



Introduction à la spectroscopie de sol

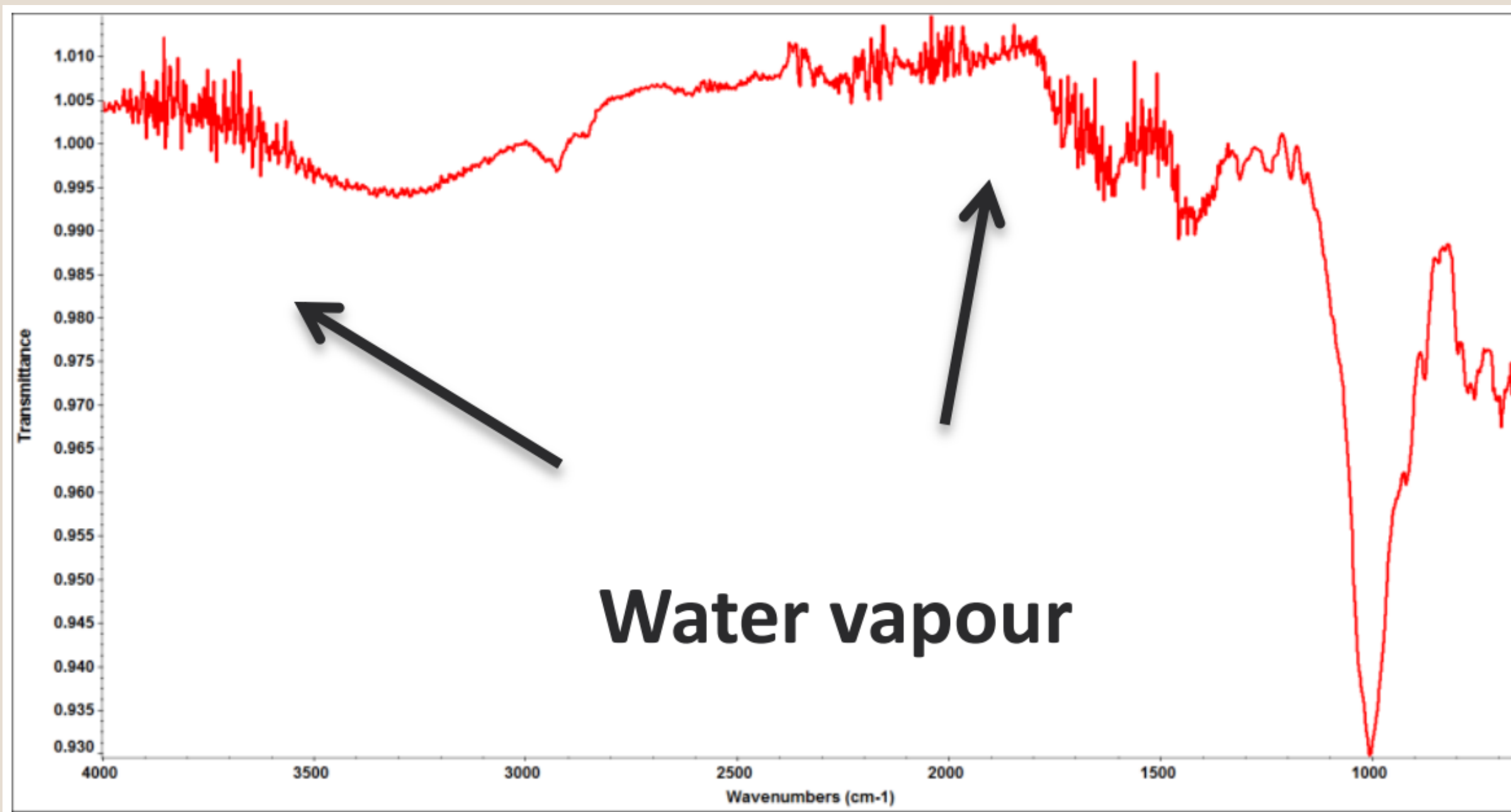
Issam Barra, PhD

**Expert en spectroscopie de Sol,
GSP-FAO**

Issam.barra@fao.org

Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

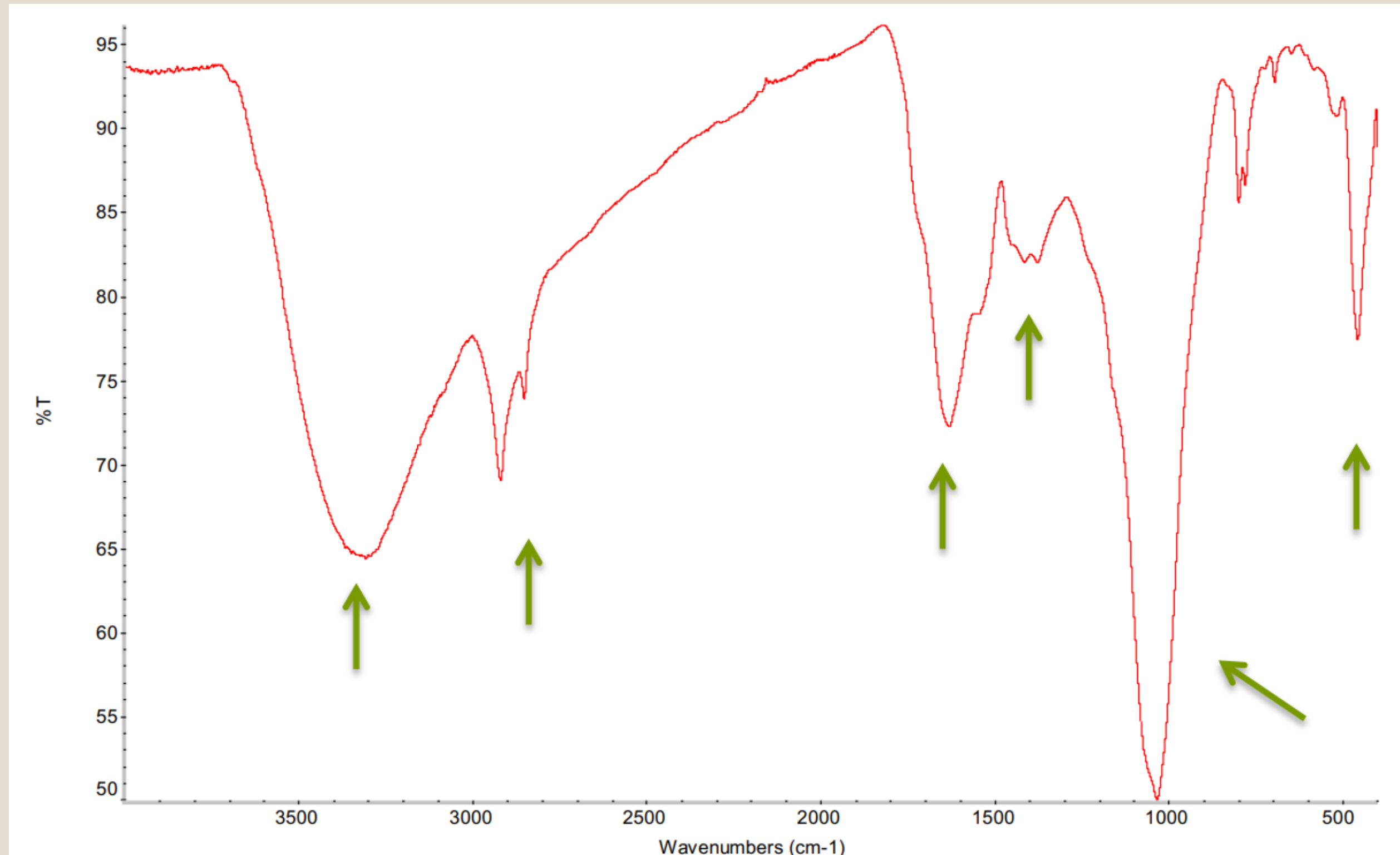
1- Utiliser des données de haute qualité, par exemple : un bon rapport signal/bruit, absence de pics de vapeur d'eau ou d'interférences dues au dioxyde de carbone. La bande la plus intense doit avoir une absorbance inférieure à 2.



