

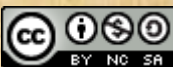


Plateforme de modèles locaux/globaux de transfert de spectres inter-instruments

20^{ème} rencontres HélioSPIR - Mardi 15 octobre 2019

Céline Chauvergne¹, Laurent Bonnal², Denis Bastianelli², Yves Griveau³, Valérie Méchin³,
Virginie Rossard¹, Hélène Carrère¹, Éric Latrille¹

- (1) LBE (Laboratoire de Biotechnologie et de l'Environnement) - INRA (102 Avenue des Étangs, 11100, Narbonne, France)
- (2) SELMET (Systèmes d'Élevage Méditerranéens et Tropicaux) - CIRAD (F-34398 Montpellier, France)
- (3) IJPB (Institut Jean-Pierre Bourgin) - INRA (Centre de Versailles-Grignon, Route de St-Cyr, 78026 Versailles Cedex France)



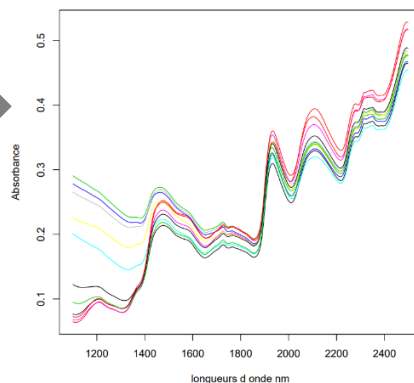
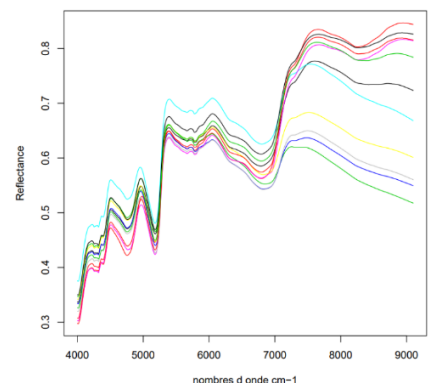
Echanges inter-laboratoire **d'échantillons** pour la mesure et la prédiction de paramètres biochimiques

Objectif : s'affranchir de l'étape d'acquisition spectrale en créant des modèles de transfert de spectres entre deux spectromètres

Laboratoire	Appareil	Prise	Mode	Unité	Plage	Résolution
INRA – LBE Narbonne	BUCHI N-500	Coupelle 30g Ø 10cm Vials 4mL, 2g	Réflectance	cm ⁻¹	4 000 – 10 000 cm ⁻¹	4 cm ⁻¹
CIRAD – SELMET Montpellier	FOSS - NIRSystem5000	Coupelle 4g Ø 3,5 cm	Absorbance	nm	1100 – 2498 nm	2 nm

Spectre BUCHI

Spectre FOSS



- Gain de temps
- Prédictions de paramètres biochimiques non accessibles auparavant
- Plateforme de partage des modèles et de stockage des données : utilisation de ChemFlow

1. Démarche et construction des modèles locaux et globaux

- 1.1. Jeux de données et modèles
- 1.2. Construction des modèles

2. Analyses et validation des modèles

- 2.1. Analyses spectrales
- 2.2. Analyses des prédictions biochimiques des spectres transférés
- 2.3. Choix du modèle de transfert

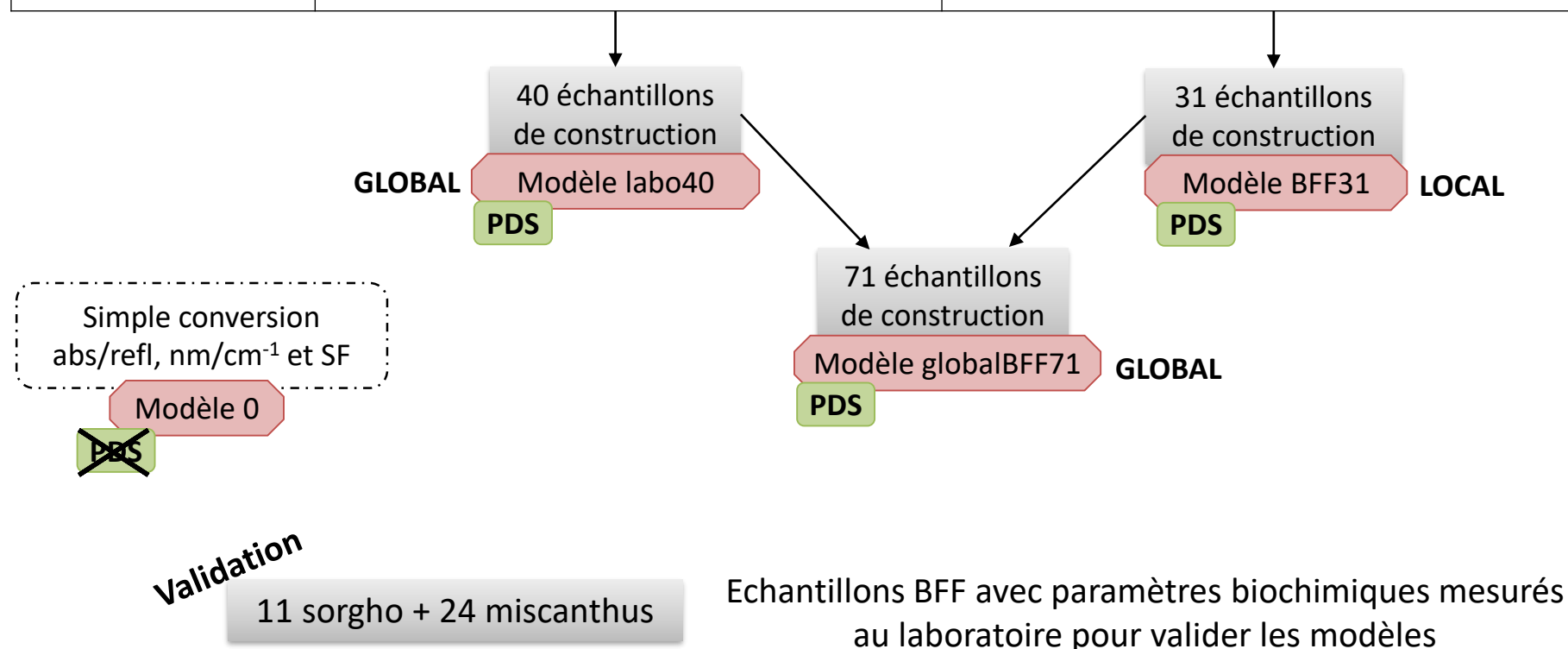
3. Exemple d'application du transfert de spectres

