Séminaire technique APRONA Les méthodes de traitement des séries temporelles : application à l'hydrogéologie

> Introduction aux méthodes géostatistiques applicables à l'hydrogéologie : application à la caractérisation de panaches de contaminants

> > Chantal de FOUQUET Ecole des mines de Paris

Mardi 30 novembre 2021 Maison de la Région, Strasbourg

Introduction

Mesures de qualité ou de charge dans les cours d'eau et les nappes

- occasionnelles, régulières ou en continu
- directes (prélèvements) ou indirectes

Dans quel but ?

- suivis spécifiques : périodes de fortes concentrations, étiages...
- rapportage environnemental systématique
- cartographies de l'état de la nappe à intervalles réguliers

Estimation de concentrations, comparaison à un seuil réglementaire Quantification des incertitudes d'estimation Détection d'anomalies dans les données

traitements ou méthodes géostatistiques

Sur des exemples

- Estimation d'une moyenne annuelle
- Quelles relations entre modèle déterministe et observations ?
- Autre façon de combiner modèle déterministe et observations : le krigeage avec variogramme numérique

1. Indicateurs de Qualité des cours d'eau : estimation de la « moyenne annuelle »



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

Rapportage environnemental

<u>Objectifs</u>

Améliorer les indicateurs statistiques de qualité des cours d'eau :

Moyenne annuelle (micro polluants), Quantile 90 (nutriments)

<u>Contexte</u> SEQ-EAU Directive cadre européenne

Collaboration

- ministère de l'écologie et du développement durable
- agences de l'eau Loire-Bretagne et Rhin-Meuse
- IFEN

Quelles améliorations?

Les calculs statistiques usuels ne tiennent pas compte des corrélations temporelles ou spatiales

Saisonnalité des concentrations dans les cours d'eau :

valeurs fortes en hiver, faibles en été ou réciproquement.

→ L'échantillonnage orienté induit des biais d'estimation.



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

La moyenne annuelle (1)

En statistique, la moyenne annuelle est interprétée comme un paramètre :

l'espérance m de la loi des concentrations

Pour l'estimation,

oLes tirages sont supposés indépendants

○ *n* mesures X₁, X₂,...,X_n
 ○ <u>Moyenne arithmétique</u> X_n = 1/n ∑_{i=1}ⁿ X_i
 ○ <u>Variance d'estimation</u>

$$Var(\overline{X}_n - m) = Var(\overline{X}_n) = \frac{\sigma^2}{n}$$

Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

La moyenne annuelle (2)

En géostatistique, la moyenne annuelle est interprétée comme la version probabiliste de la moyenne temporelle sur un intervalle T

$$z_T = \frac{1}{T} \int_T z(t) dt \qquad \Longrightarrow \qquad Z_T = \frac{1}{T} \int_T Z(t) dt$$

Z(t) fonction aléatoire

Corrélation temporelle : variogramme $\gamma(t)$

n mesures $Z_1, Z_2, ..., Z_n$ <u>Estimation par krigeage</u> $Z_T^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i$ <u>Variance de l'erreur d''estimation</u> $Var(Z_T^* - Z_T)$

Qualité de l'eau 8

Contro do Cácototistique - Ecolo dos Minos do Daria

Exemple : nitrates et nitrites en une station



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

Tests sur simulations



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

La moyenne annuelle

annual sample mean with 95% confidence interval
 real annual mean
 geostatistical mean with 95% confidence interval



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

Bassin Loire Bretagne



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

Evolution temporelle des concentrations

Moyenne annuelle

Quantile 90



Evolution temporelle des concentrations



Centre de Géostatistique - Ecole des Mines de Paris

Ecart relatif en fonction du nombre de mesures par an



Compléments sur le krigeage

$$n_i$$
 dates de mesures l'année T_i
Krigeage de la moyenne annuelle $Z_{T,i} = \frac{1}{T} \int_{T_i} Z(t) dt$
 $Z_{T,i}^* = \sum \lambda_j Z(t_j)$

A condition d'utiliser l'ensemble des données (années *i* et *i*+1) pour estimer chacune des moyennes annuelles, le krigeage de la différence

$$D = Z_{T, i+1} - Z_{T, i}$$

vérifie

$$D^* = Z_{T, i+1}^* - Z_{T,i}^*$$

Avantage : calcul de la précision de l'estimation de *D* aussi calculable à partir des poids de krigeage des moyennes annuelles, comme variance d'une combinaison linéaire autorisée