Exemple d'un spectre de mauvaise qualité

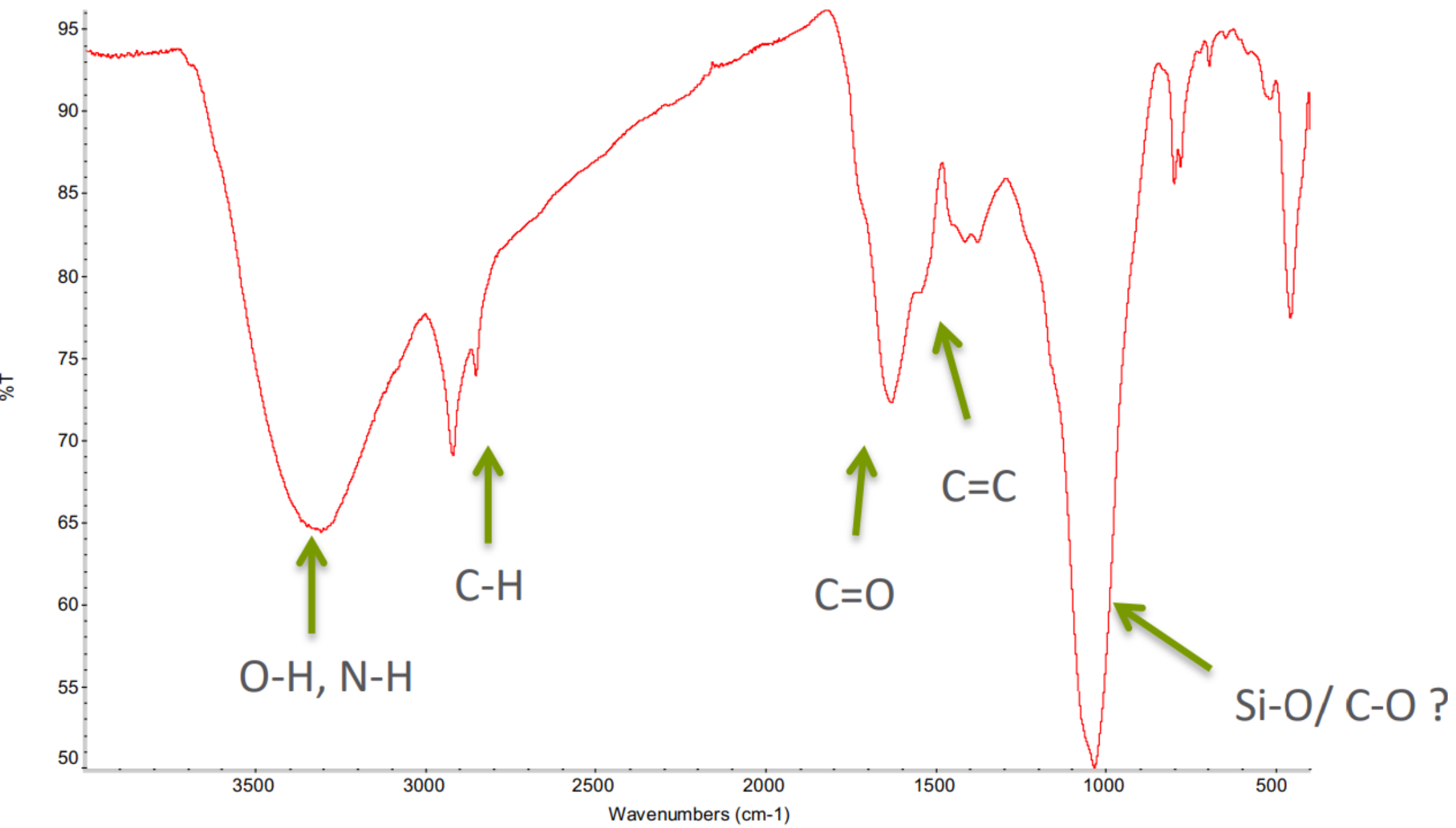
Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

2- Observer le spectre de gauche à droite, en notant la fréquence (cm^{-1}) des pics d'absorption intenses.



Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

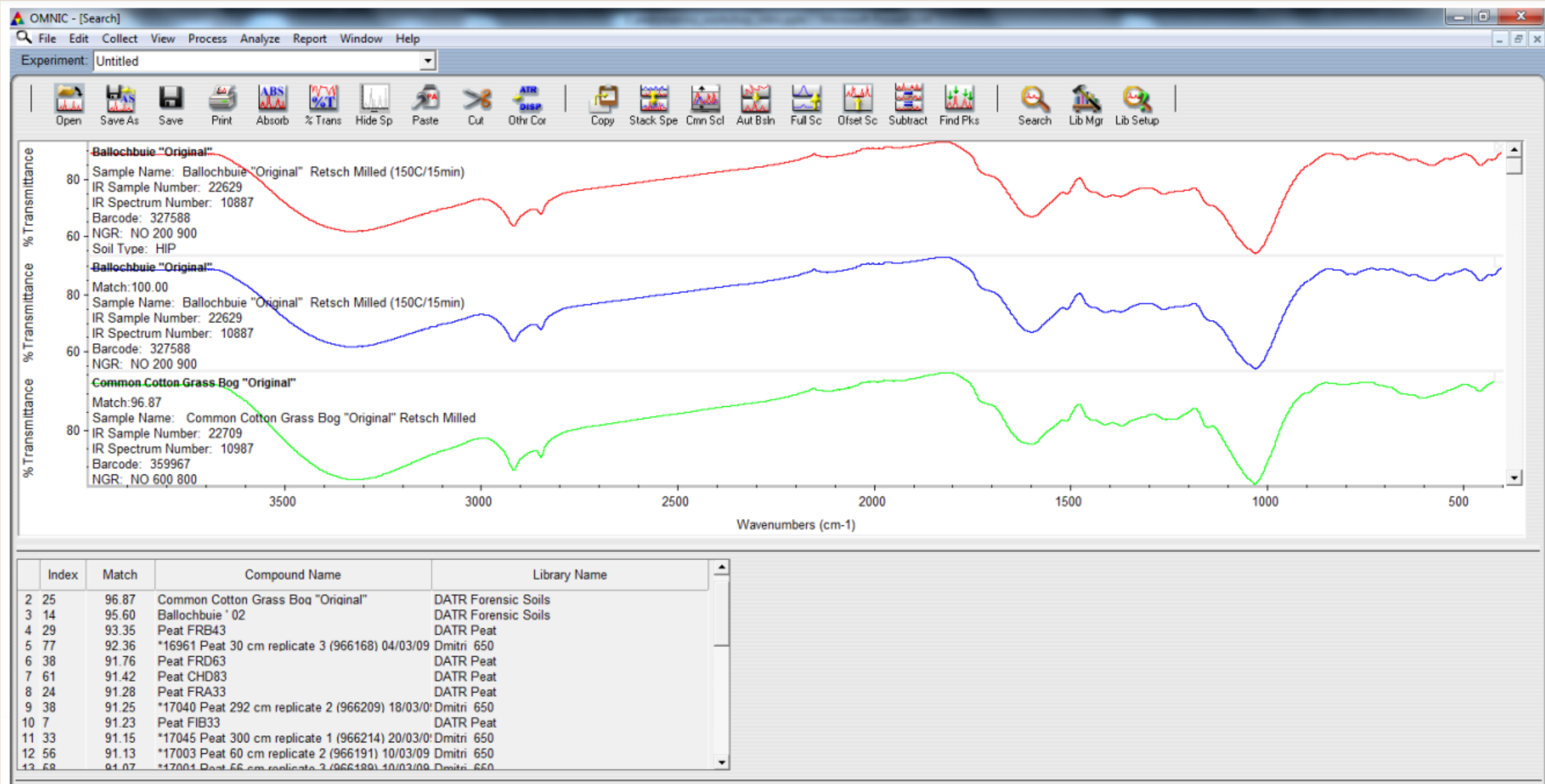
- 3- En tenant compte de vos connaissances sur l'échantillon (par exemple, est-il principalement minéral ou organique), attribuez d'abord les bandes les plus intenses à l'aide de tables de corrélation ou d'un article de référence fiable.
- 4- Rechercher, si possible, les bandes secondaires des groupes fonctionnels — par exemple, pour les protéines/amides, il devrait y avoir les bandes amide I et amide II.
- 5- Assignez les autres bandes selon les besoins



