



Introduction à la spectroscopie de sol

Issam Barra, PhD

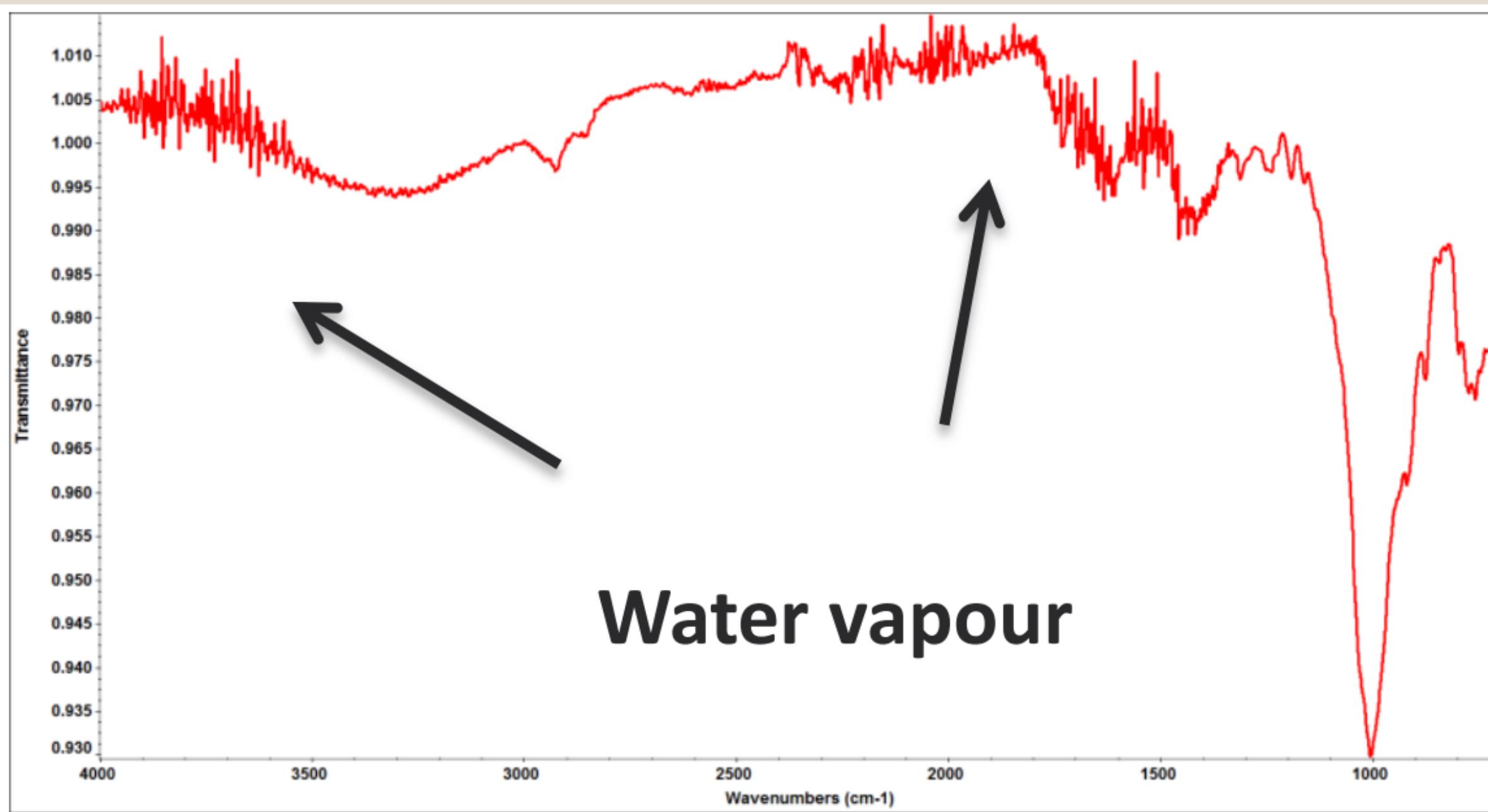
Expert en spectroscopie de Sol,

GSP-FAO

Issam.barra@fao.org

Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

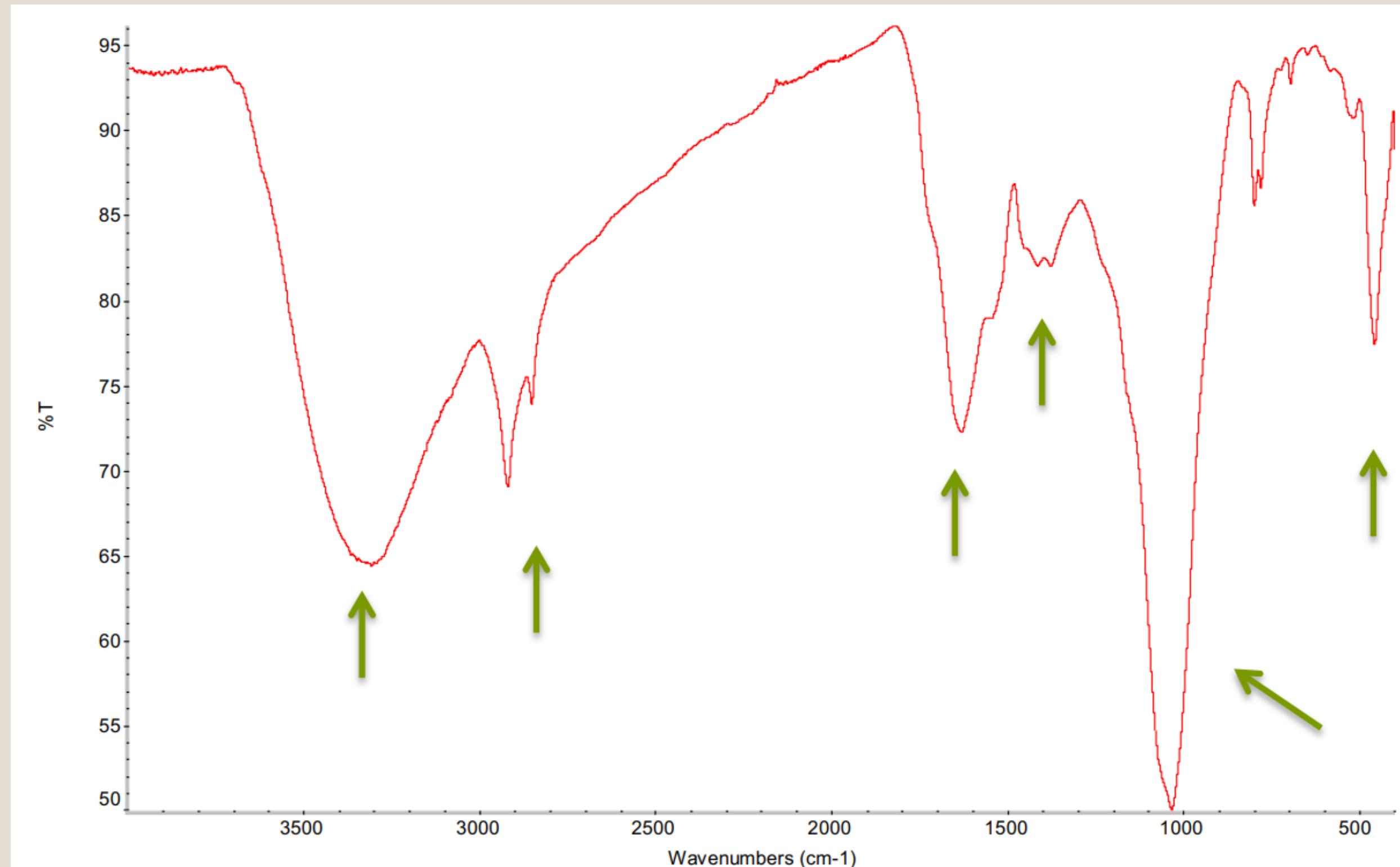
1- Utiliser des données de haute qualité, par exemple : un bon rapport signal/bruit, absence de pics de vapeur d'eau ou d'interférences dues au dioxyde de carbone. La bande la plus intense doit avoir une absorbance inférieure à 2.



