

INCERTITUDES DES MÉTHODES D'ÉVALUATION « EAUX LITTORALES » : UTILISATION DE MODÈLES LINÉAIRES DYNAMIQUES POUR L'ÉVALUATION DES INCERTITUDES DES PARAMÈTRES CONTAMINANTS CHIMIQUES DANS LE BIOTE

Soudant D., Bouchoucha M., Gouriou L., Menet F., Trut G.

Programme scientifique et technique
Année 2019

Document final

Contexte de programmation et de réalisation

Ce rapport a été réalisé dans le cadre du programme d'activité AQUAREF pour l'année 2019, action E2.2D : incertitudes des méthodes d'évaluation "eaux littorales" : utilisation de modèles linéaires dynamiques pour l'évaluation des incertitudes des paramètres contaminants chimiques dans le biote.

Auteur (s) :

Soudant Dominique

Ifremer, Service Valorisation de l'Information pour la Gestion Intégrée et la Surveillance

dsoudant@ifremer.fr

Bouchoucha Marc

Ifremer, Laboratoire Environnement Ressources Provence-Azur-Corse

marc.bouchoucha@ifremer.fr

Gouriou Laure

Ifremer, Laboratoire Environnement Ressources d'Arcachon

laure.gouriou@ifremer.fr

Menet Florence

Ifremer, Laboratoire Environnement Ressources de Normandie

florence.menet@ifremer.fr

Trut Gilles

Ifremer, Laboratoire Environnement Ressources d'Arcachon

gilles.trut@ifremer.fr

Relectrice :

Anne Grouhel

Ifremer centre de Nantes

anne.grouhel@ifremer.fr

Les correspondants

Office français de la biodiversité : Nicolas Gaury

Etablissement Dominique Soudant

Référence du document : Dominique Soudant, Marc Bouchoucha, Laure Gouriou, Florence Menet, Gilles Trut – Incertitudes des méthodes d'évaluation « eaux littorales » : utilisation de modèles linéaires dynamiques pour l'évaluation des incertitudes des paramètres contaminants chimiques dans le biote – Rapport AQUAREF 2019 – 91 p.

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

Remerciements

Ce document est le fruit d'un travail collectif impliquant de nombreux acteurs de la surveillance des contaminants chimiques, mise en œuvre dans les réseaux pilotés par Ifremer. Tous les intervenants des Laboratoires Environnement et Ressources de l'Ifremer (LERs) des sites de Port-en-Bessin, Arcachon et Toulon, de l'Unité Biogéochimie et Écotoxicologie ainsi que les partenaires de l'Ifremer, participant aux prélèvements, observations, analyses et saisies des données, sont ici particulièrement remerciés. Merci à Isabelle Auby pour son ultime regard sur les expertises relevant d'Arcachon.

1. INTRODUCTION.....	7
2. DONNÉES ET MÉTHODES.....	8
2.1 Réseau, lieux, période, prélèvement, paramètres et mesures.....	8
2.2 Méthode d'analyse des séries.....	9
3. RÉSULTATS.....	10
3.1 Cadmium.....	10
3.2 CB153.....	17
3.3 Cuivre.....	24
3.4 Fluoranthène.....	26
3.5 Mercure.....	34
3.6 Plomb.....	41
3.7 Synthèse des résultats.....	48
4. DISCUSSION.....	48
5. CONCLUSION.....	50
6. BIBLIOGRAPHIE.....	52
7. ANNEXE 1 : CARACTÉRISTIQUES DES SÉRIES TEMPORELLES.....	53
8. ANNEXE 2 : MÉTHODES ET LABORATOIRES.....	55
9. ANNEXE 3 : REPRODUCTION DE LA SECTION MÉTHODE DU PRÉCÉDENT RAPPORT.....	57
10. ANNEXE 4 : PRÉSENTATION DES GRAPHIQUES UTILISÉS.....	63
11. ANNEXE 5 : DÉTAILS DES EXPERTISES CADMIUM.....	67

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 des paramètres de contaminations chimiques (cadmium, cuivre, CB153, fluoranthène, mercure, plomb) mesurés dans les huîtres et les moules prélevées sur les lieux de surveillance de l'estuaire de la Seine (*i.e.* « Cap de la Hève », « Villerville »), en Gironde (*i.e.* « La Fosse »), dans le bassin d'Arcachon (*i.e.* « Les Jacquets », « Comprian »), dans le Golfe de Fos (*i.e.* « Pointe St. Gervais ») et dans la petite rade de Toulon (*i.e.* « Toulon Lazaret »).

La pertinence des DLM entraîne généralement la validation de la nécessaire expertise thématique. Bien que la relation moyenne-variance n'ait pas été observée sans ambiguïté pour tous les modèles, le caractère log-normal des distributions des contaminants est très vraisemblable. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient globalement de -20 % à -30 % pour la borne inférieure et de 30 % à 60 % pour la borne supérieure pour les contaminants métalliques. Ces résultats sont compatibles avec l'expérience experte. Pour les courtes séries des contaminants organiques les valeurs sont de l'ordre de -35 % pour la borne inférieure et pour la borne supérieure, de 80 % à 96 % pour le CB153 et de 100 % à 198 % pour le fluoranthène. Pour ce dernier, la multiplication des laboratoires et des méthodes impliquées est sans doute une cause de la grande variabilité.

Mots clés (thématique et géographique) :

Incertitude, cadmium, cuivre, CB153, fluoranthène, mercure, plomb, modèle linéaire dynamique, estuaire de Seine, bassin d'Arcachon, Méditerranée, ROCCH.

1. INTRODUCTION

Dans le prolongement des précédents travaux (Soudant et al., 2018, 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.

La 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 $\pm 13,5$ %. Pour les deux paramètres, ces valeurs sont compatibles avec l'expérience des experts.

La seconde application concerne les mêmes lieux de surveillance et les paramètres physico-chimiques (température, turbidité, matières en suspension, oxygène dissous, nitrate+nitrite, ammonium, phosphate, silicate). 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 $0,05\text{ (mg/L)}^2$. 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.

L'objectif du présent travail consiste à étendre les analyses aux paramètres de contamination chimique (cadmium, CB153, cuivre, fluoranthène, mercure, plomb) mesurés dans les huîtres et les moules.

2. DONNÉES ET MÉTHODES

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

Les données utilisées sont celles du Réseau d'Observation des Contaminants Chimiques (ROCCH) et sont extraites de la base Quadrigé². Les lieux de surveillance sont situés en aval de l'estuaire de Seine (*i.e.* « Cap de la Hève », « Villerville »), en Gironde (*i.e.* « La Fosse »), dans le bassin d'Arcachon (*i.e.* « Les Jacquets », « Comprian »), dans le Golfe de Fos (*i.e.* « Pointe St. Gervais ») et dans la petite rade de Toulon (*i.e.* « Toulon Lazaret ») (*cf.* Figure 1), lieux sous la responsabilité des laboratoires environnement ressources (LER) Normandie, Arcachon et Provence-Azur-Corse. Aucune restriction n'a été imposée sur la fenêtre temporelle considérée : toutes les données disponibles ont été utilisées. Les principales caractéristiques des séries de données sont indiquées en annexe 1.

Les coquillages, huîtres (*i.e.* *Crassostrea gigas* sur la côte atlantique) et moules (*i.e.* *Mytilus edulis* en estuaire de Seine et *Mytilus galloprovincialis* en Méditerranée), sont prélevés sur des bancs sauvages ou sur des supports d'élevage, à marée basse en Manche-Atlantique et en sub-surface en Méditerranée. Les coquillages sont choisis de manière à ne prendre que des individus présents sur sites depuis plus de six mois, de taille adulte. Rapidement après prélèvement, ils sont épurés vivants durant au minimum 18 heures dans de l'eau de mer propre pour éliminer les particules alimentaires non digérées puis écoquillés, égouttés et congelés en vue d'un transport jusqu'à Nantes. Une partie de l'échantillon est analysée au Laboratoire Ifremer Biogéochimie des Contaminants Métalliques pour les éléments traces métalliques ou par un laboratoire tiers pour les familles de contaminants chimiques organiques (*e.g.* hydrocarbures, pesticides). La première étape de l'analyse consiste en un broyage-homogénéisation, suivie d'une lyophilisation des tissus de mollusques. La base résultante est ensuite soumise à un protocole d'analyse spécifique en fonction des contaminants. Les laboratoires en charge des analyses et les méthodes mises en œuvre sont donnés en annexe 2.

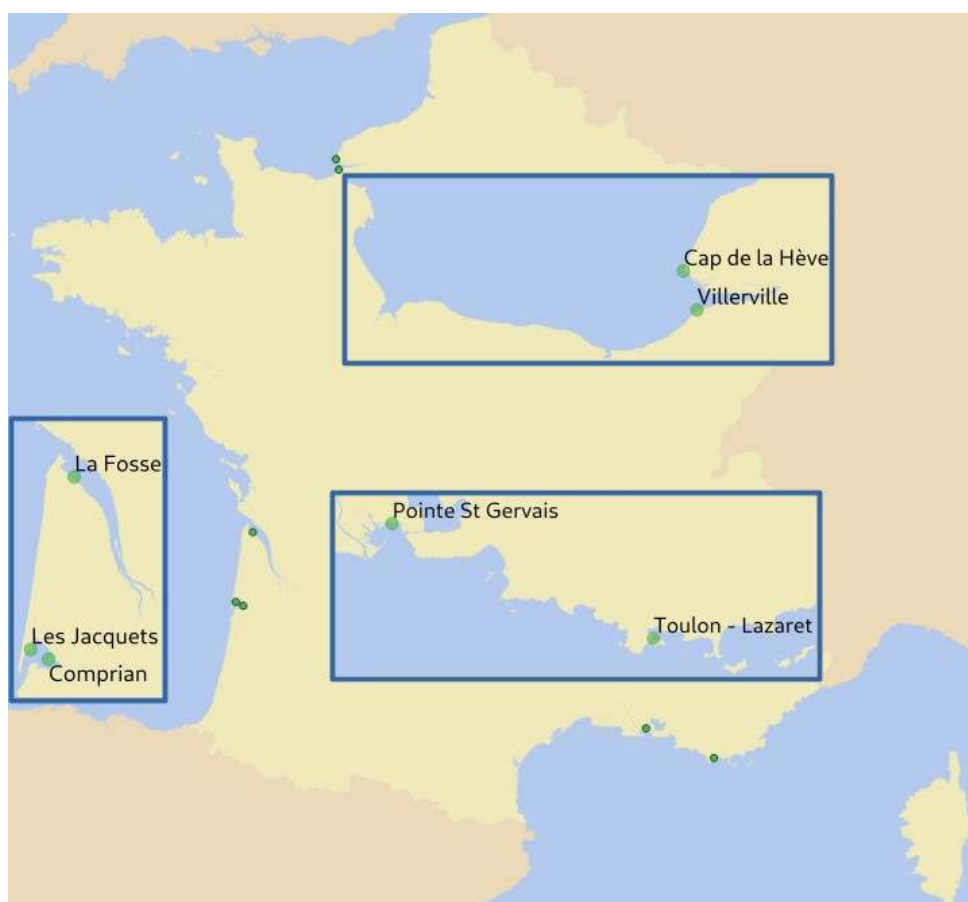


Figure 1: Positions géographiques des lieux de surveillance considérés.

Les moules régulant leur concentration en cuivre, seules les séries de mesures effectuées dans les huîtres sont considérées pour ce contaminant.

2.2 MÉTHODE D'ANALYSE DES SÉRIES

La méthode d'analyse statistique est similaire à celle utilisée dans la précédente étude (Soudant et al., 2016). Le paragraphe « méthodes » du premier rapport est reproduit pour information en Annexe 3 (p. 57). La méthode utilisée est différente sur un point. À l'expérience des précédents travaux, il est apparu d'une part que les suggestions de données exceptionnelles étaient toujours validées à l'issue de l'expertise thématique, alors que d'autre part, les changements de niveaux pouvaient être plus difficiles à retenir. Afin d'en tenir compte, au lieu d'identifier à chaque modèle conjointement des suggestions de valeurs exceptionnelles et de changements de niveau, il a été décidé d'identifier et traiter en priorité les valeurs exceptionnelles, et de ne traiter les changements de niveaux que lorsqu'il n'y a plus de suggestions de valeurs exceptionnelles. De cette manière, l'expertise « automatique » peut présenter un modèle traitant uniquement des valeurs exceptionnelles avant des changements de niveau éventuels.

Le modèle mis en œuvre ne comporte qu'une seule harmonique en cohérence avec l'évolution annuelle connue des concentrations liées à la physiologie des bivalves.

L'expérience du traitement des séries de contaminants de tous les LERs amène à considérer l'existence d'une relation entre la variance et la moyenne, telle qu'observée avec les distributions log-normales. Par voie de conséquence, une transformation logarithmique de base e^a a été utilisée pour stabiliser la variance et ainsi respecter ou se rapprocher au plus près de l'hypothèse d'homoscédasticité du modèle.

Une contrainte de l'approche « série temporelle » réside dans la nécessité de déterminer l'unité temporelle de base de l'analyse. Ainsi, en tenant compte de la stratégie de prélèvement, de sa fréquence théorique d'observation et de son application effective à travers les données, il s'agit de déterminer la taille de l'unité de temps (e.g. jour, semaine, quinzaine, mois) pour laquelle on attend au plus une observation. Du choix de cette unité s'ensuit deux conséquences 1) des unités temporelles devront être créées avec comme observation une donnée manquante dans le cas où elles ne contiennent pas une date de prélèvement, 2) les unités temporelles présentant plus d'une observation doivent être ramenées à une observation en utilisant un opérateur d'agrégation (e.g. médiane, maximum, minimum, moyenne). Opérationnellement, un processus automatique détermine pour chaque série son unité temporelle optimale minimisant le nombre d'unités générées avec une donnée manquante et celui pour lequel une agrégation temporelle a été nécessaire, le choix de l'opérateur d'agrégation étant la médiane.

Pour le fluoranthène, les séries de chacun des lieux présentent au plus 2 mesures par an et les saisons échantillonnées sont l'automne et l'hiver. La notion de saison renvoie à celle d'un plan d'échantillonnage trimestrielle, rencontré par ailleurs avec les autres contaminants, et induit ainsi un modèle à la saisonnalité trimestrielle. Cependant, l'optimisation numérique d'un modèle pour lequel certaines unités temporelles de la saisonnalité n'ont jamais été observées, ici le printemps et l'été, conduit à une variance du niveau moyen biaisée, invalidant le modèle. Par voie de conséquence, pour les séries temporelles de fluoranthène, l'unité temporelle est contrainte à être l'année.

Dans la partie « Résultats », seuls seront donnés les graphiques des modèles résultant de l'expertise statistique et thématique. Les représentations graphiques utilisées sont présentées en annexe 4 (p. 63). À titre d'illustration, les étapes d'expertise et les éléments de diagnostic des modèles pour le cadmium sont donnés en annexe 5.

a. C'est-à-dire tel que $\ln(e)=1$, autrement dit logarithme naturel ou népérien.

3. RÉSULTATS

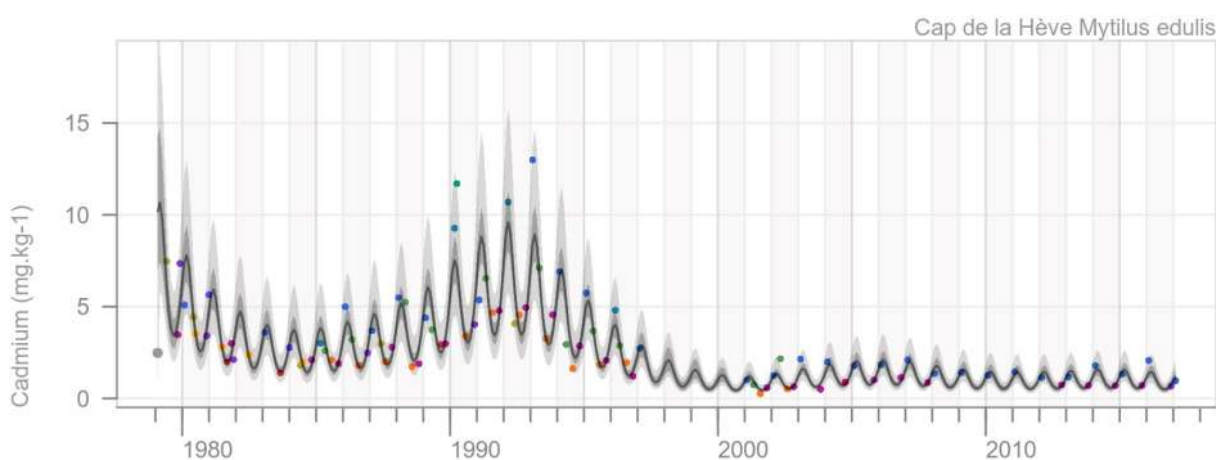
La première étape de l'analyse est la détermination pour chaque série de l'unité temporelle de traitement. Globalement c'est le trimestre qui est retenu, en cohérence avec la fréquence d'échantillonnage la plus fine qui ait été utilisée, avec les exceptions suivantes :

- comme évoqué précédemment, pour le fluoranthène les séries ont été traitées à l'échelle de l'année ;
- pour le cadmium, le mercure et le plomb au « Cap de la Hève », le mois a été retenu ;
- pour le cadmium à « Toulon Lazaret », le mois a été retenu.

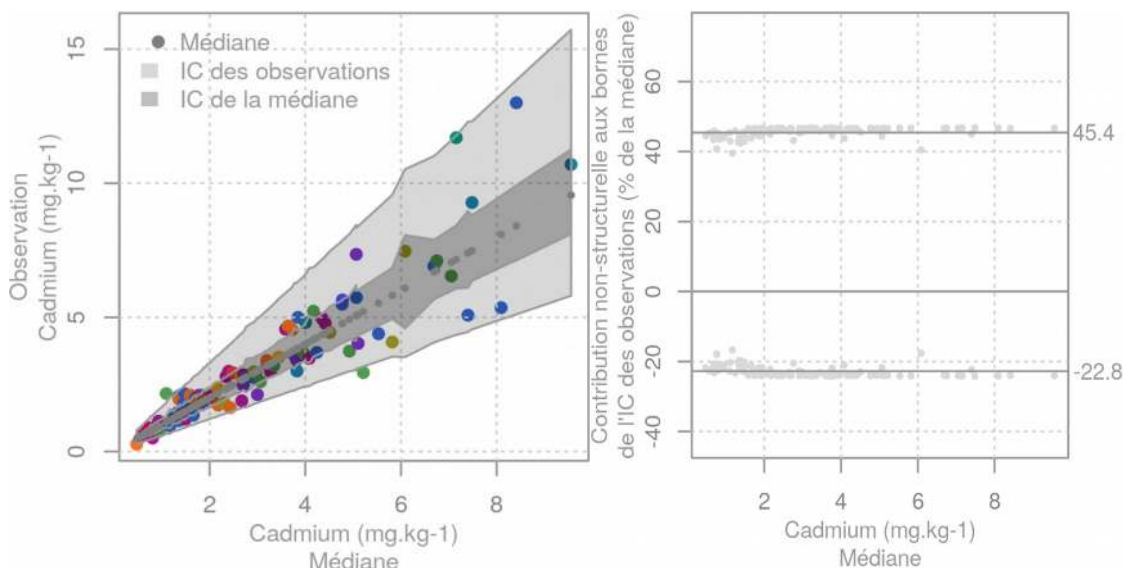
3.1 CADMIUM

Cap de la Hève

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



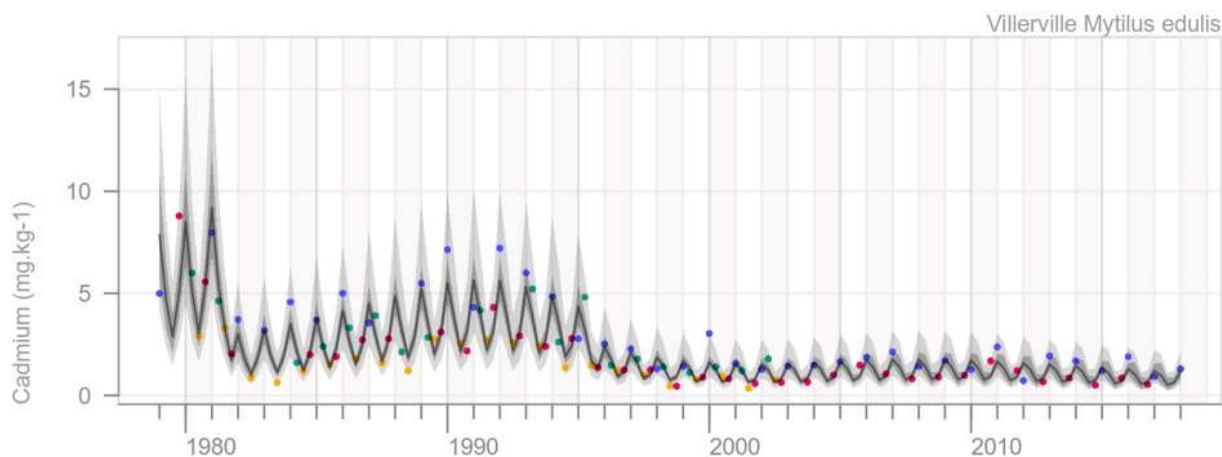
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle en février 1979.



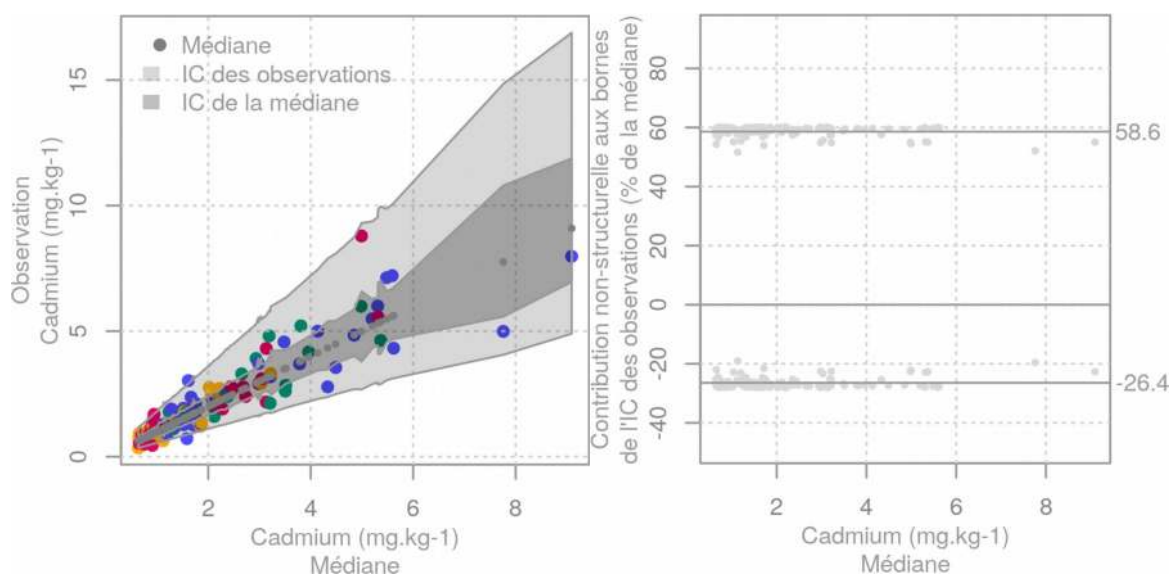
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +45 %).

Villerville

Le modèle retenu à l'issue de l'expertise thématique est le suivant :



Il comporte deux changements de niveau, à l'automne 1981 et à l'automne 1995.

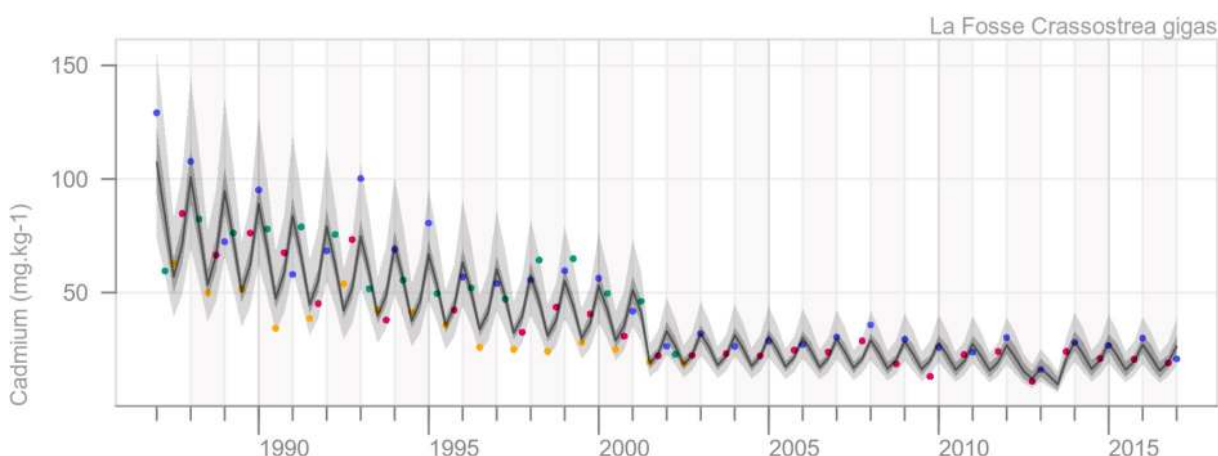


Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-26 %, +59 %).

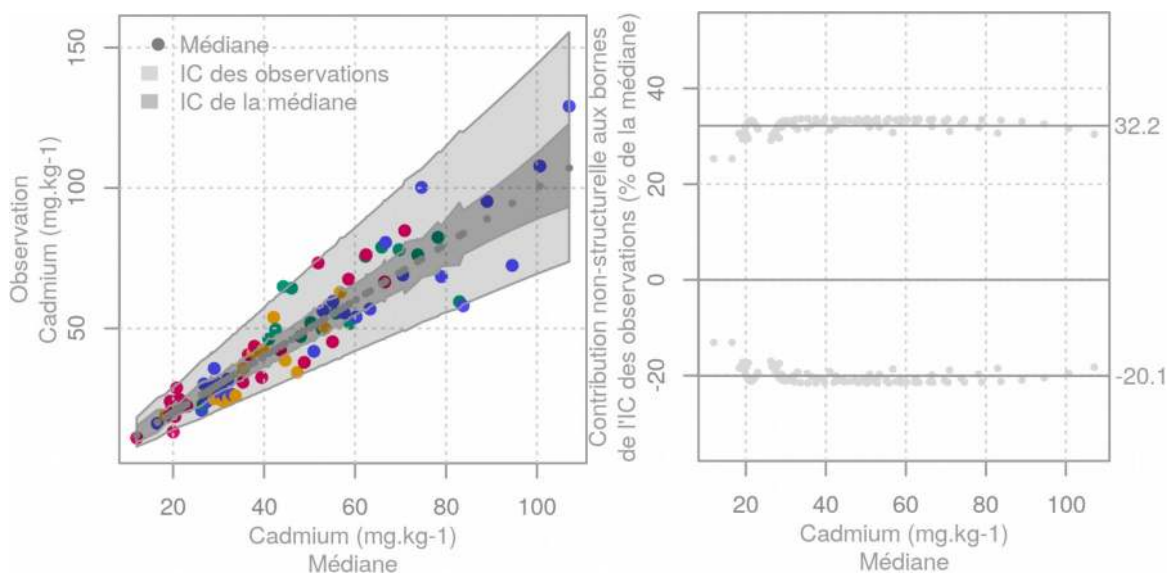
La Fosse

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987.

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Il comporte trois changements de niveau, à l'été 2001, automne 2012 et 2013.

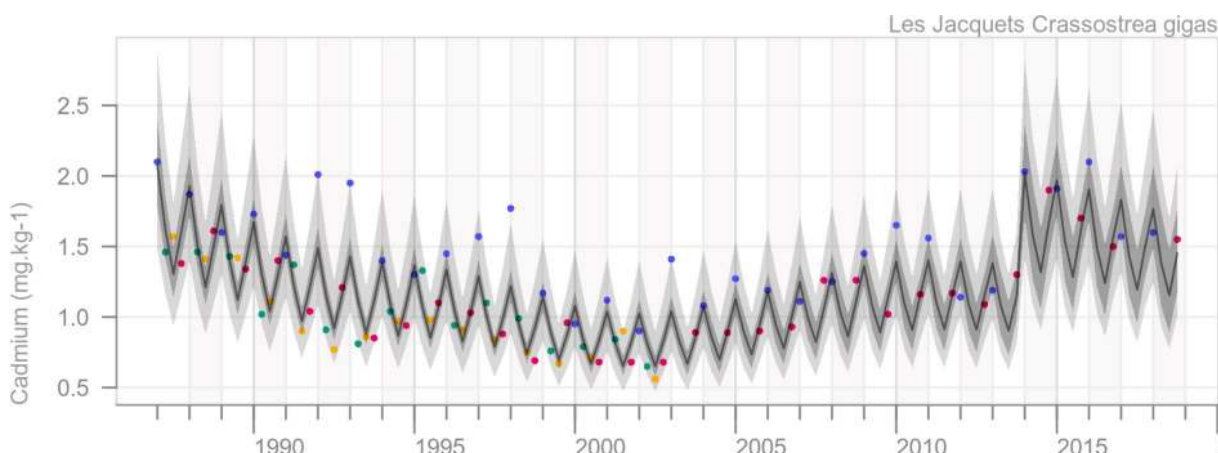


Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-20 %, +32 %).

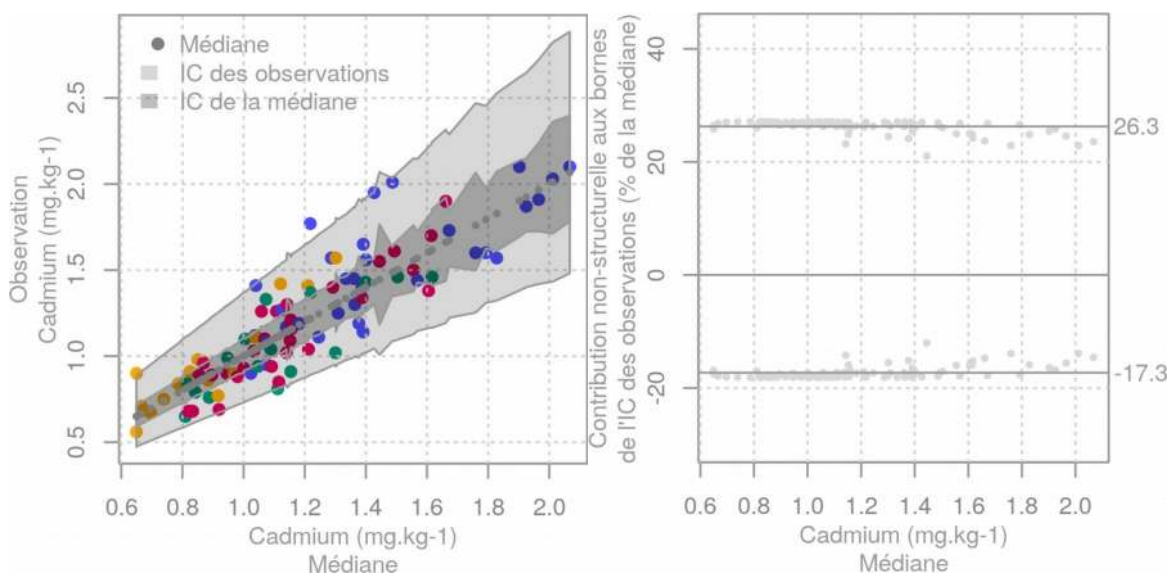
Les Jacquets

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987.

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Il comporte un changement de niveau à l'hiver 2014.

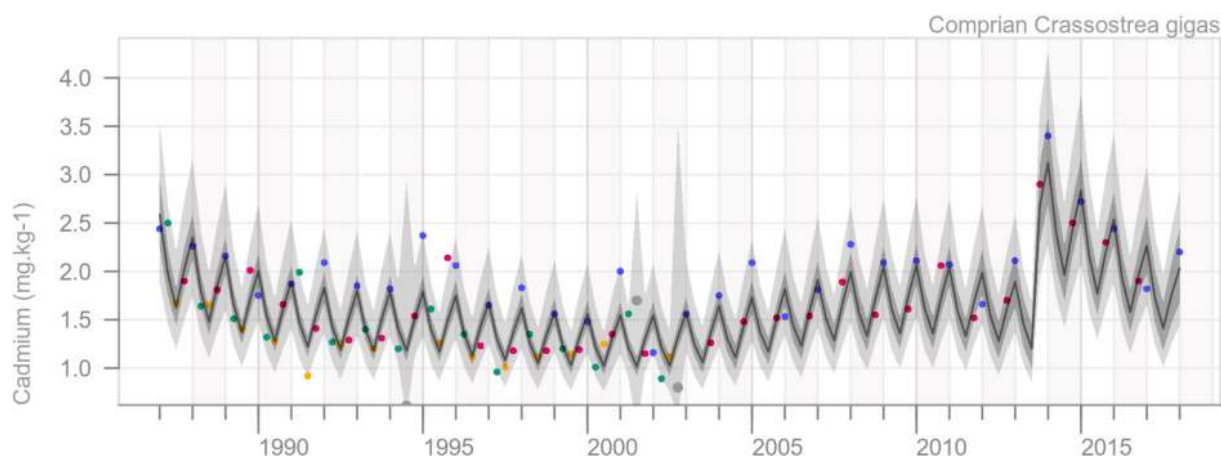


Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +26 %).

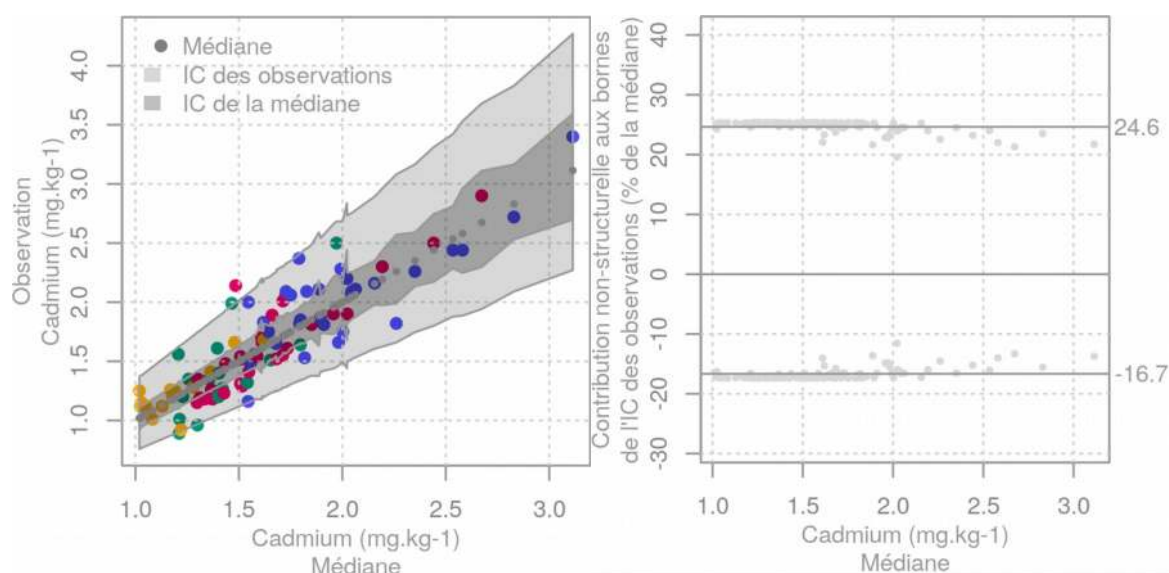
Comprian

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987.

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



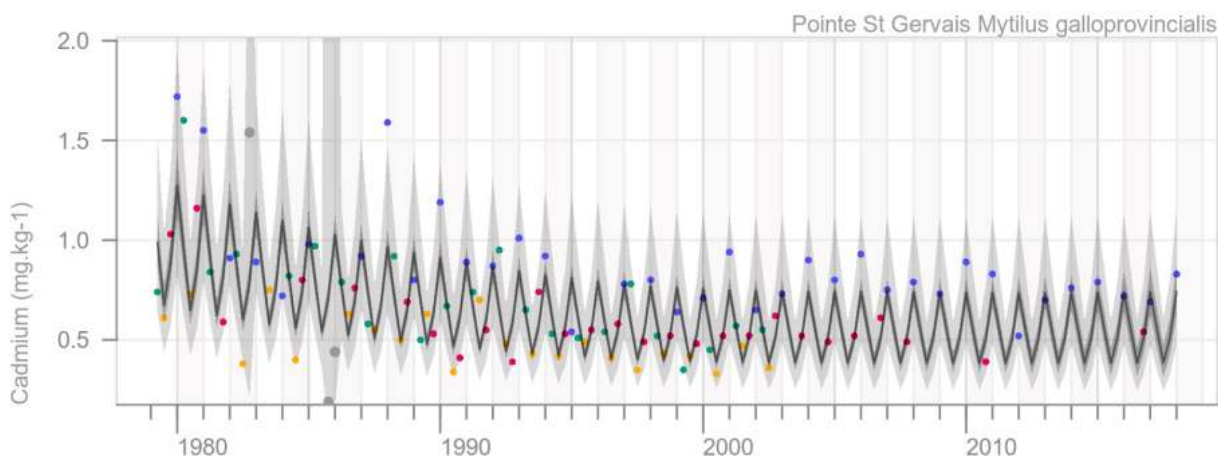
Les valeurs de l'été 1994 et de l'automne 2002 sont identifiées comme exceptionnelles, un changement de niveau est suggéré à l'automne 2013.



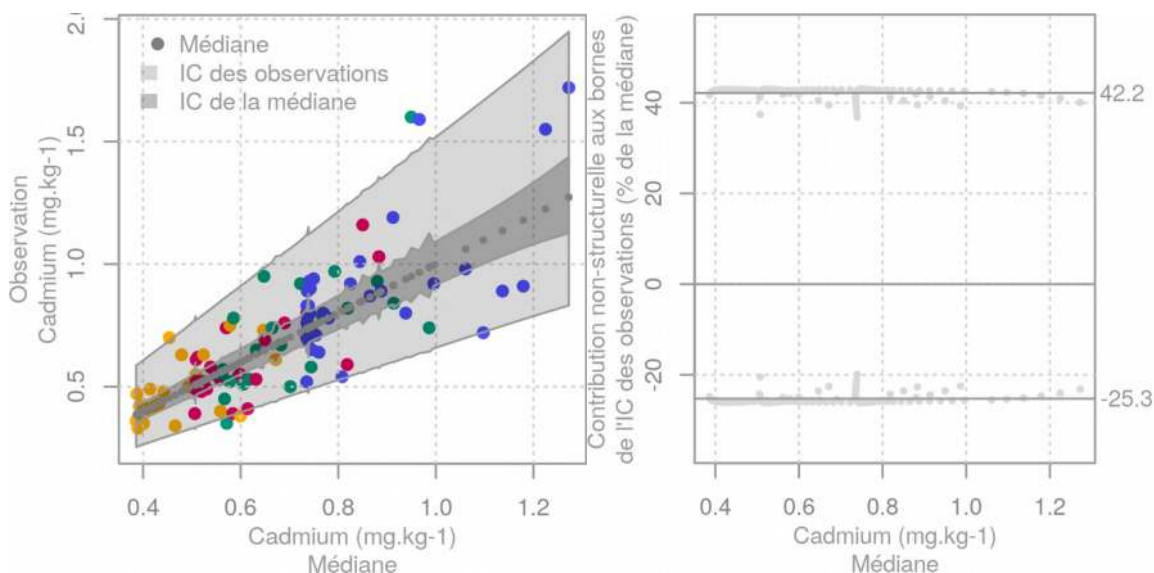
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +25 %).

Pointe St. Gervais

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



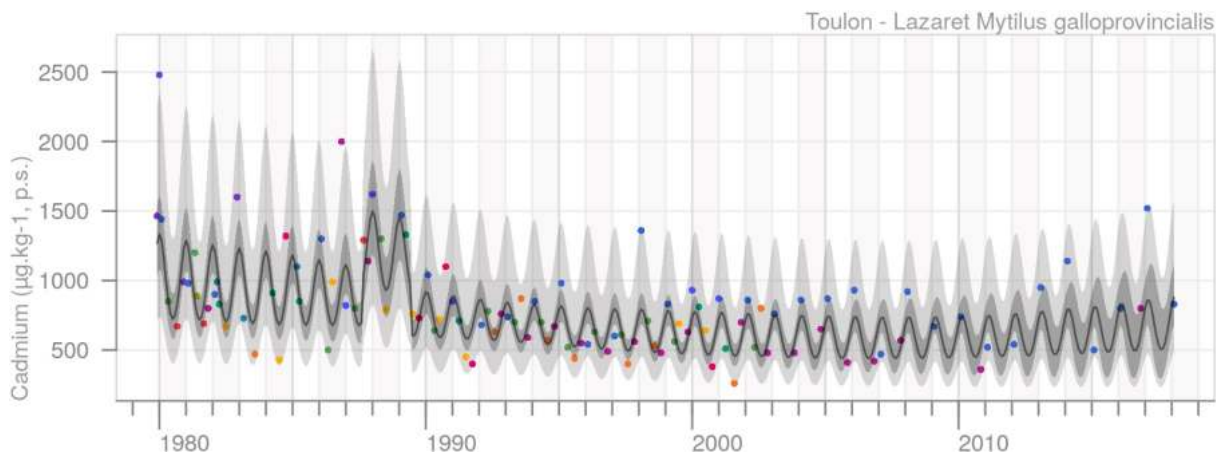
Il comporte trois valeurs exceptionnelles à l'automne 1982, l'automne 1985 et l'hiver 1986.