IR Absorptions of Common Functional Groups		
Functional Group	Absorption Location (cm ⁻¹)	Absorption Intensity
Alkane (C–H)	2,850–2,975	Medium to strong
Alcohol (O–H)	3,400–3,700	Strong, broad
Alkene (C=C)	1,640–1,680	Weak to medium
(C=C–H)	3,020–3,100	Medium
Alkyne (C≡C)	2,100–2,250	Medium
(C≡C–H)	3,300	Strong
Nitrile (C≡N)	2,200–2,250	Medium
Aromatics	1,650–2,000	Weak
Amines (N–H)	3,300–3,350	Medium
Carbonyls (C=O)		Strong
Aldehyde (CHO)	1,720–1,740	
Ketone (RCOR)	1,715	
Ester (RCOOR)	1,735–1,750	
Acid (RCOOH)	1,700–1,725	

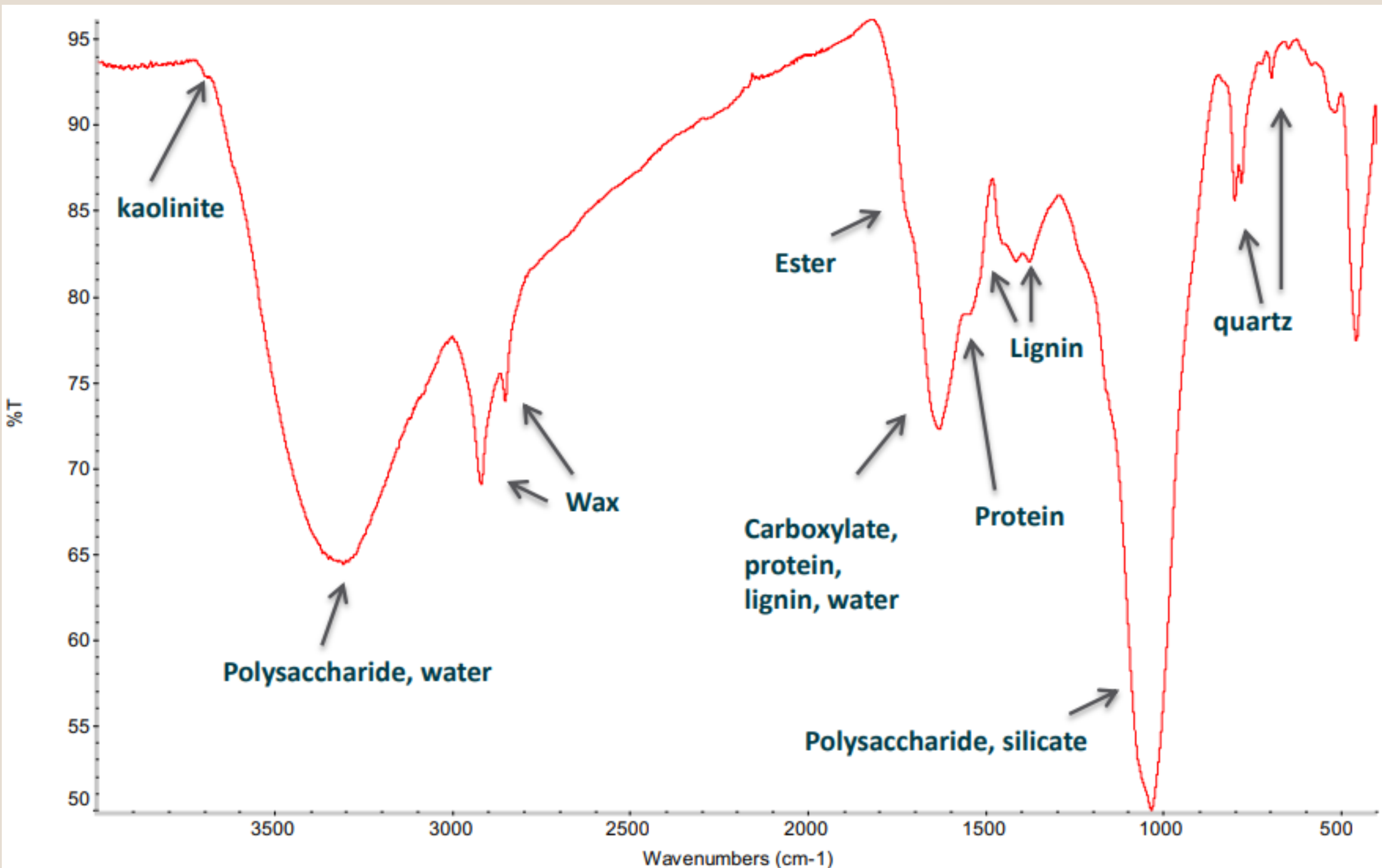
Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

- 6- Notez les groupes fonctionnels de la matière organique du sol (MOS) et/ou les minéraux que vous pensez présents dans l'échantillon.
- 7- Utilisez les bases de données spectrales ou les logiciels d'interprétation – car les sols sont des mélanges très complexes.



Spectre d'un sol organique

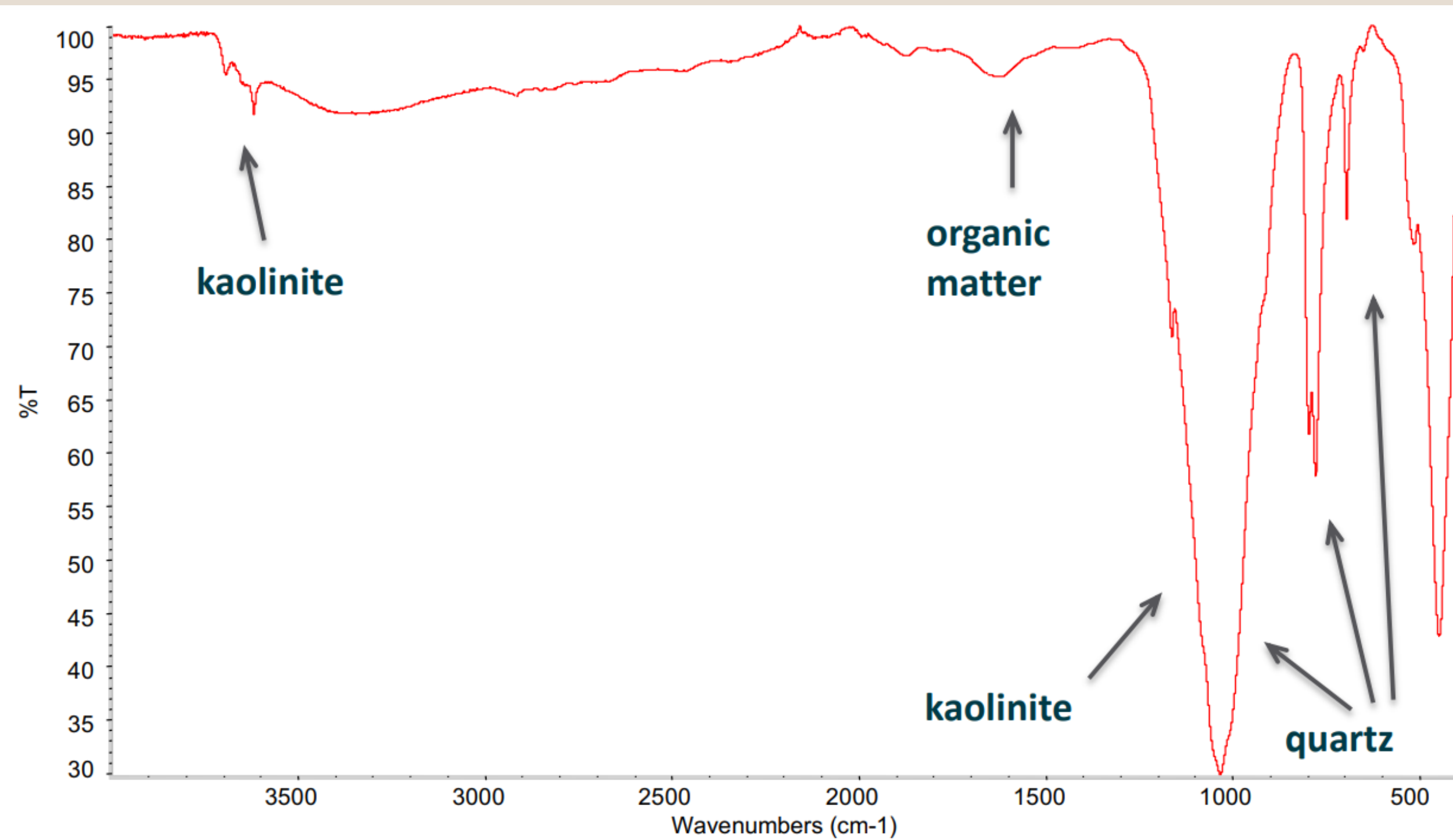
- ✓ La cellulose et la lignine sont des composants majeurs du matériel végétal.
- ✓ Fréquemment, même dans des échantillons presque purement organiques, on trouve des traces de quartz et de minéraux argileux.