Krigeage des moyennes annuelles et de leurs variations

Moyennes annuelles

$$\begin{bmatrix} \gamma_{\alpha\beta} & [\mathbf{1}] \\ [\mathbf{1}]^{t} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda(T_{i}) \\ \mu(T_{i}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{\gamma}(t_{\alpha}, T_{i}) \\ \mathbf{1} \end{bmatrix}$$

Variations

$$\begin{bmatrix} \gamma_{\alpha\beta} & [1] \\ [1]^{t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda(D) \\ \mu(D) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{\gamma}(t_{\alpha}, D_{i}) \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \overline{\gamma}(t_{\alpha}, T_{i+1}) - \overline{\gamma}(t_{\alpha}, T_{i}) \\ 1 - 1 \end{bmatrix}$$

- Bien préciser les grandeurs à estimer (paramètre espérance, régularisée temporelle)
- Le krigeage s'étend à l'estimation de toute combinaison linéaire de Z(t_i) ou de Z_{T,i}
- → cartes de différences de moyennes annuelle, décennales ... et écart-type de l'erreur d'estimation associée
- application :

adaptation de la fréquence de mesures pour un suivi temporel





2. Quelles relations entre modèles déterministes& observations ?

Chantal de Fouquet^a, Nicolas Flipo^a, Laurent Létinois^b, Laure Malherbe^b, **Edwige Polus-Lefèbvre^{a,c}**, Michel Poulin^a, Antony Ung^b

a) Ecole des mines de Paris (Mines ParisTech), b) INERIS



Extraits de la présentation et de la thèsed'Edwige Polus-Lefèbvre (2010) sur les relations entre Prose et observations (Seine)

Introduction

 Etat chimique et écologique des cours d'eau, pollution atmosphérique...

 simulations déterministes par modélisation numérique de phénomènes complexes

- observations en quelques stations
- Constat : les simulations diffèrent des observations
 Ces écarts ne s'expliquent pas par la différence de support spatial : observations « ponctuelles », simulations peuvent correspondre à «la moyenne par maille »

Concentration horaire en Oxygène dissous



Simulation ProSe

- reproduit les variations saisonnières
- Surestime les concentrations estivales

Introduction

Comment combiner simulations déterministes et observations pour

- « recaler » les simulations aux observations ?

 - améliorer le réalisme et la précision des estimations géostatistiques, en tenant compte des simulations déterministes ?

Relations entre modèle déterministe et observations

Présentation en contexte spatial.

Y : la « réalité »

Observations : $Z = Y + \varepsilon$, ε erreur de mesure en x_{α} Modèle déterministe *S*, connu « partout »

- Il est tentant de poser Y = S + R
- Estimation $Y^* = S + R^*$

Différentes méthodes: krigeage des « innovations » R=Z-Sassimilation de données

à partir d'une estimation monovariable du résidu R

Estimation du résidu : $Y^* = S + R^*$

• Y* repasse par les observations,

aux erreurs de mesures (modélisées) près

- Mais ... attention aux hypothèses implicites :
 - pas de liaison spatiale entre simulation S et résidu R

 \rightarrow en termes de Fonctions Aléatoires :

$$Y^* = S + \mathbf{R}^{\mathbf{K}}$$

est une simplification du cokrigeage de Y par S et Z (Rivoirard, 2001)

$$Y^* = S + \mathbf{R}^{CK}$$

Estimation par krigeage du résidu

• $Y^* = S + R^{CK}$ se simplifie en $Y^* = S + R^K$ dans le cas du « modèle de Markov» où

- S connue partout est la variable maîtresse
- R le résidu, spatialement non corrélé à S

Alors, relations entre variogramme simples et croisés

$$\gamma_{SR} = 0$$
, d'où $\gamma_{YS} = \gamma_S$, $\gamma_{YR} = \gamma_R$ et $\gamma_Y = \gamma_S + \gamma_R$

En présence d'une erreur de mesure de variance constante σ_{ϵ}^{2}

non corrélée à la valeur réelle Y

$$\gamma_Z = \sigma_{\varepsilon}^2 + \gamma_S + \gamma_R, \ \gamma_{ZS} = \gamma_S \text{ et } \gamma_{ZR} = \gamma_R$$

Généralisation à Y = aS + b + R

Question

Les variogrammes temporels, spatiaux ou spatio-temporels simples et croisés entre observations Z et modèle déterministe S sont-ils compatibles avec cette hypothèse ? Autre modèle : (Y,S) en corrélation intrinsèque