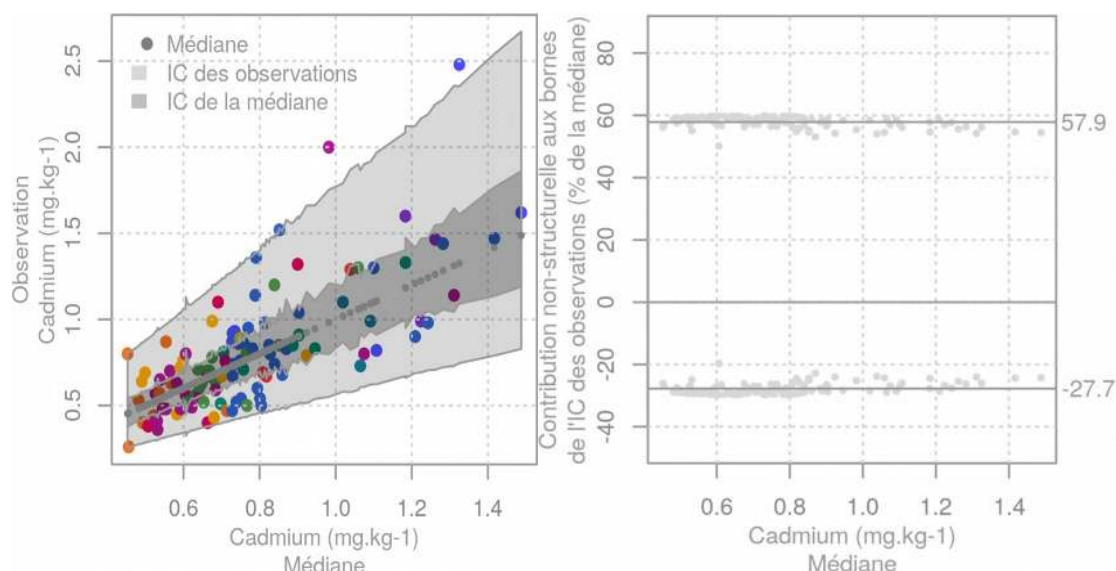
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-25 %, +42 %).

Toulon Lazaret

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Une période de changement de niveau est retenue de janvier 1987 à juillet 1989.



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-28 %, +58 %).

Synthèse concernant les incertitudes

Table 1: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre cadmium.

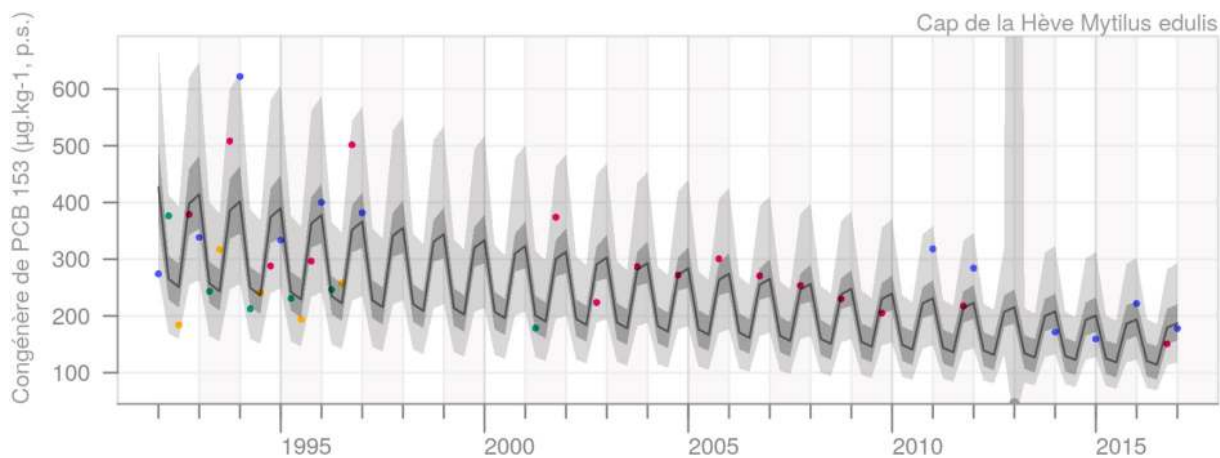
Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
Cap de la Hève	(-23 %, +45 %)
Villerville	(-26 %, +59 %)
La Fosse	(-20 %, +32 %)
Les Jacquets	(-17 %, +26 %)
Comprian	(-17 %, +25 %)
Pointe St. Gervais	(-25 %, +42 %)
Toulon Lazaret	(-28 %, +58 %)

Dans 6 cas sur 7, le modèle statistique a été retenu à l'expertise thématique. Les données montrent une variabilité qui va en augmentant avec la concentration. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de l'ordre de -20 % à -30 % pour la borne inférieure et de 30 % à 60 % pour la borne supérieure.

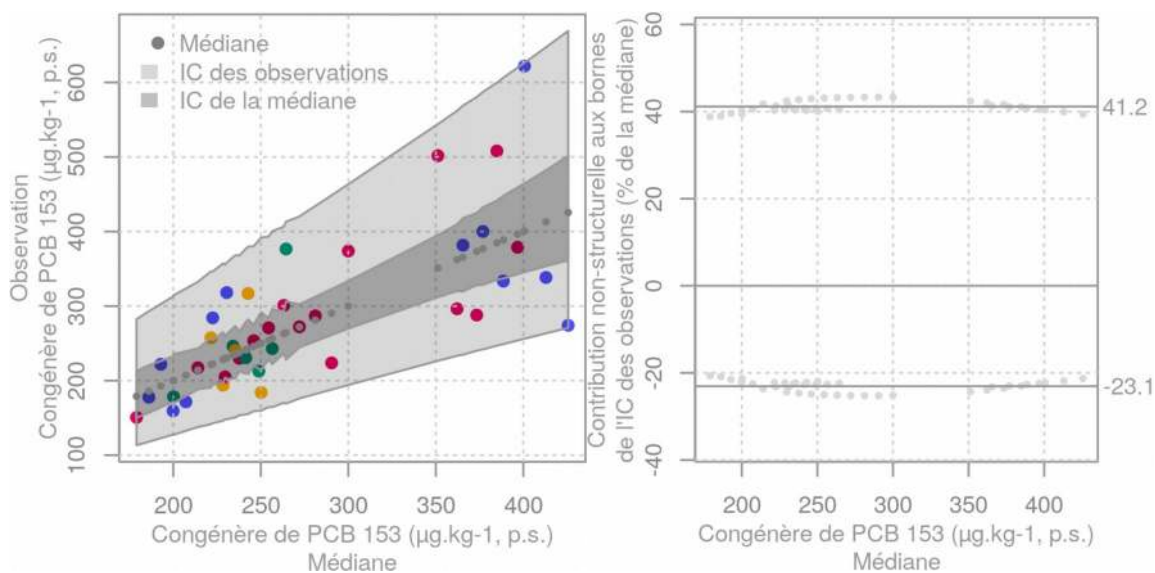
3.2 CB153

Cap de la Hève

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



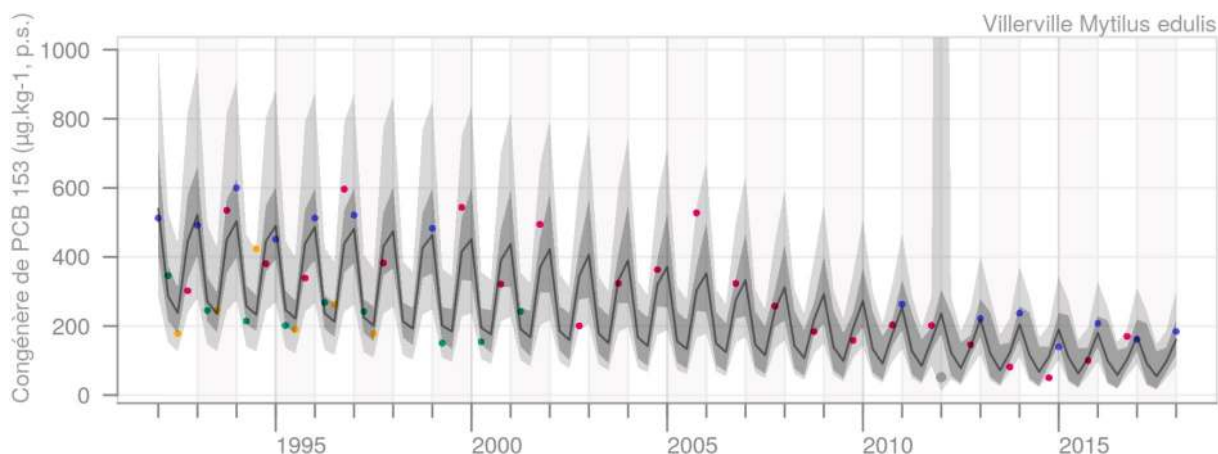
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'hiver 2013.



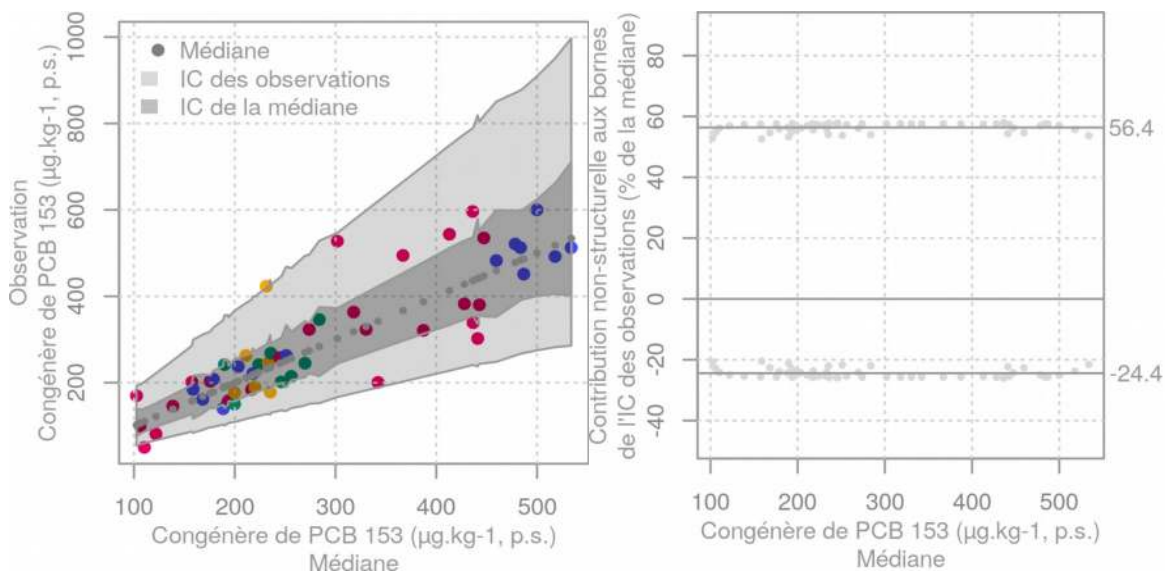
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +41 %).

Villerville

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



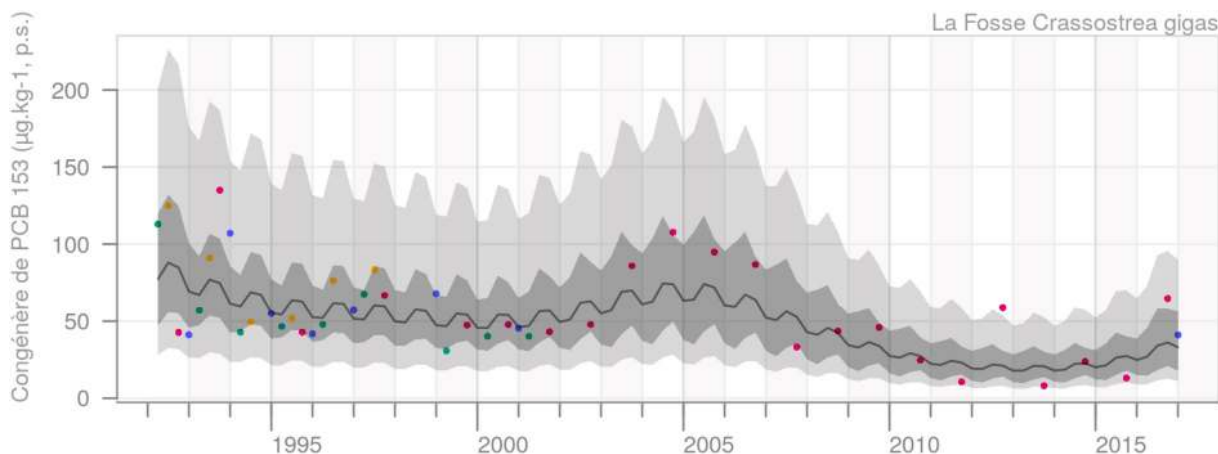
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'hiver 2012.



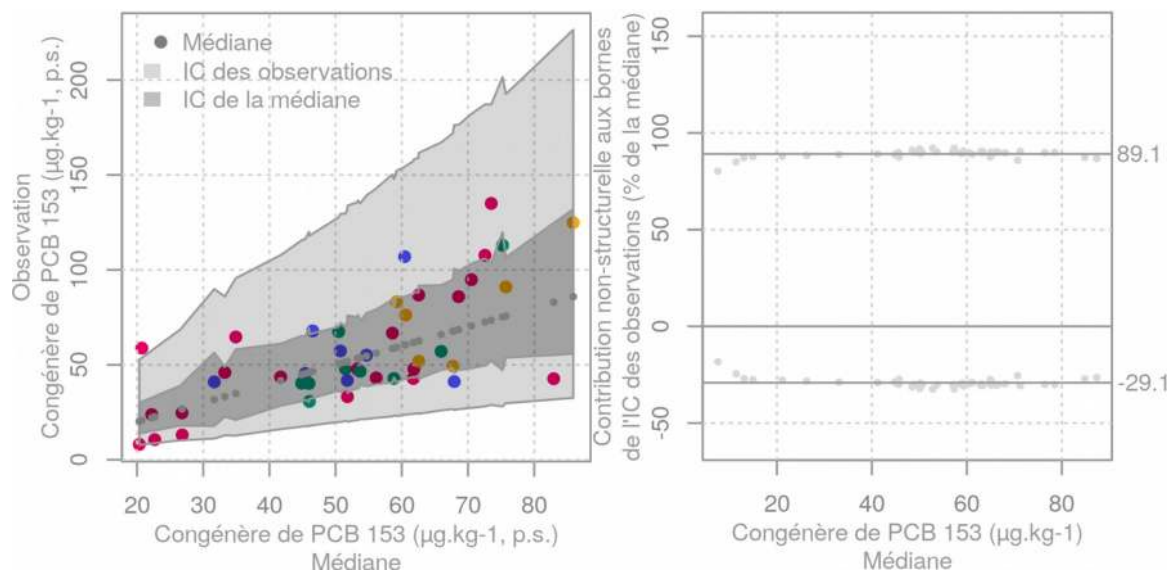
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-24 %, +56 %).

La Fosse

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



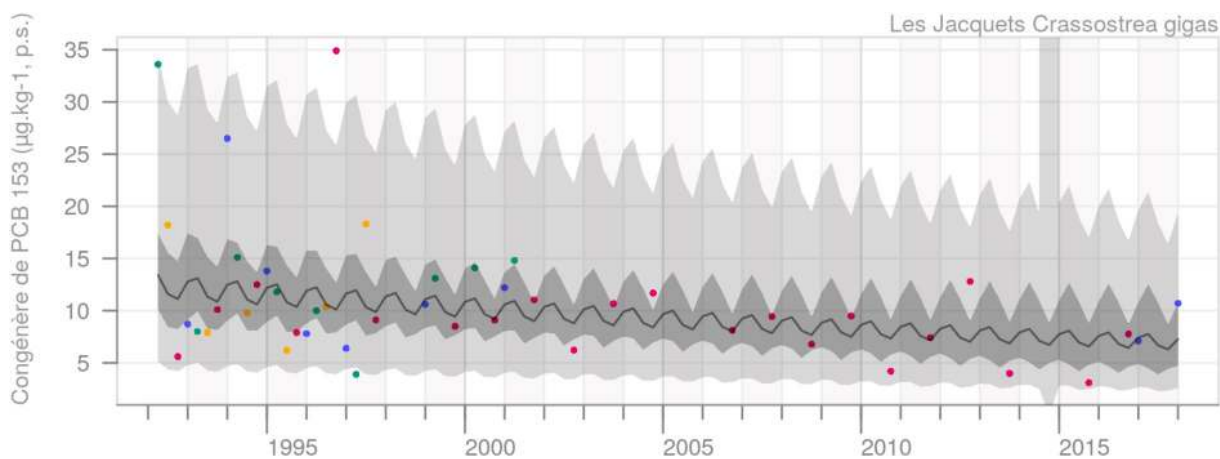
Aucune intervention n'est suggérée.



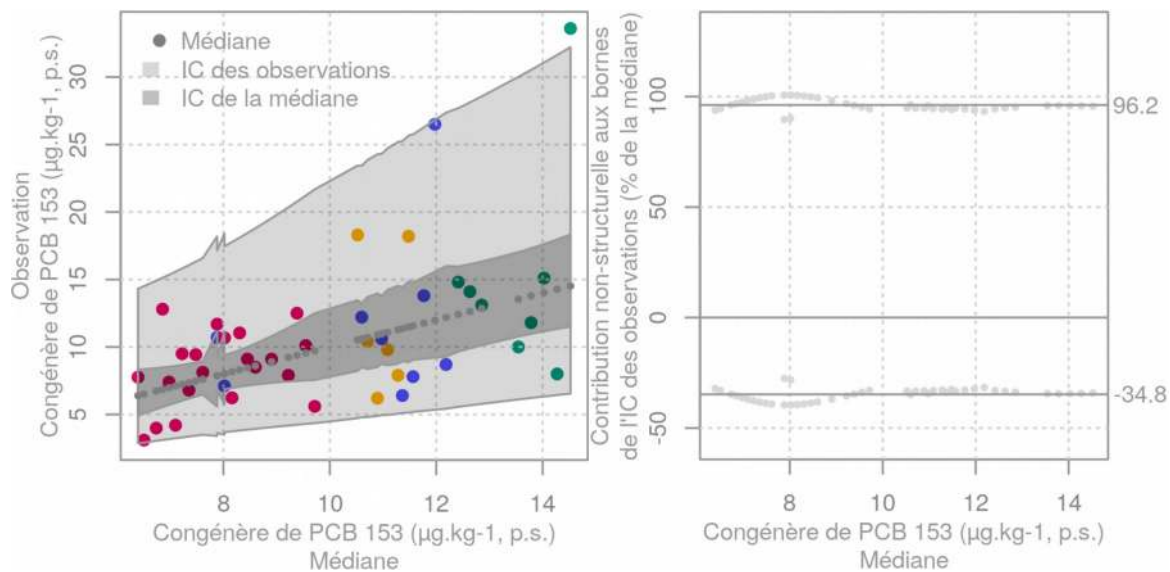
Les observations et leurs intervalles de confiance laissent supposer l'existence d'une relation moyenne variance. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-29 %, +89 %).

Les Jacquets

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



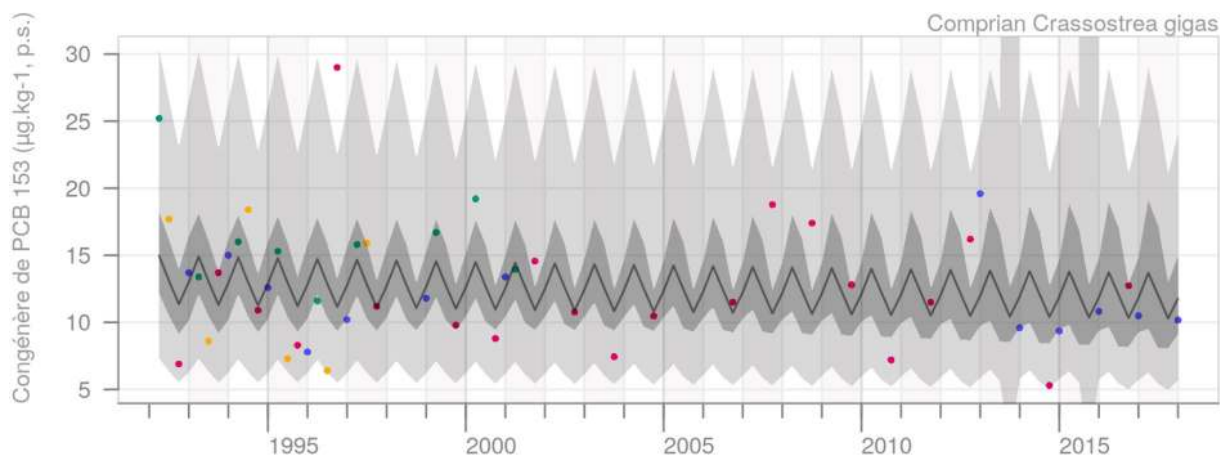
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'automne 2014.



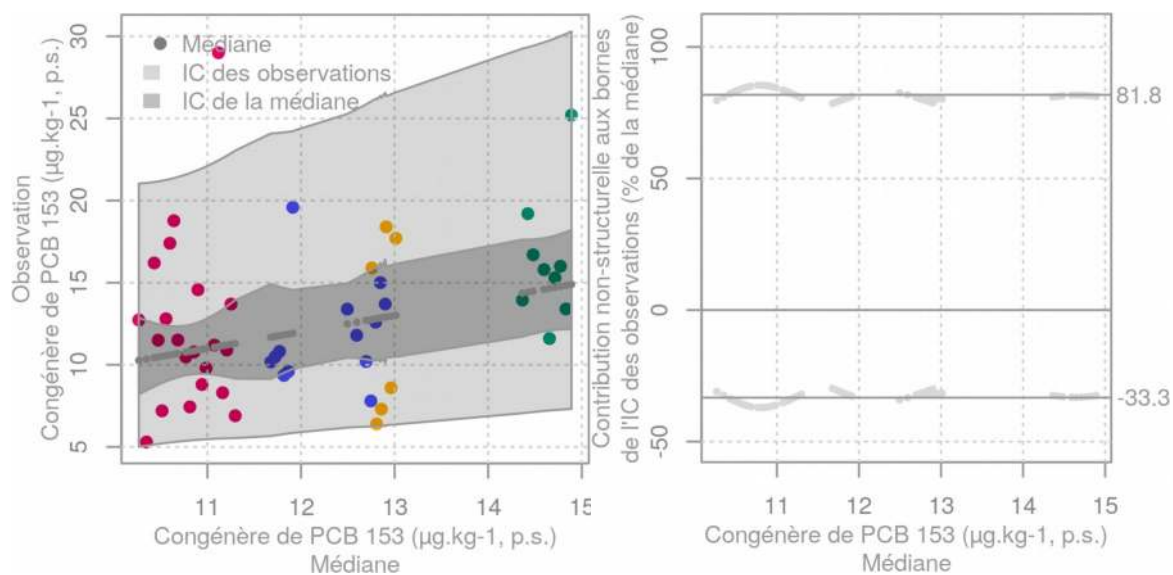
Les observations et leurs intervalles de confiance laissent supposer l'existence d'une relation moyenne variance. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-35 %, +96 %).

Comprian

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



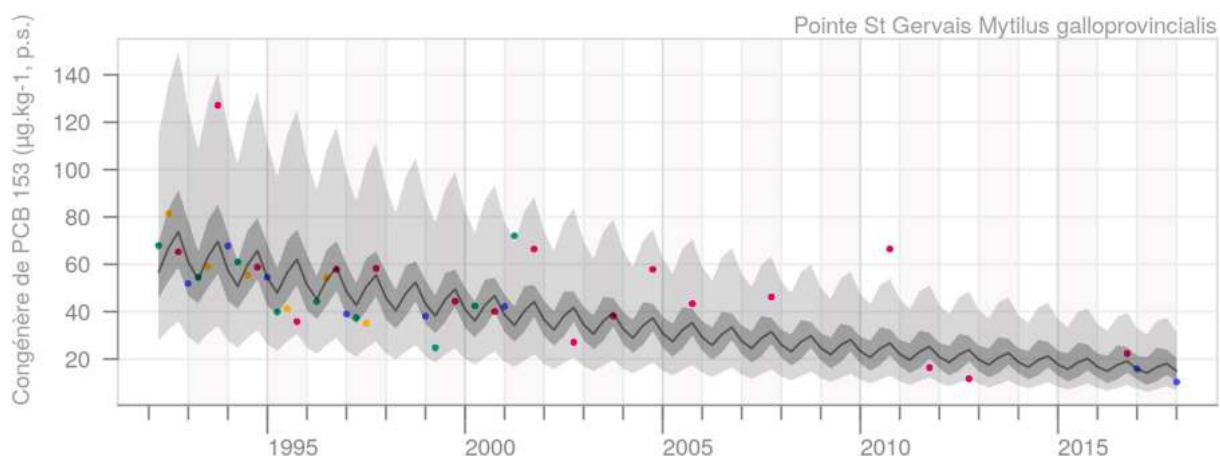
Deux valeurs sont identifiées comme exceptionnelles à l'automne 2014 et 2015.



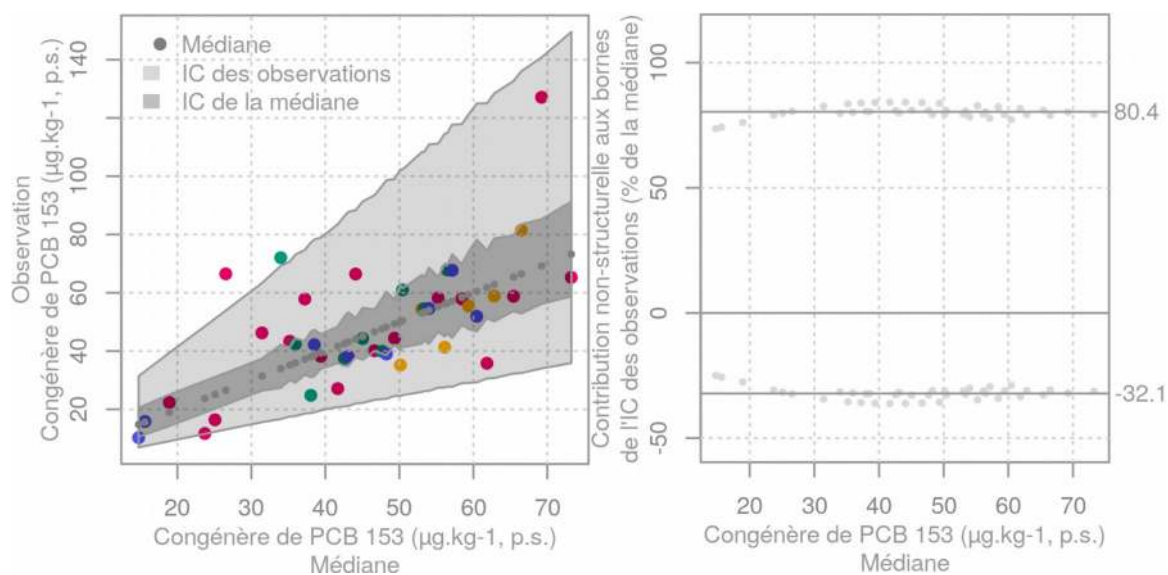
La distribution des données n'apporte pas d'évidence d'une relation moyenne variance. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-33 %, +82 %).

Pointe St. Gervais

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



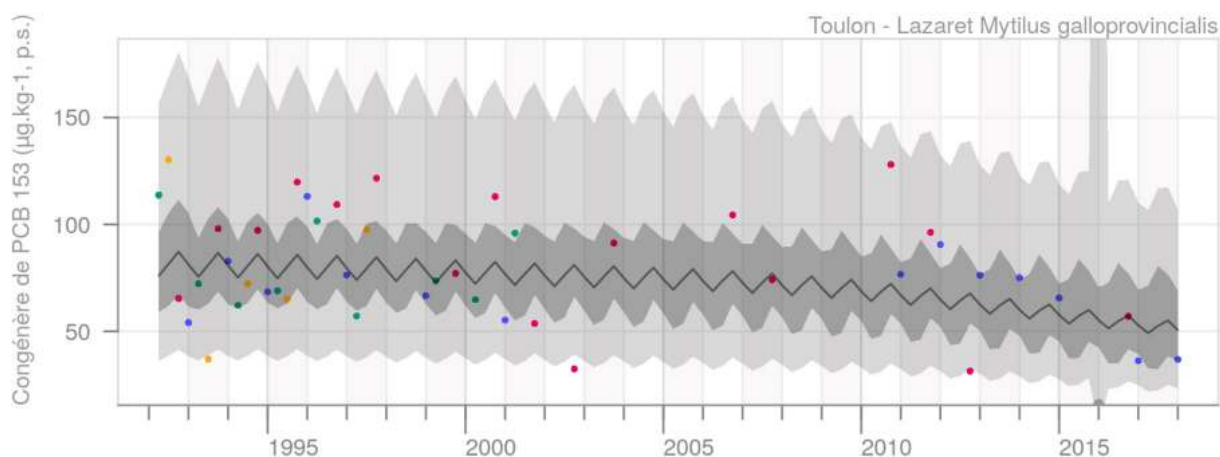
Aucune intervention n'est suggérée.



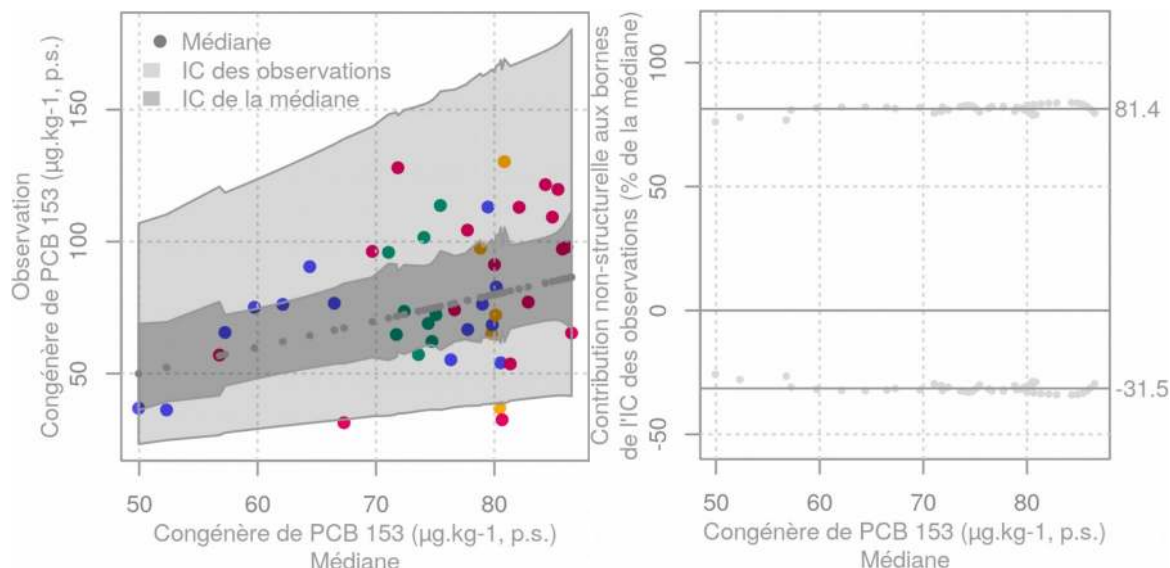
Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-32 %, +80 %).

Toulon Lazaret

Sur la base de l'expertise statistique, l'expertise thématique identifie une valeur fausse (*i.e.* automne 2005). À l'issue d'un nouveau traitement sans cette valeur, le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'hiver 2016.



La variabilité des mesures semble augmenter avec la concentration. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-32 %, +81 %).

Synthèse concernant les variances d'observation

Table 2: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre CB153.

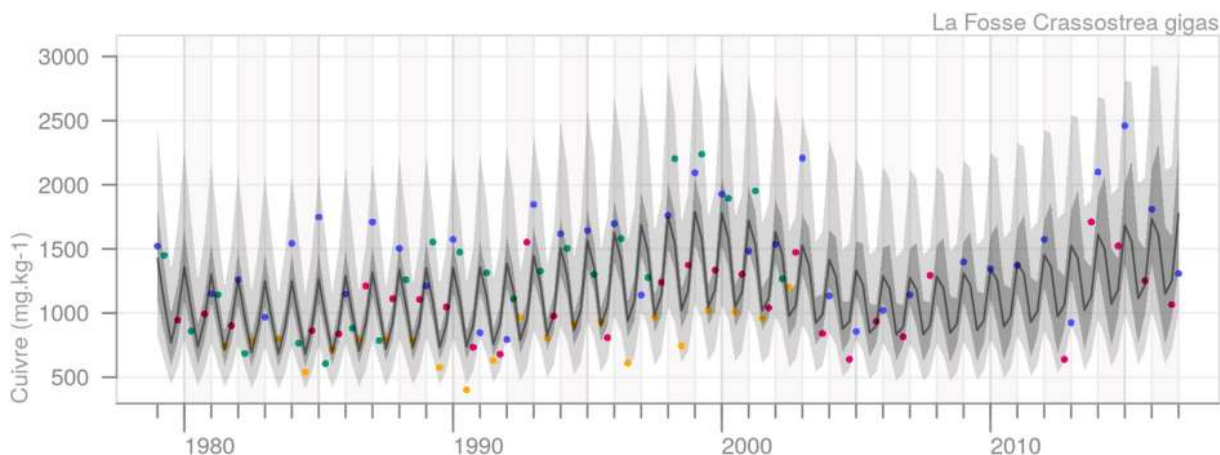
Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
Cap de la Hève	(-23 %, +41 %)
Villerville	(-24 %, +56 %)
La Fosse	(-29 %, +89 %)
Les Jacquets	(-35 %, +96 %)
Comprian	(-33 %, +82 %)
Pointe St. Gervais	(-32 %, +80 %)
Toulon Lazaret	(-32 %, +81 %)

Le modèle statistique a été toujours retenu à l'expertise thématique. Les données montrent une variabilité qui va en augmentant avec la concentration pour les lieux de l'estuaire de Seine. Cette relation est plus discutable pour les autres lieux. Pour ces derniers, les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -32 % à -35 % pour la borne inférieure et de 80 % à 96 % pour la borne supérieure. Elles sont moindres pour les lieux de l'estuaire de Seine.

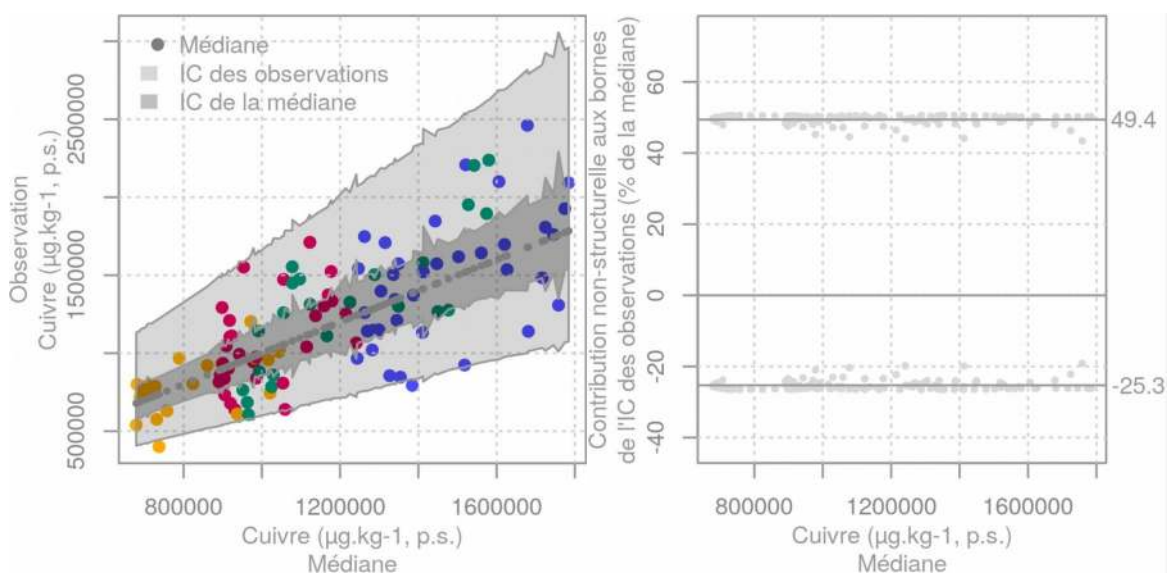
3.3 CUIVRE

La Fosse

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



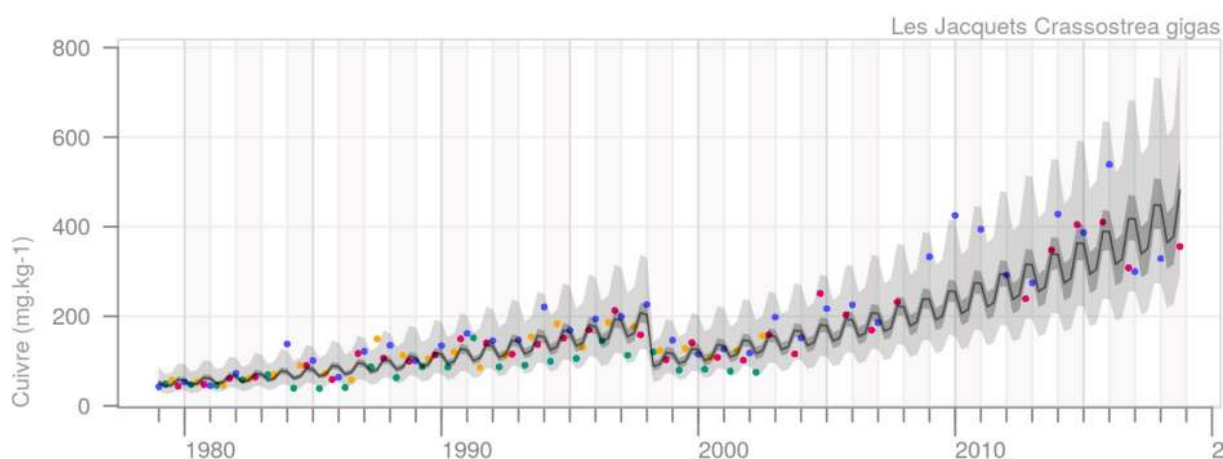
Aucune intervention n'est suggérée.



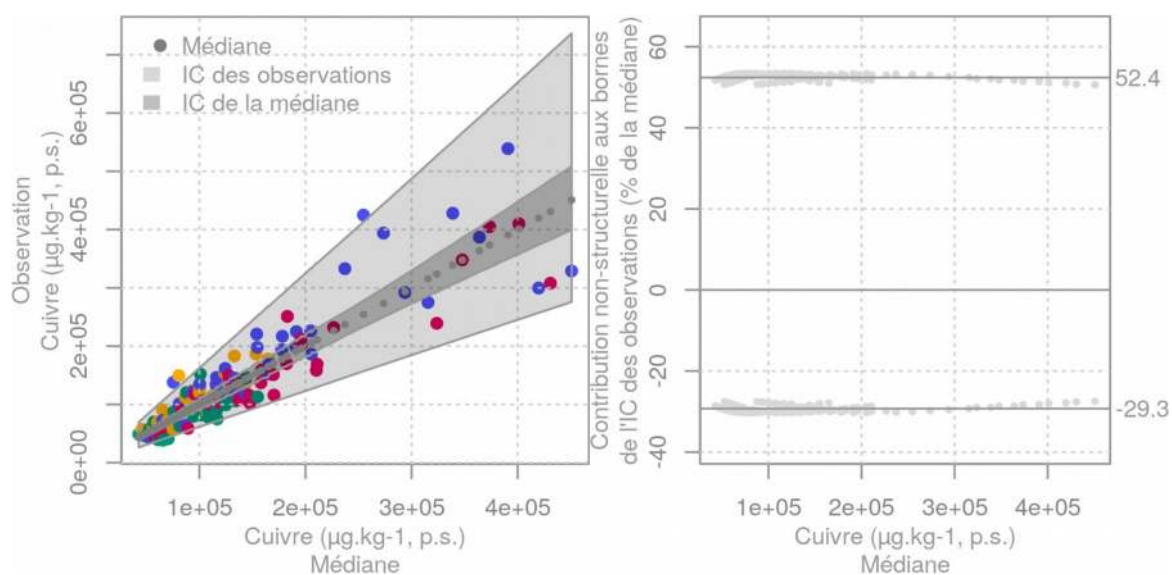
La dispersion des données forme un cône typique de la loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-25 %, +49 %).

Les Jacquets

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



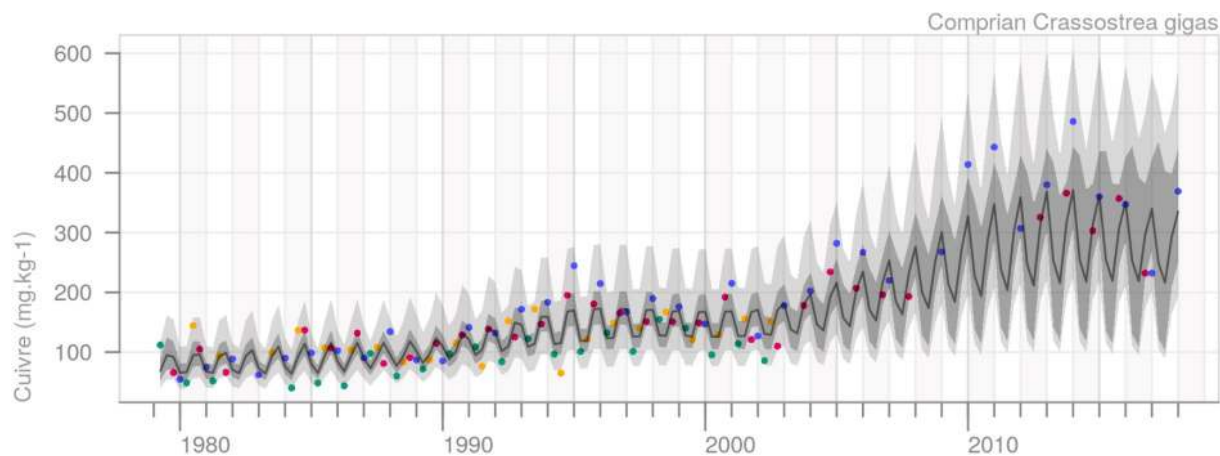
Un changement de niveau est retenu au printemps 1998.



