

Faculté des bioingénieurs

Approche combinée d'inférence causale et d'apprentissage machine pour la modélisation de variables hydro-géophysiques du système karstique de la Lhomme (Rochefort, Belgique)

Auteur : Jonathan Brulein

Promoteur : Pr. Marnik Vanclooster

Co-promoteur : Ir. Damien Delforge

Lecteurs : Pr. Patrick Bogaert, Pr. Olivier Kaufmann (UMons)

Bioingénieur : **Sciences et technologies de l'environnement**

Année académique 2018-2019

Approche combinée d'inférence causale et d'apprentissage machine pour la modélisation de variables hydro-géophysiques du système karstique de la Lhomme (Rochefort, Belgique)

Jonathan Brulein

Résumé :

Pour répondre aux enjeux en matière de gestion des ressources en eaux dans le monde, l'étude de l'hydrologie des systèmes karstiques et en particulier des aquifères karstiques reste encore primordiale. En raison de la structure complexe et de la dynamique non linéaire de ces systèmes, les difficultés à trouver des modèles généralisables et transposables pour plusieurs cas d'études motivent à s'orienter vers de nouvelles approches, non mécanistiques.

Les approches liées à l'apprentissage machine, tels que les réseaux de neurones artificiels, sont rapidement applicables à la modélisation d'un cas d'étude ou un autre. Toutefois, ces modèles sont généralement qualifiés de « boîtes noires » en ce sens qu'il n'est pas possible d'interpréter les mécanismes internes de ces modèles d'un point de vue physique. Pour pallier ce manque, une perspective s'offre à travers les outils d'analyses d'inférence causale. Ceux-ci sont de plus en plus développés dans le but d'étudier des mécanismes environnementaux à large échelle. Pour identifier des relations causales, ces outils se basent sur la fouille de données, à défaut de pouvoir faire des expériences à large échelle.

Dans ce mémoire, nous considérons d'allier la réflexion causale par des méthodes linéaires et non linéaires avec la modélisation par des réseaux de neurones artificiels Long Short-Term Memory (LSTM). En particulier nous modélisons, d'un part, un débit de percolation dans les grottes de Rochefort (Belgique) comme une variable traduisant les flux préférentiels vers la grotte, et, d'autre part, un signal gravimétrique résiduel décrivant la dynamique hydrologique plus générale du système karstique de la Lhomme, à Rochefort.

Nos résultats laissent suggérer que ces outils sont prometteurs pour l'étude de systèmes hydrologiques complexes tels que les karsts. Un choix de prédicteurs basé sur les résultats d'inférence causale s'avère être généralement plus efficient pour la modélisation LSTM qu'un choix plus large de prédicteurs. Toutefois, une discussion des hypothèses causales suggère de rester prudent quant à la sélection des variables et à l'interprétation des résultats de l'analyse causale, et, conseille de varier les méthodes dans le but de confronter les résultats et d'enrichir la réflexion autour de la dynamique du système. En guise de perspective, il conviendrait de comparer également l'inférence causale aux autres méthodes couramment utilisées pour la sélection de variables dans le domaine de l'apprentissage machine.

UNIVERSITÉ CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Faculté des bioingénieurs

Croix du Sud, 2 bte L7.05.01, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgique | www.uclouvain.be/agro

Remerciements

Je tiens à remercier toute une série de personnes qui ont permis à ce document de voir le jour.

Tout d'abord, je tiens tout particulièrement à remercier Damien Delforge, mon co-promoteur, sans qui ce sujet de mémoire ne me serait peut-être jamais venu. Mais surtout pour son aide incroyablement précieuse tout au long de l'année, et en particulier vers la fin. Merci de m'avoir fait découvrir ce bel univers d'outils numériques, que j'ai fini par m'approprier.

Merci à Marnik Vanclooster, mon promoteur pour avoir cru en moi malgré mes retards de deadline à n'en plus finir. Il a su me motiver à terminer ce travail, avec clarté et rigueur.

Merci à Michel Van Camp pour m'avoir fait découvrir avec enthousiasme, le temps d'une journée, le laboratoire des grottes de Rochefort.

Je suis reconnaissant de toutes les rencontres, les expériences que j'ai vécues tout au long de ces études (et avant !), qui s'accomplissent par ce mémoire. Merci à la vie quoi ! #mémoirevie

*Merci à tous mes copains, à ma famille pour m'avoir soutenu tout au long de ce travail !
Dédiasse spéciale aux broos du GERU, on lâche rien !!*

Allez, si, maintenant on peut !

Table des matières

1. Introduction	5
2. Objectifs de travail	11
3. Site d'étude	13
3.1. Système karstique de la Lhomme	13
3.2. Données	14
4. Matériel et méthodes	21
4.1. Inférence causale	21
4.1.1. Algorithme PCMCi	21
4.1.1.1. ParCorr	23
4.1.1.2. CMiknn	24
4.1.1.3. Graphe des processus et hypothèses	25
4.1.2. Modèle hydrologique synthétique	27
4.1.3. Méthodologie	28
4.2. Modélisation	29
4.2.1. Machine Learning	29
4.2.2. Long Short-Term Memory	31
4.2.3. Méthodologie	32
5. Résultats	35
5.1. Cartes causales	35
5.1.1. ParCorr	35
5.1.2. CMiknn	36
5.2. Prédictions	38
6. Discussion	43
6.1. Cartes causales	43
6.1.1. Données de gouttes	43
6.1.2. Gravité résiduelle	44
6.2. Performance des modèles	45
6.2.1. Modélisation des données de gouttes	45
6.2.2. Modélisation de la gravimétrie résiduelle	46
6.3. Méthodologie	46
6.3.1. Inférence causale	46
6.3.2. Modélisation LSTM	47
6.4. Hypothèses causales	48
7. Conclusion et perspectives	51
8. Références	53
9. Annexes	59
9.1 Annexe 1 : Expériences virtuelles avec TIGRAMITE	59
9.2 Annexe 2 : Graphe de processus	66

Liste des figures

FIGURE 1 : SCHÉMA CONCEPTUEL D'UN SYSTÈME KARSTIQUE. MISE EN ÉVIDENCE DE LA DUALITÉ DE LA POROSITÉ, DE L'INFILTRATION ET DE LA NATURE DE LA RECHARGE (GOLDSCHIEDER ET DREW, 2007).	6
FIGURE 2 - CONNEXIONS HYDROGÉOLOGIQUES DU SYSTÈME KARSTIQUE DE LA LOMME (POULAIN, 2017, TIRE DU TRAVAIL DE WATLET, 2017).....	13
FIGURE 3 : SÉRIES TEMPORELLES SÉLECTIONNÉES COMME BASE DES DIFFÉRENTES ANALYSES DE CE MÉMOIRE. PÉRIODE COUVERTE : DU 01-01-15 AU 31-12-16.	18
FIGURE 4: LOCALISATION DES POINTS DE MESURES POUR LES DIFFÉRENTES VARIABLES ÉTUDIÉES	19
FIGURE 5 : GRAPHE DES PROCESSUS - EXEMPLE CONCEPTUEL	25
FIGURE 6 : MACHINE LEARNING (SOURCE : FANVOICE)	29
FIGURE 7 : ARCHITECTURE TYPIQUE D'UN RÉSEAU DE NEURONES ARTIFICIELS MULTICOUCHES.....	30
FIGURE 8 : REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DES ENTRÉES DANS UN NEURONE (EXEMPLE POUR 3 INPUTS)	31
FIGURE 9 : GRAPHE DES PROCESSUS SUITE AU TEST PARCORR ET LES DONNÉES DÉRIVÉES. FOCALISATION SUR LES LIENS AVEC DD (À GAUCHE) ET AVEC RG (À DROITE).	36
FIGURE 10 : GRAPHE DES PROCESSUS SUITE AU TEST CMikNN ET LES DONNÉES DÉRIVÉES. FOCALISATION SUR LES LIENS AVEC DD (À GAUCHE) ET AVEC RG (À DROITE).	37
FIGURE 11 : GRAPHE DES PROCESSUS SUITE AU TEST CMikNN ET LES DONNÉES BRUTES. FOCALISATION SUR LES LIENS AVEC DD (À GAUCHE) ET AVEC RG (À DROITE).	37
FIGURE 12 : SCÉNARIO 1 : PRÉDICTION DE LA DEUXIÈME ANNÉE DE DD (EN HAUT) ET RG (EN BAS). INPUT : 98 SÉRIES (8 AUTRES VARIABLES ET 10 DÉLAIS TEMPORELS POUR CHAQUE SÉRIE DE LA FIGURE 3).	38
FIGURE 13 : SCÉNARIO 1 : PRÉDICTION DE LA PREMIÈRE ANNÉE DE DD (EN HAUT) ET RG (EN BAS). INPUT : 98 SÉRIES (8 AUTRES VARIABLES ET 10 DÉLAIS TEMPORELS POUR CHAQUE SÉRIE DE LA FIGURE 3).	39
FIGURE 14 : SCÉNARIO 2 : PRÉDICTIONS DE LA 2 ^E ANNÉE DES DÉRIVÉES DE DD (EN HAUT) ET RG (EN BAS) SUR BASE DE L'INPUT CAUSAL PARCORR.	39
FIGURE 15 : SCÉNARIO 4 : PRÉDICTIONS (EN HAUT) ET DÉRIVÉES DES PRÉDICTIONS (EN BAS) DE LA 2 ^E ANNÉE DE RG SUR BASE DE L'INPUT CAUSAL CMikNN DONNÉES BRUTES.	40
FIGURE 16 : SCÉNARIO 4 : PRÉDICTIONS (EN HAUT) ET DÉRIVÉES DES PRÉDICTIONS (EN BAS) DE LA 2 ^E ANNÉE DE DD SUR BASE DE L'INPUT CAUSAL CMikNN DONNÉES BRUTES.	40

Liste des tableaux

TABEAU 1 : MÉTADONNÉES SUR VARIABLES SÉLECTIONNÉES (COORDONNÉES GÉOGRAPHIQUES LAMBERT BELGE 1972)	15
TABEAU 2 : NSE MAXIMUM OBTENU POUR CHAQUE SCENARIO, VARIABLE, ANNÉE PRÉDITE ET DÉRIVÉES DES PRÉDICTIONS.....	41

1. Introduction

Près d'un quart de la population mondiale dépend des aquifères karstiques en matière d'approvisionnement en eau potable (Hartmann et al., 2014; Ford et Williams, 2007). Les aquifères karstiques se développent au sein d'un socle géologique carbonaté et soluble présentant une géomorphologie fracturée, et, selon les stades de développement, une présence éventuelle de cavités. Les milieux karstiques couvrent environ 13,6 % des surfaces continentales mondiales, 21,6% de la surface de l'Europe, et 31,2% de la Belgique (Chen et al., 2017). En raison de leur caractère fracturé, la vulnérabilité des aquifères karstiques notamment face à la pollution est élevée (Zwahlen, 2003). A l'ère de l'anthropocène et de ses défis en matière de gestion des ressources en eaux (Di Baldassarre et al., 2019), l'étude des systèmes karstiques reste primordiale.

La structure d'un système karstique et les processus hydrologiques associés sont complexes. Au sein de ce système se développe un réseau d'écoulement souterrain par érosion et dissolution des roches carbonatées. Ce réseau est constitué de macropores allant des fissures les plus fines aux conduites les plus larges telles que les grottes par exemple (Worthington et Ford, 2009). Ce processus s'appelle la karstification. Les systèmes karstiques présentent une dualité de porosité et d'écoulement. On distingue les écoulements lents dans la matrice poreuse des écoulements préférentiels, anisotropes et distribués de manière hétérogènes dans les conduits du système (Király, 1998) (Figure 1). Les systèmes karstiques sont connus pour être non linéaires, en ce sens que la réponse hydrologique dépend de l'état du système. Cette dépendance se traduit notamment par des effets de seuil pour les écoulements dans le réseau de conduits (Pinault et al., 2001). De plus, les limites physiques d'un système karstique ne sont pas toujours évidentes à caractériser. Il peut y avoir des entrées d'eau souterraines de nature allogénique alimentant le système, ainsi que des exutoires méconnus, exfiltrant éventuellement l'eau de l'aquifère karstique de façon épisodique (Hartmann et al., 2014).

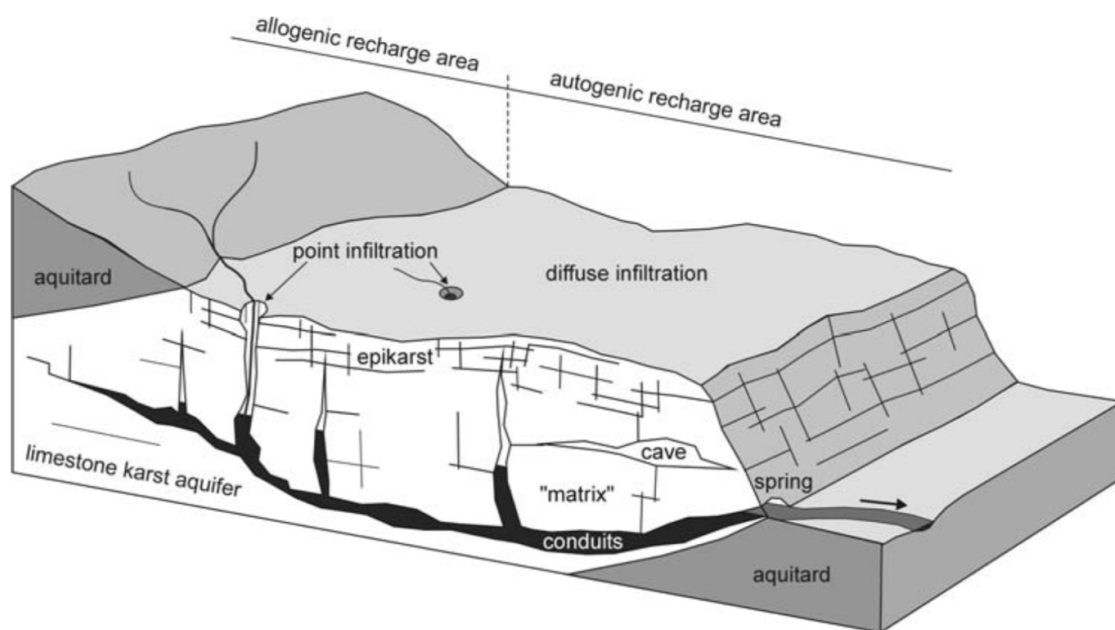


Figure 1 : Schéma conceptuel d'un système karstique. Mise en évidence de la dualité de la porosité, de l'infiltration et de la nature de la recharge (Goldscheider et Drew, 2007).

Si, conceptuellement le karst et ses processus sont bien connus, en pratique, les méthodes d'investigation du karst sont limitées. Celles-ci se focalisent tantôt sur la structure statique du système karstique, géologique et géomorphologique, tantôt sur sa dynamique fonctionnelle par la détection des processus hydrologiques et de l'étude de leur variabilité. D'après Bakalowicz (2005), le comportement hydrologique ne peut être déduit uniquement sur base de la structure géologique et en particulier sur base de la distributions des fractures dans le karst. D'une part, cette distribution est en général méconnue ou incertaine. De plus, les écoulements sont dictés par la continuité et la discontinuité des gradients hydrauliques existant entre la zone d'infiltration et la source d'eau en aval du système. Dès lors, une analyse des séries temporelles de débits aux différentes résurgences, de mesures hydrogéochimiques ou isotopiques comme des traceurs, naturels ou artificiels, ou encore le recours à la modélisation permet de caractériser d'un point de vue fonctionnel le système karstique (Bakalowicz, 2005). La corrélation entre ces séries temporelles renseigne sur la dynamique qui survient dans le réseau de conduits karstiques (Mangin, 1984; Bailly-Comte et al., 2008; Tagne et Dowling, 2018). En régime de crue et lors de pluies torrentielles, le comportement des systèmes karstiques approche celui des systèmes linéaires. Ainsi, l'analyse corrélatoire entre séries chronologiques des variables fonctionnelles est plutôt valable en périodes de crue. L'étude d'un site en particulier fait souvent appel à la modélisation pour prédire le comportement du système. Toutes les approches de modélisation physiques des systèmes karstiques nécessitent un nombre plus ou moins important de propriétés mesurées et de manière plus ou moins continue (Hartmann et al., 2014). Généralement, la non-linéarité des phénomènes rend la modélisation des systèmes karstiques assez difficile et peu transposable entre divers cas d'étude. De plus, le bilan de masse d'eau est souvent délicat à déterminer.

Selon Hartmann et al. (2014), il est impératif de mettre au point des outils de simulation adéquats dotés d'une meilleure utilisation des données disponibles et applicables à plus large échelle pour pouvoir modéliser les systèmes karstiques.

Dans la catégorie des modèles plutôt mécanistiques, on distingue des modèles qui discrétisent l'espace en 2 ou 3 dimensions. Ce maillage permet d'attribuer un état et des paramètres hydrologiques à chaque « cellule ». Certains chercheurs développent une approche de « milieu poreux équivalent », d'autres considèrent un double continuum : la matrice poreuse d'une part et les conduits karstiques d'autre part. Une autre catégorie de modèles mécanistiques conceptualise les processus physiques à l'échelle du système karstique tout entier. Au sein de cette famille de modèles, des variantes existent en fonction de la considération de la nature de la recharge, des effets de seuil pour l'activation ou l'arrêt de la recharge au travers du réseau de conduits, de la séparation conceptuelle des réservoirs pour l'infiltration diffuse et pour les flux préférentiels, de la surface de recharge considérée en tant que variable et du drainage par plusieurs résurgences.

Les modèles qualifiés « stochastiques » se fondent sur les observations en tant que telles et utilisent des approches statistiques ainsi que la fouille des données pour modéliser le système. Actuellement, on entre dans l'ère de l'information et du *Big Data*, et, de surcroît, on observe une disponibilité croissante de modèles basés sur la fouille des données (*data mining*) et l'apprentissage machine (*machine learning*). Ces modèles sont parfois considérés sous le vocable d'intelligence artificielle (*AI- Artificial intelligence*). L'intelligence artificielle se résume à un ensemble d'outils, d'algorithmes et de modèles, qui ont pour but de traiter, classer, réduire et prédire des données (Michalski et al., 1983). Dans cette catégorie de modèles, on distingue des outils de modélisation linéaires (par exemple des modèles autorégressifs) et des outils non-linéaires tels que les réseaux de neurones artificiels (RNA). De façon plus marginale, jusqu'alors, l'utilisation de RNA a montré un certain potentiel pour la modélisation de systèmes karstiques (Hu et al., 2008; Kurtulus et Razack, 2010; Kong A Siou et al., 2011; Kong-A-Siou et al., 2014). Certes, ces modèles sont qualifiés de « boîte noire » et intègrent peu, voire pas du tout les processus physiques mais peuvent, néanmoins, aider à modéliser des systèmes hydrologiques complexes (Kratzert et al., 2018). D'après Shen et al. (2018), coupler les approches basées sur les données avec les approches mécanistiques s'appuyant sur les processus permettrait de mieux gérer les difficultés souvent rencontrées en matière de disponibilité des données. Pas encore appliquée pour l'étude de systèmes karstiques mais bien dans d'autres domaines de l'hydrologie, l'architecture neuronale *Long Short-Term Memory* (Hochreiter et Schmidhuber, 1997) montre de bonnes performances de prédiction dans diverses applications hydrologiques (Kratzert et al., 2018; Zhang D et al., 2018; Zhang J et al., 2018). En effet, ces modèles conservent en mémoire la dynamique du passé afin d'améliorer les prédictions (Shen, 2018). D'architecture complexe et flexible, les réseaux de neurones sont capables de reproduire des interactions non-linéaires. Toutefois, les réseaux

de neurones artificiels perdent en fiabilité lorsqu'on sort des conditions particulières pour lesquelles ils ont été entraînés, c'est-à-dire en conditions non-stationnaires (Teutsch et Sauter, 1998; Kuczera et Mroczkowski, 1998). Le fait que de tels outils performant bien par association mais non par intégration causale est un phénomène révélateur. C'est en ce sens, notamment en sciences de la terre, que certains prônent une intégration de la causalité au sein des modèles de *machine learning* (Runge et al., 2019).

Historiquement, le père de la Physique, Aristote, définissait la causalité comme le discours du pourquoi (Aristoteles et Carteron, 1926). Cependant, la causalité a été bannie du vocabulaire de la science, en particulier de la physique, depuis Galilée jusqu'à il y a peu (Pearl, 2000). La science s'est détournée du pourquoi au profit du comment, se limitant à la stricte description physique des processus par l'usage de l'algèbre et des mathématiques. Ce n'est qu'au 20^e siècle que l'inférence causale refait surface, d'abord à travers la popularisation des mesures statistiques de l'association telles que le coefficient de corrélation de Pearson (Pearson, 1897). Cette méthode peut notamment s'appliquer à des séries temporelles, en mesurant entre deux variables la corrélation croisée, permettant ainsi l'identification d'un délai temporel potentiellement causal entre celles-ci. La causalité est alors induite du principe de priorité de la cause, c'est-à-dire que la cause précède l'effet. La méthode de la corrélation croisée peut toutefois induire des relations causales qui s'avèrent fausses. C'est notamment le cas lorsque deux variables n'ont aucun lien entre elles mais sont chacune sous l'influence d'une troisième variable. C'est ainsi que se développe la notion de graphe causal dans un journal de recherche en agronomie (Wright, 1921). Les travaux de Wright ont ensuite été repris par Pearl et Spirtes (Pearl, 2000; Spirtes et al., 2000). L'économètre prix Nobel Granger reconnaît qu'il faut, au préalable, déduire l'effet de cette troisième variable sur les autres avant de voir s'il reste une quelconque corrélation entre les résidus, un principe nommé corrélation partielle (Granger, 1969). Pour ce faire, Granger fournit un cadre d'analyse basé sur des modèles de type vecteur autorégressifs afin de mesurer la causalité sur une base multivariée. Bien que les travaux contemporains de Rodriguez-Iturbe et Yevjevich (1968) en hydrologie soient très similaires à ceux de Granger, ces méthodes n'ont pas eu la même popularité en hydrologie. En effet, les premières applications de la causalité de Granger en hydrologie n'apparaissent que dans les années 90 et 2000 (Tessier et al., 1996; Salvucci et al., 2002), et très récemment sur l'analyse des séries temporelles en milieu karstique (Kadić et al., 2018).

Entre-temps, la causalité de Granger étant limitée aux interactions causales linéaires, d'autres méthodes d'inférence causale se sont développées sur base d'autres cadres d'analyse pour envisager la détection d'interactions causales non linéaires. Pour une analyse bi-variée, la méthode du transfert d'entropie (Schreiber, 2000) repose sur la théorie de l'information (Shannon, 1948). Une autre méthode, la méthode du *Convergent Cross Mapping* (Sugihara et al., 2012) se base sur la théorie des systèmes dynamiques (Lorenz, 1963; Takens, 1981). Plus récemment, un cadre d'analyse multivarié qui permet l'inférence causale sur base de

l'information mutuelle conditionnelle (Runge, 2015) a été mis en place, et, étend donc la méthode bi-variée du transfert d'entropie à un cadre générique multivarié. En particulier, l'algorithme d'inférence causale PCMCI (Runge et al., 2017) permet de combiner les méthodes linéaires similaires à celles de Granger et les méthodes non linéaires pour l'analyse de la causalité. D'autres méthodes multivariées telles que les réseaux bayésiens se basent sur les probabilités conditionnelles (Koller et Friedman, 2009).