1.

Démarche et construction des modèles locaux et globaux

Echange inter-laboratoire d'échantillons

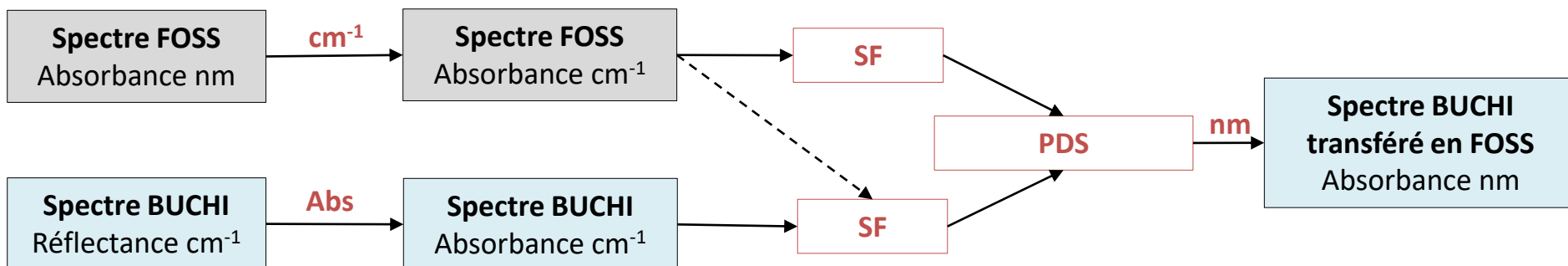
	Echantillons de référence laboratoire (échantillons organiques représentatifs des activités de chaque laboratoire)	Echantillons spécifiques du projet BFF (échantillons de végétaux représentatifs de chaque laboratoire)
Nature	Diverse (végétale, animale, déchets...)	Miscanthus, Sorgho, Maïs
Nombre	40 échantillons	31 échantillons



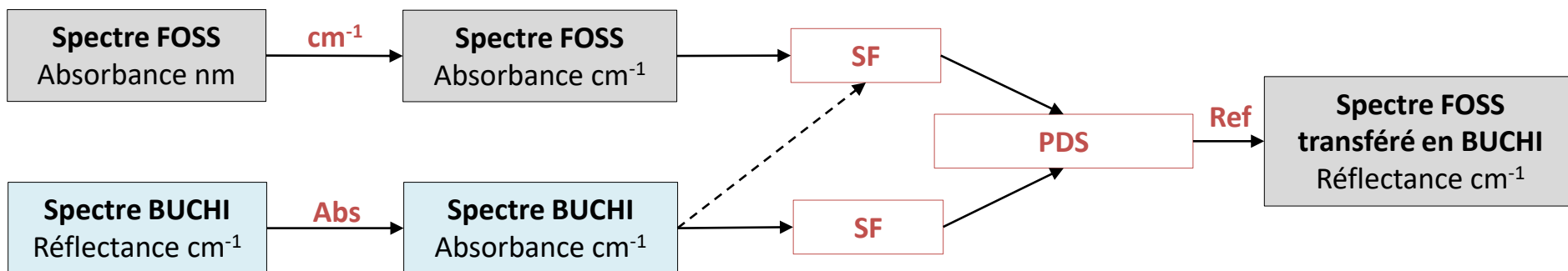
Modalités des spectres pour la PDS¹ : spectres en **cm⁻¹** et en **absorbance**, fenêtre de 7

SF = fonction de lissage et interpolation des spectres

Modèles de transfert BUCHI vers FOSS



Modèles de transfert FOSS vers BUCHI



(1) Wang et al. (1992). Improvement of multivariate calibration through instrument standardization. In Analytical Chemistry, 64 (5), pp. 562–564.