En plus de la cellulose (polysaccharide – 1030 cm⁻¹ et 3330 cm⁻¹) et de la lignine (aromatique – 1600, 1510 cm⁻¹), les sols organiques en grande partie non décomposés présentent probablement d'autres polysaccharides (C-O 1100-900 cm⁻¹), des esters (C=O ~1730 cm⁻¹) et des groupes fonctionnels protéiques (amide I ~1650 cm⁻¹, amide II ~1550 cm⁻¹) identifiables dans les spectres.

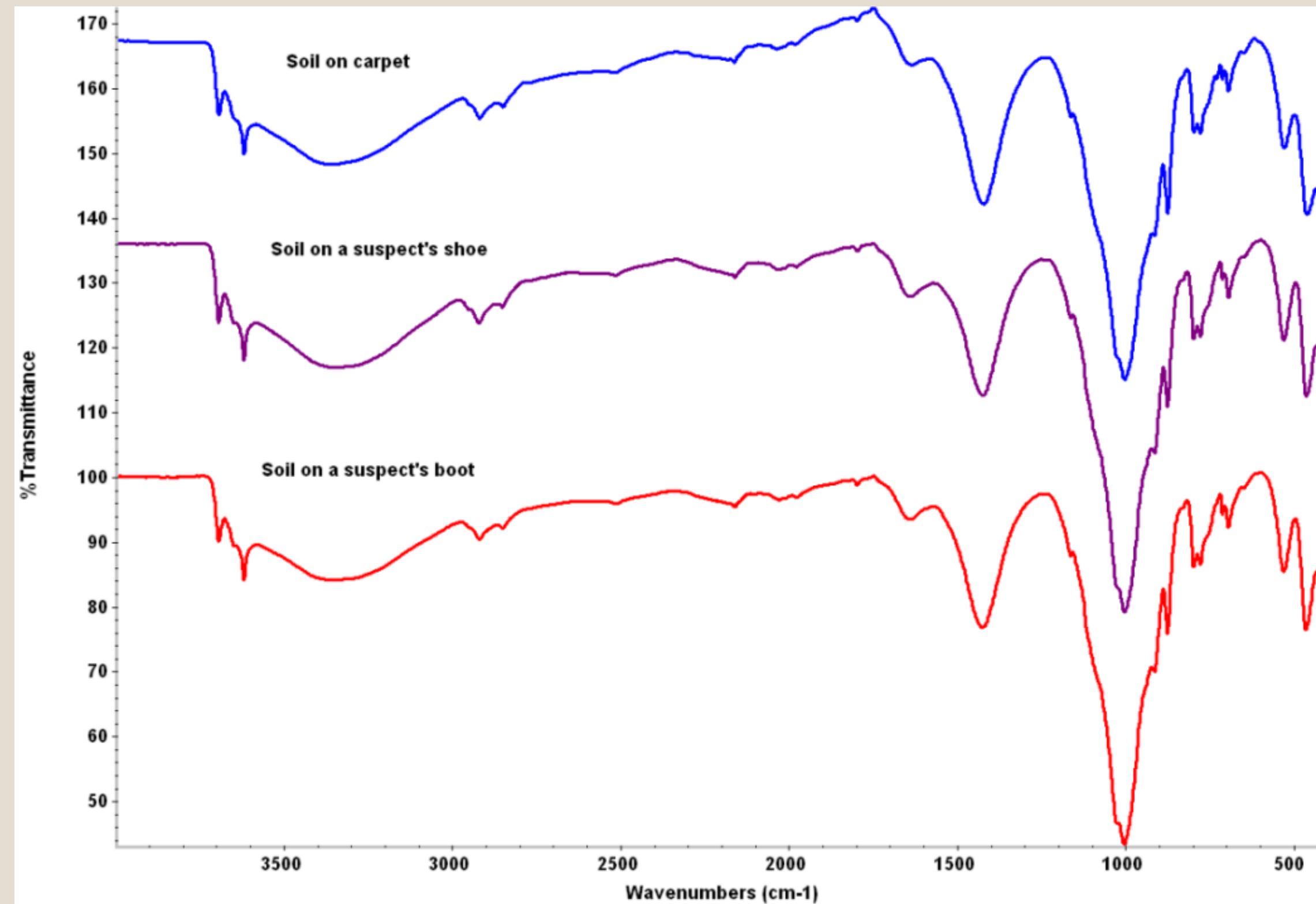
Spectre d'un sol mineral

Par définition, les sols minéraux ont une faible teneur en matière organique du sol (MOS) et sont donc principalement inorganiques.



- ✓ La majorité des minéraux du sol possèdent des liaisons covalentes, par exemple Si–O, O–H et CO_3^{2-} , qui absorbent respectivement par étirement autour de $\sim 1000 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 3700\text{--}3200 \text{ cm}^{-1}$ et $\sim 1400 \text{ cm}^{-1}$.
- ✓ Les silicates ou carbonates dominant généralement, mais certains sols contiennent d'autres composants, comme le gypse (sulfate de calcium – $\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$).

Autres applications: science criminelle



**Crime : un suspect peut-il être relié à la scène
du crime grâce à des preuves de sol ?**

SOIL SPECTROSCOPY



Spectroscopie de sol

Qu'est-ce que c'est ?

La science qui consiste à extraire des informations à partir des sols en utilisant des techniques mathématiques et statistiques.

Pourquoi est-ce important ?

