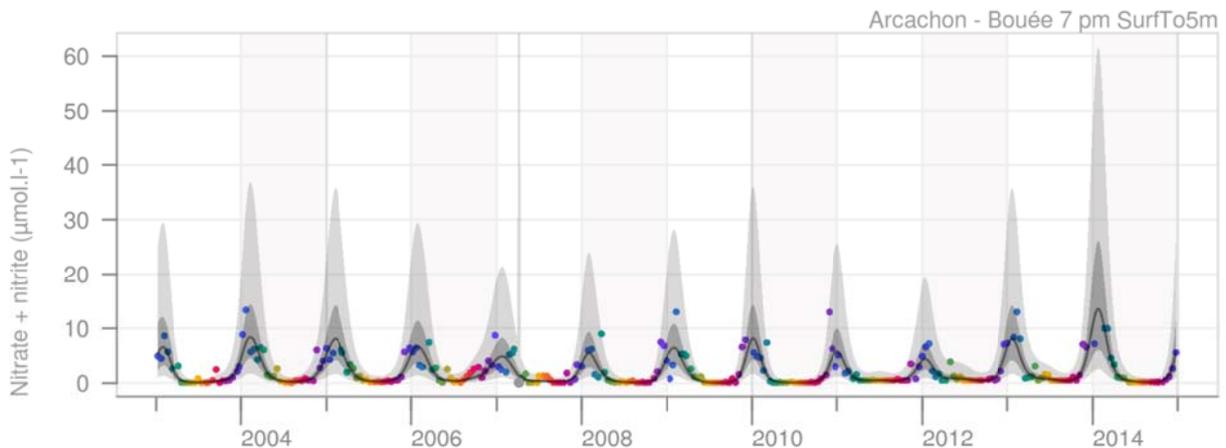
celle de la médiane qui témoigne de la variabilité du processus d'observation. Rapporté à la médiane, il constitue la part non-structurale de la précision.

Les approches développées dans les deux derniers paragraphes sont applicables aussi bien à la chlorophylle *a* en $\mu\text{g/L}$ qu'à l'abondance en \log_{10} cell./L. Toutefois, dans ce dernier cas, les représentations seront également faites en cell./L, unité plus familière aux experts des comptages phytoplanctoniques.

8. ANNEXE 2 : PRÉSENTATION DES GRAPHIQUES UTILISÉS.

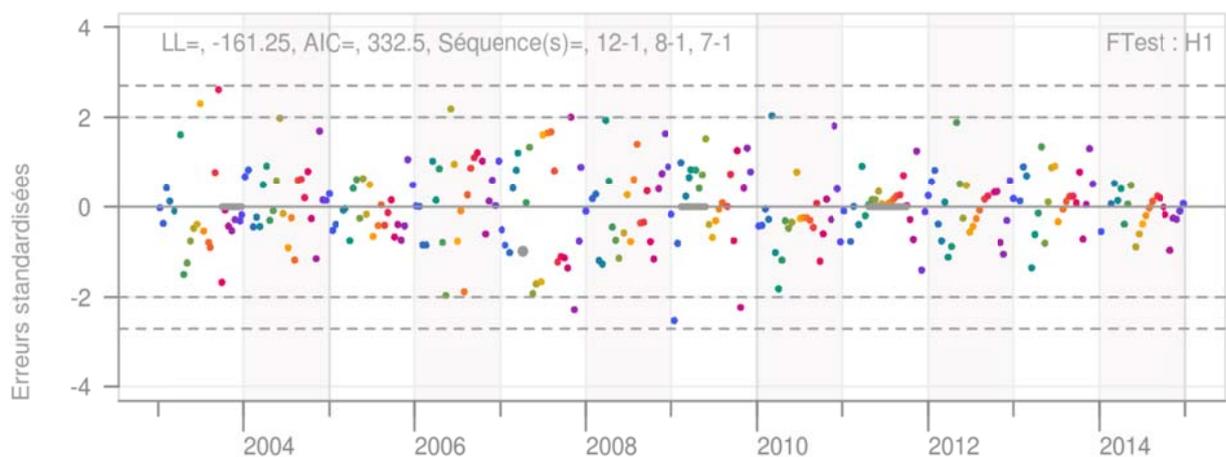
Les graphiques de la concentration en (nitrate+nitrite) à « Arcachon-Bouée 7 » sont utilisées à titre d'exemple.

