2003-2019
évolutions des applications de spectroscopie infrarouge en science du sol

Bernard Barthès
UMR Eco&Sols (CIRAD, INRA, IRD, Montpellier SupAgro)
Montpellier

20e Rencontres HélioSPIR, 14-15/10/2019

Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE

Spécificités des sols

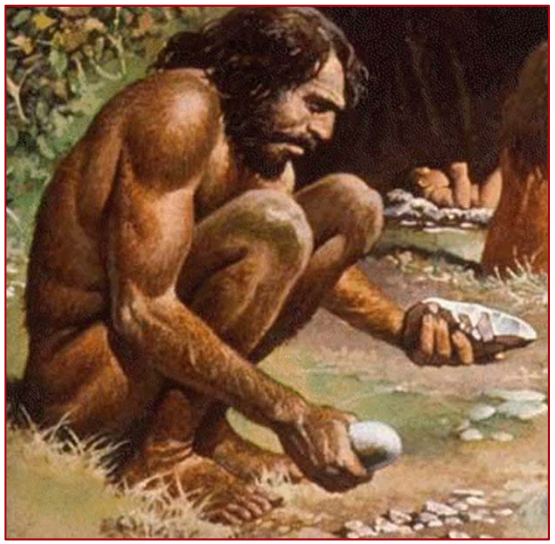
"peu contraints par l'ADN"

- **Composition variable** (de 90% SiO_2 à 90% $CaCO_3$) donc **populations hétérogènes**
- Constituants d'intérêt souvent **peu concentrés** (Corg, N…), dans matrice variable

⇒ Prédictions moins précises que sur produits végétaux

- Set de validation **indépendante bien représenté** par le set d'étalonnage : rarement trivial

Jusqu'en 2003

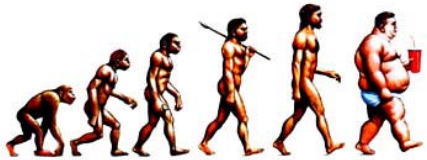


assez basique

- Surtout NIRS* au laboratoire, avec PLSR (voire PCR)
- Physico-chimie des sols
- Etalonnages localisés voire régionaux à quelques exceptions près
- Problèmes validation indépendante / étalonnage représentatif

* en minéralogie, traditionnellement, reconnaissance de pics en moyen IR

Depuis 2003…



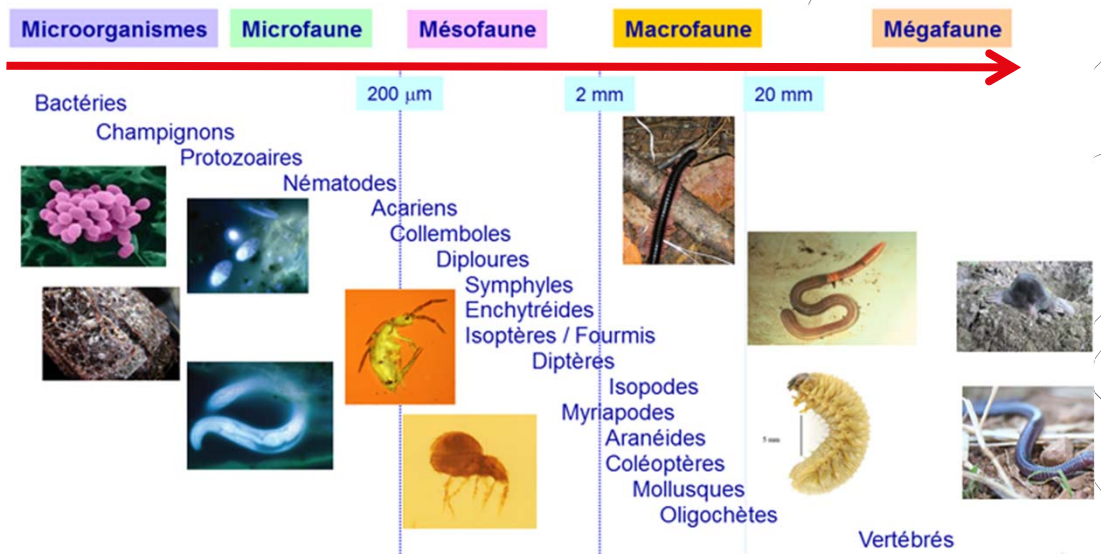
Depuis 2003…

une gamme élargie de variables

- Toutes les variables physico-chimiques usuelles

  Teneurs en C, N, K, P, Ca, Mg, Na, Fe, Al (tot. ou extr.), argile, pH, conductivité, agrégation

- Ruée sur les variables biologiques
  - Activités biologiques : respiration, enzymes (βglucosidase, phosphatases…), etc.
  - Biomasse et abondance des bactéries, champignons, protozoaires, nématodes, etc.
  - Diversité (indices)



Depuis 2003…

étalonnages élargis

- Bases d'étalonnages nationales et au-delà

Depuis 2003…

étalonnages élargis

Geoderma 276 (2016) 41–52

Contents lists available at ScienceDirect

Geoderma

journal homepage: www.elsevier.com/locate/geoderma

National calibration of soil organic carbon concentration using diffuse infrared reflectance spectroscopy

Michaël Clairotte [a,1], Clovis Grinand [b,c], Ernest Kouakoua [b], Aurélie Thébault [b,2], Nicolas P.A. Saby [d], Martial Bernoux [b], Bernard G. Barthès [b,*]