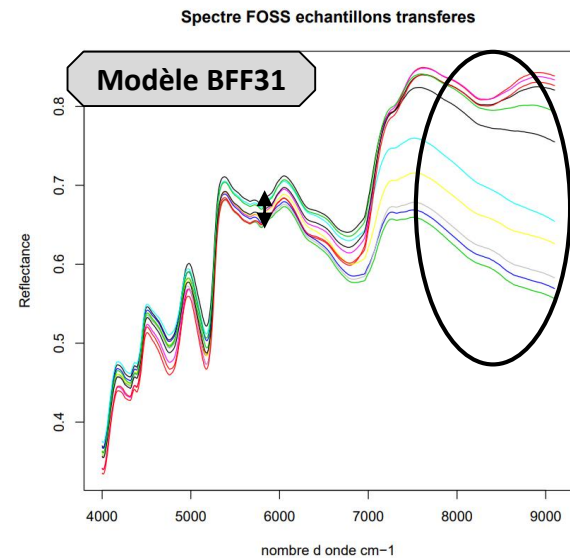
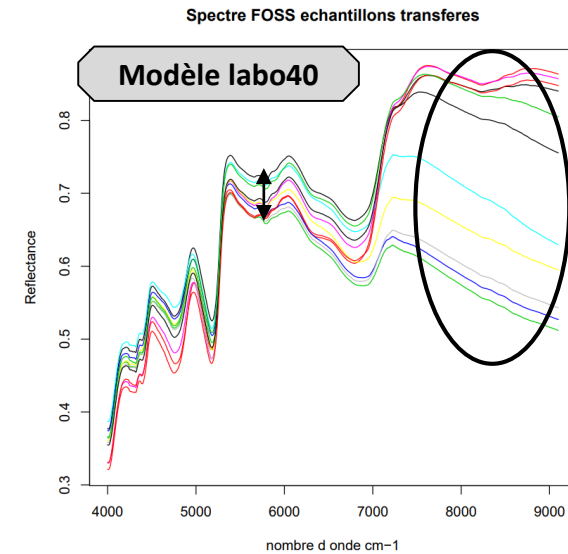
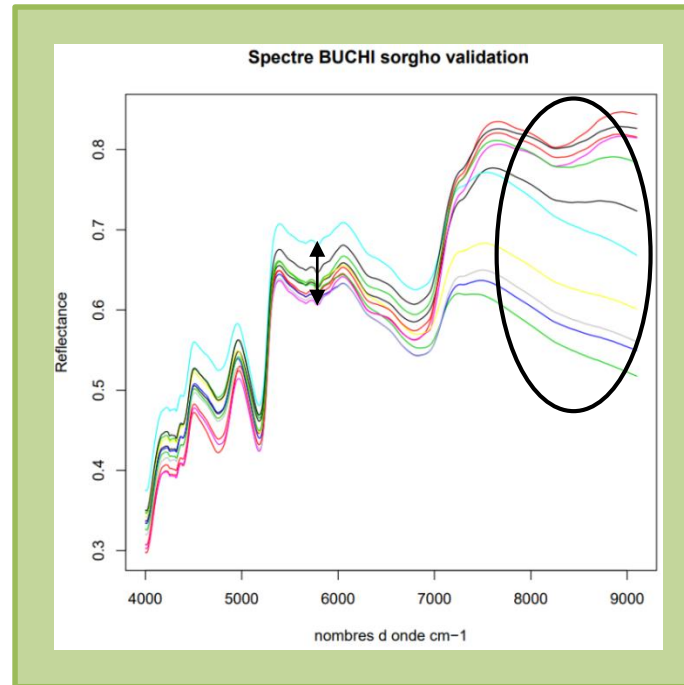
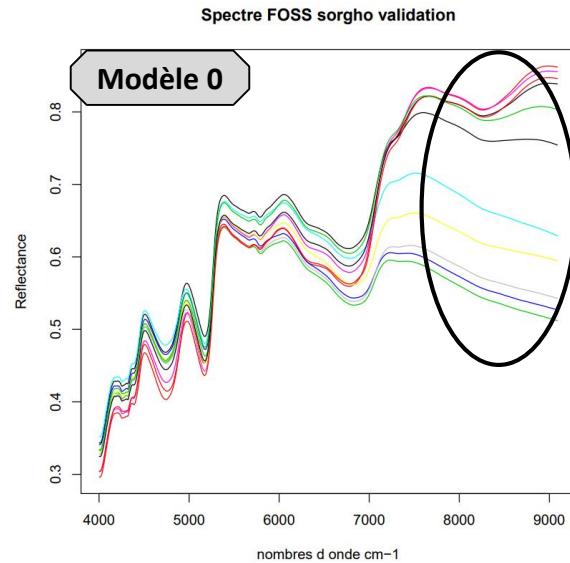
2.

Analyses et validation des modèles

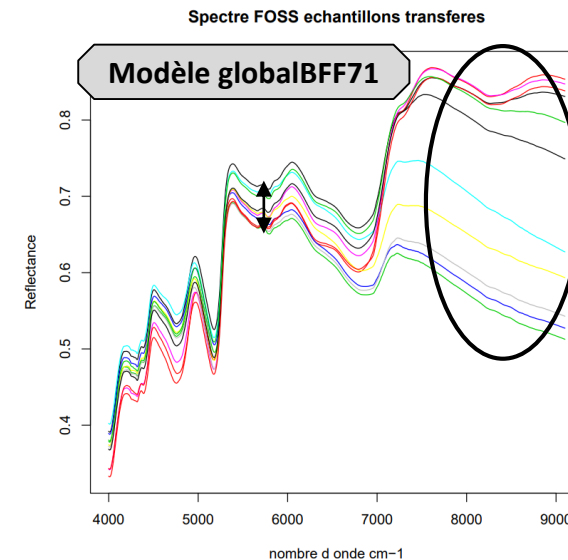
Transfert d'un spectre FOSS vers un spectre BUCHI

11 échantillons de validation sorgho

Cible



- 8000 cm^{-1} : déformation du spectre
- Modèle BFF31 : effet de resserrement des spectres
- Transferts globaux très semblables



Transfert d'un spectre BUCHI vers un spectre FOSS Tracé du spectre cible en fonction du spectre transféré

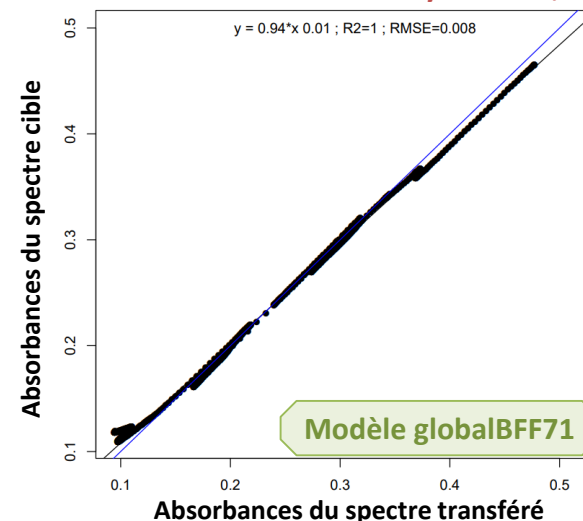
Exemple miscanthus

Comparaison selon :

