



HAL
open science

SCANCHEM : un outil d'analyse issue du projet PIT pour la dendrochimie appliquée aux sols pollués.

Francois Beaujard, Chris Balouet, Michel Chalot

► **To cite this version:**

Francois Beaujard, Chris Balouet, Michel Chalot. SCANCHEM : un outil d'analyse issue du projet PIT pour la dendrochimie appliquée aux sols pollués.. ADEME, 3ème rencontre nationales de la recherche sur les sites et sols pollués, Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME). FRA., Nov 2014, Paris, France. 4 p. hal-01268945

HAL Id: hal-01268945

<https://hal.science/hal-01268945>

Submitted on 3 Jun 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.


L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



18 & 19 NOVEMBRE 2014 • PARIS

3^e Rencontres nationales
de la
recherche
sur les
sites & sols
pollués

ADEME



Agence de l'Environnement
et de la Maîtrise de l'Énergie



Liberté • Égalité • Fraternité
RÉPUBLIQUE FRANÇAISE

MINISTÈRE
DE L'ÉCOLOGIE,
DU DÉVELOPPEMENT DURABLE
ET DE L'ÉNERGIE

MINISTÈRE
DE L'ÉDUCATION NATIONALE,
DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE

RECUEIL DES RÉSUMÉS
COMMUNICATIONS ORALES

SCANCHEM: un outil d'analyse issu du projet PIT pour la dendrochimie appliquée aux sols pollués

François BEAUJARD^{1*}, Chris BALOUET², Michel CHALOT^{3,4}

^{1*} UMR 547, PIAF (INRA - Université Blaise Pascal), INRA Centre de Clermont-Ferrand, Site de Crouël, 5 chemin de Beau lieu, 63039 Clermont-Ferrand Cedex 02, France
francois.beaujard@clermont.inra.fr

² Environment International, 2 ruelle du Hamet, 60129, Orrouy, France
balouet.jean-christophe@neuf.fr

³ Laboratoire « Chrono-Environnement », Université de Franche-Comté, UMR 6249, 4 place Tharradin, BP 71427, 25 211 Montbéliard, France
michel.chalot@univ-fcomte.fr

Résumé

Le développement des méthodes dendrochimiques appliquées aux arbres donnent accès à la caractérisation de pollutions édaphiques mais il demande aujourd'hui que des outils d'investigation dans la masse des données que la méthode génère, soient disponibles. Le programme informatique Scanchem en est une proposition. Construit sous Excel, son utilisation comme gabarit spécifique à l'application rend aisée la construction d'un nouveau classeur de résultats, facilite la prospection dans les données en générant des graphiques multiples, assure une traçabilité totale au travail d'investigation, et facilite finalement la diffusion des résultats du fait de l'utilisation d'un logiciel grand public très largement pratiqué.

Introduction

Le cadre de développement de l'outil Scanchem

L'imprégnation des arbres par les polluants via la sève permet de caractériser la pollution actuelle du sous-sol et du phréatique, méthode connue sous le terme de phytoscreening. L'analyse dendrochimique des carottes d'arbres exposés à la pollution en permet de retracer l'historique, que ce soit pour les dater ou les caractériser chimiquement par leurs traceurs élémentaires.

Le programme de recherche international Pollution Investigation by Trees (PIT), financé par l'ADEME, s'est attaché à tester plus avant ces méthodes sur 24 sites avec plusieurs familles de polluants (COHVs, carburants fossiles, HAPs, métaux, PCBs) et de nouvelles méthodes d'échantillonnage, d'extraction et d'analyses. Achevé en 2014, PIT a été soutenu pendant 3 ans par 51 chercheurs et professionnels de 6 pays (Allemagne, Canada, Etats Unis, France, Royaume Uni, Suisse).

Le nombre très important de données analytiques réunies en dendrochimie par PIT, près de 8 millions, nous a amené à développer l'outil informatique Scanchem, en automatisant les quelques 3000 fonctions que l'opérateur devait répéter à chaque dossier. Scanchem a été, depuis sa mise en place, appliqué à une centaine d'expertises environnementales.

La mémoire de l'arbre.

En vivant facilement une centaine d'années, les arbres constituent des témoins privilégiés de l'histoire environnementale et édaphique des lieux. Ils mémorisent alors très significativement les conditions de leur environnement de croissance au point que l'on trouve un intérêt majeur à tenter d'en décrypter la mémoire qu'ils portent. Cette activité est largement entreprise dans le domaine de la dendrochronologie avec l'étude des changements climatiques et, plus récemment, dans celui de la dendrochimie pour des activités en phytoforensie environnementale [1,3,4].

