



HAL
open science

Mise au point de modèles chimiométriques pour la caractérisation de sols à partir de mesures spectrales PIR effectuées au laboratoire et au champ

Bernard Barthès, Claude Boussan, Amandine Etayo, Youssef Fouad, Cyril Girardin, Etienne Lamy, Eric Latrille, Marie Noelle Mistou, Brigitte Montegano, Nicolas Proix, et al.

► To cite this version:

Bernard Barthès, Claude Boussan, Amandine Etayo, Youssef Fouad, Cyril Girardin, et al.. Mise au point de modèles chimiométriques pour la caractérisation de sols à partir de mesures spectrales PIR effectuées au laboratoire et au champ. 19ième Rencontres HelioSPIR, Nov 2018, Montpellier, France. hal-02785832

HAL Id: hal-02785832

<https://hal.inrae.fr/hal-02785832v1>

Submitted on 4 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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - ShareAlike 4.0 International License



Mise au point de modèles chimiométriques pour la caractérisation de sols à partir de mesures spectrales PIR effectuées au laboratoire et au champ

Bernard Barthès, Claude Doussan, Amandine Etayo, Youssef Fouad, Cyril Girardin, Etienne Lamy, Eric Latrille, Marie-Noelle Mistou, Brigitte Montegano, Nicolas Proix, Virginie Rossard, Pascal Sartre, Jeanne-Chantale Thoisy



CONTEXTE



- ❖ Développer des compétences « NIRS » sur des données du sol
- ❖ Pari scientifique EA 2017-2018
- ❖ Partage de données et de modèles via ChemFlow
- ❖ Organisation d'ateliers
- ❖ **Objectif** : caractériser les types de sol présents et leur répartition spatiale pour accéder à des calculs de stocks de carbone et l'azote





PLAN



- I. Etalonnages à partir des spectres obtenus en labo
- II. Etalonnages à partir des spectres obtenus au champ
- III. Perspectives

Développement de calibrations à partir de mesures (spectres et analyses) effectuées en laboratoire (INRA – LAS)

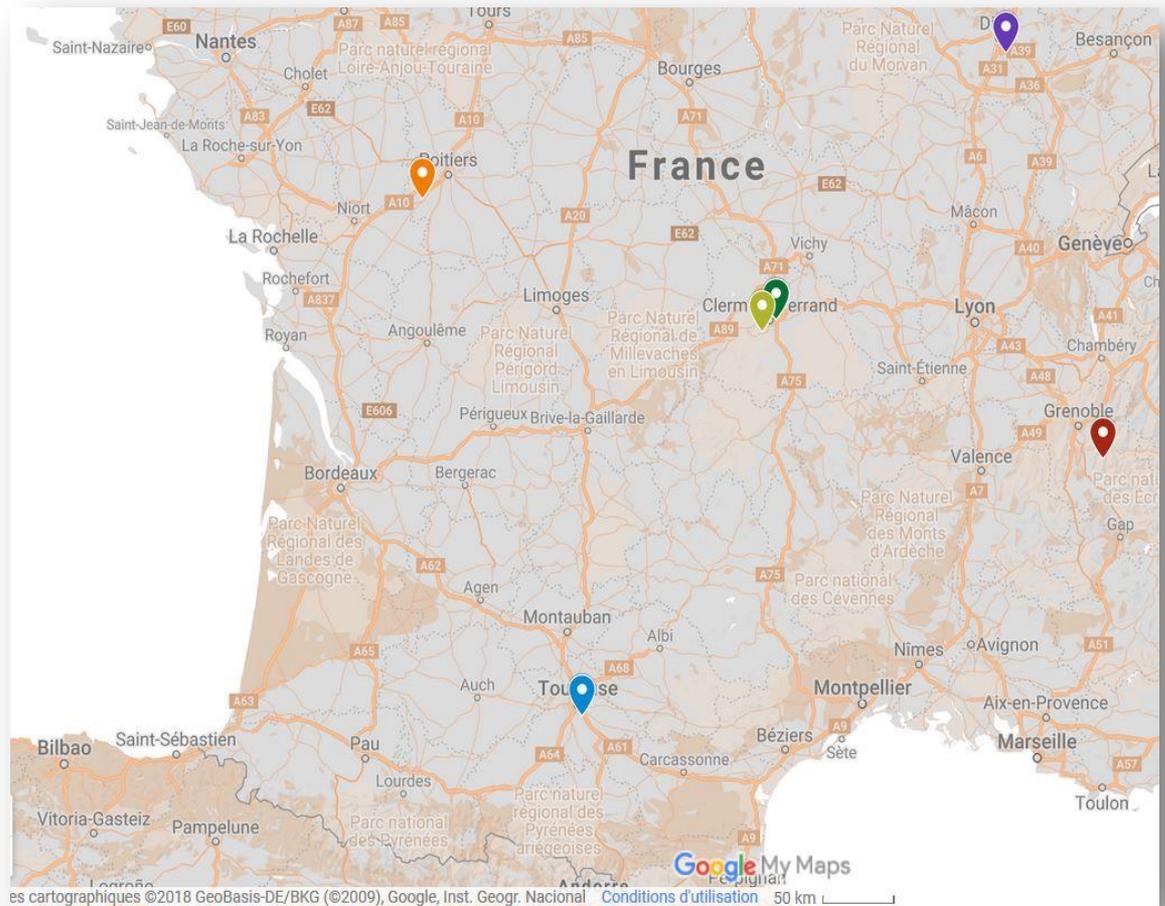


LES ECHANTILLONS

Provenance

- ❖ 1036 échantillons
- ❖ 5 sites français

Sites	Nb ech
 Auzeville-Tolosane	337
 Isère	48
 Époisses	158
 Lusignan	352
 Crouel  Theix } Clermont -Ferrand	141



