

Résumés des communications

Communications orales

Pages

Jour 1 – 24 novembre

M. ROUSSEL et al. La spectroscopie proche infrarouge et le phénotypage dans les semences	2
S. MONTAGNIER et al. Dosage d'acides à base de phosphore dans des poudres de polyamide 11 par spectroscopie proche-infrarouge	3
C. DUCRET et al. Amélioration de la maîtrise du process par spectroscopie proche infrarouge en ligne	3
S. ROUSSEL et al. Comparaison de méthodes du Machine Learning pour l'analyse de données spectroscopiques	4
F. AMMARI Détection et quantification d'insectes vivants par spectroscopie proche infrarouge et imagerie hyperspectrale	5

Jour 2 – 25 novembre

M. ECARNOT et al. Phénotypage: Élargissons le spectre !	6
M. RYCKEWAERT et al. Potentiel de la méthode REP-ASCA pour la sélection variétale	7
B. JAILLAIS et al. Phénotypage multispectral de graines de blé à haut débit. Apport du deep learning	7
F. VASSEUR et al. Predicting intraspecific functional diversity and ecological strategies: leaf hyperspectral reflectance is coming to the rescue	8
V. FONSECA DIAZ et al. A framework for bilinear calibration transfer based on transfer levels	9
S. SALMI et al. Robustesse et transfert de modèles d'étalonnage en spectroscopie proche infrarouge appliquée aux propriétés des grains de sorgho	10
J. BRUSTEL et al. Évaluer les teneurs en métabolites secondaires par spectrométrie proche infrarouge : application au phénotypage des contenus en isoflavones de la graine de soja à usage alimentaire	11
T. RANDRIAMBININTSOA et al. Correction de l'effet de la variation de l'humidité du bois sur l'étalonnage des modèles de discrimination SPIR : cas de trois espèces de Dalbergia de Madagascar	12
D. VINCKE et al. Evaluation des apports potentiels de l'imagerie hyperspectrale pour le phénotypage variétal du froment d'hiver en Wallonie	13
T. RAMANANTOANDRO et al. Apport de la spectroscopie proche infrarouge pour les thématiques de recherches de l'ESSA-Forêts à Madagascar	14
N. GENGLER et al. Les opportunités de l'exploitation du MIR dans l'élevage des animaux laitiers, bien plus que le simple phénotypage par prédiction de composés majeurs du lait	15
L. BONNAL et al. Phénotypage des animaux par SPIR - exemples et perspectives	16
J.M. GOUJON et al. Applications de la SPIR et HSI à l'étude des produits carnés. Retour d'expériences	17
M. AHMAD et al. Image Decomposition Encoding and Localization (IDEL) a new proposal for hyperspectral imaging	18
F. MARINI. Improving spectroscopic-based authentication by data fusion	19

Posters

A. HERRERO-LANGREO et al. Comparison of portable and benchtop spectral imaging for the characterization and identification of bacteria on food-related surfaces	20
--	----

Communications orales

La spectroscopie proche infrarouge et le phénotypage dans les semences

Magali ROUSSEL, Milagros GARCIA

LIDEA - Discovery & Technology Research Team , 31700 Mondonville (France)
magali.rousseau@lidea-seeds.com ; milagros.garcia@lidea-seeds.com

Le Département de Recherche de LIDEA (entreprise créée en septembre 2020 suite à la fusion Euralis Semences et Caussades Semences) a pour mission de créer de nouvelles variétés de maïs, soja, sorgho, blé, colza, fourragères, ...

La sélection de nouvelles variétés s'appuie notamment sur la caractérisation phénotypique annuelle d'un très grand nombre de plantes, avec des contraintes majeures : (i) la rapidité et l'efficacité de mise à disposition de données de qualité et couvrant une large gamme d'environnements, (ii) l'optimisation des coûts (logistique et temps de travail) de ces analyses. Compte tenu de ces contraintes, les méthodes de sélection variétale ont beaucoup évolué depuis plusieurs années et s'appuient de plus en plus sur des outils de phénotypage haut débit.

Dans ce contexte, la technologie NIRS est un outil de choix car elle comporte de nombreux avantages (non destructive, évolutive avec des possibilités de développement et d'implémentation de modèles de prédiction pour de nouveaux critères, sur de nouvelles espèces, etc...) et elle est couramment utilisée et reconnue chez les semenciers. Chez LIDEA, cette technologie est largement employée pour produire des données de composition biochimique sur l'ensemble des espèces travaillées, aussi bien en laboratoire qu'en embarqué sur les machines de récolte.

L'objectif de cette présentation est de dépeindre une vision globale de l'utilisation de cette technologie chez LIDEA en se focalisant plus particulièrement sur l'activité NIRS embarquée : contraintes, saisonnalité, activités "satellites", problématiques, ...

Dosage d'acides à base de phosphore dans des poudres de polyamide 11 par spectroscopie proche-infrarouge

Safia MONTAGNIER, Perrine HEBERT, Margaux LECOMTE

ARKEMA CERDATO, Laboratoire d'Etude des Matériaux (LEM)

27470 Serquigny – France

safia.montagnier@arkema.com ; perrine.hebert@arkema.com

ARKEMA fabrique sur son site de Serquigny différentes sortes de polyamides sous forme de granulés mais aussi de poudres. Les poudres produites sont à base d'acide 11 afin d'obtenir un polyamide 11. Différentes étapes sont nécessaires pour obtenir le produit final avec les propriétés chimiques et mécaniques attendues. Dans un souci de maîtrise de la qualité et d'augmentation de la capacité de nos lignes, la spectroscopie est de plus en plus utilisée en at line et on line de la matière première au produit final.

Les acides à base de phosphore sont utilisés en tant que catalyseurs ou antioxydants. Il est important de connaître avec précision leurs teneurs au fil du process afin de garantir un produit conforme. L'analyse par fluorescence X est une technique rapide et simple d'utilisation en laboratoire de contrôle mais ne permet de donner un dosage par espèce mais seulement par élément. Le suivi est alors réalisé par RMN qui n'est pas une technique de laboratoire de contrôle. C'est pourquoi, la spectroscopie proche-infrarouge a été testée sur cette problématique avec une calibration reposant sur les données obtenues par RMN.

Amélioration de la maîtrise du process par spectroscopie proche infrarouge en ligne

Cendrine DUCRET¹, Perrine HEBERT¹, Bernard PEES², Patrice IAFRATE²

1. ARKEMA CERDATO, Laboratoire d'Etude des Matériaux (LEM), 27470 Serquigny – France

2. ARKEMA Marseille, 13011 Marseille - France

cendrine.ducret@arkema.com

perrine.hebert@arkema.com

L'usine de Marseille Saint-Menet produit la matière première du Rilsan[®] (polyamide), l'acide 11-aminoundécanoïque (Amino 11), à partir d'Huile de Ricin. Durant un long processus, l'Huile est tour à tour transformée pour obtenir un intermédiaire de synthèse qui réagit avec l'acide bromhydrique en milieu solvant. L'acide bromoundécanoïque obtenu est alors transformé en Amino 11 par une ultime étape réactionnelle.

Les performances de la réaction d'hydrobromuration sont très dépendantes de la qualité du solvant. Ainsi sa composition est mesurée par des méthodes conventionnelles en laboratoire (GC et Karl-Fisher) mais pour des raisons HSE celui-ci n'est prélevé et donc analysé qu'une fois par semaine. De même, la qualité de l'acide bromoundécanoïque est évaluée quotidiennement sur un échantillon moyen de 24h (GC, HS-GC, Karl-Fisher). Afin de s'affranchir de la faible fréquence des prélèvements mais également de la durée des analyses, cet atelier a été équipé d'un système d'analyse en ligne NIR qui nous permet d'obtenir la composition du solvant et celle du produit fini toutes les 2 minutes.