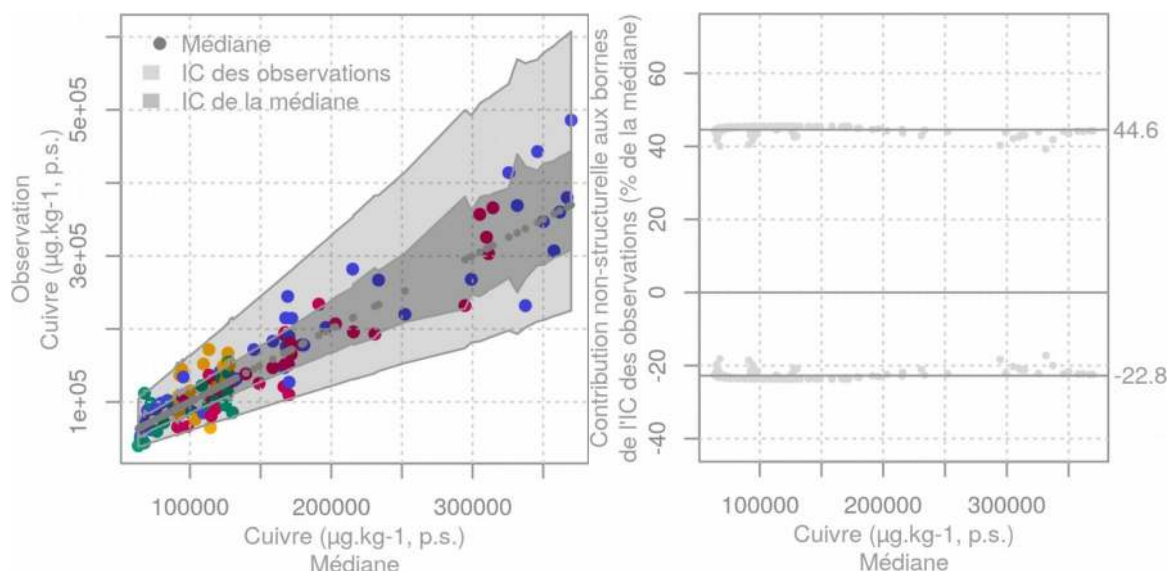
La dispersion des données forme un cône typique de la loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-29 %, +52 %).

Comprian

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Aucune intervention n'est suggérée.



La dispersion des données forme un cône typique de la loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +45 %).

Synthèse concernant les variances d'observation

Table 3: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre cuivre.

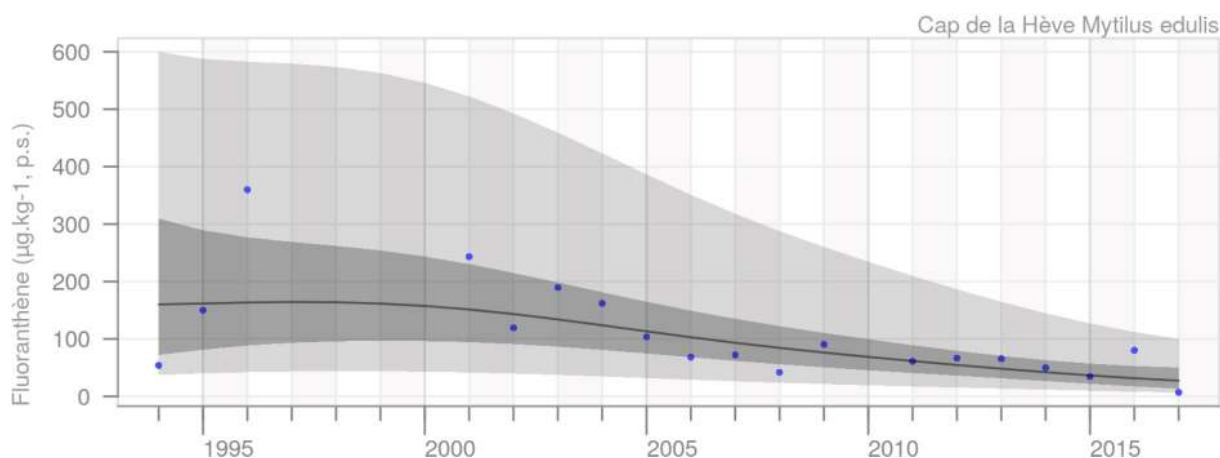
Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
La Fosse	(-25 %, +49 %)
Les Jacquets	(-29 %, +52 %)
Comprian	(-23 %, +45 %)

Le modèle statistique a été toujours retenu à l'expertise thématique. Les données montrent une variabilité qui va en augmentant avec la concentration. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -23 % à -29 % pour la borne inférieure et de 45 % à 52 % pour la borne supérieure.

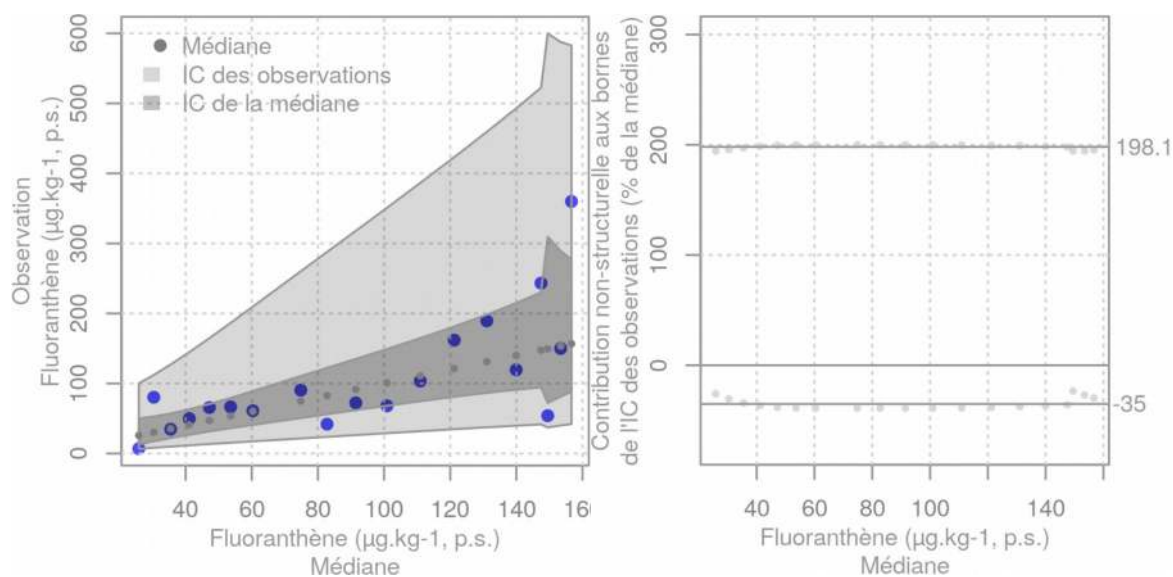
3.4 FLUORANTHÈNE

Cap de la Hève

Le premier modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



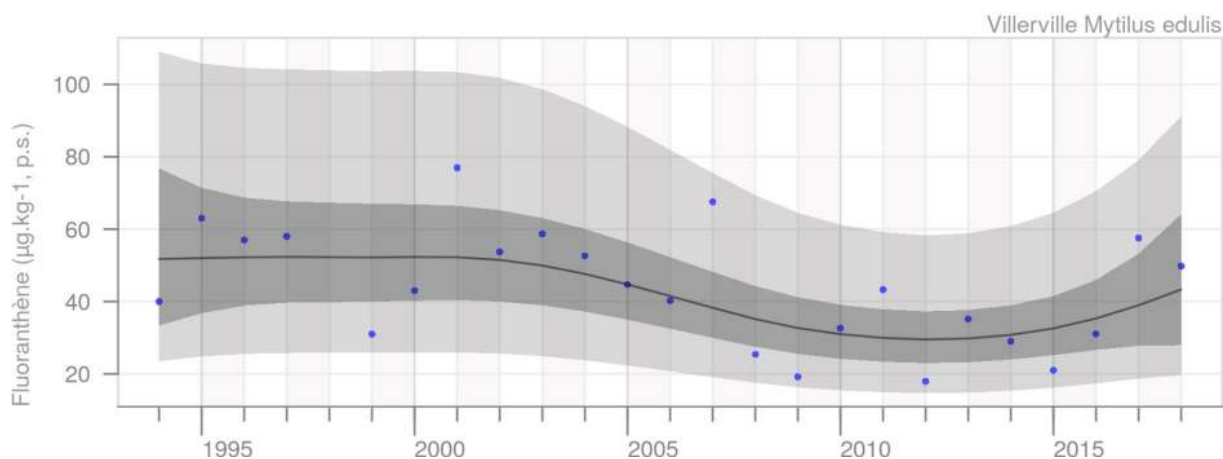
Aucune intervention n'est suggérée.



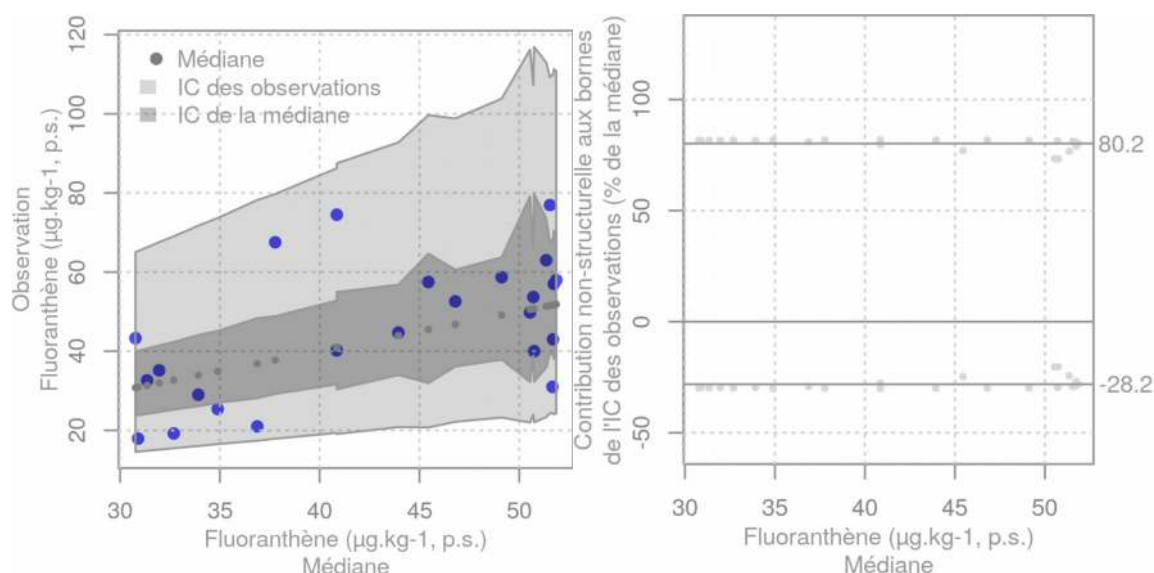
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-35 %, +198 %).

Villerville

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



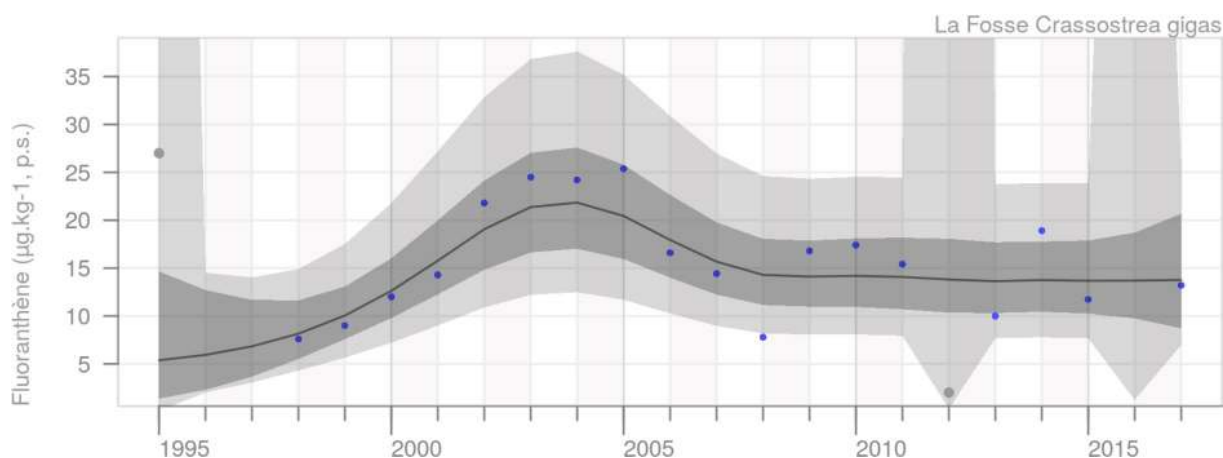
Aucune intervention n'est suggérée.



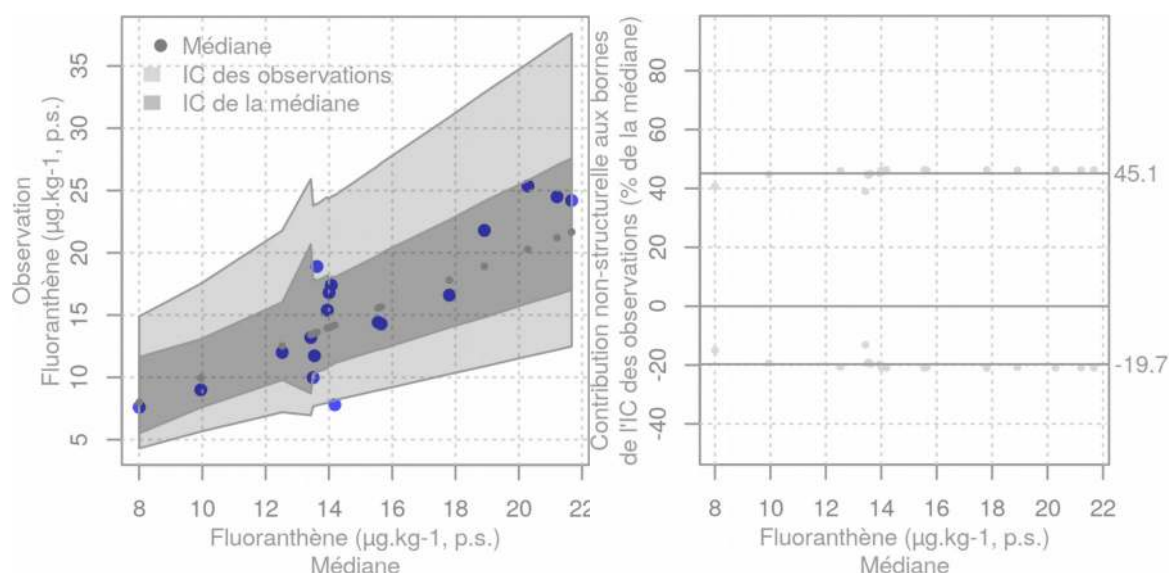
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-28 %, +80 %).

La Fosse

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



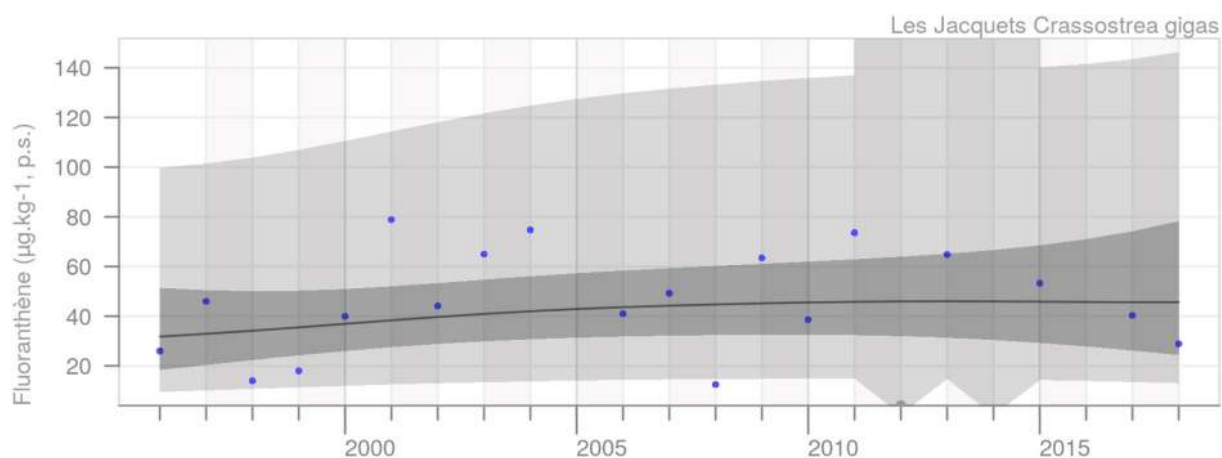
Il identifie trois valeurs exceptionnelles pour les années 1995, 2011 et 2016.



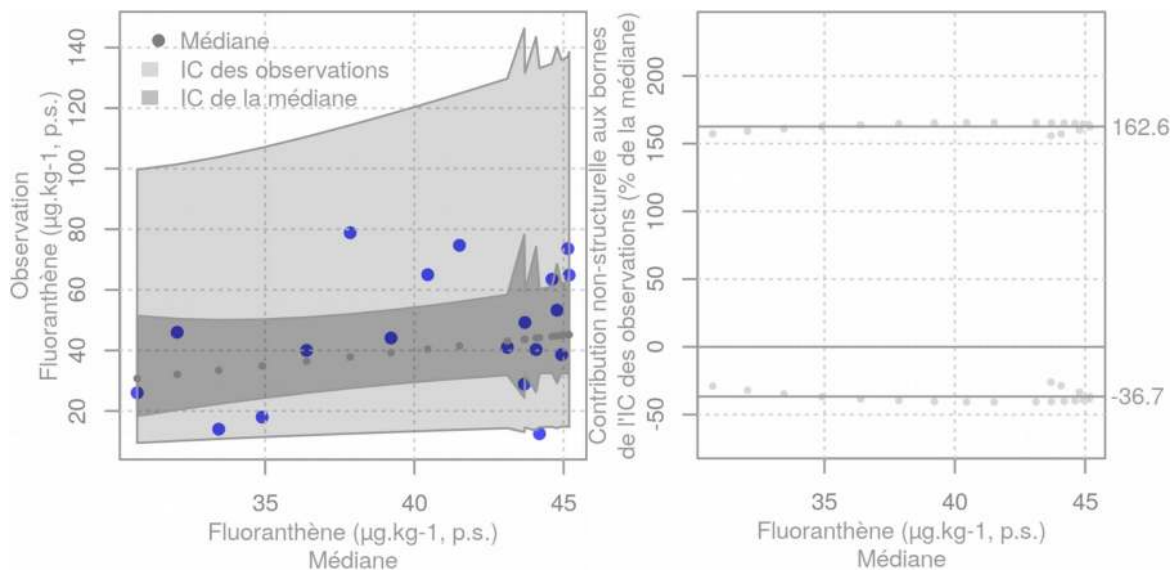
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-20 %, +45 %).

Les Jacquets

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



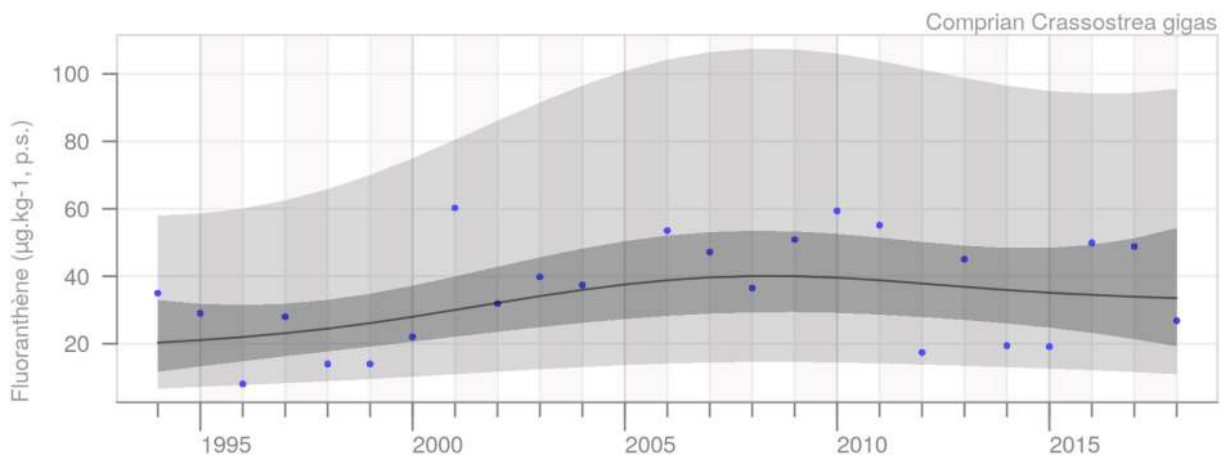
Il identifie deux valeurs exceptionnelles pour les années 2012 et 2014.



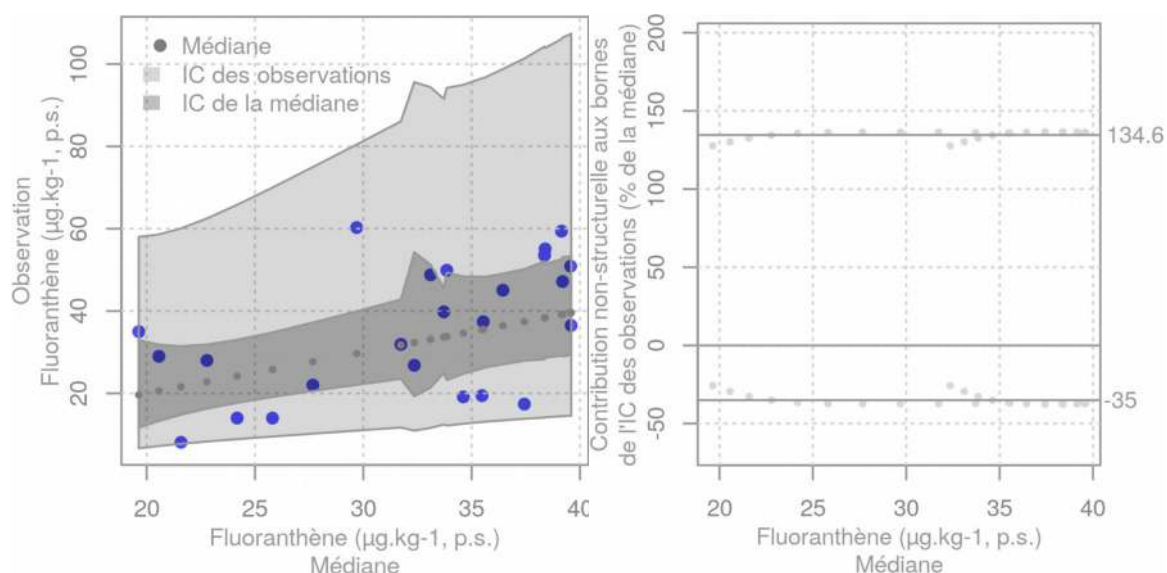
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont élevées : (-37 %, 163 %).

Comprian

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



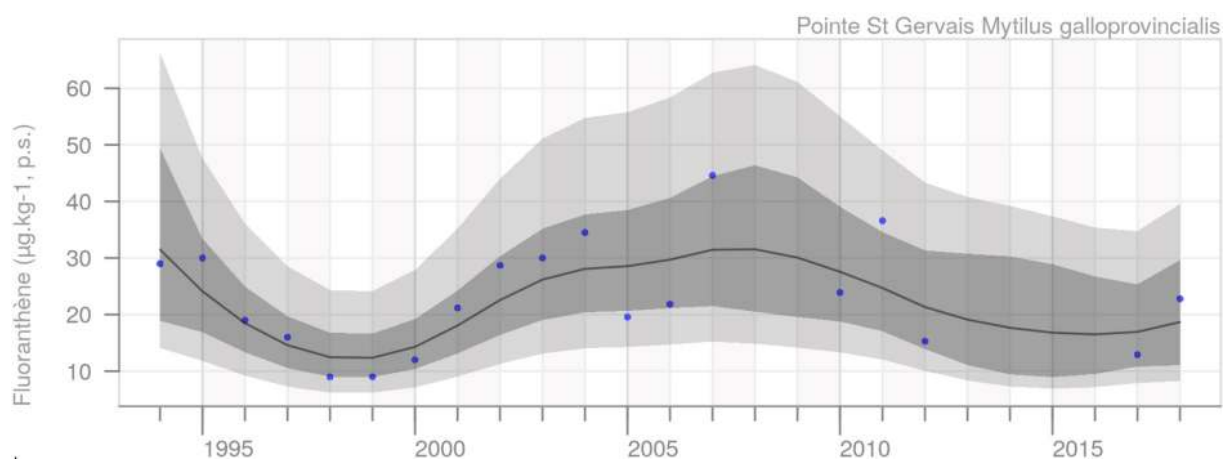
Aucune intervention n'est suggérée.



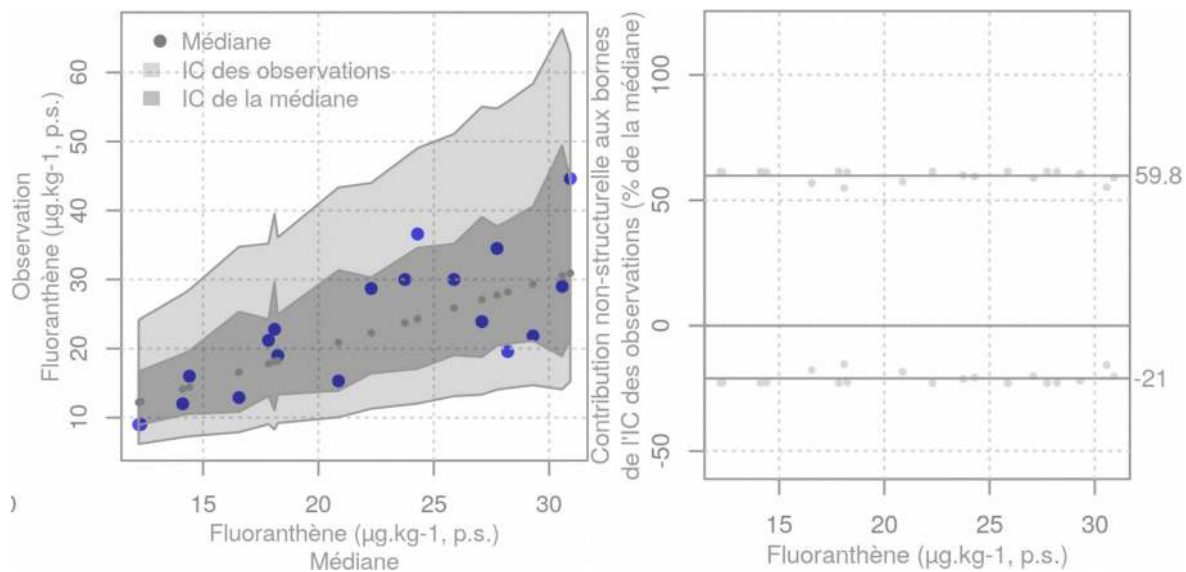
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-35 %, +135 %).

Pointe St. Gervais

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



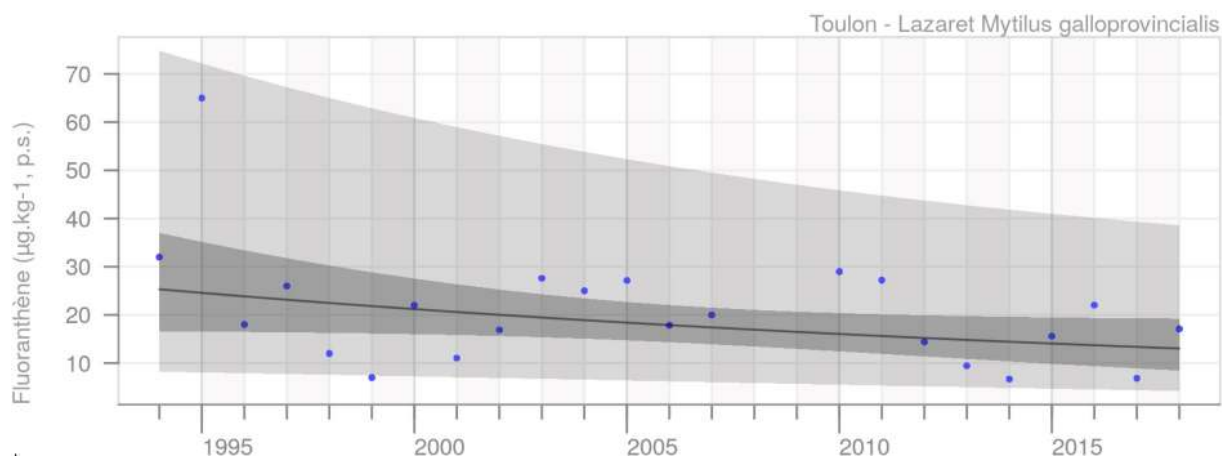
Aucune intervention n'est suggérée.



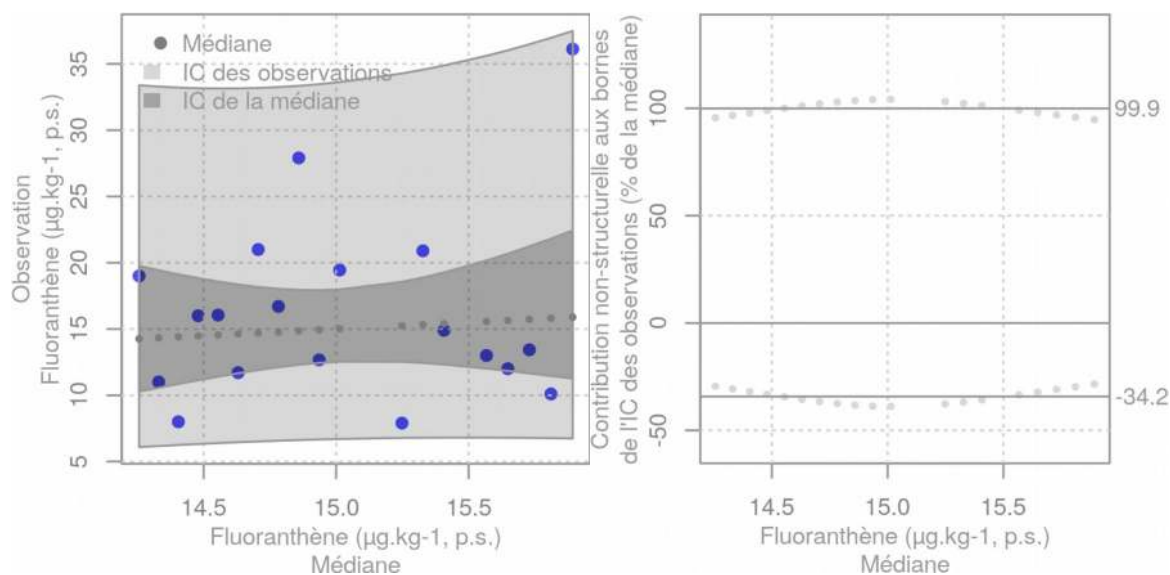
La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-21 %, +60 %).

Toulon Lazaret

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Aucune intervention n'est suggérée.



La variance d'observation est élevée et la légitimité de la relation moyenne-variance discutable. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-34 %, 100 %).

Synthèse concernant les variances d'observation

Table 4: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre fluoranthène.

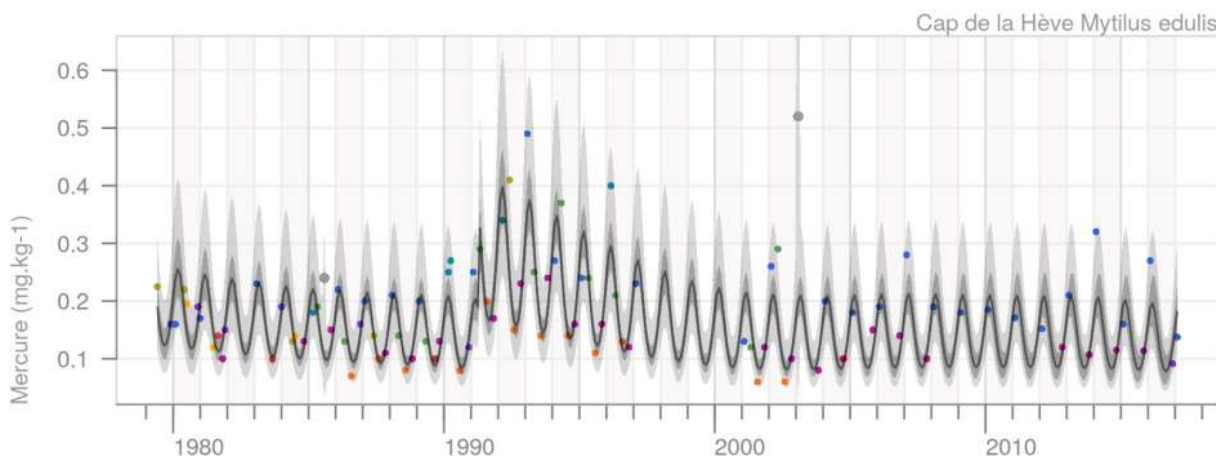
Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
Cap de la Hève	(-35 %, +198 %)
Villerville	(-28 %, +80 %)
La Fosse	(-20 %, +45 %)
Les Jacquets	(-37 %, +163 %)
Comprian	(-35 %, +135 %)
Pointe St. Gervais	(-21 %, +60 %)
Toulon Lazaret	(-34 %, 100 %)

Le modèle statistique a été toujours retenu à l'expertise thématique. La grande variabilité des données rend discutable la légitimité d'une relation moyenne-variance. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -20 % à -37 % pour la borne inférieure et de 45 % à 198 % pour la borne supérieure.

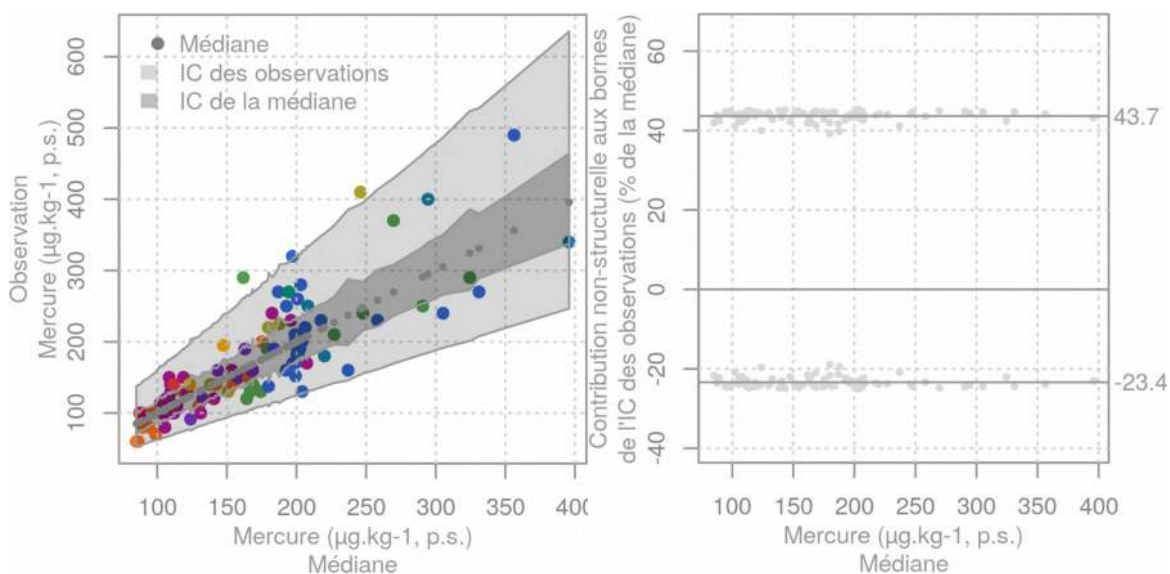
3.5 MERCURE

Cap de la Hève

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



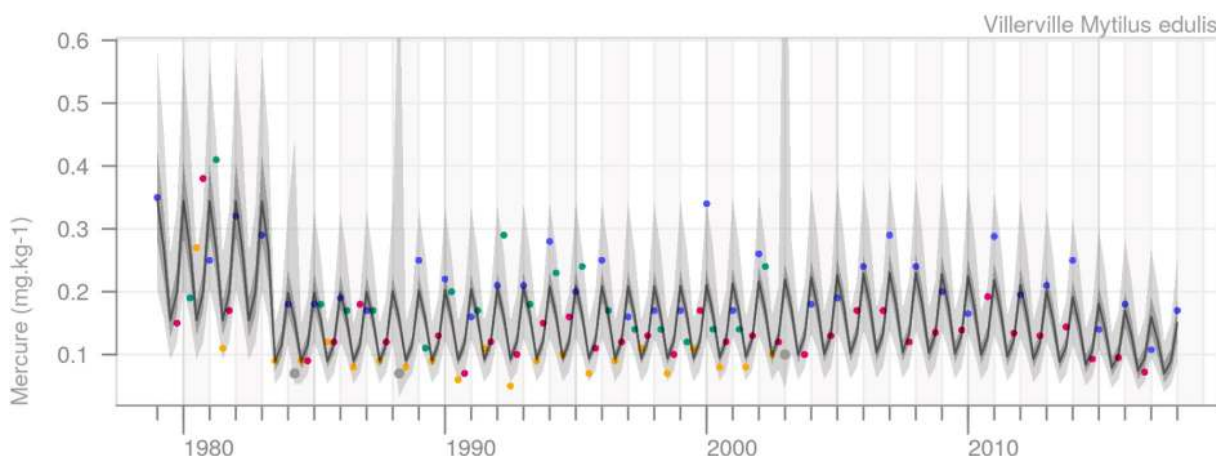
Deux valeurs sont considérées comme exceptionnelles, en août 1985 et en février 2003. Le modèle comporte un changement de niveau en mai 1991.



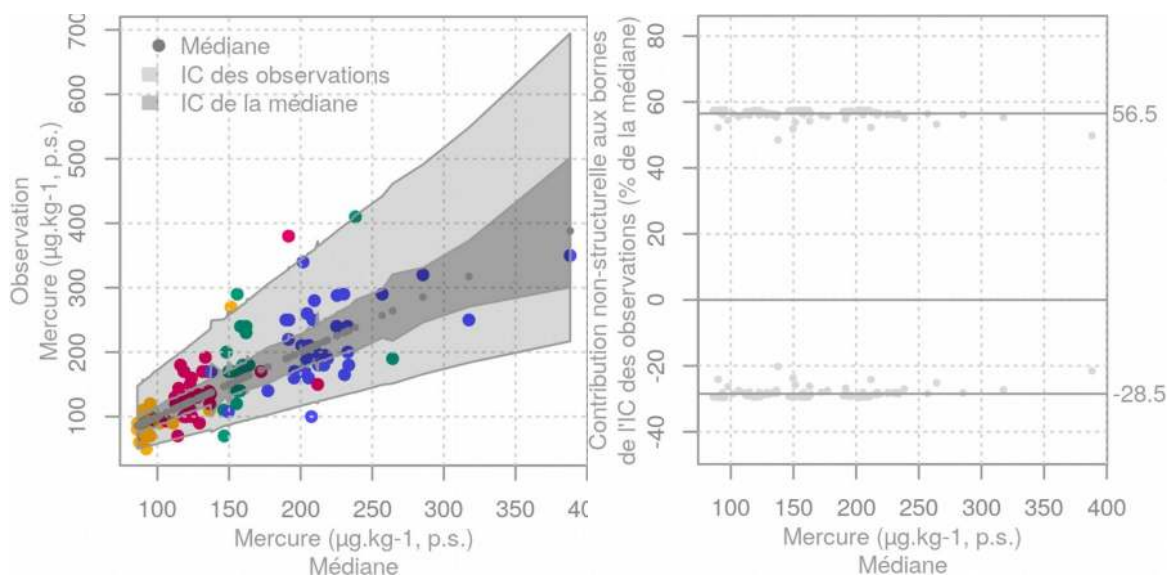
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +44 %).

Villerville

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



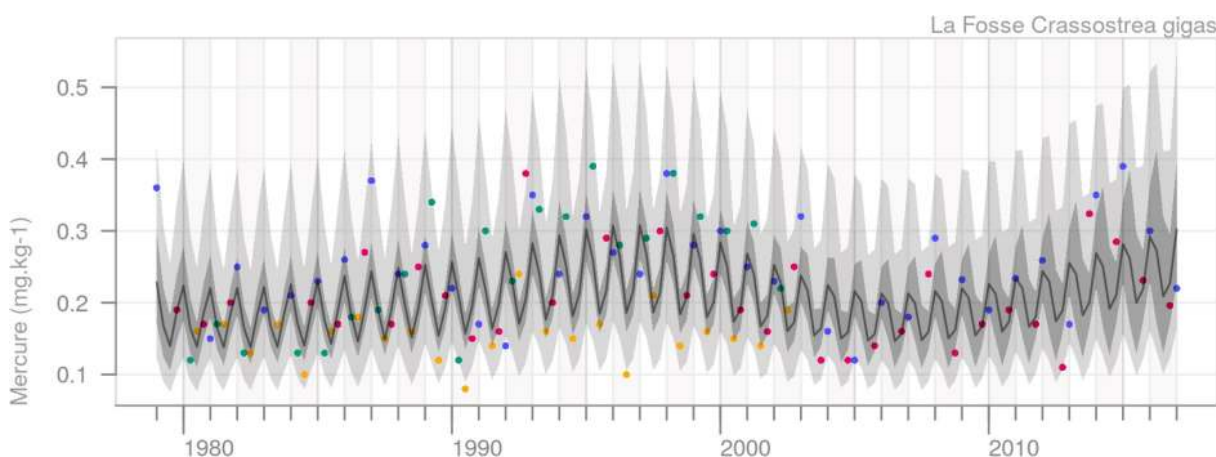
Trois valeurs sont considérées comme exceptionnelles, printemps 1984, 1988 et hiver 2003. Le modèle comporte un changement de niveau à l'automne 1983.