Dans la mesure où les systèmes karstiques restent des « boîtes noires » en raison des limites des méthodes d'investigation à caractériser la structure du système, ses limites et sa dynamique non linéaire, ce mémoire considère pour sa modélisation une approche de fouille des données et plus particulièrement, les réseaux de neurones LSTM (*Long Short-Term Memory*). Dans un contexte hydrologique global reconnu comme étant non-stationnaire (Milly et al., 2008), il apparaît comme important de développer une vision de l'intelligence artificielle qui soit plus résiliente aux changements des conditions sur lesquelles ses modèles sont calibrés. C'est ainsi que ce mémoire vise à allier la réflexion causale et la modélisation LSTM en comparant les performances des modèles calibrés avec et sans sélection causale préalable des variables. Cette sélection causale est opérée à la fois en comparant les méthodes d'inférence causale linéaire et non-linéaire de l'algorithme PCMCI.

2. Objectifs de travail

De manière générale, ce travail a pour objectif de progresser dans la compréhension des dynamiques hydrologiques s'opérant dans le karst en utilisant des algorithmes récents développés dans le domaine de l'inférence causale et dans celui des réseaux de neurones artificiels (RNA). Ces outils, basés sur la fouille des données, permettraient de modéliser des systèmes complexes comme le karst en complémentarité avec des modèles à base physique. Les modèles produits seraient notamment capables de comprendre et de dévoiler des interactions non-linéaires souvent présentes en hydrologie.

Plus particulièrement, nous proposons d'analyser la valeur ajoutée d'une analyse causale préalable à la modélisation par RNA en termes de performance de modélisation. Pour ce faire, nous utilisons l'algorithme PCMCI comme analyse causale et le *Long Short-Term Memory* (LSTM) comme algorithme de RNA.

De manière plus spécifique, nous travaillons sur 9 séries chronologiques d'un système karstique, enregistrées au laboratoire des grottes de Rochefort (Belgique) sur deux années consécutives. Parmi ces séries, deux en font l'objet d'une analyse plus approfondie: le débit de gouttes percolant dans une grande cavité karstique (le Val d'Enfer) et le signal gravimétrique résiduel du gravimètre à supraconductivité, situé dans le laboratoire de surface. Ces deux variables rendent compte de deux dynamiques distinctes. Le débit de gouttes traduit les flux préférentiels vers la grotte, tandis que le signal gravimétrique décrit la dynamique des masses d'eau globalement retenues dans l'aquifère karstique.

Dans un premier temps, nous établissons des cartes causales sur base des 9 variables sélectionnées. Ces cartes sont construites par inférences causales linéaires et non linéaires, grâce à l'algorithme PCMCI, basé sur des tests d'indépendance conditionnelle (Runge et al., 2017). Les résultats de cette analyse seront présentés pour les deux variables d'intérêt. Dans un second temps, nous voulons mettre en lumière le potentiel modélisateur de réseaux de neurones récurrents à architecture neuronale *Long Short-Term Memory* (Hochreiter et Schmidhuber, 1997) dans la prédiction des deux variables d'intérêt. Nous comparons, entre autres, les prédictions basées sur l'ensemble des données avec celles basées sur les prédicteurs sélectionnés d'après les analyses causales. Pour chaque scénario, l'efficacité de prédiction est évaluée par le critère de Nash et Sutcliffe (Nash et Sutcliffe, 1970).

3. Site d'étude

3.1. Système karstique de la Lhomme

Le site d'étude choisi est le système karstique de la Lhomme (LKS), situé à Rochefort et ses alentours, au sud de la Belgique. Ce système constitué de roches calcaires du Givétien intègre un grand réseau d'écoulements souterrains (Michel et Thys, 2015). Il s'étend sur près de 10 km, le long de la rivière Lhomme, un affluent de la Lesse. La résurgence d'Éprave est l'unique sortie du système et génère un débit relativement constant contenu entre $0,68$ et $2,6 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ (Poulain, 2017). Les couches calcaires du LKS font partie d'un anticlinal renversé (Vandycke et Quinif, 2001). L'hydrogéologie du LKS a déjà été étudiée par de nombreux chercheurs via la spéléologie ou par des essais de traçage depuis le début du XX^e siècle (Van Den Broeck et al., 1910; Willems et Ek, 2011). Plus récemment, Poulain (2017) a identifié plus clairement des connexions hydrogéologiques au sein du LKS par des essais de traçage (Figure 2). À certains emplacements particuliers dans les grottes, il est possible d'observer l'écoulement des rivières souterraines ou la présence de la nappe d'eau. Les rivières souterraines sont associées à la percolation des deux rivières de surface : la Wamme (Figure 2, North underground river) et à la Lhomme (Figure 2, South underground river).

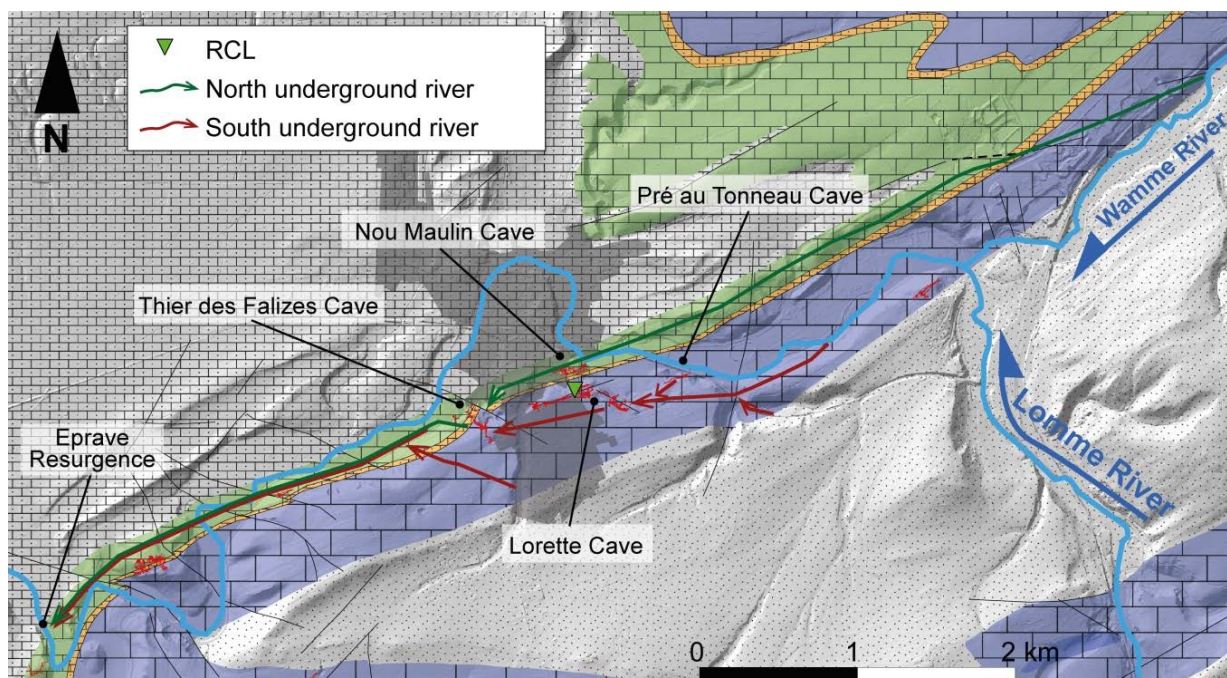


Figure 2 - Connexions hydrogéologiques du système karstique de la Lomme (Poulain, 2017, tiré du travail de Watlet, 2017)

Plusieurs grottes sont présentes sur le site de Rochefort (Figure 2). Parmi elles, la grotte de Lorette constitue un laboratoire de recherche (RCL). Plusieurs variables hydrologiques et géophysiques y sont mesurées. À l'extérieur, on note la présence d'un laboratoire de surface.

Il contient notamment un gravimètre à supraconductivité. Ce dernier a permis d'étudier les processus de recharge au niveau de la zone vadose du système karstique de la Lhomme (Watlet, 2017). Le laboratoire est installé depuis les années 90 afin d'y observer des failles tectoniques actives. (Vandycke et Quinif, 2001; Van Camp et al., 2006; Camelbeeck et al., 2012). L'étude hydrogéologique et hydrogéophysique a débutée en 2013 avec le projet KARAG (Karst Aquifer ReseArch by Geophysics) mené par l'Université de Namur, l'Université de Mons et l'Observatoire Royal de Belgique. Dans la lancée, un nouveau projet a vu le jour, MIGRADAKH (MIning GRAvity DATA from a Karst Hydrosystem), mené par l'UCLouvain et l'Observatoire Royal de Bruxelles (ORB). C'est au sein de ce nouveau projet que prend part ce mémoire de fin d'étude.

3.2 Données

La base de données du projet MIGRADAKH regroupe un total de 123 séries temporelles relatives au système karstique de la Lhomme sur base d'observation de 19 propriétés physiques ou physico-chimiques différentes, obtenues à partir de 49 instruments de mesures différents. Une partie des données hydrologiques provient du Services Public de Wallonie (SPW) telles que les données de hauteurs d'eau, du débit de rivière ou de pluie, disponibles depuis les portails Aqualim¹ et Infocrue² du SPW. Davantage de données agrométéorologiques sont fournies par l'ASBL PAMESEB³ pour la station de Jemelle. Dans le cadre du projet KARAG et sous la collaboration de l'Observatoire Royal de Belgique (ORB), de l'Université de Mons (UMons) et de l'Université de Namur (UNamur), des données hydrologiques et géophysiques supplémentaires ont été récoltées en surface et au sein du réseau spéléologique du système karstique de la Lhomme. Il s'agit de l'humidité du sol, des niveaux piézométriques, de la résistivité électrique de l'épikarst, de la gravité et des débits mesurés sur stalactites ou le long des failles géologiques.

A partir de la base de données MIGRADAKH, 9 séries temporelles de fréquence journalière ont été extraites selon un compromis alliant 4 objectifs pour une analyse causale cohérente : i) se focaliser sur le système des grottes de Rochefort ; ii) maximiser la couverture temporelle des données sur au moins deux années ; iii) varier le type de propriétés physiques et de processus observés ; et iv) éviter l'inclusion de séries temporelles dont la dynamique est intermittente (par exemple les piézomètres qui ne sont pas constamment sous eaux). Les métadonnées associées au jeu de données sélectionné sont rapportées dans le Tableau 1. Malgré la volonté de sélectionner un jeu de données d'observations continues, ces séries ne sont pas toutes complètes. Les données manquantes sont dues à divers facteurs, comme des pannes suite à

¹ <http://geoportail.wallonie.be/catalogue/96458822-8ec0-4f6e-bebd-2a611beb62b5.html>

² <http://voies-hydrauliques.wallonie.be/opencms/opencms/fr/hydro/Actuelle/crue/index.html>

³ <https://www.pameseb.be>

un dysfonctionnement de l'appareil de mesure ou des pannes de courant. Chaque série comporte donc au maximum 731 observations. Le ré-échantillonnage en fréquence journalière se fait par estimation des moyennes ou des sommes journalières au départ des données de la base de données MIGRADAKH. Notons que les données de débit de goutte (DD) présentent dans la base de données MIGRADAKH sont déjà un recalage horaire de données échantillonnées à intervalles irréguliers obtenues par interpolation linéaire.

*Tableau 1 : Métadonnées sur variables sélectionnées
(coordonnées géographiques Lambert Belge 1972)*

<i>Abr.</i>	<i>Nom complet de la mesure</i>	<i>Unités</i>	<i>Fournisseur de données</i>	<i>Fréquence Initiale⁴</i>	<i>Coordonnées Lambert : x</i>	<i>Coordonnées Lambert : y</i>	<i>Nbre données manquantes</i>
<i>RF</i>	Précipitations	mm	ORB	15 min	211307	94156	0
<i>ET</i>	Évapotranspiration potentielle	mm	PAMESEB	horaire	212428	95307	0
<i>AP</i>	Pression atmosphérique	hPa	ORB	horaire	211234,5	94138,1	2
<i>RG</i>	Signal gravimétrique résiduel	nm/s ²	ORB	horaire	211234,5	94138,1	1
<i>GL</i>	Niveau piézométrique de la nappe	m	UNamur	15 min	211260	94262	12
<i>VW</i>	Teneur en eau volumique ⁵	-	UMons	journalier	211252	94147	157
<i>DD</i>	Débit de gouttes (P1) dans le Val d'Enfer	L/h	UMons	horaire	211296	94121	211
<i>SDr</i>	Débit de la Lhomme au niveau de Rochefort	m ³ /s	SPW	10 min	211255	94457	0
<i>SDe</i>	Débit de la Lhomme au niveau d'Éprave	m ³ /s	SPW	10 min	206845	92363	0

⁴ Telle que encodée dans la base de données MIGRADAKH. Cette fréquence peut différer de la fréquence d'échantillonnage.

⁵ Moyenne des teneurs en eau volumique à trois profondeurs : 10, 50 et 105 cm ; obtenue par des sondes réflectométriques ; dans un mélange de sol et de roches calcaires (Watlet, 2017).

Les données ont été sélectionnées selon la logique du mémoire qui vise à étudier causalement et modéliser à la fois une vue intégrée du système des grottes de Rochefort et une dynamique plus locale. Le signal gravimétrique résiduel intègre le bilan de masse sur un rayon d'environ 1 km, en capturant les variations de masse d'eau (Tableau 1, RG). La dynamique locale est associée au débit des gouttes précipitant à l'intérieur de la grotte de Rochefort (Tableau 1, DD).

Le signal gravimétrique résiduel est une mesure transformée au départ du signal d'un gravimètre à supraconductivité (Goodkind, 1999) mesuré dans le laboratoire de surface surplombant les grottes. Le signal du gravimètre à supraconductivité est une mesure relative de la gravité qui est calibrée au moyen d'un gravimètre absolu (Niebauer et al., 1995; Van Camp et al., 2016). Les effets des marées et les effets liés à la rotation de la terre sont ensuite retirés du signal. Pour finir, les effets liés à la pression atmosphérique sont retirés en admettant un facteur d'admittance de $-3,3 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{hPa}^{-1}$. Cette valeur théorique⁶ correspond à la résultante entre les effets dus au changement de la densité de masse de l'atmosphère (environ $-4 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{hPa}^{-1}$) et au changement de densité de la croûte terrestre induit par la pression atmosphérique (environ $+1 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{hPa}^{-1}$). Cette correction ne permet que de corriger les effets linéaires de la pression sur le signal gravimétrique. Afin d'investiguer les effets non linéaires éventuels, la pression atmosphérique (AP) est incluse dans le jeu de données. Le baromètre correspondant est celui intégré au gravimètre à supraconductivité. Toutefois, les données gravimétriques résiduelles intègrent principalement des composantes hydrologiques et trouvent de plus en plus d'application dans ce domaine (par exemple Van Camp et al., 2006; Cazenave et Chen, 2010; Naujoks et al., 2010; Creutzfeldt et al., 2010, 2012; Mazzilli et al., 2013).

La dynamique temporelle de l'ensemble des variables est rapportée à la Figure 3. La Figure 4 reprend quant à elle une carte permettant de visualiser spatialement la localisation des instruments de mesures associés au jeu de données. L'évapotranspiration étant l'une des principales variables motrices de tout système hydrologique, des données d'évapotranspiration potentielle (Tableau 1, ET) sont calculées au départ des données de la station agro-météorologique PAMESEB la plus proche, celle située à Jemelle. Cette estimation est faite selon l'équation FAO-56 de Penman-Monteith (Allen et al., 1998). Toute aussi primordiale, la pluie (Tableau 1, RF) est mesurée sur le site des grottes de Rochefort par un pluviomètre installé par l'Observatoire Royale de Belgique. Bien que la rivière soit située en aval des grottes, deux séries de données de débits de la Lhomme sont également incluses pour la station SPW de Rochefort (Tableau 1, SDr) et d'Eprave (Tableau 1, SDe). En effet, la Lhomme

⁶ (Watlet, 2017) rapporte une admittance de $-2,95 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{hPa}^{-1}$ associée au gravimètre à supraconductivité des grottes de Rochefort. La valeur théorique de $-3,3 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{hPa}^{-1}$ est cependant celle utilisée dans le cadre de ce mémoire.

contribue à la recharge de l'aquifère karstique (Poulain, 2017) de façon continue à travers les pertes par percolation au niveau du lit perché de la rivière et de façon sporadique lorsque les débits atteignent des valeurs supérieures à $15 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$. Le cas échéant, la rivière se déverse partiellement dans le système karstique. Lorsque les débits dépassent $25 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$, la rivière se déverse directement par débordement dans le réseau de galeries dans lequel est situé le piézomètre (Tableau 1, GL) : les grottes de Nou Maulin. Le piézomètre est une sonde à pression CTD-Diver® permettant l'estimation d'un niveau d'eau en déduisant la pression atmosphérique. Les eaux de l'aquifère karstique se déchargent à nouveau dans la Lhomme au niveau de la résurgence vauclusienne d'Éprave, située à quelques mètres de la rivière, 1 km à l'est de la station de mesure SDe, à la limite du système karstique. Les débits de la résurgence sont difficilement jaugeables mais, en guise d'ordre de grandeur, son débit varie entre $0.5 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ et $2.5 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ selon que l'on soit en période d'étiage ou de crue, avec un débit moyen estimé autour de $1 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$.

Enfin, afin de considérer les transferts d'eau verticaux, de la surface jusque dans la chambre principale des grottes de Rochefort, le Val d'Enfer, des données de teneur en eau volumique (VW) mesurées en surface sont incluses dans le jeu de données ainsi que les données locales de gouttes précipitées dans la grotte (DD), dans la chambre du Val d'Enfer. Les données de teneur en eau volumique ont été mesurées par Watlet (2017), via des sondes réflectométriques à trois profondeurs : 10, 50 et 105 cm. Les trois profondeurs ont été moyennées pour obtenir la série temporelle montrée à la Figure 3. Le compteur de gouttes est un dispositif à auget basculeur, spécialement adapté pour recueillir les eaux calcaires (Kaufmann et al., 2016). Les connections hydrologiques entre la surface et les écoulements locaux identifiés par ce compteur ont déjà été déterminés par essais de traçage (Poulain, 2017), par corrélation croisée avec les données de teneur en eau volumique et de résistivité électrique (Watlet et al., 2018), et avec d'autres méthodes d'inférences causales bi-variées appliquées telles que la méthode linéaire de Granger et la méthode non-linéaire de la cartographie croisée convergente (*convergent cross mapping*) (Delforge et al., 2019). Cependant, à ce jour, aucune approche multivariée d'inférence causale n'a été appliquée pour étudier cette dynamique.

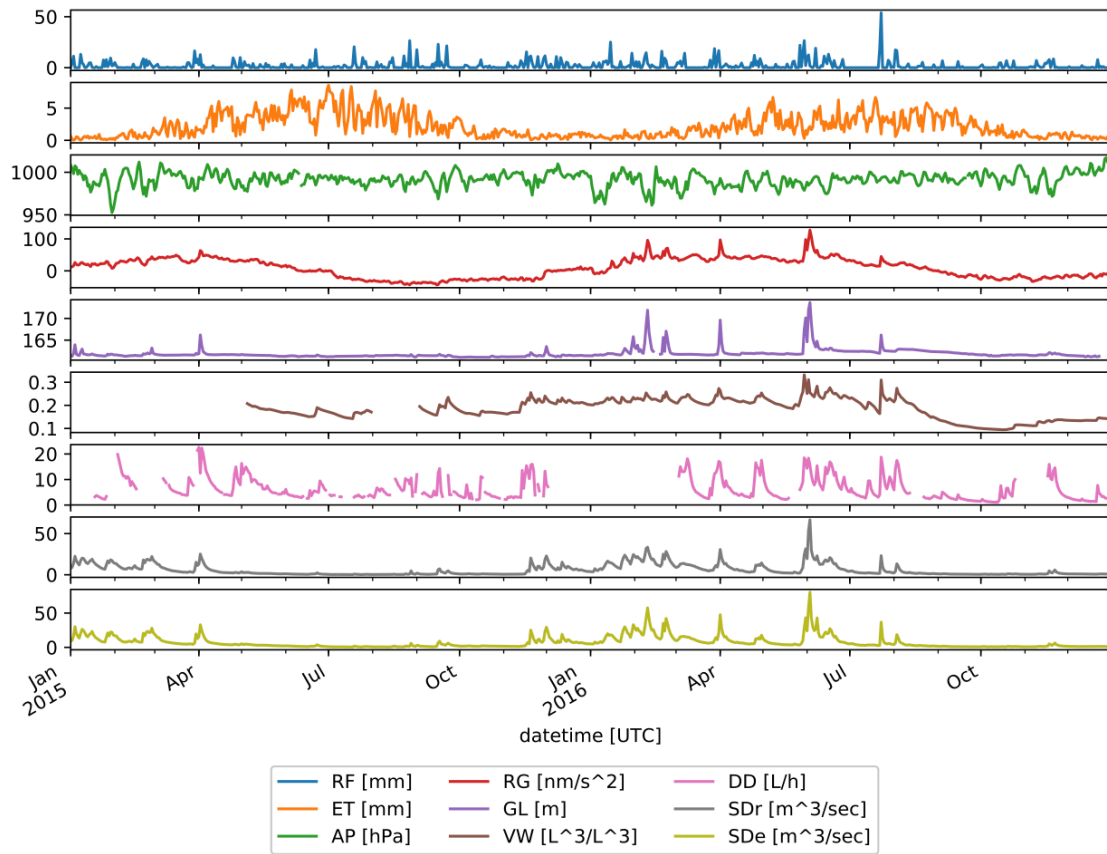


Figure 3 : Séries temporelles sélectionnées comme base des différentes analyses de ce mémoire.
Période couverte : du 01-01-15 au 31-12-16.