Observations et modèle



Les disques représentent les observations. La couleur des disques est relative à la saison des prélèvements : les teintes bleues correspondent à l'hiver, les vertes au printemps, les jaunes-orangées à l'été et du rouge au violet à l'automne. Les disques gris sont les observations traitées comme exceptionnelles. Ce code couleur est utilisé dans les autres graphiques. La ligne continue représente la valeur du modèle, c'est-à-dire le niveau moyen additionné à la saisonnalité. En l'absence de transformation, c'est la moyenne des distributions modélisées. Si une transformation logarithmique a été appliquée, c'est la médiane. La surface gris foncée est l'enveloppe de confiance à 90 % du modèle. La surface gris claire est l'enveloppe à 90 % des observations. Attention : lorsqu'une transformation est appliquée aux données, ce graphique est le seul qui soit dans les unités initiales, tous les autres sont dans les unités transformées.

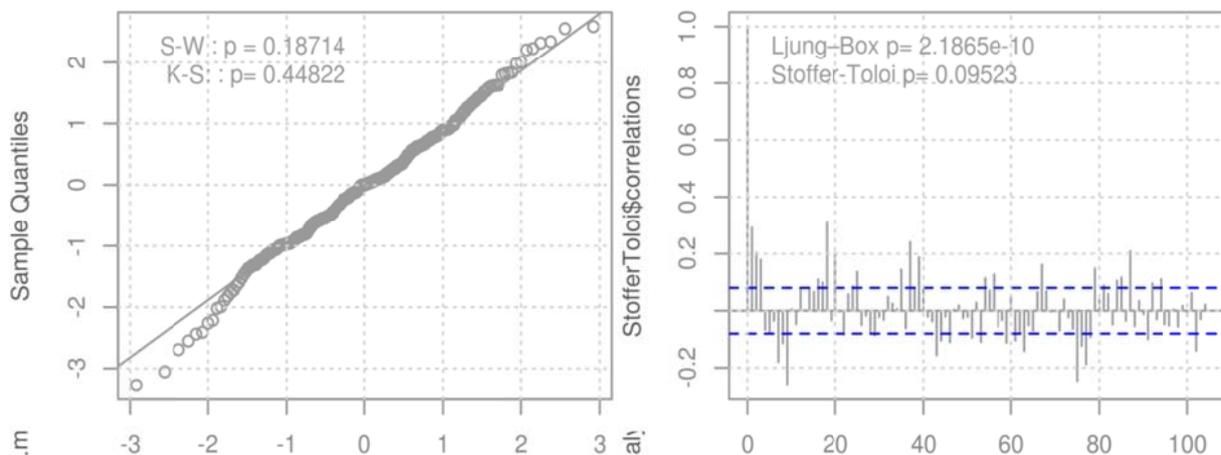
Résidus standardisés



Les résidus standardisés sont les écarts entre le modèle et les observations, divisés par la variance du modèle. Ils sont supposés indépendants et identiquement distribués selon une loi normale centrée réduite (*i.e.* de moyenne 0 et de variance 1). Les lignes pointillées horizontale aux ordonnées 2 et -2 (resp. 2.7 et -2.7) sont respectivement les quantiles 2.5 % et 97.5 % (resp. 0.35 % et 99.65 %) de la loi normale centrée réduite. Les valeurs 2.7

et -2.7 sont utilisées pour la suggestion automatique des valeurs exceptionnelles. « LL » est la valeur de la log-vraisemblance du modèle, « AIC » est la valeur du critère d'Akaikeⁱ, « Séquence(s) » informe sur l'existence d'erreurs standardisées de même signe consécutives de longueur supérieure ou égale à 7 (*i.e.* dont la probabilité est inférieure à 0.008 sous l'hypothèse d'indépendance) sous la forme de deux chiffres séparés par un tiret : le premier est une longueur de séquence en termes d'unités temporelles, le second est le nombre d'occurrence de séquences de cette longueur. Par ailleurs, les séquences sont représentées sur le graphique par des disques gris consécutifs sur l'axe des abscisses.