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.

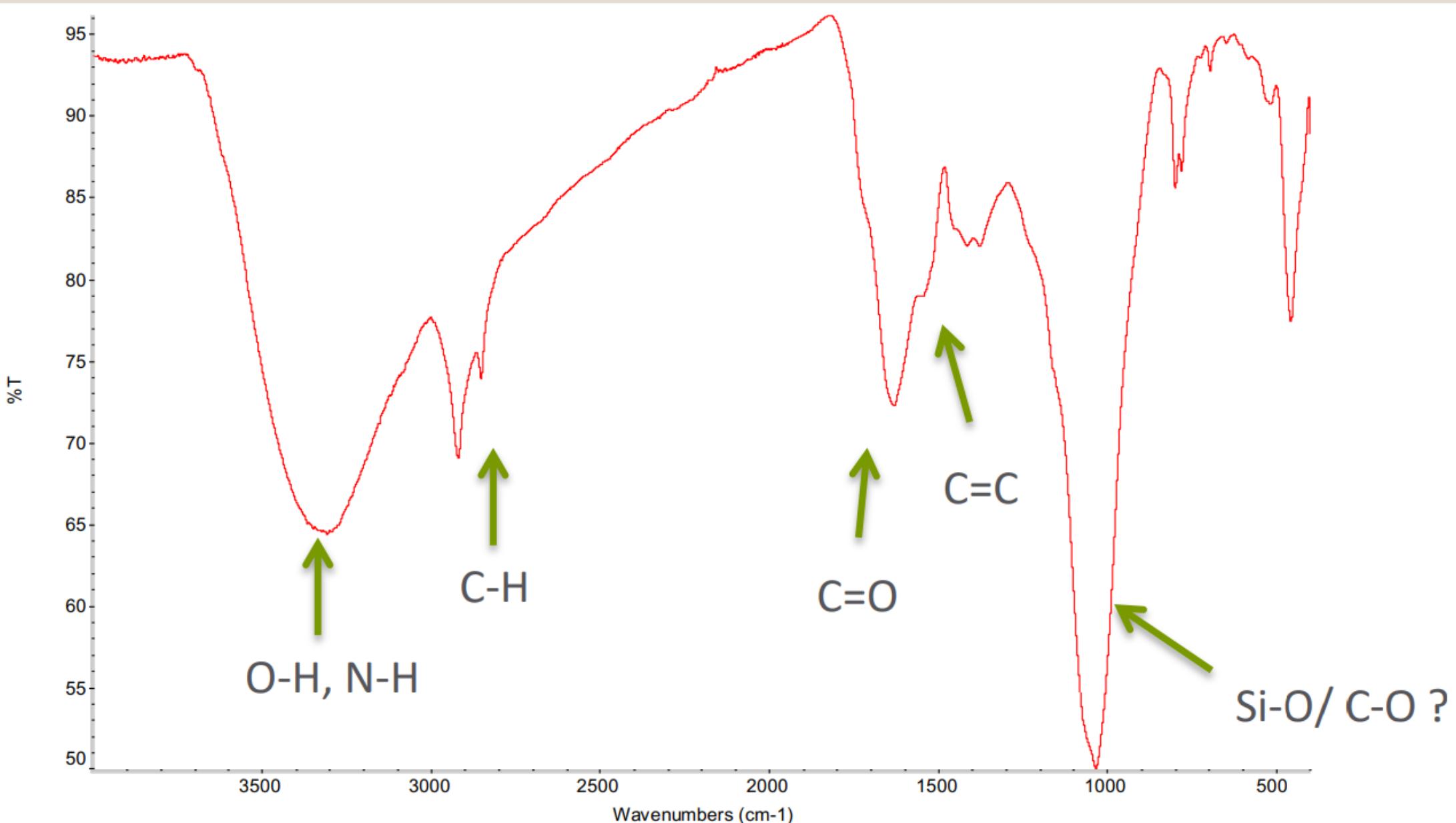


Comment aborder l'interprétation spectrale infrarouge conventionnelle des sols ?