LES ECHANTILLONS

Mesures au Laboratoire d'Analyses des Sols (LAS)

- ❖ Unité de service de l'INRA



- ➔ Acquisition des spectres PIR
- ➔ Mesure de 16 paramètres physico-chimiques

PROTOCOLE DE MESURE SPECTRALE

Au LAS

❖ Préparation des échantillons

Selon la norme **NF ISO 11464**

- séchage à l'air (température 35°C)
- émottage et tamisage à 2mm

Avant la prise de spectre

Nouveau séchage à l'air au moins 12h (température 35°C)

- Prise d'essai entre 50 et 100 g d'échantillon dans une clayette puis déposé dans une coupelle

❖ Prise de spectre

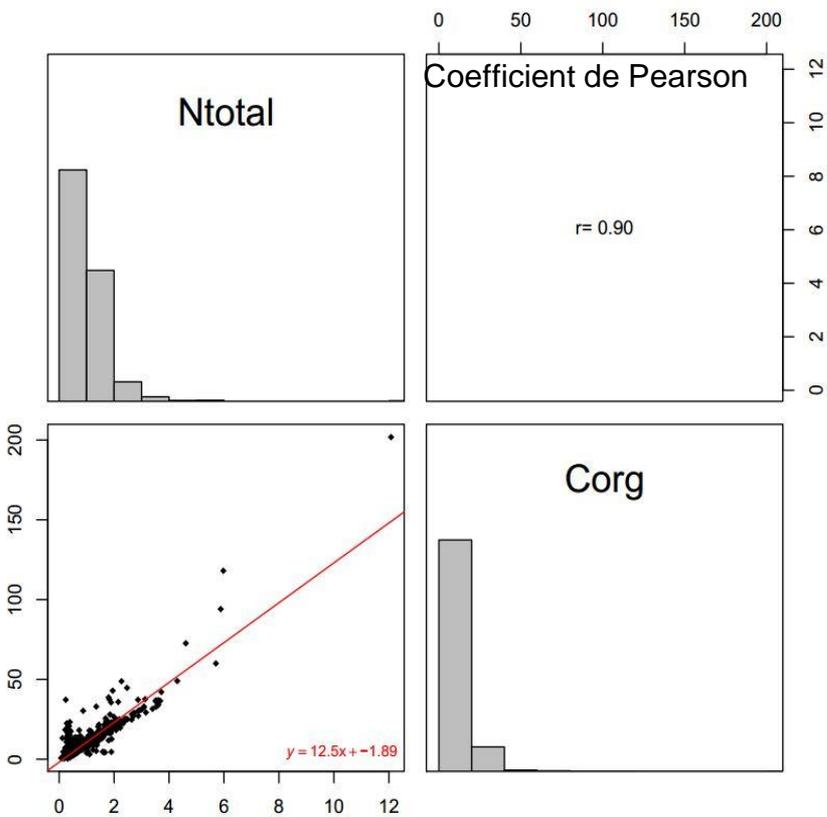
- Büchi NIRFLEX N500. Mode réflectance.
- Acquisition en 4000 et 10000 cm^{-1} (1000-2500nm)
- Résolution de 8 cm^{-1} (1501 valeurs)
- Un échantillon de référence est inséré en début et fin de séquence et tous les 10 échantillons « inconnus »



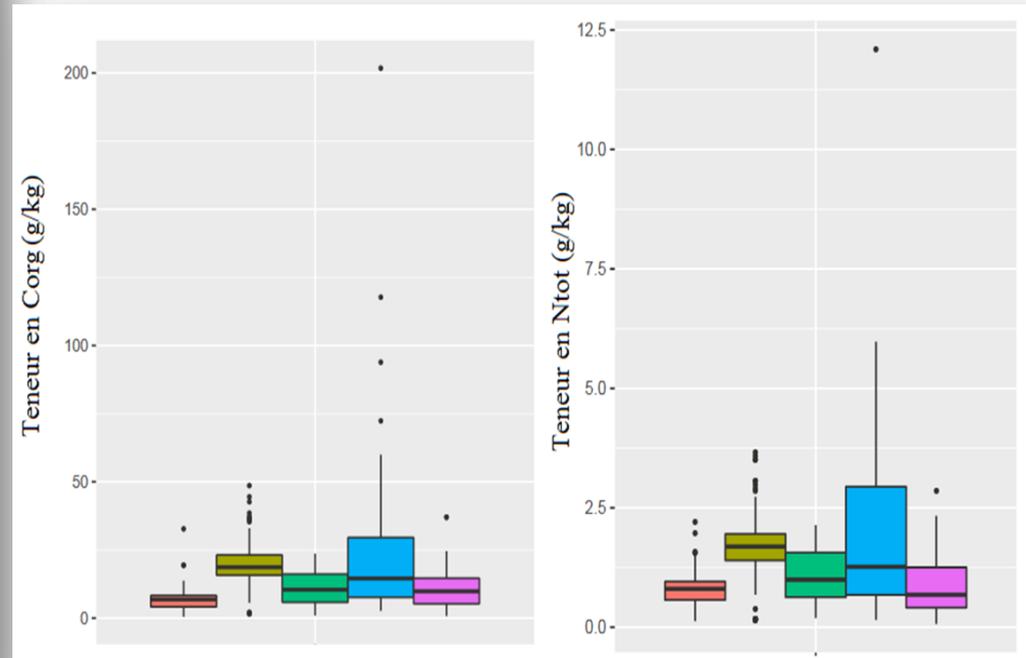
ANALYSES DE C_{org} et N_{tot} (g/Kg)