Absorbance

1.5
1.0
0.5

4000

3000

2000

1000

Wavenumbers cm^{-1}

Accurate



Cost-efficient



Rapid



Portable



Soil
spectroscopy
+
Machine
Learning



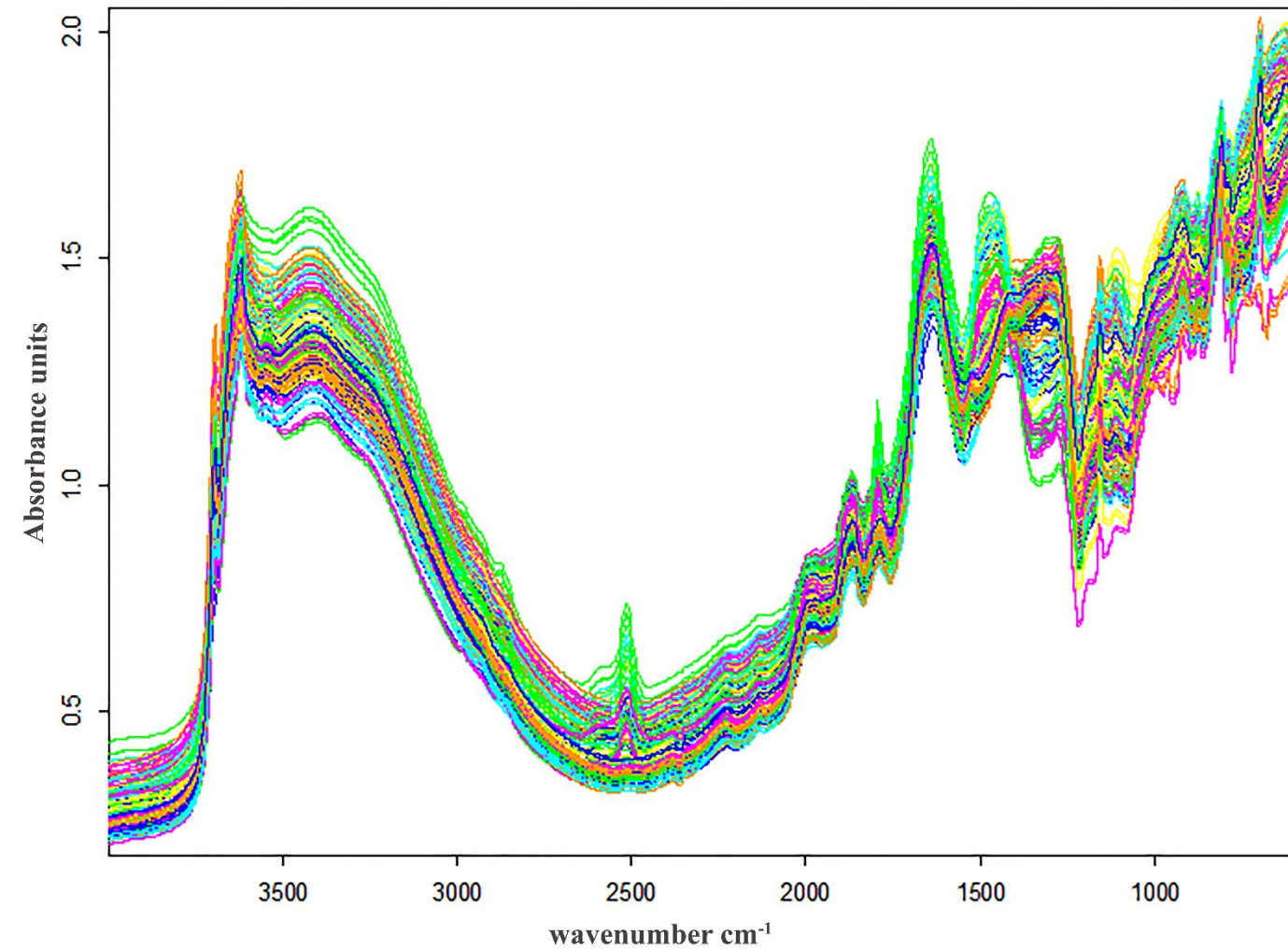
Large-scale

Non-polluting



Calibration= Modélisation

Spectres



Fonctions de calibration

f ()



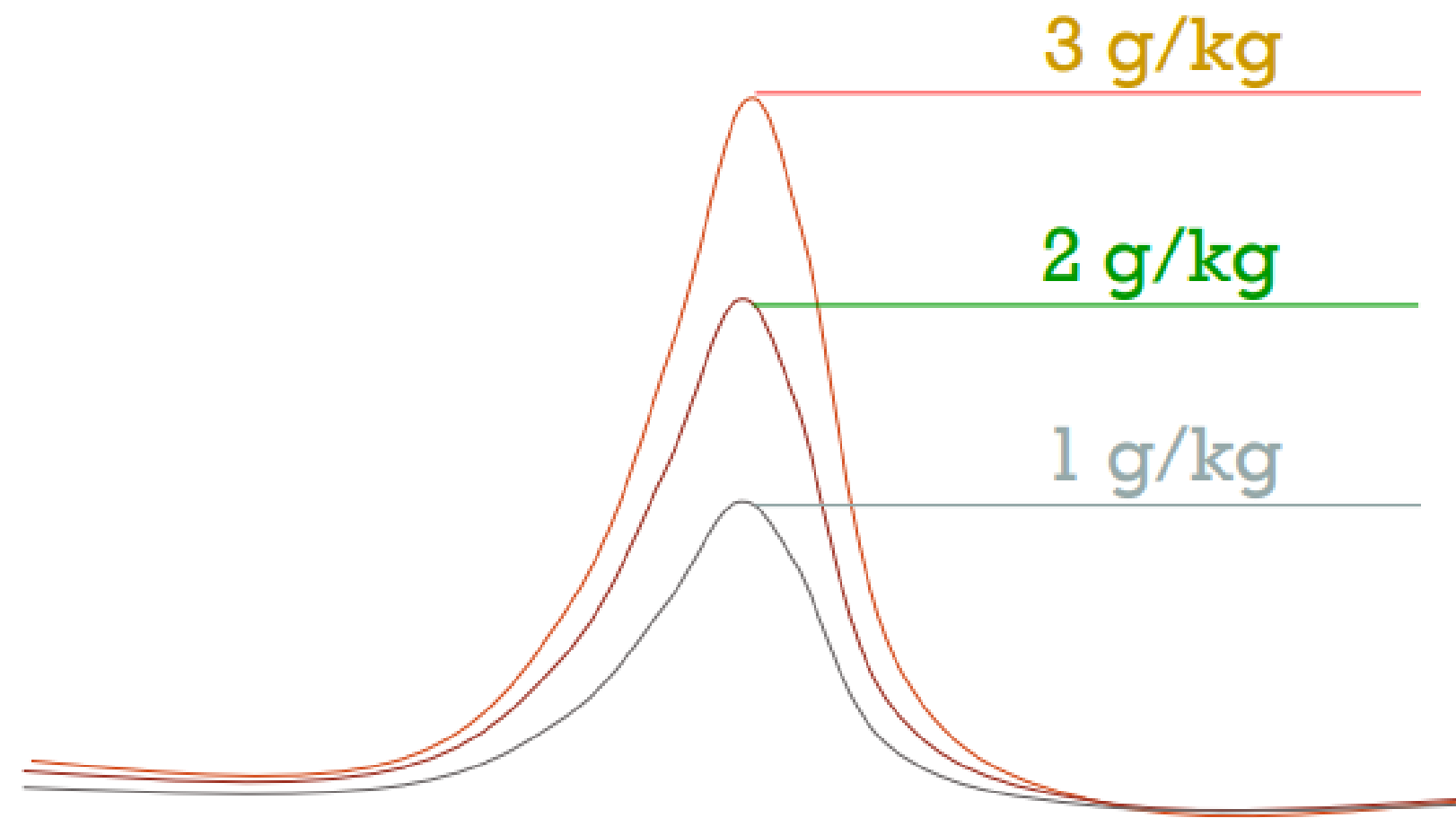
Propriétés de sol

texture
pH
OC
CaCO₃
CEC
K,
Ca,
Mg
N,
P
...

Calibration= Modélisation

Relating spectra to soil properties

If the Beer Lambert's law was observed :



Univariate
Calibration

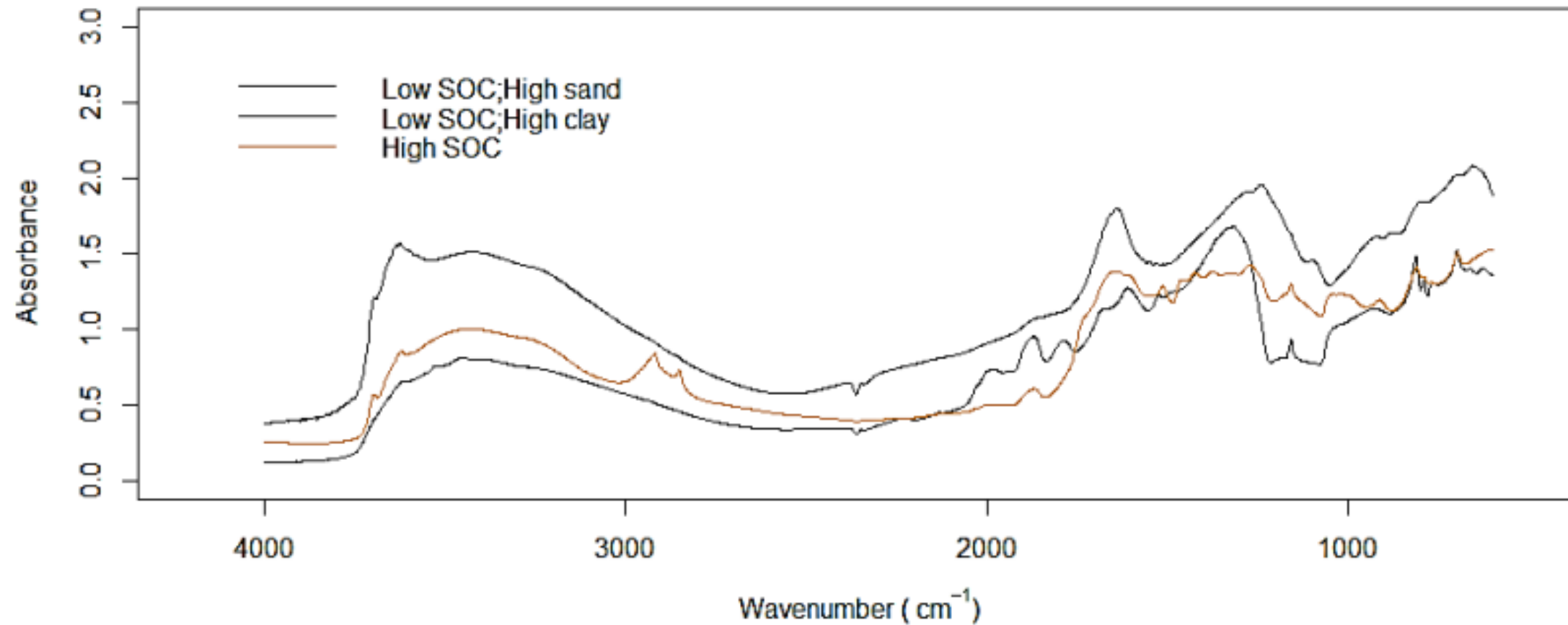
$$a = a_0 + kC + e$$

Calibration= Modélisation

Since the Beer Lambert's law is not observed,

The shape of the spectra
Is more meaningful
than
Reflectance at particular
wavelengths