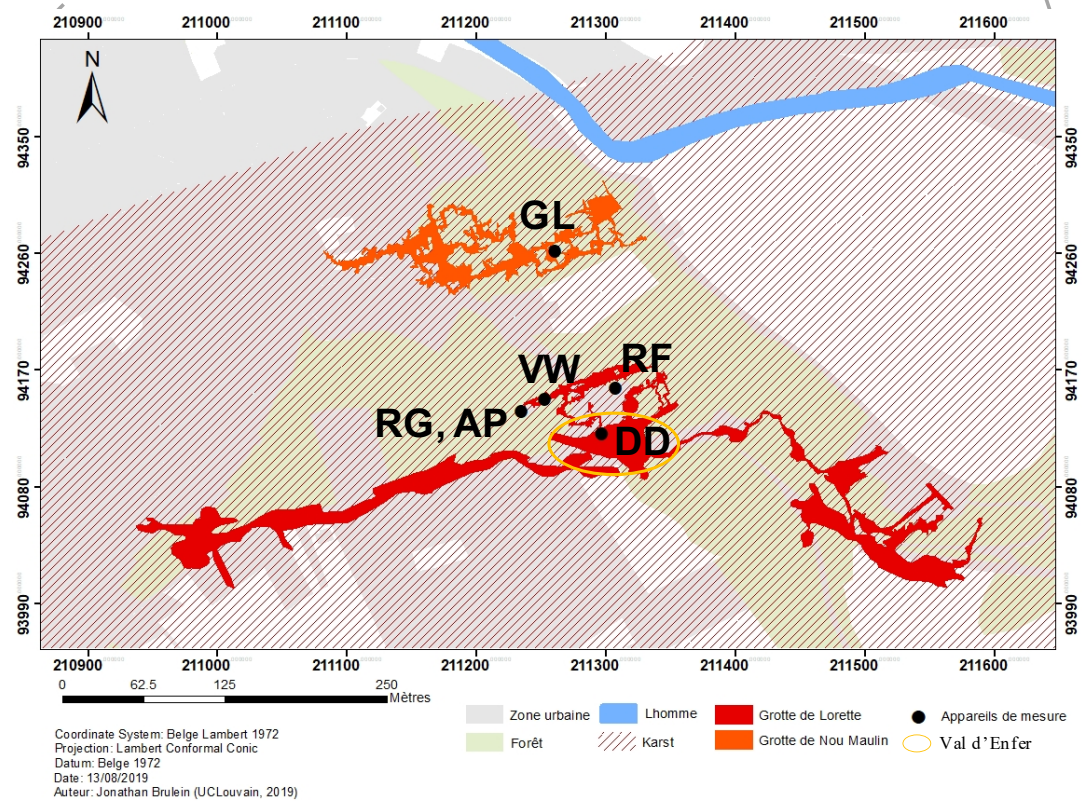
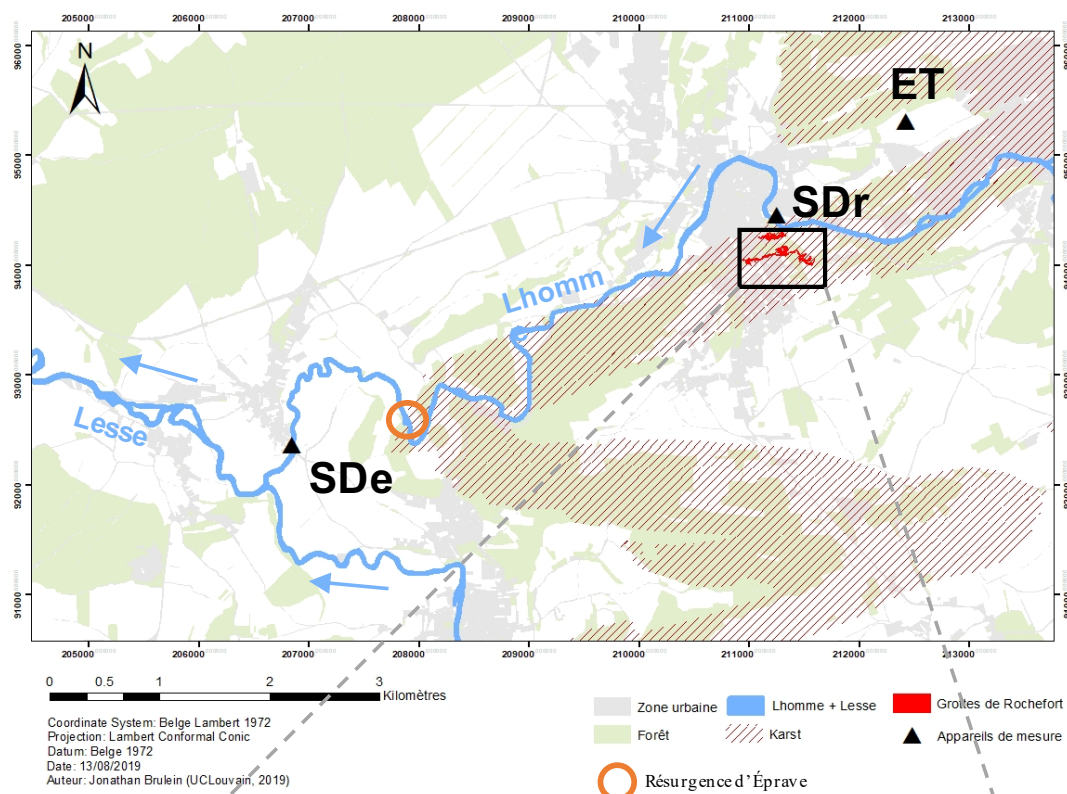


Figure 4: Localisation des points de mesures pour les différentes variables étudiées

4. Matériel et méthodes

4.1. Inférence causale

4.1.1. Algorithme PCMCI

L'algorithme d'inférence causal PCMCI est implémenté dans une bibliothèque logicielle Python développée par Jacob Runge et baptisée *Tigramite*, pour **T**ime series **G**raph based **M**asures of **I**nformation **T**ransfer, détaillée dans Runge et al. (2017). Il s'agit d'un cadre d'analyse causale entre séries temporelles.

Considérons la terminologie suivante : soit $\mathbf{X}$, un processus stochastique multivarié de données temporelles discrètes. Ce processus est décrit par les séries chronologiques des m variables et l'ensemble des délais temporels leur étant associés. Ainsi, la variable i , pour $i \in \{1, 2, \dots, m\}$ à l'instant t s'écrit X_t^i . Cette même série décalée d'un pas de temps dans le passé sera considérée comme la variable à part entière X_{t-1}^i . L'objectif est d'établir un lien dirigé entre deux variables i et j avec un certain décalage temporel pour la variable i , tel que $X_{t-\tau}^i \rightarrow X_t^j$, pour $0 \leq \tau \leq \tau_{max}$ et $i, j \in \{1, 2, \dots, m\}$, et où τ_{max} est un paramètre définissant le domaine temporel causal maximum pour le processus $\mathbf{X}$. PCMCI fonctionne donc dans le domaine temporel et utilise le critère d'antériorité de la cause comme principe d'inférence causale. Dans le cas particulier de $\tau = 0$ et $i \neq j$, la relation entre les deux variables apparaîtra comme non dirigée dans la mesure où le caractère instantané de la relation ne permet pas de distinguer la cause de l'effet. Au total, on peut résumer 3 types de relations causales identifiables par PCMCI :

- L'auto-dépendance (autocorrélation dans le cas linéaire) : la réalisation d'une variable est causée par la réalisation antérieure de cette même variable.
- La dépendance instantanée : deux variables sont liées entre elles à chaque instant ou pas de temps.
- La dépendance avec un certain décalage temporel : la réalisation d'une variable est causée par la réalisation antérieure d'une autre variable.

L'approche de découverte causale par l'algorithme PCMCI est basée sur des tests d'indépendance conditionnelle. Selon Spirtes et al. (2000), il est plus pertinent en inférence causale de rejeter l'indépendance conditionnelle plutôt que de prouver directement la dépendance conditionnelle, qui repose sur des hypothèses bien plus fortes.

Elle part du principe que pour $\tau > 0$, on aura un lien dirigé « $X_{t-\tau}^i \rightarrow X_t^j$ » si et seulement si :

$$X_{t-\tau}^i \not\perp\!\!\!\perp X_t^j \mid \mathbf{X}_t^- \setminus \{X_{t-\tau}^i\} \quad (1)$$

où $\mathbf{X}_t^-$ représente le passé du processus multivarié, c'est-à-dire tout ce qui se passe avant le temps t . Si l'hypothèse d'indépendance ($\perp\!\!\!\perp$) conditionnelle est rejetée avec un certain niveau de signification α , on estime qu'il y a une dépendance entre les variables $X_{t-\tau}^i$ et X_t^j . Dans ce mémoire, nous avons choisi $\alpha = 0.01$. La condition $\mathbf{X}_t^- \setminus \{X_{t-\tau}^i\}$ sert à retirer l'influence des autres variables réalisées dans le passé.

Les tests d'hypothèses sur l'indépendance conditionnelle peuvent être réalisés selon différentes approches. Plusieurs tests sont proposés pour l'algorithme PCMCi : un test basé sur la corrélation partielle (*ParCorr*), un test non linéaire à deux étapes (*GPDC*), un test entièrement non paramétrique basé sur une estimation par plus proche voisin de l'information mutuelle conditionnelle (*CMiknn*) et un test basé sur l'utilisation de noyaux, également non paramétrique (*RCOT*). Le test *ParCorr* est basé sur l'estimation de la corrélation entre des résidus de régressions partielles. Le test *GPDC*, pour *Gaussian Process and Distance Correlation* (Székely et al., 2007), permet de détecter des liens aussi bien linéaires que non linéaires lorsqu'ils sont exempt de bruit multiplicatif. En effet, pour les cas expérimentaux que Runge et al. (2017) ont testés, *CMiknn* révèle être le seul test capable de détecter des dépendances dans des modèles (linéaires ou non linéaires) auxquels on ajoute du bruit multiplicatif, là où *ParCorr* et *GPDC* n'arrive pas établir l'indépendance conditionnelle. On dit qu'elle est *data-adaptive*, c'est-à-dire qu'elle s'adapte localement à la densité des données, la rendant plus efficiente vis-à-vis des données que les autres méthodes. Enfin, *RCOT*, pour *Randomized Conditional Correlation Test*, doit être utilisé pour des échantillons de taille supérieure à 1000 observations, car l'approximation analytique de la distribution nulle n'est pas valable pour des échantillons plus petits (Strobl et al., 2017). À travers ce mémoire, nous utilisons uniquement *ParCorr* et *CMiknn*. Ces deux tests sont développés aux sous-sections suivantes.

L'algorithme PCMCi fonctionne en deux étapes. La première consiste en une version de l'algorithme PC développé par Spirtes et Glymour (1991), et, modifiée plus tard par Colombo et Maathuis (2014). L'objectif est d'estimer les parents de chaque variable X_t^j , soit de sélectionner le set de conditionnement de chaque variable pour l'étape suivante (MCI). Les parents du nœud X_t^j sont définis comme :

$$\mathcal{P}(X_t^j) = \{X_{t-\tau}^k : X^k \in \mathbf{X}, \tau > 0, X_{t-\tau}^k \rightarrow X_t^j\} \quad (2)$$

En pratique, on peut avoir des parents pour $\tau = 0$ et $k \neq j$ mais ce cas peut mener à des associations où l'on ne peut pas distinguer la cause de l'effet.

L'estimation des parents se fait comme suit. L'estimateur des parents du nœud X_t^j est initialement défini comme l'ensemble de toutes les variables (sauf X_t^j), soit :

$$\widehat{\mathcal{P}}(X_t^j) = \mathbf{X} \setminus \{X_t^j\} = \{X_t \setminus \{X_t^j\}, X_{t-1}, X_{t-2}, \dots, X_{t-\tau_{max}}\} \quad (3)$$

Par itération, l'algorithme PC retire la variable $X_{t-\tau}^i$ si l'hypothèse nulle $H_0 : X_{t-\tau}^i \perp\!\!\!\perp X_t^j \mid \mathcal{S}$ est acceptée, au niveau de signification α , où $\mathcal{S}$ initialement vide, augmente en cardinalité en fonction des parents retenus.

La deuxième étape (MCI, pour *momentary conditional independence*) est inspirée de la mesure *momentary information transfer* introduite par Pompe et Runge (2011), basée sur la théorie de l'information. Pour chaque paire de variables ($X_{t-\tau}^i ; X_t^j$), on teste l'indépendance conditionnellement aux parents estimés. Un lien sera finalement retenu entre $X_{t-\tau}^i$ et X_t^j si et seulement si :

$$X_{t-\tau}^i \not\perp\!\!\!\perp X_t^j \mid \widehat{\mathcal{P}}(X_t^j) \setminus \{X_{t-\tau}^i\}, \widehat{\mathcal{P}}_{p_X}(X_{t-\tau}^i) \quad (4)$$

4.1.1.1. ParCorr

Le test d'indépendance conditionnelle linéaire basé sur la corrélation partielle est une procédure en deux étapes. Simplifions l'écriture par $X \perp\!\!\!\perp Y \mid \mathbf{Z}$. La première étape consiste à récupérer les résidus des régressions multivariées de X sur $\mathbf{Z}$ et de Y sur $\mathbf{Z}$ avant d'estimer la corrélation entre ces deux résidus. La distribution des estimateurs des résidus sous l'hypothèse nulle $X \perp\!\!\!\perp Y \mid \mathbf{Z}$ s'obtient analytiquement car elle suit une loi de Student à $n - 2 - D_Z$ degrés de liberté, où D_Z est le nombre de variables dans $\mathbf{Z}$. L'hypothèse nulle est rejetée si, pour l'estimateur de la corrélation entre les résidus, la p-valeur est inférieure au niveau de signification α . Le cas échéant, l'algorithme crée un lien, une corrélation, entre X et Y . Toutefois, ce test n'est applicable que pour des cas Gaussiens multivariés et capture uniquement des dépendances linéaires.

4.1.1.2. *CMlknn*

Le test d'indépendance conditionnelle basé sur un estimateur de l'information mutuelle conditionnelle fait l'objet d'un article complet de Runge (2017). Contrairement à *ParCorr*, c'est un test direct et non-paramétrique de l'indépendance conditionnelle, en une étape. L'information mutuelle conditionnelle est estimée sur base des k plus proches voisins, d'où le nom *CMlknn* (**C**onditional **M**utual **I**nformation **k** nearest-neighbor).

L'information mutuelle conditionnelle (CMI) de variables aléatoires et potentiellement multivariées X, Y, Z est défini comme :

$$I_{XY|Z} = H_{XZ} + H_{YZ} - H_Z - H_{XYZ} \quad (5)$$

où H désigne l'entropie de Shannon (Shannon, 1948). Pour le test $X \perp\!\!\!\perp Y \mid Z$, on peut considérer chaque point (x_i, y_i, z_i) de l'échantillon dans l'espace $\mathcal{X} \otimes \mathcal{Y} \otimes \mathcal{Z}$. On estime alors CMI par l'estimateur de l'information mutuelle développé par Kraskov et al. (2004) et généralisé pour CMI (Frenzel et Pompe, 2007; Vejmelka et Paluš, 2008) sur base de l'équation 5, tel que :

$$\hat{I}_{XY|Z} = \psi(k) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [\psi(k_i^Z) - \psi(k_i^{xz}) - \psi(k_i^{yz})] \quad (6)$$

avec la fonction Digamma qui est une dérivée logarithmique de la fonction Gamma $\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x)$, n le nombre d'observations et où k est le seul paramètre à choisir arbitrairement, qu'on nommera plutôt k_{CMI} . Pour un état donné i , il représente le nombre de voisins les plus proches dans l'espace $\mathcal{X} \otimes \mathcal{Y} \otimes \mathcal{Z}$ qui définissent une sphère locale ε_i autour de chaque point i . k_i^Z est le nombre de points contenus dans la projection des points sur l'axe Z pour lesquels la distance au point i est égale ou inférieure au rayon de la sphère ε_i . Il en va de même pour k_i^{xz} et k_i^{yz} , mais sur le plan $\mathcal{X} \otimes \mathcal{Z}$ et l'espace $\mathcal{Y} \otimes \mathcal{Z}$, respectivement. L'avantage de cette méthode est qu'elle s'adapte à la densité de points dans l'espace $\mathcal{X} \otimes \mathcal{Y} \otimes \mathcal{Z}$. Afin d'éviter une estimation biaisée, le paramètre k_{CMI} doit être sélectionné de telle sorte que l'hypothèse de densité de point constante soit respectée au sein de la sphère de voisinage ε_i . Sur base d'expériences virtuelles, Runge (2018) fournit des règles heuristiques telles que k_{CMI} peut inclure 10 à 20 % des points. Ces valeurs peuvent sembler exagérées pour un système hydrologique journalier perturbé par des précipitations d'intensités variables. En effet, si l'échantillon comporte 100 observations journalières, il s'agit d'estimer CMI avec un voisinage de 10 à 20 voisins. L'estimation du paramètre k_{CMI} optimale est donc étudiée au point 4.1.2 sur base d'expériences virtuelles. Cette valeur optimale est à relativiser au vue du temps de calcul linéairement croissant en fonction de la valeur de k_{CMI} .

Pour un k_{CMI} choisi, on obtient un $\hat{I}_{XY|Z}$. Si l'estimateur $\hat{I}_{XY|Z} = 0$, alors $X \perp\!\!\!\perp Y | Z$. Plus la valeur de l'estimateur est proche de 1, plus la dépendance entre X et Y est forte. Pour tester l'hypothèse d'indépendance, il faut rejeter l'hypothèse nulle qui dit que $X \perp\!\!\!\perp Y | Z$. Pour ce faire, l'algorithme génère un certain nombre d'échantillons qui sont sous l'hypothèse nulle, afin de trouver la p-valeur à laquelle se situe notre estimation de CMI sur la distribution des CMI sous l'hypothèse nulle. Pour construire cette distribution, l'algorithme effectue des permutations locales aléatoires des x_i . En permutant les x_i d'un environnement local contenant k_{perm} voisins dans l'espace Z , on détruit la dépendance entre x_i et y_i mais on la conserve (si elle existe) entre x_i et z_i . En effet, les z_i de ce environnement local sont très proches, donc pratiquement d'égale valeur ($z_i \approx z_j$). Il faut donc décider de la valeur d'un deuxième paramètre (k_{perm}) afin d'utiliser cette méthode. Runge (2017) propose des valeurs entre 5 et 10, selon ces tests de calibrations, bien que l'algorithme soit peu sensible aux variations de k_{perm} . Nous avons fait le choix d'un $k_{perm} = 10$, soit la valeur par défaut.

4.1.1.3. Graphe des processus et hypothèses

L'algorithme PCMCI est étroitement lié aux concepts développés dans les modèles d'équations structurelles et à la théorie des graphes. Ainsi, les résultats de l'algorithme PCMCI sont généralement représentés sous forme de graphes. Le graphe des processus (ou carte causale) est la représentation graphique des résultats de l'algorithme PCMCI. Il affiche chaque variable X_t^i sous forme d'un nœud. Les m nœuds sont ensuite reliés par des flèches pour les dépendances avec délais et par une simple droite pour les dépendances instantanées.

Pour illustrer le propos, prenons l'exemple d'un modèle hydrologique conceptuel, composé d'une pluie P et de débits sortants de deux réservoirs $Q^{OUT,A}$ et $Q^{OUT,B}$ non connectés. Sur la Figure 5, on comprend qu'il y a un lien causal dirigé de la pluie vers le réservoir A : $P_{t-1} \rightarrow Q_t^{OUT,A}$, ainsi que 3 liens causals dirigés de la pluie vers le réservoir B sur 3 pas de temps, soit : $P_{t-1} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$; $P_{t-2} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$ et $P_{t-3} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$.

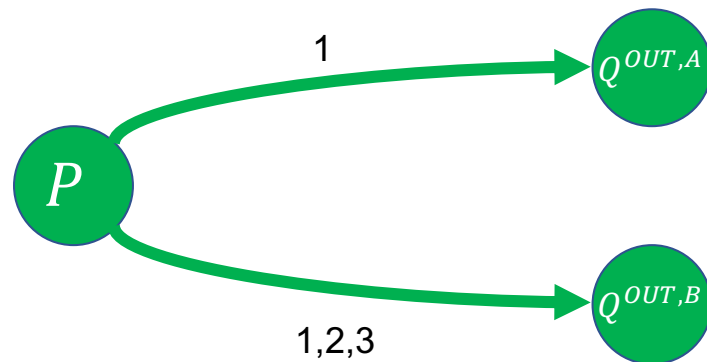


Figure 5 : Graphe des processus - exemple conceptuel

L'algorithme PCMC, comme tout algorithme d'inférence causale, doit satisfaire plusieurs hypothèses comme la suffisance causale, la condition causale de Markov et la stationnarité causale (Spirtes et al., 2000) :

- La suffisance causale suppose que toute variable causant communément deux variables ou plus parmi toutes les variables est incluse dans l'ensemble de variables $\mathbf{X}$. Autrement dit, ces variables suffisent pour décrire un certain processus. Si le système ne respecte pas la suffisance causale, on peut voir apparaître des liens erronés qui résultent de la non inclusion d'une ou plusieurs variables causales. Par exemple, sur l'exemple décrit précédemment (Figure 5), si la pluie est omise de $\mathbf{X}$, autrement dit si elle n'apparaît pas sur le graphe, on aurait probablement un lien $Q_{t-1}^{OUT,A} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$ et un autre $Q_{t-2}^{OUT,A} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$, du fait de ne pas avoir conditionné l'indépendance entre les deux débits par la pluie.
- La condition causale de Markov affirme que lorsque deux variables, conditionnées d'un ensemble de variables ne sont pas connectées dans le graphe des processus, alors elles sont conditionnellement indépendantes. Par exemple, si le lien $Q_{t-1}^{OUT,A} \rightarrow Q_t^{OUT,B}$ n'apparaît pas sur le graphe, c'est parce que, conditionnés à la pluie, c'est-à-dire $\{P_{t-1}; P_{t-2}; P_{t-3}; \dots\}$, $Q_{t-1}^{OUT,A}$ et $Q_t^{OUT,B}$ sont indépendants.
- La stationnarité causale implique que pour le processus $\mathbf{X}$, et sur la période de temps étudiée, l'Éq. (1) est valable pour tout instant t inclus dans la période de temps étudiée, pour tous les liens $X_{t-\tau}^i \rightarrow X_t^j$ représentés sur le graphe des processus. Cette hypothèse est moins forte que les définitions de stationnarité en termes de moyenne ou de variance. Cependant, la force des mécanismes causals peut fluctuer au cours du temps (des saisons notamment) tout en satisfaisant l'hypothèse de stationnarité causale (Runge, 2018). Cette hypothèse implique qu'il ne peut pas y avoir de tendance au cours du temps. Par exemple, pour des variables climatiques, et dans le contexte des changements climatiques, cette hypothèse n'est pas vérifiée pour un large domaine temporel étudié.

Dans un système hydrologique, ces hypothèses posent questions dans la mesure où il n'est pas aisé de bien fermer le système en incluant toutes les variables. Dans l'exemple de la Figure 5, on simplifie considérablement le système. Simplifier le système, c'est résumer un continuum hydrologique en faisant abstraction de certaines variables et de réservoirs. En termes de variabilité spatiale, par exemple, un pluviomètre localisé n'est sans doute pas suffisant causalement pour expliquer la dynamique pluviométrique à l'échelle d'un bassin versant. Cela va de même pour la considération de certaines variables ou de réservoirs que l'on peut omettre soit par ignorance, soit à défaut de disponibilité. La sélection des variables s'appuie également sur la vision causale antérieure qu'a le modélisateur sur le système.

Pour l'étude d'un système karstique, la suffisance causale est d'autant plus discutable. En effet, nous sommes en présence d'un continuum hydrologique complexe, présentant une dualité entre les flux préférentiels et les flux dans la matrice poreuse. Les variables incluses dans notre processus X ne suffisent probablement pas pour décrire causalement l'entière du système. De plus, l'intermittence, souvent saisonnière, des processus hydrologiques karstiques peut sans doute nuire à l'hypothèse de stationnarité causale.