Propriétés des échantillons

Correlation plot



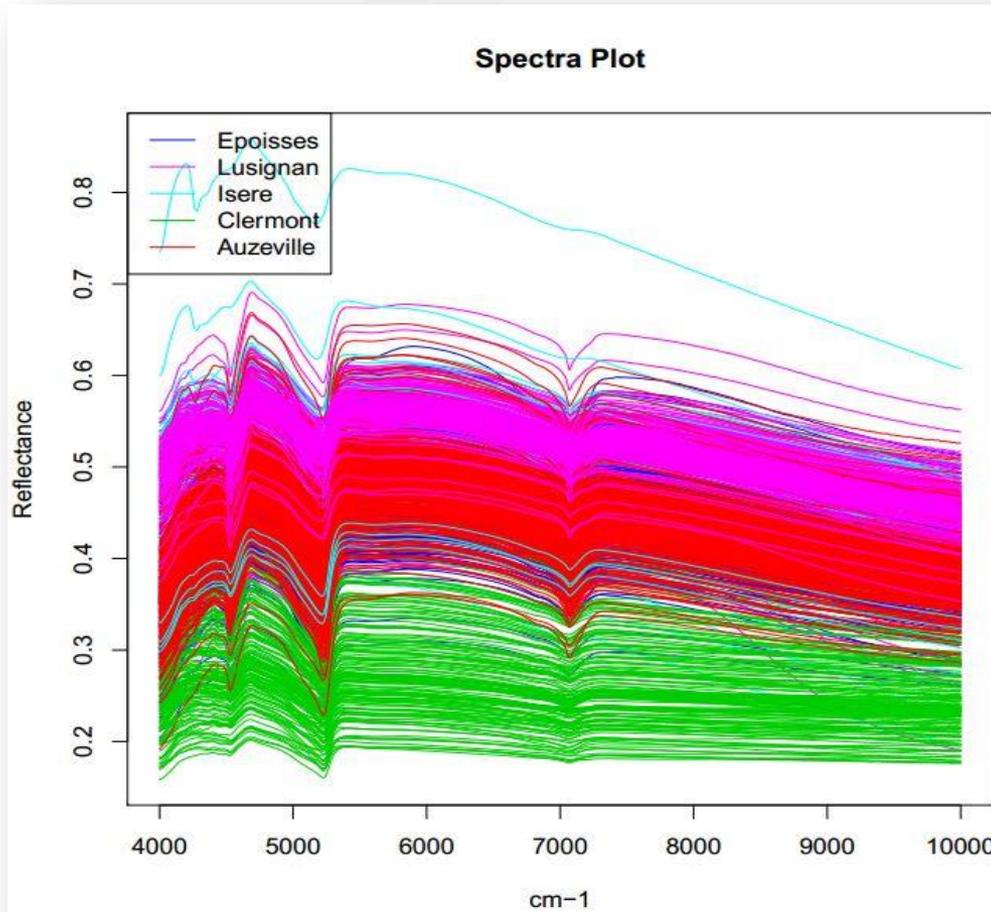
Teneurs observées en C_{org} et N_{tot} sur les différents sites étudiés