Comparaison de méthodes du Machine Learning pour l'analyse de données spectroscopiques

Sylvie ROUSSEL, Jordane LALLEMAND, Sébastien PREYS

Ondalys, 4 rue Georges Besse, 34830 Clapiers (France)

sroussel@ondalys.fr – jlallemand@ondalys.fr – spreys@ondalys.fr

Pour l'analyse de données spectroscopiques, les termes « d'analyse de données multivariées » ou de « chimiométrie » sont les plus souvent employés. Depuis quelques années, avec l'avènement des « Big Data » et autres « IoT – Internet des Objets », les termes « Machine learning » et « d'Intelligence Artificielle (IA) », sont de plus en plus employés.

Mais que recouvrent réellement ces méthodes de Machine Learning ?

Comme monsieur Jourdain, ne faisons-nous pas de la prose sans le savoir ?

Au travers d'un cas concret de spectroscopie proche infrarouge (SPIR), cette présentation a pour objectif de présenter et comparer différentes méthodes de Machine Learning permettant modéliser un paramètre non linéaire : la teneur en matières grasses dans la viande.

Les échantillons de viande sont mesurés en transmission par un instrument FOSS Tecator Infratec, sur la gamme 850-1050nm (<http://lib.stat.cmu.edu/datasets/tecator>). Les spectres proche infrarouge ont été convertis en absorbance et séparés en un jeu d'étalonnage et un jeu de test indépendant.

Le modèle linéaire PLS montre une non-linéarité résiduelle entre les spectres et la teneur en matières grasses. Des méthodes de Machine Learning, permettant de modéliser cette non-linéarité, ont été testées et comparées afin d'améliorer la précision des prédictions (ci-dessous par ordre de performance croissante) :

- Transformation des variables d'origine et modèles PLS
- Modèle local (Locally Weighed Regression - LWR)
- CART / Forêt Aléatoires (Random Forest - RF)
- Support Vector Machine (SVM)
- Réseaux de Neurones Artificiels (ANN)

Le tableau ci-dessous synthétise les résultats comparés de ces méthodes par rapport à divers critères d'intérêt.

Méthode	Gestion non-linéarité	Performance	Complexité de mise en œuvre	Risque de sur-apprentissage
PLS	-	-	-	-
PLS sur X transformé	+	+	-	+
LWR	+	+	+	+
RF	+	+	+	+
SVM	+	++	++	++
ANN	+	++	+++	+++

Détection et quantification d'insectes vivants par spectroscopie proche infrarouge et imagerie hyperspectrale

Faten AMMARI, Marlène FAURE, Bruno MOULINIER, Isabelle ROUX, Catherine RENAUD, Katell CREPON, Séverine MAUDEMMAIN.

*ARVALIS Institut du végétal, Pôle Analytique, Station Expérimentale - 91720 BOIGNEVILLE
f.ammari@arvalis.fr

Dans les pays industrialisés, les pertes économiques liées à la mauvaise maîtrise des conditions de stockage ont pu être estimées entre 5 et 10 % de la valeur totale de la collecte (FAO, 2000 ; Phillips and Throne, 2010 ; Yigezu et al., 2010). L'infestation par des insectes, un problème majeur lors du stockage des céréales, est souvent à l'origine de pertes de matière, de nutriments, de pouvoir germinatif et de la qualité sanitaire et technologique des grains (Mohd et al., 2014).

Pour lutter contre les insectes au stockage, les insecticides de contact sont souvent utilisés. En France, on estime à 1,7 million le nombre de doses unitaires (NODU) utilisées chaque année (Dutarte et al., 2014). Cette stratégie de lutte est même utilisée à titre préventif (traitement à réception, avant stockage). En contrepartie, les consommateurs sont de plus en plus conscients des dangers potentiels de ces traitements et réclament des produits sans résidus d'insecticides.

La filière céréalière française a affirmé sa volonté de réduire drastiquement l'usage de ces insecticides, s'engageant à réduire d'ici 2022 de moitié la proportion de céréales présentant un résidu d'insecticide (Adda et al., 2017). Dans ce contexte, la détection et la quantification des insectes présents dans un lot deviennent cruciales pour adapter sa prise en charge et raisonner un éventuel traitement. Les méthodes actuellement mises en œuvre pour détecter les insectes reposent sur un échantillonnage et une détection par tamisage. Ces méthodes ne permettent de détecter que de fortes infestations (Wilkin & Fleurat-Lessard, 1991) en forme adulte. En effet, une absence de détection d'insectes dans l'échantillon est simplement l'indication d'une infestation inférieure à 5 insectes/kg.

L'objectif de cette étude est d'évaluer le potentiel de la spectroscopie proche infrarouge (SPIR) et de l'imagerie hyperspectrale (IHS) pour la détection et la quantification d'insectes vivants (charançon du riz, forme adulte) dans un lot de blé tendre. Ces technologies ont l'avantage d'utiliser des échantillons de plus grande taille, voire de mesurer l'infestation sur un flux de grains, améliorant ainsi la probabilité de détection des insectes.

Les résultats ont montré la fiabilité de la SPIR et de l'IHS pour détecter et quantifier les insectes vivants. Ces deux technologies permettraient d'améliorer la sensibilité de la détection des insectes comparativement aux méthodes classiques.

Références :

- FAO, 2000. Crop and food supply assessment. FAO Corporate Document Depository: Economic and Social Department, United Nations, Roma, Italy.
- Phillips and Throne (2010), Biorational Approaches to Managing Stored-Product Insects, *Annu. Rev. Entomol.* 2010. 55:375–97.
- Yigezu, YA, Alexander, CE, Preckel, PV, Maier, D, Mason, L, Woloshuk, C, Lawrence, J and Moog, D, 2010. Economics of integrated insect management in stored corn. *Journal of economic entomology* 103 (5): 1896-1908.
- Mohd, A. S., Akhtar A. K., 2014. Imaging techniques for the detection of stored product pests. *Applied Entomology and Zoology* 49: 201-212.

- Dutartre S., Lavarde P., Malpel G.-P., Pelosse H., Winter L., Englebert P., 2014. Préfiguration de la mise en oeuvre des certificats d'économie des produits phytosanitaires – mission d'appui, rapport de la mission CGEDD-IGF-CGAAER, juillet 2014.
- Adda C., Barrier-Guillot B., Le Boudec S., 2017. Plan de transformation filière céréales, Intercéréales, décembre 2017.
- Wilkin R., Fleurat-Lessard F., 1991. The detection of insects in grain using conventional sampling spears. In Proceeding of the 5th International Conference on Stored-Product Protection (F. Fleurat-Lessard et P Ducom, eds) pp 1445-1453, Bordeaux, France.
-

Phénotypage: Élargissons le spectre !