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

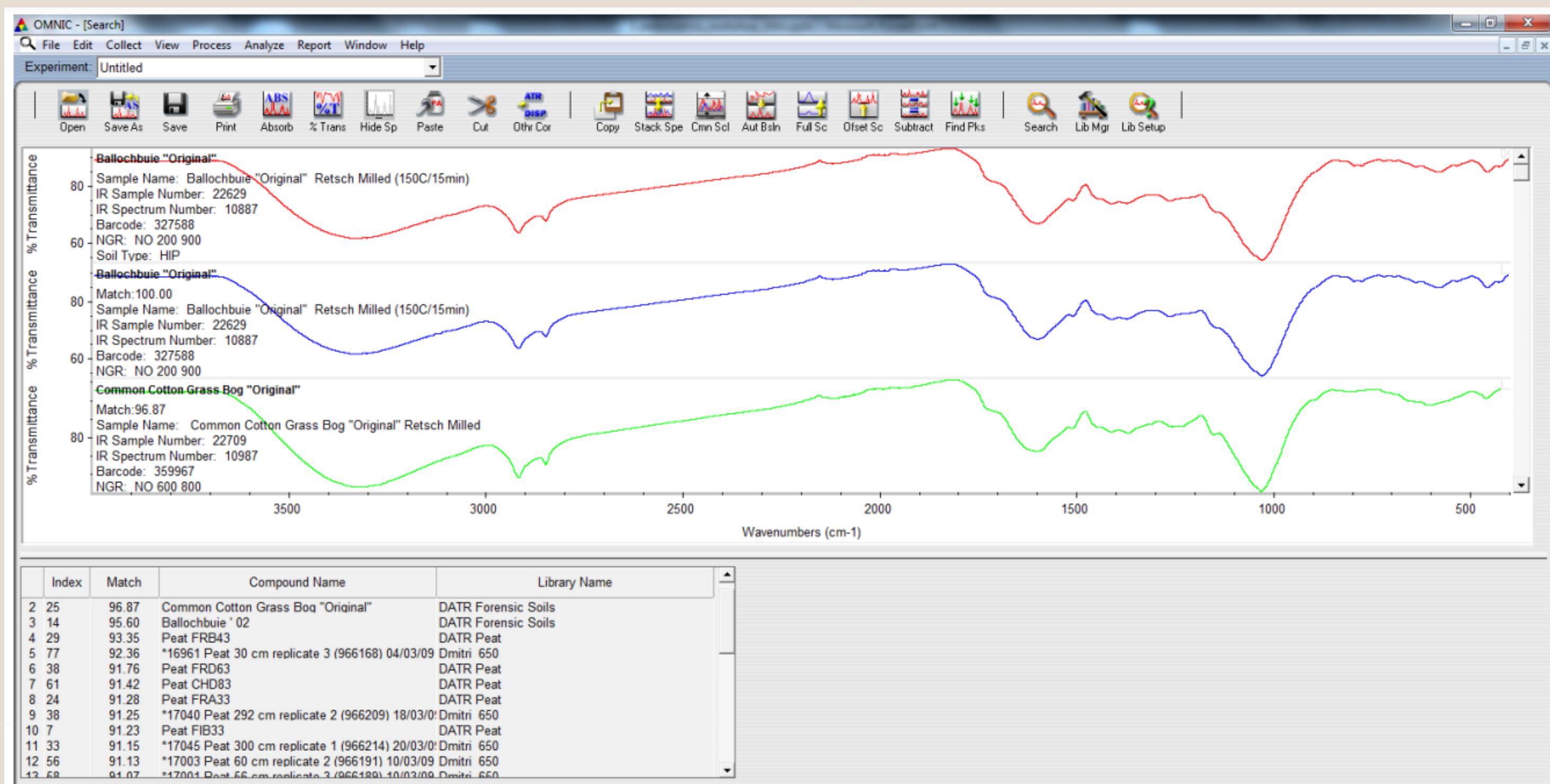


IR Absorptions of Common Functional Groups		
Functional Group	Absorption Location (cm ⁻¹)	Absorption Intensity
Alkane (C-H)	2,850–2,975	Medium to strong
Alcohol (O-H)	3,400–3,700	Strong, broad
Alkene (C=C) (C=C-H)	1,640–1,680 3,020–3,100	Weak to medium Medium
Alkyne (C=C) (C=C-H)	2,100–2,250 3,300	Medium 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)	1,720–1,740	Strong
Aldehyde (CHO)	1,715	
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 ?

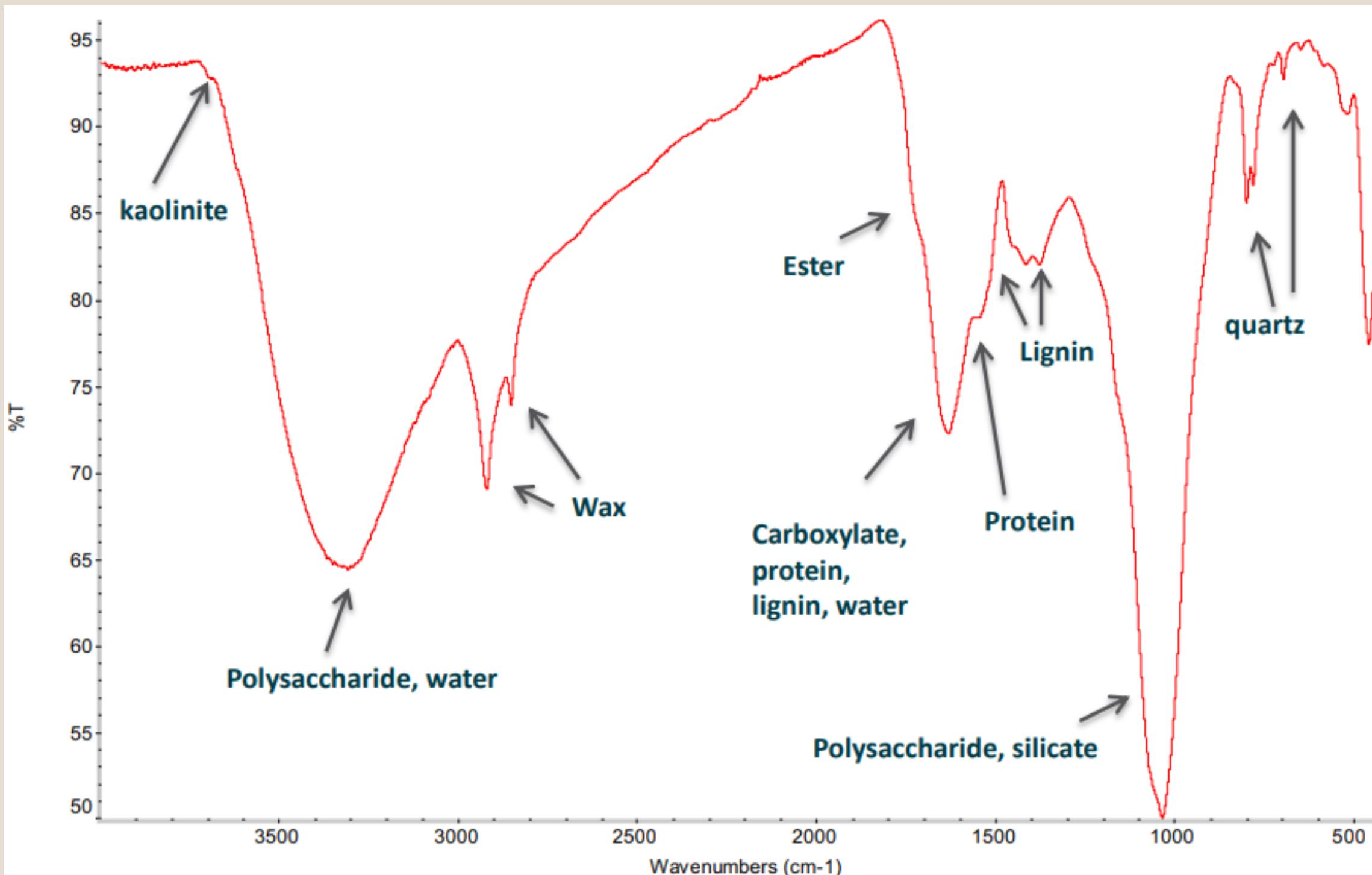
6- Notez les groupes fonctionnels de la matière organique du sol (MOS) et/ou les minéraux que vous pensez présents dans l'échantillon.