Chilès, Séguret & al. 2008, pollution atmosphérique

- innovation Z S est corrélée spatialement à S
- simulation S parfois plus variable que les observations

 \Rightarrow Modèle de corrélation intrinsèque entre réalité Y et simulation S

 $S(x) = w [r Y(x) + (1-r^2)^{\frac{1}{2}}Q(x)]$

avec $\gamma_Q = \gamma_Y$ et (*Y*, *Q*) spatialement non corrélés

r : coefficient de corrélation entre (*Y*,*S*)

"intrinsèque" car ne dépend ni du champ, ni du support

Interprétation

- S modifie l'amplitude des fluctuations : $\gamma_S = w^2 \gamma_Y$
- S présente une composante Q non corrélée à Y

Différentes situations

$$w^{\,2}$$
 =1.5 , r =0.5 , $\sigma_{_{\rm E}}^{\,2}$ = 0



$$w^2 = 0.5$$
, $r = 0.9$, $\sigma_{\epsilon}^2 = 0.1$

$$w^{\, 2}$$
 =0.5 , r =0.4 , $\sigma_{\rm c}^{\ 2}$ = 0.2



Variograms

Observation Z Innovation = Z – S Simulation S Chilès, Séguret et al., 2008

Généralisation : modèle linéaire de corégionalisation entre S et Y

 « Réalité » et simulation sont des combinaisons de plusieurs composantes structurales

 $Y(x) = \sum \omega_u [r_u S_u (x) + (1 - r_u^2)^{\frac{1}{2}} T_u(x)] + T(x)$

où S_u et T_u ont même variogramme γ_u et sont spatialement non corrélées

• Interprétation : Rapport d'amplitude ω_u des fluctuations et la corrélation r_u entre S et Y diffèrent selon les échelles de variabilité

 \Rightarrow Estimation de *Y* par **cokrigeage** de *Z* et *S*

• Simplification du modèle de Markov : krigeage du "résidu" ou krigeage avec *S* en dérive externe.

Concentrations dans la Seine

PROSE : modélisation hydro-écologique (C,N,P,O) Maillage et observations



Variogrammes temporels des nitrates

Ajustement des variogrammes simples et croisés entre ProSe et les observations par le modèle linéaire de co-régionalisation



3 structures

- Sinusoïdale (75%) saisonnalité
- Exponentielle (20%), portée pratique d'environ 30 jours
- Effet de pépite (5%)

phénomènes de portée inférieure à la semaine erreurs de mesures

Evolution spatiale des coefficients



E. POLUS-LEFEBVRE Soutenance de thèse - Paris, le 06/12/10

Evolution de l'amont vers l'aval

Evolution spatiale des coefficients du modèle linéaire de corégionalisation entre ProSe et les Observations

- variabilité \rightarrow localisation des singularités
- corrélations \rightarrow identification des imperfections de ProSe

 \Rightarrow amélioration de la caractérisation des flux entrants et des

processus

O2 dissous. Co-krigeage spatial sur graphe entre ProSe et observations

Modèle de corrélation intrinsèque entre (Y,S), r = 0.89



- Toute méthode d'estimation comporte des hypothèses
- Les expliciter pour « utiliser au mieux » les données disponibles

 Complété par l'introduction de corrélations différées (Marcotte, 2012), le modèle linéaire de corégionalisation est très utile pour caractériser les relations entre simulations déterministes et observations

... mais d'autres liaisons bivariables sont possibles



3. Estimation géostatistique à base physique : application à la caractérisation de panaches de contaminants



Léa Pannecoucke¹, Mathieu Le Coz¹, Xavier Freulon², Chantal de Fouquet² ¹Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), PSE-ENV, 92260 Fontenay-aux-Roses, France ²MINES ParisTech, PSL University, Centre de Géosciences, 77300 Fontainebleau, France

Limites des méthodes géostatistiques usuelles



37

Le projet Kri-Terres – ANDRA / PIA

Géostatistique

- + Interpolateur exact
- + Structure spatiale modélisée
- Difficultés de modélisation
- Non prise en compte des phénomènes physique

Simulations à base physique

- + Résolution des équations physiques
- Paramètres d'entrée nombreux et calibration complexe
- Simulations non conditionnées

Combinaison du krigeage et des simulations de transport pour améliorer la précision et le réalisme des estimations

Présentation extraite de la thèse de Léa Pannecoucke (2020)

Combinaison de la géostatistique et des simulations

□ Krigeage avec dérive externe (Rivest et al. 2008; Rühaak et al. 2014; Varentsov et al. 2019)