Martin ECARNOT, Pierre ROUMET, Vincent SEGURA

UMR AGAP Institut, Univ Montpellier, CIRAD, INRAE, Institut Agro, F-34398 Montpellier, France
martin.ecarnot@inrae.fr, pierre.roumet@inrae.fr, vincent.segura@inrae.fr

Le phénotype est l'ensemble des caractéristiques observables d'un individu. Il reflète à la fois l'expression des gènes (génotype), la quantité de ressources disponibles (nutriments minéraux, eau, température, lumière) ainsi que leur interaction. Les mesures phénotypiques sont essentielles pour comprendre comment les organismes interagissent avec leur environnement afin d'identifier, par exemple, le déterminisme génétique de certaines caractéristiques ou pour développer des génotypes adaptés à des conduites plus économes en intrants. Le développement de méthodologies permettant d'évaluer facilement une liste élargie de ces caractères est d'un grand intérêt pour différents domaines d'étude : agronomie, écologie, génétique, phytopathologie. Parfaitement adaptée aux contraintes typiques des programmes d'amélioration génétique dans lesquels il est nécessaire d'effectuer des mesures rapides et non-destructives pour caractériser de très nombreux échantillons de plantes et des produits de l'agriculture, la SPIR a permis le développement d'applications permettant d'inférer les valeurs de nombreux traits, depuis la création des premiers instruments commerciaux jusqu'aux actuels imageurs hyperspectraux sur drones, .

Dans un 1er temps, les propriétés d'absorption spécifiques des composés d'intérêt agronomiques ont été exploitées pour obtenir des modèles de prédiction directe de molécules ou de caractères simples d'intérêt pour la sélection (ex: teneur en protéines, en chlorophylle). Plus récemment, la SPIR a été utilisée pour évaluer des caractères plus complexes, c'est-à-dire qui ne sont pas liés seulement à un type de molécule (ex: maladies foliaires, discrimination de variétés,...). Enfin, le fait que le signal spectral puisse être considéré comme une signature globale de l'ensemble des propriétés biochimiques et physiques d'une matrice (grain, feuille, racines ..) permet d'envisager des approches multitraits très intégratives

A travers un certain nombre d'exemples choisis, majoritairement dans nos travaux de recherche, nous illustrerons de façon graduelle comment l'exploitation du spectre dans sa globalité peut présenter un intérêt particulier dans le contexte de l'amélioration des plantes au-delà de la prédiction de molécules ou de caractères simples. Ces exemples incluent notamment la prédiction de caractères technologiques ou physiologiques complexes et l'étude de processus dynamiques. Nous finirons par une présentation de la prédiction phénotypique qui, par analogie avec la prédiction génomique, pousse à l'extrême ce raisonnement en cherchant à capturer et exploiter l'information génétique contenu dans les spectres pour prédire des valeurs génétiques.

Potentiel de la méthode REP-ASCA pour la sélection variétale : Cas d'étude de l'utilisation de la spectroscopie VIS-NIR sur des essais stress hydrique

Maxime RYCKEWAERT, Ryad BENDOULA, Daphné HERAN, Jean-Michel ROGER

ITAP, Univ Montpellier, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France

maxime.ryckewaert@inrae.fr

Pour les données spectrales associées à un plan expérimental, l'analyse de la variance de données multivariées appelée ASCA est la plus couramment utilisée. Cependant, lors d'une expérience, les données acquises peuvent contenir des erreurs liées à un manque de répétabilité des mesures, les résultats de l'ASCA peuvent alors être mal interprétés.

Une méthode nommée REP-ASCA a été développée pour répondre à ce problème. Cette approche propose d'adapter un protocole consistant à ajouter des mesures répétées aux mesures pour l'analyse de la variance. La méthodologie de REP-ASCA sera détaillée et appliquée à un cas d'étude sur l'utilisation de la spectroscopie VIS-NIR du maïs pour la sélection végétale.

Pour une date avec un stress hydrique avéré les facteurs traitement et génotype et le terme d'interaction sont significatifs avec un seuil de valeur p à 0.05. Les composantes liées au terme traitement mettent en évidence les régions spectrales impactées par le changement d'irrigation alors que celles du facteur génotype permettent de regrouper les génotypes en fonction de leur potentiel de rendement indépendamment de l'irrigation. Les composantes du terme d'interaction peuvent être utilisées comme des traits phénotypiques liés à la réponse au stress hydrique. Sur la base de cette signature, les génotypes tolérants sont différenciés des génotypes sensibles selon un classement basé sur le rendement final ($R = 0,81$). Cette signature spectrale a ensuite été appliquée à un autre environnement présentant un déficit hydrique modéré.

Pour la plupart des génotypes, nous avons pu retrouver le classement précédemment établi par l'environnement stressé ($R = 0.60$). Cela ouvre des perspectives pour l'utilisation de la spectroscopie VIS-NIR pour la sélection variétale. Des essais qui présentent un déficit hydrique plus léger ou épisodique sans impacter le rendement peuvent être utilisés.

Phénotypage multispectral de graines de blé à haut débit. Apport du deep learning

Benoit JAILLAIS, Alioune DIEYE

StatSC, Oniris INRAE, Rue de la géraudière, 44322, Nantes, France

Benoit.Jaillais@inrae.fr

L'agriculture mondiale est confrontée à des défis majeurs pour assurer la sécurité alimentaire mondiale, tels que la sélection de cultures à haut rendement adaptées aux changements climatiques. Un grand nombre de marqueurs génétiques associés à des résistances est obtenu par le principe de génétique d'association. Des marqueurs d'ADN couvrant l'ensemble d'un génome sont facilement obtenus en routine, et testés grâce à des puces de génotypage.

La sélection phénotypique végétale est un outil émergent qui s'appuie sur un ensemble de nouvelles technologies permettant d'accélérer les progrès dans la compréhension de la fonction des gènes et des réponses environnementales. Le phénotypage des plantes est l'identification des effets sur le phénotype résultant des

différences de génotype et des conditions environnementales auxquelles une plante a été exposée. La collecte rapide, précise et avec exactitude, sur des milliers de plantes et de parcelles de terrain est difficile à réaliser d'une part, et le grand volume de données associé difficile à interpréter.

En effet, la vitesse à laquelle les phénotypes sont extraits sur le terrain ou en laboratoire ne correspond pas à la vitesse du génotypage et cela crée un goulot d'étranglement. Il est donc indispensable de mener des recherches afin d'éliminer le "goulot d'étranglement du phénotypage" et d'augmenter le débit d'analyses. Parmi les technologies rapides et non-destructives, la spectroscopie proche infrarouge (SPIR) semble prometteuse pour remplacer l'analyse des génotypes à l'aide de marqueurs moléculaires, par l'acquisition d'un spectre unique que l'on pourra associer à un caractère de tolérance recherché. De nombreuses études ont montré que des réponses spectrales peuvent être spécifiques de composés chimiques permettant ainsi de mesurer et quantifier des caractéristiques phénotypiques". Cependant, le phénotypage s'intéresse aussi aux formes des organes étudiés et à leur variation. La vision par ordinateur est un outil puissant, car elle permet de mesurer ces caractéristiques à partir d'images. C'est ainsi que l'imagerie multispectrale, combinant l'image et le spectre, ambitionne de révolutionner la compréhension de la biologie en fournissant un nombre conséquent d'informations phénotypiques en une seule analyse.

Dans cette étude, ce système d'imagerie a été intégré, en tant que détecteur, dans un robot de phénotypage «Phenotim» qui a pour principales fonctions de convoier des grains, de les couper et de les présenter devant le système d'image multispectral à leds. A partir des images multispectrales obtenues, des traits phénotypiques sont estimés dans un second temps. Le haut-débit du robot (environ 500 images par période de 24h00) nécessite un changement de paradigme dans les outils d'analyse d'image. Ainsi, le deep learning apparaît comme étant le seul moyen de traiter ce volume de données dans des conditions de temps raisonnables, et en temps réel dans le futur.