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

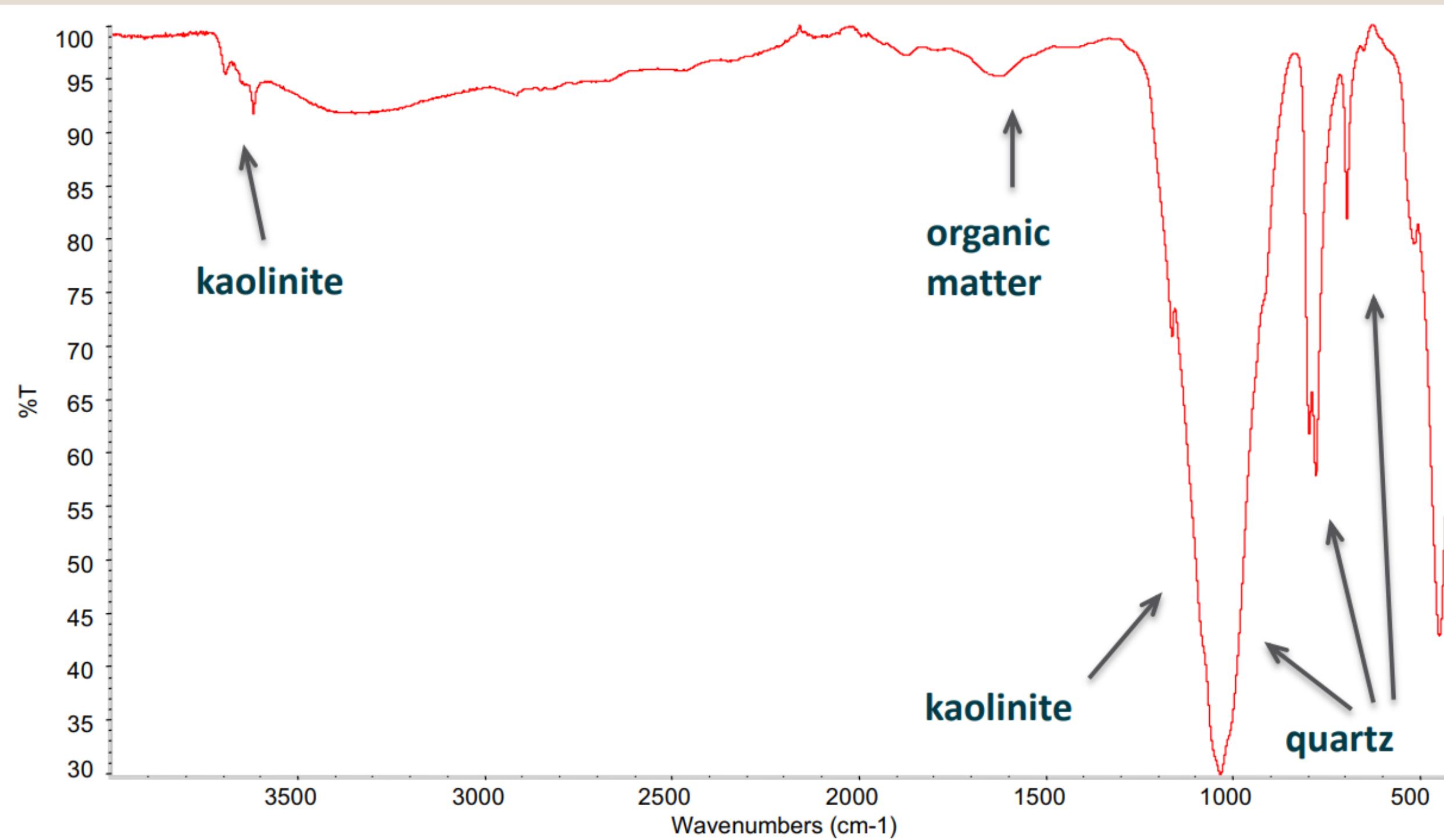
- ✓ La cellulose et la lignine sont des composants majeurs du matériel végétal.
- ✓ Fréquemment, même dans des échantillons presque purement organiques, on trouve des traces de quartz et de minéraux argileux.



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.

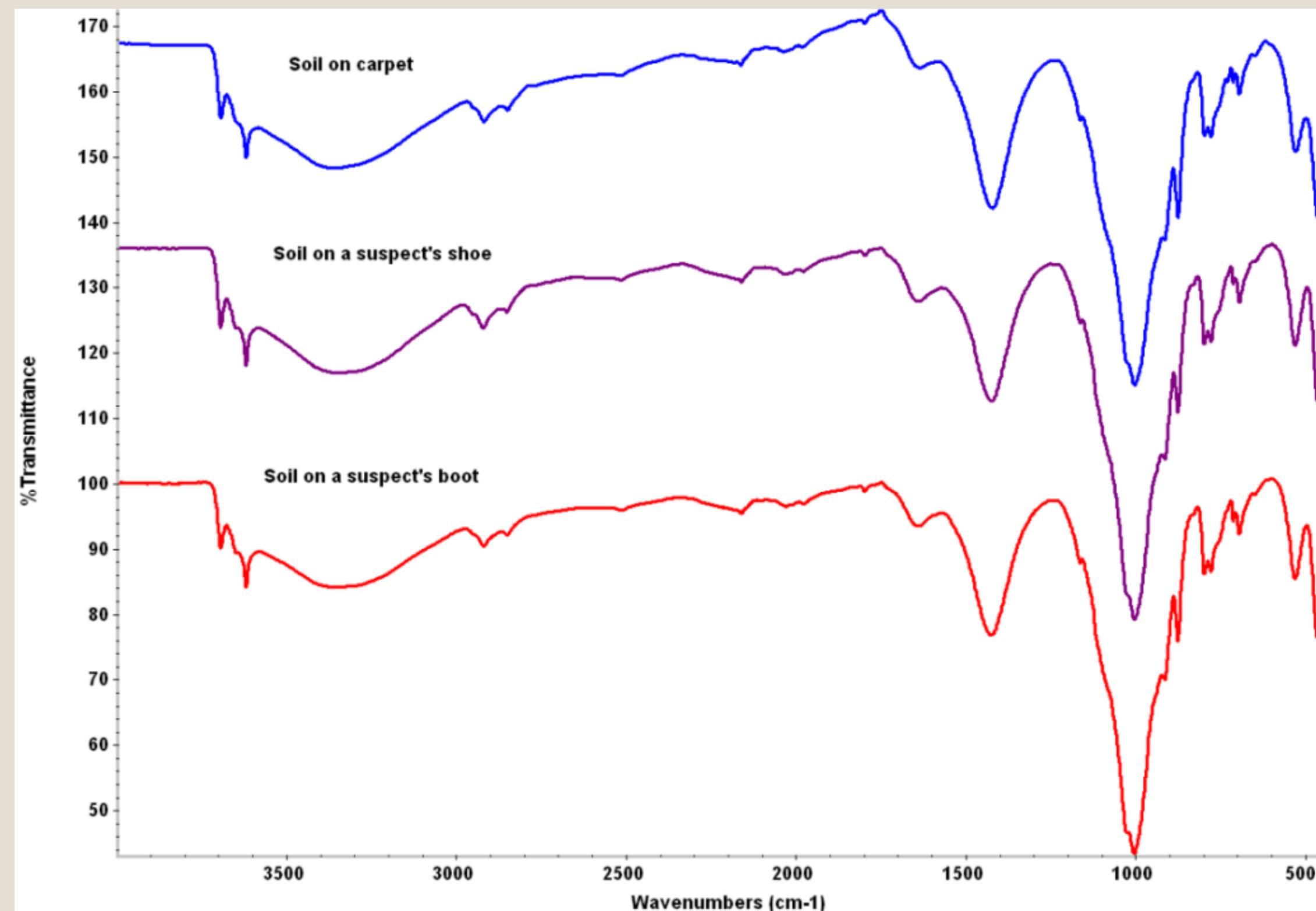
Spectre d'un sol minéral

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 CO₃²⁻, qui absorbent respectivement par étirement autour de ~1000 cm⁻¹, ~3700–3200 cm⁻¹ et ~1400 cm⁻¹.
- ✓ Les silicates ou carbonates dominent généralement, mais certains sols contiennent d'autres composants, comme le gypse (sulfate de calcium – CaSO₄·H₂O).