4.1.2. Modèle hydrologique synthétique

Une expérience virtuelle a été effectuée pour valider l'efficacité de l'algorithme PCMCi sur un processus de nature hydrologique. Le modèle hydrologique synthétique est un modèle à deux réservoirs fictifs dont l'architecture est similaire à la Figure 5, et, donc, causalement séparés. Les réservoirs sont alimentés par une pluie effective journalière à laquelle on applique un bruit multiplicatif et une fonction de transfert linéaire propre à chaque réservoir. Le débit sortant de chaque réservoir est calculé selon une relation non linéaire entre le stock d'eau dans le réservoir et le débit de sortie. L'algorithme PCMCi est ensuite appliqué sur un set de trois variables : la pluie effective et le stock des deux réservoirs dans le but de retrouver les relations causales, théoriquement connues. Une description complète du modèle est disponible à l'Annexe 1.

Le modèle a tourné pour les deux tests (*ParCorr* et *CMIknn*) sur 730 données simulées en considérant à la fois les données brutes et leur dérivées. Nous avons conclu que la valeur optimale du paramètre k_{CMI} du test *CMIknn* serait : $k_{CMI} = 15$. Ce choix dépend entre autres du niveau de bruit appliqué à la pluie effective. Les résultats de l'expérience suggèrent que pour le test *CMIknn*, l'utilisation des données brutes (non dérivées) reconnaissent mieux les relations causales entre les variables.

4.1.3. Méthodologie

Le jeu de données, présenté à la Figure 3, peut être employé directement comme *input* de l'algorithme PCMCI. Le seul prétraitement indispensable est de spécifier la présence des données manquantes par une valeur « marqueur » qui sera reconnue par l'algorithme. En guise de comparaison, selon la volonté d'éliminer les effets de saisonnalité dans les données et de rendre la moyenne stationnaire, les dérivées des données sont également utilisées comme *input*. En pratique, nous appliquons $dx_t/dt = x_t - x_{t-1}$, où $dt = 1$.

Pour l'application *ParCorr*, un seul scénario est évalué, c'est celui qui prend les dérivées en *input*.

Suite aux résultats de notre expérience virtuelle, nous avons voulu tester les deux scénarios (données brutes et dérivées) pour le test *CMIknn*. Les graphes des processus (ou cartes causales) seront présentés avec une focalisation sur nos deux variables d'intérêt pour chaque scénario.

Le choix du paramètre τ_{max} pose question en ce sens qu'il faut à la fois décrire l'entièreté du domaine temporel causal tout en limitant le temps de calcul. Une connaissance à priori des processus permet de cerner un délai temporel maximal physiquement attendu au sein du système. Suite aux essais de traçage réalisés par Poulain (2017), un pic de temps de transfert d'environ 2 jours a été détecté entre l'entrée des eaux dans la grotte de Rochefort et l'arrivée à la résurgence d'Éprave, qui représentent approximativement les limites du système étudié dans ce mémoire. Pour prendre en compte la dilution des temps de transfert, les temps de résidence très variables, la dualité entre les flux diffus et les flux préférentiels, tout en visant suffisamment large, nous avons défini dans ce mémoire $\tau_{max} = 10$.

4.2. Modélisation

4.2.1. Machine Learning

Dans le domaine du *machine learning*, ou apprentissage automatique en français, on parle d'apprentissage supervisé pour les tâches prédictives telles que la classification ou la régression, par opposition à l'apprentissage non supervisé tel que le *clustering*, qui rassemble les modèles de regroupement et d'interprétation des données (Figure 6). Dans tous les cas, l'objectif est qu'après entraînement, un modèle soit capable de traiter des nouvelles données en entrée et d'en prédire les données à la sortie.

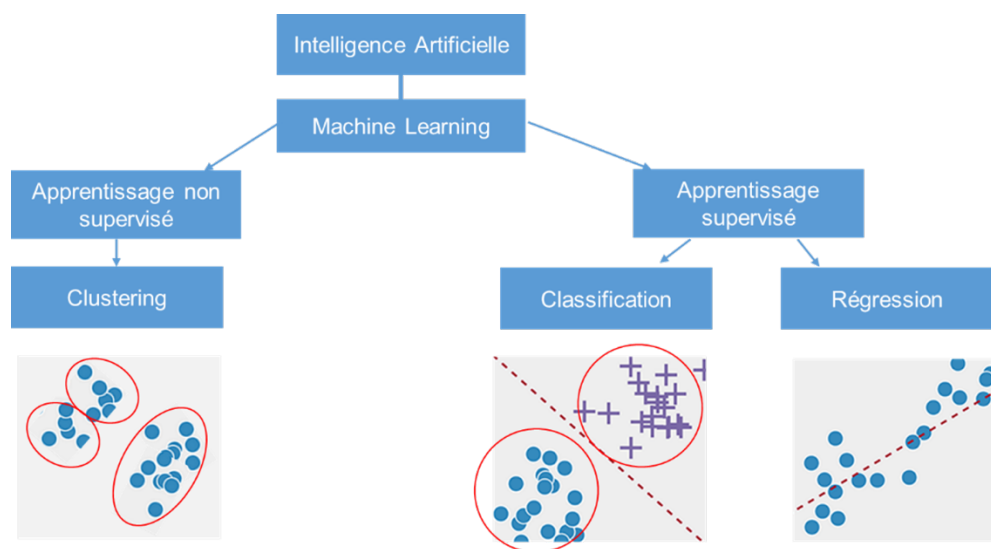


Figure 6 : Machine Learning (source : FANVOICE)

En pratique, l'apprentissage supervisé est généralement appliqué sur les données divisées en deux ou trois sous-ensembles : entraînement, validation et test. Le modèle s'entraîne sur le set d'entraînement, valide éventuellement les paramètres sur une période non entraînée afin de réduire les risques de sur-paramétrisation avant de finalement tester le modèle sur un 3^e sous-ensemble qui en évalue les performances. Il s'agit du *train test split*, ou *train validation test split* dans certains cas (Brownlee, 2017).

Les réseaux de neurones artificiels (RNA) font partie des modèles d'apprentissage supervisé. Ces modèles sont inspirés des neurones biologiques, en ce sens que les neurones qui les constituent sont reliés entre eux par des fonctions mathématiques, de la même manière que les synapses transmettent l'information entre les neurones du cerveau humain. Il existe de multiples types d'architectures de RNA. Parmi les principales architectures, on peut citer les RNA récurrents (RNN, pour *Recurrent Neural Networks*) et les RNA convolutionnels. Ces

derniers sont notamment utilisés pour la reconnaissance d'images ou du langage (par exemple, Jin et al., 2017 ; Abdel-Hamid et al., 2014). Les RNN connaissent le même type d'application mais sont aussi utilisés pour la modélisation de séries temporelles multivariées ou du traitement de séquences temporelles (par exemple, Che et al. ,2018 ; Hu et al. ,2019). À partir du moment où le réseau est multicouche, on parle d'apprentissage profond (*deep learning*).

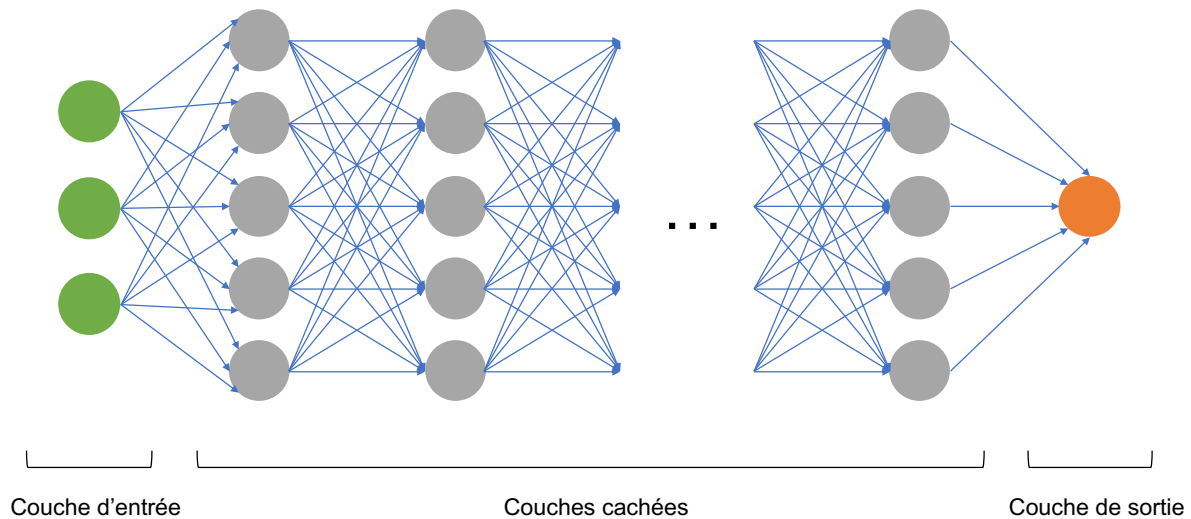


Figure 7 : Architecture typique d'un réseau de neurones artificiels multicouches

Typiquement, un réseau de neurones comporte une première couche, la couche d'entrée, contenant les données d'entrée (*inputs*). S'en suit une ou plusieurs couches de neurones dites « cachées » (*hidden layers*). C'est en quelque sorte la « boîte noire » du modèle, puisqu'on ne peut pas interpréter le comportement de ces neurones et des connexions qui les relient. La dernière couche est la couche de sortie, constituée du ou des données à la sortie (*outputs*) du modèle (Figure 7). Dans un RNA, chaque neurone d'une couche cachée possède un état interne h . C'est l'état « caché » (*hidden state*). Celui-ci est défini par une fonction d'activation f (typiquement, une tangente hyperbolique) qui est fonction des p vecteurs d'entrées x_i , avec des poids respectifs w_i leur étant accordés, ainsi que d'un vecteur de biais b , tel que :

$$h = f\left(\sum_{i=1}^p w_i x_i + b\right) \quad (7)$$

Le concept de neurone est souvent plus parlant graphiquement (Figure 8). Chaque couche de neurones est une juxtaposition de neurones qui partagent les mêmes entrées mais pas les mêmes paramètres (poids et biais). Cette formulation permet d'utiliser l'algorithme de rétropropagation (Rumelhart et al., 1986) pour les réseaux de neurones multicouches afin

d'optimiser les paramètres (w_i , b). Ces derniers sont initialement générés de manière aléatoire et sont ajustés à chaque itération de l'algorithme de rétropropagation, afin de réduire l'écart entre la sortie du modèle et les données observées, par le biais d'une fonction objectif. Dans la terminologie des RNA, le nombre d'itérations est appelé *epochs*. L'erreur quadratique moyenne est la fonction objectif utilisée pour la modélisation des variables étudiées dans ce mémoire. Lors de la rétropropagation, à chaque *epoch*, un gradient de la fonction objectif est calculé et met à jour cette dernière. Ce gradient est la somme des gradients de la fonction objectif par rapport à chaque paramètre, qui mettent à jour les valeurs des paramètres à chaque *epoch*. Un problème souvent rencontré lors de la rétropropagation est l'instabilité du gradient, plus connu sous le nom de disparition du gradient ou d'explosion du gradient. Les gradients sont fonction du produit des paramètres aux couches subséquentes. Plus ces paramètres sont nombreux et, soit relativement petits (inférieur à 1), soit relativement grands (supérieur à 1), plus on va voir apparaître un phénomène soit de disparition du gradient, soit d'explosion du gradient, respectivement.

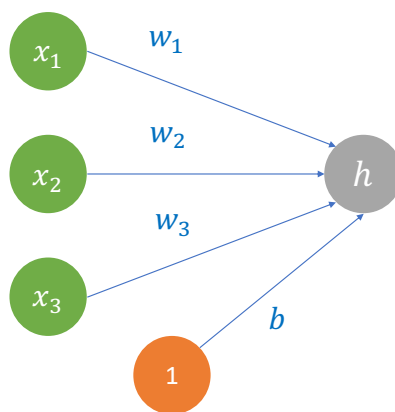


Figure 8 : Représentation graphique des entrées dans un neurone (exemple pour 3 inputs)

4.2.2. Long Short-Term Memory

Un réseau de neurones à architecture neuronale *Long Short-Term Memory* (LSTM), initialement introduit par Hochreiter et Schmidhuber (1997), est une architecture particulière de réseaux de neurones récurrents (RNN) conçue pour compenser la faiblesse des RNN traditionnels à apprendre des dépendances sur le long terme. Dans les RNN, l'information peut se propager dans les deux sens, c'est-à-dire qu'elle peut revenir dans les couches de neurones précédentes, d'où le concept de récurrence. C'est ainsi que l'information est gardée en mémoire puisqu'un certain nombre d'états passés peuvent être repris en compte. Les données sont interprétées comme une suite de données et non comme des données indépendantes les unes des autres. Pour des RNN traditionnels, cette mémoire est dite à court-terme. Les réseaux de neurones LSTM, à « mémoire court-terme étendue » sont dotés

d'un état supplémentaire pour chaque neurone qui leur permet de garder en mémoire des informations supplémentaires jugées utiles sur le long terme. Ces deux états communiquent entre eux par les biais de « portes » qui ne sont autres que des fonctions logistiques sigmoïdales qui sortent des valeurs comprises entre 0 et 1 selon le degré d'activation de la porte. Cet état supplémentaire est une caractéristique des LSTM qui va aider à empêcher le problème d'explosion ou de disparition du gradient lors de la rétropropagation (Hochreiter et Schmidhuber, 1997).

Il est possible de calibrer un réseau de neurones LSTM (Kratzert et al., 2018) en fixant un série de paramètres tels que : la taille du groupe de données utilisées à chaque sous-itération (*batch input size*), le nombre de couches cachées dans l'architecture du réseau de neurones, le *dropout rate* (une technique pour réduire la sur-paramétrisation), la taille de la séquence d'entrée (nombre de délais temporels d'une variable) et la division du jeu de données en deux ou trois sous-ensembles (entraînement, validation et test). La bibliothèque logicielle *Keras* (Chollet, 2015) permet d'implémenter facilement des réseaux de neurones LSTM. Elle se base sur le *Framework* de la bibliothèque *TensorFlow* (Abadi et al., 2016).

4.2.3. Méthodologie

Comme déjà explicité dans les objectifs de ce mémoire, nous voulons comparer les performances des réseaux de neurones LSTM basés sur un nombre large de données avec d'autres basés sur un nombre réduit et présélectionné de variables découlant de l'analyse causale. Les séries causales sont dérivées de l'analyse causale pour les scénarios suivant : *ParCorr* données dérivées, *CMiknn* données dérivées, *CMiknn* données brutes, *CMiknn* données brutes et liens sélectionnés. Cette comparaison nécessite une série d'étapes préalables de prétraitement.

Pour un entraînement efficient, toutes les données d'entrée de validation doivent être normalisées au préalable. En effet, lors de l'algorithme de rétropropagation, les nombreux paramètres, en particuliers les poids, ne peuvent s'ajuster que dans l'intervalle de valeurs [0 ; 1], rendant difficile la diminution de la fonction objectif au cours des *epochs* (fixé à 200, pour ce mémoire) si les données sont distribuées dans un large intervalle de valeurs. Ainsi, LeCun et al. (2012) proposent de les standardiser en soustrayant la moyenne et en divisant ensuite par l'écart type. Cette standardisation est appliquée notamment par Kratzert et al. (2018) et Zhang et al. (2018) pour des cas de modélisation hydrologique. D'autres méthodes de normalisation consistent à échelonner les données entre 0 et 1 ou entre -1 et 1. Compte tenu des distributions peu gaussiennes de notre jeu de données, nous avons choisi de normaliser les séries temporelles entre 0 et 1.

Les réseaux de neurones LSTM ne tolèrent pas de données manquantes. Pour les séries temporelles comportant une ou deux données manquantes (RG et AP), les valeurs ont été interpolées linéairement en fonction des valeurs voisines. Trois autres séries, GL, VW et DD, sont affectées par le manque de 12, 157 et 211 données respectivement. Les données manquantes ont été imputées par un modèle non-linéaire de forêt d'arbres aléatoires (*sklearn RandomForestRegressor*). Le modèle d'imputation considère toutes les données de la base de données MIGRADAKH, soit 123 séries, ré-échantillonnées en moyenne journalière. Le nombre d'entrées du modèle s'étant sur le domaine temporel de la variable à imputer. Le modèle est entraîné sur toutes les données où la variable à imputer est définie, c'est-à-dire le nombre d'entrées total moins le nombre de données manquantes. Un coefficient de détermination (R^2) est obtenu par validation croisée. Une fois entraîné, le modèle est utilisé pour prédire les données manquantes. Les R^2 obtenus pour DD, VW et GL sont 0.79, 0.98 et 0.97 respectivement. DD totalise le plus d'incertitude, à cause d'un R^2 obtenu relativement plus faible, du large nombre de données imputées, et du prétraitement des données impliquant un ré-échantillonnage et de l'interpolation sur les données d'origine récoltées.

Les données en entrée sont constituées de l'*input* à l'instant t , accompagné d'une quantité raisonnable de délais temporels. Compte tenu du fait que nous disposons d'un échantillon relativement limité en observations, nous avons ajouté 10 délais à chaque variable. Les données en entrée sont donc définies par les 9 séries temporelles auxquelles s'ajoutent les mêmes séries mais décalées de 1 jusqu'à 10 jours dans le passé. Une des 9 séries temporelles initiales est retirée du jeu de données d'entrée pour définir les données à la sortie, celles à prédire. Il s'agit dans un cas de la série DD, dans l'autre, de la série RG. Nous avons choisi un délais jusqu'à 10 jours par souci de cohérence avec l'analyse causale où $\tau_{max} = 10$. On comprend alors que le modèle a 98 variables en entrée, et une variable à la sortie.

La dernière étape de prétraitement des données est de diviser le jeu de données en deux sous-ensembles : le set d'entraînement et le set de test. À nouveau, au vu du nombre limité d'observations, nous n'avons pas ajouté une 3^e subdivision du jeu de données, c'est-à-dire le set de validation. Les séries temporelles s'étendant sur deux années, nous définissons la première année comme set d'entraînement et la deuxième comme set de test. Nous analysons également un deuxième scénario où l'entraînement a lieu sur la deuxième année et la prédiction sur la première.

Au vue des multiples scénarios décrits plus haut, une multitude de combinaisons de ces derniers est possible. Nous avons, pour chaque variable et pour chaque année de prédiction, imaginé 5 scénarios.

- **Scénario 1** : Modèle basé sur les 9 variables et les 10 délais temporels associés.
- **Scénario 1 bis** : Scenario 1 sur base des données dérivées.
- **Scénario 2** : Modèle ayant en entrées les variables causales détectées via le test *ParCorr* sur les données dérivées (Figure 9).
- **Scénario 3** : Modèle ayant en entrées les variables causales détectées via le test *CMlknn* sur les données dérivées (Figure 10).
- **Scénario 4** : Modèle ayant en entrées les variables causales détectées via le test *CMlknn* sur les données brutes (Figure 11).
- **Scénario 5** : Modèle naïf : $y_t^{pred} = y_{t-1}^{obs}$ (voir fin de Section).

Pour chaque modèle, l'efficienne de prédiction est évaluée par le critère de Nash et Sutcliffe (Nash et Sutcliffe, 1970), Équation 8.

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{obs} - y_i^{pred})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i^{obs} - \bar{y}^{obs})^2} \quad (8)$$

où y_i^{obs} est la i ème valeur observée, $\bar{y}^{obs}$ la moyenne des observations et y_i^{pred} la i ème valeur prédite. La NSE est similaire au coefficient de détermination (R^2). Un NSE inférieur à 0 renseigne que le modèle performe en deçà d'un modèle considérant la moyenne constante comme prédiction.

Lors de la première itération de la construction du modèle LSTM, les paramètres sont générés de manière aléatoire. En raison de cette initialisation aléatoire, l'algorithme peut converger vers des résultats différents. La distribution des NSE obtenues pour un même input est discutée dans la section 6. Pour chaque scénario, nous compilons 10 modèles et présentons celui dont la NSE est la plus élevée. Pour s'assurer que le modèle n'ait pas uniquement capturé la saisonnalité de la série temporelle, nous dérivons les résultats après prédiction et calculons à nouveau l'efficienne de Nash-Sutcliffe (NSE). La NSE est donc calculée entre les résultats et les observations, y^{pred} et y^{obs} , ainsi qu'entre $d(y^{pred})/dt$ et $d(y^{obs})/dt$.

Pour confirmer la validité des résultats, un modèle simple de comparaison est ajouté. Il s'agit d'un modèle naïf dont nous devons au moins dépasser les performances. Nous avons choisi un modèle naïf qui affirme que l'observation à l'instant t est égale à l'observation à l'instant $t - 1$, soit $y_t^{pred} = y_{t-1}^{obs}$. La NSE est alors calculée pour ce modèle naïf ainsi que pour sa dérivée $d(y_t^{pred})/dt = d(y_{t-1}^{obs})/dt$. Les valeurs d'efficiences de Nash-Sutcliffe (NSE) sont présentées dans le Tableau 2, de la Section 5.2.

5. Résultats

5.1. Cartes causales

Toutes les figures de cette section sont produites à la sortie de l'algorithme PCMCI, sur base des séries temporelles de la Figure 3. En effet, l'algorithme est conçu de telle sorte à pouvoir gérer les données manquantes. Les paramètres de délais temporel maximal et du niveau de signification sont les suivants :

- $\tau_{max} = 10$
- $\alpha = 0.01$

Ces figures montrent le graphe des processus construit suite à l'algorithme PCMCI basé sur les tests d'indépendance conditionnelle *ParCorr* et *CMiknn*. Compte tenu du grand nombre de liens souvent présents dans ces graphes, nous présentons ici uniquement les liens qui concernent la variable DD d'une part, et la variable RG d'autre part. Les graphes complets se trouvent en Annexe 2.

5.1.1. *ParCorr*

Sur la Figure 9, on peut distinguer le graphe des processus produit suite à l'algorithme PCMCI basé sur le test linéaire d'indépendance conditionnelle *ParCorr*. Les liens sont colorés selon la valeur de l'estimateur de la corrélation entre les résidus (cfr. Section 4.1.1.1) dont les limites sont $[-1;1]$. De façon similaire, la couleur des nœuds représentant les variables est représentative de l'auto-dépendance partielle, c'est-à-dire de la capacité du passé d'une variable à expliquer son état présent une fois que l'effet des autres variables a été déduit. Les séries temporelles (Figure 3) ont été dérivées temporellement afin de retirer toute tendance saisonnière. Un nombre important de variables causales (liens dirigés vers DD et vers RG et liens « instantanés » non dirigés) est détecté significativement selon ce test. Aucune des deux variables d'intérêt ne présente d'autocorrélation partielle, contrairement à d'autres (voir Annexe 2).