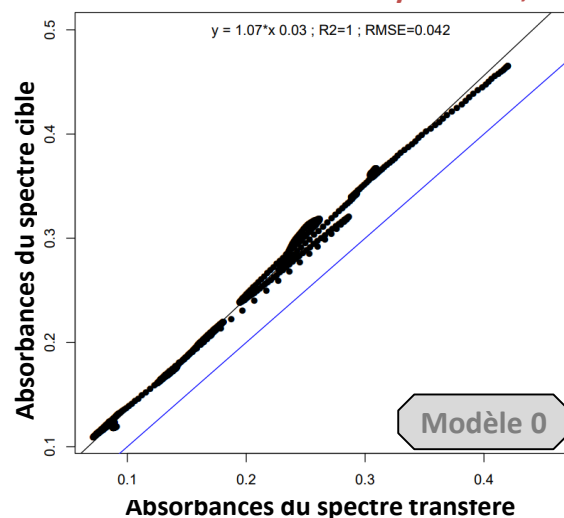
- les **déformations** visibles
- la **distance euclidienne** entre spectre cible et spectre transféré

mod 0 < mod BFF31 < mod globalBFF71 $\approx$ mod labo40

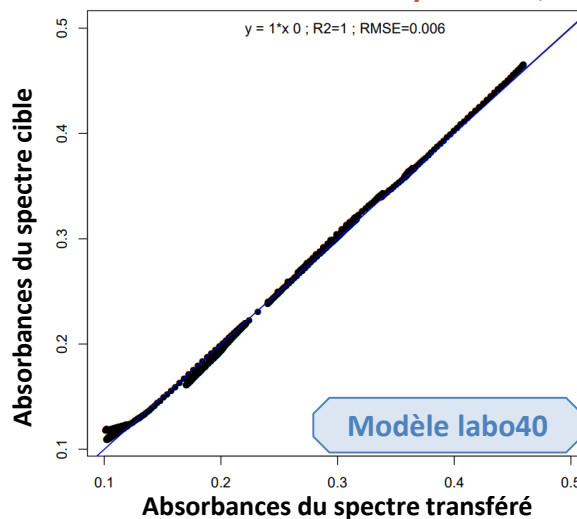
Distance euclidienne moyenne = 0,31



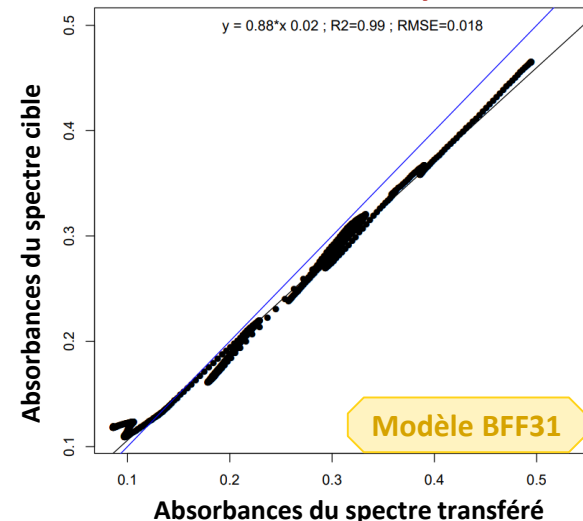
Distance euclidienne moyenne = 1,32



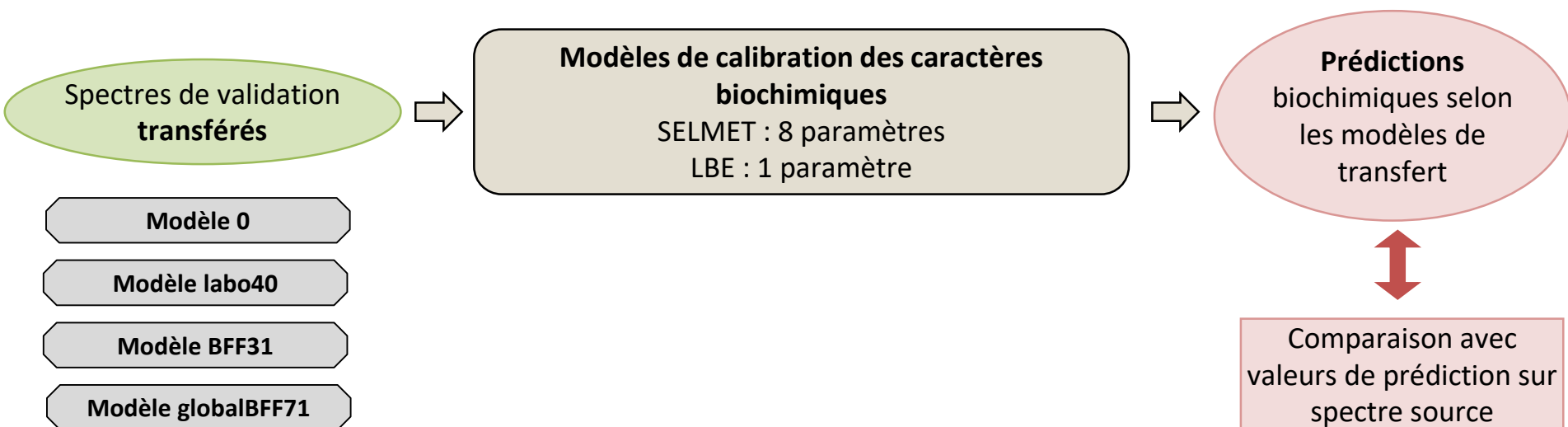
Distance euclidienne moyenne = 0,33



Distance euclidienne moyenne = 0,36



Prédictions de paramètres biochimiques des échantillons de validations



SELMET : 8 caractères : Matière minérale totale (MM), Matière azoté totale (MAT), Cellulose (CBW), Fibres au détergent neutre (NDF), Fibres au détergent acide (ADF), Lignine (ADL), Digestibilité de matière sèche (SMS), Digestibilité de matière organique (SMO).