Autres applications: science criminel



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

SOIL SPECTROSCOPY

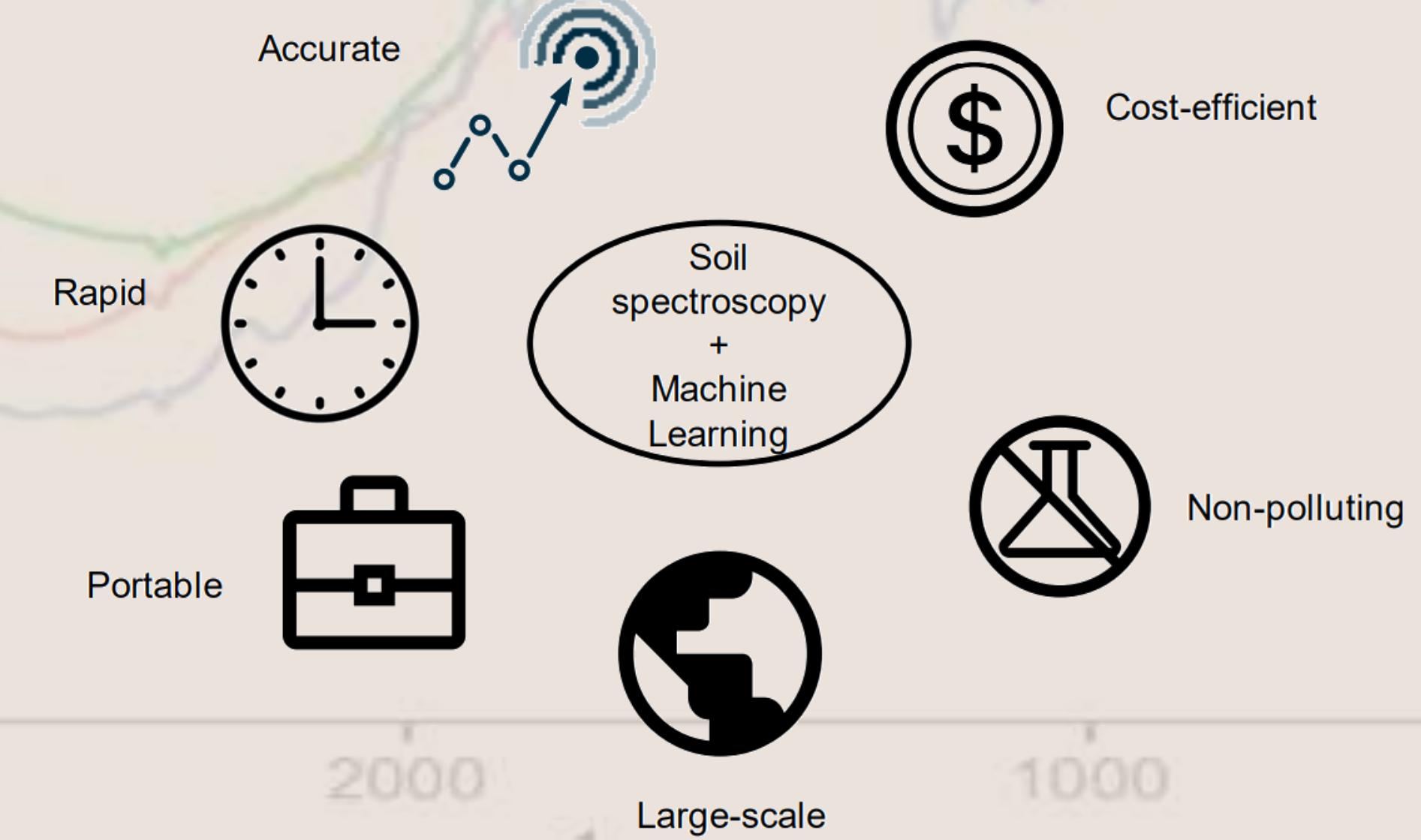


Spectroscopie de sol

Qu'est-ce que c'est ?

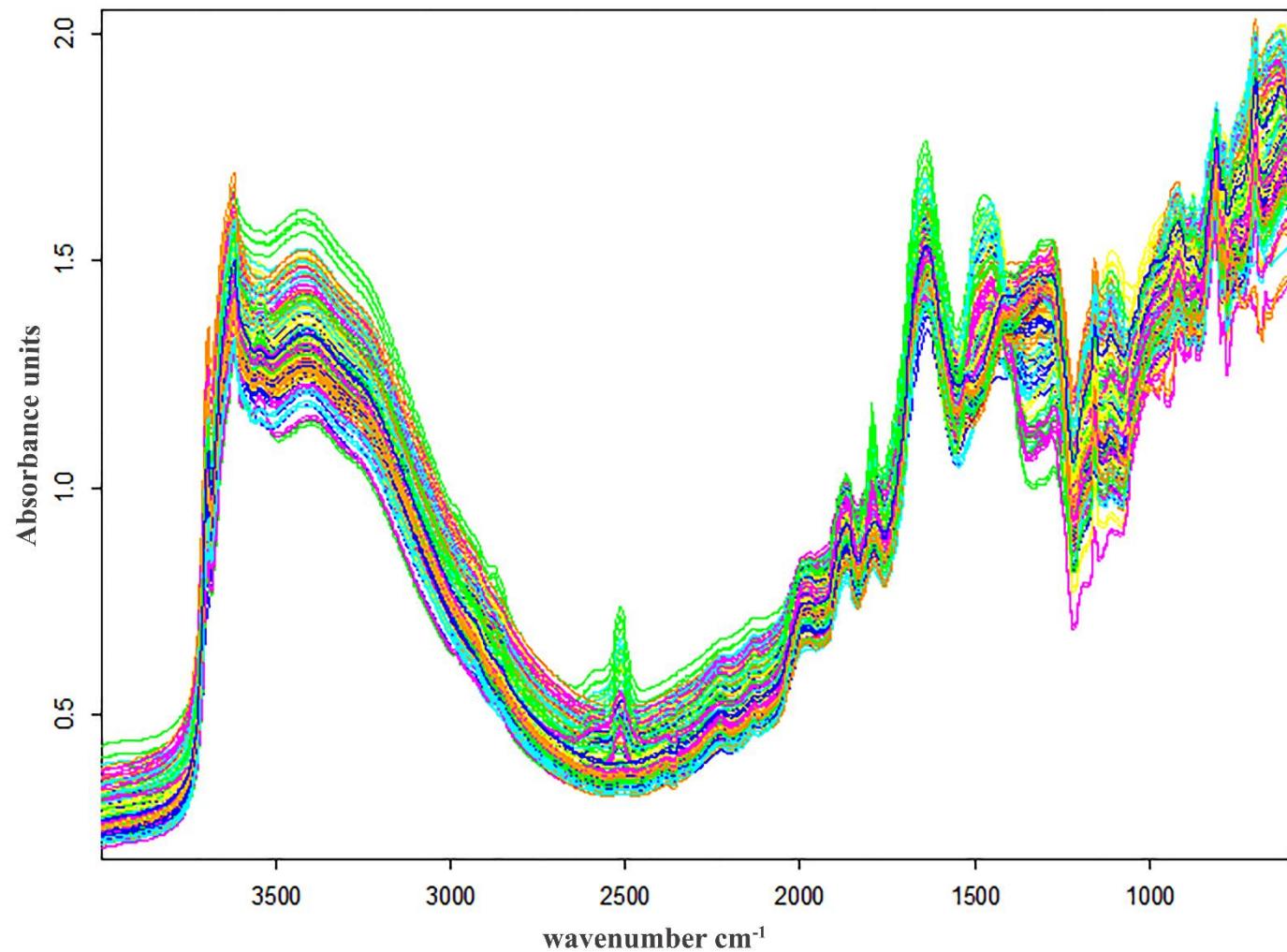
La science qui consiste à extraire des informations à partir des sols en utilisant des techniques mathématiques et statistiques.

Pourquoi est-ce important ?