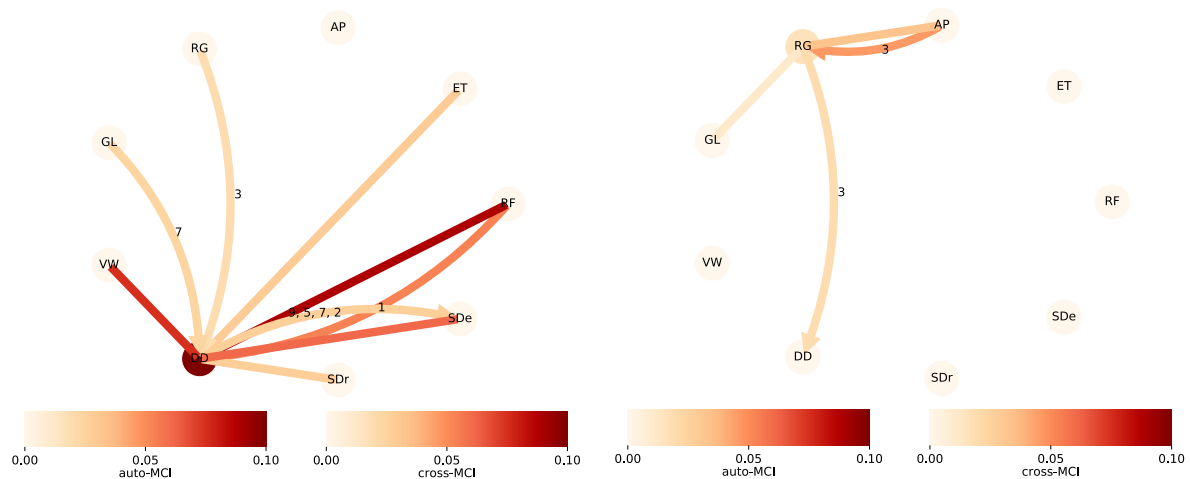


Figure 10 : Graphe des processus suite au test CMIknn et les données dérivées. Focalisation sur les liens avec DD (à gauche) et avec RG (à droite).

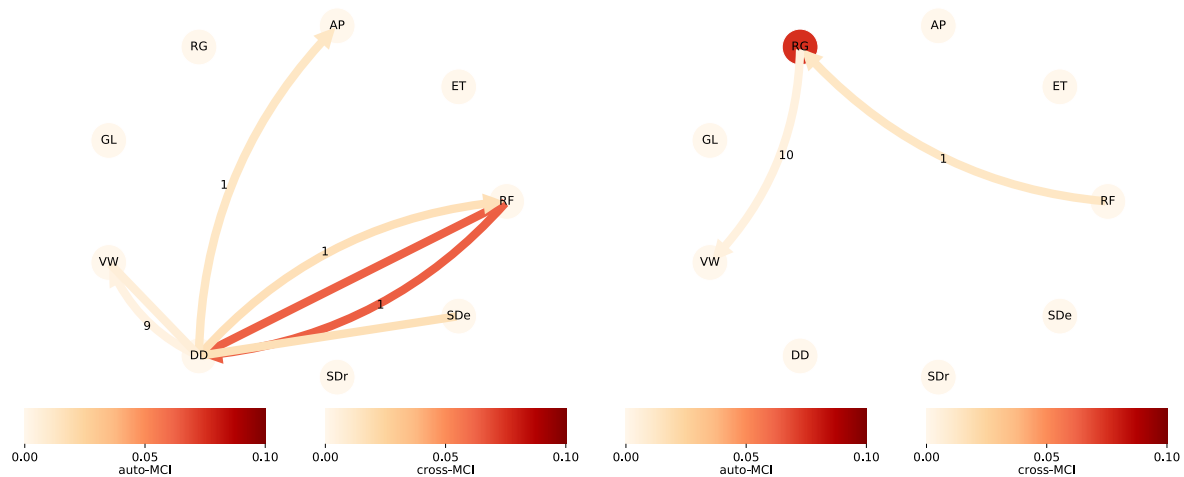


Figure 11 : Graphe des processus suite au test CMIknn et les données brutes. Focalisation sur les liens avec DD (à gauche) et avec RG (à droite).

5.2. Prédictions

Pour chaque scénario de prédiction décrit à la Section 4.2.4, la NSE des prédictions et, le cas échéant, des dérivées des prédictions, est calculée pour 10 itérations du modèle LSTM. La NSE des prédictions la plus élevée de ces 10 itérations est présentée dans le Tableau 2 pour chaque scénario, avec, le cas échéant, la NSE des dérivées des prédictions.

Sur la Figure 12, les séries temporelles des observations de DD et de RG sont présentées en juxtaposition avec les prédictions de la deuxième année d'observations pour le scénario 1. La Figure 13 affiche quant à elle les prédictions de la première année, également pour le scénario 1. La Figure 14 affiche des prédictions relatives au scénario 3. Enfin, les Figure 15 et 16 montrent les prédictions pour le scénario 4, couplées avec les dérivées des prédictions.

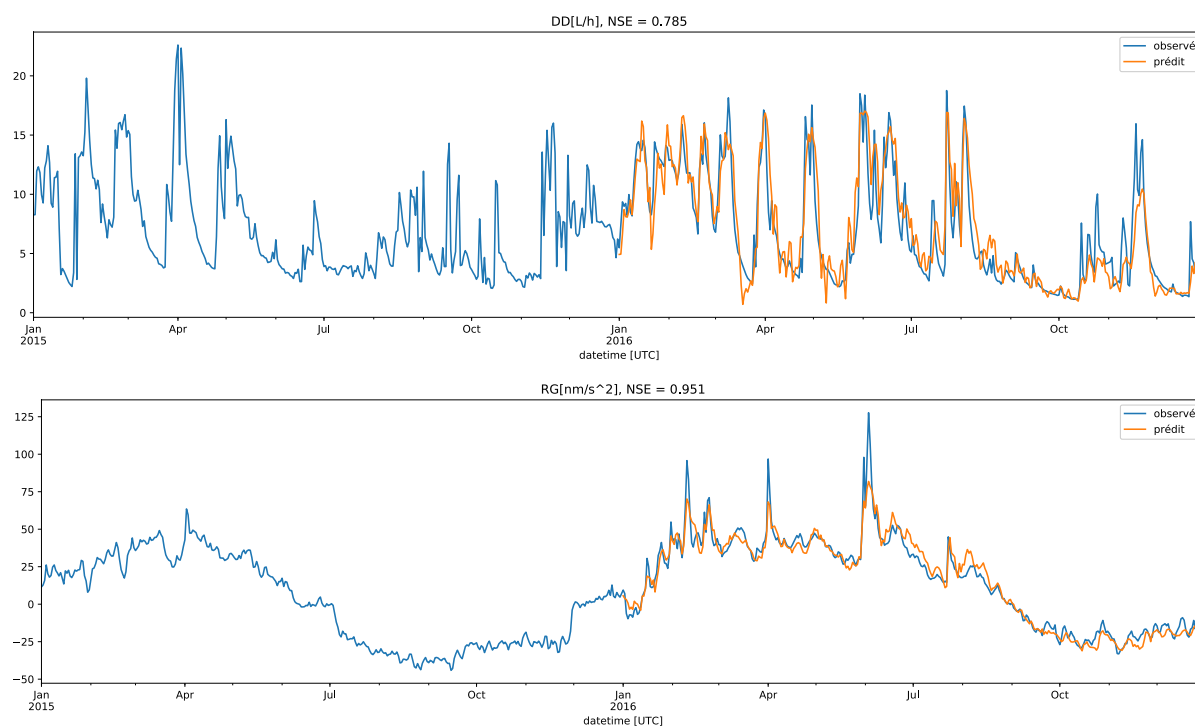


Figure 12 : Scénario 1 : Prédiction de la deuxième année de DD (en haut) et RG (en bas). Input : 98 séries (8 autres variables et 10 délais temporels pour chaque série de la Figure 3).

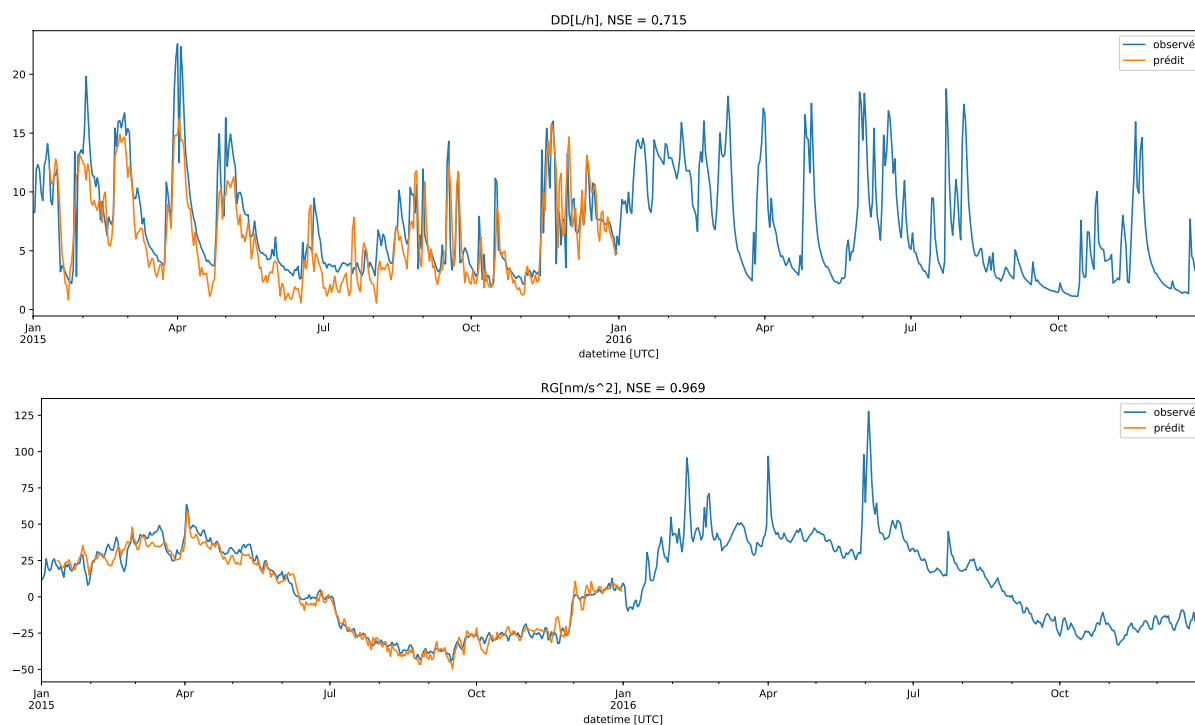


Figure 13 : Scénario 1 : Prédiction de la première année de DD (en haut) et RG (en bas). Input : 98 séries (8 autres variables et 10 délais temporels pour chaque série de la Figure 3).

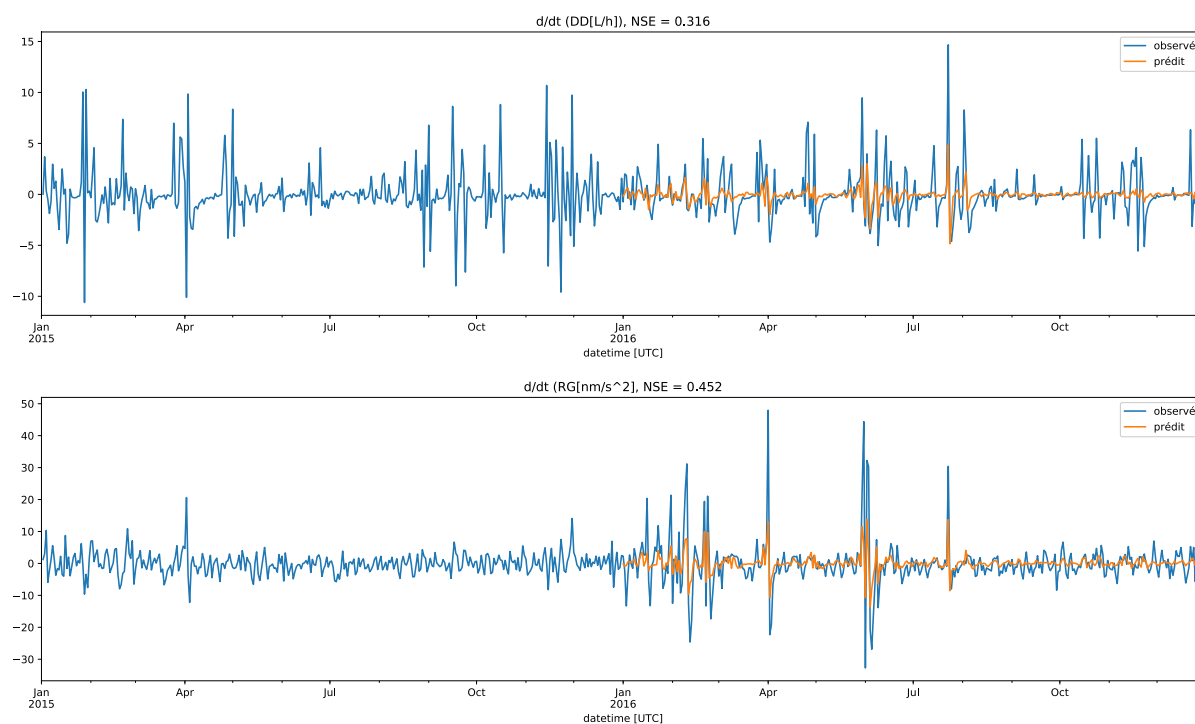


Figure 14 : Scénario 2 : Prédiction de la 2^e année des dérivées de DD (en haut) et RG (en bas) sur base de l'input causal ParCorr.

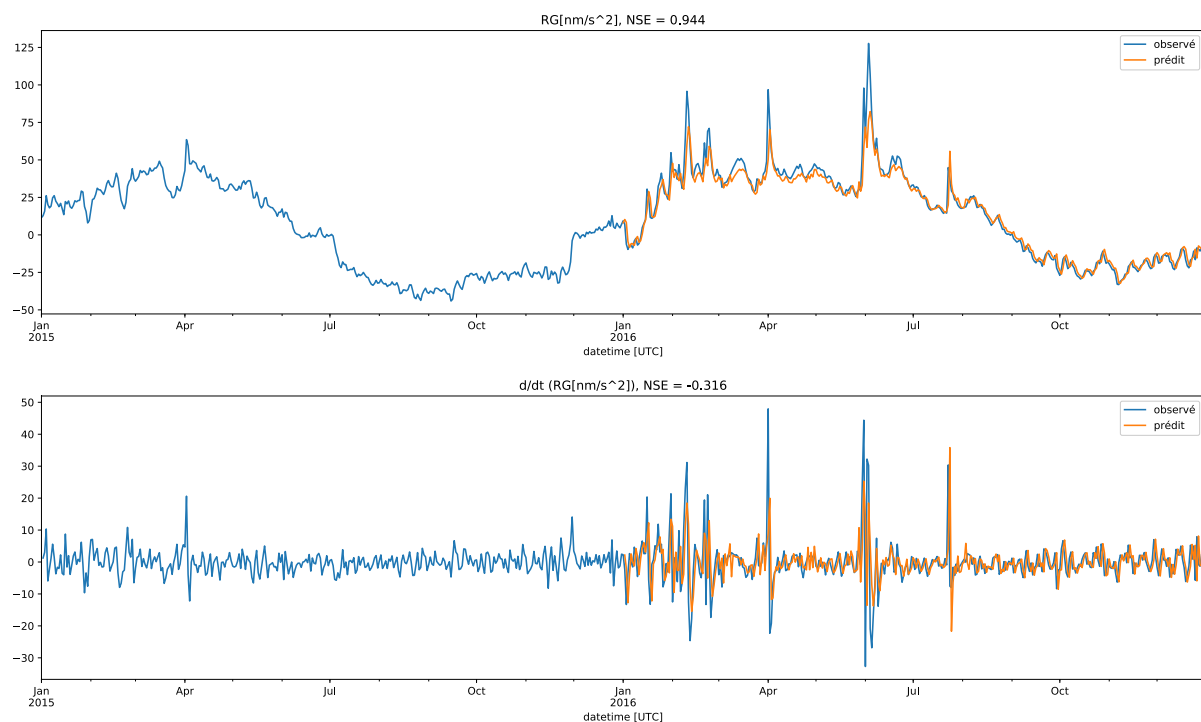


Figure 15 : Scénario 4 : Prédiction (en haut) et dérivées des prédictions (en bas) de la 2^e année de RG sur base de l'input causal CMiknn données brutes.

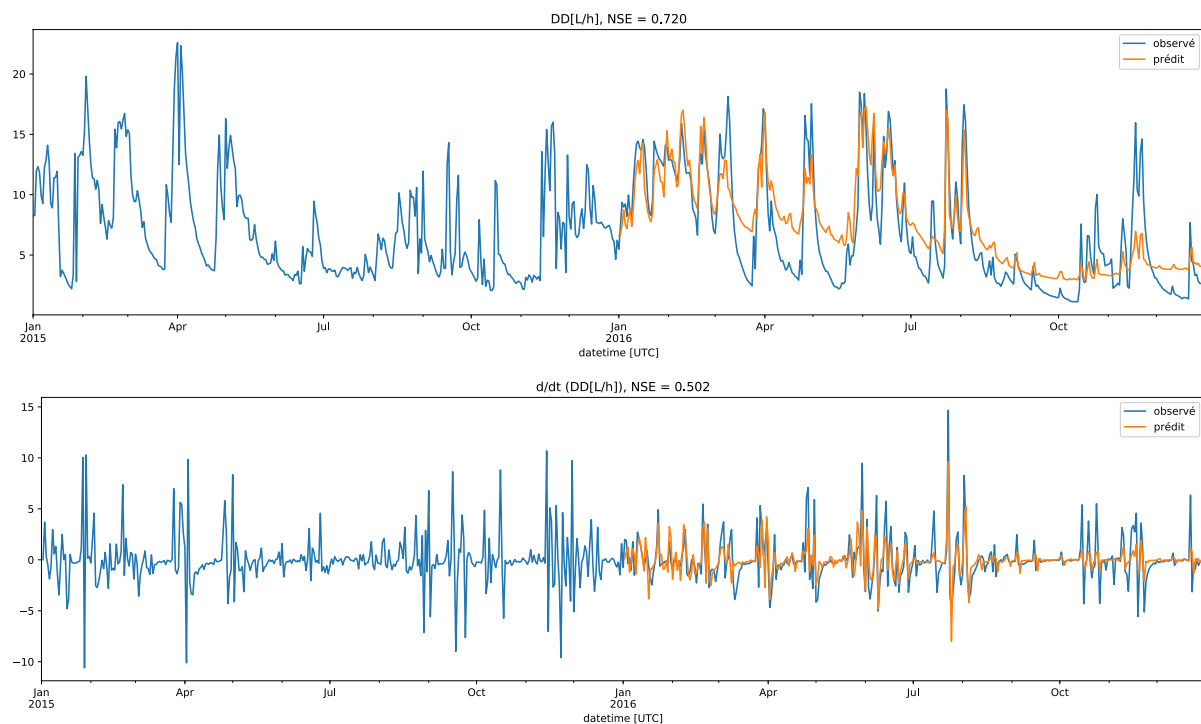


Figure 16 : Scénario 4 : Prédiction (en haut) et dérivées des prédictions (en bas) de la 2^e année de DD sur base de l'input causal CMiknn données brutes.

Tableau 2 : NSE maximum obtenu pour chaque scenario, variable, année prédite et dérivées des prédictions.

Scénario n° :			1 (Tout, Y)	1 bis (Tout, dY/dt)	2 (ParCorr, dY/dt)	3 (CMlknn, dY/dt)	4 (CMlknn, Y)	5 (naïf)
DD	1ère année	y^{pred}	0,715	0,129	0,127	0,133	0,502	0,62
		$d(y^{pred})/dt$	-0,116	/	/	/	0,241	-1,495
	2e année	y^{pred}	0,785	0,19	0,316	0,193	0,72	0,783
		$d(y^{pred})/dt$	0,22	/	/	/	0,502	-0,832
RG	1ère année	y^{pred}	0,969	0,163	0,265	0,198	0,921	0,987
		$d(y^{pred})/dt$	-1,307	/	/	/	-10,3	-0,655
	2e année	y^{pred}	0,951	0,174	0,452	0,296	0,944	0,938
		$d(y^{pred})/dt$	0,428	/	/	/	-0,316	-0,887

6. Discussion

6.1. Cartes causales

6.1.1. *Données de gouttes*

Selon une approche linéaire pour l'explication causale des données de débit de gouttes (Figure 9, DD), elles seraient principalement expliquées par les relations instantanées entre la teneur en eau du sol en surface (VW), la pluie (RF) et les deux séries de données de débits à Rochefort et à Éprave (SDr et SDe). La relation $VW \rightarrow DD$ fait sens dans la mesure où le débit de gouttes serait expliqué par les processus d'infiltrations et d'écoulements canalisés dans les macropores. Le fait que RF reste une cause majeure laisse penser que VW ne suffit pas à expliquer totalement DD selon une chaîne causale transitive $RF \rightarrow VW \rightarrow DD$. L'eau prendrait donc des chemins hydrologiques alternatifs pour alimenter DD et il conviendrait d'inclure davantage de variables représentatives de la teneur en eau à différents points de la surface des grottes pour espérer s'affranchir du lien causal direct entre RF et DD. La relation $VW \rightarrow DD$ s'avère instantanément positive et négative à 1 pas de temps. Cet effet peut s'interpréter selon le proverbe « après la pluie vient le beau temps » et est d'ailleurs visible pour d'autres relations considérant le niveau piézométrique $GL \rightarrow DD$ ou la gravité résiduelle $RG \rightarrow DD$. L'effet positif de RF sur DD semble quant à lui persister sur 1 pas de temps. Enfin, la relation négative et instantanée entre ET et DD fait sens dans la mesure où ET génère un déficit en eau à la surface qui se soustrait à la percolation.

Un certain nombre d'interactions linéaires apparaissent néanmoins comme des aberrations causales du point de vue physique, principalement par violation du gradient lié à la différence d'altitude. Le niveau piézométrique GL mesuré bien plus bas dans les grottes de Nou Maulin, de même que les débits de rivières SDr et SDe, pour des raisons identiques, ne peuvent raisonnablement causer la dynamique DD des gouttes dans la grotte. Elles apparaissent toutefois en raison du fait qu'elles améliorent les prédictions lorsqu'elles sont incluses dans un modèle linéaire. Les données de débits SDr et SDe sont des mesures intégrant la dynamique du bassin versant répondant aux facteurs externes que sont la pluie (RF) et l'évapotranspiration (ET) au même titre que DD. On peut se demander pourquoi les données de débits, en tant qu'intégrateur systémique du bassin versant, expliquent davantage la dynamique de DD que les données gravimétriques résiduelles RG qui intègrent directement le système des grottes. Une raison serait le caractère relativement bruité de RG par rapport à SDr ou SDe. Une deuxième raison pourrait être que le gravimètre de surface ne soit pas en mesure de capturer les variations d'eau dans les premiers mètres du sol pour être en mesure d'expliquer DD mieux que VW ne le fait. De façon similaire, une troisième raison serait que toute l'information utile dans RG pour expliquer DD soit déjà reprise dans les autres variables

du système, mais, que l'exclusion de l'une ou l'autre variable pourrait faire basculer RG en tant que facteur causal dominant.