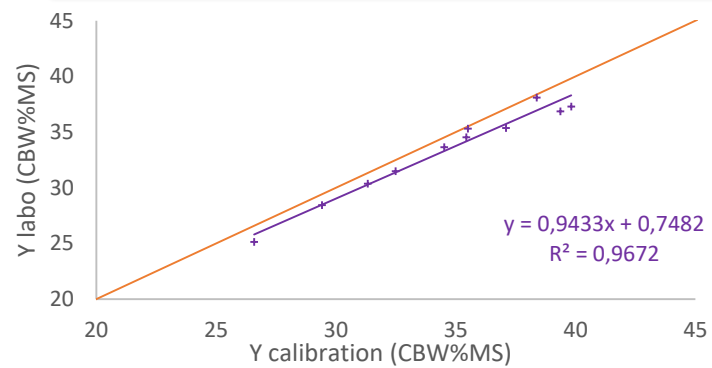
LBE : 1 caractères : potentiel méthane (BMP)

Transfert d'un spectre BUCHI vers un spectre FOSS : prédictions sur 11 échantillons de sorgho

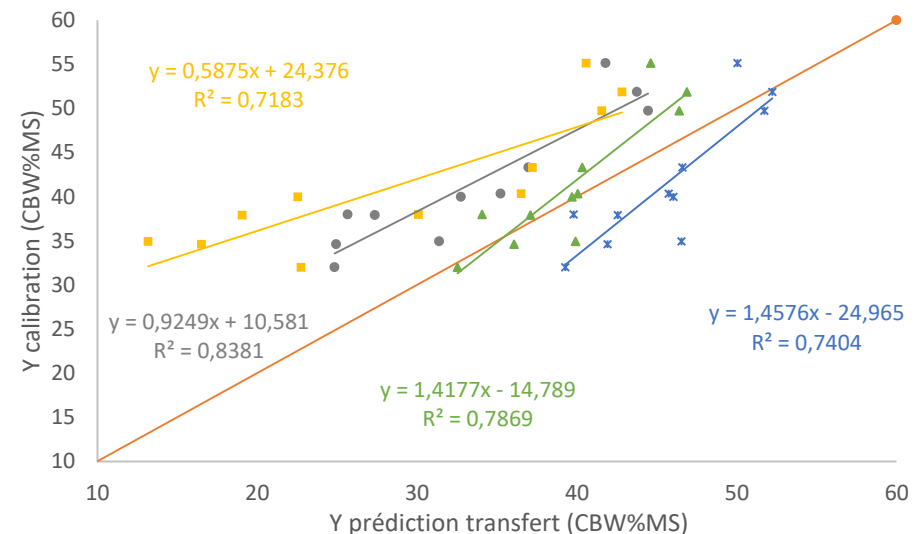
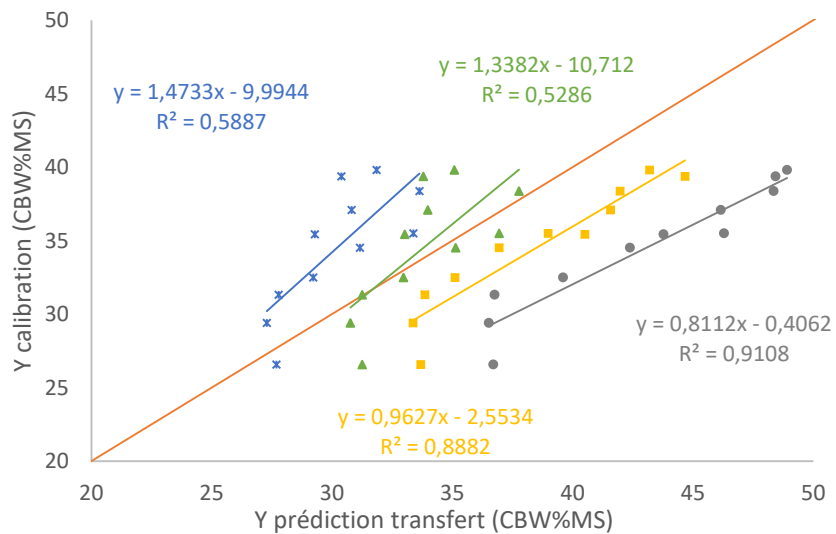
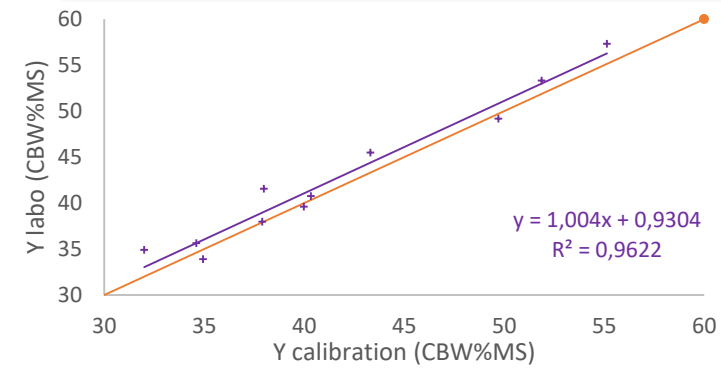
Calibrations labo

Prédictions transfert

Prédiction de la Cellulose (CBW%MS)



Prédiction de la Digestibilité (SMO%MS)



