

SUJET DE STAGE MASTER 2/INGENIEUR

TITRE DU PROJET : SpecSols

Analyse simultanée de spectres de Fluorescence X et Infrarouge pour explorer la diversité de sols de la région Grand Est : Description, séparation de sources et classification.

MOTS CLEFS : Chimiométrie, Pédologie, Fluorescence X, Infrarouge, Environnement, Analyse de données.

ENCADREMENT

- Marc Offroy | marc.offroy@univ-lorraine.fr
- Hermine Huot | hermine.huot@ird.fr

LIEU DU STAGE : Université de Lorraine, CNRS, LIEC, F-54000 Nancy, France.

CONTEXTE :

De nos jours, plus de 50 % de la surface terrestre hors glaces a été modifiée de manière directe par les activités humaines, majoritairement par les exploitations agricoles et forestières [1]. Cependant, avec l'augmentation de la population, du taux d'urbanisation et de demandes sociétales (nourriture, logement, matériaux, énergie, infrastructures, espaces verts), les sols artificialisés ou anthropisés augmentent aux dépens des sols naturels, agricoles et forestiers [2]. En modifiant les caractéristiques des sols, les activités humaines peuvent affecter leur capacité à remplir des fonctions essentielles au fonctionnement des écosystèmes terrestres et à rendre des services écosystémiques aux sociétés. En effet, les sols assurent la production de biomasse, la filtration de l'eau, le stockage du carbone ou un habitat pour de nombreux organismes. En conséquence, les sols représentent un levier important pour répondre à de nombreux enjeux auxquels l'humanité doit faire face, tels qu'assurer la sécurité alimentaire, limiter et s'adapter au changement climatique ou préserver la biodiversité. Pour répondre à ces enjeux, il est important de mieux comprendre les impacts des usages passés sur le fonctionnement et le potentiel d'évolution des sols anthropisés afin de pouvoir choisir des usages futurs et des méthodes de réhabilitation adaptées et durables.

Il existe une large diversité de sols anthropisés en fonction de l'histoire des usages qu'ils ont subie. En particulier, ces sols peuvent contenir des mélanges de constituants organiques et minéraux d'origine naturelle en place ou transportés et d'origine anthropique. Les perturbations liées aux activités humaines (excavation, mélange, tassement, enfouissement) peuvent fortement perturber l'organisation des profils de sols en horizons issus des processus de formation naturelle [3]. L'étude du fonctionnement et de l'évolution des sols anthropisés nécessite de pouvoir appréhender la diversité et la variabilité de ces sols et donc de développer une approche pour pouvoir les comparer et les classer.

En pédologie, l'usage des techniques spectroscopiques prend une place de plus en plus importante car elles permettent de concilier rapidité d'analyse et signature de sources et sont utilisées pour estimer certaines propriétés physico-chimiques des sols. En particulier, la spectroscopie de fluorescence X permet de mesurer la composition élémentaire des sols [4] alors que la spectroscopie infrarouge, qui est une spectroscopie vibrationnelle, donne une information moléculaire sur les composés organiques et minéraux des sols [5]. Ces spectroscopies montrent un potentiel pour établir des classifications de sols [6]. La possibilité de générer en peu de temps, un nombre conséquent de données, a nécessité le développement d'outils mathématiques pour les analyser. En physico-chimie, une discipline appelée Chimiométrie a été développée pour justement acquérir une connaissance plus approfondie et une interprétation plus complète des échantillons analysés. Ces approches comprennent la réduction en dimension de données [7], la classification des observations [8] et la modélisation des relations qui peuvent exister entre les variables analysées [9].

DEVELOPPEMENT DU SUJET DE STAGE :

L'objectif du stage est donc d'appliquer et de développer des outils de chimiométrie pour exploiter de façon optimale les données de Fluorescence X et/ou Infrarouge obtenues sur un ensemble d'échantillons de sols agricoles, forestiers et anthropisés de la région Grand Est. L'analyse simultanée de l'information moléculaire et élémentaire permettra de différencier les sols en fonction de leur histoire d'anthropisation, d'établir une typologie de sols à l'échelle régionale et de définir des marqueurs d'anthropisation. Pour ce faire, plusieurs stratégies d'analyse des données devront être testées :

- (1) Trouver le meilleur pré-traitement pour corriger les effets indésirables ou inhérents à la mesure sur les spectres (correction de ligne de base, spikes, etc.).
- (2) Appliquer différentes méthodes multivariées pour extraire les informations spectrales les plus pertinentes (ACP, MCR-ALS, ICA, etc.) soit en -mono- soit en -multi- blocs.
- (3) Et enfin, proposer une méthode de classification des données.

RÉFÉRENCES :

[1] Hooke, R.LeB., Martin-Duque, J.F., Pedraza, J., 2012. Land transformation by humans: A review. *GSA Today* **22**, 4-10 (2012).

- [2] Béchet, B., Le Bissonnais, Y., Ruas, A. (coord.), Aguilera, A., Andrieu, H., Barbe, E., Billet, P., Cavailhès, J., Cohen, M., Cornu, S., Dablanc, L., Delolme, C., Géniaux, G., Hedde, M., Mering, C., Musy, M., Polèse, M., Weber, C., Frémont, A., Le Perchec, S., Schmitt, B., Savini, I., Desrousseaux, M. Sols artificialisés : déterminants, impacts et leviers d'action, Quæ ed. (2019).
- [3] Huot, H., Simonnot, M.-O., Morel, J.L. Pedogenetic Trends in Soils Formed in Technogenic Parent Materials. *Soil Science* **180**, 182-192 (2015).
- [4] Weindorf, D.C., Chakraborty, S. Portable X-ray fluorescence spectrometry analysis of soils. *Soil Science Society of America Journal* **1**, 1384-1392 (2016).
- [5] Parikh, S.J., Goyne, K.W., Margenot, A.J., Mukome, N.D., Calderón, F.J. Chapter one - Soil Chemical Insights Provided through Vibrational Spectroscopy. *Advances in Agronomy* **126**, 1-148 (2014).
- [6] Zhang, Y., Hartemink, A.E., Huang, J. Spectral signatures of soil horizons and soil orders - An exploratory study of 270 soil profiles. *Geoderma* **389**, 114961 (2021).
- [7] Wold, S., Esbensen, K., Geladi, P. Principal Component Analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (2)1-3, 37-52 (1987).
- [8] Cocchi, M., Biancolillo, A., Marini, F. Chapter Ten - Chemometric Methods for Classification and Feature Selection, Editors Joaquim Jaumot, Carmen Bedia, Romà Tauler, Comprehensive Analytical Chemistry, **82**, 265-299 (2018).
- [9] Offroy, M., Duponchel, L. Topological data analysis: A promising big data exploration tool in biology, analytical chemistry and physical chemistry. *Analytica Chimica Acta* **910**, 1-11 (2016).

COMPETENCES REQUISES :

La candidate ou le candidat devra avoir des compétences solides en physico-chimie (notamment en spectroscopies), et en mathématique (notamment statistiques, calcul matriciel). Elle ou il devra également avoir un goût particulier et une certaine autonomie en programmation (MATLAB, VBA, PYTHON, R ou tout autre langage).