

# Analyse de données environnementales : outils statistiques et géochimiques

#	Niveau d'étude Bac +2	#	ECTS crédits	#	Composante Sciences Fondamentales et Appliquées	#	Volume horaire 50.0	#	Période de l'année Semestre 4
---	--------------------------	---	-----------------	---	--	---	------------------------	---	-------------------------------------

## En bref

- # **Langue(s) d'enseignement:** Français
- # **Méthode d'enseignement:** En présence
- # **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

## Présentation

### Description

Deux mots clés caractérisent tout particulièrement les milieux naturels : hétérogénéité et incertitude. Hétérogénéité car les caractéristiques géologiques / chimiques / biologiques d'un milieu naturel peuvent être significativement différentes d'un endroit à un autre, même sur de très courtes distances. Incertitude car la collecte des données ne s'effectue la plupart du temps qu'en des endroits précis et avec une résolution spatiale bien inférieure à celle de l'objet qui nous intéresse (exemple d'un forage vis-à-vis d'un réservoir pétrolier). L'analyse et l'interprétation de données environnementales soulèvent ainsi de multiples questions : Comment extraire un maximum d'informations à partir des données disponibles ? Comment rendre compte de la variabilité spatiale des milieux naturels ? Comment traduire l'incertitude découlant de l'échantillonnage limité du milieu ? Et enfin, comment simplifier la description des objets et/ou des processus étudiés par l'intermédiaire de modèles ? Cette

UE adresse ces différentes questions et introduit les outils nécessaires pour y répondre. Dans la seconde partie de cette UE, on s'intéressera plus spécifiquement aux différentes formes sous lesquelles peuvent exister (voire co-exister) certains éléments chimiques dans les milieux naturels. Les notions de spéciation et de thermodynamique chimique seront introduites afin d'appréhender les processus qui influencent l'hétérogénéité des éléments chimiques dans les milieux naturels (dissolution-précipitation, oxydo-réduction, complexation, ...). On s'intéressera tout particulièrement à la spéciation d'éléments chimiques d'enjeux majeurs (marqueurs, polluants,...) dans les fonds géologiques, les eaux souterraines et les eaux de surface. Enfin, on introduira des outils graphiques tels que les diagrammes d'activité qui permettent de prédire l'évolution de la spéciation d'un élément en fonction de différents paramètres physico-chimiques du milieu (pH, Eh, T, P...).

### Objectifs

L'objectif de cette UE est de former les étudiants :

1. pour 50% de l'UE : à l'utilisation des outils permettant 1) d'appréhender la variabilité des milieux naturels, 2) de traduire l'incertitude découlant de l'échantillonnage limité du milieu, et 3) de simplifier la description des objets et/ou des processus étudiés par l'intermédiaire de modèles statistiques simples.

2. pour 50% de l'UE : à l'utilisation des outils nécessaires 1) à la compréhension et à la prédiction du comportement d'un élément chimique dans un environnement donné, 2) pour définir la spéciation d'éléments chimiques pertinents pour des problématiques géologiques (silicium, aluminium, fer, ...).

## Heures d'enseignement

Analyse de données environnementales : outils statistiques et géochimiques - CM	CM	14h
Analyse de données environnementales : outils statistiques et géochimiques - TP	TP	36h

## Syllabus

### I. Outils statistiques et numériques (7h CM, 18h TP)

I.1. Statistiques descriptives (moyenne, écart-type, distributions de fréquences, ajustement par des lois théoriques)

I.2. Cas particulier des données circulaires (angles)

I.3. Tests d'homogénéité (test de Fisher, ANOVA)

I.4. Relation entre plusieurs variables : régression et ACP

I.5. Analyse des séries temporelles (autocorrélogramme et corrélogramme croisé)

I.6. Fractales

I.7. Interpolation spatiale de données

### II. Outils Géochimiques (7h CM, 18h TP)

II.1. Thermodynamique chimique (loi d'action de masse, potentiel chimique, modèles d'activité)