Depuis 2003…

étalonnages élargis

Geoderma 276 (2016) 41–52

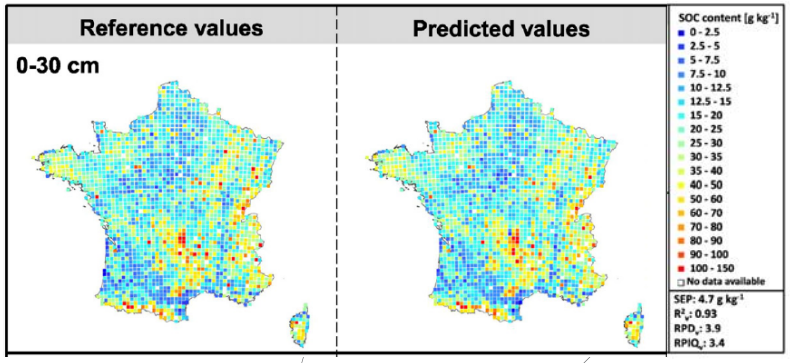
Contents lists available at ScienceDirect

Geoderma

journal homepage: www.elsevier.com/locate/geoderma

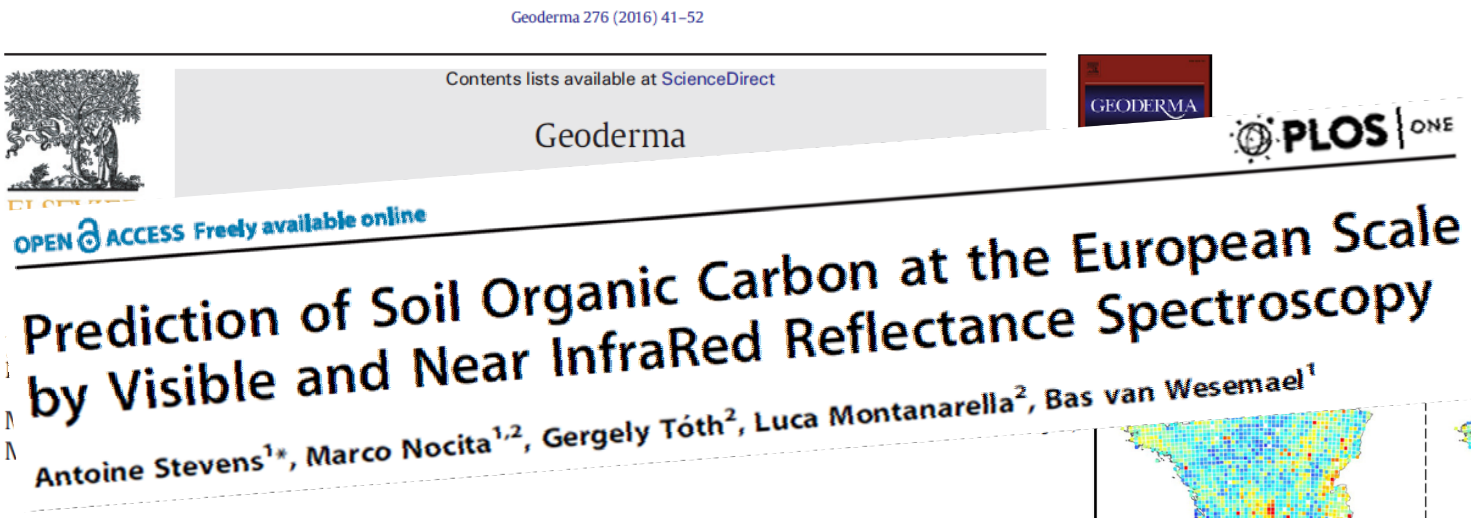
National calibration of soil organic carbon concentration using diffuse infrared reflectance spectroscopy

Michaël Clairotte [a,1], Clovis Grinand [b,c], Ernest Kouakoua [b], Aurélie Thébault [b,2], Nicolas P.A. Saby [d], Martial Bernoux [b], Bernard G. Barthès [b,*]



Depuis 2003…

étalonnages élargis


Geoderma 276 (2016) 41–52

Contents lists available at ScienceDirect

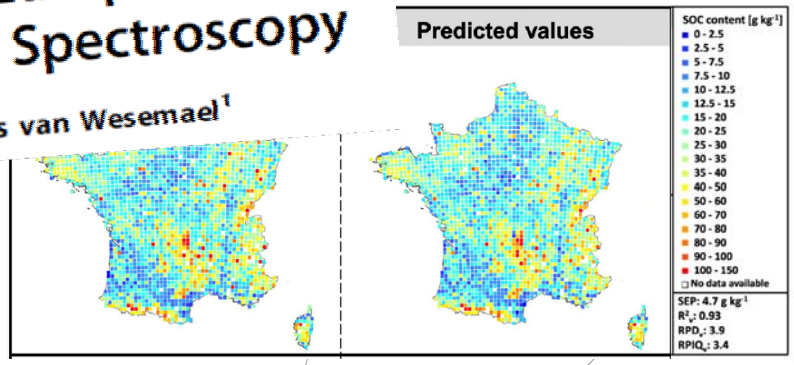
Geoderma

OPEN ACCESS Freely available online

PLOS | ONE

Prediction of Soil Organic Carbon at the European Scale by Visible and Near InfraRed Reflectance Spectroscopy

Antoine Stevens[1]*, Marco Nocita[1,2], Gergely Tóth[2], Luca Montanarella[2], Bas van Wesemael[1]



Depuis 2003…

étalonna

Geoderma 276 (2016) 41–52

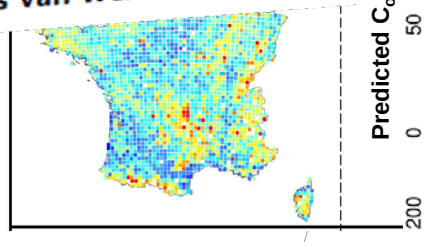
Contents lists available at ScienceDirect