■ Auzeville
 ■ Clermont
 ■ Epoisses
 ■ Isere
 ■ Lusignan

ETUDE DES DONNEES SPECTRALES

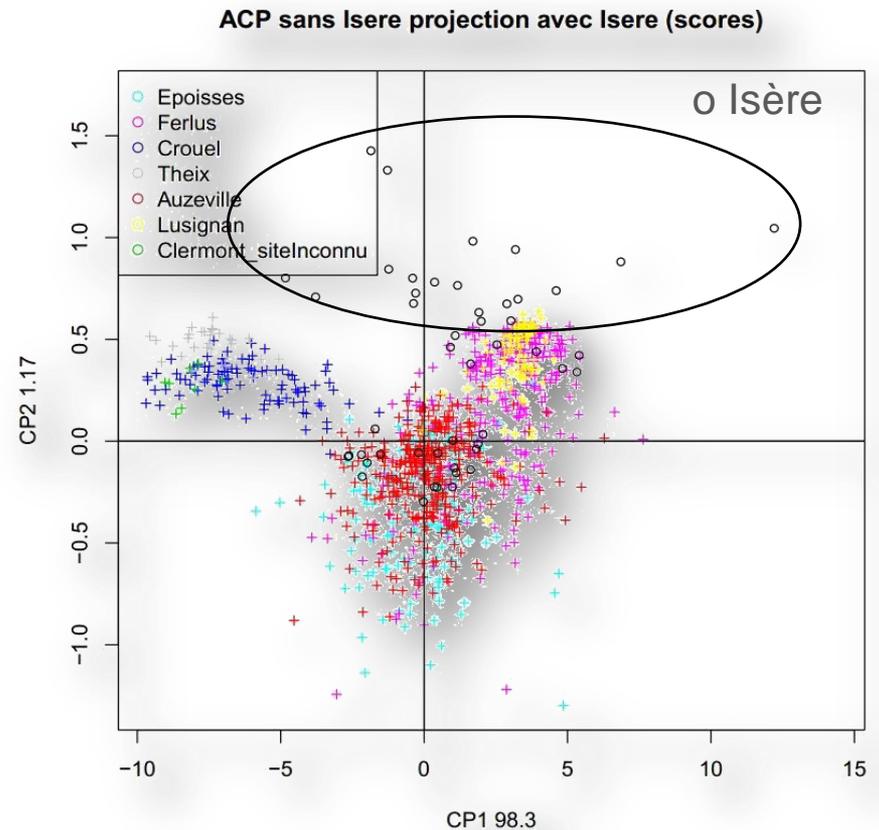
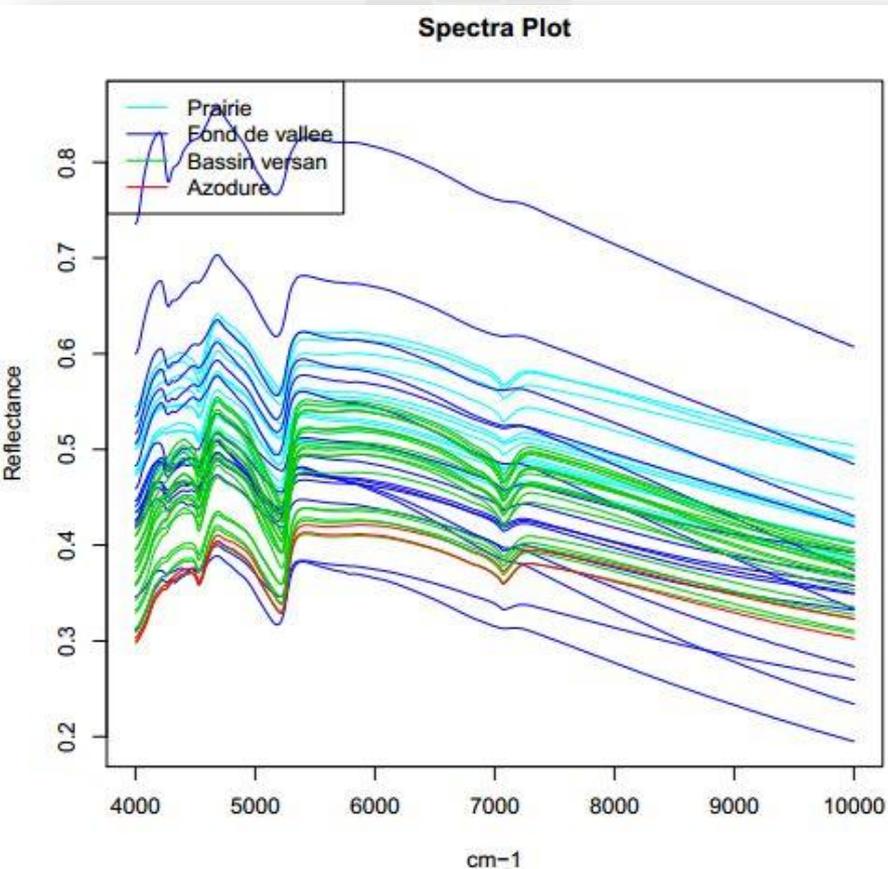
Description des 1036 spectres



- ❖ Spectres Bruts PIR
- ❖ Réflectance

ETUDE DES DONNEES SPECTRALES

Détection d'outliers - Spectres d'Isère



→ Outliers : suppression de 20 échantillons de fond de vallée de l'Isère, hors gamme spectrale et en C_{org} . Calibration sur 4 sites sauf Isère (988 échantillons) et validation sur jeu indépendant Isère (28 ech.)