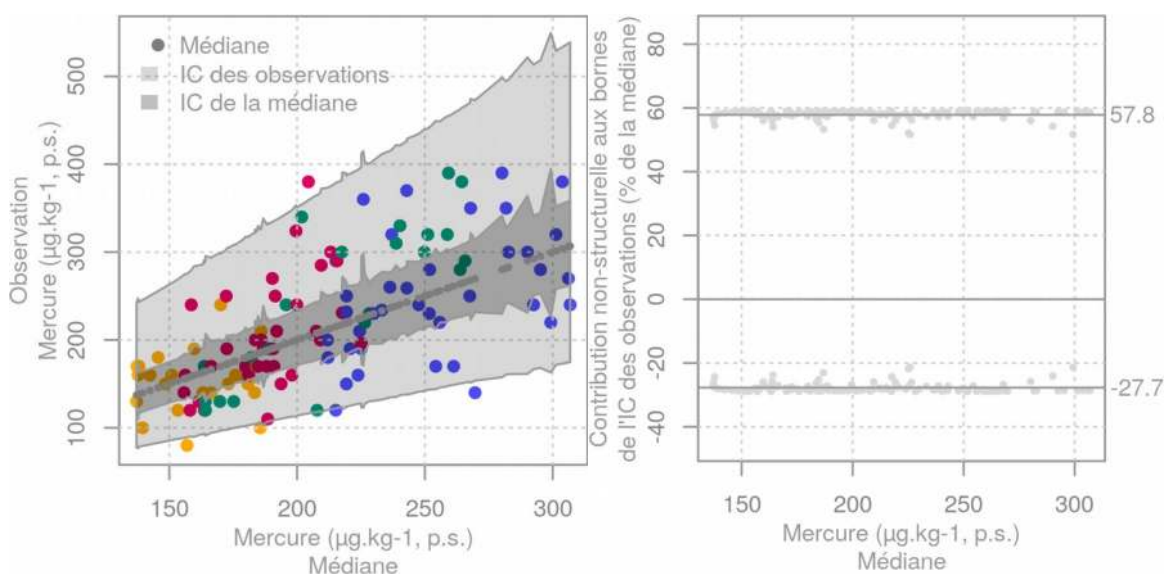
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-29 %, +57 %).

La Fosse

Le premier modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



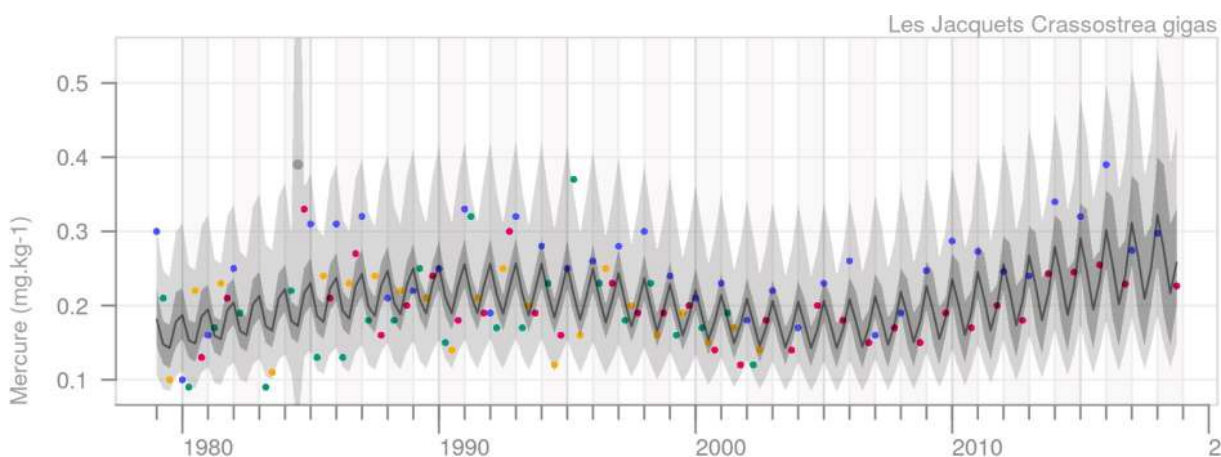
Il ne présente ni valeur exceptionnelle ni changement de niveau.



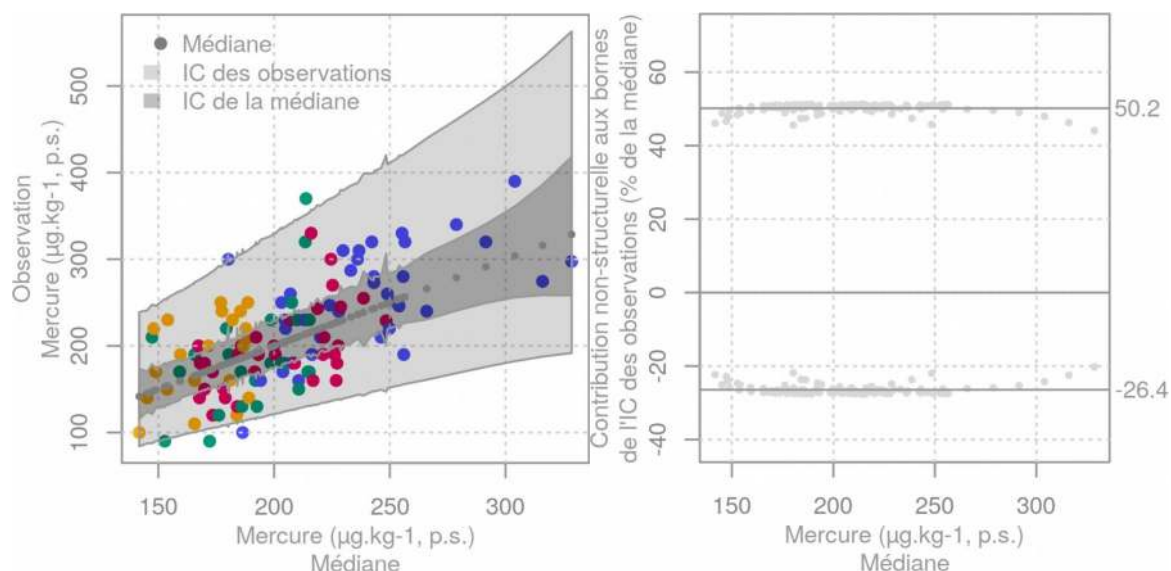
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-28 %, +58 %).

Les Jacquets

Le second modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



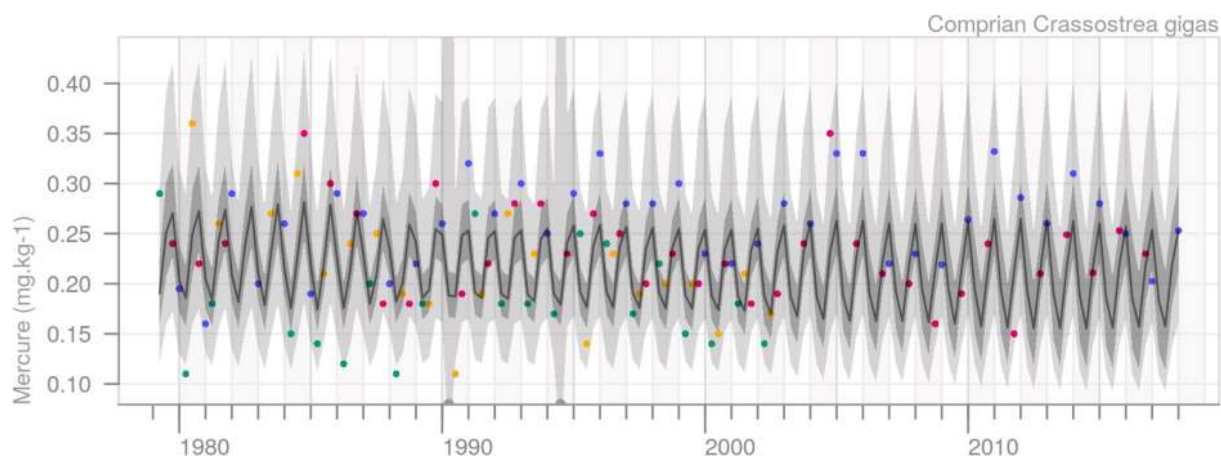
Une valeur est considérée comme exceptionnelle, été 1984.



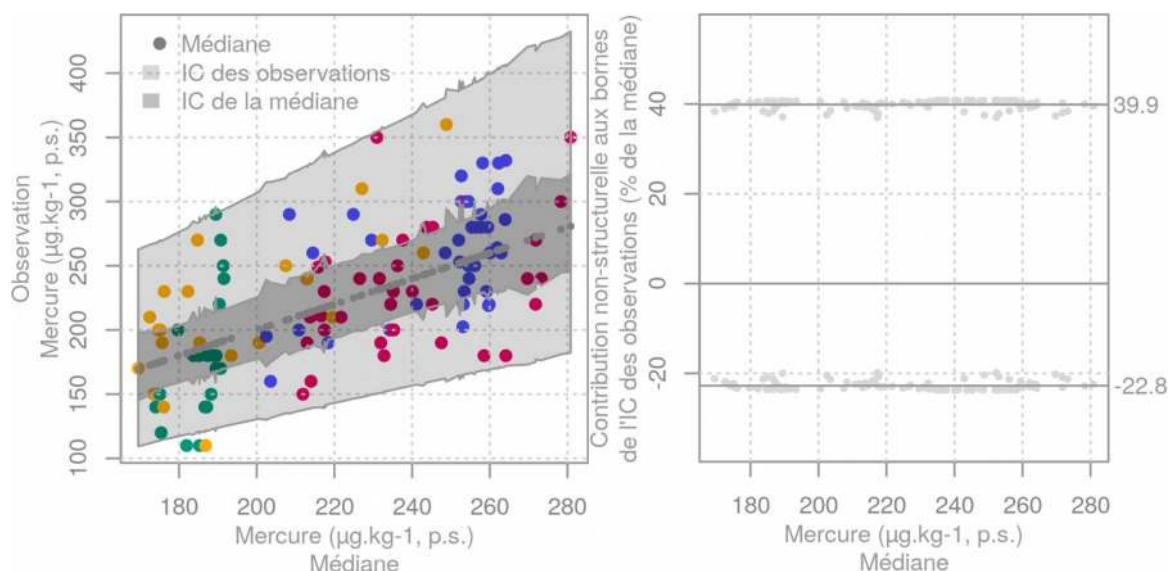
La relation médiane-variance apparaît moins nette que pour d'autres lieux et contaminants. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-26 %, +50 %).

Comprian

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



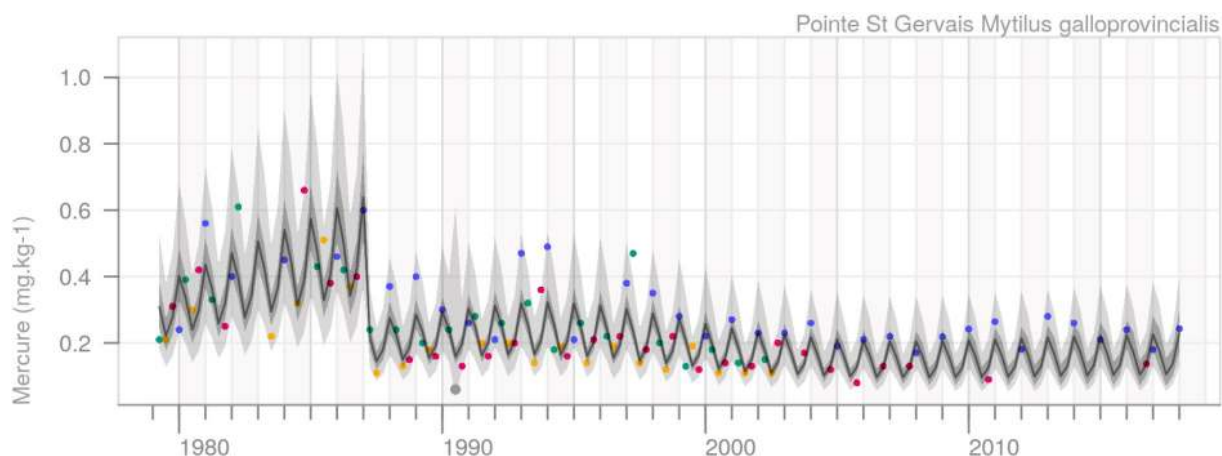
Deux valeurs sont considérées comme exceptionnelles, printemps 1990 et été 1994.



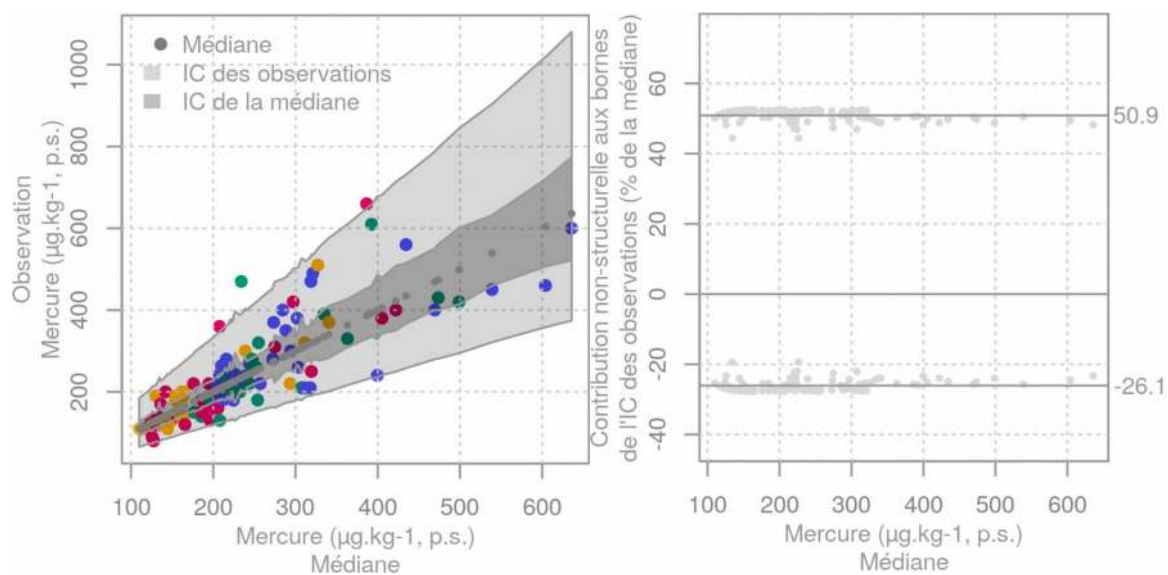
La relation médiane-variance apparaît moins nette que pour d'autres lieux et contaminants. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +40 %).

Pointe St. Gervais

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



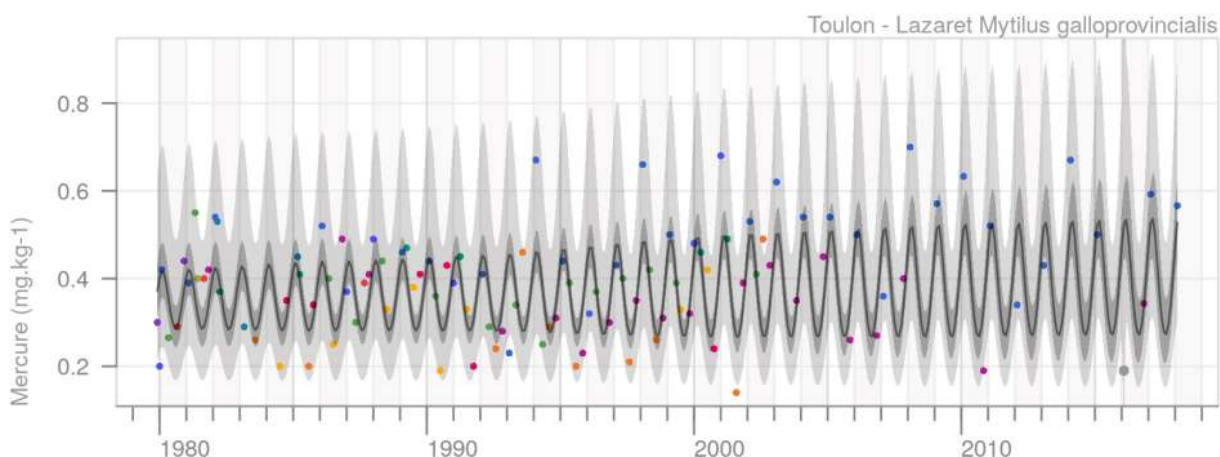
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'été 1990. Un changement de niveau est suggéré en mai 1987.



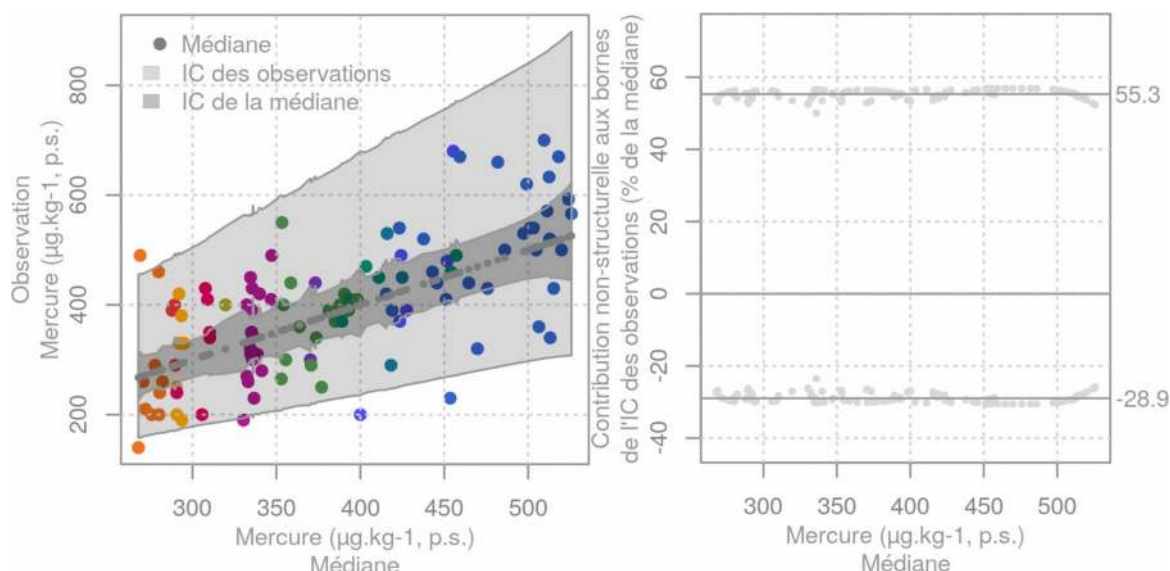
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-26 %, +51 %).

Toulon Lazaret

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Une valeur est identifiée comme exceptionnelle en février 2016.



La relation médiane-variance apparaît moins nette que pour d'autres lieux et contaminants. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-29 %, +55 %).

Synthèse concernant les variances d'observation

Table 5: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre mercure.

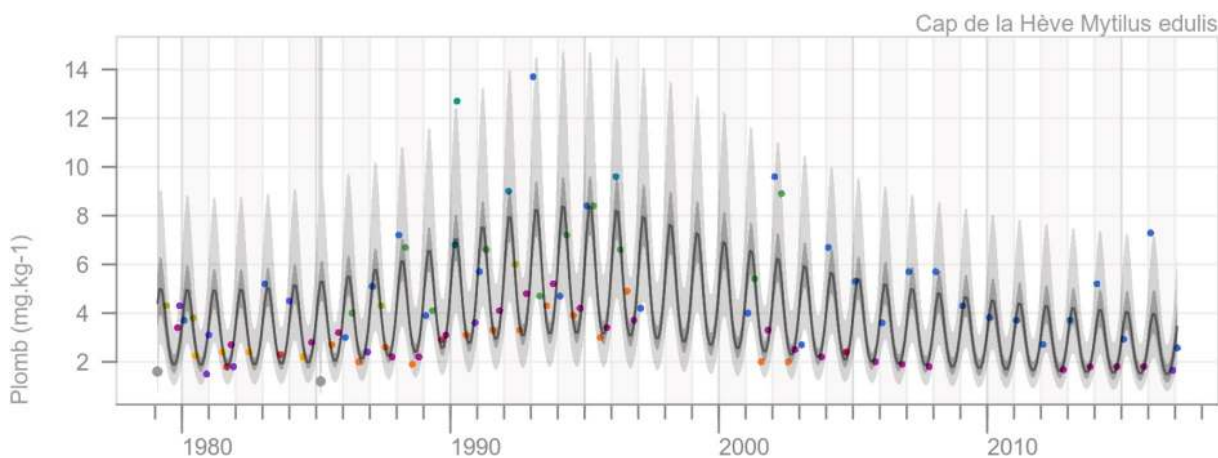
Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
Cap de la Hève	(-23 %, +44 %)
Villerville	(-29 %, +57 %)
La Fosse	(-28 %, +58 %)
Les Jacquets	(-26 %, +50 %)
Comprian	(-23 %, +40 %)
Pointe St. Gervais	(-26 %, +51 %)
Toulon Lazaret	(-29 %, +55 %)

Le modèle statistique a été toujours retenu à l'expertise thématique. Les données montrent une variabilité qui va en augmentant avec la concentration pour trois lieux (*i.e.* « Cap de la Hève », « Villerville » et « Pointe St. Gervais »). La relation est moins évidente pour les autres lieux. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -23 % à -29 % pour la borne inférieure et de 44 % à 55 % pour la borne supérieure.

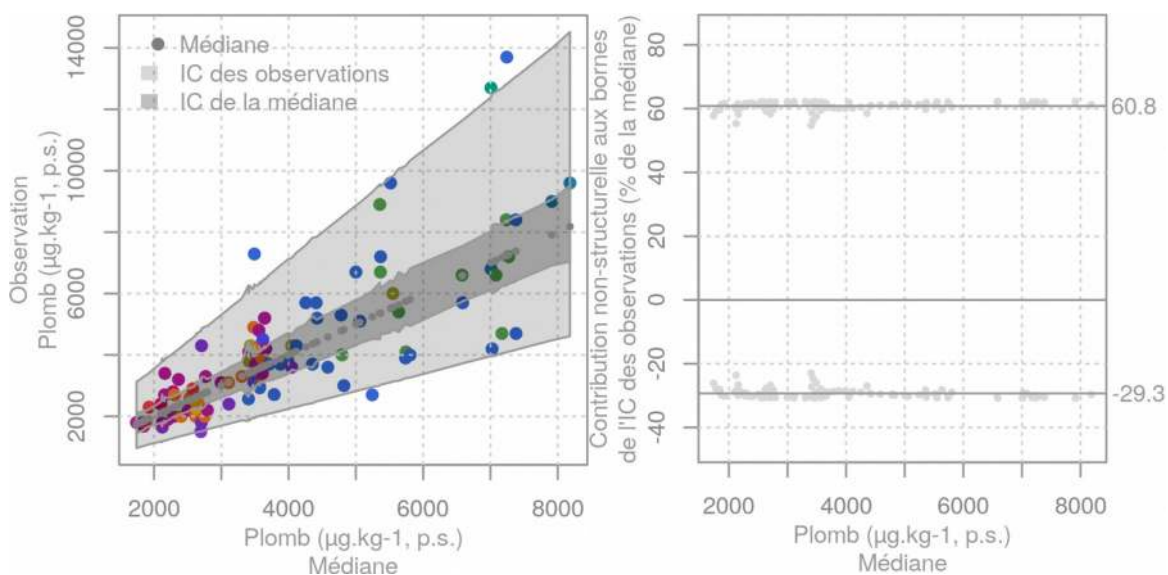
3.6 PLOMB

Cap de la Hève

Le modèle retenu à l'issue de l'expertise thématique est le suivant :



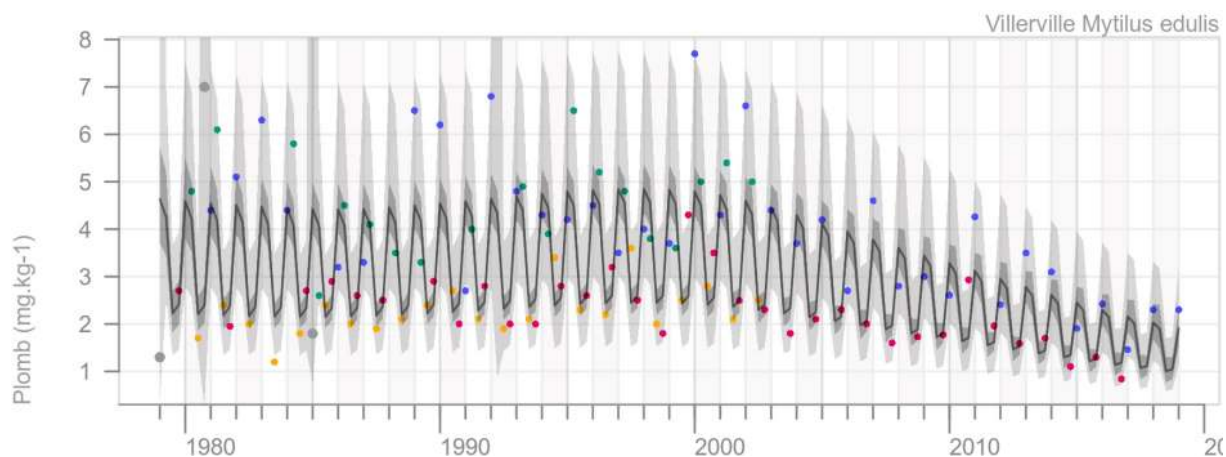
Il comporte deux valeurs exceptionnelles en février 1979 et mars 1985.



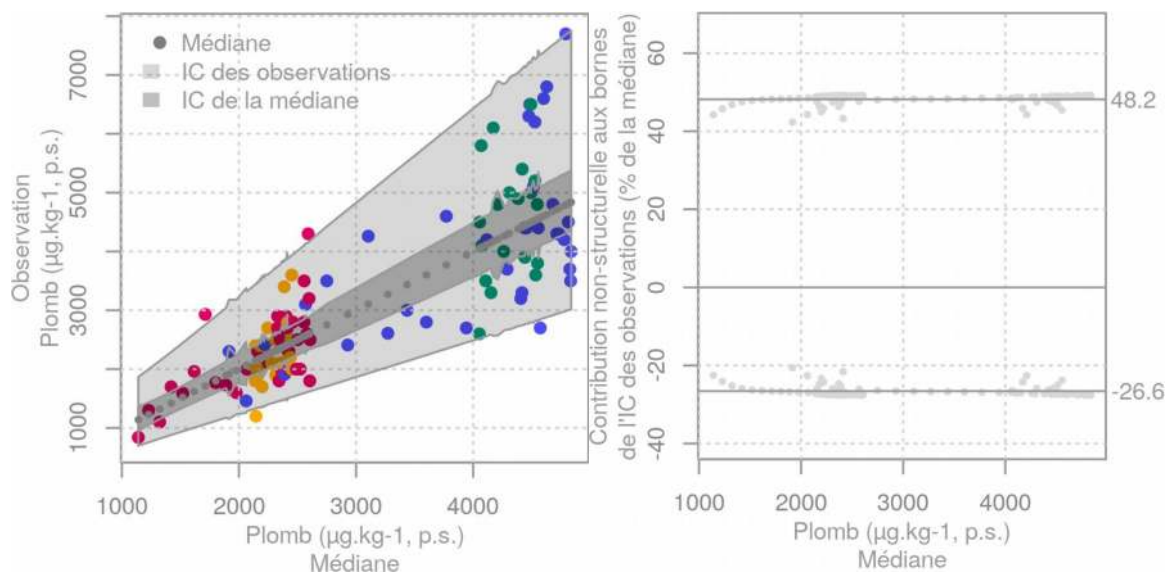
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-29 %, +61 %).

Villerville

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



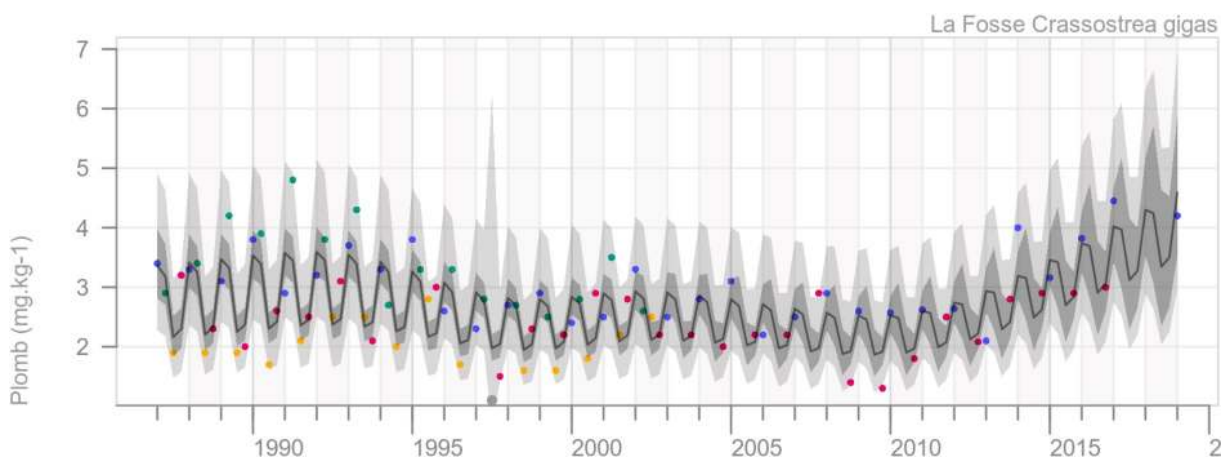
Il compte quatre valeurs exceptionnelle : hiver 1979, automne 1980, hiver 1985 et printemps 1992.



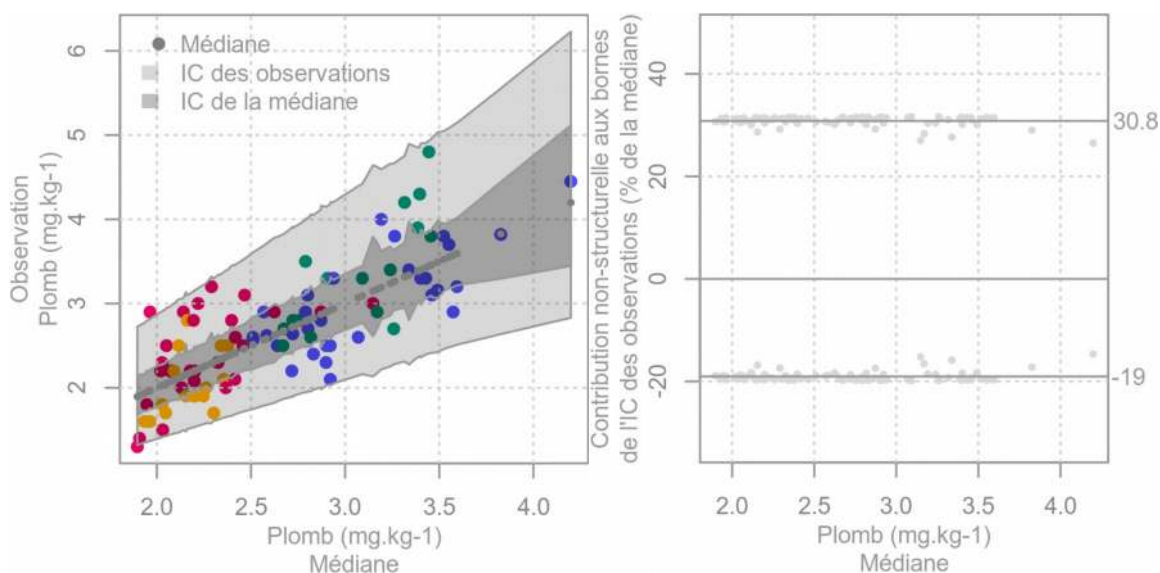
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-27 %, +48 %).

La Fosse

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987. Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



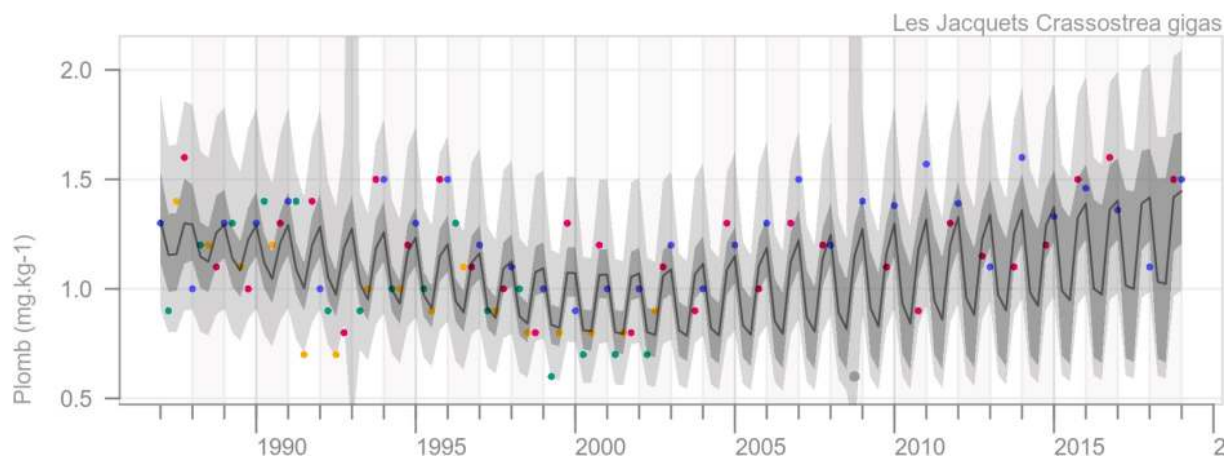
Il comporte une valeur exceptionnelle à l'été 1997.



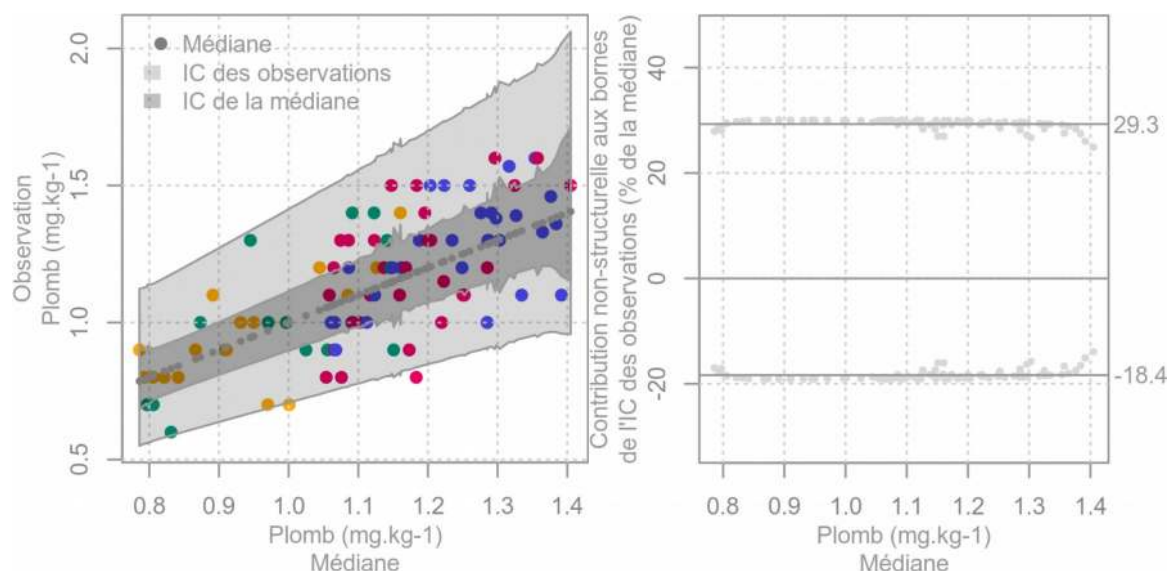
La relation médiane-variance apparaît moins nette que pour d'autres lieux et contaminants. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-19 %, +31 %).

Les Jacquets

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987. Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



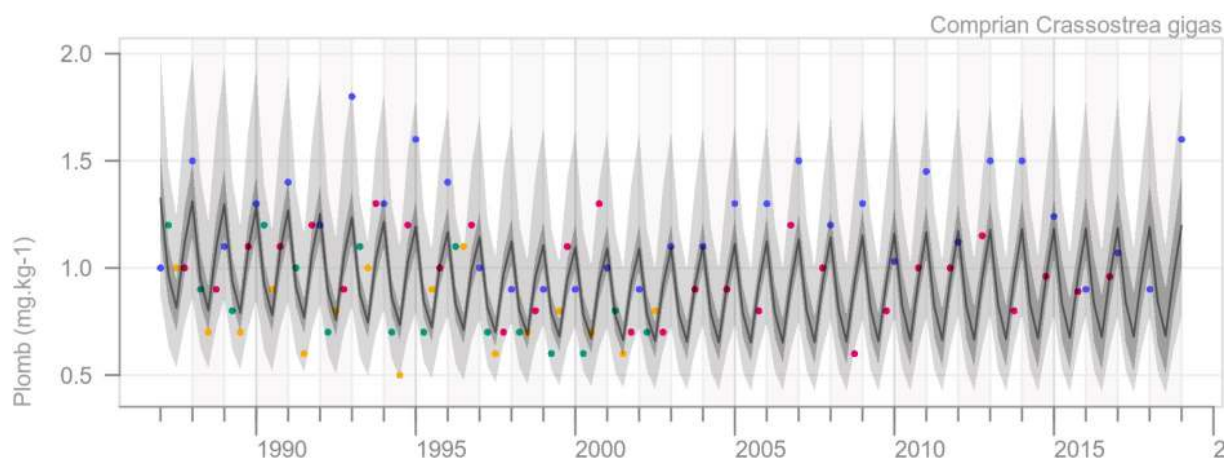
Il comporte deux valeurs exceptionnelles à l'hiver 1993 et à l'automne 2008.



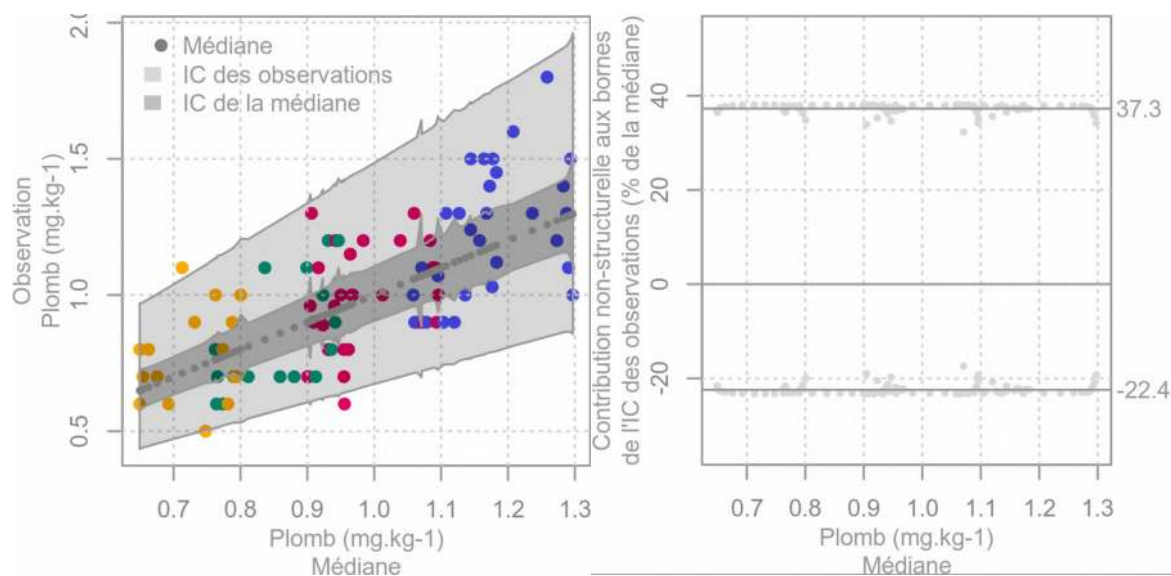
La relation médiane-variance apparaît moins nette que pour d'autres lieux et contaminants. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-18 %, +29 %).

Comprian

En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données a amené à porter le début de la période d'étude à 1987. Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



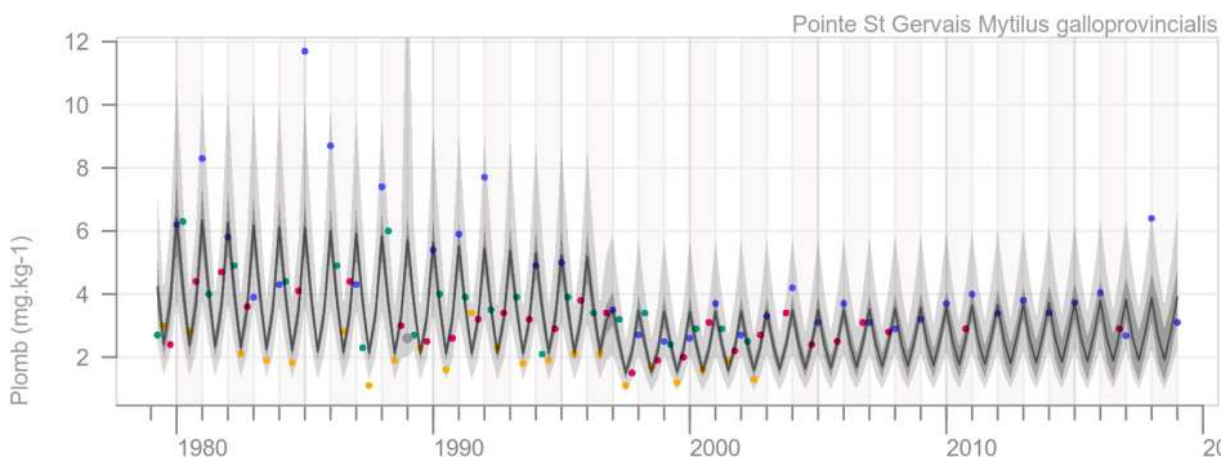
Aucune intervention n'est suggérée.