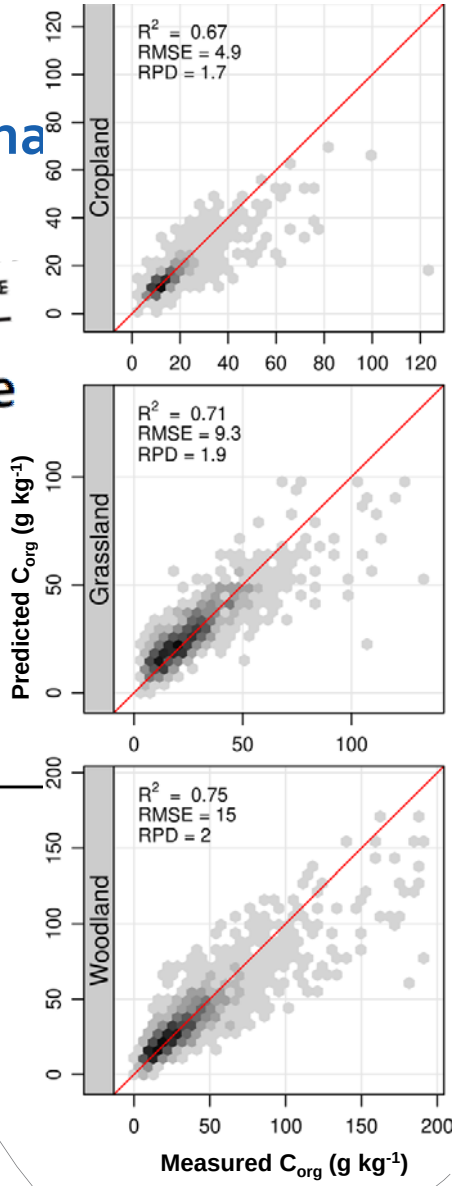
Geoderma

OPEN ACCESS Freely available online

Prediction of Soil Organic Carbon at the European Scale by Visible and Near InfraRed Reflectance Spectroscopy

Antoine Stevens[1]*, Marco Nocita[1,2], Gergely Tóth[2], Luca Montanarella[2], Bas van Wesemael[1]





Depuis 2003…

étalonna

Geoderma 276 (2016) 41–52

Contents lists available at ScienceDirect

Geoderma

OPEN ACCESS Freely available online

…ation of Soil Organic Carbon at the European Scale

…Spectroscopy

Earth-Science Reviews 155 (2016) 198–230

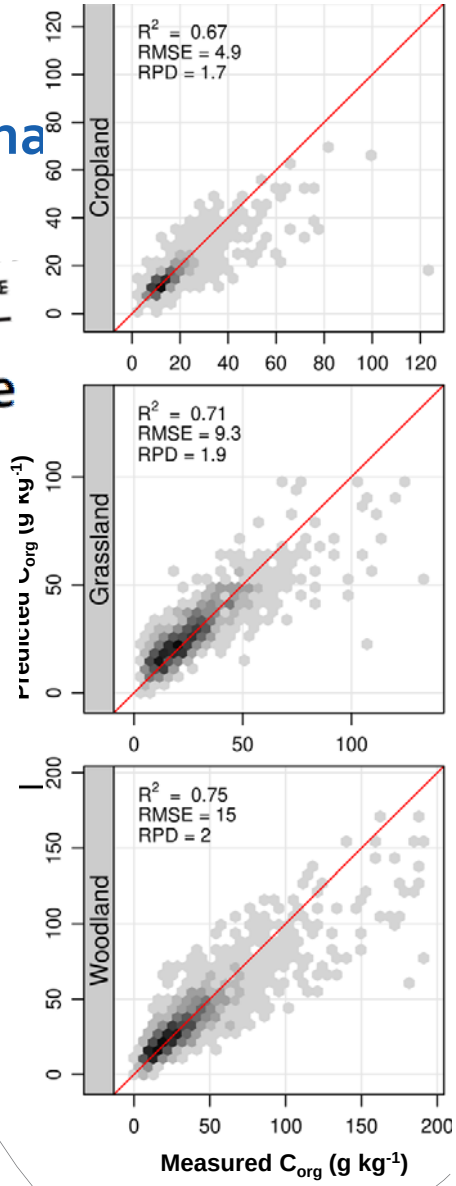
Contents lists available at ScienceDirect

Earth-Science Reviews

journal homepage: www.elsevier.com/locate/earscirev

A global spectral library to characterize the world's soil

R.A. Viscarra Rossel [a,*], T. Behrens [b], E. Ben-Dor [c], D.J. Brown [d], J.A.M. Demattê [e], K.D. Shepherd [f], Z. Shi [g], B. Stenberg [h], A. Stevens [i], V. Adamchuk [j], H. Aïchi [k], B.G. Barthès [l], H.M. Bartholomeus [m], A.D. Bayer [n], M. Bernoux [l], K. Böttcher [o,p], L. Brodský [q], C.W. Du [r], A. Chappell [a], Y. Fouad [s], V. Genot [t], C. Gomez [u], S. Grunwald [v], A. Gubler [w], C. Guerrero [x], C.B. Hedley [y], M. Knadel [z], H.J.M. Morrás [aa], M. Nocita [ab], L. Ramirez-Lopez [ac], P. Roudier [y], E.M. Rufasto Campos [ad], P. Sanborn [ae], V.M. Sellitto [af], K.A. Sudduth [ag], B.G. Rawlins [ah], C. Walter [s], L.A. Winowiecki [f], S.Y. Hong [ai], W. Ji [a,g,j]