Z(x)=m(x)+Y(x)

 \succ la dérive m(x) est donnée par une simulation à base physique,

ou une combinaison linéaire de plusieurs simulations à base physique

□ Modélisation de la structure spatiale à partir de simulations à base physique (Roth et al. 1998; Schwede et al. 2010; Yang et al. 2018)

➢ variogramme expérimental calculé sur une simulation, puis ajustement d'un modèle

calcul de covariances ou de variogrammes empiriques à partir d'un ensemble de simulations

Incertitudes liées à la variabilité spatiale des paramètres hydrauliques MvG

→ Méthodes qui utilisent un ensemble de simulations

Modélisation des écoulements en zone non saturée



Génération d'un ensemble de panaches



Génération d'un ensemble de panaches



Quelques panaches simulés



Le krigeage avec dérive externe (KDE)



Introduction d'information de nature physique dans la dérive
 Prise en compte de l'incertitude sur les paramètres d'entrées des simulations : travail sur un ensemble de panaches
 Dérive : moyenne, médiane, quelques panaches particuliers, etc.

Retour à la définition du variogramme

 $\gamma(x, x+h) = 1/2 E [(Z(x+h)-Z(x))^2]$

sans poser d'hypothèse de stationnarité

Calculé à partir des résultats du lot de simulations d'écoulement

Le krigeage avec variogrammes numériques (KVN)



Prise en compte d'information de nature physique et de l'incertitude sur les paramètres d'entrée des simulations

 $\succ \gamma(x,x')$ modèle de variogramme admissible : pour $\{x_1,\ldots,x_K\} \in \mathcal{D}$

$$\{\omega_1, \dots, \omega_K\} \in \mathbb{R}$$
 tels que $\sum_{k=1}^K \omega_k = 0, \quad -\sum_{k=1}^K \sum_{\ell=1}^K \omega_k \omega_\ell \gamma(x_k, x_\ell) \ge 0$

> Variogramme $\gamma(x, x')$ non stationnaire



Journées MAS 2020 – 25/09/2021 Modélisation aléatoire et Physique / Géostatistique

Evaluation des méthodes d'estimation



Référence que l'on cherche à estimer :

Comparaison au krigeage ordinaire usuel

- > Indicateurs de performances (calculés par rapport à la référence)
 - > cartes d'estimation, d'erreur d'estimation et d'écart-type d'erreur de krigeage
 - > erreur absolue moyenne EAM= $\frac{1}{n_{\mathcal{D}}}\sum_{i=1}^{n_{\mathcal{D}}} |Z^*(x_i) - Z^{\text{ref}}(x_i)|$

> nuages de corrélation entre la référence et les estimations

Résultats d'estimation



Résultats d'estimation



Erreurs et nuages de corrélation

(Pannecoucke et al. 2020, Sci. Total Environ.)

- Erreurs moyennes plus faibles pour le KVN
- Carte d'estimation plus réalistes
- D'autres indicateurs confirment ces résultats

Influence du nombre de simulations

Différents nombres de simulations (50 tirages avec remise) : moyenne utilisée en dérive variogramme numérique



Quantification des incertitudes sur le dépassement d'un seuil



Cokrigeage de l'indicatrice

Simulations conditionnelles

Conclusion

Implémentation et validation des méthodes combinant géostatistique et simulations (Pannecoucke et al. 2020, Sci. Total Environ.)

- KDE et KVN toujours plus précis que le KO
- résultats similaires avec d'autres scénarios d'échantillonnage & références
- > KDE moins exigeant en nombre de simulations à base physique

cas réels : KVN préférable lorsque les simulations d'écoulement sont fiables, comme pour les tests sur cas synthétiques

méthodes générales, applicables à d'autres contextes

Autre applications

- > estimation multivariables (cokrigeage)
- estimations spatio-temporelles et prévisions
- quantification des incertitudes
 - o cokrigeage de l'indicatrice de dépassement de seuil
 - o simulations géostatistiques à partir des covariances numériques

Conclusion

Méthodes géostatistiques adaptées au contexte temporel ou spatio-temporel

Analyse exploratoire pour

- comprendre le cas particulier étudié, et le décrire
- détecter des anomalies dans les données

Adapter la modélisation

bien définir les grandeurs à estimer covariables, dont les moyennes temporelles quantifier les incertitudes d'estimation lien avec modélisation hydrogéologique

Merci de votre attention !