— Bissectrice

● modèle 0

* modèle labo40

■ modèle BFF31

▲ modèle globalBFF71

Prédictions trop éloignées

Modèle spécifique non adapté

Meilleures prédictions

Ensemble des 8 caractères prédits
sur les 11 échantillons de sorgho

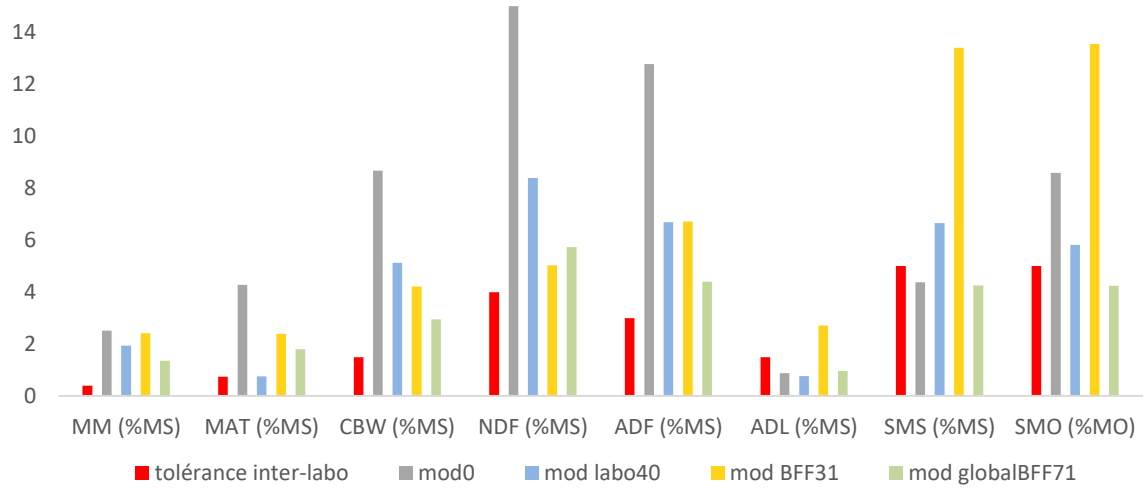
Comparaison des erreurs moyennes avec
le seuil de tolérance inter-laboratoire

mod 0 < mod BFF31 < mod labo40 <
mod globalBFF71

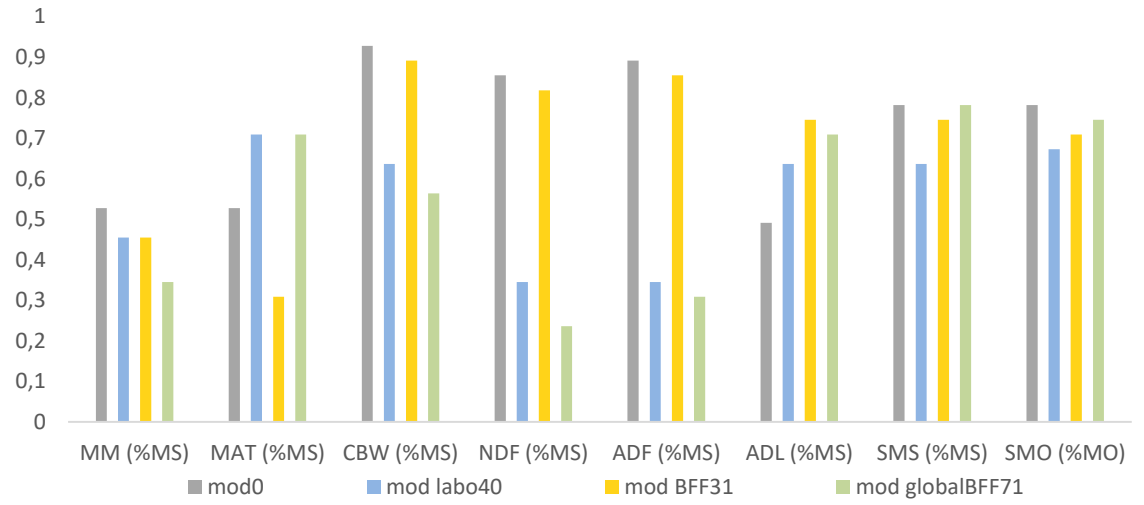
Coefficient de Kendall : corrélation du
rang entre les prédictions de transfert
et les prédictions de calibration

mod labo40 < mod globalBFF71 < mod 0 <
mod BFF31

RMSEP selon les caractères prédits

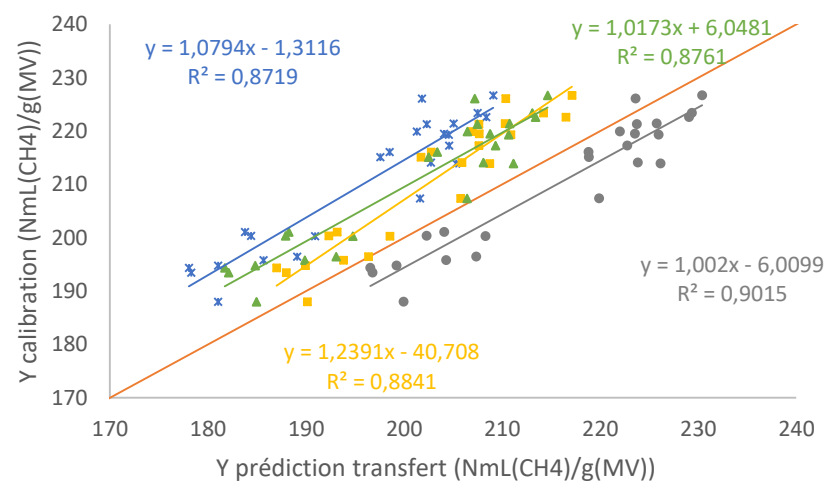
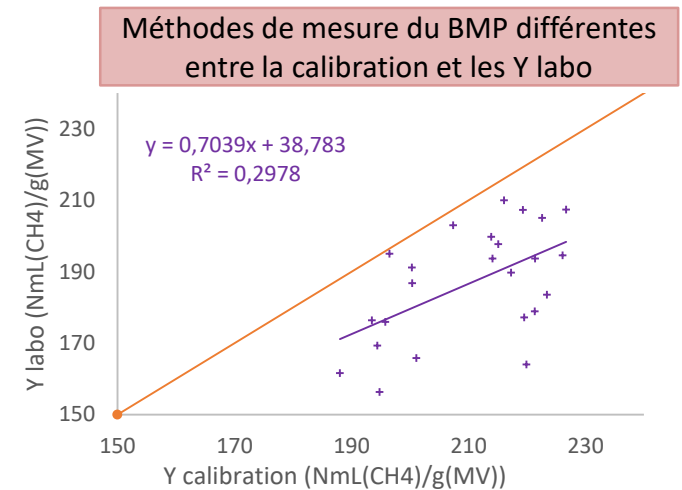