Calibration= Modélisation

Spectres



Fonctions de calibration

$f()$



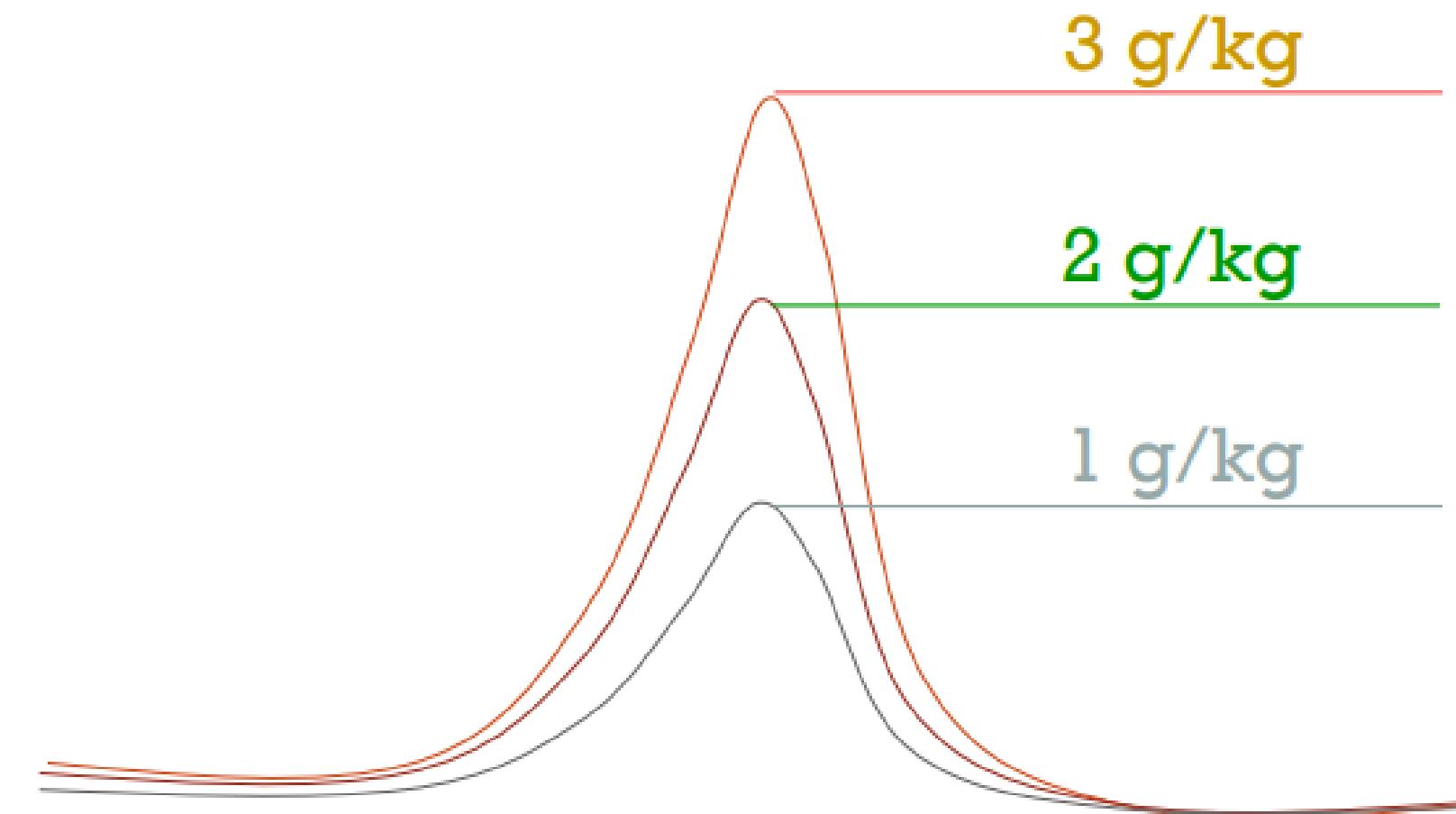
Propriétés de sol

texture
pH
OC
 CaCO_3
CEC
 K,
 Ca,
 Mg
 N,
 P
...

Calibration= Modélisation

Relating spectra to soil properties

If the Beer Lambert's law was observed :