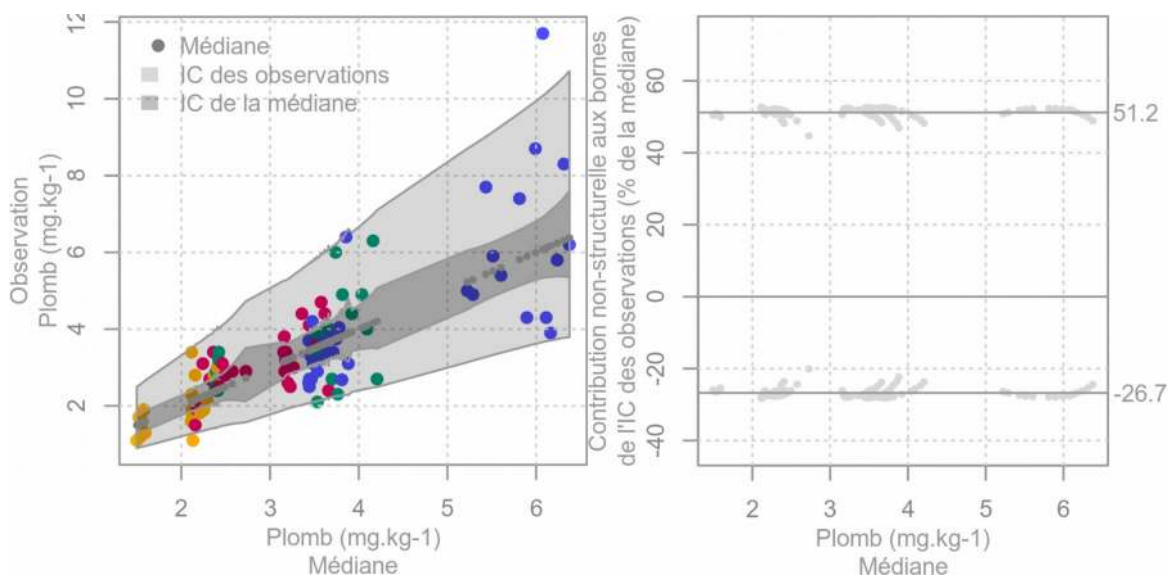
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-22 %, +37 %).

Pointe St. Gervais

Sur la base de l'expertise statistique, l'expertise thématique identifie une valeur fausse (*i.e.* printemps 1985). À l'issue d'un nouveau traitement sans cette valeur, le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



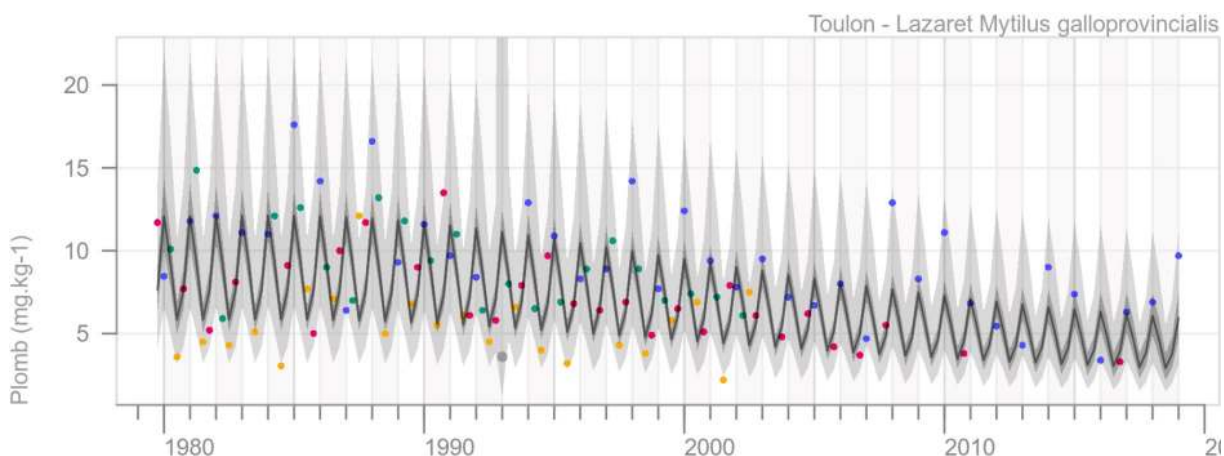
Une valeur est identifiée comme exceptionnelle à l'hiver 1989. Un changement de niveau est suggéré pendant l'hiver 1997.



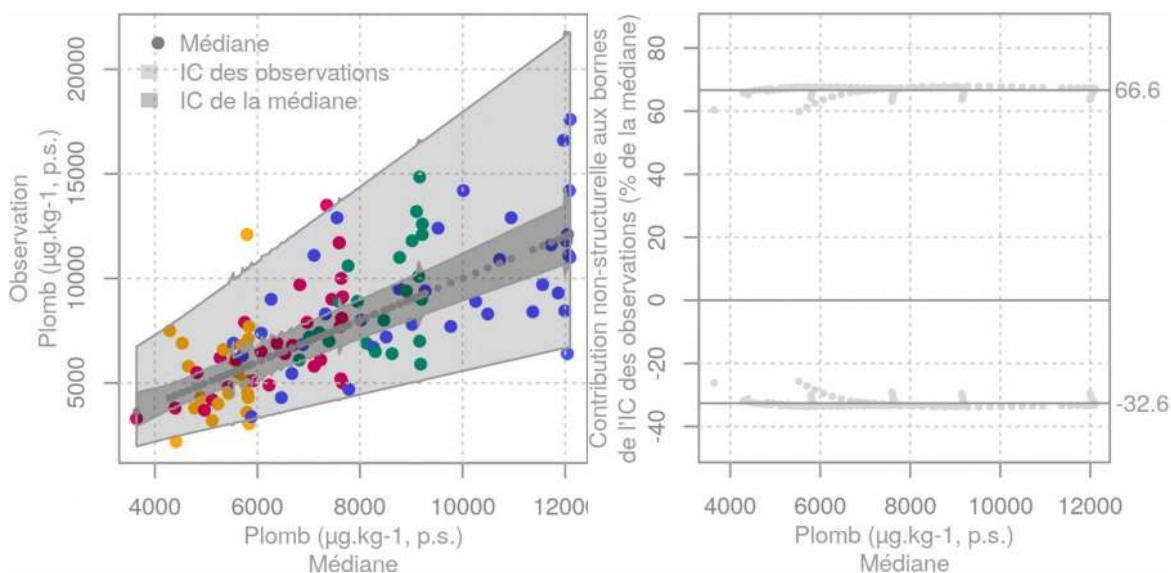
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-27 %, +51 %).

Toulon Lazaret

Le modèle de l'expertise statistique est retenu à l'issue de l'expertise thématique :



Une valeur est identifiée comme exceptionnelle en février 1993.



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-33 %, +67 %).

Synthèse concernant les variances d'observation

Table 6: Synthèse des précisions estimées pour le paramètre plomb.

Lieux de surveillance	Précision exprimée en termes de contribution non-structurelles aux bornes de l'intervalle de confiance des observations (% médiane)
Cap de la Hève	(-29 %, +61 %)
Villerville	(-27 %, +48 %)
La Fosse	(-19 %, +31 %)
Les Jacquets	(-18 %, +29 %)
Comprian	(-22 %, +37 %)
Pointe St. Gervais	(-27 %, +51 %)
Toulon Lazaret	(-33 %, +67 %)

Le modèle statistique a été toujours retenu à l'expertise thématique sauf pour « Cap de la Hève ». Les données montrent une variabilité qui va en augmentant avec la concentration, mais la relation est moins nette pour « La Fosse ». Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient de -18 % à -33 % pour la borne inférieure et de 29 % à 67 % pour la borne supérieure.

3.7 SYNTHÈSE DES RÉSULTATS

Trente-huit séries temporelles ont été analysées. Pour deux d'entre elles, *i.e.* cadmium à « Villerville » et plomb à « Cap de la Hève », l'expertise thématique a conduit à un modèle différent de l'expertise statistique. Des données ont été identifiées comme fausses (*cf.* CB153 à « Toulon Lazaret » et plomb à « Pointe St. Gervais »), et d'autres comme douteuse, *i.e.* données cadmium et plomb avant 1987 pour les lieux atlantiques. Les données identifiées comme exceptionnelles ont été reconnues comme telles. Pour dix séries, au moins un changement de niveau a été conservé.

Pour les contaminants métalliques, dans la plupart des cas, les données montrent une relation moyenne-variance. Toutefois, elle est moins marquée pour le mercure à « Les Jacquets », « Comprian » et « Toulon Lazaret », et pour le plomb à « La Fosse », « Les Jacquets » et « Comprian ». La légitimité de cette relation apparaît plus discutable pour les contaminants organiques, *i.e.* le fluoranthène et le CB153, et pour ce dernier, à l'exception des lieux de surveillance de l'estuaire de Seine.

Pour les contaminants métalliques, les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient globalement de -20 % à -30 % pour la borne inférieure et de 30 % à 60 % pour la borne supérieure à l'exception de deux lieux de surveillance pour le plomb. Pour le CB153 en estuaire de Seine, les résultats sont comparables à ceux des métaux, en revanche pour les autres lieux les valeurs varient de -32 % à -35 % pour la borne inférieure et de 80 % à 96 % pour la borne supérieure. Pour le fluoranthène, à « La Fosse » et « Pointe St. Gervais » les résultats sont similaires aux métaux, comparables à ceux du CB153 pour « Villerville » et varient de -34 % à -37 % pour la borne inférieure et 100 % à 198 % pour la borne supérieure pour les autres lieux.

4. DISCUSSION

Dans la plupart des cas, les modèles statistiques obtenus de manière automatique ou manuelle ont été retenus. Cette convergence des expertises statistiques et thématiques milite en faveur de la pertinence de l'approche DLM utilisée ici et dans les rapports précédents. En identifiant les valeurs exceptionnelles aux unités temporelles pour lesquelles les erreurs standardisées appartiennent aux 0,35 % inférieures ou aux 0,35 % supérieures de leur distribution, la procédure pointe sans ambiguïté des résultats hors normes. Toutefois, une confusion persiste entre les appellations « exceptionnelle » et « fausse/douteuse ». La première doit s'appliquer à une mesure pour laquelle le processus d'acquisition n'a pas lieu d'être remis en cause et/ou pour laquelle on dispose d'une information exogène justifiant le caractère hors norme de la mesure, par exemple une pollution accidentelle ponctuelle pour les contaminants chimiques, une efflorescence algale très importante pour la

chlorophylle *a* ou les abondances phytoplanctoniques. Un tel résultat fait partie de l'histoire de la série temporelle, doit apparaître dans les représentations et doit être traité de manière appropriée dans les analyses statistiques de sorte à limiter son influence. En revanche, une valeur fausse ou douteuse résulte d'une application déficiente du processus d'acquisition de la donnée ou d'un processus déficient, que cela soit révélé à travers l'existence d'une information exogène ou d'une expertise la pointant comme incompatible avec l'expérience. Dans ce cas, la donnée ne doit pas apparaître dans les représentations de la série temporelle et ne doit pas être incluse dans les ensembles soumis aux analyses statistiques. Ainsi, à travers les différentes séries traitées, le caractère exceptionnel de certaines données a été confirmé et d'autres ont été désignées comme fausses ou douteuses. Pour les lieux de la côte atlantique et les contaminants cadmium et plomb, les données précédant 1987 ont été qualifiées de douteuses. Il est remarquable de noter que cette identification s'est appuyée pour partie sur l'examen de la composante saisonnière de la décomposition du signal, avec en soutien à la fois une représentation des écarts aux dates théoriques d'échantillonnage et la séquence des méthodes mises en œuvre en cours du temps. Enfin, en l'état la qualification douteuse ne présente par un caractère arrêté mais devra être confirmée ou affinée par un examen *ad hoc* complémentaire.

Les changements de niveau, peu nombreux, posent un problème différent à l'expertise thématique. D'une part, l'accroissement en vraisemblance et le caractère significatif de cet accroissement constituent des arguments en faveur de l'acceptation des interventions sur le niveau. D'autre part, la difficulté à identifier des éléments exogènes potentiellement liés à ces changements et l'implication scientifique, voire le cas échéant les conséquences économiques, légales et sociétales, à les désigner comme causales sont des freins à la validation des chocs suggérés dans les séries. Finalement, le modèle optimal numériquement peut présenter une évolution à laquelle l'expert ne peut raccrocher ses connaissances et son expérience. Cet écueil, relevant souvent de la « surparamétrisation » allant à l'encontre du principe de parcimonie^b doit être évité : « le meilleur scénario ou la meilleure théorie est celui qui fait intervenir le plus petit nombre d'hypothèses *ad hoc*, c'est-à-dire hypothèses non documentées » (Lecointre, 2011). Il s'agit donc pour le statisticien et le thématique d'avoir un dialogue de manière à établir un modèle à la subjectivité assumée qui soit éclairant sur l'histoire de la série temporelle, c'est-à-dire utile au sens de Box : « *All models are wrong, but some are useful* » (Box, 1976).

Le choix d'une transformation logarithmique base e^c des concentrations en contaminant a été fait. Ce choix a été initialement motivé, d'une part par des données appartenant à l'intervalle $]0; +\infty[$, et d'autre part par une expression traditionnelle de l'incertitude analytique en termes de pourcentage de type $X \pm P \%$, où X est le résultat de la mesure et P est la précision, expression qui implique une relation entre la mesure et son incertitude. Par ailleurs les premiers essais de modélisation sans transformation ont souvent conduit à des intervalles de confiance dont la borne inférieure pouvait être négative, non compatible avec l'intervalle d'expression des données. De plus, cette transformation dans le cadre des travaux de modélisation sur les autres paramètres de l'environnement marins (*i.e.* hydrologiques, abondances phytoplanctoniques) s'est généralement révélée pertinente. Dans l'environnement marin, elle est en relation avec la grande variabilité spatiale et temporelle du milieu, mais plus généralement la loi log-normale, induite par la transformation logarithmique, présente une caractéristique d'ubiquité en écologie (Limpert et al., 2001). Enfin, si les résultats du présent rapport concernent une sélection de contaminants et de lieux avec une attention particulière portée à l'expression de la variance d'observation, ils appartiennent à un effort plus global de traitement des séries temporelles d'observation et de surveillance chimique, hydrologique, phytoplanctonique et microbiologique, initié en 2011 et comptant en particulier 18 contaminants chimiques et la totalité des lieux de surveillance pour lesquels ces mesures ont été effectuées depuis leur mise en place à partir 1979. L'examen, souvent pluriannuel des résultats de modèles, incline dans la plupart des cas en faveur de la pertinence d'une distribution log-normale de ces données, impliquant une relation de type moyenne-variance, justifiant la transformation logarithmique, en particulier pour se ramener à un traitement dans un cadre gaussien à variance constante (*i.e.* homoscedasticité), qui est une hypothèse du modèle. Compte tenu de ces éléments, il est intéressant de noter que l'usage de cette approche a suscité de l'étonnement de la part des thématiques, la transformation logarithmique des concentrations des contaminants ne leur étant pas habituelle. Il en va de même de l'expression asymétrique de l'incertitude propre aux distributions log-normales : la distance de la médiane à la borne inférieure est moins grande que celle à la borne supérieure. Cependant, les résultats ont montré en ce qui concerne les contaminants métalliques que les distributions apparaissent bien de type

b. Application du rasoir d'Ockham, *Pluralitas non est ponenda sine necessitate* (*i.e.* les multiples ne doivent pas être utilisés sans nécessité).

c. C'est-à-dire tel que $\ln(e)=1$, autrement dit logarithme naturel ou népérien.

log-normales. La relation moyenne-variance est sans ambiguïté dans la plupart des cas, elle peut être moins nette pour quelques-uns. En revanche, les modélisations des contaminants organiques conduisent à des résultats beaucoup plus discutables. Le point remarquable avec ces séries, c'est le nombre important de méthodes qui ont été utilisées par 3 à 4 laboratoires différents. Il est difficile d'apprécier l'impact de ces changements sur les données et donc sur les résultats des modèles sans procéder à un examen plus systématique, en particulier les caractéristiques précises que recouvrent les libellés des méthodes saisis dans la base de données.

Les amplitudes des incertitudes sont comparables pour les contaminants métalliques. Globalement les valeurs obtenues sont compatibles avec l'expérience des thématiciens. Des valeurs élevées mais non identifiées comme exceptionnelles entraînent manifestement une augmentation de la variance d'observation ce qui se perçoit en particulier par une borne supérieure élevée. Ces observations restent valides pour le CB153, avec des amplitudes similaires aux métaux en estuaire de Seine et un peu plus fortes pour les autres lieux. Pour le fluoranthène, les amplitudes sont plus importantes. Il faut noter que les séries de CB153 comptent moitié moins de données et les séries de fluoranthène, 4 à 5 fois moins de mesures que celles des contaminants métalliques (Annexe 2, p.53), or on sait que mécaniquement la variance diminue avec le nombre de données. Enfin pour le fluoranthène, une nouvelle fois la multiplication des laboratoires et des méthodes jette un doute sur la fiabilité de la modélisation que l'on peut en tirer.

Les extensions du modèle et leurs usages restent identiques à ce qui a été développé dans les précédents rapports et ne seront pas reproduits ici. Toutefois, il est notable qu'à nouveau la possibilité de considérer une variance d'observation variable dans le temps constitue sans doute la voie d'amélioration la plus intéressante. Il s'agit en particulier ici non seulement de pouvoir s'adapter à des méthodes différentes au cours du temps, des dates d'échantillonnages variables relativement à des dates cibles mais aussi et surtout, de modéliser les relations entre la moyenne et la variance. En effet si la transformation logarithmique permet d'exprimer la variance en fonction de la moyenne, cette expression reste figée. Or, c'est une hypothèse qu'il serait intéressant de questionner, en particulier dans les concentrations faibles, à l'approche de la limite de quantification en dessous de laquelle l'incertitude est plus importante, mais également pour les concentrations élevées pour lesquelles la variance pourrait atteindre un palier.

5. CONCLUSION

Bien que les contaminants chimiques ne jouent pas dans les écosystèmes côtiers un rôle identique à celui des paramètres hydrologiques et phytoplanctoniques, ils n'en restent pas moins soumis à des processus communs : 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^d de l'incertitude du processus d'acquisition de la donnée.

La pertinence des DLM entraîne généralement la validation de la nécessaire expertise thématique. Bien que la relation moyenne-variance n'ait pas été observée sans ambiguïté pour tous les modèles, le caractère log-normal des distributions des contaminants est très vraisemblable. Les contributions non-structurelles aux bornes des intervalles de confiance à 90 % des observations en pourcentage de la médiane varient globalement de -20 % à -30 % pour la borne inférieure et de 30 % à 60 % pour la borne supérieure pour les contaminants métalliques. Ces résultats sont compatibles avec l'expérience experte. Pour les courtes séries des contaminants organiques les valeurs sont de l'ordre de -35 % pour la borne inférieure et pour la borne supérieure, de 80 % à 96 % pour le CB153 et de 100 % à 198 % pour le fluoranthène. Pour ce dernier, la multiplication des laboratoires et des méthodes impliquées est sans doute une cause de la grande variabilité. Enfin, ce travail est susceptible de venir

d. 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.

alimenter la réflexion en ce qui concerne l'activité de surveillance, e.g. signification des résultats de mesure, stratégie d'échantillonnage.

6. BIBLIOGRAPHIE

- Aminot, A., Kérouel, R., 2004. Hydrologie des écosystèmes marins : paramètres et analyses, Méthodes d'analyse en milieu marin. Ifremer.
- Box, G.E.P., 1976. Science and statistics. *Journal of the American Statistical Association* 71, 791-799. <https://doi.org/10.2307/2286841>
- 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.
- Harvey, A., Koopman, S.J., Penzer, J., 1998. Messy time series : a unified approach. *Advances in Econometrics* 13, 103-143.
- Hyndman, R.J., Athanasopoulos, G., 2013a. 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.
- Hyndman, R.J., Athanasopoulos, G., 2013b. ARIMA models, in: *Forecasting: Principles and Practice*. OTexts, Melbourne, Australia. Section 8/5. <http://otexts.org/fpp/8/5>. Accessed 13/10/2017.
- Lecointre, G., 2011. Les Sciences face aux créationnismes : Ré-expliciter le contrat méthodologique des chercheurs, 1ère édition. ed, Sciences en questions. Quae, Versailles.
- Limpert, E., Staehl, W., Abbt, M., 2001. Log-normal Distributions across the Sciences: Keys and Clues. *Bioscience* 51, 341-352.
- 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.
- Soudant, D., Auby, I., Daniel, A., 2018. Incertitudes des méthodes d'évaluation « eaux littorales » : utilisation de modèles linéaires dynamiques pour l'évaluation des incertitudes des paramètres hydrologiques, Rapport Aquaref 2017.
- Soudant, D., Miossec, L., Neaud-Masson, N., Auby, I., Maurer, D., Daniel, A., 2016. Incertitudes des méthodes d'évaluation « eaux littorales » : utilisation de modèles linéaires dynamiques pour l'évaluation des incertitudes (chlorophylle a, phytoplancton), Rapport Aquaref 2015.
- Stoffer, D.S., Toloi, C.M.C., 1992. A note on the Ljung-Box-Pierce portmanteau statistic with missing data. *Statistics and probability letters* 13, 391-396.

7. ANNEXE 1 : CARACTÉRISTIQUES DES SÉRIES TEMPORELLES

Paramètre	Lieux	Nbre de mesures	Fenêtre temporelle	Fréquence
cadmium	Cap de La Hève	102	[1979, 2017]	Interruption d'échantillonnage de février 1997 à février 2001. 4 mesures par an jusqu'en 2002, puis deux mesures par an. Une mesure par an de 2009 à 2011.
cadmium	Villerville	115	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures par an, une seule mesure en 2017 et 2018
cadmium	La Fosse	116	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an
cadmium	Les Jacquets	123	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an.
cadmium	Comprian	119	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an jusqu'en 2018
cadmium	Pointe St. Gervais	112	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, une seule mesure de 2011 à 2016.
cadmium	Toulon Lazaret	112	[1979, 2018]	4 mesure par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, une seule mesure de 2011 à 2016.
CB153	Cap de La Hève	40	[1992, 2017]	4 mesures par an de 1992 à 1996, pas de mesures de 1997 à 2000, reprise en 2001 à une mesure par an en automne, à partir de 2011 la mesure passe à l'hiver.
CB153	Villerville	54	[1992, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 1997, 2 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2010, 2 mesures par an (<i>i.e.</i> automne et hiver) de 2011 à 2016 et finalement 1 mesure par an (<i>i.e.</i> hiver) les dernières années
CB153	La Fosse	45	[1992, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 1997, 3 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2016 et finalement une mesure en février 2017.
CB153	Les Jacquets	47	[1992, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 1997, 3 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2016 et finalement une mesure en février 2017 et 2018.
CB153	Comprian	51	[1992, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 1997, 3 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2016 et finalement une mesure en février 2017 et 2018.
CB153	Pointe St. Gervais	41	[1992, 2018]	3 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2016 et finalement une mesure en février 2017 et 2018.
CB153	Toulon Lazaret	47	[1992, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 1997, 3 mesures par an de 1999 à 2001, puis une mesure par an (<i>i.e.</i> automne) jusqu'en 2011 mais pas de mesure en 2004, 2008 et 2009. à partir de 2011 une mesure par an en hiver et 2 mesures en automne, en 2012 et 2016.
cuivre	Cap de La Hève	97	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2002 mais absence de mesures de 1997 à 2000, 2 mesures par an (automne et hiver) de 2003 à 2007 et de 2012 à 2017, une seule mesure en hiver de 2009 à 2011
cuivre	Villerville	115	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002 puis 2 mesures par an, automne et hiver
cuivre	La Fosse	112	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, automne et hiver, seulement une mesure en hiver de 2009 à 2012.
cuivre	Les Jacquets	119	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, automne et hiver, seulement une mesure en hiver de 2009 à 2012.
cuivre	Comprian	114	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, automne et hiver, seulement une mesure en hiver de 2009 à 2012.
cuivre	Pointe St. Gervais	110	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an (automne et hiver) jusqu'en 2007, puis une mesure par an (hiver), plus les automnes 2010 et 2016.

Paramètre	Lieux	Nbre de mesures	Fenêtre temporelle	Fréquence
cuivre	Toulon Lazaret	108	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an (automne et hiver) jusqu'en 2007, puis une mesure par an (hiver), plus les automnes 2010 et 2016.
fluoranthène	Cap de La Hève	19	[1994, 2017]	1 mesure par an
fluoranthène	Villerville	24	[1994, 2018]	1 mesure par an
fluoranthène	La Fosse	21	[1995, 2017]	1 mesure par an
fluoranthène	Les Jacquets	21	[1996, 2018]	1 mesure par an
fluoranthène	Comprian	24	[1994, 2018]	1 mesure par an
fluoranthène	Pointe St. Gervais	19	[1994, 2018]	1 mesure par an
fluoranthène	Toulon Lazaret	23	[1994, 2018]	1 mesure par an
mercure	Cap de La Hève	99	[1979, 2017]	fréquence trimestrielle jusqu'en 2002, pas de mesures de 1997 à 2000, puis deux mesures par an, une seule mesure (<i>i.e.</i> hiver) de 2008 à 2011
mercure	Villerville	116	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures (automne et hiver).
mercure	La Fosse	117	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures (<i>i.e.</i> automne et hiver).
mercure	Les Jacquets	119	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures (<i>i.e.</i> automne et hiver).
mercure	Comprian	119	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures (<i>i.e.</i> automne et hiver).
mercure	Pointe St. Gervais	108	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis deux mesures par an (automne et hiver) jusqu'en 2007, puis une mesure par an (hiver) sauf en 2010 et 2016 présentant une mesure en automne
mercure	Toulon Lazaret	110	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis deux mesures par an (automne et hiver) jusqu'en 2007, puis une mesure par an (hiver) sauf en 2010 et 2016 présentant une mesure en automne
plomb	Cap de La Hève	100	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures par an, interruption d'échantillonnage de février 1997 à février 2001.
plomb	Villerville	116	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2003, puis 2 mesures par an, une seule mesure en 2017
plomb	La Fosse	118	[1979, 2017]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis deux mesures par an (automne et hiver)
plomb	Les Jacquets	122	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis deux mesures par an (automne et hiver)
plomb	Comprian	118	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis deux mesures par an (automne et hiver)
plomb	Pointe St. Gervais	110	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures par an, une seule mesure de 2011 à 2016.
plomb	Toulon Lazaret	112	[1979, 2018]	4 mesures par an jusqu'en 2002, puis 2 mesures (hiver et automne) par an, une seule mesure (hiver) à partir de 2007 sauf en 2011 à 2016 présentant une mesure en automne

8. ANNEXE 2 : MÉTHODES ET LABORATOIRES

Paramètre	Lieux	Laboratoires analystes	Méthodes
cadmium cuivre plomb	Cap de La Hève	BE et LMROU en novembre 1984	Absorption atomique sans flamme (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Absorption atomique sans flamme (correction Zeeman) jusqu'en 2004, puis ICP/MS (méthode interne Ifremer) jusqu'en 2016, puis ICP/MS (méthode ANSES/LSAliments/LSA-INS-0084)
cadmium cuivre plomb	Villerville	BE	cf. ci-dessus
cadmium cuivre plomb	La Fosse Les Jacquets Comprian	BE et LMROU en novembre 2008, 2009 et 2010	cf. ci-dessus et Absorption atomique sans flamme (correction Zeeman) pour les mesures de novembre 2008, 2009 et 2010
cadmium cuivre plomb	Pointe St. Gervais Toulon Lazaret	BE et LHUM de 1985 à 1986 et avril et juillet 1984 et LMROU en novembre 2010	Absorption atomique sans flamme (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Absorption atomique sans flamme (correction Zeeman) jusqu'en 2004, puis ICP/MS (méthode interne Ifremer) jusqu'en 2016, puis ICP/MS (méthode ANSES/LSAliments/LSA-INS-0084)
CB153	Cap de La Hève	BE jusqu'en 2007 et en novembre 2011, puis LMROU en 2008 et 2009, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie gaz organochlorés (Loizeau Abarnou) jusqu'en 1997, puis Chromatographie gaz organochlorés (10) jusqu'en 2009 et novembre 2011, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LABERCA) jusqu'en février 2002, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution(Laberca/DGAI/PCBNDL-tma.2.01)
CB153	Villerville	BE jusqu'en 2007 et en novembre 2010 et 2011, puis LMROU en 2008, 2009 et novembre 2014, 2015 et 2016 LABOCEA-29P en 2012 et 2013 LABERCA-ONERIS en février 2011 à 2016 et à partir de 2017	Chromatographie gaz organochlorés (Loizeau Abarnou) jusqu'en février 1997, puis Chromatographie gaz organochlorés (8)/ECD jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz organochlorés (10) jusqu'en 2010 et en octobre 2011, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LABERCA) pour les mois de février jusqu'en janvier 2016 Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LABOCEA) en novembre 2012 et 2013 Chromatographie gaz organochlorés (7) – µg/kg en novembre 2014 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LMRouen) – µg/kg en novembre 2015 et 2016 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution(Laberca/DGAI/PCBNDL-tma.2.01) à partir de 2017
CB153	La Fosse Les Jacquets	BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2016 sauf LABOCEA-29P en 2012 et 2013, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie gaz organochlorés (Loizeau Abarnou) jusqu'en février 1997, puis Chromatographie gaz organochlorés (8)/ECD jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz organochlorés (10) jusqu'en 2007, puis Chromatographie gaz organochlorés (7) jusqu'en 2011 et en 2014, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LABOCEA) en 2012 et 2013 Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LMRouen) en 2015 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LMRouen) – µg/kg en 2016 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution(Laberca/DGAI/PCBNDL-tma.2.01) à partir de 2017
CB153	Comprian	cf. ci-dessus auquel s'ajoute LABERCA-ONERIS pour les mois de février 2013 à 2016	cf. ci-dessus auquel s'ajoute Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LABERCA) pour les mois de février 2013 à 2016
CB153	Pointe St. Gervais	BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2016 sauf LABOCEA-29P en 2011 et 2012, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie gaz organochlorés (Loizeau Abarnou) jusqu'en février 1997, puis Chromatographie gaz organochlorés (8)/ECD jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz organochlorés (10) jusqu'en 2010, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LABOCEA) en 2011 et 2012 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LMRouen) – µg/kg en 2016 Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution(Laberca/DGAI/PCBNDL-tma.2.01) à partir de 2017
CB153	Toulon Lazaret	cf. ci-dessus auquel s'ajoute LABERCA-ONERIS pour les mois de février 2013 à 2016	cf. ci-dessus auquel s'ajoute Chromatographie gaz – spectrométrie de masse haute résolution (LABERCA) pour les mois de février 2013 à 2016

Paramètre	Lieux	Laboratoires analystes	Méthodes
fluoranthène	Cap de La Hève	BE en 1994, puis LMROU jusqu'en 1999, puis BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2009, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie liquide haute performance (LMRouen) jusqu'en 1996, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse IE-1 jusqu'en 2010, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (Veyrand et al. 2007).
fluoranthène	Villerville	BE en 1994, puis LMROU jusqu'en 1999, puis BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2009, BE en 2010, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie liquide haute performance (LMRouen) jusqu'en 1996, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse IE-1 jusqu'en 2010, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (Veyrand et al. 2007).
fluoranthène	La Fosse Les Jacquets Comprian	LMROU jusqu'en 1999, puis BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2016, sauf LABOCEA-29P en 2012 et 2013, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie liquide haute performance (LMRouen) jusqu'en 1998, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse IE-1 jusqu'en 2007, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2016 sauf Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LABOCEA) en 2012 et 2013, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (Veyrand et al. 2007).
fluoranthène	Pointe St. Gervais	BE en 1994, puis LMROU jusqu'en 1999, puis BE jusqu'en 2007, puis LMROU jusqu'en 2011, puis LABOCEA-29 en 2012, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie liquide haute performance (LMRouen) jusqu'en 1998, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse IE-1 jusqu'en 2007, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2011, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (LABOCEA) en 2012, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (Veyrand et al. 2007)
fluoranthène	Toulon Lazaret	BE en 1994, puis LMROU jusqu'en 1999, puis BE jusqu'en 2007, puis LMROU en 2010, puis LABERCA-ONERIS	Chromatographie liquide haute performance (LMRouen) jusqu'en 1998, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse (LMRouen) jusqu'en 2000, puis Chromatographie gaz – spectrométrie de masse IE-1 jusqu'en 2010, puis Chromatographie gaz – Spectrométrie de masse en tandem (Veyrand et al. 2007)
mercure	Cap de La Hève	BE et LMROU en novembre 1984	Absorption atomique vapeur froide (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Fluorescence atomique (1) jusqu'en 1997 puis Absorption atomique sans flamme (Analyseur de mercure)
mercure	Villerville	BE	Absorption atomique vapeur froide (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Fluorescence atomique (1) jusqu'en mai 1997 puis Absorption atomique sans flamme (Analyseur de mercure)
mercure	La Fosse Les Jacquets Comprian	BE et LMROU en novembre 2008, 2009 et 2010	Absorption atomique vapeur froide (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Fluorescence atomique (1) jusqu'en mai 1997 et les mois de novembre 2008 à 2011 puis Absorption atomique sans flamme (Analyseur de mercure)
mercure	Pointe St. Gervais	BE et LHUM de 1985 à 1986 et avril et juillet 1984 et LMROU en novembre 2010	Absorption atomique vapeur froide (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Fluorescence atomique (1) jusqu'en mai 1997 puis Absorption atomique sans flamme (Analyseur de mercure)
mercure	Toulon Lazaret	BE et LHUM de 1985 à 1986 et avril et juillet 1984 et LMROU en novembre 2010	Absorption atomique vapeur froide (Aminot et Chaussepied, 1983) jusqu'en 1986, puis Fluorescence atomique (1) jusqu'en mai 1997 puis Absorption atomique sans flamme (Analyseur de mercure) sauf ICP/MS (méthode ANSES/LSAliments/LSA-INS-0084) en 2017

9. ANNEXE 3 : 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 :

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

avec

Y_t , observation

μ_t , niveau moyen ou tendance

$\mathbf{F} \mathbf{S}_t$, 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 :

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

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 $\omega_{\mathbf{S},t}$ 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 multinormal 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 sinusoïdale, 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 (Petrus 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 certains 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^e 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 ».

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

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^f (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 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 manquantes. 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 consécutif 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. Le ou 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.

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

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.

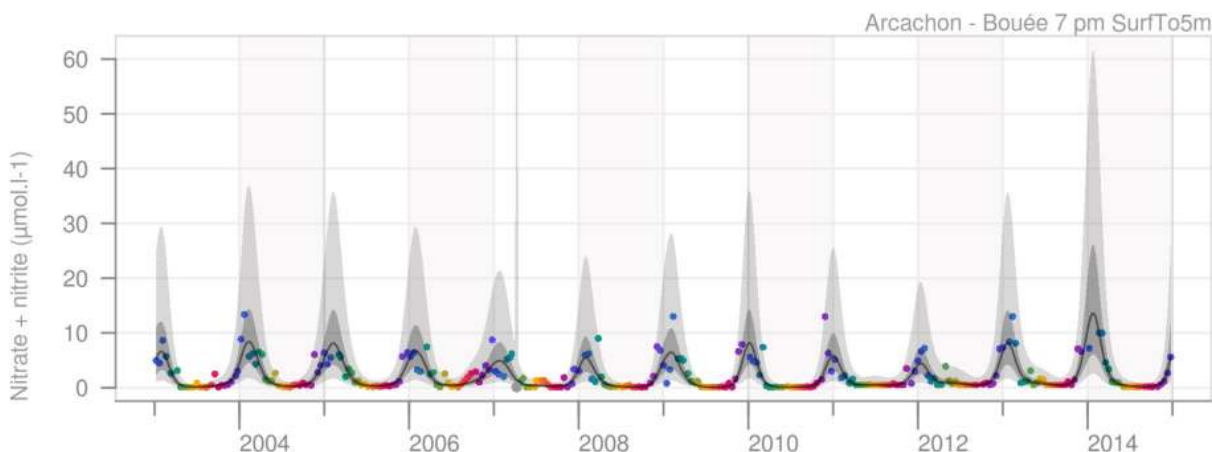
Une dernière expression de la variabilité consiste à définir la précision en pourcentage de la mesure effectuée. Typiquement, la mesure X réalisée à la précision P % signifie que l'intervalle de confiance à 95 % de la mesure X est $[X - X.P/100 ; X + X.P/100]$ (Aminot and Kérouel, 2004). Ainsi, l'intervalle 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-structurelle 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 $\log_{10} \text{ cell./L}$. Toutefois, dans ce dernier cas, les représentations seront également faites en cell./L , unité plus familière aux experts des comptages phytoplanctoniques.

10. ANNEXE 4 : PRÉSENTATION DES GRAPHIQUES UTILISÉS.

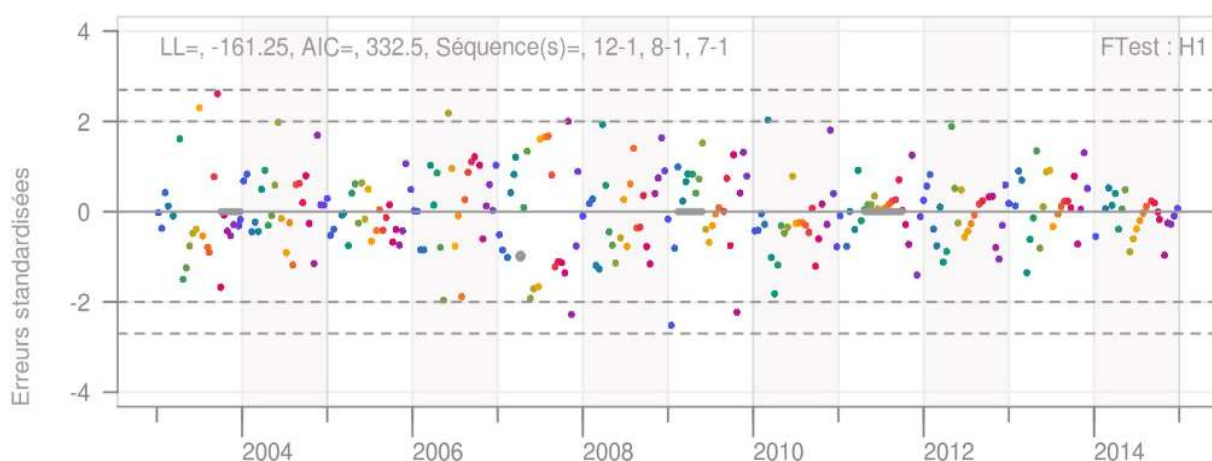
Les graphiques de la concentration en (nitrate+nitrite) à « Arcachon-Bouée 7 » sont utilisées à titre d'exemple.

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 verts 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

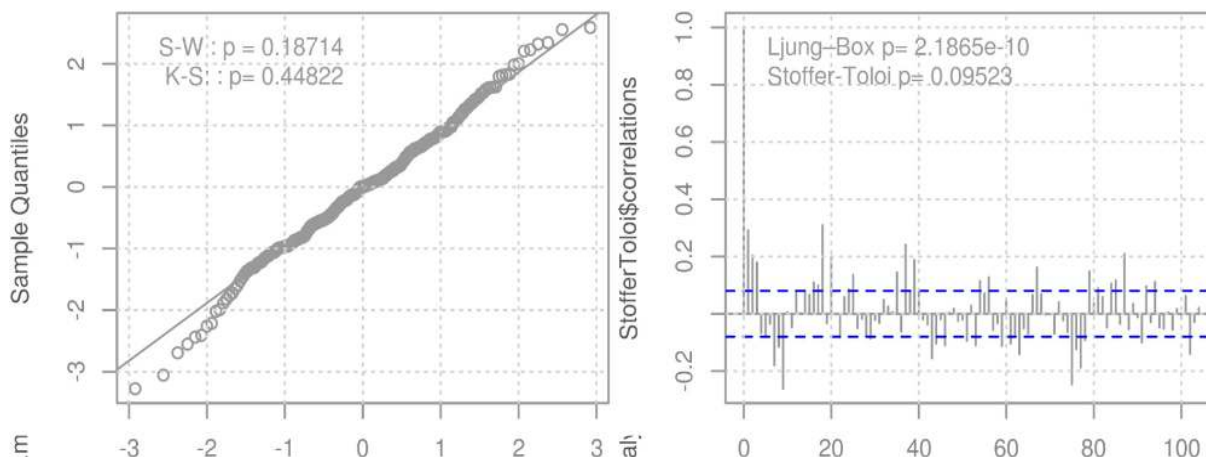


Les résidus standardisés sont les écarts entre le modèle et les observations, divisés par la variance du modèle. Ils sont supposés indépendants et identiquement distribués selon une loi normale centrée réduite (*i.e.* de moyenne 0 et de variance 1). Les lignes pointillées horizontale aux ordonnées 2 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'Akaike^g, « Séquence(s) » informe sur l'existence d'erreurs standardisées de même signe

g. 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

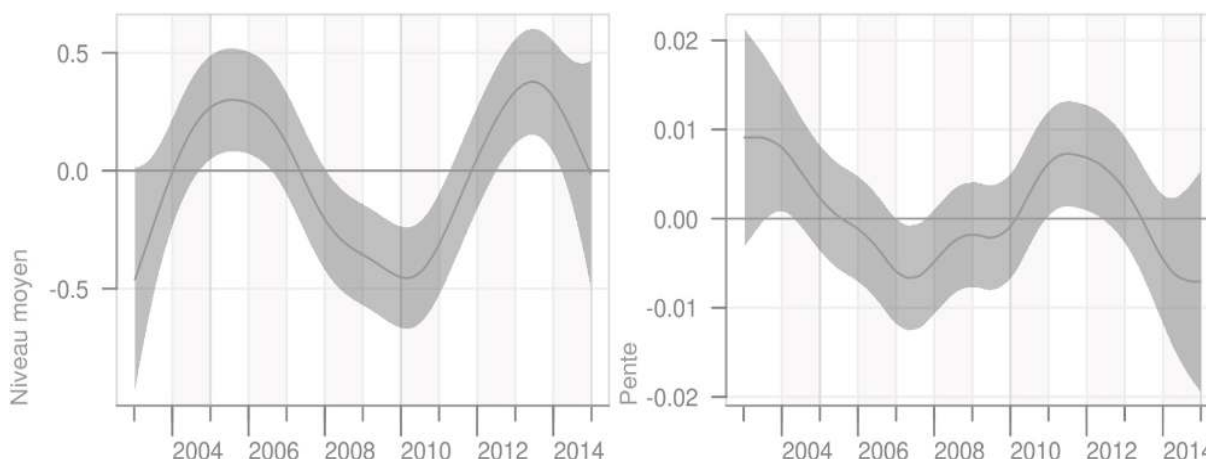
consécutives de longueur supérieure ou égale à 7 (*i.e.* dont la probabilité est inférieure à 0.008 sous l'hypothèse d'indépendance) sous la forme de deux chiffres séparés par un tiret : le premier est une longueur de séquence en termes d'unités temporelles, le second est le nombre d'occurrence de séquences 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 2 m 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 (2013a). « Stoffer-Toloi » donne la p-value pour le test du même nom d'autocorrélation globale pour les 2 m 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 (2013b).