Bien que d'autres végétaux non arborescents puissent vivre aussi longtemps, les arbres édifient spécifiquement des troncs dont la particularité est d'inscrire les traits de leur propre histoire dans de la formation du bois. Cette production tissulaire constitue, pour un travail dans l'espace-temps, une zone certes

restreinte, mais intéressante parce qu'elle est très ordonnée. En effet, la croissance radiale du tronc des arbres se fait par la périphérie et la production cyclique, ou saisonnière, de nouveaux vaisseaux dont ceux du xylème constituant le bois. Ce tissu conducteur à l'état jeune assure de façon centrale des fonctions physiologiques dans la plante, comme la circulation de la sève brute, celle de l'eau avec sa propriété de solvant, celle de petites molécules organiques, et celle des ions minéraux essentiellement remobilisés ou prélevés par les racines dans le sol. Avec le temps, les vaisseaux xylémiens plus anciens et leurs tissus collatéraux rentrent progressivement dans un processus de maturation, d'imprégnations diverses, puis de sénescence pour les tissus associés, pour évoluer à terme vers du bois de cœur. Ce processus conduit à l'abandon du rôle de ces structures dans la circulation de la sève brute et mais il permet aussi le renforcement des propriétés mécaniques de l'arborescence. L'accumulation centrifuge du xylème conduit ainsi à la formation d'un réseau concentrique de cernes anatomiquement distincts et qui marquent nettement les saisonnalités en zone tempérée. Cette propriété permet d'effectuer des datations précises par simple inventaire des cernes.

Au cours de la première phase de leur existence, les jeunes tissus vasculaires du bois échangent avec la sève brute, stockent et déstockent des éléments chimiques divers depuis leurs propres structures et les structures cellulaires adjacentes. Ils participent ainsi au réseau fonctionnel reliant les différentes parties de l'arbre. Avec le temps, ils deviennent sénescents, non coopératifs pour le réseau physiologique et finissent par séquestrer définitivement leurs constituants. Parmi ceux-ci, on compte des matériaux organiques et des éléments chimiques intéressant la physiologie de l'arbre, mais aussi des éléments non vitaux dont les métaux lourds ou d'autres éléments dont des alcalino-terreux. Bien que l'enchaînement des mécanismes conduisant à la séquestration quasi-totale des éléments chimiques présents dans le bois de cœur soit assez mal connu, le résultat de ces propriétés est mis à profit pour identifier des anomalies de composition chimique correspondant ou reflétant des variations brutales et pas trop récentes de l'environnement édaphique, dont la pollution des sols [1 et 3].

Matériel et méthodes

L'accès aux informations mémorisées.

La méthode d'accès à la structure anatomique et à la composition des cernes consiste à prélever une carotte un peu épaisse (1 cm de diamètre) dans un tronc d'arbre, de la conditionner légèrement, puis de la travailler au laboratoire dans toute sa longueur. Les méthodes actuelles de mesures élémentaires par fluorescence X (EDXRF) permettent d'analyser en multi-éléments et de façon longitudinale (pas de 10 ou 50 micron) des échantillons végétaux de 30 cm de longueur. Elles ne sont pas les seules, mais elles permettent de restituer la composition élémentaire du matériau avec 31 éléments chimiques identifiés et d'y associer une radiographie correspondant au balayage de l'échantillon. Le résultat de ces dosages conduit facilement à une matrice de données de plus de $2 \cdot 10^5$ termes avec lesquels l'expert-analyste envisage d'identifier et de dater les anomalies de composition chimique. Dans le cas de la phytoforensie, il convient aussi d'adjoindre au dossier d'expertise des résultats ayant une parfaite traçabilité. Lors d'analyses récurrentes par carottage (plus de 50 carottes pour le programme PIT), fréquentes pour étudier un site, le premier challenge pour la dendrochimie revient à automatiser les calculs et le rendu graphique des résultats. Le premier objectif est donc de permettre une très forte interactivité entre l'opérateur et ses données afin d'en faciliter l'exploitation, puis la diffusion. Sans vouloir l'absolu dans le domaine, mais pour mieux prendre en compte la diversité des interlocuteurs potentiels et leur savoir-faire dans la gestion informatisée des données, le programme Scanchem a été construit autour d'Excel (Version 2010, VBA) afin de rendre très performante la transportabilité des résultats.

Résultats et discussion

La structure de Scanchem.

Scanchem est un gabarit de classeur Excel contenant au départ plusieurs feuilles insécables, un complexe de macros VBA et un ensemble de graphiques et de tableaux prédéfinis (Fig. 1). Le départ d'une nouvelle analyse consiste à faire l'importation de nouvelles données (Excel, TXT), l'ajout de règles très simples en entête des données pour en préciser le format de lecture, puis à faire la sélection assistée par Scanchem de la zone longitudinale retenue pour le travail. Tous les calculs sont ensuite automatiquement réalisés (identification des éléments, dimension de la matrice, correction en densité et calculs du TWCMA).