Coefficient de Kendall selon les caractères prédits

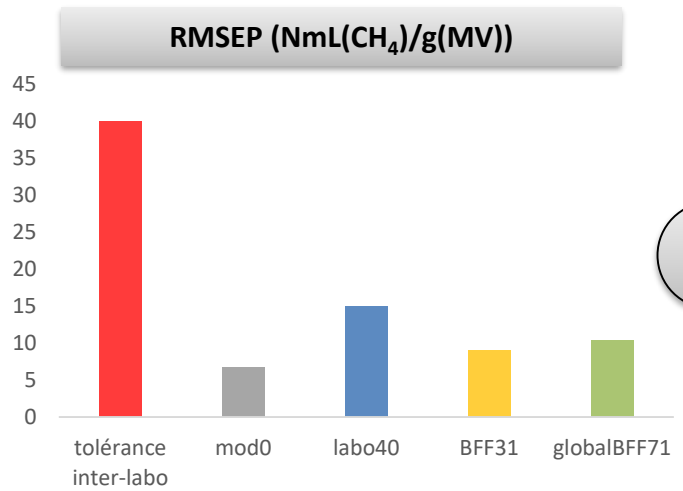


Transfert d'un spectre FOSS vers un spectre BUCHI : prédictions sur 24 échantillons de miscanthus

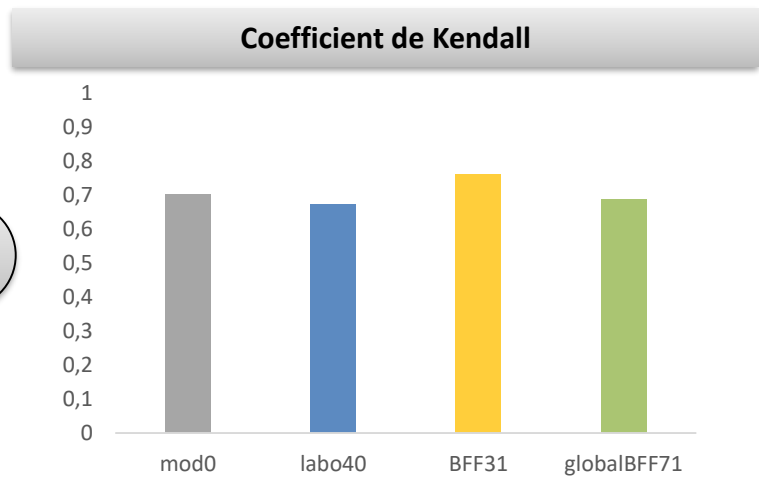
Potentiel méthane BMP (NmL(CH₄)/g(MV))



— Bissectrice • modèle 0 * modèle labo40 ■ modèle BFF31 ▲ modèle globalBFF71



Modèles équivalents



Bilan sur le choix du transfert

Local ou global ?

Le modèle local BFF n'est pas le meilleur modèle pour une prédiction d'échantillons de sorgho ou de miscanthus

→ Orientation vers un modèle plus **global**

Taille du jeu de construction ?

Le modèle globalBFF71 est d'une manière générale meilleur que le modèle labo40

→ Les données du projet BFF permettent **d'enrichir** le modèle labo40

Modèle sélectionné : globalBFF71

3.

Exemple d'application du transfert de spectres

Demande de la prédiction du BMP pour 98 échantillons de sorgho

98 échantillons de sorgho

Plante entière

47 génotypes

Cultures de 2013

3 sites

36 sorgho BMP connu

Spectres acquis sur
le FOSS au
laboratoire SELMET

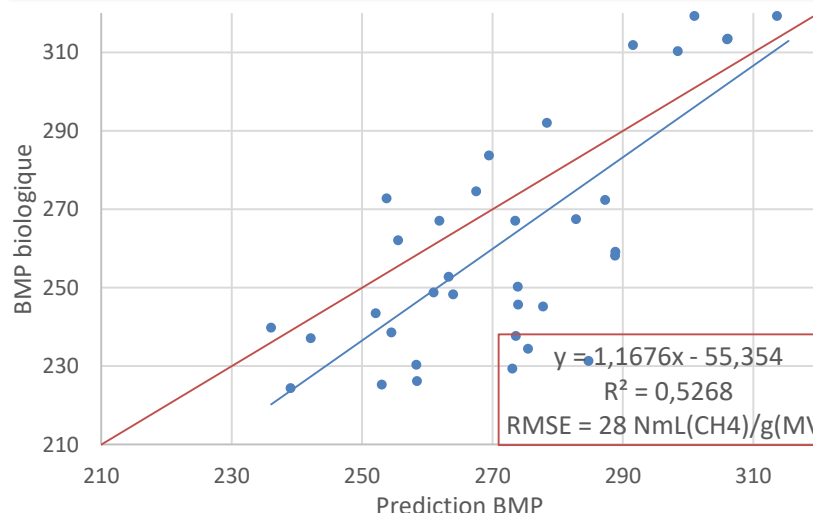
Modèle de
transfert
globalBFF71

Spectres FOSS
transférés en
spectres BUCHI



Prédictions du
BMP

BMP biologique en fonction de la prédiction (NmL(CH₄)/g(MV))