Les traits phénotypiques mesurés - pour chaque grain et en moyenne pour chaque variété - dans cette étude sont les dimensions du grain coupé : longueur et largeur, la profondeur moyenne du sillon, l'épaisseur des couches périphériques et la vitrosité.

Predicting intraspecific functional diversity and ecological strategies: leaf hyperspectral reflectance is coming to the rescue

Francois VASSEUR¹, Grégory BEURIER^{2,3}, Denis CORNET^{2,3}, Lauriane ROUAN^{2,3}, Justine BRESSON¹, Denis VILE⁴, Cyrille VIOLLE¹

¹ CEFÉ, Univ Montpellier, CNRS, EPHE, IRD, Univ Paul Valéry Montpellier 3, INRAE, Montpellier, France

² CIRAD, UMR AGAP Institut, F-34398 Montpellier, France.

³ UMR AGAP Institut, Univ Montpellier, CIRAD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France.

⁴ LEPSE, Univ Montpellier, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France

francois.vasseur@cefe.cnrs.fr

gregory.beurier@cirad.fr

Trait-based approach in plant ecology aims at understanding and classifying the diversity of ecological strategies, based on the comparison of plant morphology and physiology across species and genotypes. However, measuring the traits that describe plant ecological strategies remains laborious to perform on many individuals and in contrasted environments. We argue here that hyperspectral reflectance coupled with deep learning approaches offers a highly versatile tool to quantitatively measure plant morphology, chemistry and metabolism. Using a large set of experimental data (including hyperspectrum, leaf traits, and metabolites) collected in the model species *Arabidopsis thaliana*, we show that hyperspectral reflectance accurately predicts leaf functional traits and recapitulates major plant ecological strategies. Moreover, the statistical treatment of leaf hyperspectrum with deep learning allows discriminating the effect of growth conditions and predicting plant response to stress. Together, hyperspectral reflectance and deep learning are therefore a promising method to massively capture various information about plant functioning and create extensive databases of traits at different temporal and spatial scales.

A framework for bilinear calibration transfer based on transfer levels

Valeria FONSECA DIAZ, Bart De KETELAER, Wouter SAEYS

KU Leuven, Division of Mechatronics, Biostatistics and Sensors, Kasteelpark Arenberg 30, 3001 Leuven, Belgium

wouter.saeys@kuleuven.be

The success of transferring calibration models contributes to diminishing the costs and waste involved in building models for new instruments or environments. Several methods have been proposed in the last two decades to successfully transfer models between instruments [1][2]. However, in many applications, the transferred models using state-of-the-art methods did not render models with satisfactory performance or models with highly noisy regression coefficients. We have elaborated a unified framework for transferring multivariate calibration models, defining the problem as transferring models at the level of the instrument variation and/or at the level of the Xy relationship. This framework allows to position state-of-the-art methods for calibration transfer such as (Piecewise) Direct Standardization [3], Orthogonalization [4], [5] Joint PLS [6] and more recent proposals such as Domain Invariant PLSR [7] with respect to each other in order to analyze the conditions under which they will provide a successful transfer. We present applications of calibration transfer in light of the proposed framework for agrofood studies involving handheld devices.

References :

- [1] C. Pasquini, "Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review," *Anal. Chim. Acta*, vol. 1026, pp. 8–36, 2018, doi: 10.1016/j.aca.2018.04.004.
- [2] J. J. Workman, "A Review of Calibration Transfer Practices and Instrument Differences in Spectroscopy," *Appl. Spectrosc.*, vol. 72, no. 3, pp. 340–365, 2018, doi: 10.1177/0003702817736064.
- [3] Y. Wang, D. J. Veltkamp, and B. R. Kowalski, "Multivariate Instrument Standardization," *Anal. Chem.*, vol. 63, no. 23, pp. 2750–2756, 1991, doi: 10.1021/ac00023a016.
- [4] A. Andrew and T. Fearn, "Transfer by orthogonal projection: Making near-infrared calibrations robust to between-instrument variation," *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 72, no. 1, pp. 51–56, 2004, doi: 10.1016/j.chemolab.2004.02.004.
- [5] J. M. Roger, F. Chauchard, and V. Bellon-Maurel, "EPO-PLS external parameter orthogonalisation of PLS application to temperature-independent measurement of sugar content of intact fruits," *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 66, no. 2, pp. 191–204, 2003, doi: 10.1016/S0169-7439(03)00051-0.
- [6] A. Folch-Fortuny, R. Vitale, O. E. de Noord, and A. Ferrer, "Calibration transfer between NIR spectrometers: New proposals and a comparative study," *J. Chemom.*, vol. 31, no. 3, pp. 1–11, 2017, doi: 10.1002/cem.2874.
- [7] R. Nikzad-Langerodi, W. Zellinger, E. Lughofer, and S. Saminger-Platz, "Domain-Invariant Partial-Least-Squares Regression," *Anal. Chem.*, vol. 90, no. 11, pp. 6693–6701, 2018, doi: 10.1021/acs.analchem.8b00498.

Robustesse et transfert de modèles d'étalonnage en spectroscopie proche infrarouge appliquée aux propriétés des grains de sorgho

Samira SALMI¹, Gilles CHAIX^{2,3}, Jean Michel ROGER⁴, Jean François RAMI^{2,3}

¹ Université Paris Saclay, 92290 Châtenay-Malabry, France, Unité AGAP-CIRAD, 34398 Montpellier, France. samira.salmi@universite-paris-saclay.fr

² CIRAD, UMR AGAP Institut, F-34398 Montpellier, France. gilles.chaix@cirad.fr, jean-francois.rami@cirad.fr

³ UMR AGAP Institut, Univ Montpellier, CIRAD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France.

⁴ UMR ITAP-INRAE, 34196 MONTPELLIER, France. jean-michel.roger@inrae.fr

Nous avons développé un modèle de prédiction de la teneur en protéine, sur des données spectrales d'une « core-collection » de grains de sorgho. Les spectres ont été mesurés en 2006 (Alencar Figueiredo et al (2006)). Cependant, ce modèle ne permet pas de prédire des échantillons de sorgho sur la base de spectres obtenus dans d'autres conditions que celles des échantillons de la base spectrale d'étalonnage (différence d'humidité, maintenance de spectromètre). Les spectres des jeux de tests ont été mesurés sur les mêmes échantillons en 2011, sont issus d'un croisement entre deux populations (Diarah Guindo (2016)). La base de test baptisée P114C (P114 conditionnée). Elle contient les spectres X1 acquis en conditions contrôlées, en termes d'humidité des grains (11.5%) mais pas de spectromètre. La deuxième version de la base de test P114C baptisée P114NC (P114 non conditionnée) est constituée des spectres X2 acquis en conditions non contrôlées d'humidité.

Les spectres pour tous les échantillons ont été acquis avec le même spectromètre FOSS NIRS 6500, sur une gamme spectrale allant de 900nm à 2500nm, avec une résolution de 2nm. Une opération de maintenance du spectromètre a eu lieu entre les mesures spectrales de H3 (réalisées en 2007) et celles de P114 (réalisées en 2011).