Depuis 2003…

étalonna

Geoderma 276 (2016) 41–52

Contents lists available at ScienceDirect

Geoderma

OPEN ACCESS Freely available online

Earth-Science Reviews 155 (2016) 198–230

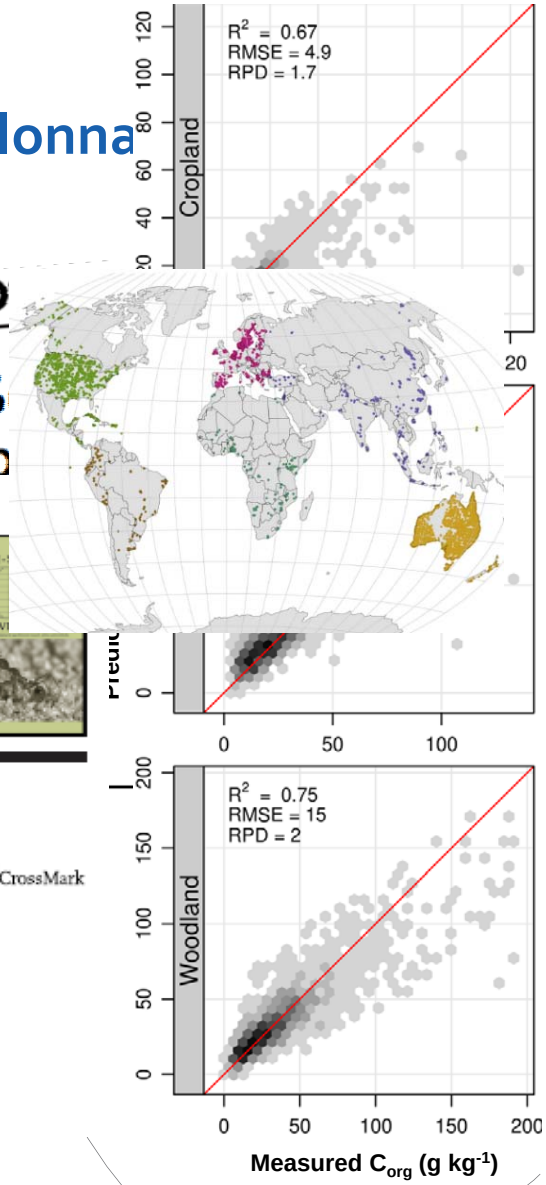
Contents lists available at ScienceDirect

Earth-Science Reviews

journal homepage: www.elsevier.com/locate/earscirev

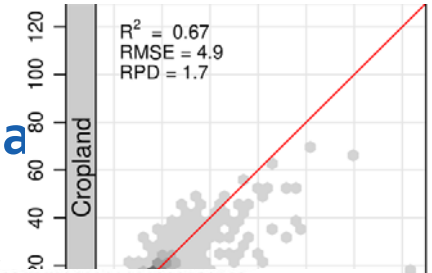
A global spectral library to characterize the world's soil

R.A. Viscarra Rossel [a,*], T. Behrens [b], E. Ben-Dor [c], D.J. Brown [d], J.A.M. Demattê [e], K.D. Shepherd [f], Z. Shi [g], B. Stenberg [h], A. Stevens [i], V. Adamchuk [j], H. Aïchi [k], B.G. Barthès [l], H.M. Bartholomeus [m], A.D. Bayer [n], M. Bernoux [l], K. Böttcher [o,p], L. Brodský [q], C.W. Du [r], A. Chappell [a], Y. Fouad [s], V. Genot [t], C. Gomez [u], S. Grunwald [v], A. Gubler [w], C. Guerrero [x], C.B. Hedley [y], M. Knadel [z], H.J.M. Morrás [aa], M. Nocita [ab], L. Ramirez-Lopez [ac], P. Roudier [y], E.M. Rufasto Campos [ad], P. Sanborn [ae], V.M. Sellitto [af], K.A. Sudduth [ag], B.G. Rawlins [ah], C. Walter [s], L.A. Winowiecki [f], S.Y. Hong [ai], W. Ji [a,g,j]



Depuis 2003…

étalonna



Geoderma 276 (2016) 41–52

Contents lists available at ScienceDirect

Geoderma

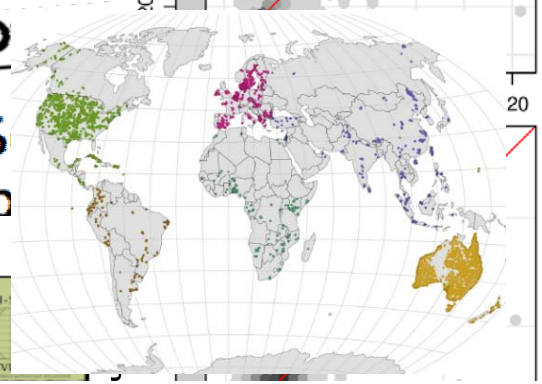
OPEN ACCESS Freely available online

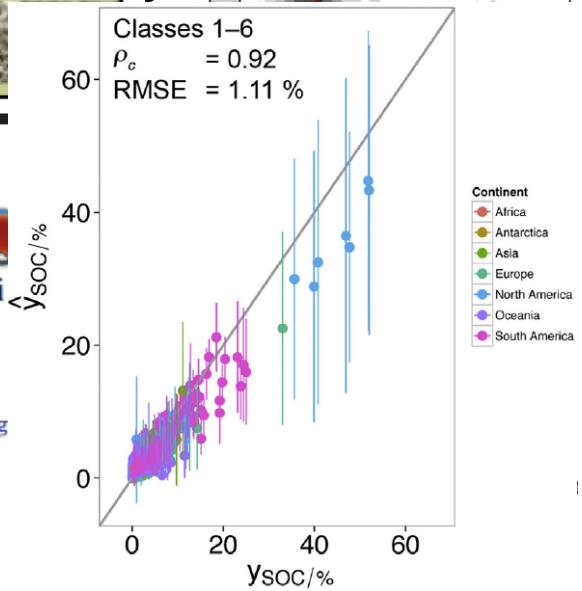
Earth-Science Reviews 155 (2016) 198–230