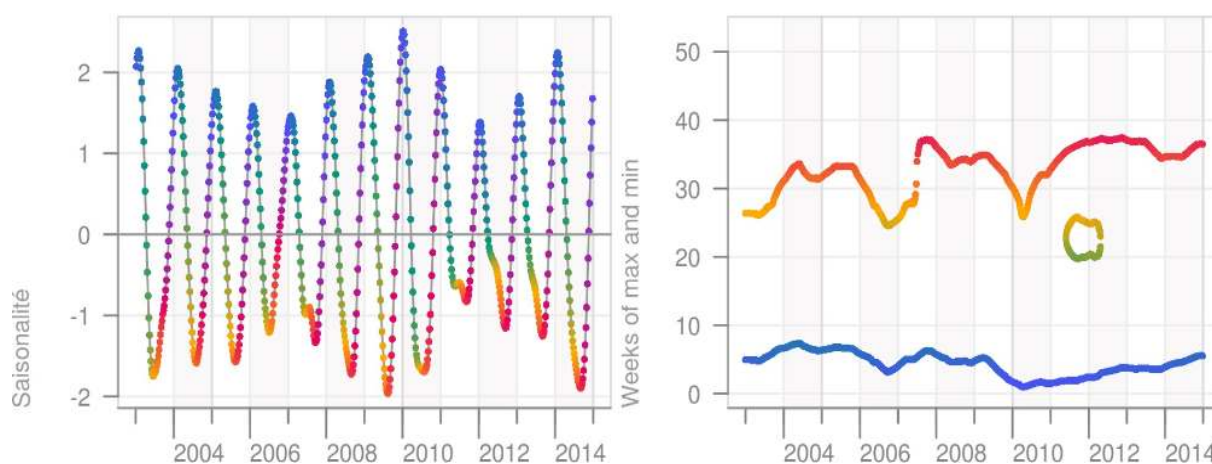
Niveau moyen et pente



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 %.

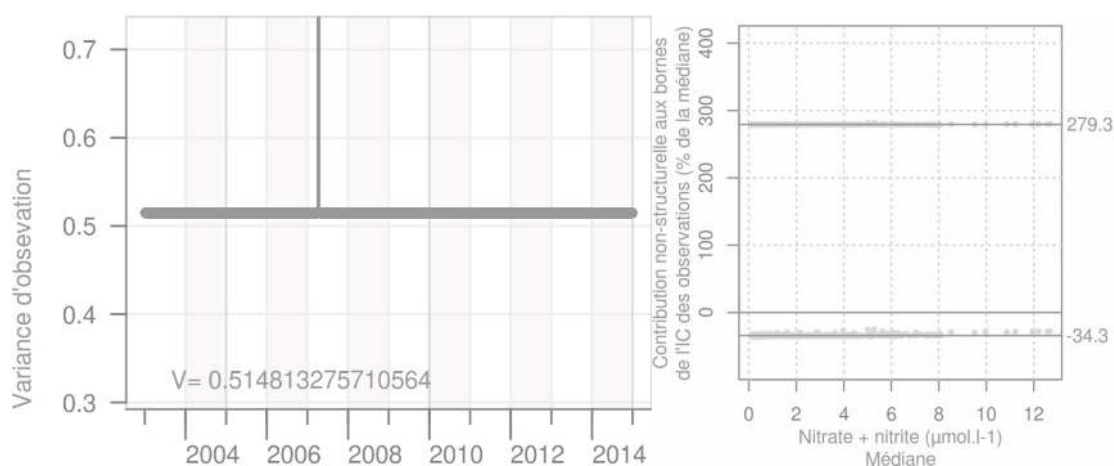
vraisemblance du modèle en ajoutant un paramètre. Le critère d'information d'Akaike permet de pénaliser les modèles en fonction du nombre de paramètres afin de satisfaire le critère de parcimonie. On choisit alors le modèle avec le critère d'information d'Akaike le plus faible. (source : wikipédia)

Saisonnalité et phénologie



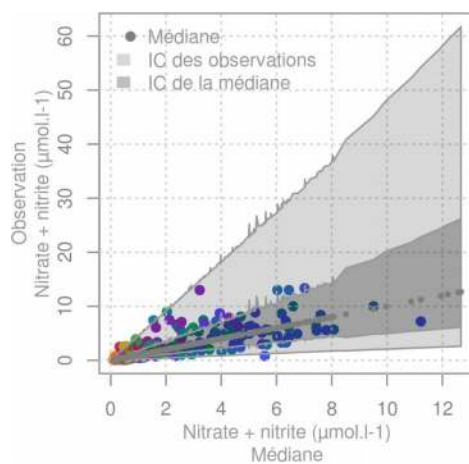
À gauche est représenté le paramètre structurel estimé de saisonnalité. À droite sont portées les unités temporelles pour lesquelles la saisonnalité atteint un maximum ou un minimum, c'est-à-dire pour lesquelles la dérivée première de la saisonnalité s'annule.

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 attribuables 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).



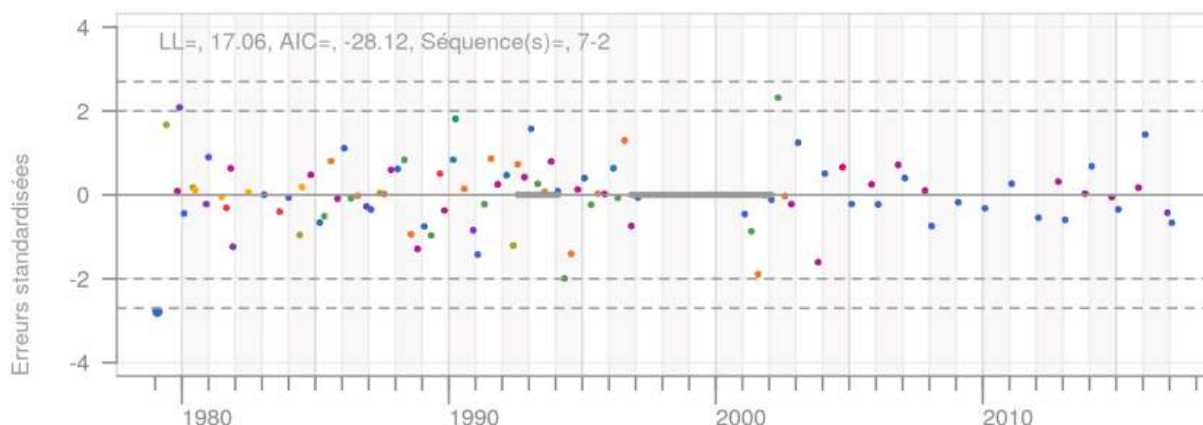
11. ANNEXE 5 : DÉTAILS DES EXPERTISES CADMIUM

À titre d'illustration, les sections ci-dessous apportent pour les séries concernant le cadmium des commentaires quant aux résultats de la procédure automatique et donnent des éléments d'échanges des expertises statistiques et thématiques. Il s'agit essentiellement d'une mise en formes de documents de travail. Ils explicitent en particulier les éléments diagnostiques conduisant d'une étape à l'autre, donnent les gains en vraisemblance et la vérification des hypothèses des modèles. En ce qui concerne ce dernier point, chaque évocation d'un modèle est suivi des deux mentions « normalité » et « indépendance » correspondant aux deux hypothèses concernant les résidus et de « OK » ou « KO » selon qu'elles sont vérifiées ou pas. Procédures automatiques, expertises statistiques et thématiques alternent et sont signalées explicitement.

010-P-055 *Mytilus edulis*

Procédure automatique

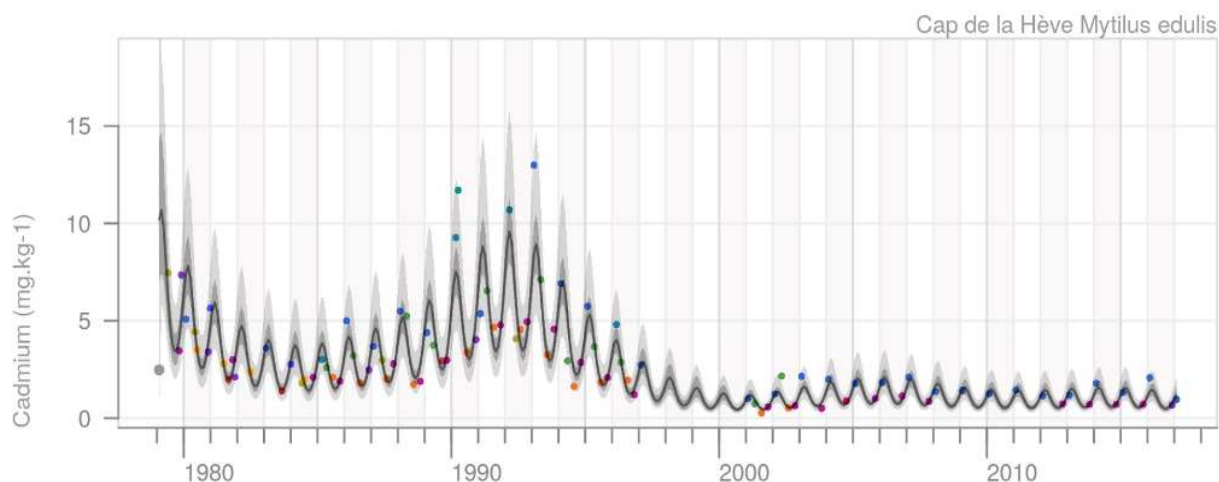
Le premier modèle (normalité OK, indépendance KO) identifie une valeur exceptionnelle : la première observation qui est trop faible pour la saison.



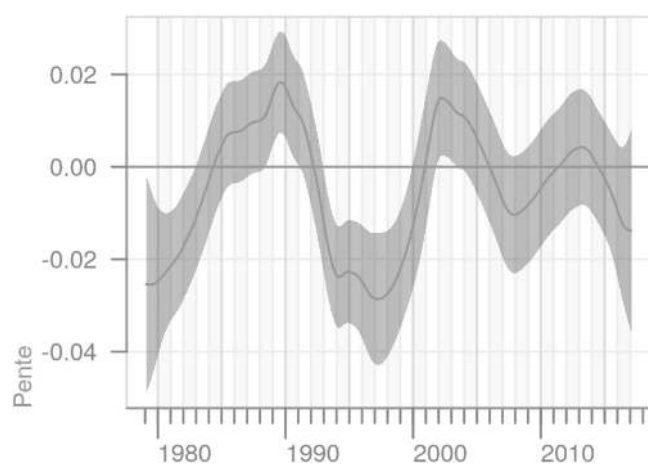
Le second modèle (normalité OK, indépendance OK) traitant cette valeur comme exceptionnelle présente un gain significatif de vraisemblance ($p < 0.0001$). Ce second modèle ne suggère pas de nouvelle valeur exceptionnelle par contre deux périodes de rupture sont identifiées : la première à l'augmentation entre fin 1988 et début 1990 et la seconde à la diminution entre mi-1993 et mi-1998 (bornes incluses). Un troisième modèle inclut deux suggestions de changement de niveau en décembre 1990 et novembre 1994. Ce modèle est numériquement moins vraisemblable que le précédent. Deux périodes de rupture possibles restent identifiées, toujours aux mêmes périodes. Un quatrième modèle (normalité OK, indépendance OK) suggère un changement de niveau en septembre 1990 : le modèle est plus vraisemblable que le précédent mais moins que le second modèle. Ce dernier est conservé comme point de départ d'éventuelles nouvelles suggestions.

Expertise statistique

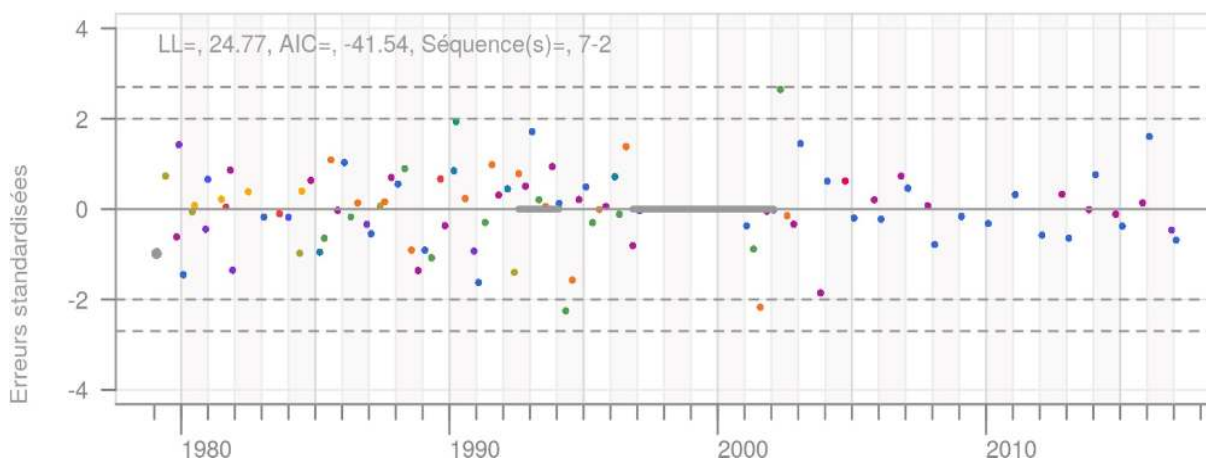
En 1990, on ne peut pas exclure que la suggestion de changement de niveau soit liée aux valeurs élevées début mars et fin avril 1990.



Elles sont deux à plus de deux fois supérieures à celles observées les années précédentes, début février et mai 1989. En mars 1992 et février 1993 on retrouve des concentrations supérieures à 10 mg.kg^{-1} . Si ces quatre valeurs tirent sans aucun doute la croissance de cette période, les valeurs des autres mois témoignent de la réalité de l'augmentation significative de la pente de mi-1988 à fin 1990.

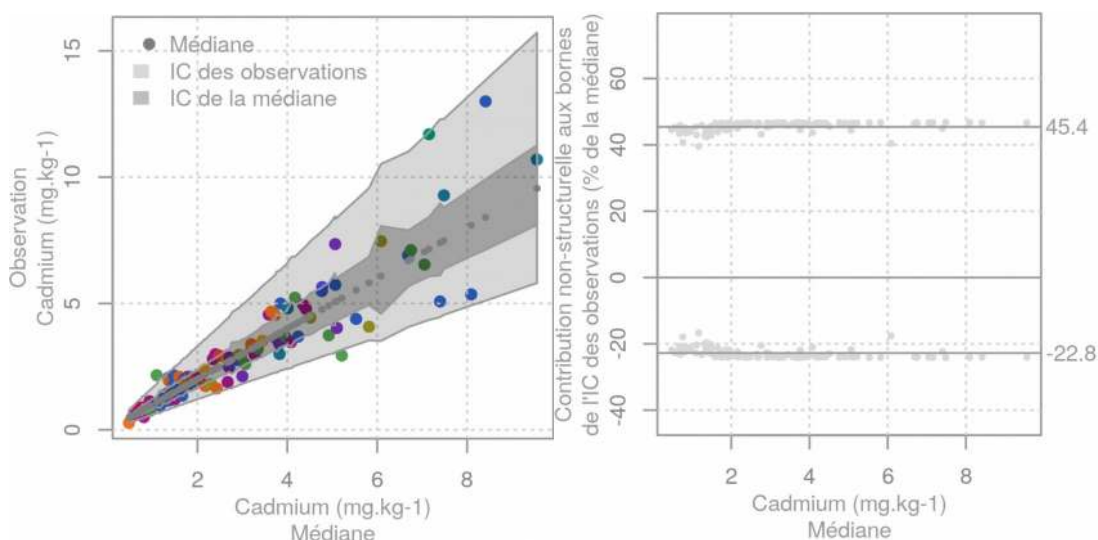


La seconde période de suggestion de changement de niveau (i.e. 1993-1998) inclut en particulier l'interruption de mesures à partir de février 1997, soit un tiers de la taille de la fenêtre de suggestion pour un changement de niveau. L'absence de mesure ne permet pas au modèle de se mettre à jour avant la prochaine mesure (i.e. février 2001) et tire en longueur l'épisode de décroissance, comme on peut le voir à l'examen des séquences d'erreurs de même signe :



Finalement sur ce graphique on remarque l'existence d'une séquence de 7 valeurs consécutives de même signe, d'août 1992 à février 1994. Dans le même temps, la concentration en mai 1994 présente une baisse importante à un niveau qui n'avait pas été observé depuis 1985. Une suggestion de changement de niveau en mai 1994 conduit à un modèle beaucoup moins vraisemblable que le modèle 2. Ainsi ce dernier, parce qu'il est à la fois le plus vraisemblable et le plus parcimonieux reste le modèle de référence.

Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-23 %, +45 %).

Expertise Thématique

Pour Cap de la Hève, l'outlier du 26/02/79 est qualifié comme bon, mais il correspond à la moitié de la valeur mesurée à Villerville : la valeur paraît douteuse. Je validerais donc le modèle deux et un changement de niveau en décembre 1990 lié au changement de minerai plus riche en Cd en 1987. Le changement proposé en novembre 1994 ne me paraît pas robuste.

Expertise statistique

La vraisemblance du modèle obtenu avec un changement de niveau en 1990 est moindre que celle du modèle deux, c'est-à-dire que ce nouveau modèle n'explique pas mieux les données et est moins

parcimonieux, on a pas besoin de saut de niveau pour expliquer l'augmentation de concentration de début 1989 à 1991. L'augmentation de teneur en cadmium dans le phosphogypse liée à celle du minerai utilisé est sans doute la cause de l'augmentation de la concentration en Cd dans les moules, mais il semble que le processus par lequel le métal est passé de l'un à l'autre ne se traduise pas un changement de niveau.

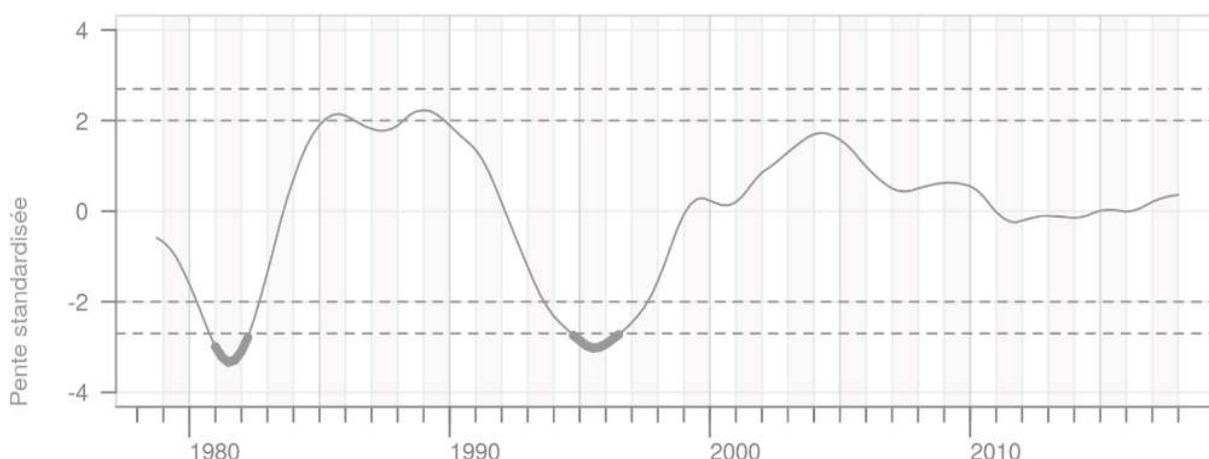
Expertise thématique

On en reste au modèle deux.

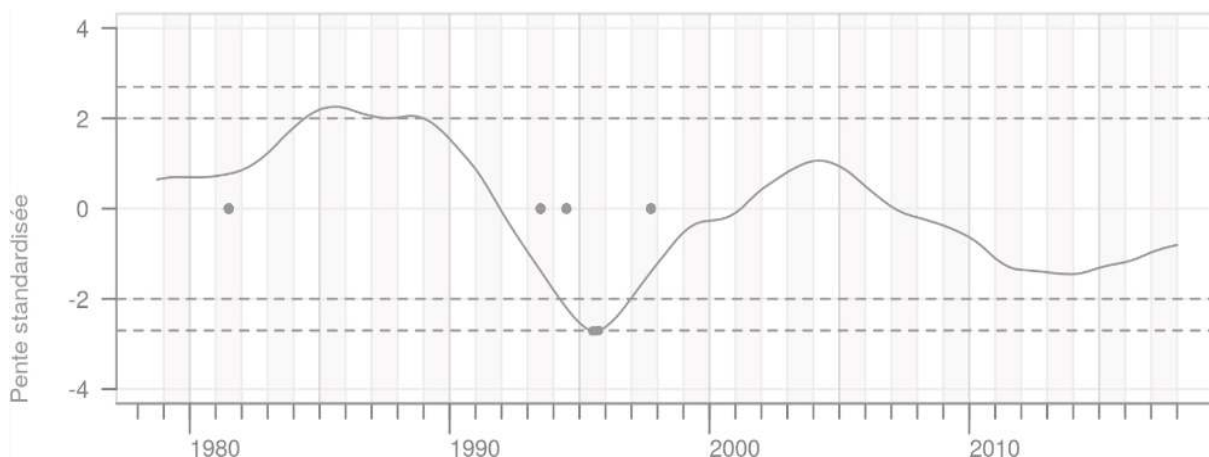
011-P-005 *Mytilus edulis*

Procédure automatique

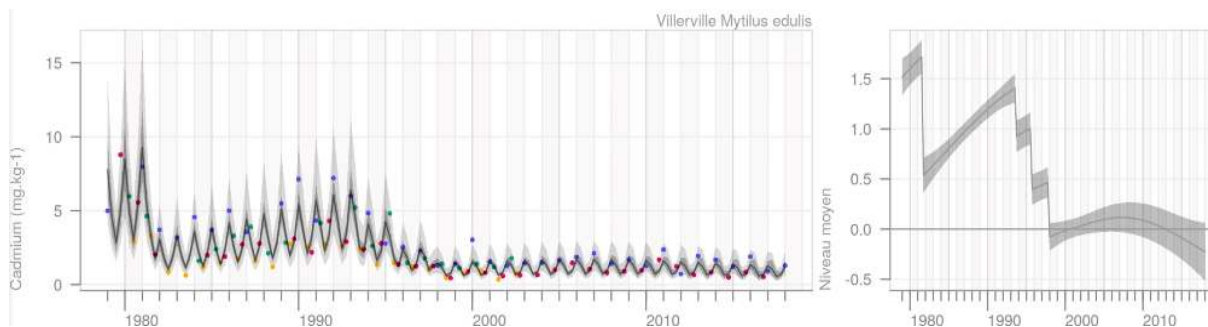
Le premier modèle (normalité OK, indépendance OK) n'identifie pas de valeur exceptionnelle. En revanche il identifie deux périodes de changement de niveau possible, autour de 1981 et 1995 :



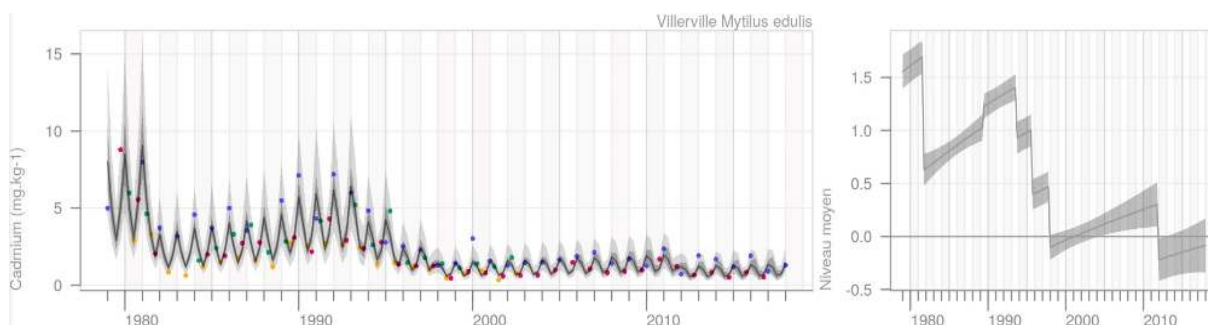
Le second modèle (normalité OK, indépendance OK) valide le changement de niveau en novembre 1981, mais pas celui suggéré en 1994. Le gain de vraisemblance est significatif ($p=0.0004$) et la vraisemblance est inchangée avec ou sans changement suggéré en 1994. Le troisième modèle (normalité OK, indépendance OK) suggère un nouveau changement en 1993, gain non significatif. Même chose pour le quatrième modèle (normalité OK, indépendance OK) avec un changement en 1997. À l'issue de ces suggestions successives, la période de changement possible s'est réduite considérablement à une très courte période de 1995 :



De ce fait, le cinquième modèle (normalité OK, indépendance OK) présente une possibilité de choix plus réduite et suggère un changement en novembre 1995, qui présente un gain significatif de vraisemblance ($p=0.0043$) par rapport au second modèle.



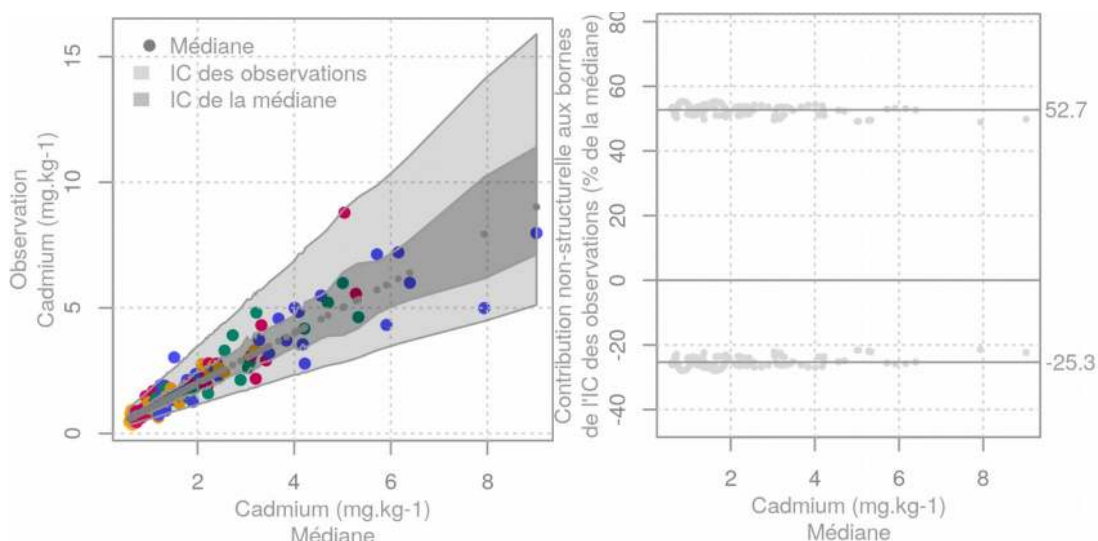
Le sixième et dernier modèle (normalité OK, indépendance OK) suggère un changement de niveau en août 1989 et un autre en février 2012 avec un nouveau gain significatif de vraisemblance ($p=0.0407$).



Expertise statistique

L'expertise automatique décrite ci-dessus semble indiquer que les 2 premiers changements importants sont en 1981 et 1995. Un modèle incluant seulement ces deux suggestions présente une vraisemblance supérieure à celle du modèle 2 mais non significativement différente.

Les graphiques associés relatifs à la variance pour le modèle 6 sont les suivants :



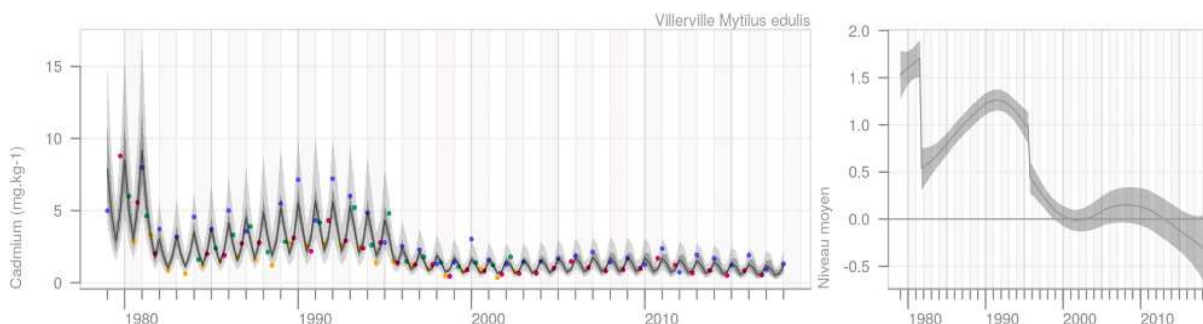
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-25 %, +53 %).

Expertise thématique

Les changements de niveau qui paraissent être les plus significatifs sont ceux de novembre 1981 et novembre 1995 : que donne le modèle avec seulement ces deux changements ? En 1981, il pourrait être lié au passage à un minerai pauvre en Cd, et en 1995 à l'arrêt de l'activité (arrêt des usines en 1992 et démantèlement).

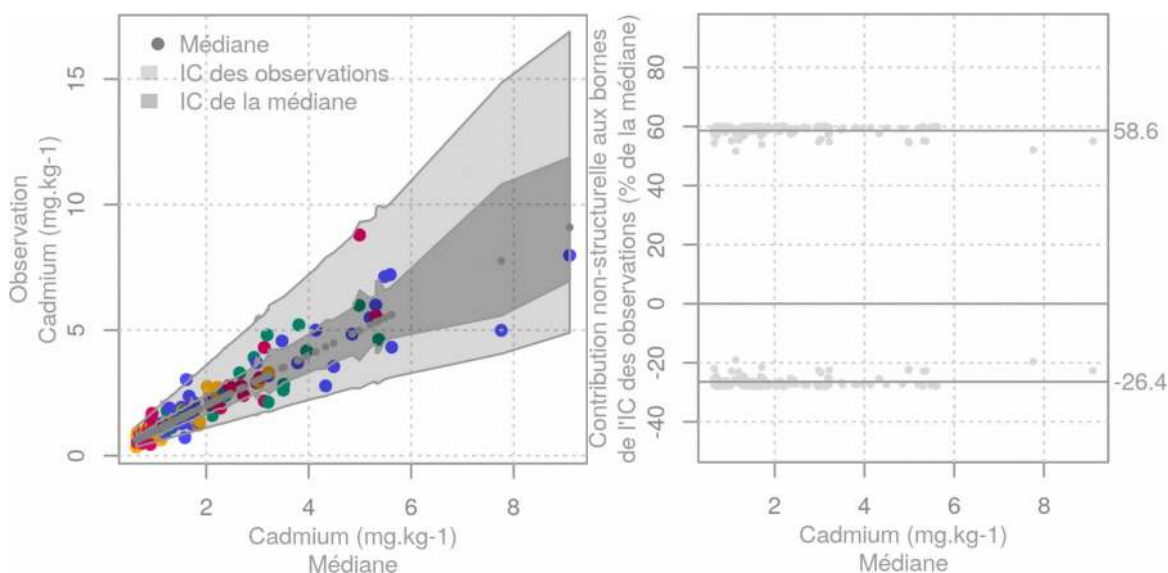
Expertise statistique

Ci-dessous le modèle (normalité Ok, indépendance OK) avec seulement un changement en 1981 et un autre en 1995 :



Pas de suggestion de changement de niveau. Cela en fait un modèle parcimonieux avec des changements de niveau que l'on peut expliquer sans un recours excessif aux informations exogènes.

Les graphiques associés au dernier modèle retenu et relatifs à la variance sont les suivants :



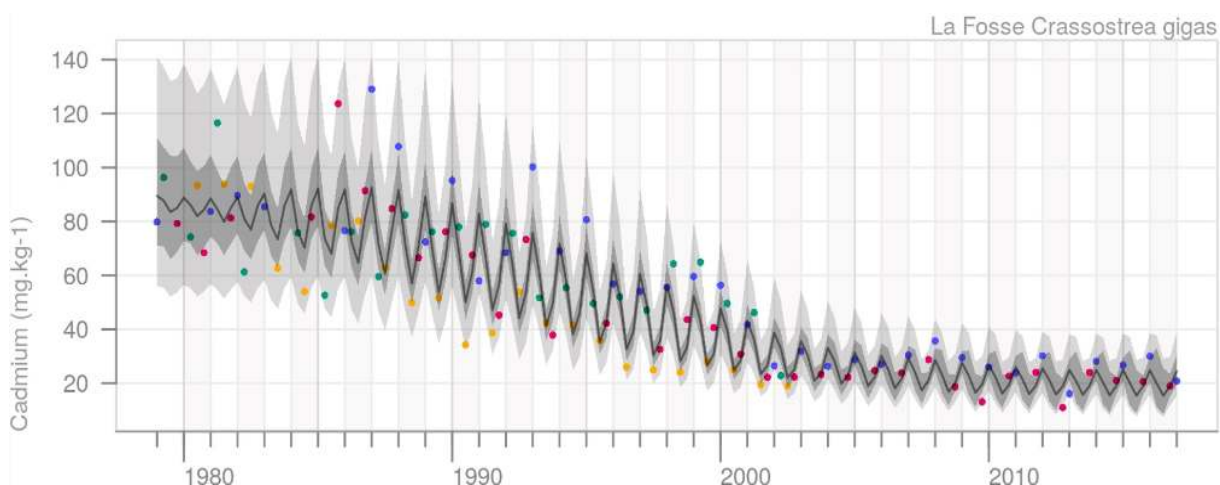
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-26 %, +59 %).

Expertise thématique

OK pour le nouveau modèle avec des changements de niveau en 1981 et 1995.

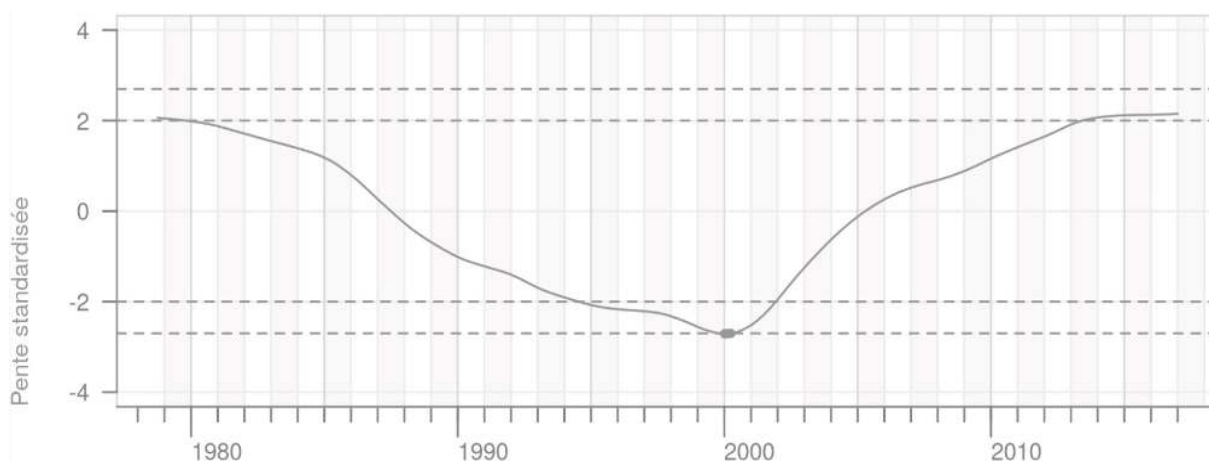
085-P-007 *Crassostrea gigas* Procédure automatique

Le premier et unique modèle (normalité OK, indépendance OK) ne suggère ni valeur exceptionnelle ni changement de niveau.



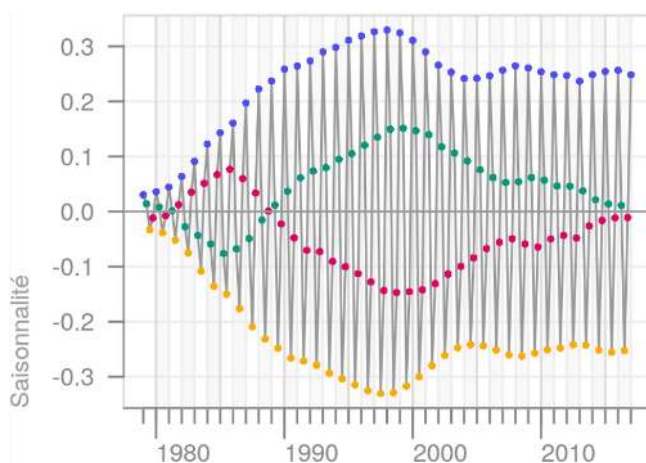
Expertise Statistique

Toutefois, il faut noter que sur le graphique de la pente standardisée on identifie une possibilité de changement de niveau.



L'algorithme de suggestion de date peut être pris en défaut, il semble que l'on soit dans l'un de ces cas.

L'évolution de la saisonnalité est un second point remarquable.

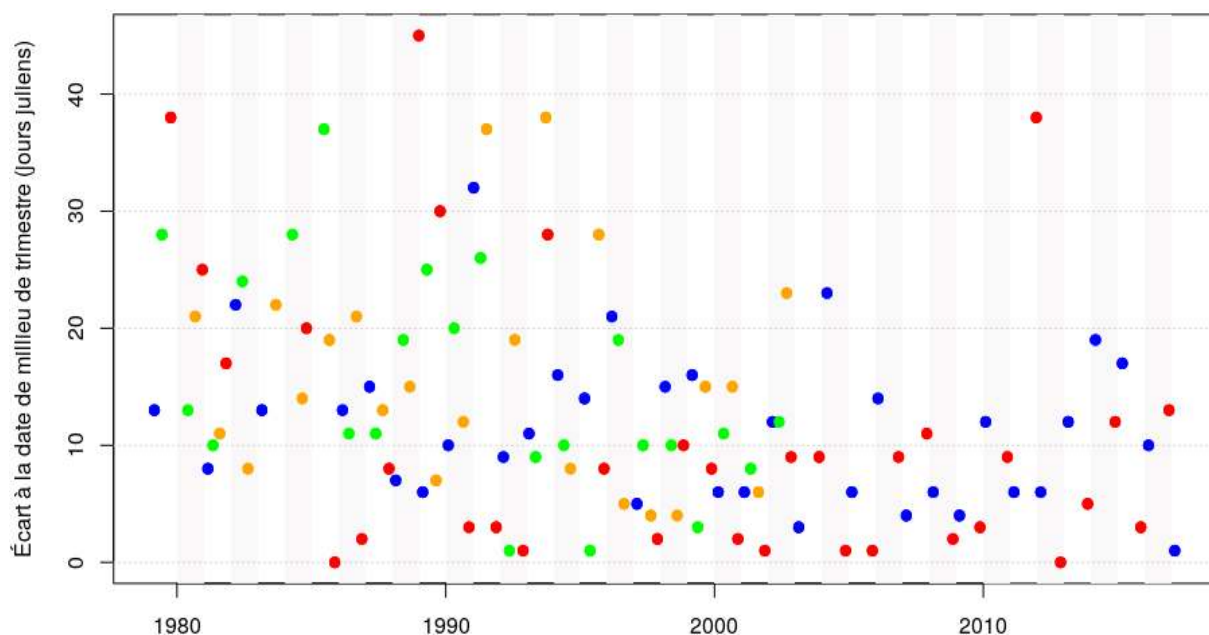


À la fin de la période considérée, elle présente le schéma connu d'un hiver affichant la concentration maximale, en baisse au printemps jusqu'à un minimum estival avant une nouvelle augmentation à l'automne. Mais au début de la période on observe à la fois une contraction des amplitudes et une inversion du printemps et de l'automne. Ce résultat est lié aux données :

- de 1981 à 1983 la concentration estivale est supérieure à l'hiver et l'automne, mais également au printemps en 1981 et 1983 ;
- en 1979 et 1982 la concentration printanière est la plus forte de l'année ;
- de 1979 à 1982 la concentration automnale est la plus faible annuelle ;
- en 1985 et 1986 les concentrations estivales sont plus fortes qu'au printemps, en 1986 plus forte également que l'hiver ;
- de 1984 à 1986 ce sont les concentrations automnales qui sont les plus fortes.

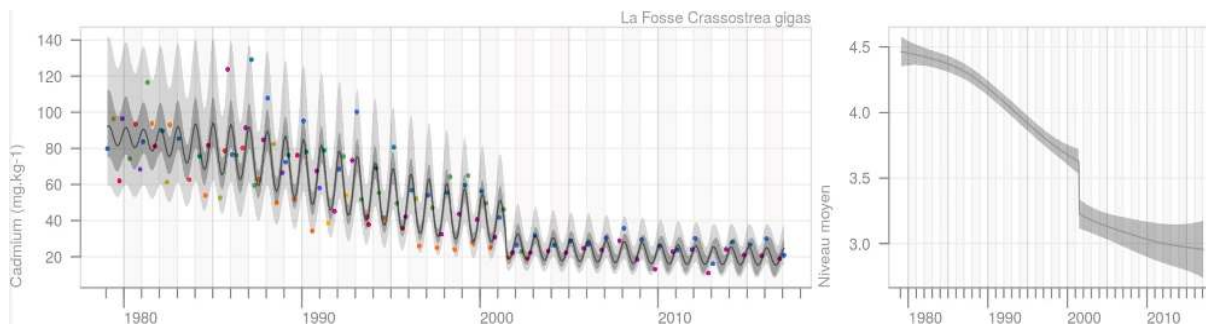
Du fait de ces variations saisonnières importantes, la variance de la saisonnalité est élevée et avec elle la capacité d'adaptation du facteur saisonnier qui mécaniquement dans cette première partie de période vient « coller » au mieux aux données. Ainsi, l'absence de schéma saisonnier clair conduit à l'érosion de l'amplitude de la saisonnalité confinant à son caractère non significatif. De ce point de départ et en l'absence de mécanisme d'identification et de traitement de rupture dans la saisonnalité, le modèle ne peut que s'adapter lentement lorsque les données reviennent au schéma « classique » à partir de 1987. Cette singularité a nécessairement un impact important sur l'ensemble du modèle et des résultats qui en découlent.