De nouvelles feuilles et de nouveaux graphiques peuvent ensuite facilement être ajoutés et réordonnés pour ajuster l'analyse de la carotte dosée aux besoins de l'expertise. Un classeur remodelé peut à son tour servir de gabarit Scanchem. La méthode dite « ouverte » permet de faire évoluer son travail rapidement sans avoir à produire des manipulations récurrentes et parfois fastidieuses sous Excel. Le classeur Scanchem est une entité qui en véhiculant les programmes VBA permet d'exporter le fichier et d'en conservant les propriétés pour la manipulation des graphiques.

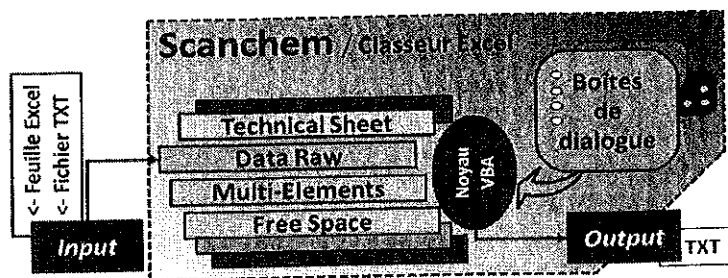


Figure 1. Organisation schématique d'un classeur Scanchem.

L'interactivité entre l'opérateur, les données sous forme graphique et leur sélection est principalement assurée par des boîtes de dialogue. Le classeur peut être facilement enrichi de nouvelles feuilles et de nouveaux graphiques comme tous les classeurs Excel.

Un exemple pour la sélection d'un élément chimique.

La maquette de la table de Mendeleïev prévue dans le programme affiche automatiquement les éléments identifiés depuis la feuille des données brutes (Fig. 2). Un simple clic sur l'un des symboles chimiques affichés permet de construire un graphique normalisé par le format de lecture des données. Le graphique est alors produit dans une feuille libre (Free Space) et peut facilement être retravaillé avec les boîtes de dialogue de Scanchem, ou bien, mais moins facilement, par les fonctions classiques d'Excel. D'autres fonctions non présentées ici permettent aussi de créer des graphiques personnalisés.

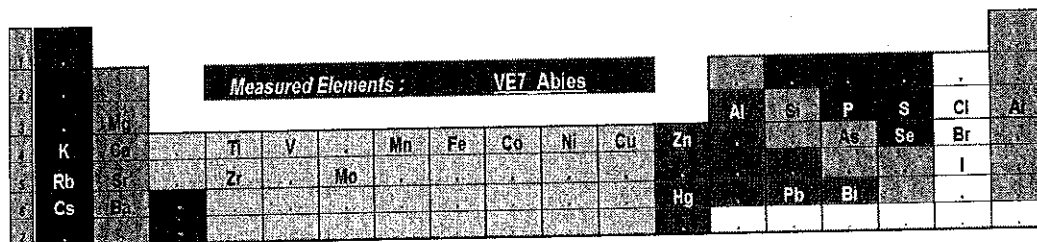


Figure 2. Sélection de l'un des éléments mesurés par fluorescence X depuis leur répartition dans la table de Mendeleïev

Un exemple de sortie graphique associant l'image de la carotte à sa composition chimique.

La boîte à outil du programme permet de modifier directement depuis le graphique les éléments chimiques, de faire apparaître ou disparaître l'image de fond, ou bien d'afficher les résultats d'un élément en fonction d'un autre pour en étudier les corrélations. Des fonctions « Zoom » permettent aussi de focaliser l'attention sur une partie réduite du graphique. Le design graphique peut encore être modifié et conservé pour réaliser un nouveau gabarit. Les graphiques comme tous les graphiques Excel peuvent facilement être exportés (Fig. 3) vers d'autres logiciels traditionnellement utilisés pour l'édition de rapport et de présentation.