**Multivariate
Calibration**
(using the whole spectra)



Calibration= Modélisation

Linear models

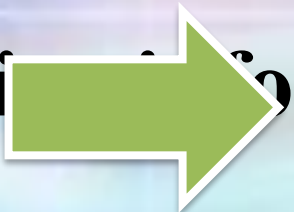
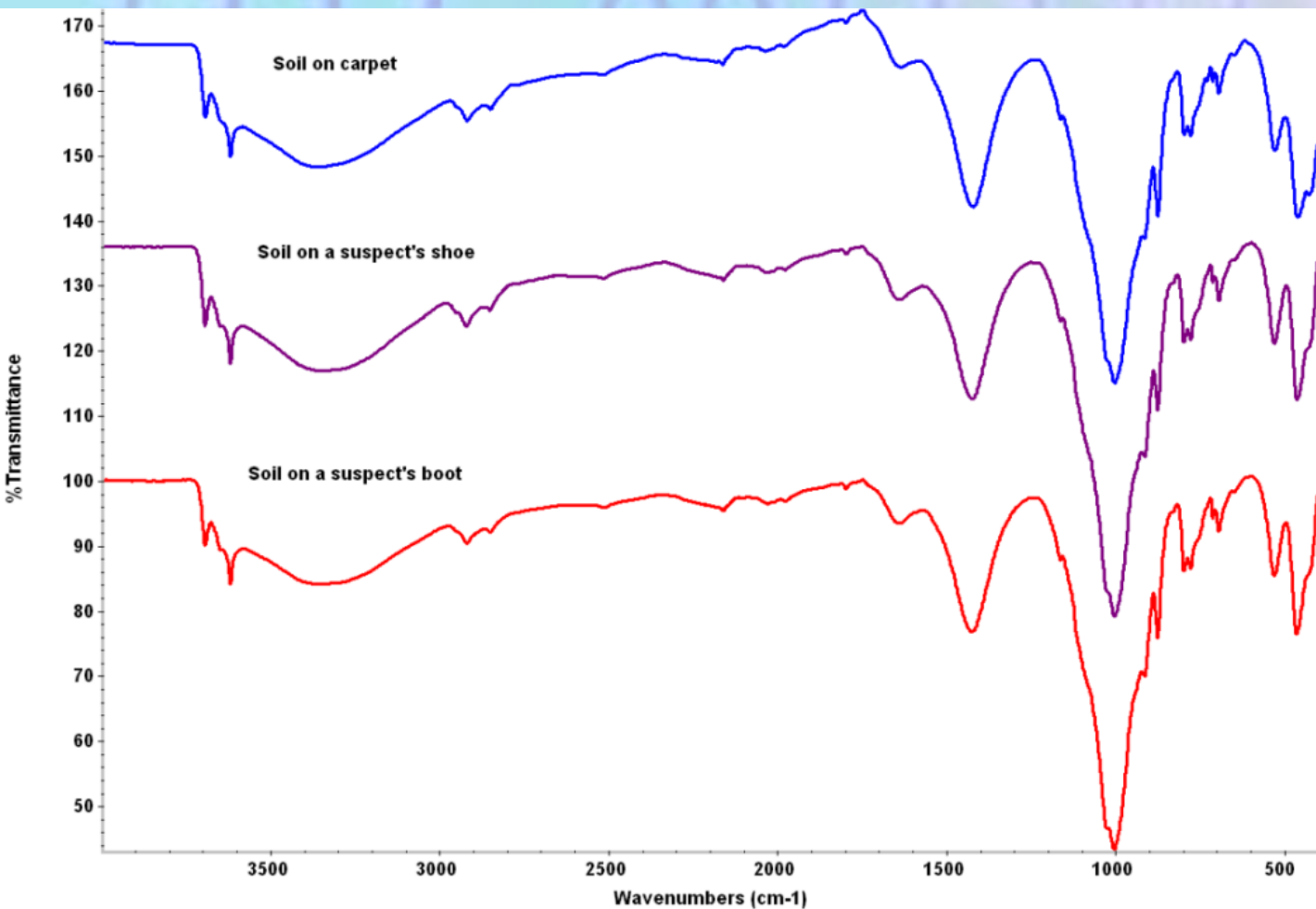
Response[s]
e.g. Soil OC

Spectra
[predictors]

Regression
coefficients

Residuals

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Spectra} \\ \mathbf{X} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathbf{b} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{r} \end{pmatrix}$$



Modelisation

	3997,163	3995,735	3994,307	3992,451	3990,022	3988,594	3987,166	3985,738
S000014MA21-3	0,2732762	0,2737451	0,2741967	0,27460834	0,2755393	0,2759995	0,2764943	0,2770515
S000014MA21-3	0,2704934	0,2708916	0,2712772	0,271690971	0,2725817	0,2731213	0,2737169	0,2743466
S000014MA21-5	0,2407945	0,2412324	0,2416659	0,2420837	0,242985	0,2434253	0,2439064	0,2444609
S000014MA21-5	0,2380398	0,2384223	0,2388113	0,2392299	0,2400807	0,2405521	0,2410969	0,2417135
S000014MA21-7	0,263935	0,2643544	0,2647693	0,265185	0,2660599	0,2665104	0,2669981	0,2675419
S000014MA21-7	0,260845	0,2612429	0,2616469	0,2620631	0,2629114	0,263396	0,2639632	0,2645863
S000029MA21-3	0,1856674	0,1858531	0,1860142	0,18618631	0,1864573	0,1866092	0,1868085	0,1870767
S000029MA21-3	0,1819217	0,1820649	0,1822019	0,1823438	0,1826485	0,1828524	0,1831302	0,1834737
S000029MA21-5	0,1563226	0,1565142	0,156682	0,156859816	0,1571354	0,1572969	0,157501	0,1577749
S000029MA21-5	0,1534739	0,1535986	0,1537148	0,1538359835	0,1541605	0,1543813	0,1546633	0,1549898

X

Chemometrics. Partial least squares regression (PLSR)