Pour répondre aux problèmes de robustesse du modèle d'étalonnage, nous avons appliqué la méthode de correction « projection orthogonale dynamique » (DOP), développée par Roger et al. (2003). Cette méthode, qui repose sur un jeu de spectres standards (sélectionnés de la base à prédire), est basée sur le calcul des spectres idéaux (X_{h1}/X_{h2}) qui auraient été obtenus en absence des grandeurs d'influences, à partir des valeurs de références des standards ($X1_{std}/X2_{std}$) et les spectres mesurés de la base d'étalonnage ($X0$). La différence entre les standards mesurés et les spectres calculés (standards virtuels) (matrices d'influences : $D1=X_{h1}-X1_{std}$ et $D2=X_{h2}-X2_{std}$) permet de corriger la base spectrale d'étalonnage par la méthode d'orthogonalisation des paramètres externes (EPO).

Le principe de la méthode EPO (External Parameter Orthogonalisation), développée par Roger et al. (2003), consiste à construire la matrice D contenant les informations de perturbations. Puis, le sous espace spectral généré par cette matrice est estimé en appliquant une ACP sur D. Nous avons combiné les deux matrices de différences afin de tenir compte de toutes les perturbations au même temps. La matrice P des K premiers loadings de l'ACP est une base orthonormale de cet espace. Pour neutraliser les perturbations, la base spectrale d'étalonnage est projetée orthogonalement à cette base selon la formule suivante : $X^* = X(I - PPT)$. Ensuite, un modèle est reconstruit avec la matrice d'étalonnage corrigée X^* .

Le nouveau modèle M12 corrigé est construit en appliquant l'EPO sur l'ensemble des jeux de données, les spectres de la base d'étalonnage ($X0_{cal}$), les spectres sélectionnés ($X1_{std}/X2_{std}$) et les spectres calculés (X_{h1}/X_{h2}), pour les deux jeux de données de test ($[X0_{cal} * EPO ([D1, D2], M), [X_{h1}, X_{h2}] * EPO ([D1, D2], M), [X1_{std}, X2_{std}] * EPO ([D1, D2], M)]$), en utilisant une EPO à M composantes.

Ensuite il a été testé sur les échantillons qui ne sont pas impliqués dans la correction du modèle et sur le jeu de test de $X0_{test}$.

Ce modèles de prédiction basé sur les spectres corrigés est utilisé pour prédire différentes bases perturbées ou non par des grandeurs d'influence et comparés aux résultats du modèle non corrigé. Nous avons obtenu

de meilleures performances en prédiction du modèle corrigé tant pour des jeux de données perturbés que non perturbés. Dans notre cas, ce modèle robuste permet de s'affranchir à la fois de l'étape de conditionnement des grains vis-à-vis de l'humidité, de l'effet de la maintenance du spectromètre effectuée et de l'effet du temps sur l'appareil.

De même, dans le cas de changement de spectromètres ou de transferts d'étalonnage sur des spectromètres de partenaires la méthode DOP permet de transférer ses modèles d'étalonnage sur les nouveaux appareils.

Évaluer les teneurs en métabolites secondaires par spectrométrie proche infrarouge : application au phénotypage des contenus en isoflavones de la graine de soja à usage alimentaire

Jean BRUSTEL¹, Cécile LEVASSEUR-GARCIA², Jean DAYDE², Monique BERGER²

¹ LIDEA SEEDS, Dom de Sandreau, 31700 Mondonville – France

² ECOLE d'INGENIEUR de PURPAN, Laboratoire d'Analyses Physico-chimiques (LAP), 31076 Toulouse – France

La consommation croissante d'aliments à base de soja se heurte aujourd'hui à la présence dans les graines d'isoflavones, molécules aux effets potentiellement phytoœstrogéniques. La transformation alimentaire de la graine n'est réalisée que sur les cotylédons. Pourtant, les études actuelles se concentrent sur la graine entière dont les fractions ont des teneurs et compositions très différentes (leur contrôle génétique est indépendant). L'objectif du projet Soyfood+ est d'intégrer la teneur en isoflavones du cotylédon dans les schémas de sélection afin de développer des variétés à teneur réduite. La spectrométrie proche-infrarouge pourrait assurer un phénotypage haut débit de la teneur en isoflavones des cotylédons à partir d'analyses spectrales de graines entières. Une première série d'analyses a été réalisée à partir d'un essai pluriannuel de 4 variétés selon 4 itinéraires culturaux. Les analyses de référence des teneurs en isoflavones ont été réalisées par HPLC-DAD-UV dans les cotylédons après lyophilisation, dissection, broyage puis extraction liquide/solide des échantillons. 124 spectres, moyennes de 3 répétitions, ont été collectés sur les graines entières. La base de données spectrales, prétraitée par SNV, a permis d'obtenir des performances de régression PLS prometteuses ($r^2_{\text{crossval}} = 0.78$ et $\text{RMSECV} = 0.35 \text{ mg/gMS}$).

Correction de l'effet de la variation de l'humidité du bois sur l'étalonnage des modèles de discrimination SPIR : cas de trois espèces de Dalbergia de Madagascar

RANDRIAMBININTSOA Tiavina^{1,2}, RAOBELINA Andry Clarel³, CHAIX Gilles^{1,2}, RAZAFIMAHATRATRA Andriambelo Radonirina^{1,2}, RAMANANANTOANDRO Tahiana^{1,2}

¹ CIRAD - UMR AGAP Institut, Montpellier, France

² AGAP Institut, Univ Montpellier, CIRAD, INRA, Institut Agro, Montpellier, France

³ Université d'Antananarivo, Ecole Supérieure des Sciences Agronomiques, Antananarivo 101, Madagascar
andryclarel@gmail.com

La Spectroscopie Proche InfraRouge (SPIR) associée aux analyses chimiométriques constitue une technique alternative qui est utilisée depuis ces dernières années dans l'identification des essences forestières. Peu d'attention a pourtant été accordée dans la littérature sur application sur terrain de cette technique où des grandeurs d'influences extérieures peuvent intervenir sur la composition chimique du bois et les réponses du spectromètre. Le changement des conditions du milieu d'expérimentation (température, humidité relative de l'air) influe sur l'humidité du bois à cause de son hygroscopicité, fait varier par conséquent les réponses du spectromètre et diminue la robustesse des modèles de classification. La considération de ces grandeurs d'influence est alors d'un intérêt primordial si l'on veut utiliser les modèles d'étalonnage dans des environnements non contrôlés. Dans ce contexte, la présente étude a pour objectif de corriger l'effet de la variation de l'humidité du bois sur l'étalonnage de modèles de de discrimination de trois espèces de palissandres malgaches (*Dalbergia chlorocarpa* R. Vig., *Dalbergia orientalis* Bosser & R. Rabev et *Dalbergia purpurascens* Baill.) à partir des spectres proches infrarouges du bois. Pour conduire l'étude, 99 microcarottes de bois ont été prélevés sur 99 arbres situés à l'intérieur et autour de plusieurs aires protégées de Madagascar. Les carottes ont été conditionnés à quatre niveaux d'humidité Th(%) = [8, 12, 16, 20]. Six spectres ont été mesurés sur la partie duramen de chaque microcarotte pour chacun des quatre états d'humidité. Les échantillons ont ensuite été partagés en trois lots: S0 pour l'étalonnage du modèle non corrigé, S1 pour la correction du modèle et S2 pour les tests. Un modèle PLSDA(Th%=12%) a été étalonné à partir des spectre X0[Th=12%] acquis à 12% d'humidité. Une diminution de la performance du modèle PLSDA(Th%=12%) est constaté lorsqu'il est utilisé pour prédire les spectres de test X2[Th (%) = 8%], X2[Th (%) = 16%] et X2[Th (%) = 20%] mesurés aux trois autres états d'humidité. Cela a permis d'appréhender l'effet de la variation de l'humidité sur la performance des modèles, avec un pourcentage de bien classés qui a chuté de 83% à 33,3% issu de la classification des spectres de test X2[Th=12%] et X2[Th=20%]. Trois méthodes dont la Correction à priori, Model Update et EPO ont été utilisée pour corriger et améliorer la robustesse des modèles. L'orthogonalisation EPO et Model update ont permis de mieux prendre en compte dans les modèles les perturbations liés à la variation de l'humidité du bois. L'utilisation des deux méthodes ont permis d'améliorer la performance du modèle de 55% à 70% d'individus bien classés issu de la prédiction des spectres de test X2[Th%=8%], X2[Th%=12%], X2[Th%=16%] et X2[Th%=20%]. Les résultats sont prometteurs dans la finalité d'utilisation de l'outil dans la routine d'identification des bois de Dalbergia de Madagascar. L'enrichissement des données spectrales par des spectres PIR du bois prises à des intervalles d'humidité plus étroites est important afin d'avoir des spectres plus représentatifs des états d'humidités du bois qui pourrait être rencontrés sur site.