Références

-Bernard-Michel C., de Fouquet C. 2005. Geostatistical indicators of waterway quality for nutrients. - In Geostatistics Banff 2004. Leuangthong O., Deutsch C.V. (eds) Springer

- Bernard-Michel C., de Fouquet C. 2005. Geostatistical indicators of nutrients concentrations in streams. In Proceedings IAMG2005 Toronto. Cheng Q. & Bonham-Carter G. (eds), York University, Toronto Canada & GPMR, Wuhan, China. 716-721

- de Fouquet C., Bernard-Michel C. 2006. Modèles géostatistiques de concentrations ou de débits le long des cours d'eau. Comptes-rendus Géosciences. 338(5) 307-318

- de Fouquet C., Malherbe L., Ung A. Geostatistical analysis of the temporal variability of ozone concentrations. Comparison between CHIMERE model and surface observations. Atm. Env. 2011, 45(20) 3343-3514

- L. PANNECOUCKE. Combinaison de la géostatistique et des simulations à base physique – application à la caractérisation de panaches de contaminants. Thèse de Doctorat, PSL – Ecole des Mines de Paris (2020).

- L. PANNECOUCKE et al. "Combining geostatistics and simulations of flow and transport to characterize

contamination within the unsaturated zone". Science of The Total Environment 699 (2020), p. 1–13.

- L. PANNECOUCKE et al. "Impact of spatial variability in hydraulic parameters on plume migration within unsaturated surficial formations". Journal of Hydrology 574 (2019), p. 160–168.

- Polus E., de Fouquet C., Flipo N., Poulin M. Caractérisation spatiale et temporelle des « Masses d'Eau Cours d'Eau ». Revue des sciences de l'eau. 2010, 23(4)415-429

- Polus E., Flipo N., de Fouquet C., Poulin M. Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model: application to nitrates in the Seine River. Hydrological Processes. 2011, 25(2)217-233

- M. RIVEST , D. MARCOTTE et P. PASQUIER . "Hydraulic head field estimation using kriging with an external drift : A way to consider conceptual model information". Journal of Hydrology 361.3 (2008), p. 349–361.

- C. ROTH , J.-P. CHILÈS et C. de FOUQUET . "Combining geostatistics and flow simulators to identify transmissivity". Advances in Water Resources 21.7 (1998), p. 555–565.

- W. RÜHAAK, K. BÄR et I. SASS. "Combining Numerical Modeling with Geostatistical Interpolation for an Improved Reservoir Exploration". Energy Procedia 59 (2014), p. 315–322.

- R. L. SCHWEDE et O. A. CIRPKA . "Interpolation of Steady-State Concentration Data by Inverse Modeling". Groundwater 48.4 (2010), p. 569–579.

- M. VARENTSOV , I. ESAU et T. WOLF . "High-resolution temperature mapping by geostatistical kriging with external drift from large-eddy simulations". Monthly Weather Review 148.3 (2019), p. 1029–1048.

X. YANG , G. TARTAKOVSKY et A. M. TARTAKOVSKY . "Physics-Informed Kriging : A Physics-Informed Gaussian Process Regression Method for Data-Model Convergence". arXiv :1809.03461v2 [stat.ML] (2018), p. 1–24.

La moyenne annuelle (2)

Echantillonnage préférentiel, 1000 simulations

Moyenne des 1000 moyennes
annuelles estimées avec 365 mesures6.72

	statistique	géostatistique
Moyenne des 1000 moyennes annuelles estimées avec 18 mesures	7.62	6.72
Ecart-type d'estimation du modèle	0.97	0.42
Ecart-type d'estimation expérimental	0.25	0.32

Modélisation des écoulements en zone non saturée

MELODIE (Modèle d'Évaluation à LOng terme des Déchets Irradiants Enterrés), IRSN

Ecoulement en milieu à saturation variable $\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} + S_s S(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\overline{K}(h) \operatorname{grad} h\right)$ Transport de radionucléides $\operatorname{div}\left[\left(\overline{D} \overrightarrow{U} + \omega d\right) \operatorname{grad} C - \overrightarrow{U} C\right] = \omega' R \frac{\partial C}{\partial t} + \omega' \lambda R C$ avec vitesse de Darcy $\overrightarrow{U} = -\overline{K} \operatorname{grad} h$

où : t temps, θ teneur en eau, K conductivité hydraulique, h charge hydraulique, S_s coeff. d'emmagasinement, S saturation en eau, D dispersivité, d coeff. de diffusion moléculaire, ω porosité, ω ' porosité efficace, λ constante de décroissance radioactive, R coeff. de retard

Modèle de Mualem-van Genuchten (MvG)