Contents lists available at ScienceDirect

Earth-Science Reviews

journal homepage: www.elsevier.com/locate/earscirev





A global spectral library to characterize the world's soil

R.A. Viscarra Rossel [a,*], T. Behrens [b], E. Ben-Dor [c], D.J. Brown [d], J.A.M. Demattê [e], K.D. Shepherd [f], Z. Shi [g], B. Stenberg [h], A. Stevens [i], V. Adamchuk [j], H. Aïchi [k], B.G. Barthès [l], H.M. Bartholomeus [m], A.D. Bayer [n], M. Bernoux [l], K. Böttcher [o,p], L. Brodský [q], C.W. Du [r], A. Chappell [a], Y. Fouad [s], V. Genot [t], C. Gomez [u], S. Grunwald [v], A. Gubler [w], C. Guerrero [x], C.B. Hedley [y], M. Knadel [z], H.J.M. Morrás [aa], M. Nocita [ab], L. Ramirez-Lopez [ac], P. Roudier [y], E.M. Rufasto Campos [ad], P. Sanborn [ae], V.M. Sellitto [af], K.A. Sudduth [ag], B.G. Rawlins [ah], C. Walter [s], L.A. Winowiecki [f], S.Y. Hong [ai], W. Ji [a,g,j]

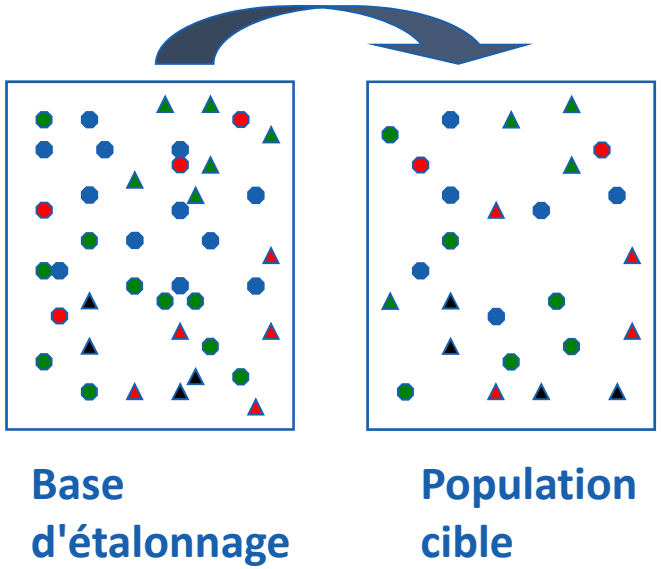
Depuis 2003…

étalonnages élargis

- Bases d'étalonnages nationales et au-delà
- Optimiser l'utilisation de ces librairies
  - Étalonnages locaux
  - Spiking

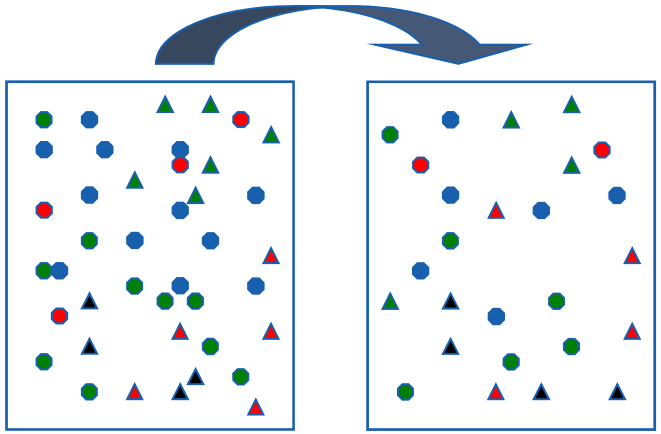
Etalonnage global vs. local

- **Etalonnage global (usuel)** :
  un étalonnage unique est construit et appliqué à tous les échantillons cibles



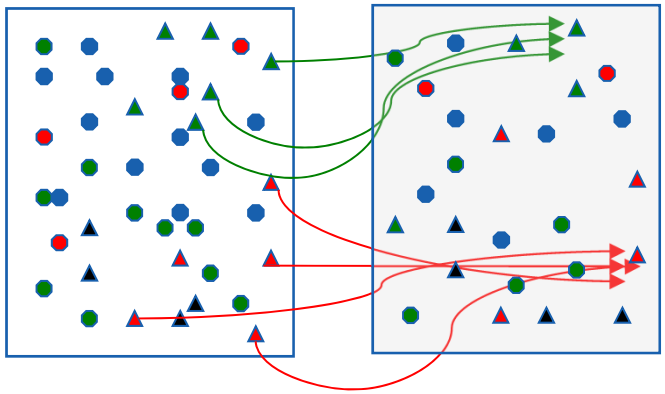
Etalonnage global vs. local

- **Etalonnage global (usuel)** :
  un étalonnage unique est construit et appliqué à tous les échantillons cibles