Selon une approche non-linéaire, l'interprétation des cartes causales est en générale plus difficile dans le sens où il n'est plus possible de penser linéairement en termes d'effet positif ou négatif. Cependant, la réflexion quant au fait que VW ne suffise pas à expliquer DD sans RF, c'est-à-dire $RF \rightarrow VW \rightarrow DD$, reste valide que ce soit sur les cartes causales générées sur les données dérivées (Figure 10) ou les données brutes (Figure 11). Sur les données brutes, la pluie devient la force motrice principale de DD. Toutefois, cette dernière carte causale pose question notamment par rapport aux liens dirigés de DD vers les autres variables RF ($\tau = 1$), VW ($\tau = 9$) ou la pression atmosphérique AP ($\tau = 1$). Pour ces raisons, la carte causale obtenue sur les données dérivées (Figure 10) semble généralement plus raisonnable bien que les expériences sur données synthétiques suggèrent une application de l'algorithme sur les données brutes (Section 4.1.2). Toutefois, on observe un comportement particulier entre les effets de DD sur SDe qui s'étale sur l'ensemble des délais causals. Bien que l'eau des gouttes percolant dans la grotte est susceptible d'être restituée à la rivière, il est difficile de penser qu'une telle singularité ait un effet notable sur les mesures de débits à Éprave. Si tel est le cas, il faut penser DD non point comme une singularité, mais comme une variable intégrant la dynamique de l'épikarst de façon plus large. Alternativement, DD peut bien être une singularité mais dont le comportement déterministe permet de dresser une association dynamique avec le comportement déterministe de la rivière à Éprave. Ainsi, bien que non causalement reliés, une variation de DD entraîne systématiquement une variation de SDe dans le futur par synchronisation des dynamiques en réponse aux facteurs exogènes comme la pluie et l'évapotranspiration. Enfin, nous noterons que dans le cas de cette carte (Figure 10), DD est également fortement expliqué par son auto-dépendance, ce qui n'est pas le cas dans les autres cartes.

6.1.2. *Gravité résiduelle*

Dans le cas de la cartographie causale linéaire (Figure 9), la gravité résiduelle RG est principalement expliquée par les interactions positives et instantanées avec la piézométrie dans la grotte de Nou Maulin et les relations avec les débits de la rivière à Rochefort (SDr) et à Éprave (SDe). Il faut noter que ces 3 variables ont un intérêt particulier pour expliquer les inondations du système karstique. D'autres interactions positives instantanées interviennent dans une moindre mesure : AP – RG, VW – RG, DD – RG et RF – RG. L'effet instantané entre AP et RG suggère que l'admittance de $-3,3 \text{ nm.s}^{-2}.\text{hPa}^{-1}$ (Section 3.2) n'est pas parfaitement ajustée. Les interactions négatives sont majoritairement au départ de RG et soumises à des délais causals. On notera trois exceptions : l'effet négatif difficilement

explicable de AP sur RG à 4 jours, l'effet persistant de la pluie RF sur RG à 1 jour et l'effet positif également difficile à expliquer de DD sur RG à 2 jours.

Les cartes non linéaires (Figure 10 et 11) dressent un portrait causal différent. Concernant les données dérivées, le système causal de RG est relativement simple et implique 3 autres variables : GL, AP et DD, ce qui pose RG comme une variable intégrant l'atmosphère, la zone vadose et la zone saturée au niveau des grottes de Rochefort. On note un effet de AP instantanée et à 3 jours qui peut être comparé aux résultats de la carte linéaire. RG serait encore sujet à une relation instantanée avec GL, et, des variations de RG génèreraient un effet sur DD 3 jours plus tard. En ce qui concerne les données brutes (Figure 11), le diagnostic est entièrement différent. RG serait principalement expliqué par son passé, ce qui n'a pas de sens causalement dans la mesure où la gravité capture des relations instantanées entre les masses environnantes. En plus, nous noterons l'effet de la pluie à 1 jour sur RG et l'effet difficilement interprétable de RG sur VW à 10 jours.

6.2. Performance des modèles

6.2.1. Modélisation des données de gouttes

L'analyse du Tableau 2 permet d'interpréter la valeur ajoutée de la sélection de variables causales par rapport à une approche qui considère toutes les données et leurs décalages jusqu'à un délai de 10 pas de temps (Scénario 1, Tout). Dans le cas de la modélisation des données de gouttes, de manière générale les performances sont meilleures lorsque l'on calibre le modèle sur la première année pour le valider sur la deuxième. Cela est probablement dû au fait que davantage d'événements extrêmes sont présents dans la première année, ce qui permet une meilleure régression par interpolation pour la deuxième année. Dans le cas contraire, les modèles calibrés sur la deuxième année se doivent d'extrapoler les relations établies pour prédire les événements extrêmes de la première année, ce qui peut diminuer sensiblement les performances du modèle.

Si l'on compare les différentes performances des scénarios au moyen du NSE calculé sur les données de débits en sorties non dérivées (y^{pred}), le scénario 1 apparaît comme le plus performant, suivi du modèle naïf (scénario 5) et du modèle causal non linéaire des données brutes (scénario 4). Les prédictions des scénarios 1bis, 2 et 3 sont plutôt à comparer avec la ligne $d(y^{pred}/dt)$. Ainsi, dans le cas de la deuxième année - et non de celui de la première année, probablement pour les mêmes raisons invoquées au paragraphe précédent – les scénarios faisant usage de l'analyse causale permettent de meilleures performances de prédiction pour les variations de débit de gouttes avec des NSE satisfaisants : 0.316 pour le scénario 2, 0.193 pour le scénario 3 et 0.502 pour le scénario 4. Le scénario 4 permet

également une bonne simulation des données non dérivées avec un NSE de 0,72. On peut donc conclure que l'analyse causale préalable peut mener à des modèles moins performants en ce qui concernent la modélisation de la tendance ou des variations à basse fréquence. Toutefois, elle mène à des modèles qui sont plus cohérents lorsque la performance de ceux-ci est évaluée à la fois sur les données brutes et les données dérivées qui traduisent davantage les variations à haute fréquence. Par ailleurs, dans la mesure où tous les *inputs* des cartes causales sont présents aussi dans le scénario 1, on peut dire qu'un modèle LSTM ne se calibre pas forcément selon la logique du « mieux vaut trop que trop peu ». Une surcharge du modèle peut ainsi mener à des performances suboptimales.

6.2.2. Modélisation de la gravimétrie résiduelle

A l'inverse des données de débit de gouttes, la gravimétrie résiduelle présente davantage d'extrêmes lors de la deuxième année. Cependant, ceux-ci ne concernent que les maximas et sont à associer à des événements d'inondations des grottes plus fréquents. Ainsi, il est difficile d'établir un modèle cohérent vu que les deux années sont sensiblement différentes d'un point de vue dynamique. Les performances du modèle naïf (scénario 5) sont supérieures à celle du scénario 1 sauf dans les cas de $d(y^{pred})/dt$ pour la deuxième année. On ne peut donc pas dire que le LSTM soit un modèle perspicace en ce qui concerne le scénario 1. Les scénarios 2 et 3 ont des performances supérieures au scénario 1bis pour les deux années. Le scénario 4 présente de bonnes performances sur les données brutes, néanmoins, à relativiser par rapport au modèle naïf, mais très mauvaises sur les données dérivées. A la différence de la carte causale associée à DD pour le scénario 4, la carte causale du scénario 4 était relativement peu sensée (section 6.1.2), ce qui peut expliquer ses faibles performances. Ainsi, dans le cas présent, c'est le scénario 2 qui permet de mieux prédire les variations de gravité à haute fréquence.

6.3. Méthodologie

6.3.1. Inférence causale

Dans le cadre de ce mémoire, l'inférence causale via l'algorithme PCMCi est supposée ou s'est effectivement montrée sensible à une série de choix et de paramètres :

1. Aux données d'entrée, tant en matière de sélection des variables, du choix de leur résolution temporelle que du choix de leur représentation sous forme brutes ou dérivées ;
2. Au délai causal maximal τ_{max} ;
3. Au niveau de signification α ;

4. Dans le cas de l'analyse non linéaire, au paramètre k_{CMI} définissant le voisinage à considérer pour l'estimation de l'information mutuelle conditionnelle ;
5. Outre le choix optimal des paramètres, les résultats de l'inférence causale ont un caractère légèrement aléatoire. Pour construire la distribution nulle du test $CMIknn$, l'algorithme génère aléatoirement une série d'échantillons issus de permutations locales.

Cette sensibilité n'a pas été évaluée sur les analyses causales appliquées aux données réelles. Le choix des paramètres et de la méthode s'est davantage fondé sur des choix rationnels et personnels, s'appuyant entre autres sur les connaissances préalables du système karstique de la Lhomme, et, sur un cas d'expérience synthétique (Annexe 1). En cause, principalement, l'algorithme basé sur le test $CMIknn$ requiert un temps de calcul important qui croît en fonction du nombre de variables et qui ne permet pas de réaliser cette analyse sur un ordinateur personnel en un temps raisonnable. Ainsi, les supercalculateurs peuvent être une alternative de choix dans des cas futurs d'analyse où il s'agira de démontrer cette sensibilité.

6.3.2. Modélisation LSTM

Concernant la modélisation par des réseaux de neurones LSTM, un certain nombre de remarques se doivent d'être rapportées. Le domaine temporel choisi a fourni un nombre limité d'observations impactant sur la qualité de l'apprentissage du modèle. De même, l'imputation des données par un autre modèle a rendu les prédictions davantage incertaines. D'autres approches de normalisation auraient pu être prises en compte à des fins de comparaisons, telles que la normalisation $[-1 ; 1]$ ou encore, la standardisation des données. Une analyse plus poussée sur l'hyperparamétrisation des modèles LSTM – entendons par là les paramètres architecturaux des réseaux de neurones – auraient pu mener à des prédictions plus robustes. En effet, des techniques telles que le *dropout*, permettant de faire revenir à zéro l'état de certains neurones, aléatoirement choisis à chaque *epoch*, permet de rendre plus robuste le modèle, en diminuant le risque de sur-paramétriser (Kratzert et al., 2018). Enfin, nous avons choisi d'utiliser l'erreur quadratique moyenne pour calibrer le modèle et l'efficacité de Nash et Sutcliffe pour évaluer les performances de ce dernier. D'autres fonctions objectifs auraient pu être choisies pour calibrer et/ou valider le modèle. De manière générale, une série d'alternatives auraient pu être étudiées et/ou discutées dans ce mémoire. Principalement, ce mémoire démontre l'applicabilité d'une approche par inférence causale pour la sélection des variables d'entrée du modèle LSTM. Pour en démontrer la compétitivité, il faudrait également comparer la sélection des variables par inférence causale avec les méthodes généralement utilisées pour sélectionner les variables dans le domaine de l'apprentissage machine.

6.4. Hypothèses causales

Les hypothèses de l'algorithme PCMCI sont le principe de priorité de la cause sur l'effet, la suffisance causale (toutes les variables potentiellement causales sont incluses dans l'analyse), la condition causale de Markov (deux variables non causalement reliées directement sont indépendantes conditionnellement à leur set de parents communs) et la stationnarité causale.

PCMCI, étant basé sur le principe de priorité de la cause, est un algorithme qui traite les données dans le domaine temporel. Il impose de fixer un délai causal maximal. Cette démarche pose question en hydrologie quand on connaît la variabilité des temps de résidence de l'eau dans un système hydrologique. Ainsi, le parcours d'une goutte d'eau et son transit au sein du système karstique peut être très rapide si elle est amenée à ruisseler directement vers la rivière, très lent si elle s'infiltre dans la matrice poreuse de l'épikarst, ou, d'une durée intermédiaire si elle est véhiculée par flux préférentiels dans le réseau de conduits karstiques jusqu'à la résurgence. Par conséquent, s'il s'agit de complètement caractériser causalement un système hydrologique sur base du principe de priorité de la cause, il s'agit de ré-échantillonner les données à différentes fréquences temporelles et de répéter l'analyse. Dans le cadre de ce mémoire, nous nous sommes limités à l'analyse des flux préférentiels dont la dynamique journalière peut s'exprimer sur un domaine maximal de 10 jours. Ils s'agit donc d'une vue causale restreinte du système.

Les hypothèses de suffisance causale et de condition causale de Markov peuvent être discutées conjointement par rapport à la notion de continuum hydrologique (spatial et temporel) au sein d'un système. La question principale est dans quelle mesure un système hydrologique et toute la variabilité spatio-temporelle peut être causalement défini par un set fini de séries temporelles ? Comment faut-il discrétiser les variables ? Jusqu'à quel niveau de résolution ? Par exemple, considérant la variabilité de la pluie, dans quelle mesure faut-il considérer différents pluviomètres dans l'analyse ? La même question peut se poser pour diverses variables échantillonnées comme celle de l'humidité du sol ou des données piézométriques. Cette question n'a pas vraiment de réponse prédéfinie et c'est ainsi que l'on voit régulièrement coexister en hydrologie des modèles spatialement distribués, qui tendent à intégrer toute l'hétérogénéité spatiale et temporelle que permettent les méthodes d'acquisition de données modernes, avec des modèles très simple qui ne considèrent que quelques variables et réservoirs abstraits pour modéliser le système. En raison de l'impossibilité de répondre à cette question, il reste une incertitude épistémique quant au fait d'atteindre la suffisance causale.

En conséquence, pour des applications réelles en dehors de conditions virtuelles ou de laboratoire, il y a toujours un risque que l'inférence causale génère des résultats dont la causalité est discutable. Ainsi, il apparaît important de garder en mémoire que tout algorithme

d'inférence causale n'est pas la causalité. Ce n'est qu'une mesure de la valeur ajoutée de l'inclusion d'une variable par rapport à d'autres en matière de potentiel de prédiction, linéaire ou non-linéaire. Il appartiendra toujours à l'utilisateur de juger du caractère pertinent de celle-ci, de la conserver ou non dans un modèle prédictif, selon qu'il souhaite privilégier les performances de son modèle ou bien la structure causale de celui-ci.

Pour une meilleure inférence causale, une question qui se pose, est, notamment relative à la contrainte des algorithmes d'inférences de manière à spécifier a priori les connexions physiquement possibles (Rinderer et al., 2018). Bien sûr, cette démarche sacrifie le côté purement empirique derrière les méthodes et implique une projection causale préalable de l'utilisateur qui peut être elle-même erronée. Toutefois, certains diront que cette projection est inévitable car elle est déjà présente dans les étapes de sélection et de prétraitement des données.

Pour ce qui est de la certitude avec laquelle une relation établie par inférence causale peut être proclamée relation causale, nous citerons le principe de précaution de Berkeley (Berkeley, 1999) :

« Pour que quelques idées originales puissent être faites pour signifier un grand nombre d'effets et d'actions, il est nécessaire qu'elles soient combinées entre elles : Et pour que leur utilisation soit permanente et universelle, ces combinaisons doivent être faites par la règle, et selon une sage procédure ». Il convient donc de varier les méthodes et de faire coexister les exercices d'analyse de séries temporelles avec d'autres méthodes d'investigation des milieux karstiques et de faire converger les idées vers une représentation fidèle du système.

Enfin, le principe de stationnarité causale est également discutable. Sur une période de deux ans, il est raisonnable de penser que le système karstique n'a pas sensiblement évolué d'un point de vue structurel, selon le processus de karstification ou selon les changements d'occupation ou d'usage du sol en surface. Les données ne présentent pas de tendances autre que la variabilité interannuelle. Toutefois, en guise de perspective, on peut se poser deux questions ouvertes en lien avec la problématique de stationnarité, la première étant : les séries temporelles sont-elles suffisamment longues pour caractériser causalement le système ? La deuxième concerne le caractère intermittent des processus hydrologiques, par exemple les inondations de la grotte, qui traduisent en quelque sorte une causalité intermittente. Dès lors, comment les algorithmes d'inférence causale traitent ces processus intermittents ?

7. Conclusion et perspectives

Le karst est un milieu complexe, tant dans sa structure que dans son comportement hydrologique non linéaire. Son étude reste pourtant primordiale en raison de son importance en termes de ressource en eau à l'échelle planétaire (Ford et Williams, 2007; Hartmann et al., 2014). Il existe aujourd'hui un certain nombre de méthodes qui se basent sur les processus physiques qui visent à modéliser les systèmes karstiques, tant à l'échelle locale (dynamiques des écoulements dans les réseaux de conduits karstiques), tant à l'échelle globale dans la mesure où le système intègre une dynamique hydrologique plus large, celle du bassin versant. La dualité des écoulements préférentiels et des écoulement plus diffus dans les systèmes karstiques complexifie les approches de modélisation sans pour autant que ces modèles soient facilement transposables à d'autres cas d'études en raison du caractère unique de chaque système karstique.

Nous sommes entrés dans l'ère du Big Data, et, de surcroît, la disponibilité des modèles basés sur la fouille des données se sont largement développés. En particulier, les réseaux de neurones artificiels sont devenus des outils incontournables pour un tas d'applications de la vie quotidienne (automates, reconnaissance d'image, etc.). De façon plus marginale, actuellement, ces outils sont utilisés dans les domaines des sciences environnementales. En effet, en raison de leur approche de type « boîte noire », ils sont souvent critiqués pour leur manque de structure causale, sans base physique, et pour leur flexibilité les rendant sujets à la sur-paramétrisation. Pour pallier ce problème, nous avons proposé d'étudier un système karstique d'un point de vue causal préalablement à la modélisation.

La causalité a pourtant depuis longtemps été rejetée du vocabulaire de la physique qui s'attache davantage à décrire le comment plutôt que le pourquoi des choses. Le terme fait son retour, notamment, depuis que l'économetre prix Nobel Granger propose un cadre d'analyse linéaire multivarié d'inférence causale (Granger, 1969). Plus tard, des approches non linéaires ont été développées sur base du transfert d'entropie (Schreiber, 2000) en se basant de la théorie de l'information (Shannon, 1948) pour une analyse bi-variée seulement. Plus récemment, ces travaux ont été élargis au cadre multivarié par des approches permettant de combiner les méthodes linéaires similaires à celles de Granger et les méthodes non linéaires pour l'analyse de la causalité (Runge, 2015).

Pour une vision plus résiliente des modèles d'apprentissage machine face aux conditions sur lesquelles ces derniers sont entraînés, nous proposons d'allier la réflexion causale avec la modélisation « boîte noire » des réseaux de neurones *Long-Short-Term-Memory* (LSTM). Notre objectif s'est alors porté sur la caractérisation du système karstique de la Lhomme, situé dans la région de Rochefort, au sud de la Belgique. C'est un système constitué de roches

calcaires du Givétien dans lequel s'est formé un réseau d'écoulements complexe par un processus appelé karstification. Nous avons étudié un système de variables choisies pour décrire au mieux la dynamique générale du système par des mesures de la gravité ainsi que la dynamique plus locale des écoulements dans les conduits karstiques, par des mesures de débit de gouttes de percolation en grotte.

Nos résultats d'inférence causale laissent transparaître que l'algorithme ne distingue pas toujours la cause de l'effet. Cela est probablement dû à un certain nombre d'hypothèses, discutées dans ce mémoire. Cette analyse a néanmoins permis de retrouver des relations physiquement logiques, d'autres relativement intéressantes mais qui sont discutables et, enfin, des relations peu interprétables ou illogiques au sens physique. La conclusion la plus importante est sans doute que selon le choix des variables et leur représentation, selon les méthodes et leurs paramètres, les cartes causales obtenues sont toutes différentes. Ainsi, l'inférence causale n'a rien du caractère intangible que laisse supposer le concept de causalité. Dans le cadre de ce travail, aucun élément ne permet de suggérer la supériorité d'une méthode non linéaire vis-à-vis d'une méthode linéaire et vice versa. Les méthodes linéaires fournissent des résultats plus facilement interprétables bien que l'on puisse mettre en doute les hypothèses de linéarités. Les méthodes non linéaires sont plus difficiles à interpréter quant à la nature des relations causales entre variables mais mettent en évidence d'autres relations pour alimenter la réflexion. Par ailleurs, nous discutons entre autre du fait qu'il y a toujours un risque en inférence causale appliquée à des systèmes en contexte réel, comme un système karstique, d'inclure un nombre insuffisant de variables pour la caractérisation causale, ce qui constitue une violation des hypothèses de l'inférence causale. Pour ces raisons, l'inférence causale ne se substitue pas au scientifique à qui incombera toujours la responsabilité de distinguer le vrai du faux.

La modélisation LSTM a surtout permis de comparer les différences de performances de prédiction entre des *inputs* causals de ceux non causals. Nous avons montré que les performances des prédictions sont à relativiser, notamment après comparaison avec les dérivées des prédictions. Bien que l'on puisse remettre en question la sélection des variables obtenue par inférence causale, cette sélection améliore en général les prédictions de la dynamique à haute fréquence. En raison des doutes persistants sur l'analyse causale, il est difficile d'en déduire que la nature causale est une raison suffisante à l'amélioration des performances du modèle. Cette amélioration peut également être attribuée à la réduction de dimension du problème. C'est pourquoi, une perspective importante se situe dans la comparaison des approches de sélection des variables généralement utilisées dans le domaine de l'apprentissage machine avec les méthodes d'inférence causale. Ce mémoire démontre à cet égard des perspectives encourageantes.

