

22éme rencontre HélioSPIR, le 25/11/2021

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

**Présenté par:** Samira SALMI Encadré par:

Gilles CHAIX (Dr) Jean Michel ROGER (Dr, HDR) Jean François RAMI ( Dr)

### Soutenance stage Master 2











# **Objectifs**

Développement d'un modèle d'étalonnage robuste, pour prédire la teneur en protéines à partir des données existantes (au CIRAD)

<u>Spectres PIR</u> : Obtenus sur des grains de sorgho, avec le même spectromètre FOSS NIR 6500

# Développement de modèle d'étalonnage Modèle d'étalonnage M0



# Prétraitement

Figure 1

(a) Spectres PIR bruts obtenus sur des grains de sorgho.



Wavelength (nm)

(b) Spectres PIR obtenus sur des grains de sorgho, après prétraitement avec une SNV et une dérivée 2 (l=15,p=3, d=2).



Wavelength (nm)

# Développement de modèle d'étalonnage Modèle d'étalonnage M0



### Développement de modèle d'étalonnage Modèle d'étalonnage M0



### Résultats de la prédiction avec le modèle d'étalonnage M0



Résultats de prédiction sur le test H3

## Résultats de la prédiction avec le modèle d'étalonnage M0

09/12/2021

Résultats de prédiction sur d'autres jeux de test
P114C et P114NC



### Description des données spectrales et des mesures de références (Protéines)



### Description des données spectrales et des mesures de références (Protéines)



Base		Echantillon	Ν	Moyenne	Minimum	Maximum	Ecart-type
H3	Cal	Core collection	100	13,90	7,26	18,01	1,96
	Test		36	14,17	9,43	17,73	2,17
P114C	Test	Croisement entre deux populations	45	11,80	9,20	16,00	1,32
P114NC	Test		45				

# Analyse en composantes principales



Figure 3 : Plans factoriels CP1/CP2 de l'ACP.

Afin de rendre le modèle d'étalonnage développé robuste et limiter les effets des perturbations

Une méthode d'orthogonalisation a été explorée

# Principe de la méthode d'orthogonalisation

La méthode External Parameter Orthogonalisation; EPO. Roger et al. (2003)



D matrice de différence, P matrice des loadings, P' transposée de P, K facteur de l'EPO.

# Principe de la méthode d'orthogonalisation

La méthode External Parameter Orthogonalisation; EPO



D matrice de différence, P matrice des loadings, P' transposée de P, K facteur de l'EPO.

# Principe de la méthode d'orthogonalisation

La méthode External Parameter Orthogonalisation; EPO



D matrice de différence, P matrice des loadings , P' transposée de P, K facteur de l'EPO.

### Dans notre cas :



### Méthode Dynamic Orthogonal Projection ; DOP. Roger et al. (2006)





### Méthode Dynamic Orthogonal Projection ; DOP



# Méthode Dynamic Orthogonal Projection ; DOP



### Méthode Dynamic Orthogonal Projection ; DOP



Développement d'un modèle d'étalonnage avec la correction DOP

 $\succ$ Modèle corrigé M12

Xcal



KS: Algorithme Kennard stone

DOP: projection orthogonale dynamique

EPO: orthogonalisation des paramètres externes

# Résultats de la prédiction avec le modèle d'étalonnage corrigé M12



### Résultats de la prédiction avec le modèle d'étalonnage corrigé M12



Résultats du test du modèle corrigé M12 sur des échantillons de test H3

# Transfert d'étalonnage avec la méthode DOP

Spectromètre FOSS NIR 6500 (spectres de la core collection) / spectromètre TANGO (spectres de 2018 et 2019)

# Transfert d'étalonnage avec la méthode DOP

Spectromètre FOSS NIR 6500 (spectres de la core collection) / spectromètre TANGO (spectres de 2018 et 2019)

 Résultats de la prédiction des jeux de données obtenus avec le TANGO, avant correction avec DOP



# Transfert d'étalonnage avec la méthode DOP

Spectromètre FOSS NIR 6500 (spectres de la core collection) / spectromètre TANGO (spectres de 2018 et 2019)

Résultats de la prédiction des jeux de données obtenus avec le TANGO, avant correction avec DOP



Résultats de la prédiction des jeux de données obtenus avec le TANGO, après correction avec DOP



26

### Conclusion

La méthode DOP projection orthogonale dynamique

- 1. Nécessite pas la mesure de nouveaux échantillons standards
- 2. Estime les spectres idéaux qui auraient dû être mesurés en absence de perturbation
- La différence entre les spectres mesurés et les spectres calculés, permet d'identifier le sous espace spectral des perturbations et de l'éliminer du modèle par projection orthogonale
- ✓ Modèle d'étalonnage robuste indépendant des grandeurs d'influences et reste performant aussi en absence des perturbations.
  ✓ Valable en transfert d'étalonnage entre les spectromètres.

# Merci de votre attention

Des questions ?