Evaluation des apports potentiels de l'imagerie hyperspectrale pour le phénotypage variétal du froment d'hiver en Wallonie

Damien VINCKE¹, Damien EYLENBOSCH², Philippe VERMEULEN¹, Benoît MERCATORIS³, Vincent BAETEN¹

1 Centre wallon de Recherches agronomiques (CRA-W), Département Connaissance et Valorisation des Produits, Unité qualité et authentification des produits, Bâtiment Maurice Henseval, Chaussée de Namur 24, 5030 Gembloux, Belgique

2 Centre wallon de Recherches agronomiques (CRA-W), Département Productions agricoles, Unité Productions végétales, Bâtiment Arthur Petermann, Rue du Bordia 4, 5030 Gembloux, Belgique

3 Université de Liège Gembloux Agro-Bio Tech (ULg GxABT), Biosystems Dynamics and exchanges, Passage des Déportés 2, 5030 Gembloux, Belgique

d.vincke@cra.wallonie.be

FoodFeedQuality@cra.wallonie.be

Les travaux illustrés dans cette présentation font partie d'une thèse s'inscrivant dans le contexte du développement de méthodes de phénotypage du blé tendre d'hiver en laboratoire et au champ. Ce sujet de recherche a pour but de contribuer à l'amélioration de la sélection et de l'évaluation variétale ainsi qu'à l'évaluation des stress biotiques et abiotiques. L'imagerie hyperspectrale est considérée comme prometteuse pour le phénotypage et l'évaluation variétale, notamment concernant la détection de maladies des cultures. Toutefois, dans la plupart de ces travaux, l'imagerie hyperspectrale est mise en œuvre en conditions contrôlées (laboratoire ou serre). Peu d'études ont mis en œuvre cette technique directement sur le terrain.

Afin d'évaluer, le potentiel de l'imagerie hyperspectrale pour le phénotypage du blé tendre d'hiver, cette recherche vise à développer une méthode de détection de la fusariose. Pour ce faire, dans un premier temps, des analyses d'épis sont réalisées en laboratoire et une interprétation de la signature spectrale est proposée. Dans un second temps, la mise en œuvre de l'imagerie hyperspectrale en conditions extérieures sur parcelles d'essais est étudiée afin de déterminer si l'information spectrale acquise permet la détection d'épis et l'évaluation de leur état sanitaire en plein champ.

Les premiers résultats obtenus en laboratoire semblent indiquer la possibilité de différencier les épis sains des épis fusariés. En outre, la méthode développée en laboratoire semble également montrer une bonne corrélation avec la sévérité d'infection de fusariose observée visuellement sur les épis.

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre d'un projet de la région wallonne (PhenWheat) financé par le Service Public de Wallonie (SPW), Direction Générale Agriculture Ressources Naturelles Environnement (DGO3 - DGARNE), Direction Recherche et Développement, projet D31-1385/S1 et d'un projet européen (Invite) financé par le programme de recherche et d'innovation Horizon 2020 de l'Union européenne, sous la convention de subvention N°817970.

Apport de la spectroscopie proche infrarouge pour les thématiques de recherches de l'ESSA-Forêts à Madagascar

RAMANANANTOANDRO Tahiana, RASOAMANANA Lalaina Patricia

Université d'Antananarivo, Ecole Supérieure des Sciences Agronomiques, Département Eaux et Forêts, Antananarivo 101, Madagascar

ramananantoandro@gmail.com

patriciarasoamanana@gmail.com

Le laboratoire de l'Unité de Formation et de Recherche Sciences du Bois est un laboratoire de recherche de l'Ecole Supérieure des Sciences Agronomiques à l'Université d'Antananarivo (Madagascar). Il a été créé en 2008 et se spécialise sur toutes les recherches autour de la caractérisation des propriétés physiques, mécaniques et chimiques des bois en travaillant essentiellement sur les essences de Madagascar. Ces dernières années, le laboratoire s'oriente plus sur le développement de la spectrométrie proche infrarouge appliquée sur les bois. Plusieurs raisons ont mené à ce choix. Madagascar dispose de plus de 4000 espèces d'espèces ligneuses. Néanmoins, on ne connaît que les caractéristiques des 5% de ces essences, qui entraîne généralement une coupe sélective des essences traditionnelles et ainsi une sous exploitation des espèces non connues. Afin de promouvoir l'utilisation rationnelle et durable des ressources forestières, la connaissance des autres essences s'avère nécessaire. Néanmoins, la mesure des propriétés en suivant les normes (méthodes usuelles de laboratoires) sont destructives, lentes et généralement coûteuses. Par ailleurs, au cours de ces dernières années, l'exploitation illégale des bois précieux est devenue un problème récurrent à Madagascar, menaçant gravement ses écosystèmes et sa biodiversité exceptionnelle. En plus de priver le gouvernement de Madagascar de millions de dollars de revenus, l'exploitation illégale de bois précieux a de graves impacts à la fois sur la forêt et les peuples autochtones. Les balises réglementaires n'arrivent pas à endiguer l'exploitation illicite de ces ressources. En effet, le commerce illégal de ces bois précieux s'est poursuivi sans relâche, car les permis sont fréquemment falsifiés pour indiquer que le bois expédié a une origine différente ou pour identifier le bois en utilisant un nom général qui ne peut être associé à un genre ou une espèce particulière afin d'éviter les difficultés aux points de contrôle. Il est ainsi primordial de développer un outil d'aide à l'identification de ces essences malgaches et qui doit être à la fois abordable, non destructif, rapide et facile à utiliser. En plus de l'anatomie du bois et des propriétés physico-chimiques du bois, le laboratoire s'est aussi tourné vers la SPIR qui jusqu'ici a été démontré être une méthode performante et répondant à ces attentes. Nous allons présenter quelques résultats que nous avons trouvé sur la prédiction de propriétés physiques, mécaniques et chimiques des bois et sur l'identification des essences, ainsi que les étudiants encadrés et les projets en collaboration.