8. Références

- Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., Brevdo, E., Chen, Z., Citro, C., Corrado, G.S., Davis, A., Dean, J., Devin, M., Ghemawat, S., Goodfellow, I., Harp, A., Irving, G., Isard, M., Jia, Y., Jozefowicz, R., Kaiser, L., Kudlur, M., Levenberg, J., Mane, D., Monga, R., Moore, S., Murray, D., Olah, C., Schuster, M., Shlens, J., Steiner, B., Sutskever, I., Talwar, K., Tucker, P., Vanhoucke, V., Vasudevan, V., Viegas, F., Vinyals, O., Warden, P., Wattenberg, M., Wicke, M., Yu, Y., Zheng, X., 2016. TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems. ArXiv160304467 Cs.
- Abdel-Hamid, O., Mohamed, A.-R., Jiang, H., Deng, L., Penn, G., Yu, D., 2014. Convolutional neural networks for speech recognition. *IEEE Trans. Audio Speech Lang. Process.* 22, 1533–1545. <https://doi.org/10.1109/TASLP.2014.2339736>
- Allen, R.G., Pereira, L.S., Raes, D., Smith, M., 1998. Crop evapotranspiration-Guidelines for computing crop water requirements-FAO Irrigation and drainage paper 56.
- Aristóteles, Carteron, H., 1926. *Aristote: Physique*. Société d'édition "Les Belles lettres".
- Bailly-Comte, V., Jourde, H., Roesch, A., Pistre, S., Batiot-Guilhe, C., 2008. Time series analyses for Karst/River interactions assessment: Case of the Coulazou river (southern France). *J. Hydrol.* 349, 98–114. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2007.10.028>
- Bakalowicz, M., 2005. Karst groundwater: a challenge for new resources. *Hydrogeol. J.* 13, 148–160. <https://doi.org/10.1007/s10040-004-0402-9>
- Berkeley, G., 1999. A treatise concerning the principles of human knowledge. 1710. RS Bear.
- Brownlee, J., 2017. What is the Difference Between Test and Validation Datasets? Mach. Learn. Mastery. URL <https://machinelearningmastery.com/difference-test-validation-datasets/> (accessed 8.5.19).
- Camelbeeck, T., van Ruymbeke, M., Quinif, Y., Vandycke, S., de Kerchove, E., Ping, Z., 2012. Observation and interpretation of fault activity in the Rochefort cave (Belgium). *Tectonophysics, Crustal Stresses, Fractures, and Fault Zones: The Legacy of Jacques Angelier* 581, 48–61. <https://doi.org/10.1016/j.tecto.2011.09.027>
- Cazenave, A., Chen, J., 2010. Time-variable gravity from space and present-day mass redistribution in the Earth system. *Earth Planet. Sci. Lett.* 298, 263–274. <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2010.07.035>
- Che, Z., Purushotham, S., Cho, K., Sontag, D., Liu, Y., 2018. Recurrent Neural Networks for Multivariate Time Series with Missing Values. *Sci. Rep.* 8, 6085. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-24271-9>
- Chen, Z., Auler, A.S., Bakalowicz, M., Drew, D., Griger, F., Hartmann, J., Jiang, G., Moosdorf, N., Richts, A., Stevanovic, Z., Veni, G., Goldscheider, N., 2017. The World Karst Aquifer Mapping project: concept, mapping procedure and map of Europe. *Hydrogeol. J.* 25, 771–785. <https://doi.org/10.1007/s10040-016-1519-3>
- Chollet, F., 2015. Keras. <https://github.com/fchollet/keras>.
- Colombo, D., Maathuis, M.H., 2014. Order-Independent Constraint-Based Causal Structure Learning. *J. Mach. Learn. Res.* 15, 3921–3962.
- Creutzfeldt, B., Ferré, T., Troch, P., Merz, B., Wziontek, H., Güntner, A., 2012. Total water storage dynamics in response to climate variability and extremes: Inference from long-term terrestrial gravity measurement. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 117. <https://doi.org/10.1029/2011JD016472>

- Creutzfeldt, B., Güntner, A., Wziontek, H., Merz, B., 2010. Reducing local hydrology from high-precision gravity measurements: a lysimeter-based approach. *Geophys. J. Int.* 183, 178–187. <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2010.04742.x>
- Delforge, D., Van Camp, M., Vanclooster, M., Hallet, V., Kaufmann, O., Poulain, A., Watlet, R., 2019. Hydrological connectivity from causal analysis of time series in the Lhomme Karst System, Belgium, in: *Geophysical Research Abstracts*. Presented at the EGU General Assembly 2019, p. EGU2019.
- Di Baldassarre, G., Sivapalan, M., Rusca, M., Cudennec, C., Garcia, M., Kreibich, H., Konar, M., Mondino, E., Mård, J., Pande, S., Sanderson, M.R., Tian, F., Viglione, A., Wei, J., Wei, Y., Yu, D.J., Srinivasan, V., Blöschl, G., 2019. Socio-hydrology: Scientific Challenges in Addressing a Societal Grand Challenge. *Water Resour. Res.* <https://doi.org/10.1029/2018WR023901>
- Ford, D., Williams, P.W., 2007. *Karst hydrogeology and geomorphology*, Rev. ed. ed. John Wiley & Sons, Chichester, England ; a Hoboken, NJ.
- Frenzel, S., Pompe, B., 2007. Partial Mutual Information for Coupling Analysis of Multivariate Time Series. *Phys. Rev. Lett.* 99, 204101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.204101>
- Goldscheider, N., Drew, D. (Eds.), 2007. *Methods in karst hydrogeology*. Taylor & Francis, Leiden ; New York.
- Goodkind, J.M., 1999. The superconducting gravimeter. *Rev. Sci. Instrum.* 70, 4131–4152. <https://doi.org/10.1063/1.1150092>
- Granger, C.W.J., 1969. Investigating Causal Relations by Econometric Models and Cross-spectral Methods. *Econometrica* 37, 424–438. <https://doi.org/10.2307/1912791>
- Hartmann, A., Goldscheider, N., Wagener, T., Lange, J., Weiler, M., 2014. Karst water resources in a changing world: Review of hydrological modeling approaches. *Rev. Geophys.* 52, 218–242. <https://doi.org/10.1002/2013RG000443>
- Hochreiter, S., Schmidhuber, J., 1997. Long Short-Term Memory. *Neural Comput.* 9, 1735–1780. <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>
- Hu, C., Hao, Y., Yeh, T.-C.J., Pang, B., Wu, Z., 2008. Simulation of spring flows from a karst aquifer with an artificial neural network. *Hydrol. Process.* 22, 596–604. <https://doi.org/10.1002/hyp.6625>
- Hu, Y., Ren, P., Luo, W., Zhan, P., Li, X., 2019. Multi-resolution representation with recurrent neural networks application for streaming time series in IoT. *Comput. Netw.* 152, 114–132. <https://doi.org/10.1016/j.comnet.2019.01.035>
- Jin, K.H., McCann, M.T., Froustey, E., Unser, M., 2017. Deep Convolutional Neural Network for Inverse Problems in Imaging. *IEEE Trans. Image Process.* 26, 4509–4522. <https://doi.org/10.1109/TIP.2017.2713099>
- Kadić, A., Denić-Jukić, V., Jukić, D., 2018. Revealing hydrological relations of adjacent karst springs by partial correlation analysis. *Hydrol. Res.* 49, 616–633. <https://doi.org/10.2166/nh.2017.064>
- Kaufmann, O., Bastin, C., Barcella, C., Watlet, A., Van Ruymbeke, M., 2016. Design and Calibration of a System for Monitoring Highly Variable Dripwater Flows in Caves. 5th Int. Geol. Belg. Meet.
- Király, L., 1998. Modelling karst aquifers by the combined discrete channel and continuum approach. *Bull. Cent. Hydrogéologie*.
- Koller, D., Friedman, N., 2009. *Probabilistic graphical models: principles and techniques, Adaptive computation and machine learning*. The MIT Press, Cambridge, MA.

- Kong A Siou, L., Johannet, A., Borrell, V., Pistre, S., 2011. Complexity selection of a neural network model for karst flood forecasting: The case of the Lez Basin (southern France). *J. Hydrol.* 403, 367–380. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.04.015>
- Kong-A-Siou, L., Fleury, P., Johannet, A., Borrell Estupina, V., Pistre, S., Dörfliger, N., 2014. Performance and complementarity of two systemic models (reservoir and neural networks) used to simulate spring discharge and piezometry for a karst aquifer. *J. Hydrol.* 519, 3178–3192. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2014.10.041>
- Kraskov, A., Stoegbauer, H., Grassberger, P., 2004. Estimating Mutual Information. *Phys. Rev. E* 69, 066138. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.066138>
- Kratzert, F., Klotz, D., Brenner, C., Schulz, K., Herrnegger, M., 2018. Rainfall–runoff modelling using Long Short-Term Memory (LSTM) networks. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 22, 6005–6022. <https://doi.org/10.5194/hess-22-6005-2018>
- Kuczera, G., Mroczkowski, M., 1998. Assessment of hydrologic parameter uncertainty and the worth of multiresponse data. *Water Resour. Res.* 34, 1481–1489. <https://doi.org/10.1029/98WR00496>
- Kurtulus, B., Razack, M., 2010. Modeling daily discharge responses of a large karstic aquifer using soft computing methods: Artificial neural network and neuro-fuzzy. *J. Hydrol.* 381, 101–111. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.11.029>
- LeCun, Y.A., Bottou, L., Orr, G.B., Müller, K.-R., 2012. Efficient BackProp, in: Montavon, G., Orr, Geneviève B., Müller, K.-R. (Eds.), *Neural Networks: Tricks of the Trade*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 9–48. https://doi.org/10.1007/978-3-642-35289-8_3
- Lorenz, E.N., 1963. Deterministic nonperiodic flow. *J. Atmospheric Sci.* 20, 130–141.
- Mangin, A., 1984. Pour une meilleure connaissance des systèmes hydrologiques à partir des analyses corrélatoire et spectrale. *J. Hydrol.* 67, 25–43. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(84\)90230-0](https://doi.org/10.1016/0022-1694(84)90230-0)
- Mazzilli, N., Jourde, H., Jacob, T., Guinot, V., Le Moigne, N., Boucher, M., Chalikakis, K., Guyard, H., Legtchenko, A., 2013. On the inclusion of ground-based gravity measurements to the calibration process of a global rainfall-discharge reservoir model: case of the Durzon karst system (Larzac, southern France). *Environ. Earth Sci.* 68, 1631–1646. <https://doi.org/10.1007/s12665-012-1856-z>
- Michalski, R.S., Carbonell, J.G., Mitchell, T.M., 1983. An artificial intelligence approach. *Underst. Nat. Learn.* 2, 3–26.
- Michel, G., Thys, G., 2015. *Atlas du karst wallon : bassin de la Lesse Calestienne : inventaire cartographique et descriptif des sites karstiques et des circulations d’eau souterraine*. Commission wallonne d’étude et de protection des sites souterrains, La Hulpe.
- Milly, P.C.D., Betancourt, J., Falkenmark, M., Hirsch, R.M., Kundzewicz, Z.W., Lettenmaier, D.P., Stouffer, R.J., 2008. Stationarity Is Dead: Whither Water Management? *Science* 319, 573–574. <https://doi.org/10.1126/science.1151915>
- Nash, J.E., Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I - A discussion of principles. *J. Hydrol.* 10, 282–290. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(70\)90255-6](https://doi.org/10.1016/0022-1694(70)90255-6)
- Naujoks, M., Kroner, C., Weise, A., Jahr, T., Krause, P., Eisner, S., 2010. Evaluating local hydrological modelling by temporal gravity observations and a gravimetric three-dimensional model. *Geophys. J. Int.* 182, 233–249. <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2010.04615.x>

- Niebauer, T.M., Sasagawa, G.S., Faller, J.E., Hilt, R., Klopping, F., 1995. A new generation of absolute gravimeters. *Metrologia* 32, 159–180. <https://doi.org/10.1088/0026-1394/32/3/004>
- Pearl, J., 2000. *Causality: models, reasoning, and inference*. Cambridge University Press.
- Pearson, K., 1897. Mathematical contributions to the theory of evolution. *Proc. R. Soc. Lond.* 60, 489–503.
- Pinault, J.-L., Ladouche, B., Doerfliger, N., Bakalowicz, M., 2001. Modélisation inverse des relations pluie-débits et des chimiogrammes: Application aux systèmes karstiques des Fontanilles et des Cent Fonts (Hérault, France). *Sci. Tech. Environ. Mém. Hors-sér.* 289–292.
- Pompe, B., Runge, J., 2011. Momentary information transfer as a coupling measure of time series. *Phys. Rev. E* 83, 051122. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.051122>
- Poulain, A., 2017. Flow and transport characterization in vadose and phreatic zones of karst aquifers.
- Rinderer, M., Ali, G., Larsen, L.G., 2018. Assessing structural, functional and effective hydrologic connectivity with brain neuroscience methods: State-of-the-art and research directions. *Earth-Sci. Rev.* 178, 29–47. <https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2018.01.009>
- Rodriguez-Iturbe, I., Yevjevich, V.M., 1968. Investigation of relationship between hydrologic time series and sunspot numbers, *The. Hydrol. Pap. Colo. State Univ.* No 26.
- Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., Williams, R.J., 1986. Learning internal representations by error propagation, in: Rumelhart, David E., McClelland, J.L., Group, C.P.R. (Eds.), *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*, Vol. 1. MIT Press, pp. 318–362.
- Runge, J., 2018. Causal network reconstruction from time series: From theoretical assumptions to practical estimation. *Chaos Interdiscip. J. Nonlinear Sci.* 28, 075310. <https://doi.org/10.1063/1.5025050>
- Runge, J., 2017. Conditional independence testing based on a nearest-neighbor estimator of conditional mutual information. *ArXiv170901447 Cs Math Stat*.
- Runge, J., 2015. Quantifying information transfer and mediation along causal pathways in complex systems. *Phys. Rev. E* 92, 062829. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.062829>
- Runge, J., Bathiany, S., Bollt, E., Camps-Valls, G., Coumou, D., Deyle, E., Glymour, C., Kretschmer, M., Mahecha, M.D., Muñoz-Marí, J., Nes, E.H. van, Peters, J., Quax, R., Reichstein, M., Scheffer, M., Schölkopf, B., Spirtes, P., Sugihara, G., Sun, J., Zhang, K., Zscheischler, J., 2019. Inferring causation from time series in Earth system sciences. *Nat. Commun.* 10, 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10105-3>
- Runge, J., Nowack, P., Kretschmer, M., Flaxman, S., Sejdinovic, D., 2017. Detecting causal associations in large nonlinear time series datasets. *ArXiv170207007 Phys. Stat*.
- Salvucci, G.D., Saleem, J.A., Kaufmann, R., 2002. Investigating soil moisture feedbacks on precipitation with tests of Granger causality. *Adv. Water Resour.* 25, 1305–1312. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(02\)00057-X](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(02)00057-X)
- Schreiber, T., 2000. Measuring Information Transfer. *Phys. Rev. Lett.* 85, 461–464. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.461>
- Shannon, C.E., 1948. A Mathematical Theory of Communication. *Bell Syst. Tech. J.* 27, 379–423. <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>

- Shen, C., 2018. A Transdisciplinary Review of Deep Learning Research and Its Relevance for Water Resources Scientists. *Water Resour. Res.* 54, 8558–8593. <https://doi.org/10.1029/2018WR022643>
- Shen, C., Laloy, E., Elshorbagy, A., Albert, A., Bales, J., Chang, F.-J., Ganguly, S., Hsu, K.-L., Kifer, D., Fang, Z., Fang, K., Li, D., Li, X., Tsai, W.-P., 2018. HESS Opinions: Incubating deep-learning-powered hydrologic science advances as a community. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 22, 5639–5656. <https://doi.org/10.5194/hess-22-5639-2018>
- Spirtes, P., Glymour, C., 1991. An Algorithm for Fast Recovery of Sparse Causal Graphs. *Soc. Sci. Comput. Rev.* 9, 62–72. <https://doi.org/10.1177/089443939100900106>
- Spirtes, P., Glymour, C.N., Scheines, R., Heckerman, D., Meek, C., Cooper, G., Richardson, T., 2000. *Causation, Prediction, and Search*. MIT Press.
- Strobl, E.V., Zhang, K., Visweswaran, S., 2017. Approximate Kernel-based Conditional Independence Tests for Fast Non-Parametric Causal Discovery. *ArXiv170203877 Stat.*
- Sugihara, G., May, R., Ye, H., Hsieh, C., Deyle, E., Fogarty, M., Munch, S., 2012. Detecting Causality in Complex Ecosystems. *Science* 338, 496–500.
- Székely, G.J., Rizzo, M.L., Bakirov, N.K., 2007. Measuring and testing dependence by correlation of distances. *Ann. Stat.* 35, 2769–2794. <https://doi.org/10.1214/009053607000000505>
- Tagne, G.V., Dowling, C., 2018. Inferring groundwater flow and recharge from time series analysis of storm responses in a karst aquifer of southeastern Kentucky (USA). *Hydrogeol. J.* 26, 2649–2668. <https://doi.org/10.1007/s10040-018-1837-8>
- Takens, F., 1981. Detecting strange attractors in turbulence, in: *Dynamical Systems and Turbulence*, Warwick 1980. Springer, pp. 366–381.
- Tessier, Y., Lovejoy, S., Hubert, P., Schertzer, D., Pecknold, S., 1996. Multifractal analysis and modeling of rainfall and river flows and scaling, causal transfer functions. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 101, 26427–26440.
- Teutsch, G., Sauter, M., 1998. Distributed parameter modelling approaches in karst hydrological investigations. *Bull. D’Hydrogeologie* 16, 99–110.
- Van Camp, M., Meurers, B., de Viron, O., Forbriger, T., 2016. Optimized strategy for the calibration of superconducting gravimeters at the one per mille level. *J. Geod.* 90, 91–99. <https://doi.org/10.1007/s00190-015-0856-7>
- Van Camp, Michel, Meus, P., Quinif, Y., Kaufmann, O., van Ruymbeke, M., Vandiepenbeck, M., Camelbeeck, T., 2006. Karst aquifer investigation using absolute gravity. *Eos Trans. Am. Geophys. Union* 87, 298. <https://doi.org/10.1029/2006EO300005>
- Van Camp, M., Vanclooster, M., Crommen, O., Petermans, T., Verbeeck, K., Meurers, B., Dam, T. van, Dassargues, A., 2006. Hydrogeological investigations at the Membach station, Belgium, and application to correct long periodic gravity variations. *J. Geophys. Res. Solid Earth* 111. <https://doi.org/10.1029/2006JB004405>
- Van Den Broeck, E., Martel, E.-A., Rahir, E., 1910. *Les cavernes et les rivières souterraines de la Belgique*. H. Lamertin, Bruxelles.
- Vandycke, S., Quinif, Y., 2001. Recent active faults in Belgian Ardenne revealed in Rochefort Karstic network (Namur Province, Belgium). *Neth. J. Geosci.* 80, 297–304. <https://doi.org/10.1017/S0016774600023891>
- Vejmelka, M., Paluš, M., 2008. Inferring the directionality of coupling with conditional mutual information. *Phys. Rev. E* 77, 026214. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.026214>
- Watlet, A., 2017. Hydrogeophysical monitoring of groundwater recharge processes through the karst vadose zone at Rochefort (Belgium).

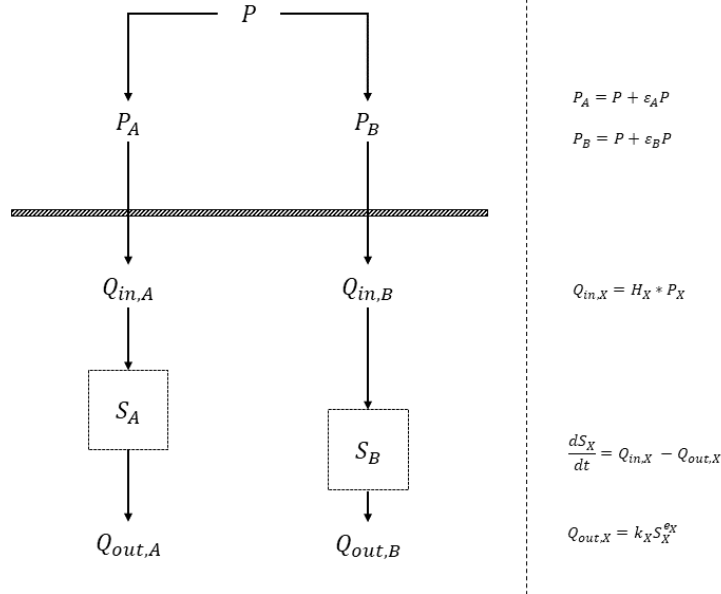
- Watlet, A., Kaufmann, O., Triantafyllou, A., Poulain, A., Chambers, J.E., Meldrum, P.I., Wilkinson, P.B., Hallet, V., Quinif, Y., Van Ruymbeke, M., Van Camp, M., 2018. Imaging groundwater infiltration dynamics in the karst vadose zone with long-term ERT monitoring. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 22, 1563–1592. <https://doi.org/10.5194/hess-22-1563-2018>
- Willems, L., Ek, C., 2011. Le système karstique de la Lomme. Quelques points d'observation remarquable. Prof. Pap. 2011/2.
- Worthington, S.R.H., Ford, D.C., 2009. Self-Organized Permeability in Carbonate Aquifers. *Groundwater* 47, 326–336. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2009.00551.x>
- Wright, S., 1921. Correlation and causation. *J. Agric. Res.* 20, 557–585.
- Zhang, D., Lindholm, G., Ratnaweera, H., 2018. Use long short-term memory to enhance Internet of Things for combined sewer overflow monitoring. *J. Hydrol.* 556, 409–418. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2017.11.018>
- Zhang, J., Zhu, Y., Zhang, X., Ye, M., Yang, J., 2018. Developing a Long Short-Term Memory (LSTM) based model for predicting water table depth in agricultural areas. *J. Hydrol.* 561, 918–929. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.04.065>
- Zwahlen, F., 2003. Vulnerability and risk mapping for the protection of carbonate (karst) aquifers. Office for Official Publications of the European Communities.

9. Annexes

9.1 Annexe 1 : Expériences virtuelles avec TIGRAMITE

Modèle hydrologique

Le modèle consiste en deux réservoirs A et B déconnectés intégrant la pluie en parallèle en présence d'un bruit multiplicatif variable :



L'objectif de l'expérience virtuelle est de vérifier si l'algorithme PCMCi est en mesure de détecter l'absence de connexion causale directe entre le stock d'eau du réservoir A, S_A et celui de B, S_B . En d'autres termes, il s'agit de prouver que S_A et S_B sont conditionnellement indépendants sachant P : $S_A \perp S_B | P$. Les variables P_A , P_B , $Q_{in,A}$, $Q_{in,B}$, $Q_{out,A}$ et $Q_{out,B}$ sont supposées inconnues et l'investigation causale n'implique que S_A , S_B et P .

P est une précipitation effective, c'est-à-dire la différence nette entre la précipitation et l'évapotranspiration. P est définie sur base des données journalière PAMESEB (station de Jemelle) de précipitation et d'évapotranspiration calculée selon l'équation FAO-56 de Penman-Monteith (Allen et al., 1998). P_A et P_B sont les précipitations effectives journalières associées aux réservoirs A et B. Elles sont égales à P plus une composante de bruit multiplicatif $\varepsilon_X P_X$ où ε_X est un bruit blanc Gaussien de moyenne nulle associé au réservoir $X \in \{A, B\}$. Sa déviation standard est variable au cours de l'expérience mais ε_A et ε_B sont toujours égales. P_X devient $Q_{in,X}$ suite à l'application d'une fonction de transfert H_X . Pour le réservoir A, le transfert intègre 3 pas de temps :

$$Q_{in,A}^t = 0.2P_A^t + 0.8P_A^{t-1} + 0.2P_A^{t-2}$$

où les indices supérieurs représentent les indices temporels. Pour le réservoir B, le transfert s'étale sur 7 pas de temps :

$$Q_{in,B}^t = 0.05P_B^t + 0.1P_B^{t-1} + 0.2P_B^{t-2} + 0.3P_B^{t-3} + 0.2P_B^{t-4} + 0.1P_B^{t-5} + 0.05P_B^{t-6}$$

La dynamique des réservoirs est solutionnée par intégration numérique de l'équation de continuité $dS_X/dt = Q_{in,X} - Q_{out,X}$ où $Q_{out,X}$ suit une loi de stockage-décharge exponentielle, c'est-à-dire non linéaire, à deux paramètres :

$$Q_{out,X} = k_X S_X^{e_X}$$

où k_X et e_X sont les paramètres de récession. Les données synthétiques sont générées à partir des paramètres suivants : $k_A = 0.01$ et $e_A = 1.2$ pour le réservoir A , et $k_B = 0.005$ and $e_B = 1.5$ pour le réservoir B .

Expérience virtuelle

Le Framework d'analyse causale TIGRAMITE et son algorithme PCMCi (Runge et al., 2017) est appliqué à la fois avec la méthode linéaire *ParCorr*, calculant la corrélation partielle entre les résidus de régressions, et la méthode non linéaire *CMiknn* qui estime l'information mutuelle conditionnelle entre les variables. Les données considérées sont à la fois les données dérivées dP/dt , dS_A/dt et dS_B/dt , ainsi que les données brutes P , S_A et S_B . Au total, les deux méthodes d'analyse et les deux types de données d'entrée se combinent en quatre expériences distinctes. Pour chaque expérience, le délai causal maximal est limité à 5 pas de temps, pour limité le temps de calcul tout en englobant les temps de transferts dominants. Le niveau de significativité causale est fixé à 0.01.