DEVELOPPEMENT DES CALIBRATIONS

Sur les données d'étalonnage pour la prédiction en Corg (g/kg) – PLS-R

Prétraitement	Type	LV	R ² -CV	RMSECV	R ²
Sans	Réflectance	8	0.64	4.21	0.91
DSG(D1,P2,S11)	Réflectance	6	0.64	4.22	0.88
Detrend2	Réflectance	5	0.63	4.29	0.94
MSC	Réflectance	12	0.69	3.90	0.93
SNV	Réflectance	9	0.68	3.97	0.94
Normalize	Réflectance	9	0.67	4.04	0.96
Baseline	Réflectance	7	0.63	4.27	0.95
Sans	Absorbance	11	0.68	4.02	0.97
SNV	Absorbance	10	0.68	4.01	0.95
Normalize	Absorbance	8	0.64	4.26	0.90
DSG(D1,P2,S11)	Absorbance	8	0.66	4.11	0.94
MSC	Absorbance	7	0.67	4.07	0.96
Detrend	Absorbance	10	0.68	4.00	0.97

DEVELOPPEMENT DES CALIBRATIONS

Sur les données d'étalonnage pour la prédiction en Ntot (g/kg) – PLS-R

Prétraitement	Type	LV	R ² -CV	RMSECV	R ²
Sans	Réflectance	14	0.83	0.25	0.90
Sans	Absorbance	10	0.82	0.25	0.96
MSC	Réflectance	10	0.89	0.19	0.94
SNV	Réflectance	11	0.88	0.21	0.95
DSG(D1,P2,S11)	Réflectance	7	0.80	0.26	0.87
DSG(D1,P1,S11)	Réflectance	7	0.79	0.27	0.87
Baseline	Réflectance	15	0.84	0.24	0.91
Normalisation	Réflectance	11	0.84	0.24	0.95
Detrend2	Réflectance	7	0.79	0.27	0.9
MSC, DSG(D1,P2,S11)	Réflectance	10	0.88	0.20	0.94
MSC	Absorbance	8	0.88	0.20	0.95
DSG(D1,P2,S11)	Absorbance	8	0.85	0.23	0.96
SNV	Absorbance	9	0.87	0.21	0.96

DEVELOPPEMENT DES CALIBRATIONS

Validation des modèles sur des données externes (Isère) et comparaison aux résultats de la littérature.

Corg en g/kg (PLS-R)

RMSEC = 3.2 ; RMSECV = 4.02 ; r2 cal = 0.69
RMSEP = 3.07 ; r2 val = 0.67
RPD = 2.87

Ntot en g/kg (PLS-R)

RMSEC = 0.23 ; RMSECV = 0.24 ; r2 cal = 0.84
RMSEP = 0.33 ; r2 val = 0.82
RPD = 2.87