Les opportunités de l'exploitation du MIR dans l'élevage des animaux laitiers, bien plus que le simple phénotypage par prédiction de composés majeurs du lait

Nicolas GENGLER¹, Groupe FUTUROSPECTRE^{1,2,3,4}

1 ULiège - GxABT, , 5030 Gembloux – Belgique

2 CRA-W, 5030 Gembloux – Belgique

3 awé groupe (Elevéo), 5190 Ciney – Belgique

4 Comité du Lait, 4651 Battice – Belgique

nicolas.gengler@uliege.be

Le défi de la gestion et de l'élevage des vaches laitières est de s'adapter en permanence à l'évolution des conditions de production sous des contraintes socio-économiques. Si la gestion et l'élevage répondent à des délais d'action différents, ils ont tous deux besoins de phénotypes pertinents permettant un suivi précis de l'état des vaches, de leur santé, de leur comportement et de leur bien-être ainsi que de leur impact environnemental et de la qualité de leurs produits. La composition du lait a été identifiée comme une source d'information importante car elle pourrait refléter, au moins partiellement, tous ces éléments. La spectrométrie dans l'infrarouge moyen (MIR) est mise à profit pour prédire les composants majeurs conventionnels du lait tels que les matières grasses, les protéines, l'urée et le lactose. Mais, la composition du lait est beaucoup plus complexe et d'autres composants non conventionnels du lait, souvent prédictible par MIR, se sont révélés informatifs. Ces nouveaux phénotypes à base de lait devraient être bon marché, obtenus rapidement, utilisables à grande échelle, robustes et fiables. Dans une première approche, de nouveaux phénotypes peuvent être prédits à partir de spectres MIR en utilisant des techniques basées sur des équations de prédiction classiques. Cette méthode a été utilisée avec succès pour de nombreux caractères nouveaux (par exemple, les acides gras, la lactoferrine, les minéraux, les propriétés technologiques du lait, le citrate) qui peuvent ensuite être utiles à des fins de gestion et de sélection. Différentes innovations et extensions du cadre habituel seront présentées qui ont été développées en particulier par le groupe de recherche conjointe CRA-W et ULiège – GxABT de Gembloux, Belgique dans le cadre de la collaboration wallonne FUTUROSPECTRE formée en 2008 impliquant aussi le laboratoire d'analyse Comité du Lait et la structure d'élevage Elevéo. Parmi ces innovations, une première consiste à considérer la nature longitudinale de la relation entre le trait d'intérêt et les spectres MIR (par exemple, pour prédire le méthane à partir de MIR). Une autre évite les étapes intermédiaires, les erreurs de prédiction peuvent être minimisées lorsque les traits d'intérêt (par exemple, le méthane, le bilan énergétique, la cétose) sont directement prédits à partir des spectres MIR et pas à travers des composés du lait déjà eux-mêmes prédits préalablement. En particulier, en acceptant le concept de caractères indicateurs basés sur des prédicteurs MIR ayant une plus faible fiabilité, de nouvelles opportunités s'ouvrent ici. En outre, à condition que les données MIR soient disponibles à grande échelle, des phénotypes basés sur le MIR décrivant ces caractères permettront de nouvelles applications dans la gestion des troupeaux, mais aussi des évaluations génétiques et génomiques innovantes. L'introduction de ces caractères nouveaux dans les objectifs de sélection nécessitera des recherches supplémentaires pour clarifier les poids socio-économiques et les corrélations génétiques avec d'autres caractères d'intérêt.

Phénotypage des animaux par SPIR - exemples et perspectives

Laurent BONNAL, Denis BASTIANELLI

1 CIRAD, UMR SELMET, F-34398 Montpellier, France.

2 SELMET, Univ Montpellier, CIRAD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France.

Laurent.bonnal@cirad.fr; denis.bastianelli@cirad.fr

L'utilisation de la SPIR pour le phénotypage animal est nettement moins répandu que pour les végétaux. Les raisons de ce décalage sont nombreuses : les modes de sélection et les effectifs concernés ne sont pas les mêmes, et par ailleurs les mesures par SPIR impliquent souvent de travailler sur la carcasse, la mesure étant alors destructive.

Pour autant la SPIR a prouvé son efficacité pour caractériser un certain nombre de paramètres qui peuvent avoir un intérêt en sélection : qualité des produits, digestibilité, certaines données physiologiques etc. Les mesures les plus simples concernent les produits « exportés » par l'animal lait, œufs, laine ... qui n'impliquent pas son abattage. La qualité du lait est mesurée depuis longtemps par MIR - parfois par SPIR - et donne accès à des paramètres biochimiques, technologiques et physiologiques utilisés en sélection. Des étalonnages ont été publiés pour des paramètres de composition des œufs et pour la qualité de la laine (teneur en suif, propriétés technologiques).

La SPIR est également utilisées sur les fèces/digesta et permet d'accéder à certains caractères liés à la digestibilité, l'efficacité alimentaire ou la physiologie digestive. On a ainsi pu phénotyper des poulets sur leur capacité de digestion, et les perspectives sont importantes chez les ruminants pour indexer les animaux sur leur métabolisme ruminal.

Après abattage, la qualité de la viande peut être évaluée par SPIR et servir de base à la sélection. Les mesures proposées peuvent être faites sur la viande fraîche – parfois directement sur la carcasse – ou sur des produits plus ou moins transformés (jambon, foie gras ...), donnant accès à des paramètres technologiques.

La mesure par SPIR de paramètres in vivo est plus difficile puisque la peau représente une barrière à la pénétration de la lumière. Des mesures ont toutefois été testées sur la composition en AG du gras cutané. Avec le développement d'applications en médecine, la mise au point d'étalonnages pour certains paramètres physiologiques (sucres, autres métabolites) pourrait être réalisée in vivo (à travers la peau) ou ex vivo (prélèvement de sang) et donner accès à des caractères liés au métabolisme.

Les perspectives du phénotypage par SPIR sont importantes, dans un contexte où les nouvelles techniques de sélection permettent la prise en compte de nombreuses variables, et où les futurs caractères d'intérêt (efficacité, robustesse, performances environnementales) sont complexes et nécessitent la prise en compte de vecteurs d'information de plus en plus importants.

Applications de la SPIR et HSI à l'étude des produits carnés. Retour d'expériences

Jean-Marc GOUJON, Ronan LE PAGE, Luiz POFFO

*Institut FOTON, Université de Rennes 1,
CNRS UMR 6082 - ENSSAT - 6 rue de Kérampont, 22305 Lannion – France*

Entre 2010 et 2020, l'Institut FOTON a participé comme partenaire à plusieurs projets collaboratifs centrés sur l'utilisation de la Spectroscopie visible et Proche InfraRouge, incluant l'Imagerie Hyperspectrale, appliqués aux produits carnés. Ces projets ont pu bénéficier de la labellisation du pôle Valorial, et de l'accompagnement du ZooPôle de Ploufragan.

SpectrAG : quantification des acides gras sur viande de porc à l'abattoir - Partenaires : Valorex, IFIP, Laréal, Institut Foton, INRAE, LIMATB, BBC.

Predict : Prédiction du défaut de structuration pour le jambon (perte d'évaporation lors de la cuisson) - Partenaires : Cooperl, IFIP, Broceliande, Edixia, Institut Foton.

Specmeat : Spectroscopie visible proche infrarouge pour la qualité de la viande bovine et bien-être animal - Partenaires : Valorex, INRA-IMRH, BBC, IDELE, Institut Foton, Terrena.

Hyperscan : Tri des pièces de découpe de porc par scanner à induction magnétique et imageur hyperspectral - Partenaires : IFIP, Agrocampus-Ouest, Institut Foton, INRAE-Pegase.

Des méthodes de classifications PLS ont été utilisées, en comparaison avec des méthodes de référence.