La connaissance d'une possible variabilité importante dans la date d'échantillonnage au début du ROCCH amène à considérer les écarts à la date de milieu de trimestre en jours juliens :

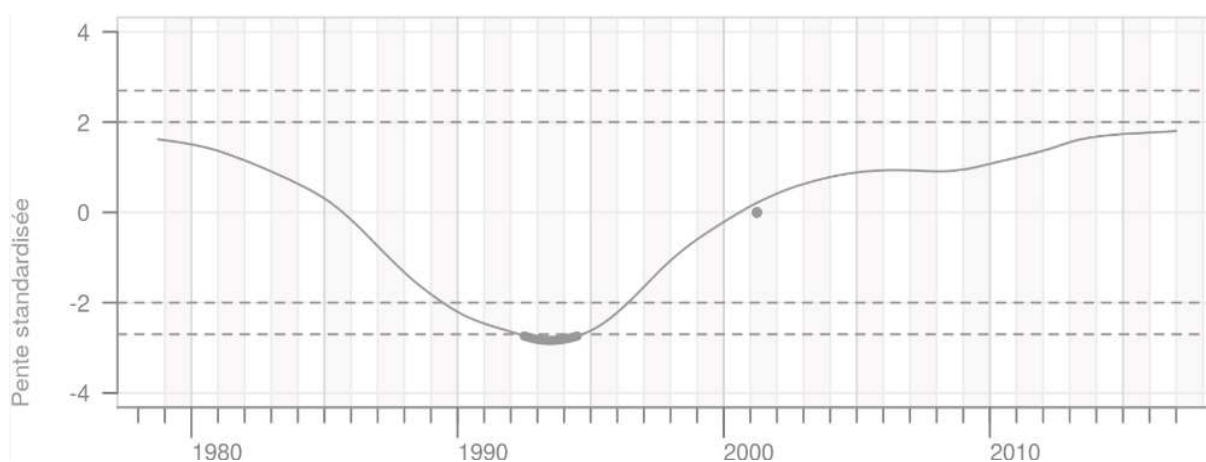


On voit que jusqu'en 1984 les écarts sont toujours au minimum de 8 jours et jusqu'en 1996 une part importante est au-delà de 3 semaines et jusqu'à un mois et demi de la date cible. Il est possible qu'une part de variabilité soit liée à la date d'échantillonnage, mais sans doute pas la totalité.

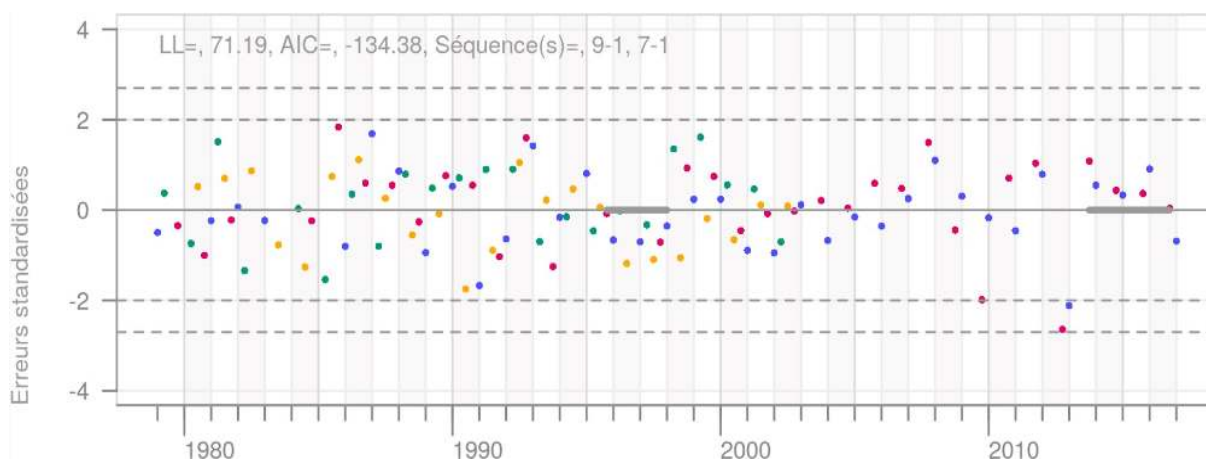
La suggestion de changement identifiée début 2000 et le fait qu'à partir de l'été 2001 les concentrations sont les plus faibles jamais observées par saison, amènent à réaliser une intervention sur le niveau moyen au 21/08/2001. Ce nouveau modèle (normalité OK, indépendance OK) présente une vraisemblance significativement supérieure ($p=0.0006$).



Ce modèle suggère une période de changement de niveau entre 1989 et 1996 :

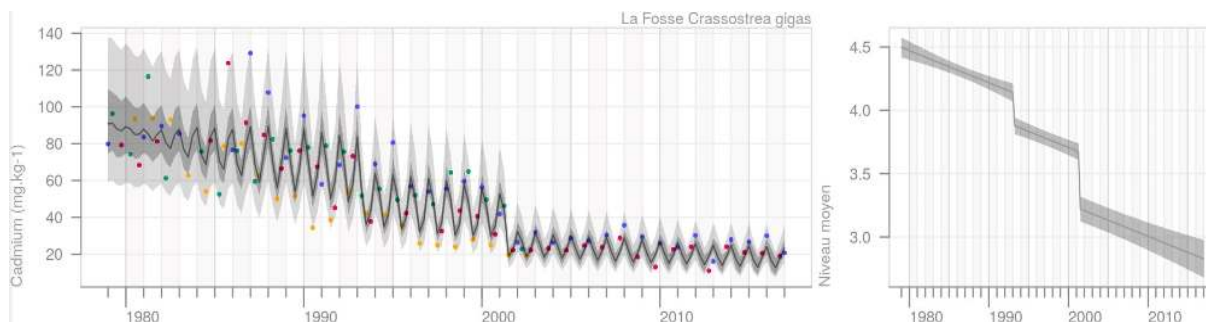


En 1993, les données printanières et automnales deviennent plus faibles, mais les données hivernales et estivales semblent peu affectées. Les erreurs standardisées présentent une séquence de même signe de 9 dates à partir de fin 1995 :

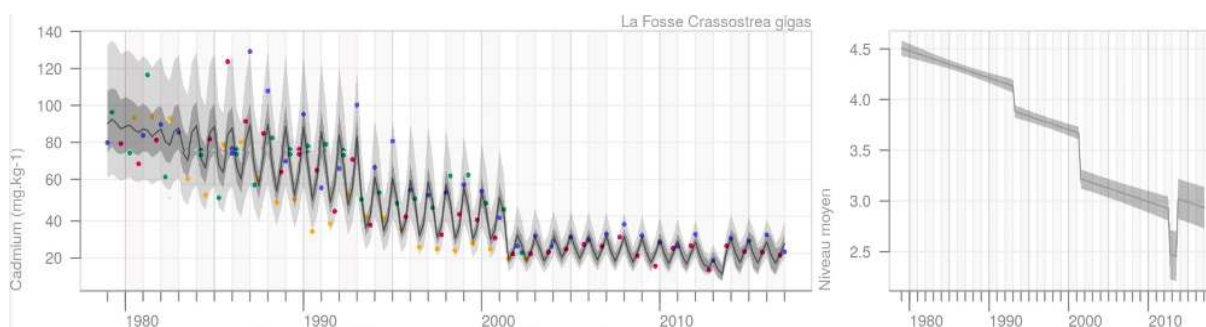


À l'examen, la séquence ne semble pas tant due à une baisse de concentration en 1995 qu'à une augmentation au printemps 1998. Une suggestion de changement de niveau à cette date conduit à un modèle non significativement différent du précédent.

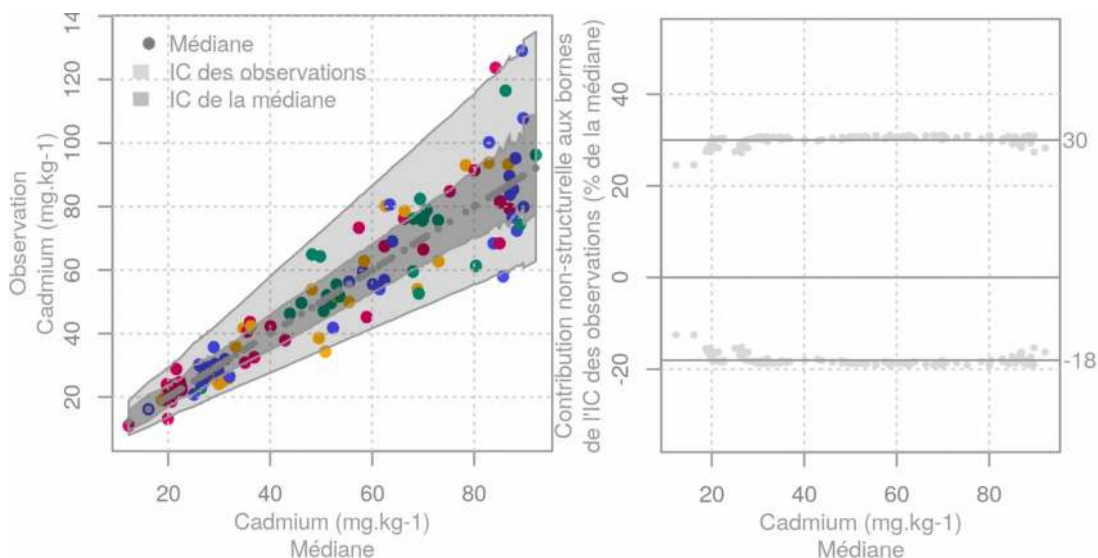
Alternativement un changement de niveau au printemps 1993 débouche sur un modèle (normalité OK, indépendance OK) présentant un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0355$) et a « dissous » la séquence d'erreur évoquée précédemment :



Ce modèle présente la même séquence d'erreurs de même signe en fin de série que le modèle précédent (cf. graphique ci-avant). Elle est précédée de deux valeurs à l'automne 2012 et l'hiver 2013 qui sont les plus faibles de leurs saisons respectives. Lorsqu'elles sont traitées comme exceptionnelles, le gain de vraisemblance n'est pas significatif. Alternativement, identifier la période comme un changement de niveau à la baisse à l'automne 2012 et à la hausse au printemps 2013 produit un modèle (normalité OK, indépendance OK) avec un gain significatif de vraisemblance :



Ce modèle ne présente plus de suggestion ou de diagnostic de changement de niveau ou de valeur exceptionnelle. Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



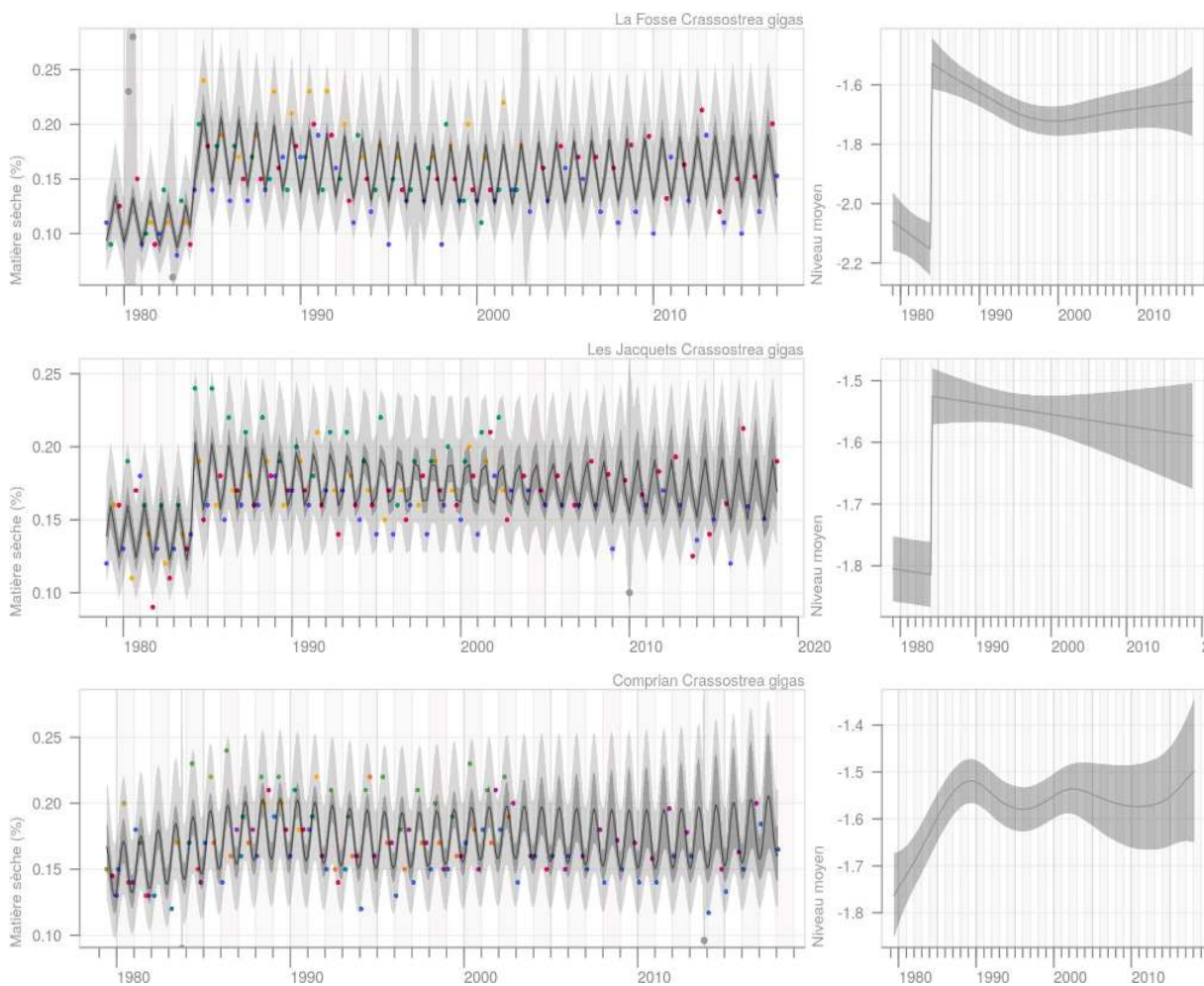
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +29 %).

Expertise thématique

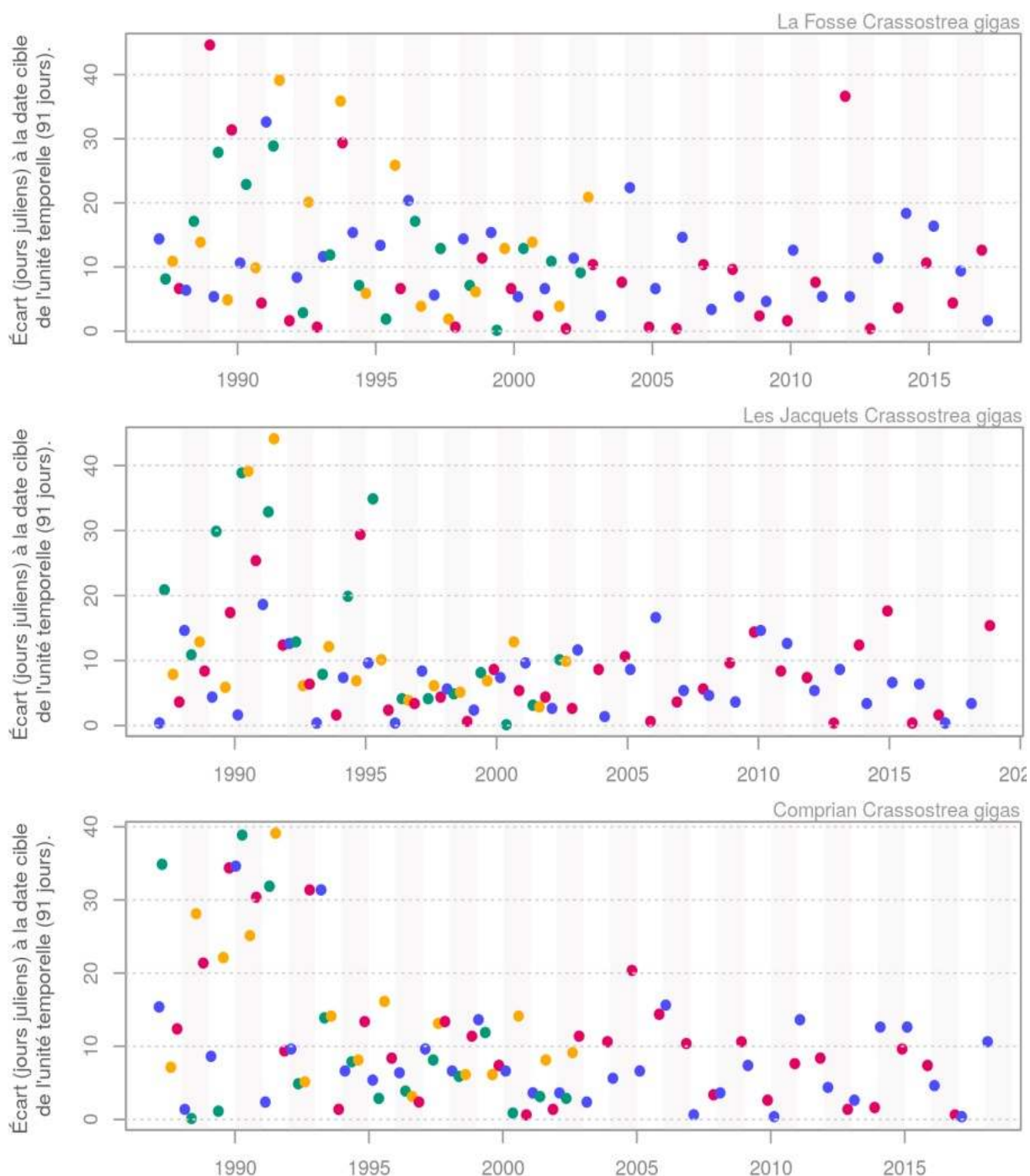
En début de fenêtre temporelle, l'obtention de résultats discutables et éventuellement attribuables à un caractère douteux des données suggère de porter le début de la période d'étude à 1987.

Expertise statistique

Les résultats des premiers modèles tous lieux relevant du LER d'Arcachon confondus ont montré des saisonnalités singulières en début de séries et les concentrations à « Les jacquets » et « Comprian » sont plus faibles à cette période (cf. lieux ci-après). Par ailleurs, d'une part les pourcentages de matière sèche se sont révélés inférieurs :



D'autre part, les dates effectives des échantillonnages sont plus éloignées des dates cibles du protocole :



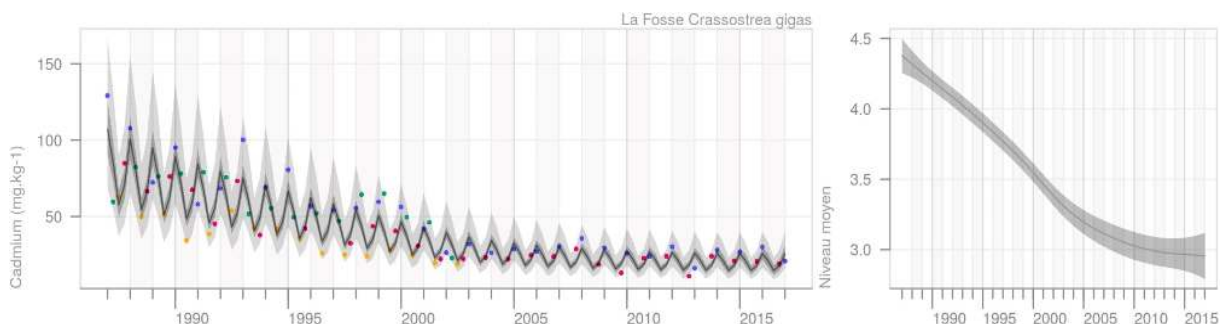
Enfin, jusqu'à et y compris 1986, la méthode de mesure est « Absorption atomique sans flamme (Aminot et Chaussepied, 1983) » et devient « Absorption atomique sans flamme (correction Zeeman) » à partir de 1987.

Admettant que le comportement de début des séries affecte les estimations de l'ensemble des modèles et que ce comportement est lié aux mesures sans pour autant être à même d'en déterminer la cause avec les éléments à disposition^h, il a été convenu de ne pas utiliser les mesures de concentration de cadmium avant 1987.

h. En particulier, les pourcentages de matière sèche et les écarts à la date cible du protocole d'échantillonnage sont identiques pour tous les contaminants des lieux de surveillance relevant d'Arcachon sans pour autant que les modèles présentent les mêmes symptômes.

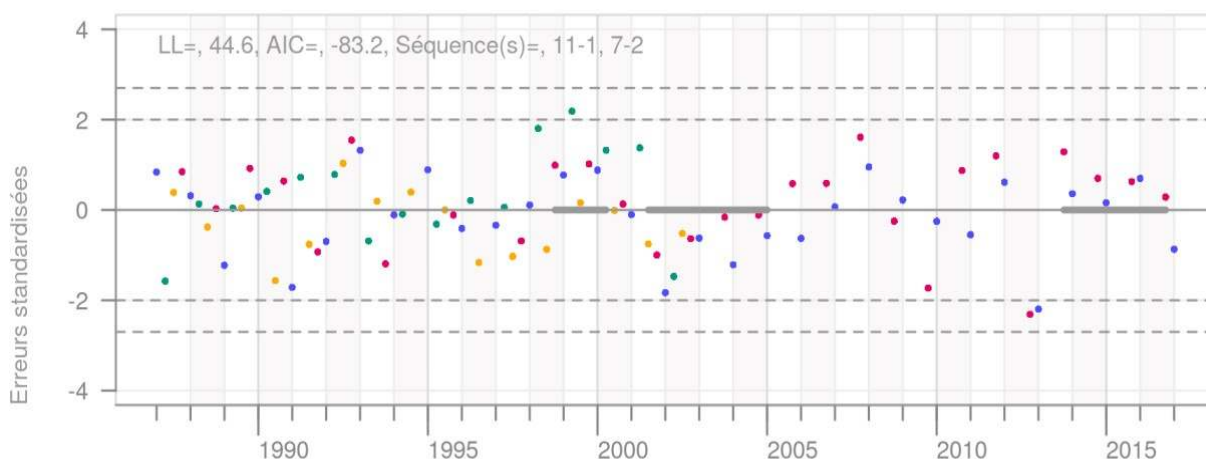
Procédure automatique

Le premier modèle (normalité OK, indépendance OK) ne suggère ni valeurs exceptionnelles ni changements de niveau.

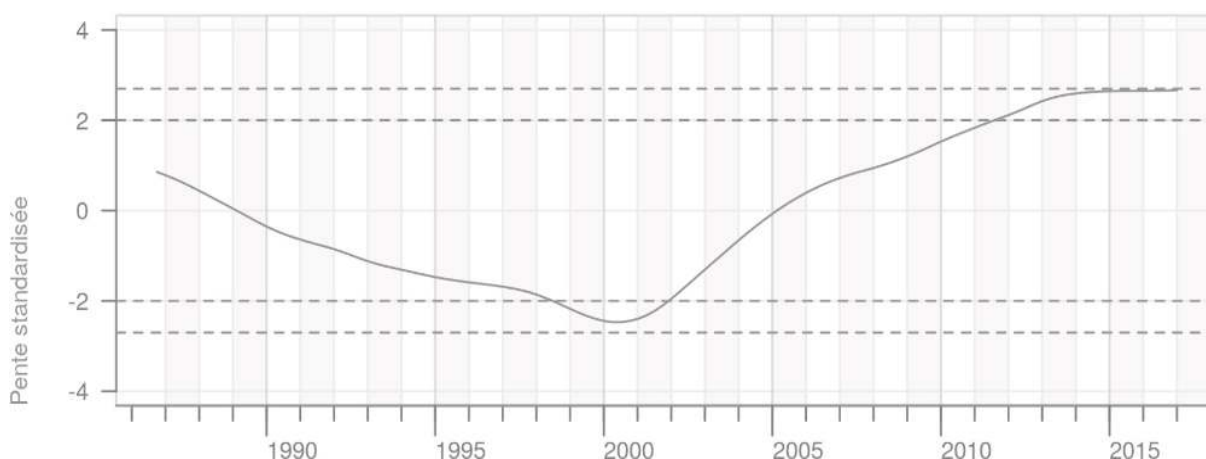


Expertise statistique

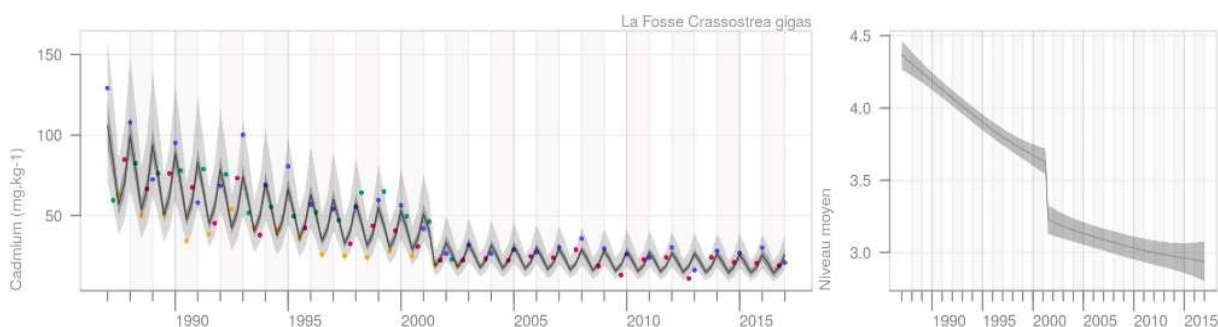
Les erreurs standardisées présentent plusieurs périodes de plus de sept erreurs consécutives de même signe :



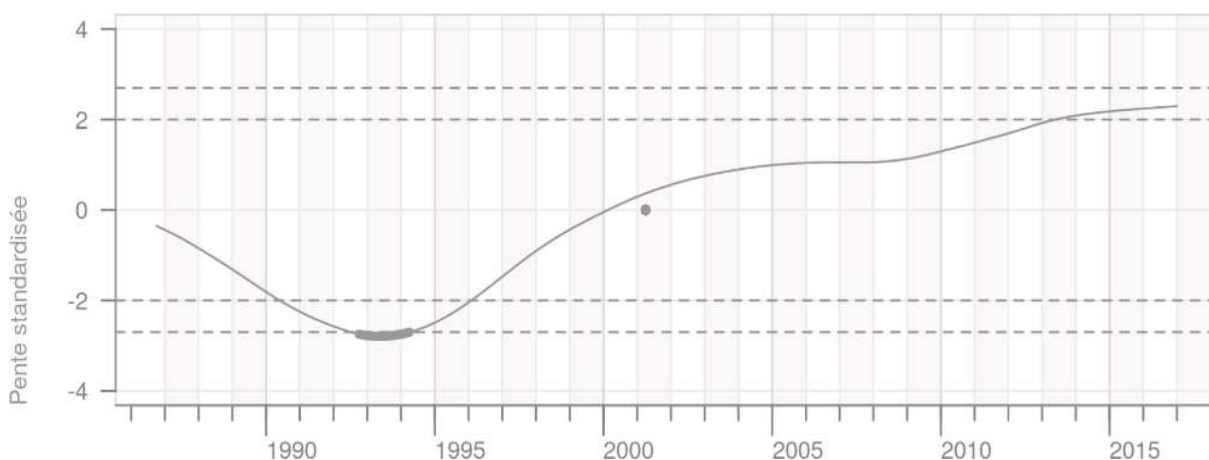
L'examen des données montre une baisse importante de concentration à l'été 2001 (i.e. 46.2 à 19.5 mg.kg⁻¹) qui correspond au début d'une plage de 11 erreurs standardisées négatives (i.e. symptôme d'une surestimation du modèle) mais aussi à une période pendant laquelle la valeur absolue de la pente standardisée est très importante :



Un second modèle (normalité OK, indépendance OK) intégrant une suggestion de changement à l'été 2001 présente un gain significatif de vraisemblance ($p=0.0003$) :

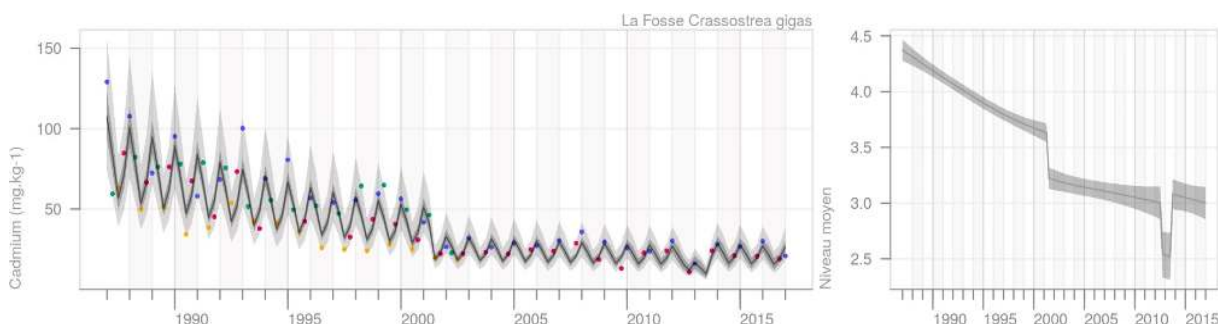


Cette intervention a dissous les deux premières séquences d'erreurs de même signe. Le modèle suggère un changement de niveau courant 1993 :



Une suggestion au printemps n'entraîne pas de gain significatif de vraisemblance, par voie de conséquence elle n'est pas retenue.

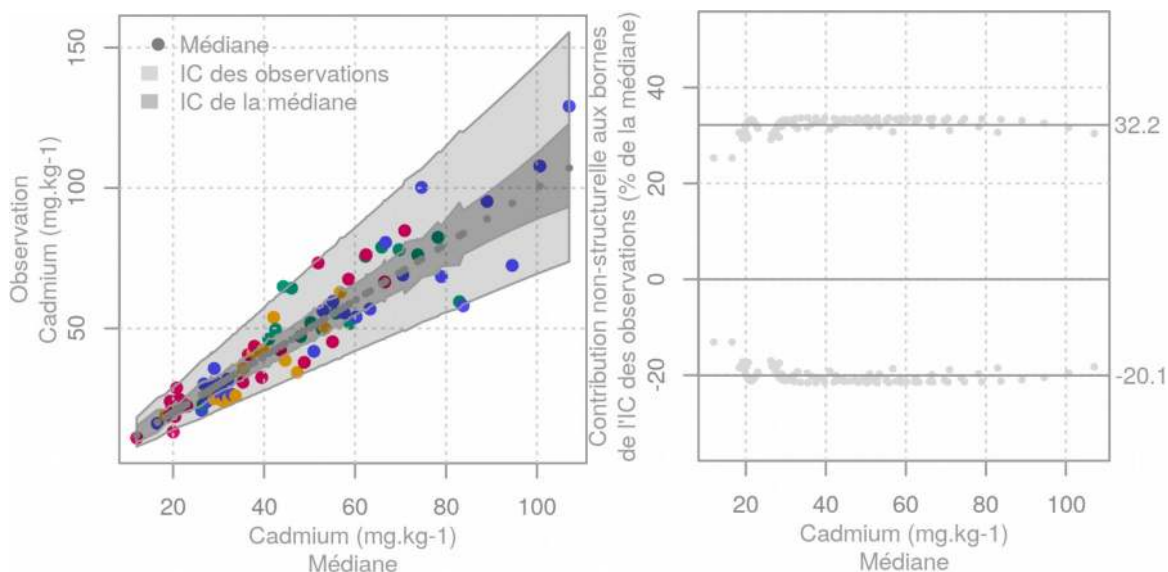
Pour finir, la concentration de l'automne 2012 (i.e. 10.97 mg.kg⁻¹) et l'hiver 2013 (i.e. 16.13 mg.kg⁻¹) sont plus faibles que les mesures antérieures et postérieures, induisent des erreurs standardisées élevées, mais pas exceptionnelles, et sont suivies dans le premier et le second modèle d'une séquence d'erreurs standardisées de même signe. Deux suggestions de changements de niveau aux automnes 2012 et 2013 induisent un modèle (normalité OK, indépendance KO) présentant un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0072$) :



Le modèle propose toujours un changement de niveau en 1993 mais une suggestion au printemps n'entraîne toujours pas de gain en vraisemblance.

En ce qui concerne le premier changement de niveau, à titre d'information exogène, on peut noter qu'à Bordeaux, l'usine de superphosphate Soferti voit ses activités suspendues le 12/10/2001 par arrêté préfectoral (La Depeche). Le 27/11/2001 « l'activité de fabrication d'acide sulfurique a redémarré [...] ». En revanche, la production d'engrais nitrates reste suspendue » (La Croix). Elle est fermée depuis juin 2006.

Les graphiques associés au dernier modèle retenu et relatifs à la variance sont les suivants :



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-20 %, +32 %).

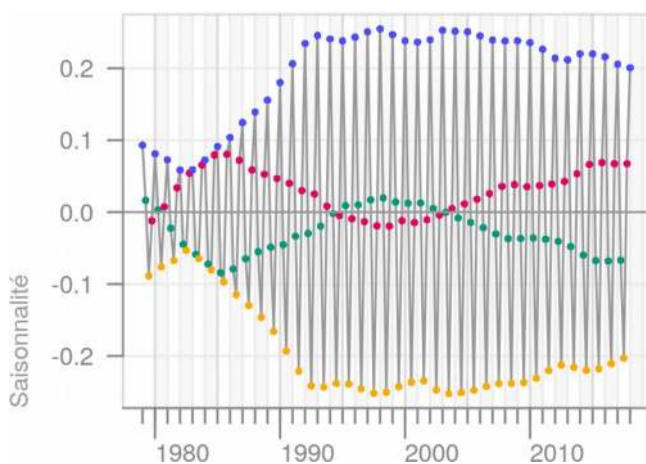
Expertise thématique

OK avec le dernier modèle.

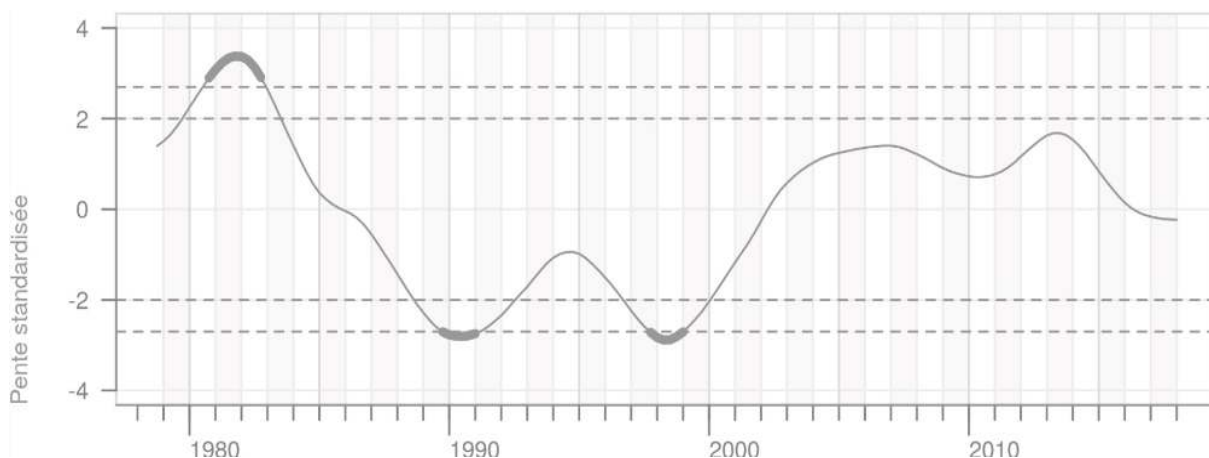
088-P-067 *Crassostrea gigas*

Procédure automatique

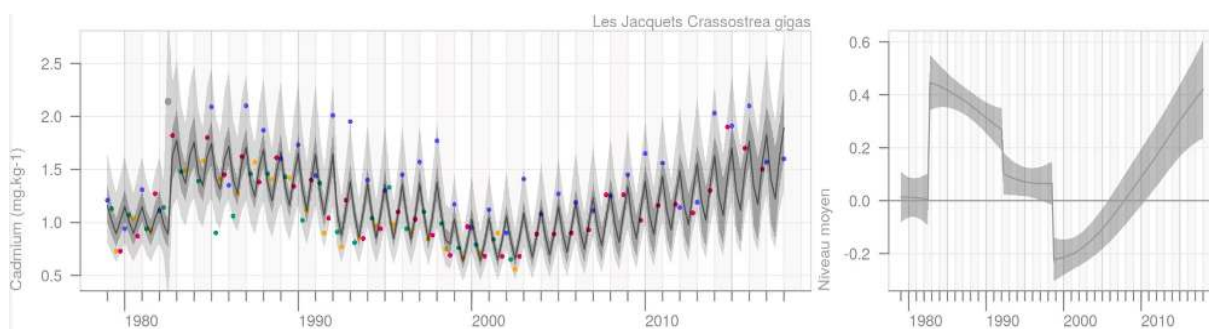
Le premier modèle (normalité OK, indépendance OK) identifie une valeur exceptionnelle en août 1982. La saisonnalité présente ici le schéma précédemment observé :



Le second modèle (normalité OK, indépendance OK) possède une vraisemblance significativement supérieure au précédent ($p=0.0043$) traitant l'observation d'août 1982, i.e. plus forte concentration de la série pendant le trimestre estival présentant habituellement la plus faible concentration annuelle, comme exceptionnelle et suggère 3 périodes de changements de niveau possible :

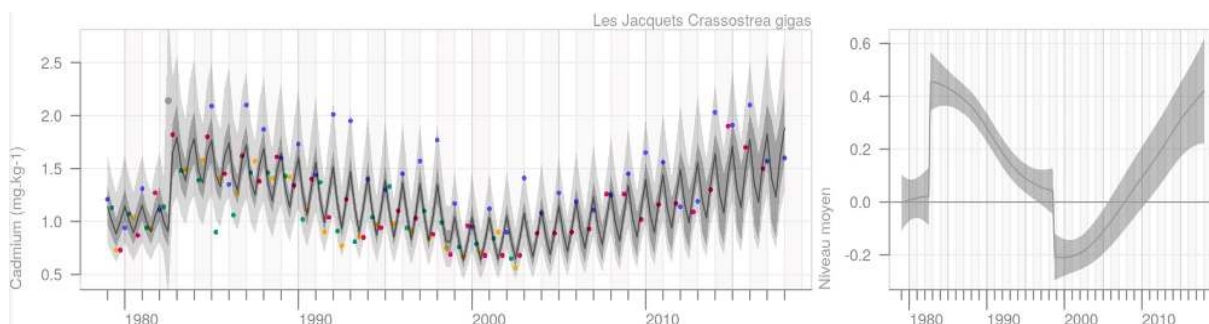


Les trois dates de rupture de niveau moyen suggérées conduisent à un nouveau modèle (normalité OK, indépendance OK) avec un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0391$). Aucune autre intervention n'est suggérée par les éléments diagnostics.

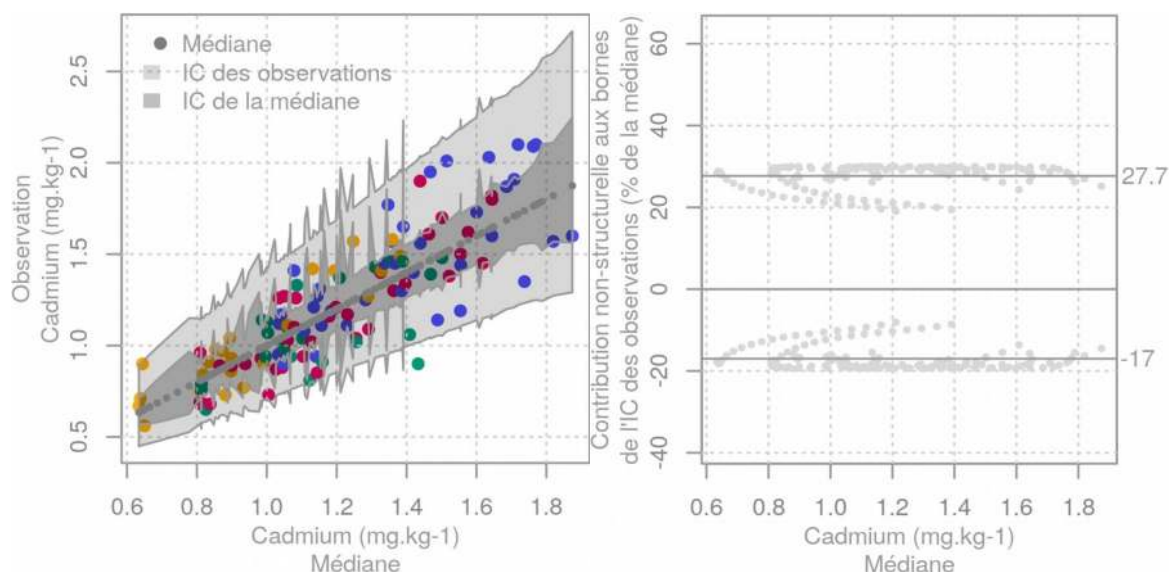


Expertise statistique

De manière à aider à répondre à la question de la validation des changements de niveau en 1982, 1992 et 1998, j'ai procédé à leur introduction pas à pas au regard du gain de vraisemblance. Pris séparément, aucun des trois changements n'induit de gain de vraisemblance significatif. Pris deux à deux, seule la combinaison (1982,1998) débouche sur un modèle (normalité OK, indépendance OK) présentant un gain significatif en vraisemblance. À ce dernier, l'ajout d'un changement en 1992 n'induit pas de gain significatif de vraisemblance. Ceci milite en faveur de considérer comme optimal le modèle avec les changements en 1982 et 1998 :

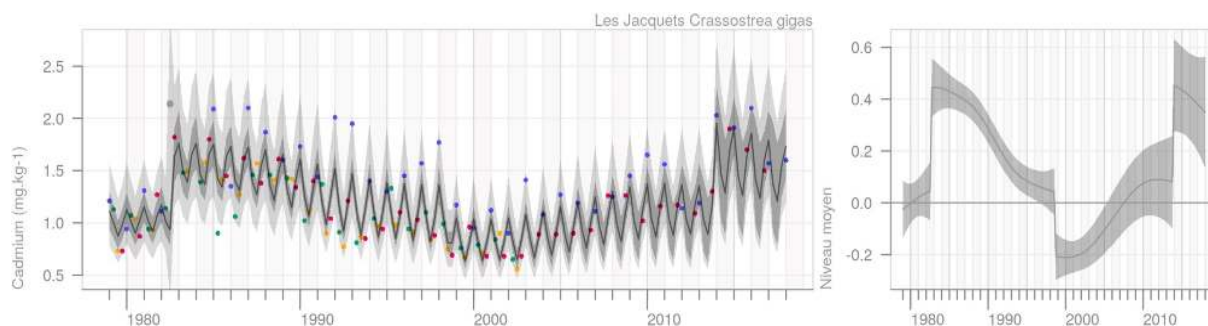


Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



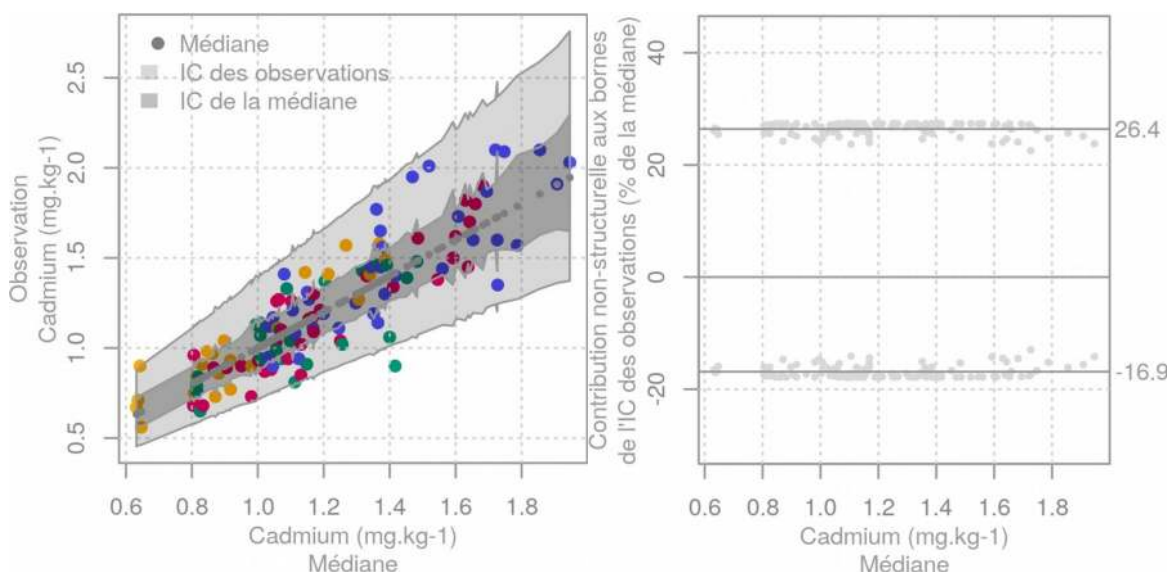
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +28 %).