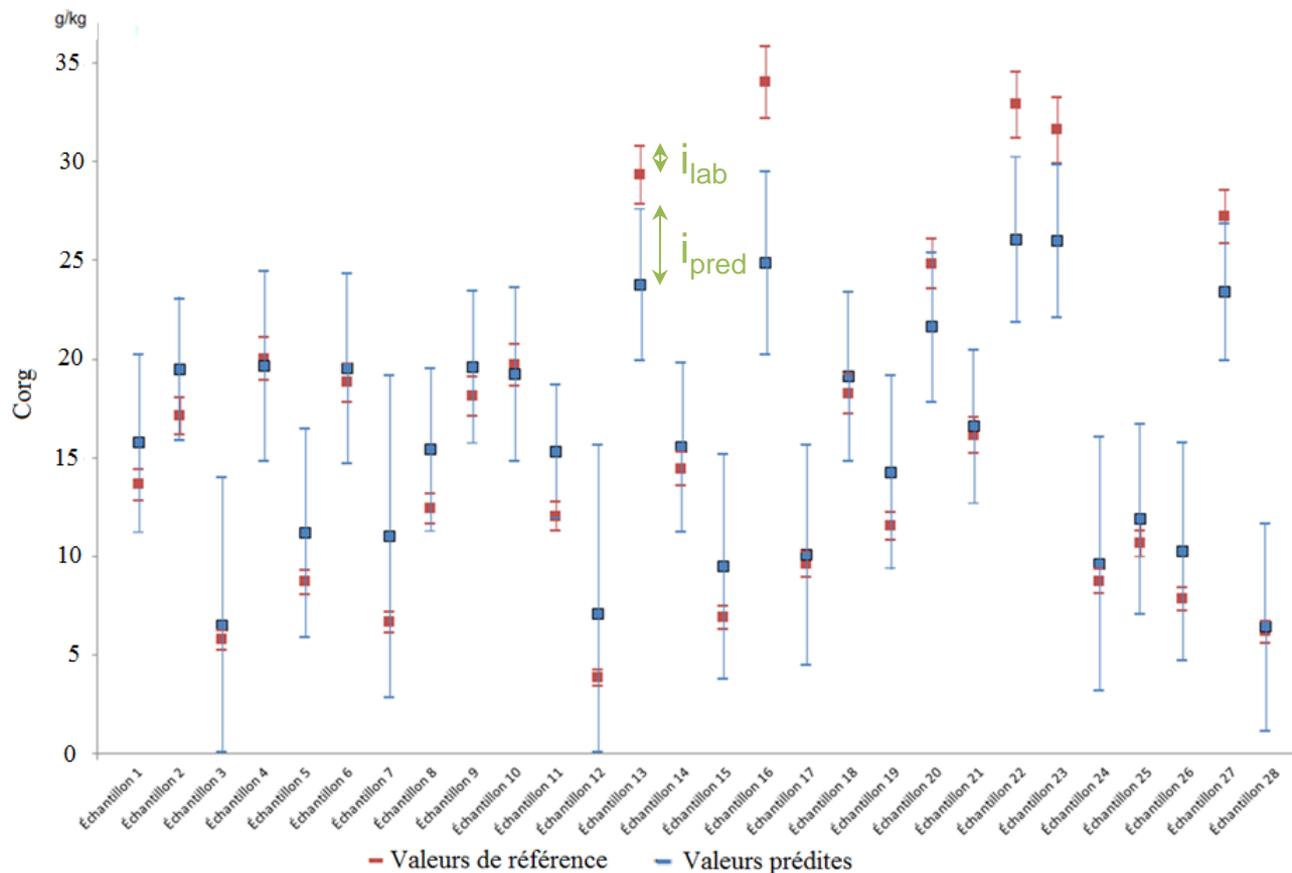
Résultats observés dans la littérature

Référence	Paramètre	RMSEP (g/kg)	RPD
Clairotte et al. (2016)	Corg	4.4	2.3
Stevens et al. (2013)	Corg	4	2.17
Gogé et al. (2012) PLS local	Corg	3,73 à 3,96	2,10 à 2,22

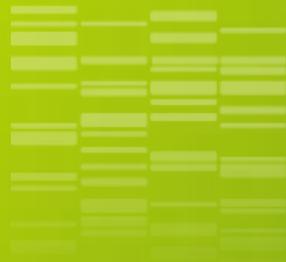
Référence	Paramètre	RMSEP (g/kg)	RPD
Brunet et al. (2007)	Ntot	0.07-0.41	1.8-3.2

DEVELOPPEMENT DES CALIBRATIONS

Validation par la détermination des incertitudes de prédiction sur les échantillons d'Isère (calcul Unscrambler)



- ❖ Incertitudes des **valeurs prédites** > Incertitudes des **valeurs de référence**
- ❖ La SPIR donne un ordre de grandeur sur les teneurs



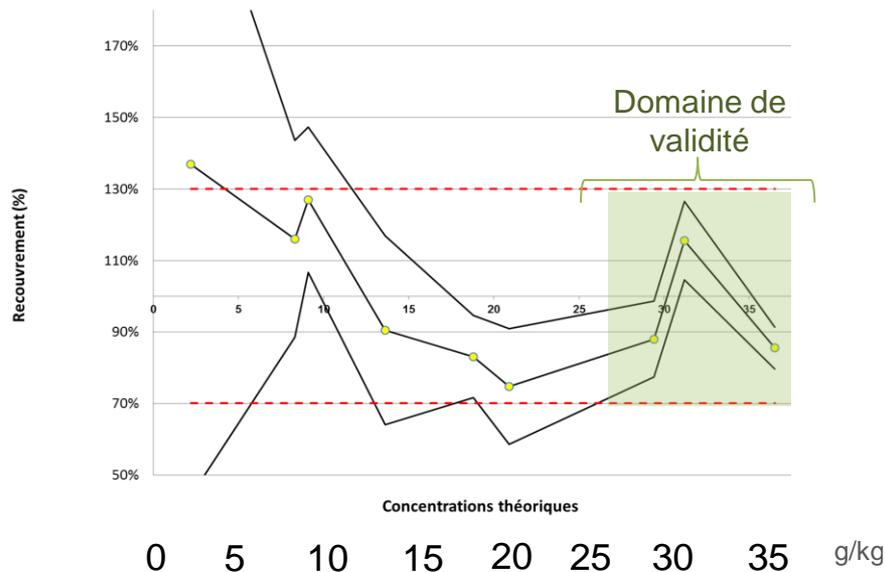
Validation par profil d'exactitude

(Approche détaillée dans CheMOOCs 2/2...)

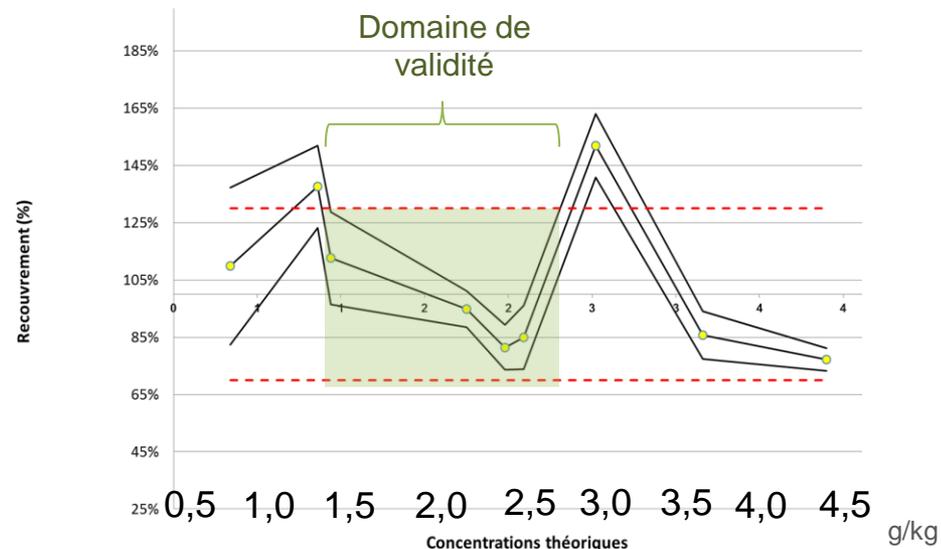
VALIDATION

à l'aide du profil d'exactitude

Profil d'exactitude



Profil d'exactitude



- Recouvrement (justesse) (%)
- Limite d'acceptabilité basse (%)
- Limite d'acceptabilité haute (%)
- Limite basse tolérance (%)
- Limite haute tolérance (%)