Base d'étalonnage **Population cible**

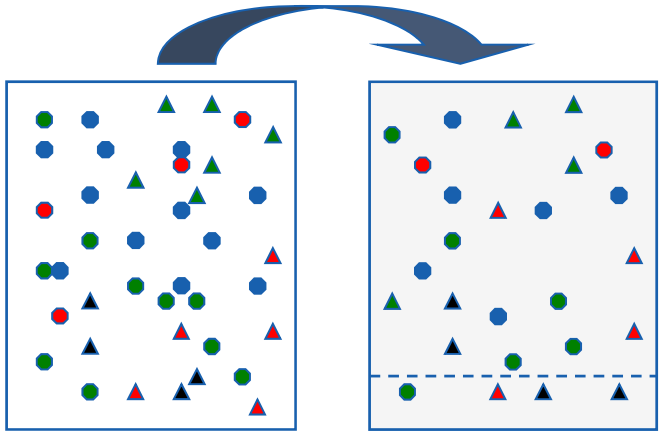
- **Etalonnage local**
  chaque échantillon cible est prédit à partir des étalons qui sont ses voisins spectraux



- **Paramétrage**
  - seuil de voisinage (R ou H)
  - nombres min et max de voisins
    [pas de prédiction si trop peu de voisins]

Spiking (ensemencement)

- On sélectionne
  des échantillons cibles
  si possible représentatifs



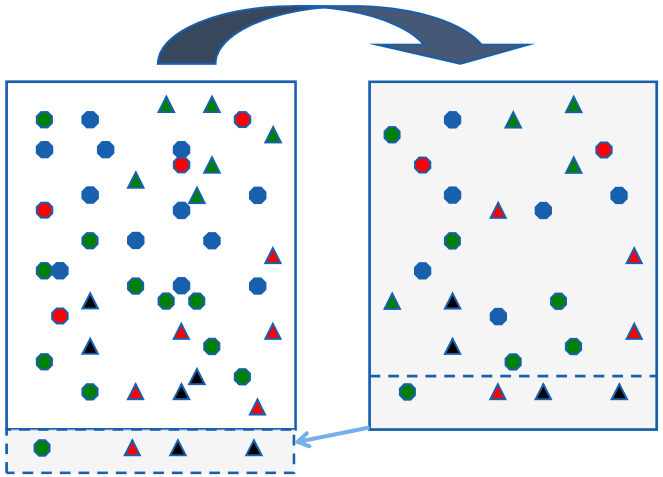
Base d'étalonnage

Population cible

Spiking (ensemencement)

- On sélectionne
  des échantillons cibles
  si possible représentatifs

- Ces échantillons viennent
  enrichir la base d'étalonnage



Base d'étalonnage enrichie

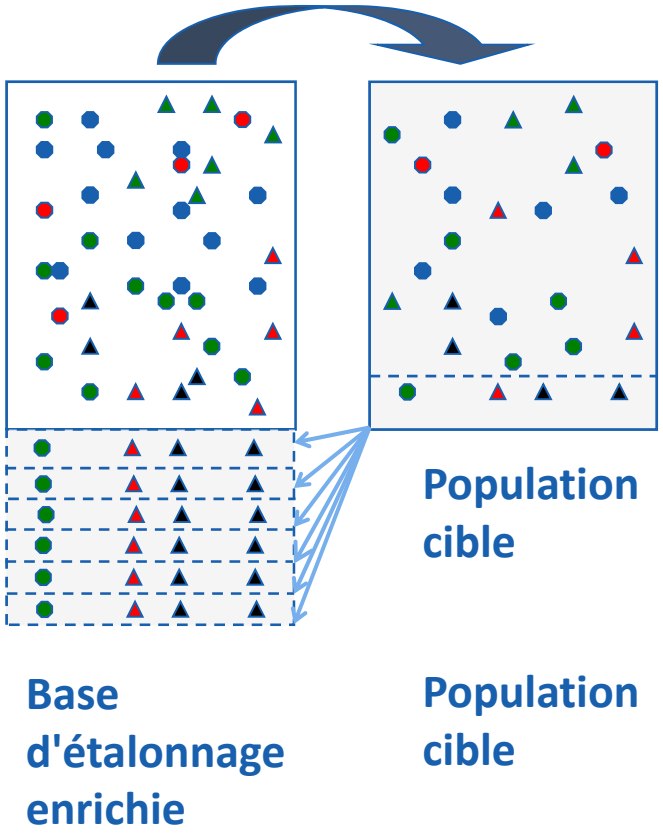
Population cible

Spiking (ensemencement)

- On sélectionne
  des échantillons cibles
  si possible représentatifs

- Ces échantillons viennent
  enrichir la base d'étalonnage
- Ces échantillons sont **surpondérés**
  (éventuellement)

- Paramétrage
  - Nombre d'échantillons de spiking
  - Poids des échantillons de spiking



Depuis 2003…

Chimiométrie

- Arbres de régression, forêts aléatoires, réseau de neurones, machines à vecteurs de support, algorithmes génétiques, ondelettes… *back propagation neural deep learning (!)…*
- Etalonnages locaux

Depuis 2003…

Chimiométrie

ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 91 (2008) 94 – 98

Chemometrics and intelligent laboratory systems

www.elsevier.com/locate/chemolab

Soil parameter quantification by NIRS as a Chemometric challenge at '*Chimiométrie* 2006'

Juan Antonio Fernández Pierna*, Pierre Dardenne

Depuis 2003…

Chimiométrie

ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 91 (2008) 94 – 98

Chemometrics and intelligent laboratory systems

www.elsevier.com/locate/chemolab

Soil parameter quantification by NIRS as a Chemometric challenge at '*Chimiométrie* 2006'