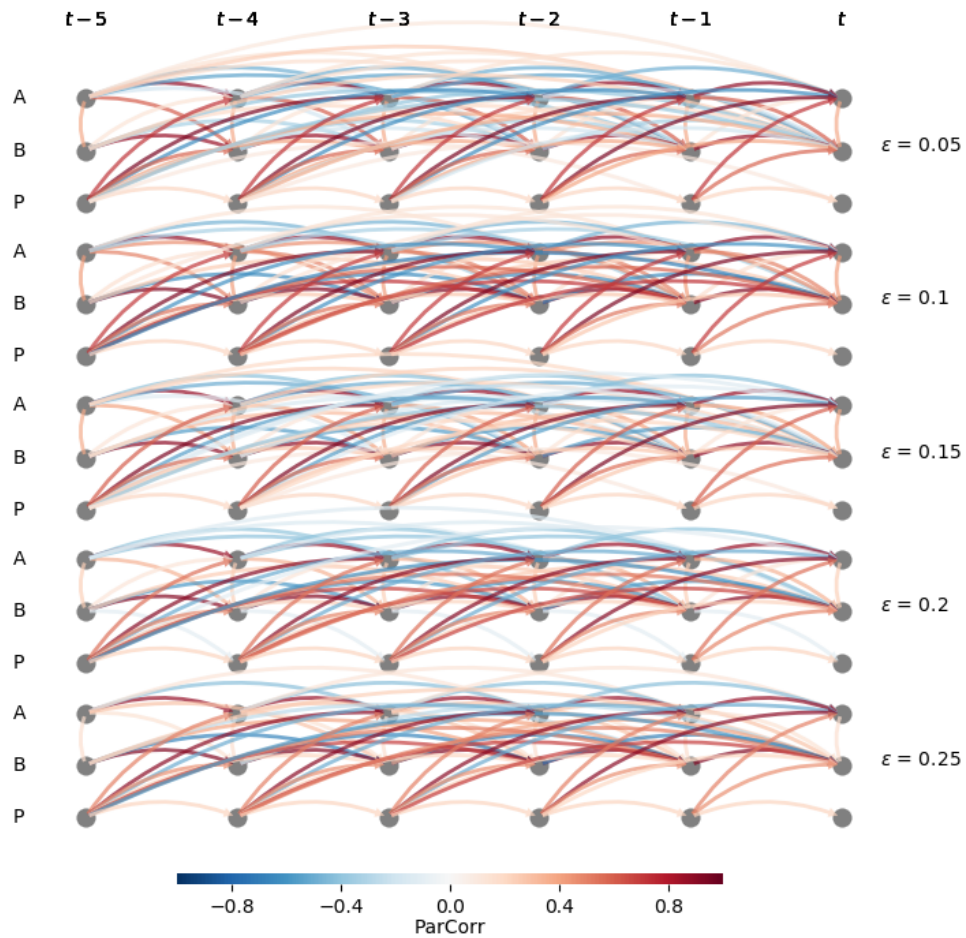
Chacune de ces expériences font varier le niveau de bruit du modèle ε_X selon 0.05, 0.1, 0.15, 0.2 et 0.25 fois la déviation standard de la précipitation effective P . Ce bruit simule une variabilité spatiale et inclus un paramètre stochastique à la simulation permettant à chaque réservoir d'avoir une identité dynamique, de telle sorte que le réservoir B ne puissent être mathématiquement défini en fonction du réservoir A . En particulier, les 2 expériences basées sur la méthode *CMiknn* (Runge, 2017) font varier le nombre de points à inclure dans le voisinage local lors de l'estimation de l'information mutuelle conditionnelle, k_{CMI} , selon les valeurs suivantes : 5, 10, 15, 20, 50, 100. Ce paramètre est à optimiser d'une part car il influe sur la résolution causale du système et est propre à la dynamique étudiée. De plus, il augmente linéairement le temps de calcul. Suivant les paramètres exposés, le temps de calcul pour la résolution des 4 expériences virtuelles avoisinent les 48 heures sans calculs parallèles sur une machine Windows 10, Intel® Core™ i7-6600U CPU @ 2.60 GHz 2.80 Ghz, 8.00 Go RAM. Ce temps est entièrement imputé à la résolution de la méthode *CMiknn*.

Le modèle synthétique est réalisé sur base de 5327 données journalière de précipitation. Les 730 derniers jours de simulation (plus stables) des débits sont utilisés pour l'expérience.

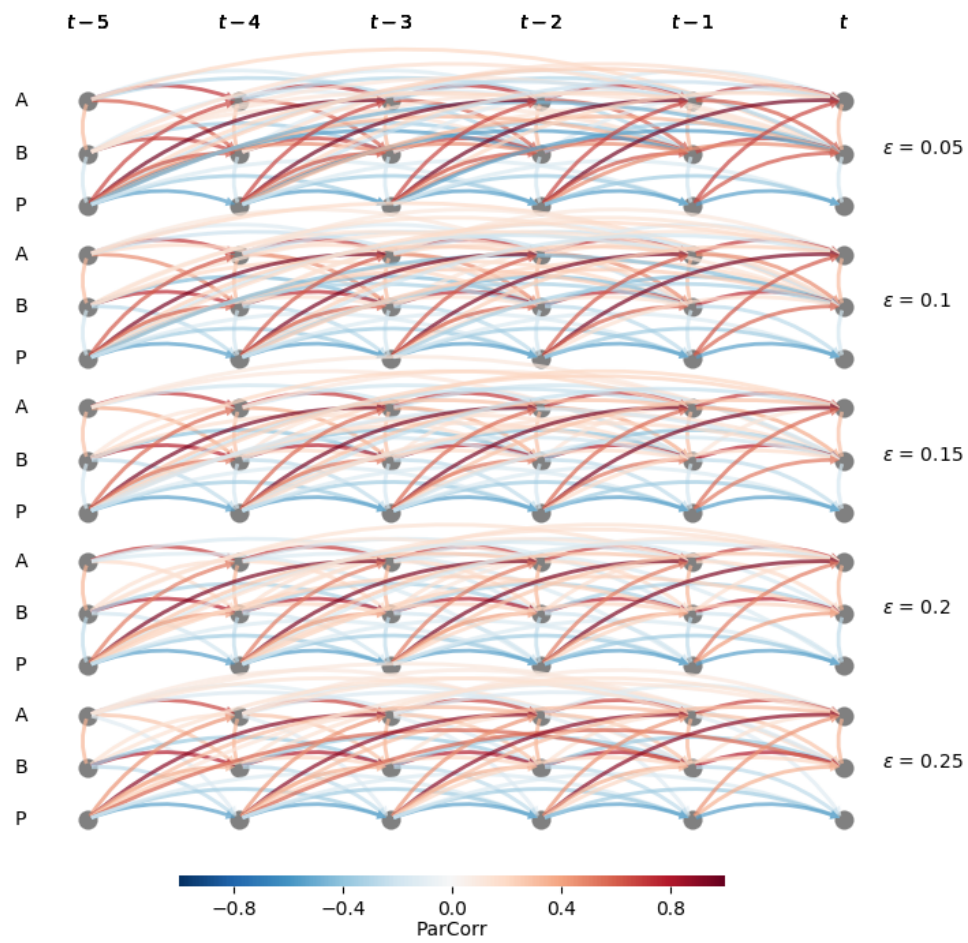
Résultats

Les résultats sont à interpréter selon une logique temporelle rapportée sur graphique. Des flèches représentent les interactions causales significative détectée par PCMCI. Elle pointent de la variable causale vers la variable causée selon un délai causal.

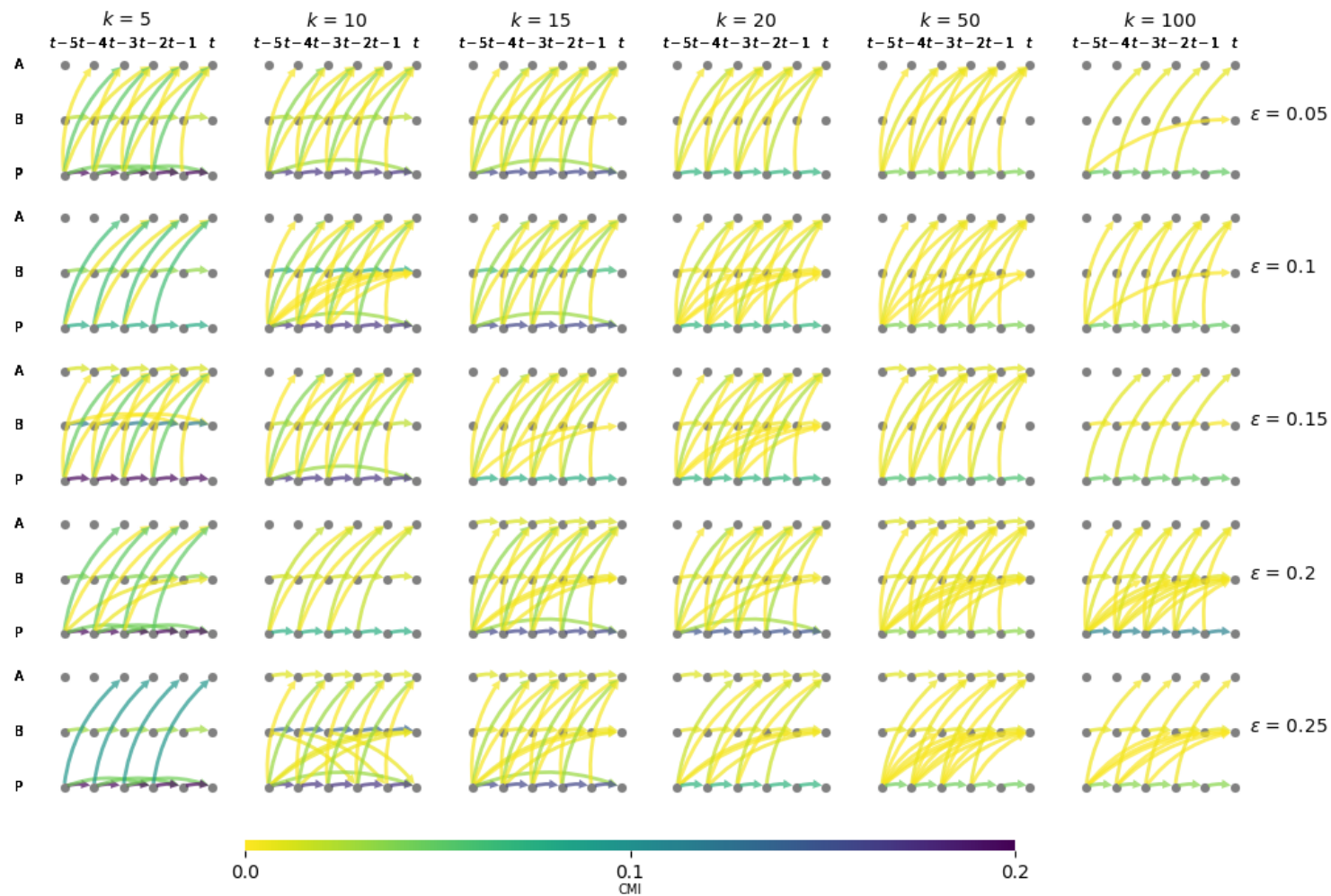
A1.3.1 ParCorr sur données brutes



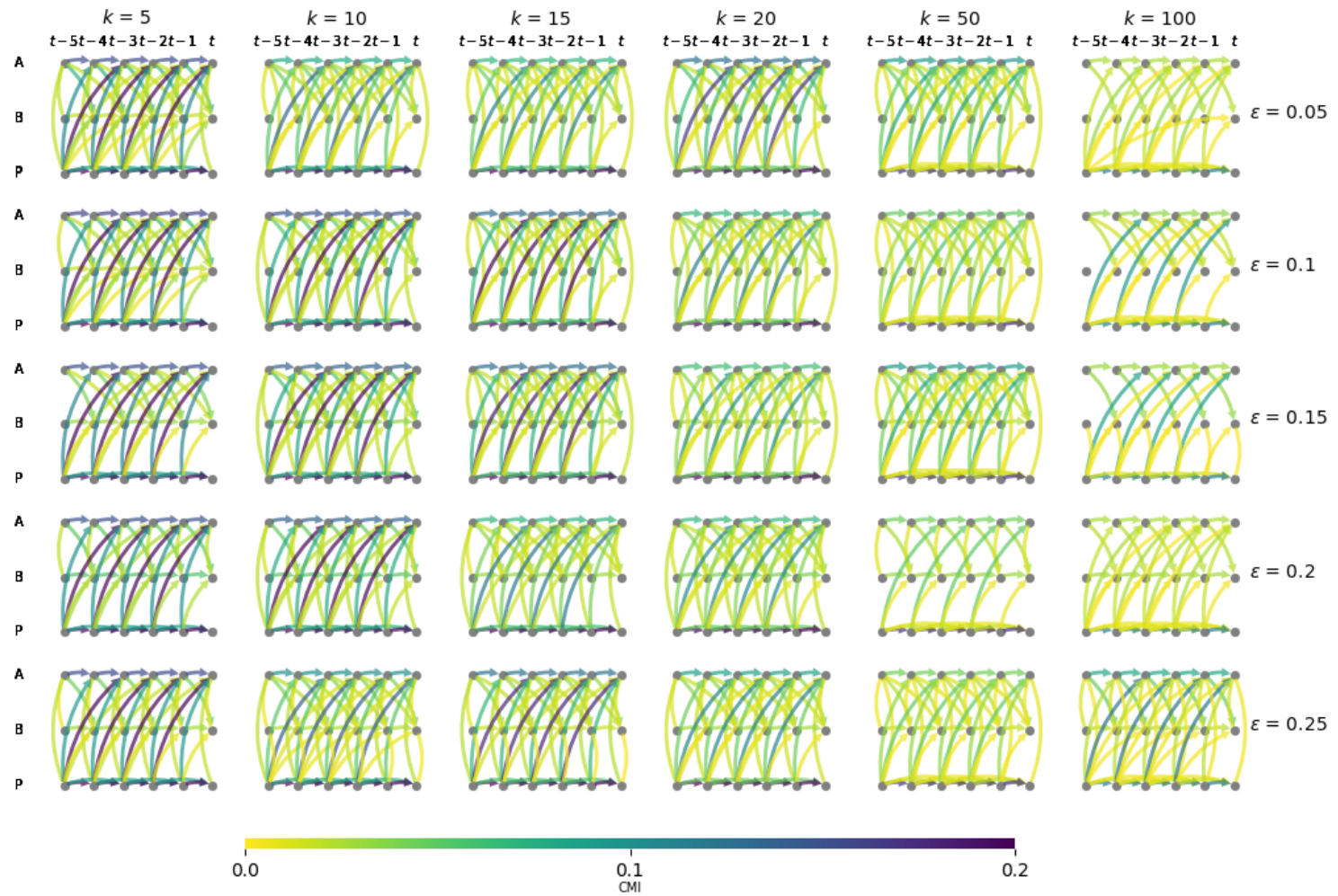
ParCorr sur données dérivées



CMiknn sur données brutes



CMknn sur données dérivées



Conclusions

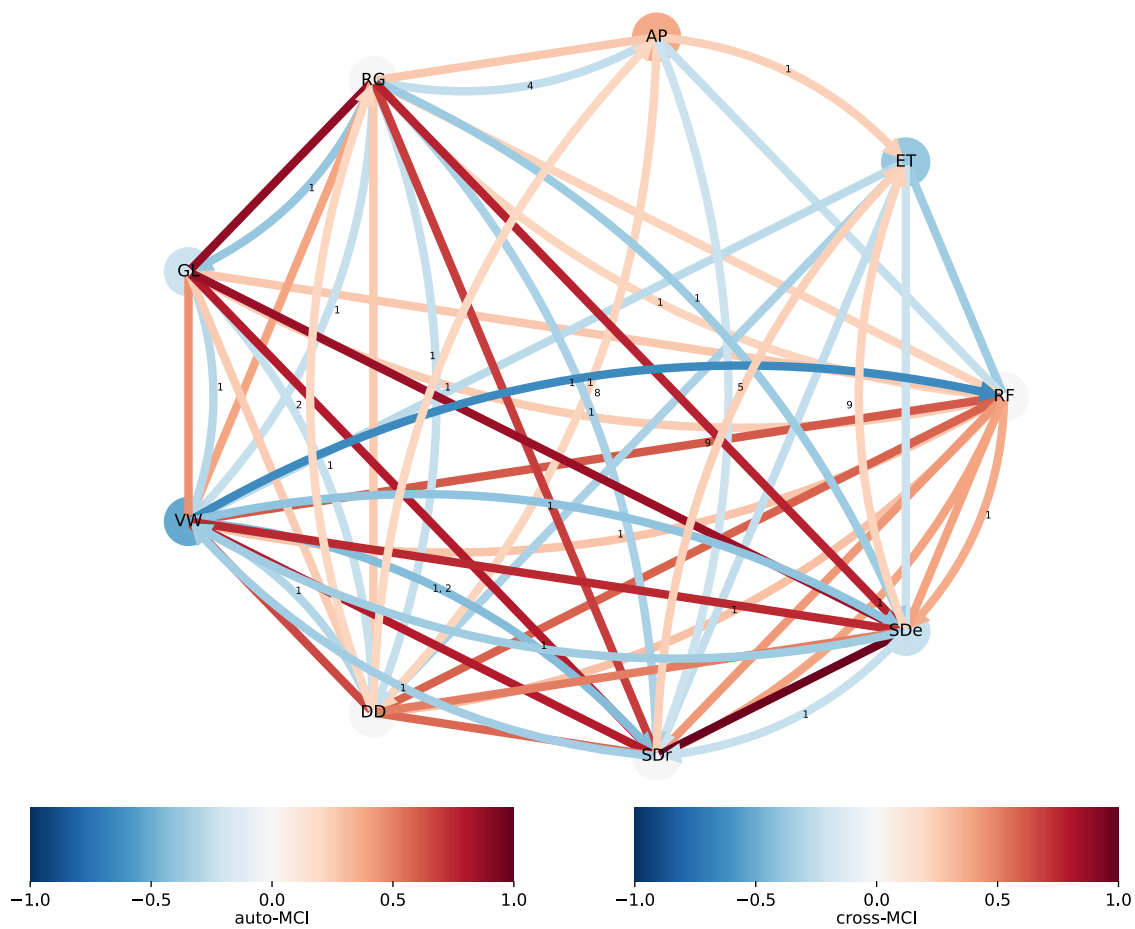
Appliquée sur un modèle hydrologique simple à deux réservoirs non linéaires et non couplés, la méthode *ParCorr* tend à détecter un nombre important d'interactions causales significatives, ce qui rend l'interprétation causale du système difficile. Que ce soit sur les données brutes ou dérivées, la méthode linéaire suggère des relations causale bidirectionnelles entre les réservoirs *A* et *B*. En ce qui concernent l'interaction entre la pluie effective et les réservoirs, l'application de la méthode linéaire détecte dans la majorité des cas un effet de la dynamique des réservoirs sur la pluie effective. L'effet semble faible et positif sur les données brutes, mais disparaît pour un niveau de bruit équivalent à 0.25. A l'inverse, cet effet est plus prononcé et négatif sur les données dérivées.

Références

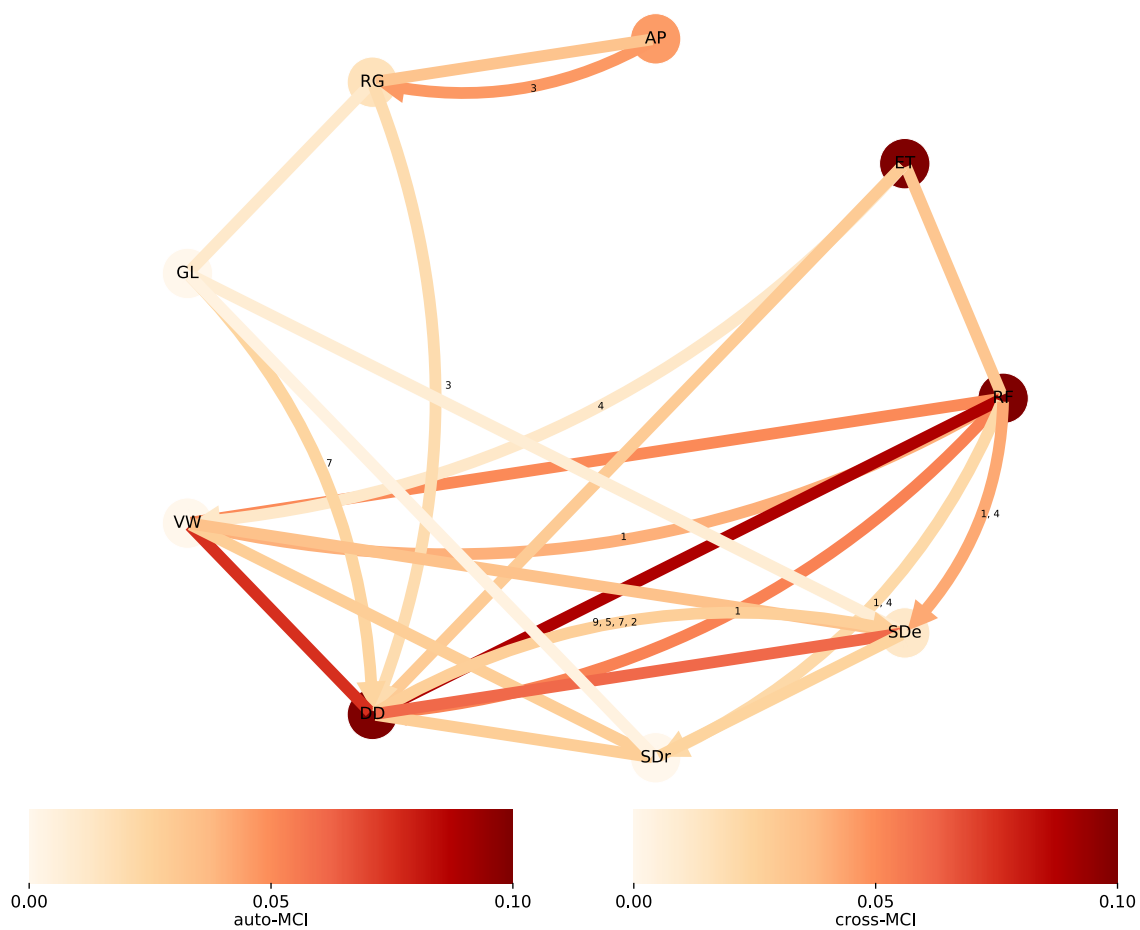
- Allen, R.G., Pereira, L.S., Raes, D., Smith, M., 1998. Crop evapotranspiration-Guidelines for computing crop water requirements-FAO Irrigation and drainage paper 56.
- Runge, J., 2017. Conditional independence testing based on a nearest-neighbor estimator of conditional mutual information. ArXiv170901447 Cs Math Stat.
- Runge, J., Nowack, P., Kretschmer, M., Flaxman, S., Sejdinovic, D., 2017. Detecting causal associations in large nonlinear time series datasets. ArXiv170207007 Phys. Stat.

9.2 Annexe 2 : Graphe de processus

ParCorr ; données dérivées



CMiknn ; données dérivées



CMiknn ; données brutes