Profil d'exactitude pour le modèle de prédiction de la teneur en C_{org}

Profil d'exactitude pour le modèle de prédiction de la teneur en N_{tot}

Développement de calibrations à partir de mesures spectrales acquises au champ



PROTOCOLE DE MESURE SPECTRALE

Au Champ

Spectromètre ASD LabSpec 2500

- ❖ Mode Absorbance
- ❖ Acquisition : entre 250 et 2500 nm (4000 et 40000 cm^{-1})
- ❖ Résolution : 3 nm
- ❖ Mesures sur carotte ou sur mottes

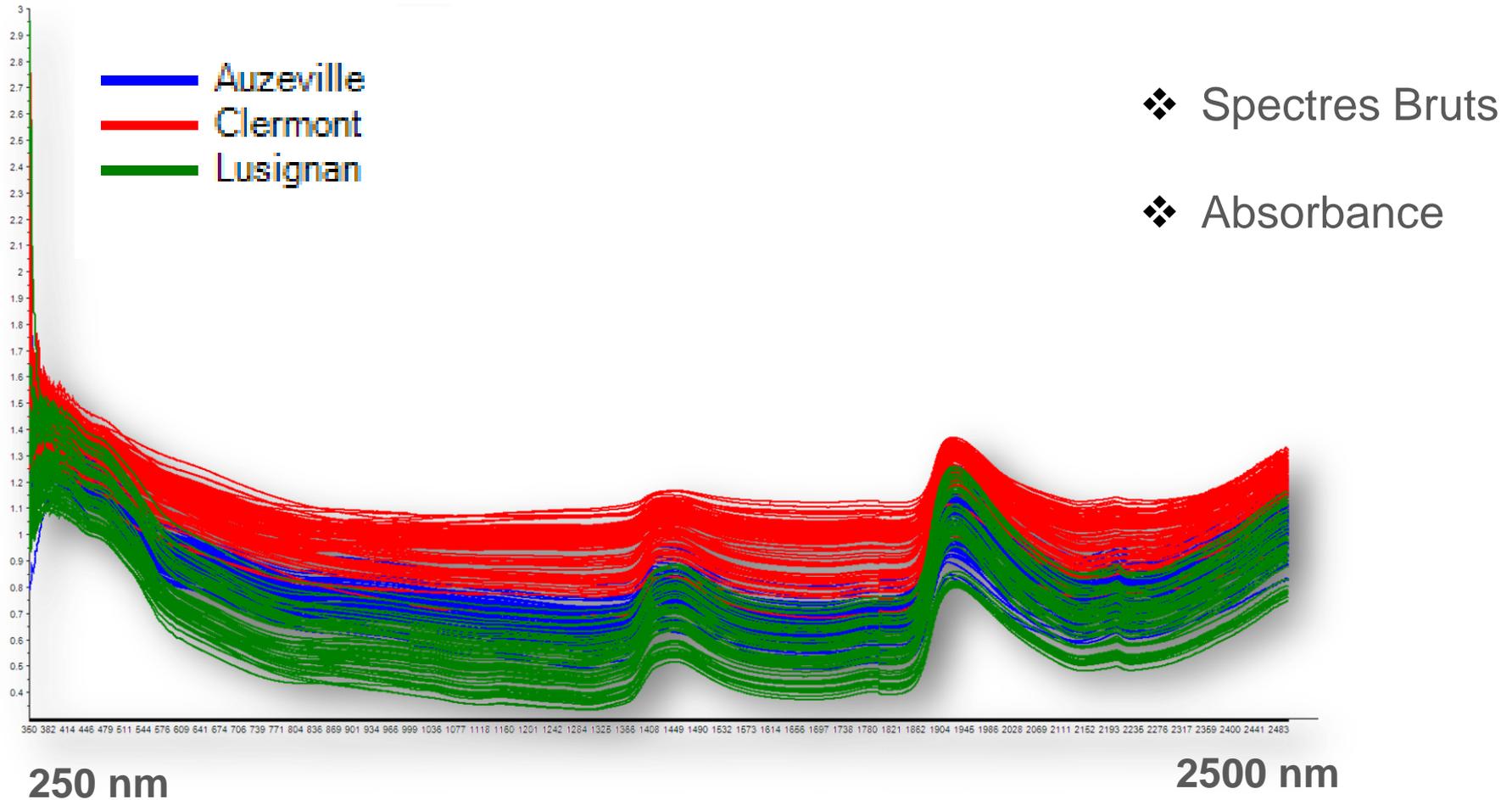
- ❖ 250 échantillons
- ❖ 3 sites français



Sites	Nb ech
 Auzeville-Tolosane	96
 Lusignan	62
 Crouel	} Clermont -Ferrand 92
 Theix	