Nous présenterons un retour d'expériences sur ces projets, en insistant sur leurs particularités :

- Les projets concernent la filière bovine et porcine,
- Les acquisitions ont été effectuées dans les lieux d'élevage, d'abattage, ou de découpe. Des choix d'équipements, et le développement de sondes spécifiques ont été nécessaires, ainsi que, dans le cas de l'imagerie hyperspectrale, la conception d'un banc garantissant la stabilité de l'éclairage des échantillons.
- Certains projets visaient également à comparer la spectroscopie Proche InfraRouge avec des techniques alternatives : spectroscopie Raman, IRM...
- Ces projets à visée industrielle ont nécessité de prendre en compte l'ergonomie des équipements et interfaces, incluant l'insertion des résultats dans le système d'information de l'entreprise.

Image Decomposition Encoding and Localization (IDEL) a new proposal for hyperspectral imaging

Mohamad AHMAD^{1,2}, Raffaele VITALE², Carolina S. SILVA³, Cyril RUCKEBUSCH², Marina COCCHI¹

¹ *Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Via Campi 103, 41125 Modena – Italy*

² *Université de Lille, CNRS, LASIRE, Laboratoire de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement, Cité scientifique, F-59000 Lille – France*

³ *University of Malta, Department of Food Sciences and Nutrition, Msida 2080, Malta*
marina.cocchi@unimore.it

Here we present a novel approach, called Image Decomposition, Encoding and Localization (IDEL) [1], for exploratory analysis of spectral images. The aim is to retrieve all spatial contributions while maintaining the significant information within the spectral domain, in situation where samples complexity manifests with lack of spectral selectivity and spatial overlap of different chemical contribution and/or physical structure. In particular, a spatial perspective is taken for the analysis of spectral images. The methodology benefits from wavelet transform to exploit spatial features, encoding the outcoming images into a set of descriptors and utilizing multivariate analysis to isolate and extract the significant spatial-spectral information. The encoded spatial information is fully exploited applying a semi-automatic procedure (that is data driven), as a result a set of distinct spatial features linked to the specific spectral channels at which they are observable are obtained, hence maintaining chemical interpretability.

A forensic case study of near-infrared images of biological stains on cotton fabrics is used as a benchmark. The stain and fabric have hardly distinguishable spectral signatures due to strong scattering effects that originate from the rough surface of the fabric and the high spectral absorbance of cotton in the near-infrared range. There is no selective information that can isolate signals related to these two components in the spectral images under study, and the complex spatial structure is highly interconnected to the spectral signatures. Projection of similar images on the derived model allowed, as well, to highlight the salient spatial features present in the test images.

The results obtained in this work are encouraging to be generalized to any application field employing spectral imaging for the visualization of materials characterized by high morphological content, such as biological/vegetal tissues, wooden materials, etc.

Reference

[1] M. Ahmad, R. Vitale, C. S. Silva, C. Ruckebusch, M. Cocchi, *Analytica Chimica Acta*, 2021, 339285, <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.339285>.

Improving spectroscopic-based authentication by data fusion

Frederico MARINI

Dep. Chemistry, Univ. Of Rome La Sapienza, P.le Aldo Moro 5, I-00185 Rome, Italy

federico.marini@uniroma1.it

With the growing complexity of analytical problems, especially in multidisciplinary fields such as food authentication and traceability, forensics, and/or the -omic sciences, and the increasing availability of high throughput techniques which allow the investigation of many samples per day, it is not infrequent that a matrix be characterized by multiple platforms. In this context, it may be useful to use the possibility to acquire signals from more than one instrumental technique on each sample and, therefore, to use the combined information from the two (or more) techniques to build the final chemometric model, be it exploratory or predictive: such an approach is generally called multi-block data analysis or "data-fusion." In this way, especially if the instruments chosen possess complementary features, it is possible to benefit from the advantages and the specific characteristics of each, to create a final model that is more reliable and robust [1].

Moreover, whenever needed, data can be tailoredly made multi-block by dividing the variable scale (e.g., wavelength range), into subsets, possibly with a chemical/physico-chemical meaning, so to have a better understanding/characterization of the systems or to improve performances [2]. Recently, the possibility of generating multi-block data from differently preprocessed (spectroscopic) data matrices has also been proposed [3].

In this communication, some recently proposed strategies for data-fusion applicable to the fingerprints resulting from different spectroscopic platforms, will be presented and discussed by means of some real-world examples, so to illustrate how the development of integrated models can provide the capability to efficiently deal with different level of complexity and data configurations.

Reference

[1] P. Mishra, J.M. Roger, D. Jouan-Rimbaud-Bouveresse, A. Biancolillo, F. Marini, A. Nordon, D.N. Rutledge, Recent trends in multi-block data analysis in chemometrics for multi-source data integration, *Trends Anal. Chem.* 137 (2021) 116206.

[2] A. Biancolillo, S. De Luca, S. Bassi, L. Roudier, R. Bucci, A.D. Magrì, F. Marini, Authentication of an Italian PDO hazelnut ("nocciola romana") by NIR spectroscopy, *Environ. Sci. Pollut. Res.* 25 (2018) 28780–28786.

[3] P. Mishra, A. Biancolillo, J.M. Roger, F. Marini, D.N. Rutledge, New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques, *Trends Anal. Chem.* 132 (2020) 116045.

Posters

Comparison of portable and benchtop spectral imaging for the characterization and identification of bacteria on food-related surfaces

Anastasia SWANSON¹, Ana HERRERO-LANGREO¹, Mariateresa FERONE¹, Sakshi LAMBA¹, Junli XU¹, Vicky CAPONIGRO¹, Amalia G.M. SCANELL^{2,3,4}, Aoife GOWEN^{1,2}

1 UCD School of Biosystems and Food Engineering, University College of Dublin (UCD), Belfield, Dublin 4 Ireland

2 UCD Institute of Food and Health

3 UCD Center for Food Safety

4 UCD School of Agriculture and Food Science

This work aims to study the potential of portable hyperspectral imaging instruments, both in the VNIR (397-1003) and SWIR (1121-1673 nm) range, to detect and differentiate food pathogenic bacteria deposited and dried on food-grade stainless steel surfaces. The performance of portable hyperspectral imaging systems is compared to a conventional benchtop set up for reference purposes.

Data was collected using conventional and portable instruments in VNIR and SWIR spectral ranges for five bacteria species dried on stainless steel: *Bacillus subtilis*, *Cronobacter sakazakii*, *Escherichia coli*, *Lactobacillus plantarum*, and *Pseudomonas fluorescens*. As a first step to discriminating between bacteria species, partial least square discriminant analysis (PLS-DA) models were built at the pixel level to differentiate between gram-positive (*B. subtilis*, *L. plantarum*) and gram-negative species (*C. sakazakii*, *E. coli*, *P. fluorescens*). Then, PLS-DA models were built to discriminate between bacteria species within gram type. Model success was measured by accuracy and Mathew's Correlation Coefficient (MCC) of prediction on an independent test set of samples. While all models allowed to distinguish between Gram-positive and Gram-negative bacteria. Only models on the VNIR range were successful at discriminating between gram-positive bacteria species (accuracy = 0.78, MCC = 0.79), and no models were successful at discriminating between gram-negative bacteria. These results show the potential of portable visible hyperspectral imaging to survey food pathogenic bacteria contamination in food related surfaces.

Funding for this research was provided by the European Research Council (ERC) under the starting grant programme ERC-2013-StG call-Proposal No. 335508-BioWater; and Science Foundation Ireland (SFI) under the investigators programme Proposal ID 15/IA/2984-HyperMicroMacro.