Suite à l'analyse du site suivant (cf. ci-après), la suggestion qui y est faite d'un changement à l'automne 2013 amène à regarder si quelque chose de similaire ne serait pas pertinent ici. L'augmentation pourrait être à l'hiver 2014. Le modèle (normalité OK, indépendance OK) obtenu est plus significatif ($p=0.0218$) et la réduction de la variance d'observation entraîne l'identification d'une nouvelle valeur exceptionnelle au printemps 1985.



Le traitement de cette dernière n'entraîne pas un gain significatif de vraisemblance. Par ailleurs, la suggestion de changement de niveau persiste au début des années 90. Là encore les différents essais de date de changement ont été sans succès, y compris les combinaisons avec la valeur exceptionnelle de 1985.

Avec le dernier modèle les contributions non-structurelles à la variance d'observation sont (-17 %, +26 %) :

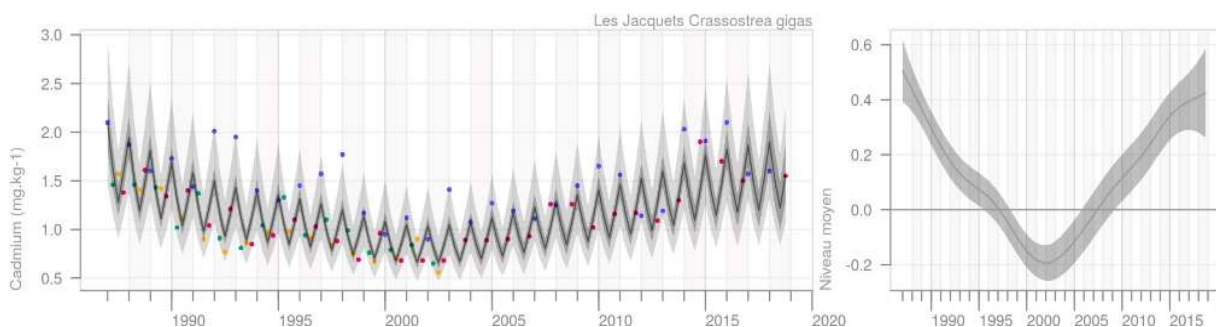


Expertise thématique

Pour l'ensemble des points : sortir les données de 83 à 86 (réalisées par la méthode sans correction zeeman).

Procédure automatique

Le premier modèle (normalité OK, indépendance OK) :

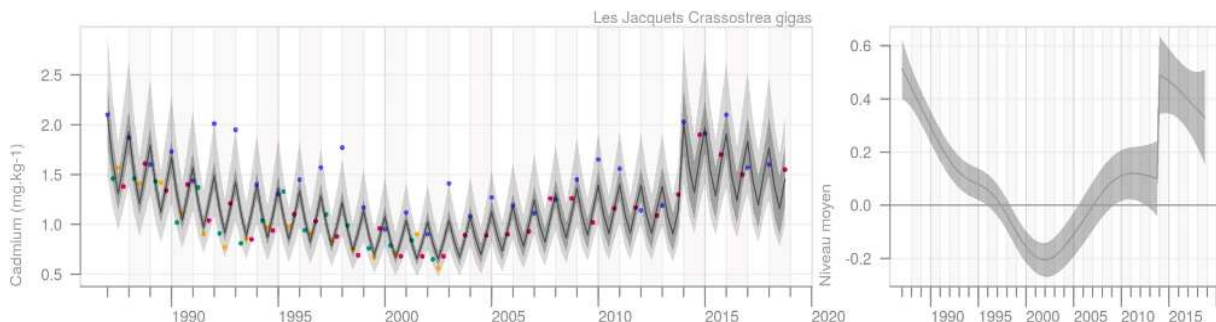


suggère un changement de niveau autour de 1990. La date identifiée de manière automatique ne conduit pas à un modèle plus vraisemblable.

Expertise statistique

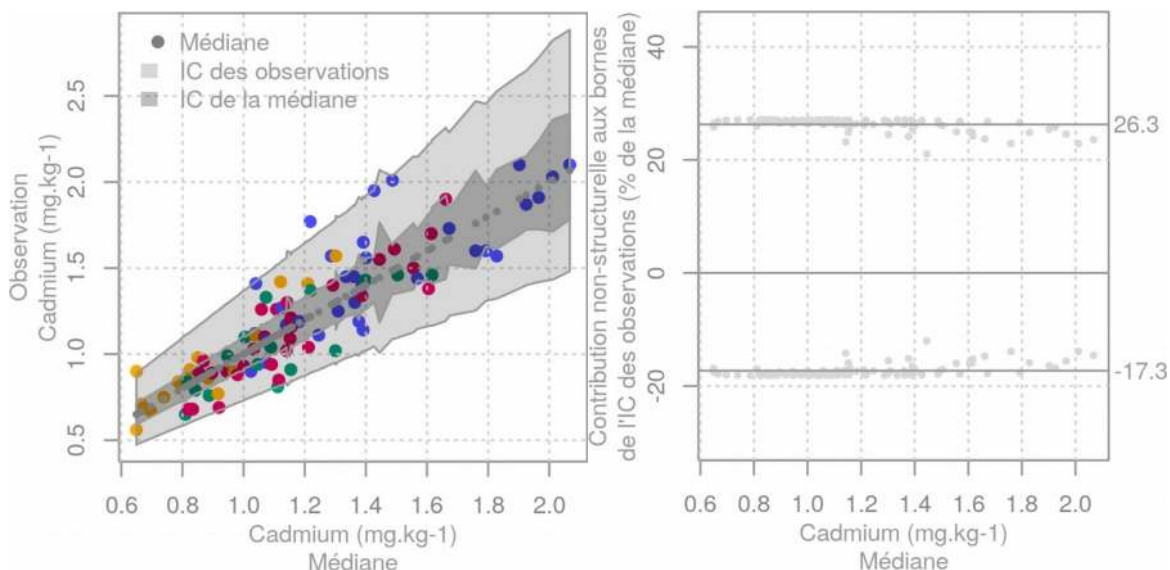
Les tentatives manuelles d'intervention autour de 1990 ont été sans succès.

L'examen attentif des données conduit à l'identification d'un changement possible à l'hiver 2014. Le modèle (normalité OK, indépendance OK) intégrant cette suggestion est significativement plus vraisemblable ($p=0.0170$).



Ce dernier modèle suggère un changement de niveau autour de 2006 mais, comme pour 1990, les essais tentés n'ont pas été concluants.

Les graphiques associés au dernier modèle retenu et relatifs à la variance sont les suivants :



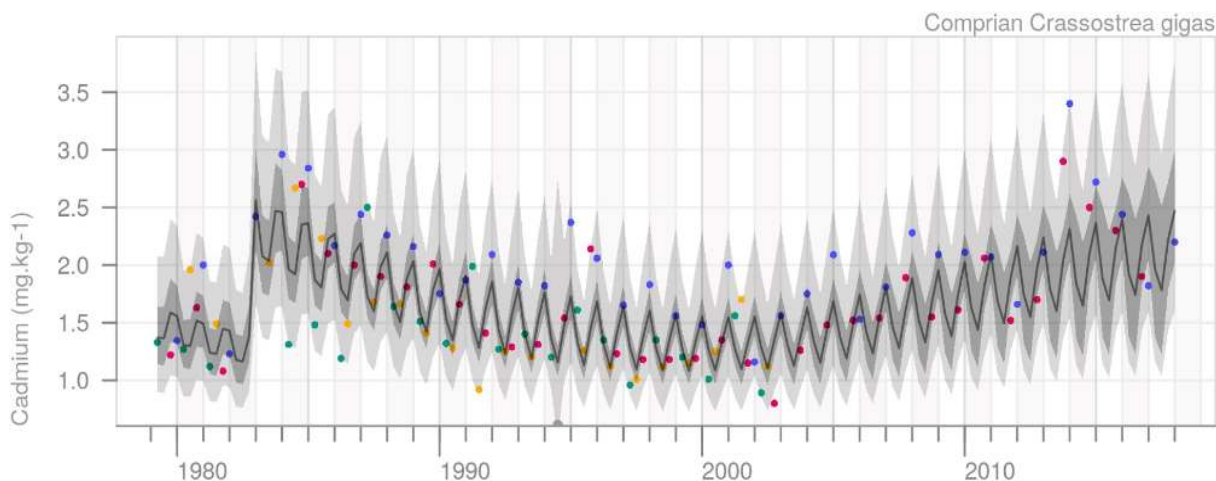
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +26 %).

Expertise thématique

OK avec le dernier modèle.

088-P-069 Crassostrea gigas Procédure automatique

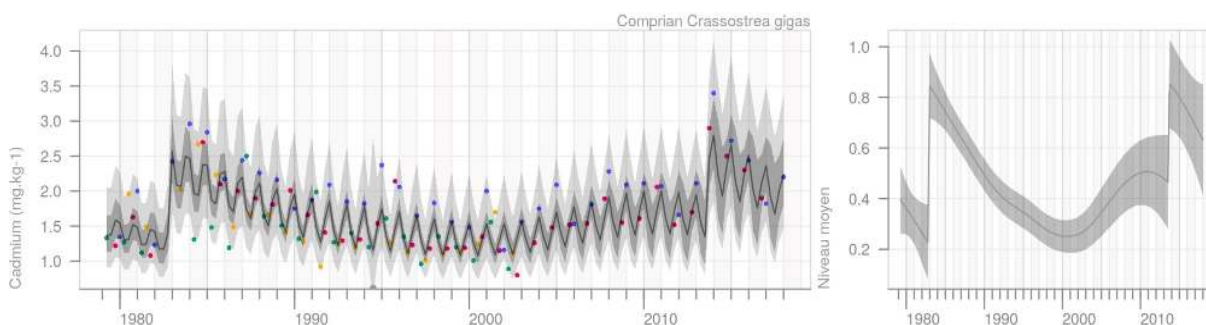
Le premier modèle (normalité OK, indépendance KO) identifie une valeur exceptionnelle durant l'été 1994, la plus faible mesure réalisée (0.61 mg/kg). Le second modèle (normalité OK, indépendance KO) tient compte de cette suggestion, affiche un gain significatif de vraisemblance ($p=0.0100$) et suggère un changement de niveau en mars 1983. Le troisième modèle (normalité OK, indépendance KO), intègre ce changement de niveau, présente un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0013$).



La pente standardisée identifie deux périodes de changement de niveau possible : de mi-1984 à mi-1992 et de mi-2003 à mi-2013. Les modèles successifs suivants ne parviennent pas à trouver sur ces périodes de dates conduisant à l'identification de ruptures significative.

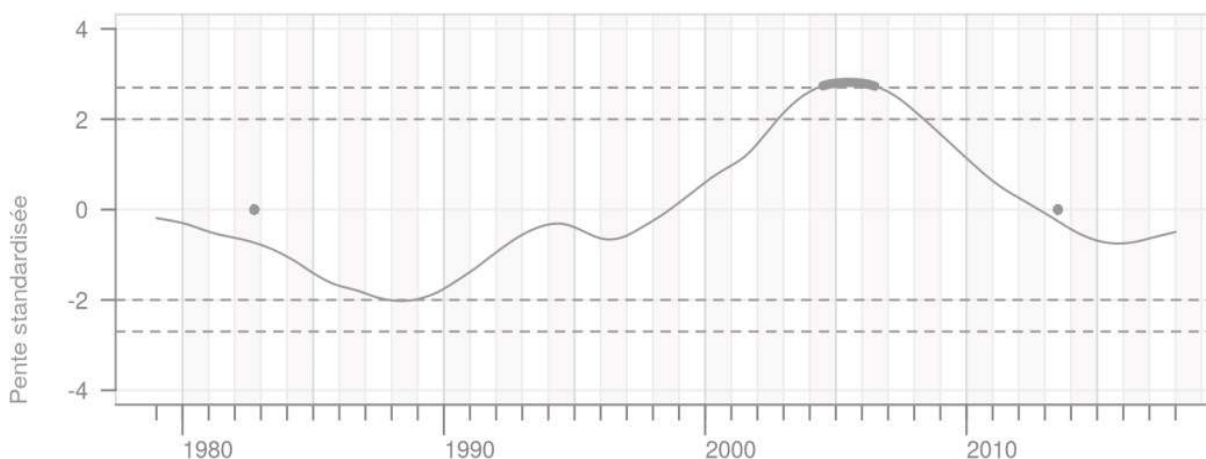
Expertise statistique

L'examen attentif des données conduit à l'identification d'un changement possible à l'automne 2013. Le modèle (normalité OK, indépendance KO) intégrant cette suggestion est significativement plus vraisemblable ($p=0.0455$).

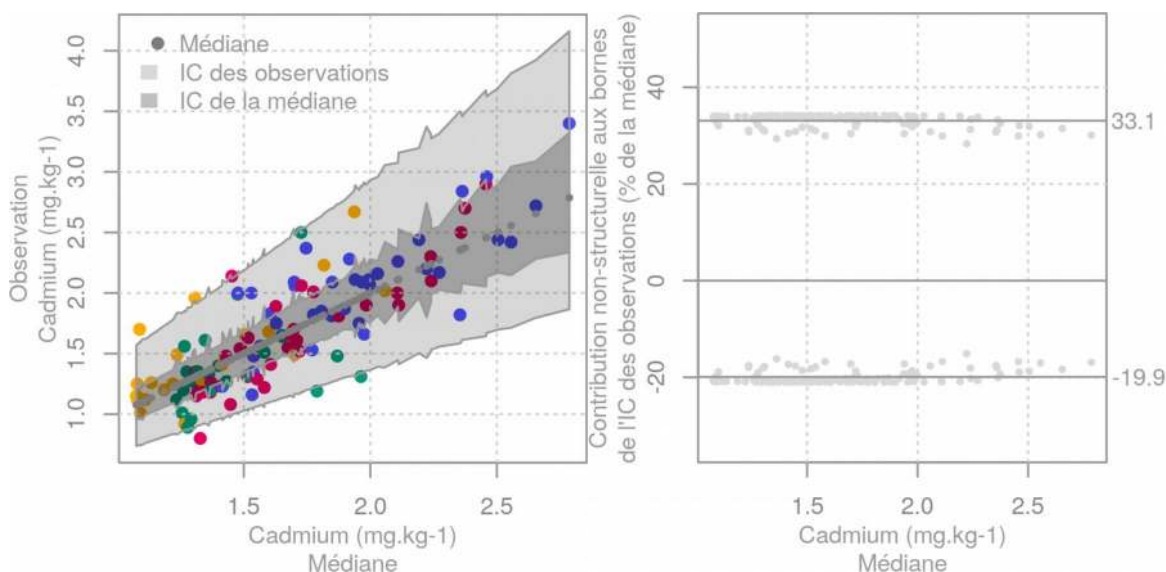


Ce changement motive un réexamen du modèle du lieu précédent (cf. ci-avant).

La pente standardisée du dernier modèle suggère une période de changement de niveau entre fin-2002 et mi-2008.



En dépit de plusieurs essais, je n'ai pas trouvé de moyen d'améliorer significativement le modèle. Une combinaison intéressante (normalité OK, indépendance OK) intègre une année 1995 présentant des concentrations plus élevées et les mesures de l'été 2001 et l'automne 2002 traitées comme exceptionnelles. En l'absence de gain significatif ($p=0.0545$), j'en reste au modèle présentant des changements en mars 1983 et à l'automne 2013. Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



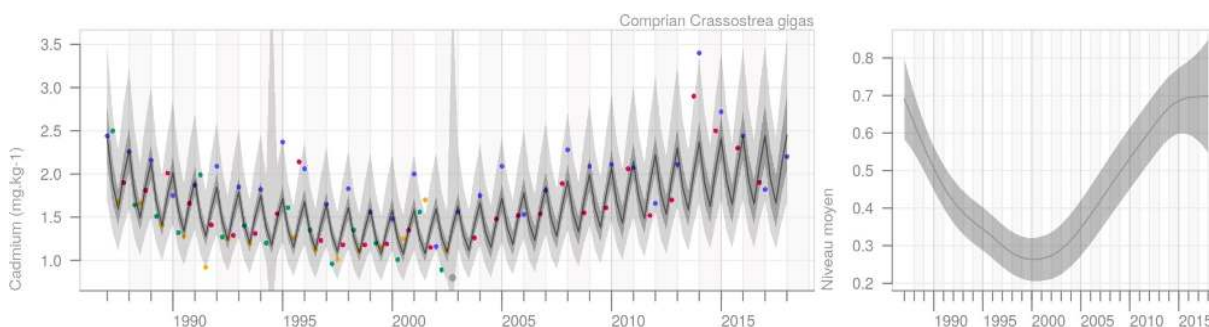
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-20 %, +33 %).

Expertise thématique

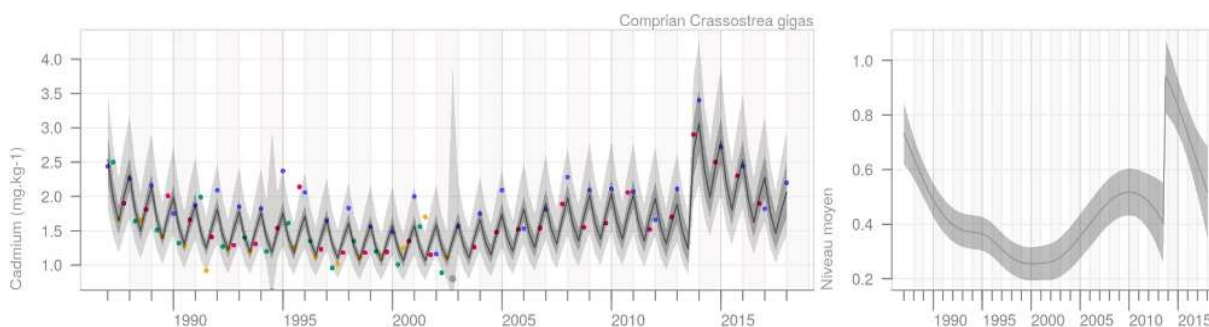
Pour l'ensemble des points : sortir les données de 83 à 86 (réalisées par la méthode sans correction zeeman).

Procédure automatique

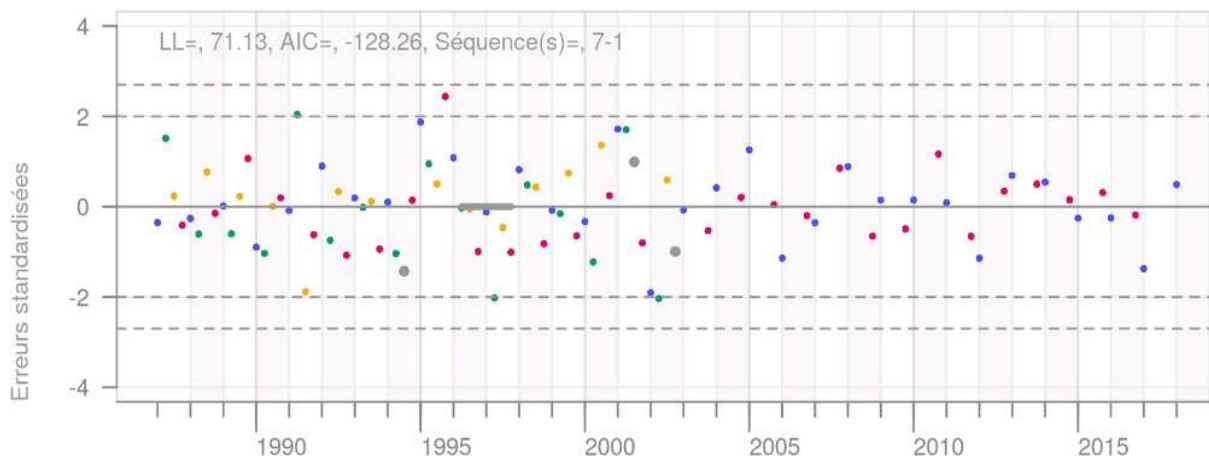
Les premier et second modèles (normalité OK, indépendance KO) identifient successivement, avec des gains significatifs de vraisemblance (i.e. $p=0.0036$ et $p=0.0134$) les concentrations de l'été 1994 puis l'automne 2002 comme exceptionnelles et sont les valeurs les plus faibles observées respectivement pour ces saisons. Le troisième modèle (normalité OK, indépendance KO) identifie une période de changement de niveau autour de 1990 mais la date suggérée n'induit pas de gain en vraisemblance.



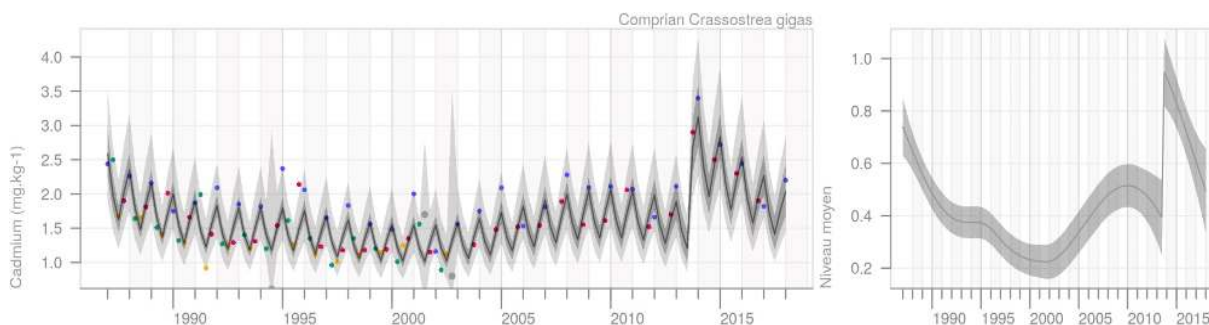
Comme pour « Les Jacquets », les données présentent un saut en fin de série, ici à l'automne 2013. Une suggestion de changement de niveau à cette date induit un modèle présentant un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0087$).



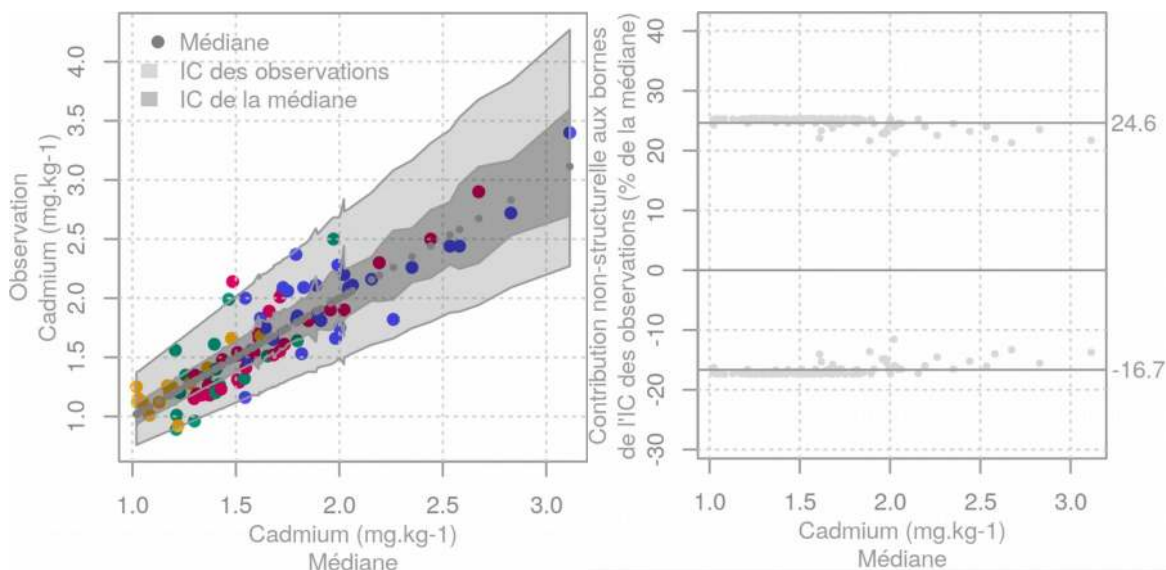
La concentration de l'été 2001, la plus forte de cette saison toutes années confondues est identifiée comme exceptionnelle. Le modèle (normalité OK, indépendance OK) intégrant une suggestion de changement de niveau à cette date présente un gain significatif en vraisemblance ($p=0.0058$). Ce dernier modèle montre une séquence de 7 erreurs standardisées de même signe :



Toutefois, 3 de ces valeurs sont en fait très proche de 0 et ni les données ni les erreurs standardisées ne motivent de suggestion de changement de niveau. Le modèle retenu est donc le suivant :



Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



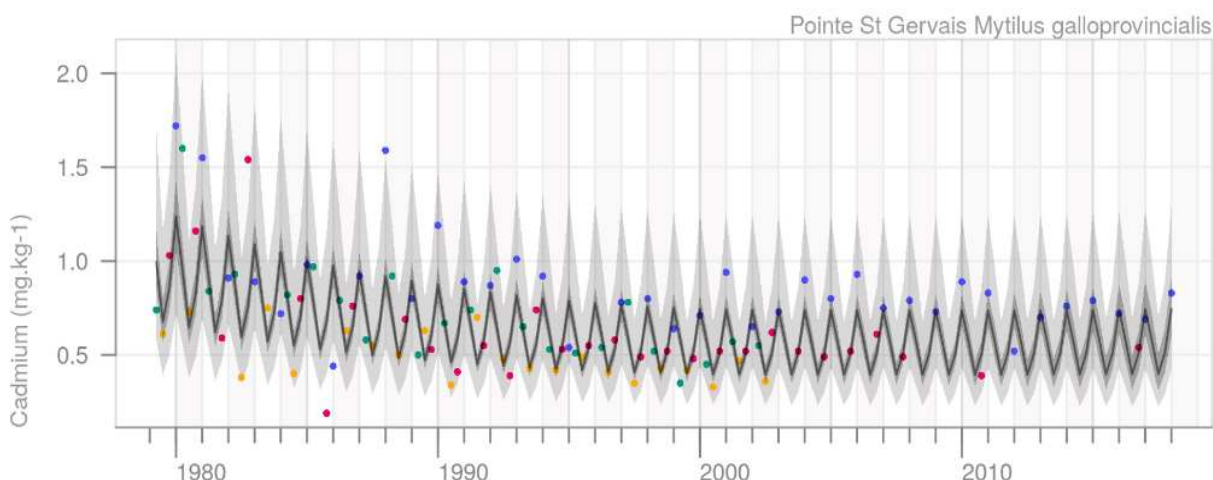
Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log-normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-17 %, +25 %).

Expertise thématique

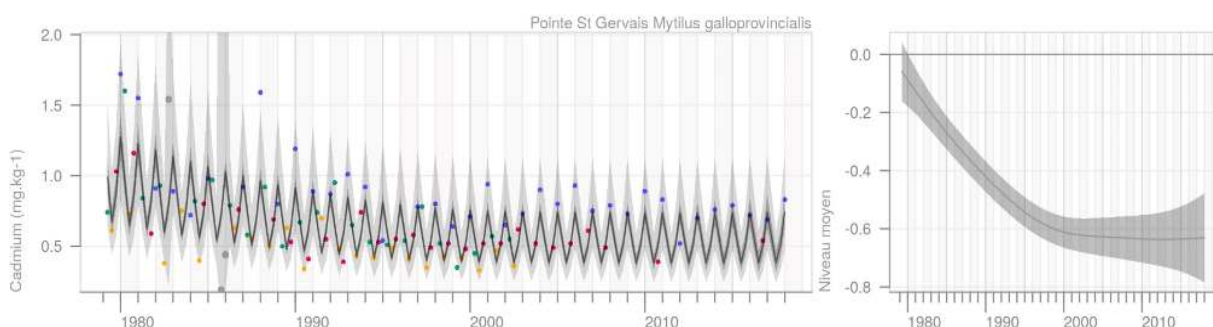
OK avec le dernier modèle. Pour le bassin d'Arcachon, on remarque une augmentation des teneurs en MES dans les eaux du fond du Bassin, explicable par la régression des herbiers de zostères. Cela peut participer à l'explication de l'augmentation des teneurs en certains contaminants dans les mollusques. Par ailleurs, Si on est tenté d'expliquer la hausse de 2014 par des conditions météo particulières (forts débits hivernaux du fleuve débouchant dans le bassin –qui peut apporter des polluants, beaucoup de forts coups de vent- qui agitent les sédiments dans lesquels les métaux sont stockés), on a du mal à expliquer pourquoi ces fortes teneurs sont aussi observées en 2015 et 2016, qui ne présentent pas ces anomalies.

109-P-020 *Mytilus galloprovincialis* Procédure automatique

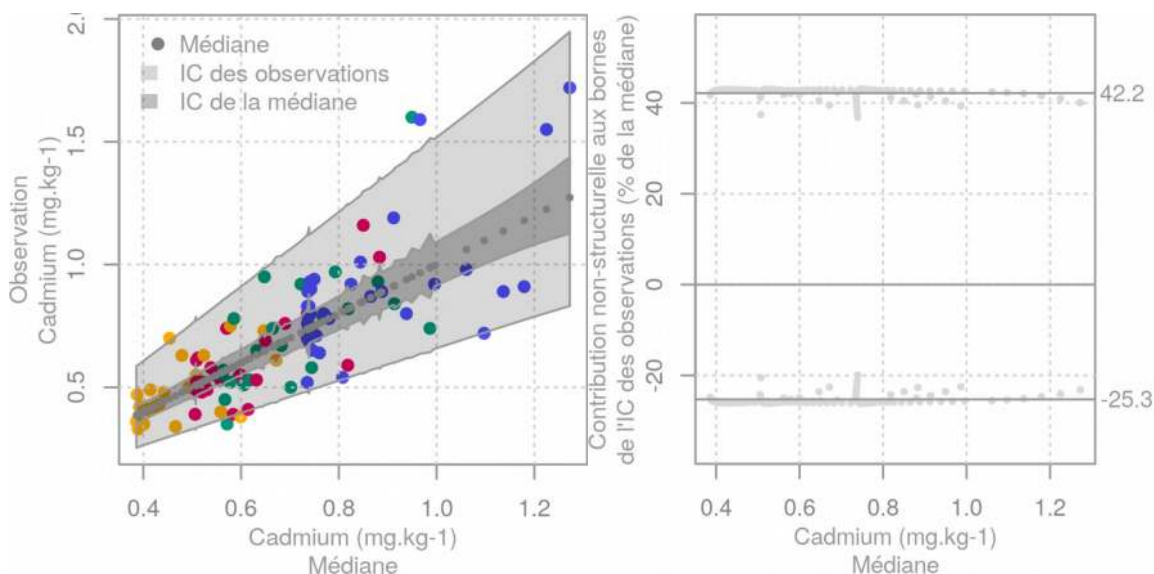
Le premier modèle (normalité KO, indépendance OK) identifie deux valeurs exceptionnelles à l'automne 1985 et l'hiver 1986.



Le second modèle (normalité OK, indépendance OK) présente un gain significatif en vraisemblance ($p < 0.0001$) et ajoute comme exceptionnelle l'automne 1992. Le modèle résultant (normalité KO, indépendance OK) est également plus vraisemblable ($p = 0.0442$), ses éléments diagnostics et l'examen des données ne suggèrent aucune autre intervention.



Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-25 %, +42 %).

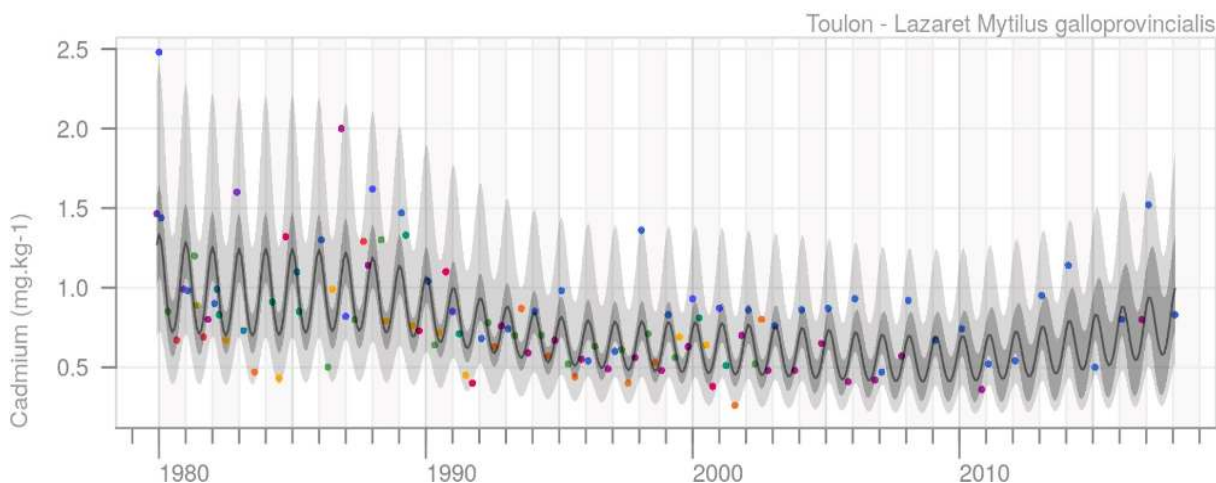
Expertise thématique

OK avec le modèle proposé.

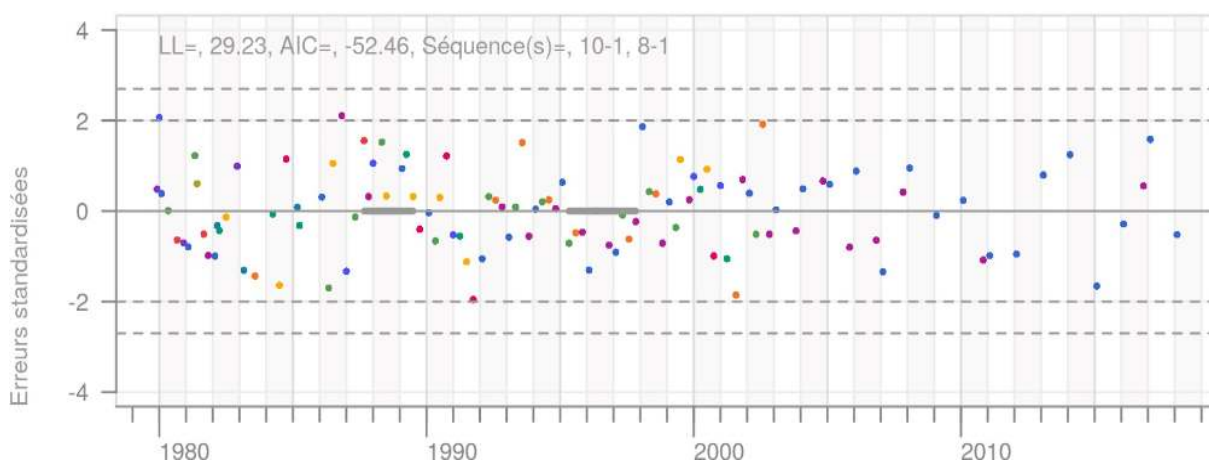
112-P-014 *Mytilus galloprovincialis*

Procédure automatique

Le premier et seul modèle (normalité OK, indépendance KO) ne suggère pas de changement de niveau via la pente standardisée non plus que de valeur exceptionnelle via les erreurs standardisées.

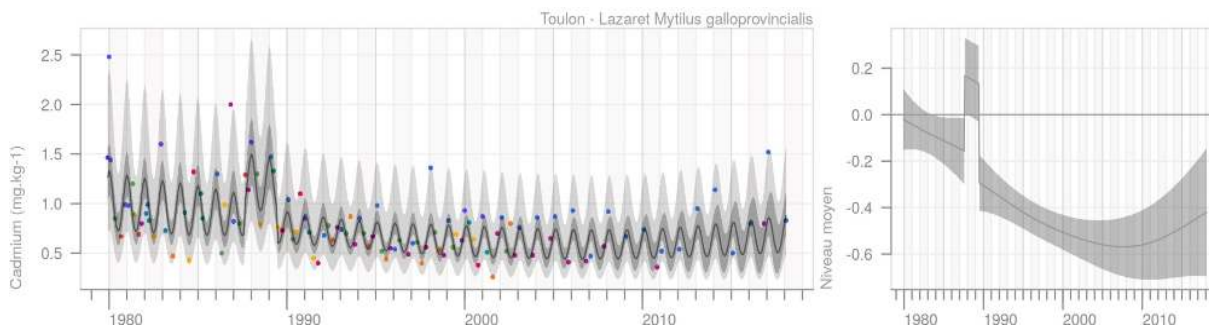


En revanche, ces dernières comptent deux séquence d'erreurs de même signe :

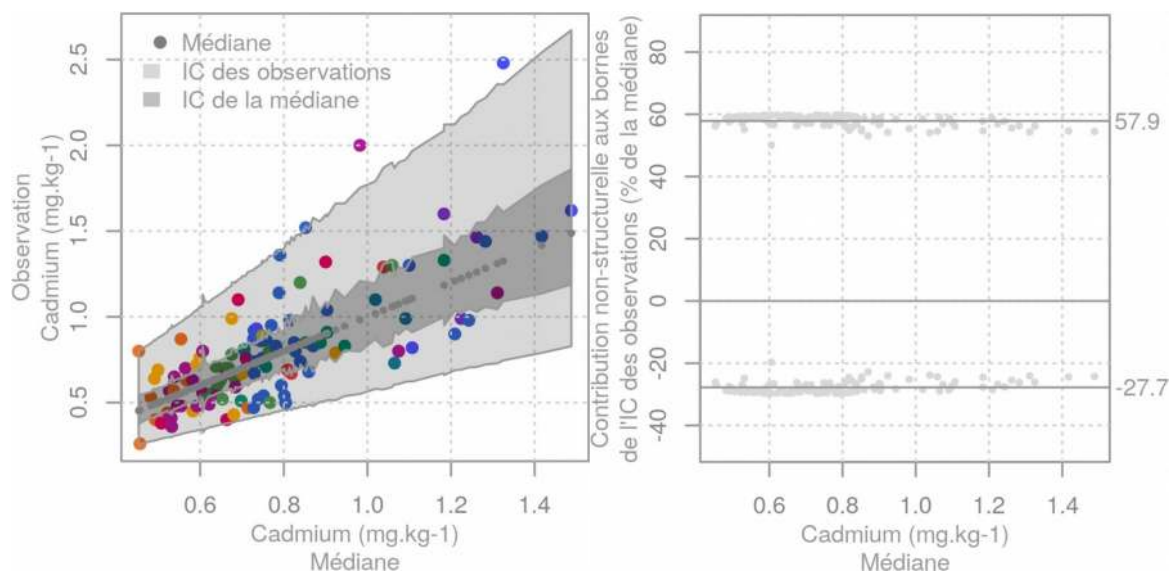


Expertise statistique

Un changement unique suggéré en janvier 1987 n'entraîne pas d'amélioration significative. En revanche l'ajout d'un second changement en juillet 1989 conduit à un modèle plus vraisemblable ($p=0.0317$).



En dépit de plusieurs essais pour améliorer le modèle dans la période post-1995, aucun n'a permis de déboucher sur un modèle significativement plus vraisemblable. Le modèle précédent reste la proposition première. Les graphiques associés relatifs à la variance sont les suivants :



Les observations s'inscrivent dans le cône typique d'une loi log normale. Les contributions de la variance d'observation aux bornes de l'intervalle de confiance des observations sont (-28 %, +58 %).

Expertise thématique

OK avec le modèle proposé.