Juan Antonio Fernández Pierna*, Pierre Dardenne

Variable	R^2 test					
	PLS	Back propagation neural network	LS-SVM	B-Splines + Radial basis function networks	PLS locale	PLS locale
N	0.56	0.63	**0.82**	0.44	**0.77**	**0.80**
C_{org}	0.50	0.77	**0.89**	0.53	**0.87**	**0.92**
CEC*	0.51	0.51	**0.73**	0.35	**0.71**	**0.75**
moyenne	0.52	0.64	**0.81**	0.44	**0.78**	**0.82**

*capacité d'échange cationique (cmol(+) kg-1)

Depuis 2003…

Spectroscopie de terrain

Depuis 2003…

Spectroscopie de terrain

depuis la surface

sur sol remanié

sur sol
non remanié

sur petites mottes

au labo
sur sol séché à l'air < 2 mm

Depuis 2003…

Spectroscopie de terrain

depuis la surface

sur sol remanié

Mais les étalonnages ?

sur sol
non remanié

sur petites mottes

au labo
sur sol séché à l'air < 2 mm

Depuis 2003…

depuis la surface

sur sol remanié

Spectroscopie de terrain

sur sol
non remanié

sur petites mottes

Mais les étalo ages ?

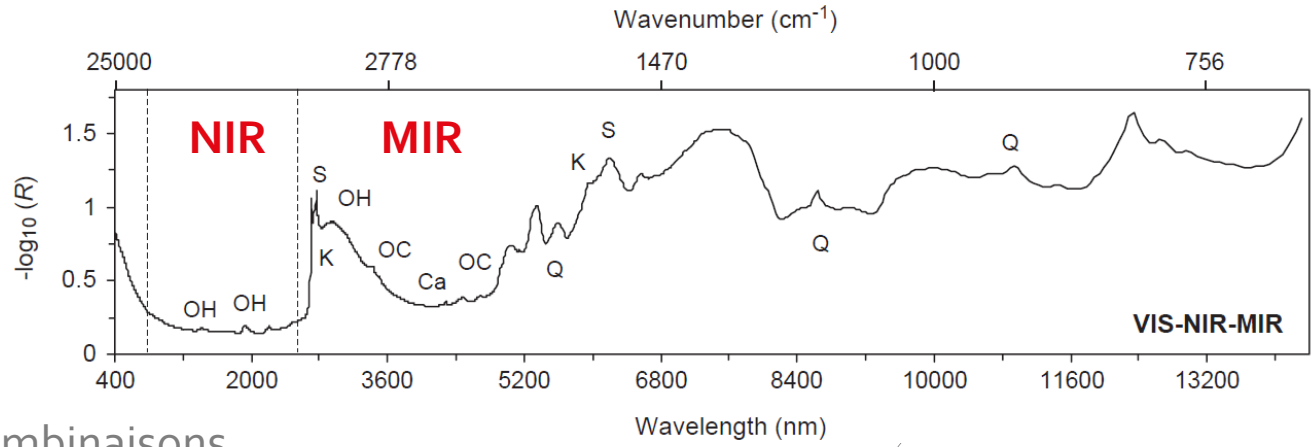
Convertir
les spectres de terrain
en spectres de labo ?

au labo
sur sol séché à l'air < 2 mm

Depuis 2003…

Moyen infrarouge

- **MIR**
  - bandes nettes
  - fondamentales
  - forte absorption
- **NIR**
  - chevauchements
  - harmoniques et combinaisons
  - faible absorption

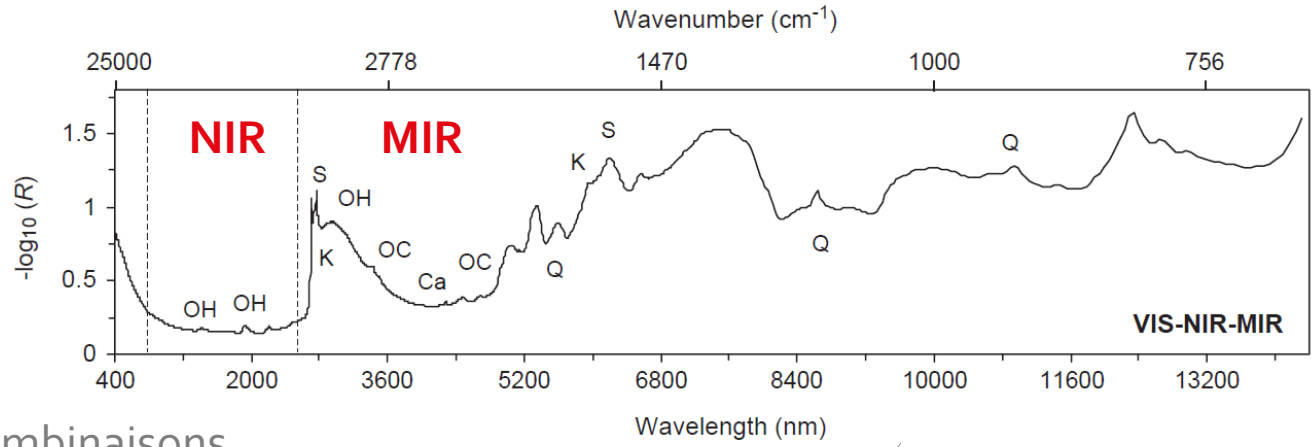


- **Prédictions plus précises avec MIRS qu'avec NIRS**

Depuis 2003…

Moyen infrarouge

- **MIR**
  - bandes nettes
  - fondamentales
  - forte absorption
- **NIR**
  - chevauchements
  - harmoniques et combinaisons
  - faible absorption



- **Prédictions plus précises avec MIRS qu'avec NIRS … sauf pour sols des régions chaudes**