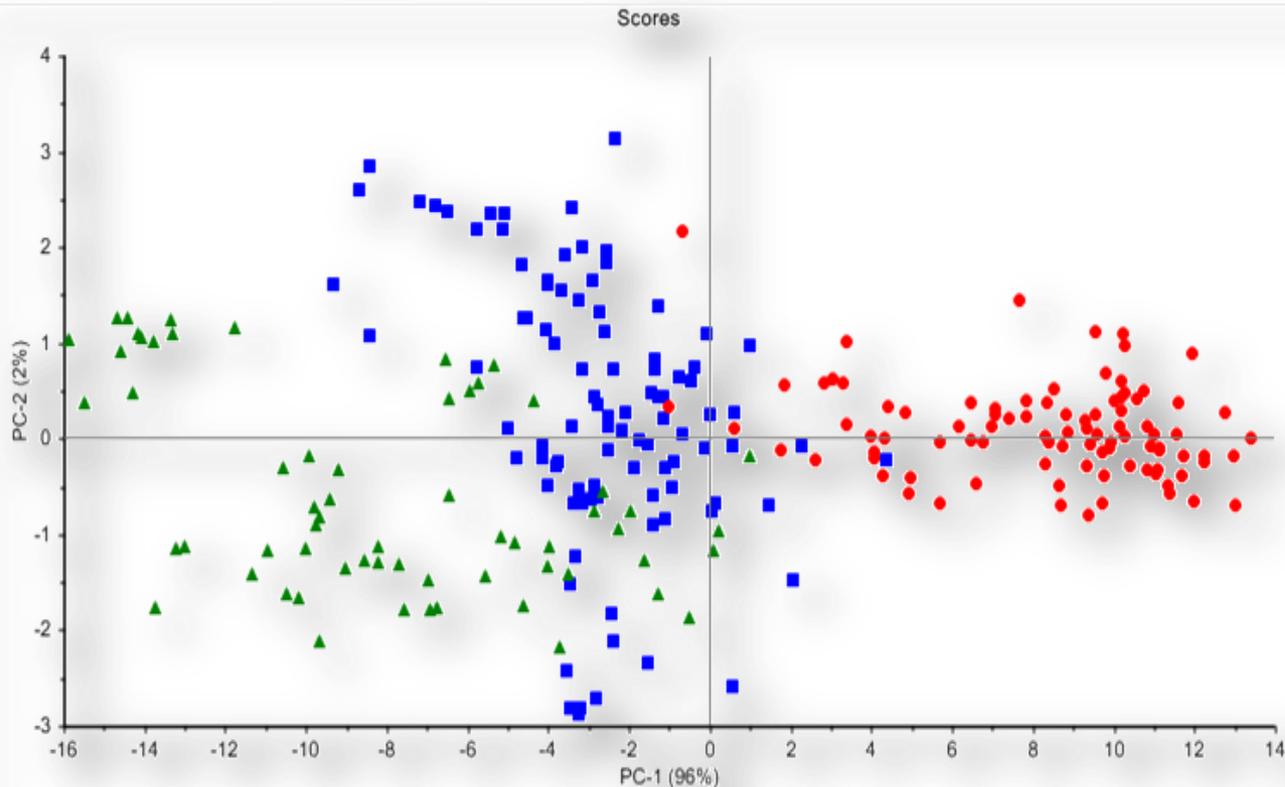
ETUDE DES DONNEES SPECTRALES

Description des 250 spectres



Développement d'étalonnages terrain

Choix du jeu de calibration et du jeu de validation



- Auzeville
- Clermont
- ▲ Lusignan

- **Calibration** sur 2 sites
Clermont et Lusignan
(158 ech.)
- **Validation** sur 1 site
Auzeville (96 ech.)

Représentation des scores de l'ACP des spectres :
PC2(2%) en fonction de PC1 (96%)

DEVELOPPEMENT DES CALIBRATIONS

Comparatif de différents prétraitements et jeux de validation

Jeu de validation d'Auzeville

Prétraitement	Type	Paramètre	LV	R ² -CV	RMSECV	RMSEP
SNV	Absorbance	Corg	11	0.68	4.54	91
SNV	Absorbance	Ntot	11	0.78	0.28	10

- Résultats de prédiction sur le jeu indépendant non satisfaisant pour C_{org} et N_{tot}
- Causes possibles :
 - différence de protocole d'acquisition des spectres sur le terrain
 - base de données terrain ne comportant que peu d'échantillons

Conclusions et perspectives



CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Les performances en prédiction des modèles dépendent des jeux de données disponibles.

- Poursuivre l'élargissement de la base de données (par ex. RMQS)
- Publication des données via un data paper sur les données et un data paper sur les modèles.
- Elargissement de la communauté de SpectraSol

Merci pour votre attention

CheMOOCs

CheMoocs 1/2 méthodes non supervisées
actuellement sur FUN-MOOC.fr : 1500 inscrits



- CheMoocs 2/2 méthodes supervisées début 4 février 2019 sur FUN : inscrivez-vous maintenant !

- Conférence de Chimiométrie à SupAgro-Montpellier du **30 janvier au 1er février 2019**



- ChemHouse