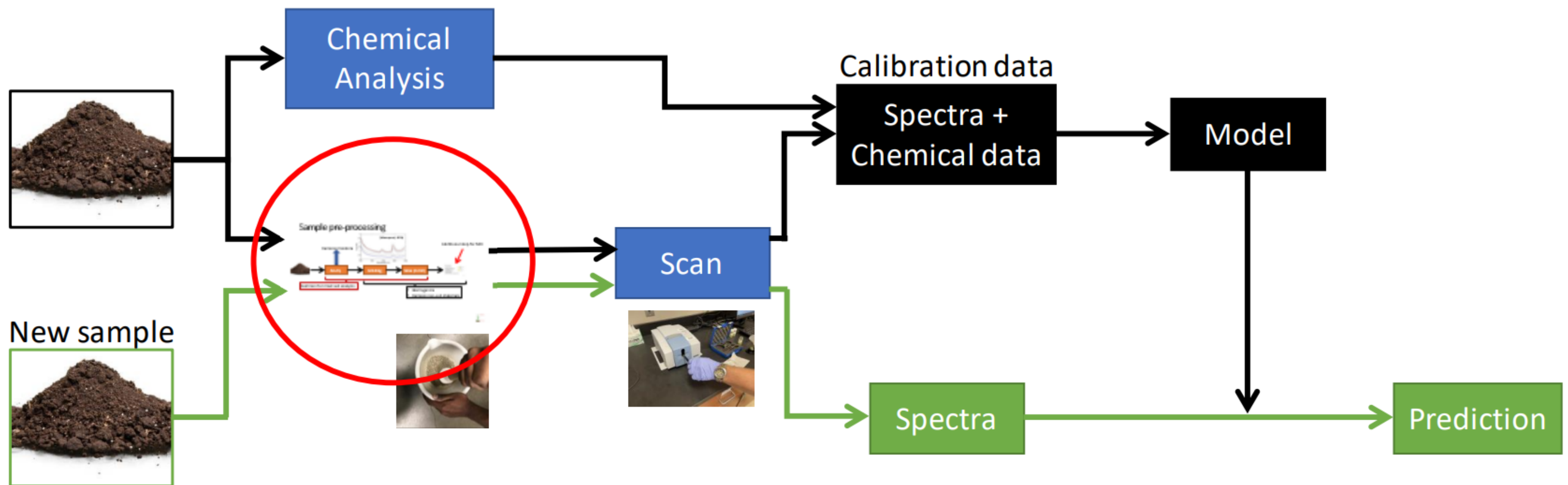
pH	Carbon - C		Nitrogen -N	CEC (Cobalthexam ine)	P Olsen	Boron - B Melich 3	micronutrients (Melich3 - mg/Kg)			
	Total Carbon - TOC %	Organic Carbon - C _{org} %	Total Nitrogen -NT				Copper - Cu	Iron - Fe	manganese - Mn	Zinc
Result	Result	Result	Result	Result	Result	Result	Result	Result	Result	Result
6,73	2,476	2,476	0,190	17,329	7,200	0,517	3,028	100,318	553,155	8,1
5,73	6,239	6,239	0,455	26,129	5,060	<DL	2,634	103,539	280,595	2,3
4,96	2,735	2,735	0,229	5,077	6,020	<DL	2,502	143,943	620,932	2,6
4,94	2,647	2,647	0,173	2,870	2,980	<DL	2,666	167,433	219,429	2,5
5,84	2,593	2,593	0,195	13,291	1,620	<DL	1,931	66,954	298,414	2,0
5,73	4,118	4,118	0,306	15,012	2,040	<DL	1,606	72,608	683,174	0,9
6,18	5,916	5,916	0,460	29,471	5,060	0,384	2,315	97,682	279,707	1,4
5,30	2,890	2,890	0,243	6,657	5,300	<DL	2,881	232,372	53,324	2,2



Response variables (Independent variables (X) are independent of the response variables (Y))

Y

Modeling



Modeling: Model performance

$$R^2 = \frac{SSR}{SST}$$

$$SSR = \sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

$$SST = \sum_i (y_i - \bar{y})^2$$

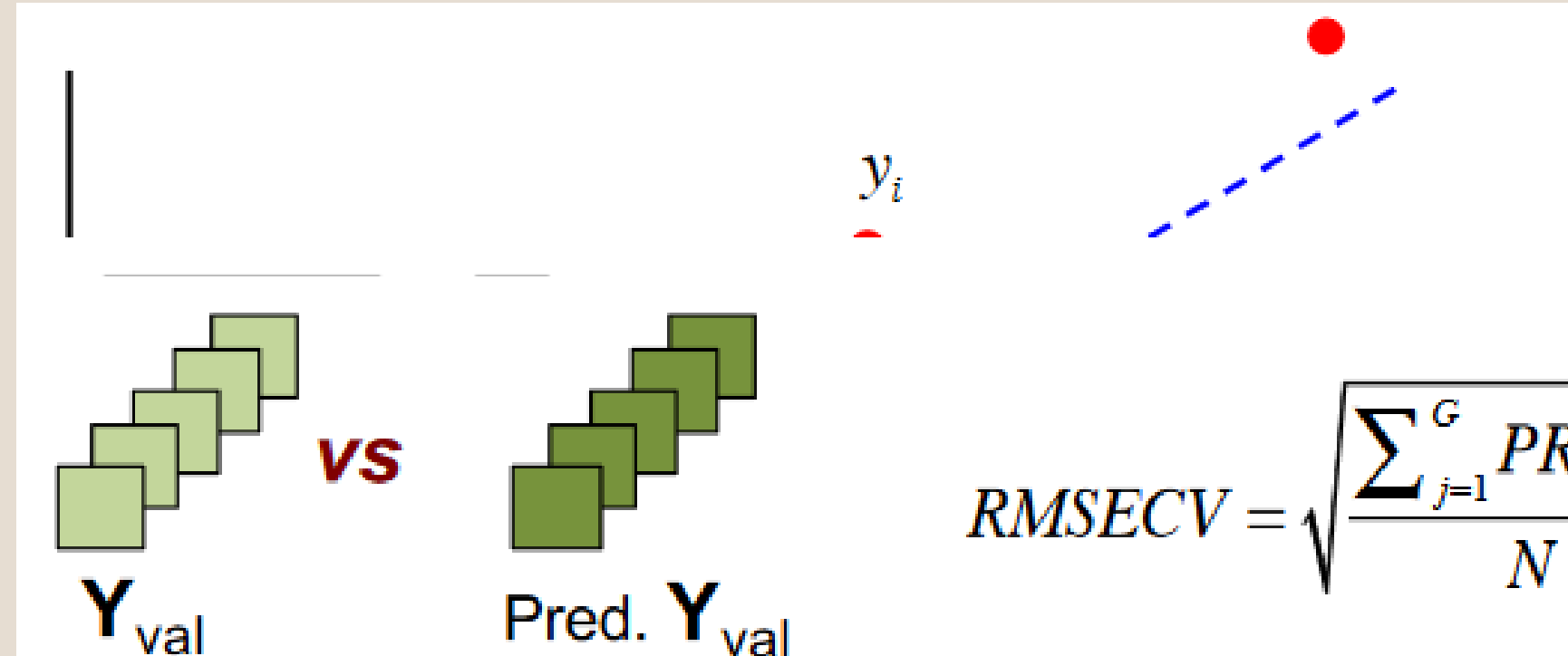
Comment savoir si un modèle est de bonne qualité ?

- Validation intern:

- ✓ Qualité de l'ajustement
 - Coefficient de corrélation R^2

- ✓ Cross validation

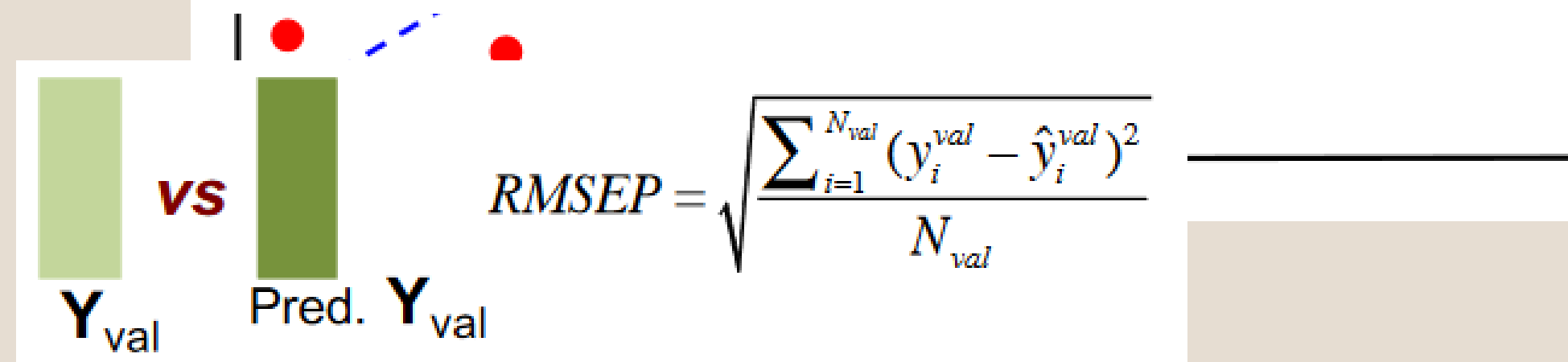
- Leave one out
 - Leave a group out



$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^G PRESS_j}{N}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_{-i})^2}{N}}$$