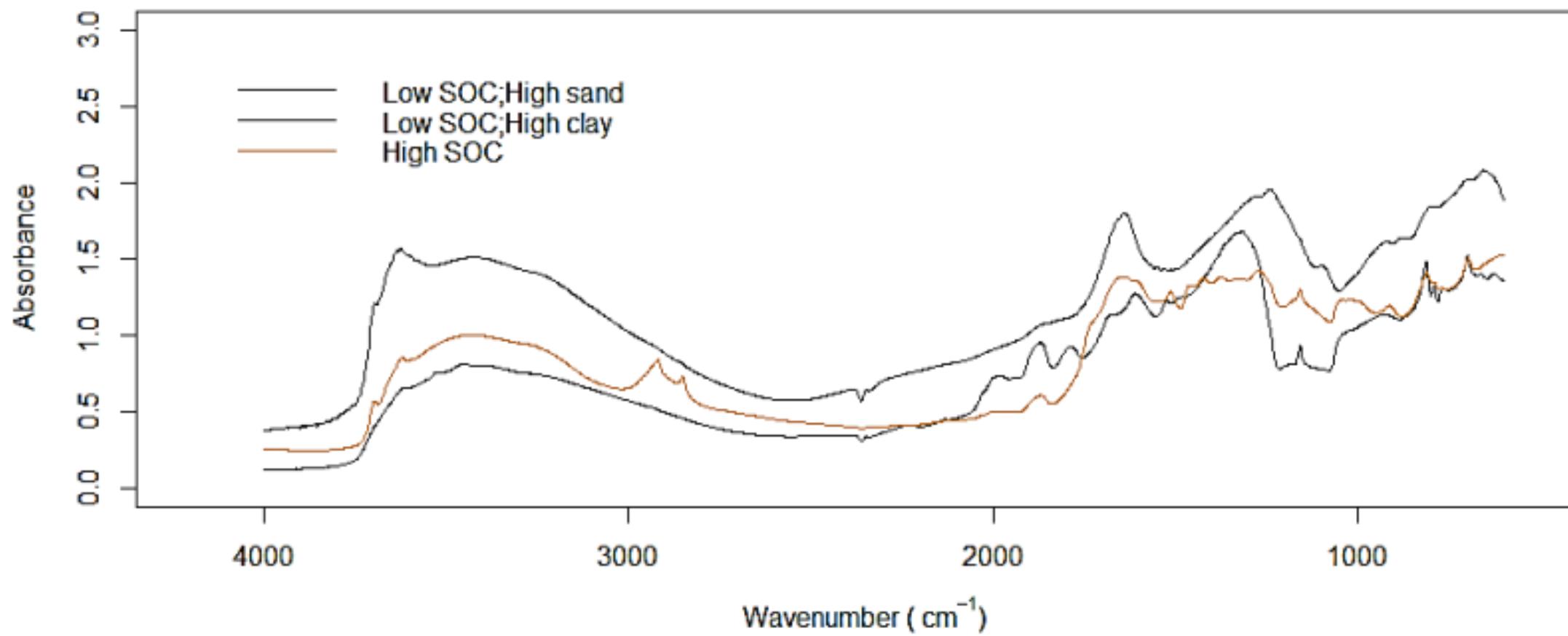


**Univariate
Calibration**

$$a = a_0 + kC + e$$

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

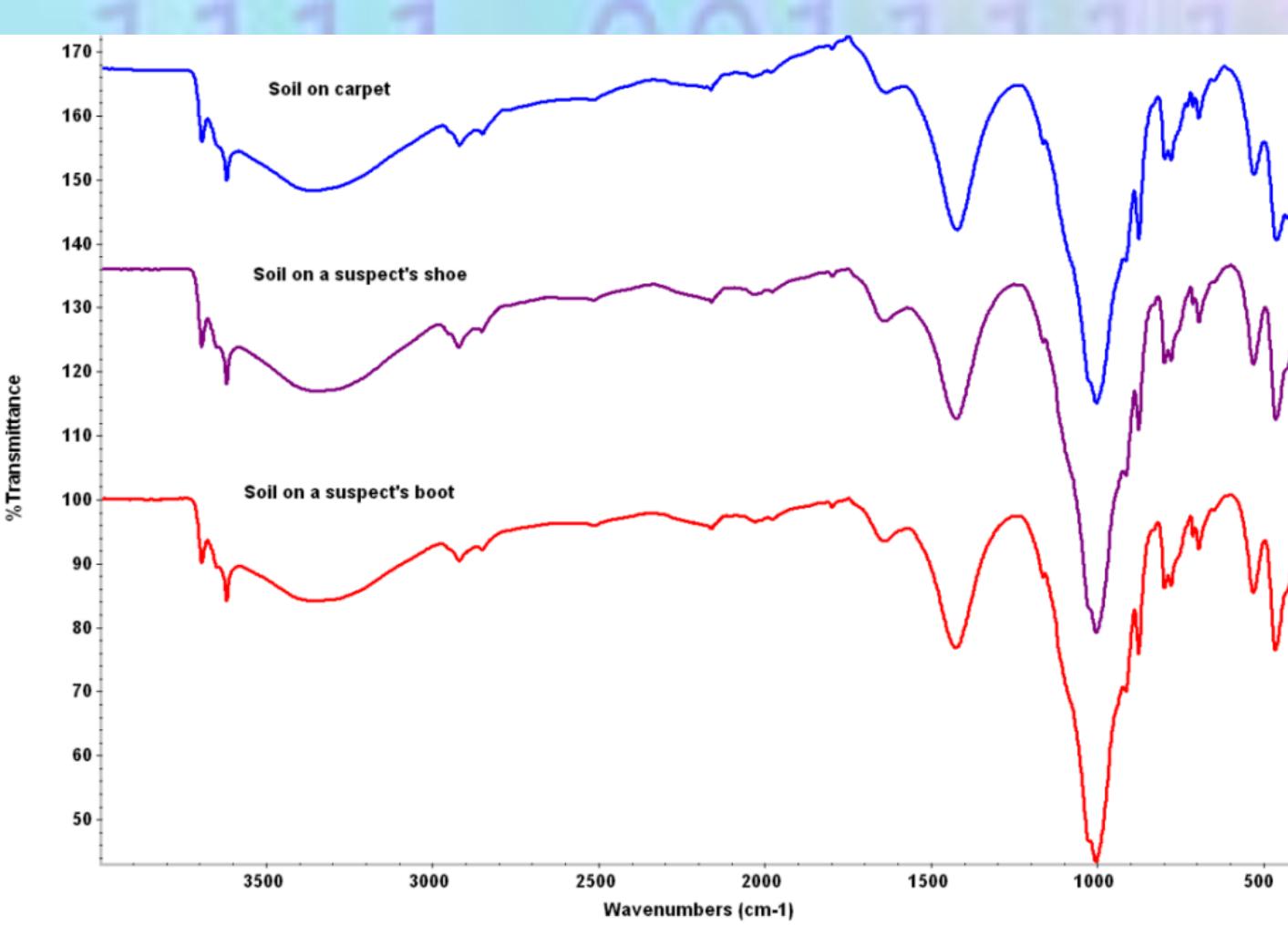
Response[s]
e.g. Soil OC

Spectra
[predictors]

Regression
coefficients

Residuals

$$\mathbf{y} = \mathbf{X} \mathbf{b} + \mathbf{r}$$



Modelisation

	3997,163	3995,735	3994,307
S000014MA21-3	0,2732762	0,2737451	0,2741967
S000014MA21-3	0,2704934	0,2708916	0,2712772
S000014MA21-5	0,2407945	0,2412324	0,2416659
S000014MA21-5	0,2380398	0,2384223	0,2388113
S000014MA21-7	0,263935	0,2643544	0,2647693
S000014MA21-7	0,260845	0,2612429	0,2616469
S000029MA21-3	0,1856674	0,1858531	0,1860142
S000029MA21-3	0,1819217	0,1820649	0,1822019
S000029MA21-5	0,1563226	0,1565142	0,156682
S000029MA21-5	0,1534739	0,1535986	0,1537148

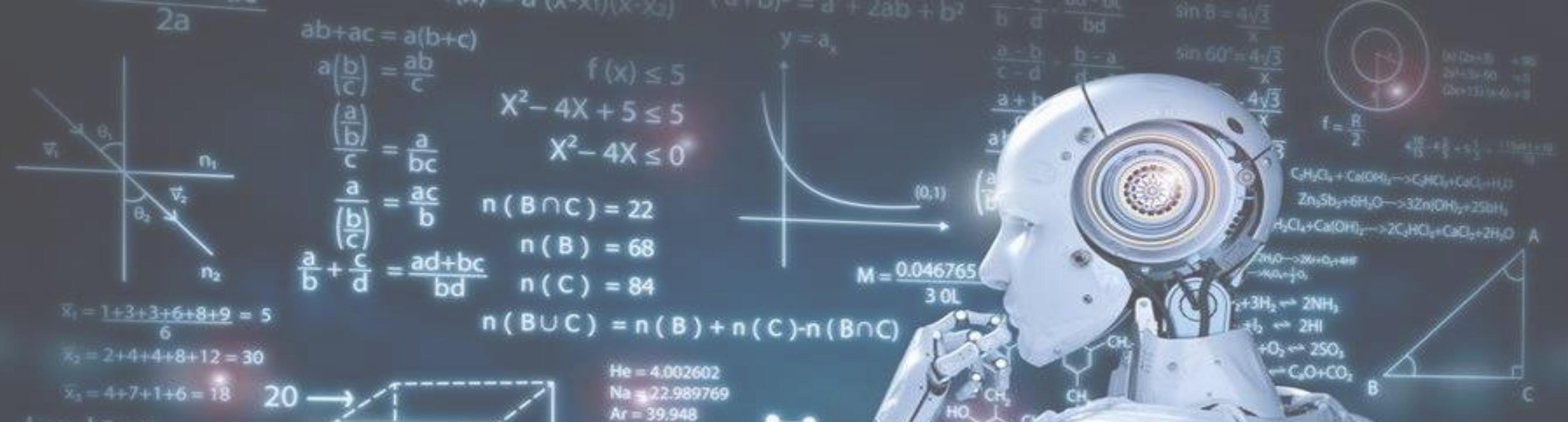


Chemometrics. Partial least squares regression (PLSR)