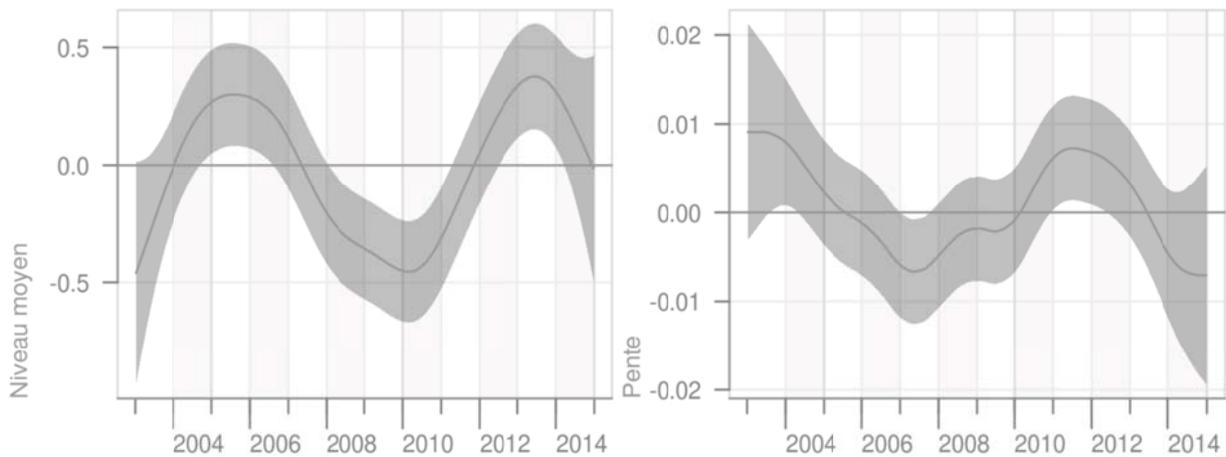
Évaluation de la normalité et de l'indépendance des résidus



Le graphique de gauche est un diagramme quantile-quantile ou Q-Q plot : si les observations (*i.e.* cercles gris) sont alignées sur la première bissectrice c'est que la distribution suit probablement une loi de distribution gaussienne normalisée. « S-W » donne la p-value (*i.e.* la probabilité d'obtenir la même valeur du test sous l'hypothèse nulle) du test de normalité de Shapiro-Wilk, « K-S » donne celle du test de Kolmogorov-Smirnov. Le graphique de droite donne les autocorrélations calculées pour le test de Stoffer-Toloi pour les $2m$ premiers retards, où m est la période de la saisonnalité (*e.g.* 52 pour l'unité temporelle « semaine ») tel que préconisé par Hyndman et Athanasopoulos (2013b). « Stoffer-Toloi » donne la p-value pour le test du même nom d'autocorrélation globale pour les $2m$ premiers retards. Il en va de même pour « Ljung-Box », donné seulement à titre indicatif car inadapté aux séries présentant des données manquantes. Les lignes de tirets bleus indiquent les valeurs critiques des autocorrélations (*i.e.* au-delà desquelles elles peuvent être considérées comme significativement différentes de 0) telles que définies par Hyndman et Athanasopoulos (2013a).

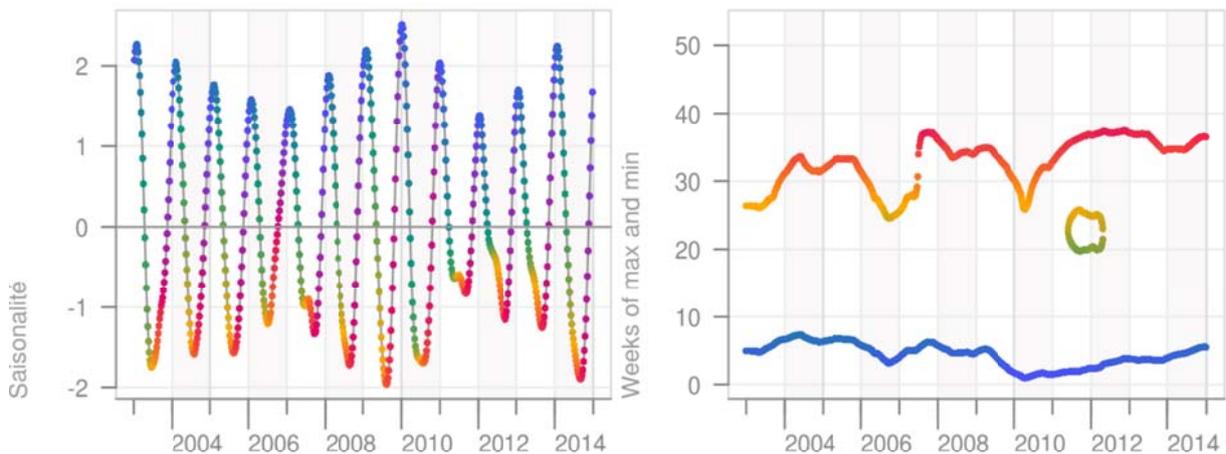
i. Le critère d'information d'Akaike, (en anglais Akaike information criterion ou AIC) est une mesure de la qualité d'un modèle statistique proposée par Hirotugu Akaike. Lorsque l'on estime un modèle statistique, il est possible d'augmenter la vraisemblance du modèle en ajoutant un paramètre. Le critère d'information d'Akaike permet de pénaliser les modèles en fonction du nombre de paramètres afin de satisfaire le critère de parcimonie. On choisit alors le modèle avec le critère d'information d'Akaike le plus faible. (source : wikipédia)