Depuis 2003…

Moyen infrarouge

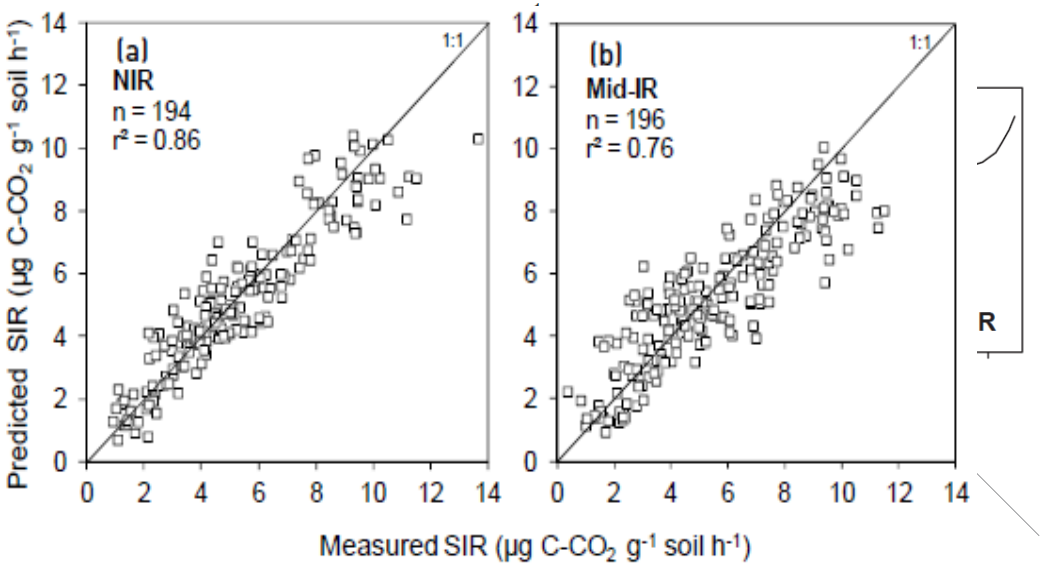
- **MIR**

M. Rabenarivo *et al.*, *J. Near Infrared Spectrosc.* **21**, 495–509 (2013)
Received: 22 May 2013 ■ Revised: 4 October 2013 ■ Accepted: 7 October 2013 ■ Publication: 3 December 2013

JNIRS JOURNAL OF NEAR INFRARED SPECTROSCOPY

Comparing near and mid-infrared reflectance spectroscopy for determining properties of Malagasy soils, using global or LOCAL calibration

Michel Rabenarivo,[a,b] Lydie Chapuis-Lardy,[a,c] Didier Brunet,[d] Jean-Luc Chotte,[d] Lilia Rabeharisoa[b] and Bernard G. Barthès[d]

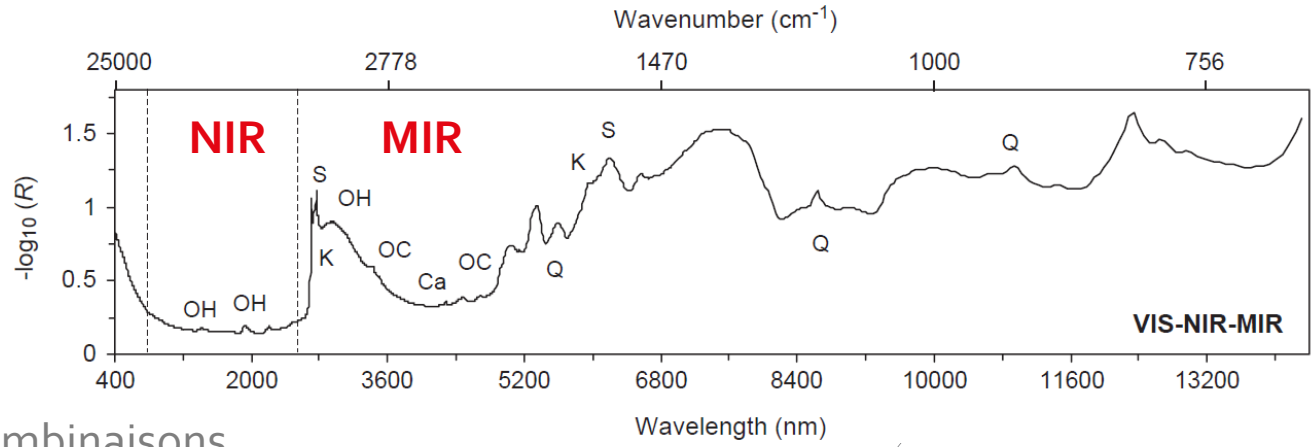


- **Prédictions plus précises avec MIRS qu'avec NIRS … sauf pour sols des régions chaudes**

Depuis 2003…

Moyen infrarouge

- **MIR**
  - bandes nettes
  - fondamentales
  - forte absorption
- **NIR**
  - chevauchements
  - harmoniques et combinaisons
  - faible absorption



- **Prédictions plus précises avec MIRS qu'avec NIRS**
  … sauf pour sols des régions chaudes
  + nécessité broyage fin < 0.2 mm (tamisage< 2 mm ok pour NIRS)
  + surtout au labo (appareils portatifs fragiles ?)

Conclusion

sur la période 2003-2019…

- De la démonstration
  du potentiel de l'infrarouge

  à une recherche
  d'opérationnalité des procédures

- Apparition d'offres commerciales

SoilCares
(Wageningen, NL)

Arvalis

Merci de votre attention

Une science engagée
pour un futur durable

Institut de Recherche pour le Développement
FRANCE