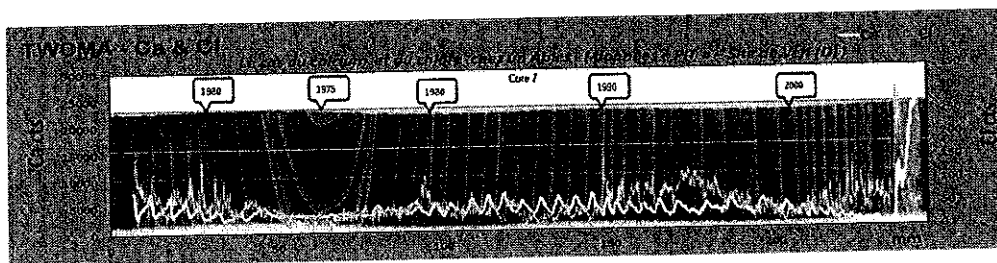


Figure 3. Automatisation des sorties graphiques avec Scanchem

Le fond du graphique illustrant la radiographie de la carotte prélevée sur un Abies (25 cm) est parfaitement ajusté à la zone longitudinale définie par le dosage en laboratoire. Cela afin que soit assurée simultanément la cohérence entre une lecture des cernes pré-datés et celle des données TWCMA (correction en densité suivie d'un lissage par un modèle de moyenne glissante). Les extrêmes des données ont été éliminés des procédures de calculs par l'opérateur et son assistant Scanchem car ils ne correspondent pas au matériel végétal initial. Le petit cadre orange marque ici la zone effective des mesures faites en fluorescence X.

Conclusion et perspectives

Scanchem est l'un des tous premiers programmes publics dédié à la visualisation, la prospection et l'analyse des données dendrochimiques multi-élémentaires et obtenues avec des carottes effectuées dans les troncs d'arbres. Il facilite l'accès à l'information sur la dynamique environnemental d'un lieu qui a été mémorisée dans le bois de cœur. Ce qui est le cas, pour exemple, de pollutions organométalliques d'un sol. Actuellement, nous n'avons qu'une connaissance imparfaite, et certainement insuffisante, de la cascade des mécanismes physiologiques qui permettent à des éléments non indispensables à la vie de l'arbre de finir, en partant du sol, stockés dans des tissus caulinaires sénescents. Toutefois, l'approche dendrochimique déjà appliquée à la phytoforensie environnementale [1] montre proprement que les anomalies de compositions élémentaires au niveau des cernes du bois reflètent bien une pollution du milieu édaphique qui, de surcroît, peut être finement datés par dendrochronologie [3]. Scanchem a tout d'abord été construit pour augmenter l'efficacité de cette approche puis, avec une construction sous Excel, pour en faciliter la diffusion.

Le programme informatique permet de saisir, visualiser et prospector rapidement dans les données brutes issues de scans linéaires qui associent des dosages multi-élémentaires. L'automatisation des tâches de formatage des données, de construction et d'actualisation des graphiques, ainsi que de la sélection d'un élément par simple réécriture du titre du graphique, ou par un clic unique dans une des cases de la table de Mendeleïev, élimine les manipulations répétitives et fastidieuses qui peuvent conduire facilement à des erreurs. Les outils spécifiques à Scanchem renforcent considérablement la capacité d'interactivité entre l'opérateur et ses graphiques, et conduit à augmenter très significativement la productivité et l'acuité dans l'analyse des données.

Scanchem n'a cependant pas d'autre ambition que d'être un outil au service de la dendrochimie et de ses applications. Il sera mis sous licence GNU-GPL au printemps 2014, puis mis à disposition de la communauté scientifique au cours du trimestre suivant. La conception générique du programme laisse envisager une possible utilisation pour d'autres situations d'expertises comme l'analyse des carottes sédimentaires.

Remerciements

Ce programme a été développé en relation avec le programme international PIT (Pollution Investigation by Trees – 2010-2014) financé par l'ADEME (Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie, France) et coordonné par Chris Balouet et Michel Chalot. Il a été développé pour favoriser le traitement en dendrochimie de nombreux échantillons d'arbres effectués dans le cadre de ce programme et pour gagner dans la normalisation de leur traitement. Les bases cognitives utilisées pour sa construction ont été largement publiées dans la littérature internationale.

Références bibliographiques

- [1] Balouet, J.-C., Smith, K.-T., Vroblecky, D.-A, Oudijk, G. (2009). Use of dendrochronology and dendrochemistry in environmental forensics: Does it meet the Daubert criteria? *Environmental Forensics*, **10**, (4), 268-276.
- [2] Balouet, J.-C., Burken, J.-G., Karg, F., Vroblecky, D.-A, Smith, K.-T., Grudd, H., Rindby, A., Beaujard, F., Chalot, M. (2012). Dendrochemistry of multiple HVOC releases at a former industrial site. *Environmental Science & Technology*, **46** (17), 9541-9547.
- [3] Smith, K.-T., Balouet, J.-C., Oudijk, G. (2008). Elemental scanning of an increment core using EDXRF: From fundamental research to environmental forensics applications. *Dendrochronologia*, **26**, 157-163.
- [4] Smith, T., Balouet, J.-C., Shortle, W.-C., Chalot, M., Beaujard, F., Grudd, H., Vroblecky, D.-A., Burken, J.-G. (2014). Dendrochemical patterns of calcium, zinc, and potassium related to internal factors detected by energy dispersive X-ray fluorescence (EDXRF). *Chemosphere*, **95**, 58-62.