Niveau moyen et pente



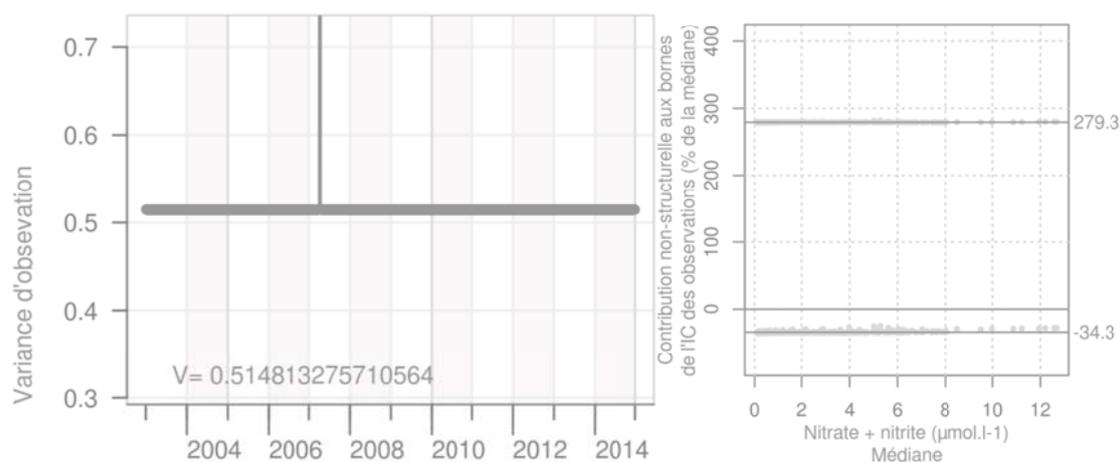
À gauche, la ligne continue est celle du niveau moyen, c'est-à-dire la tendance corrigée des variations saisonnières. À droite, la ligne continue est la pente, c'est-à-dire la différence d'ordre 1 du niveau moyen : lorsque la pente est positive, le niveau moyen augmente, lorsqu'elle est négative le niveau moyen diminue. Dans les deux cas, la surface grise représente l'intervalle de confiance à 90 %.

Saisonnalité et phénologie



À gauche est représenté le paramètre structurel estimé de saisonnalité. À droite sont portées les unités temporelles pour lesquelles la saisonnalité atteint un maximum ou un minimum, c'est-à-dire pour lesquelles la dérivée première de la saisonnalité s'annule.

Variance d'observation et incertitude



À gauche, la variance d'observation étant constante par hypothèse du modèle, elle apparaît comme une droite constituée de disque gris. « V » donne la valeur de cette variance constante. Les traits verticaux correspondent aux dates pour lesquelles l'observation est suggérée exceptionnelle et une variance plus élevée estimée. À droite, les disques sont les précisions attribuable au processus d'observation (*i.e.* bornes de l'intervalle de confiance des observations exprimées en pourcentage de la médiane). Les résultats indiqués dans les marges droites des graphiques sont les moyennes pour les bornes supérieures et inférieures.

Enfin pour les concentrations en (nitrate+nitrite) et ammonium, les observations ont été représentées en fonction de la médiane de leurs distributions, conjointement aux limites à 90 % du modèle et des observations (*cf.* ci-dessous).