- Validation Externe

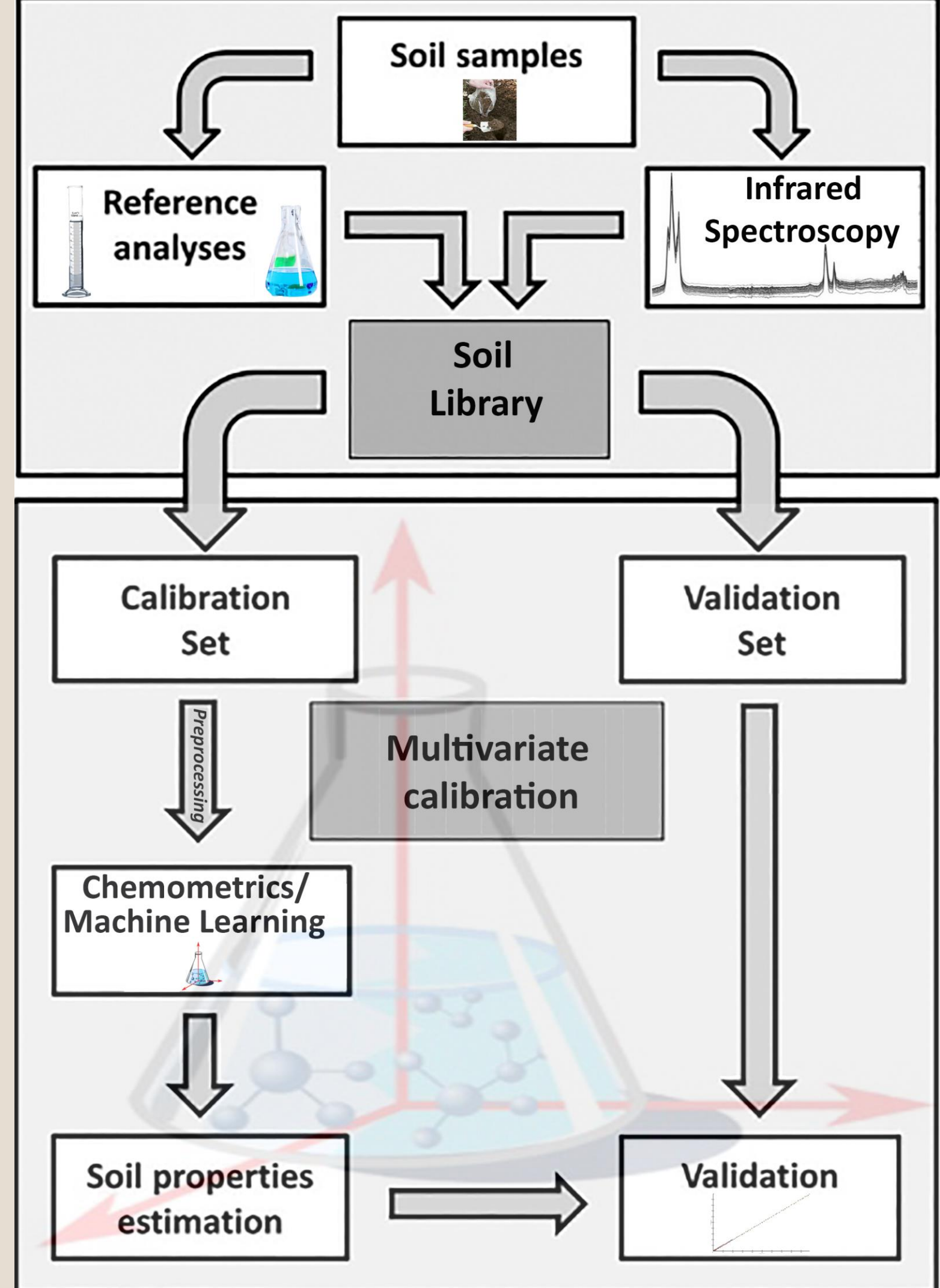
- ✓ Use a test set



$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_{val}} (y_i^{val} - \hat{y}_i^{val})^2}{N_{val}}}$$



Spectroscopie de sol



Spectroscopie de sol: Solutions

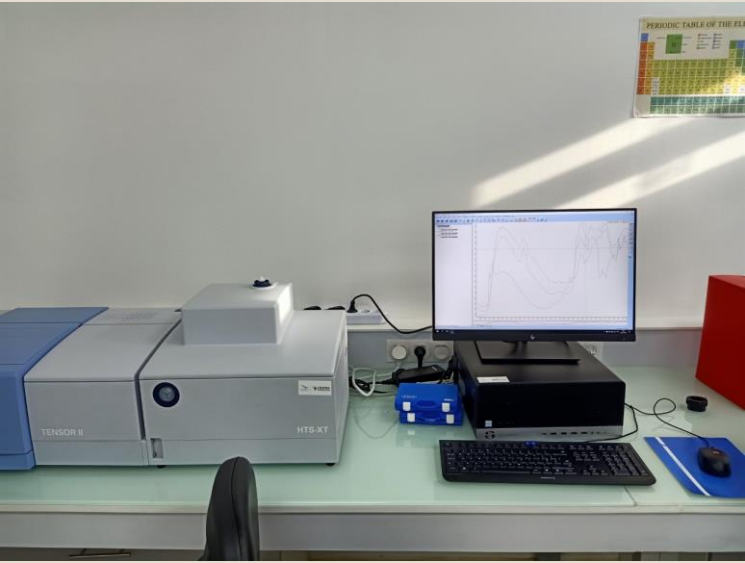
Dispersive VNIR



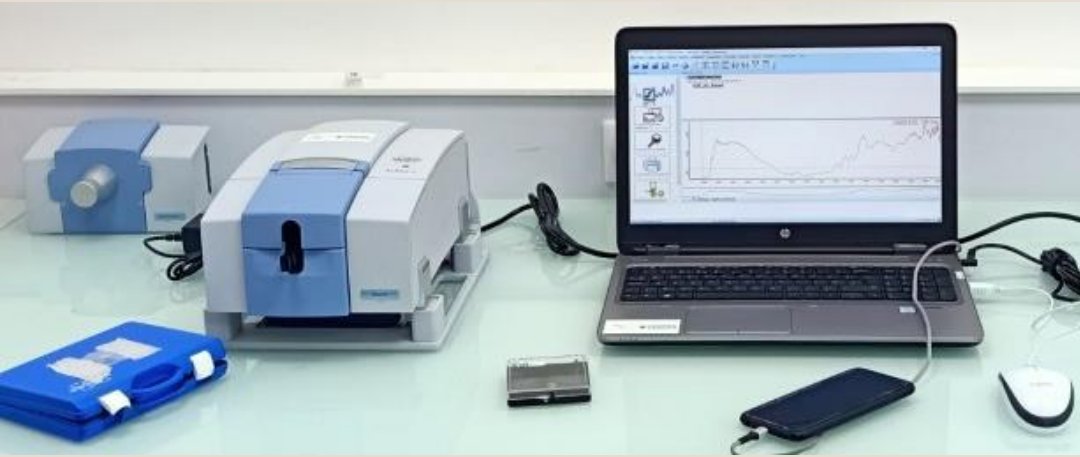
FT-NIR



FT-MIR with autosampler



FT-MIR Portable



Handheld MIR



Handheld NIR



neospectra NeoSpectra-Scanner

Portable and Handheld Spectral Sensing Scanner

The NeoSpectra-Scanner is a portable and handheld spectral sensing device that can be used in a wide variety of material sensing applications. The scanner enables the development of in-field material analysis applications in various industries.

The scanner incorporates NeoSpectra sensors that operate over a wide spectral range in the NIR (1350 - 2500 nm), offering the best qualification and quantification of materials.

Hardware & Software Ready
Hardware and software ready solution for unique application development.

Large Spot Size
Large spot size for measuring non-homogeneous materials.

Rugged Ergonomic Design
Unique design that enables ease of use for in-field applications.

Measurements can be made...

Above the Scanner
Set the scanner on a flat surface
Place samples on top

Point & Shoot
Hold scanner in hand
Point and shoot at samples

Below the Scanner
Place samples on a flat surface
Set the scanner on top

Features:

Performance

- Wide spectral range
- Large spot size
- Adjustable scan time
- Optimum resolution

Usability

- Ergonomic handheld design
- Meant to operate in rugged conditions (IP65)
- Bluetooth wireless connectivity
- Battery operated

Implementation

- Hardware & software ready solution
- Non-destructive analysis
- Simultaneous analysis of various parameters
- Various materials can be measured

Thank you



Introduction à la spectroscopie de sol

Issam Barra, PhD

Expert en spectroscopie de Sol, GSP-FAO

Issam.barra@fao.org