Erreur acceptable par
rapport à la tolérance
inter-labo
(40 NmL(CH₄)/g(MV))

Méthodes de mesure du
BMP différentes entre la
base de calibration et les
échantillons miscanthus



Merci de votre attention

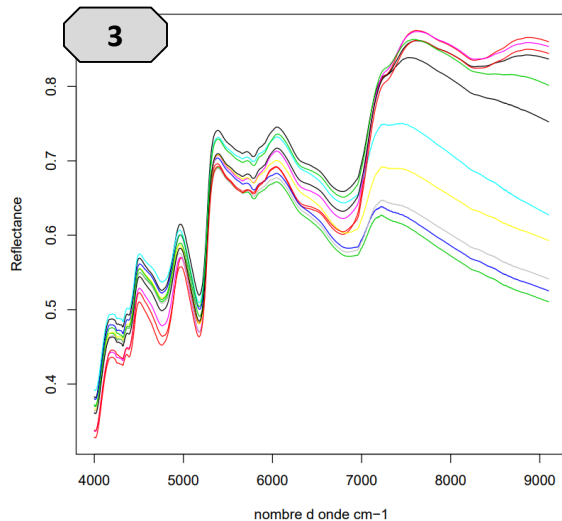
Céline Chauvergne¹, Laurent Bonnal², Denis Bastianelli², Yves Griveau³, Valérie Méchin³, Virginie Rossard¹,
Hélène Carrère¹, Éric Latrille¹

- (1) LBE (Laboratoire de Biotechnologie et de l'Environnement) - INRA (102 Avenue des Étangs, 11100, Narbonne, France)
- (2) UMR SELMET (Systèmes d'Élevage Méditerranéens et Tropicaux) - CIRAD (F-34398 Montpellier, France)
- (3) Institut Jean-Pierre Bourgin - INRA (Centre de Versailles-Grignon, Route de St-Cyr, 78026 Versailles Cedex France)

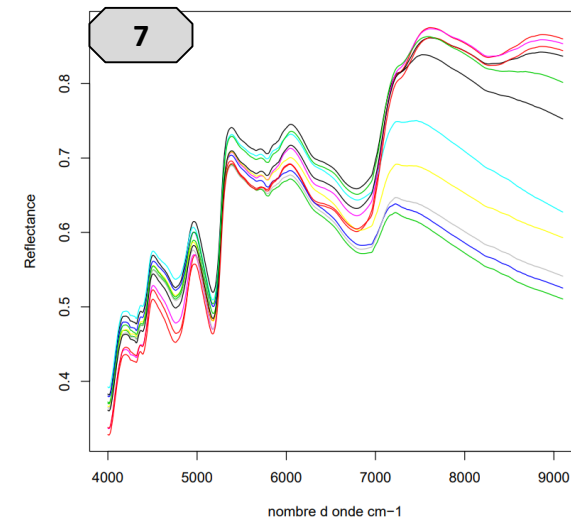


Essais avec différentes fenêtres : $\eta = 3, 7, 101, 501$

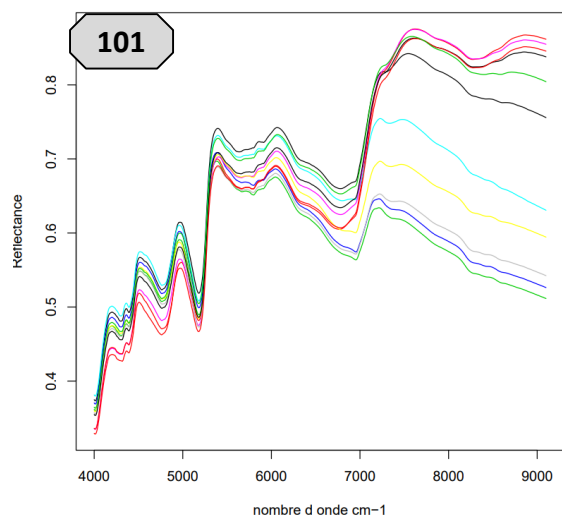
Spectre FOSS sorgho - PDS 3



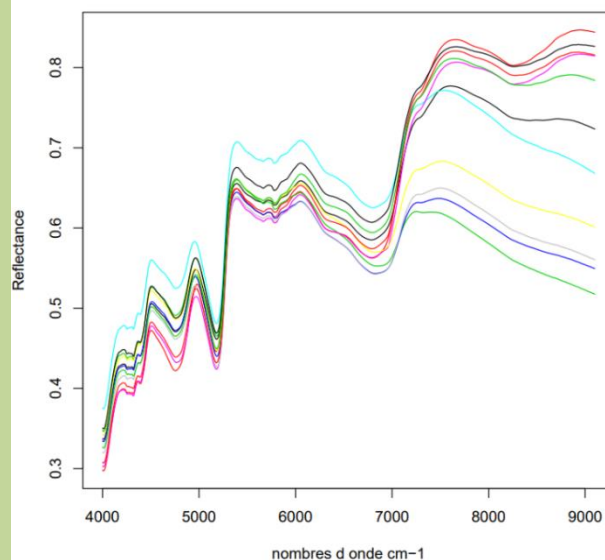
Spectre FOSS sorgho - PDS 7



Spectre FOSS sorgho - PDS 101



Spectre BUCHI sorgho validation



Spectre FOSS sorgho - PDS 501