II.2. Diagrammes de solubilité

II.3. Diagrammes d'activité

II.4. Codes géochimiques (JChess, Phreeqc, MInteq)

## Compétences visées

- Être capable de définir un plan d'échantillonnage / mesures sur le terrain

- Savoir appréhender et corriger les biais d'échantillonnage associés aux mesures d'angles (directions, pendages) sur les affleurements rocheux

- Être capable de représenter graphiquement la variabilité des données dont on dispose (diagrammes de fréquences, rosaces directionnelles)

- Être capable de synthétiser la variabilité des données étudiées par l'intermédiaire de quelques paramètres simples (moyenne, médiane, écart-type, asymétrie)

- Être capable de chiffrer l'intervalle de confiance (incertitude) associée à un paramètre

- Savoir reconnaître la(les) loi(s) théoriques qui pourraient permettre de décrire de manière optimale et simplifiée la variabilité des données (loi normale, loi lognormale, loi exponentielle, loi puissance, ...)

- Être capable d'optimiser l'ajustement d'un modèle théorique sur la distribution de fréquences des données

- Être capable de définir si les différences observées entre différents jeux de données sont significatives ou non

- Savoir reconnaître et modéliser une relation linéaire entre deux paramètres

- Être capable de chiffrer l'incertitude associée à une prédiction basée sur un modèle linéaire

- Être capable d'extraire et de synthétiser les informations contenues dans un jeu de données multi-variables à l'aide d'une matrice de corrélation et d'une analyse en composantes principales (ACP)
- Être capable d'analyser une série chronologique de données et de déterminer l'inertie temporelle ("effet mémoire") du système étudié
- Être capable d'analyser les éventuelles relations entre deux paramètres pour lesquels on dispose d'un suivi temporel
- Être capable de mettre en évidence le caractère fractal éventuel de la variabilité spatiale d'un objet naturel, et, le cas échéant, être capable de calculer la dimension fractale de cet objet
- Être capable de calculer des courbes isovaleurs pour cartographier la variabilité spatiale d'un paramètre dont on ne dispose que de données ponctuelles
- Savoir utiliser les outils thermodynamiques de base
- Savoir définir la spéciation d'un élément chimique à l'aide des outils thermodynamiques
- Être capable d'associer le comportement d'un élément chimique à sa spéciation dans un système donné
- Être capable de définir les variables pertinentes influant sur la spéciation d'un élément chimique
- Être capable de représenter graphiquement le comportement d'un élément chimique selon des variables définies (1D et 2D)
- Savoir utiliser les fonctionnalités de base d'un code de calcul géochimique
- Être capable de modéliser le comportement d'un élément chimique à l'aide d'un code de calcul géochimique
- Savoir transposer les simulations effectuées à des situations réelles (milieux naturels)

---

## Bibliographie

- Guillaume A., 1977, Introduction à la géologie quantitative, Masson
- Borradaile G. J., 2003, Statistics of Earth-science data : their distribution in time, space , and orientation, Springer
- Fisher, N. I., 1995, Statistical analysis of circular data, Cambridge University Press
- Pewsey A., Neuhauser M., Ruxton G. D., 2014, Circular Statistics in R, Oxford
- Husson F., Lê J., Pagès J., 2016, Analyse de données avec R, Presses Universitaires de Rennes
- Millot, G., 2009, Comprendre et réaliser les tests statistiques à l'aide de R, De Boeck Université
- Shumway R.H., Stoffer D.S., 2017, Time Series Analysis and Its Applications: With R Examples, Springer
- Stumm W., Morgan J.J., F., 1996, Aquatic Chemistry: Chemical Equilibria and Rates in Natural Waters, Wiley-Blackwell
- Van der Lee J., De Windt L., 2002, Chess Tutorial and Cookbook updated for version 3.0, Ecole des Mines de Paris

---

## Infos pratiques

### Lieu(x)

# Poitiers-Campus

---

### En savoir plus

# <http://sfa.univ-poitiers.fr/geosciences/>