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

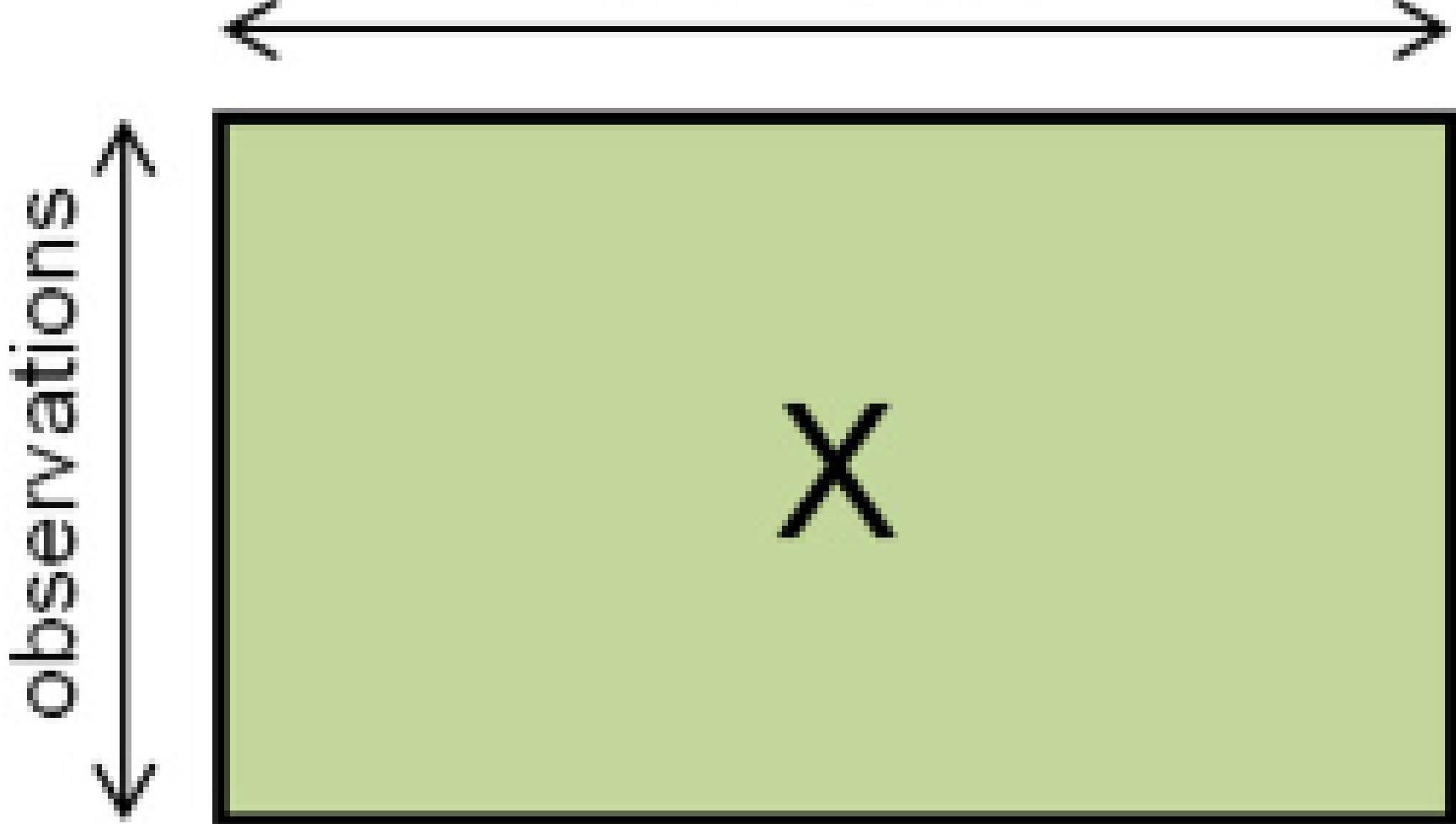
Independent variables (X) are independent of LVs
Response variable (Y)



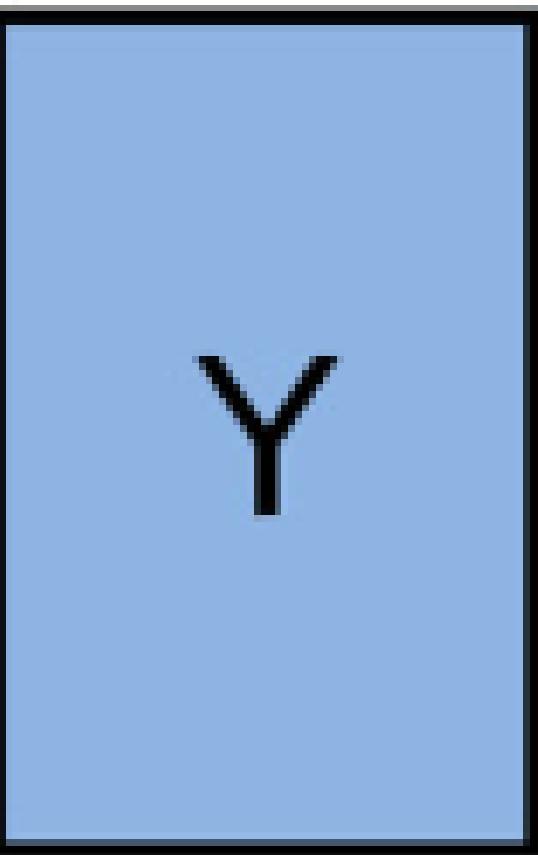


x-variables

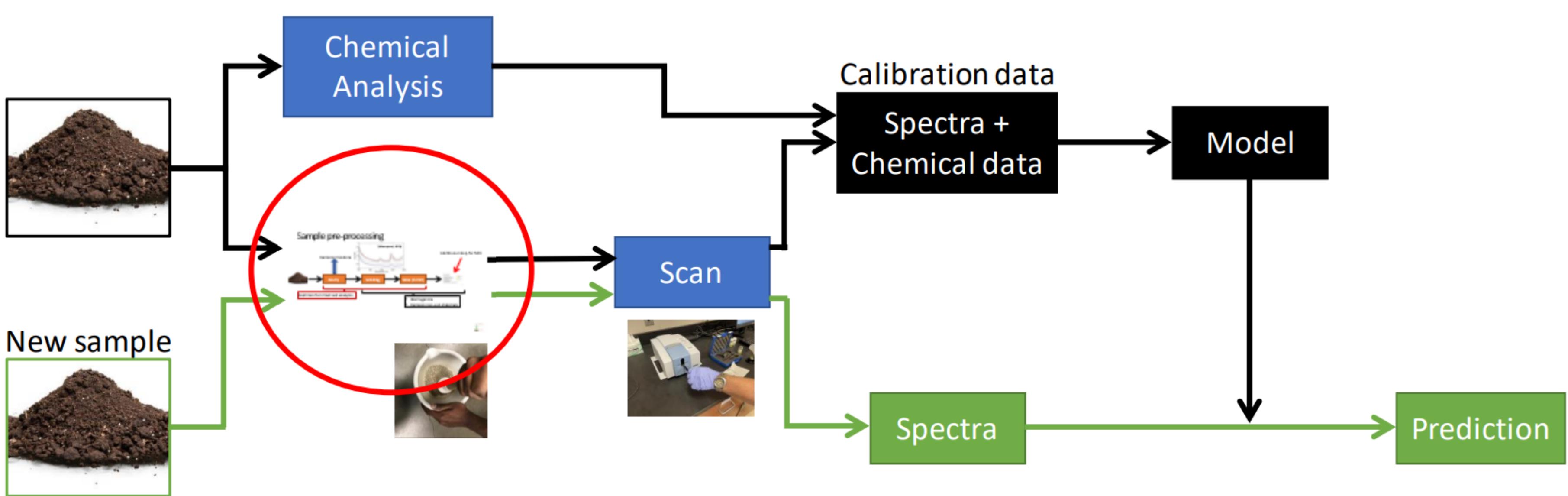
y-variables



PLS



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

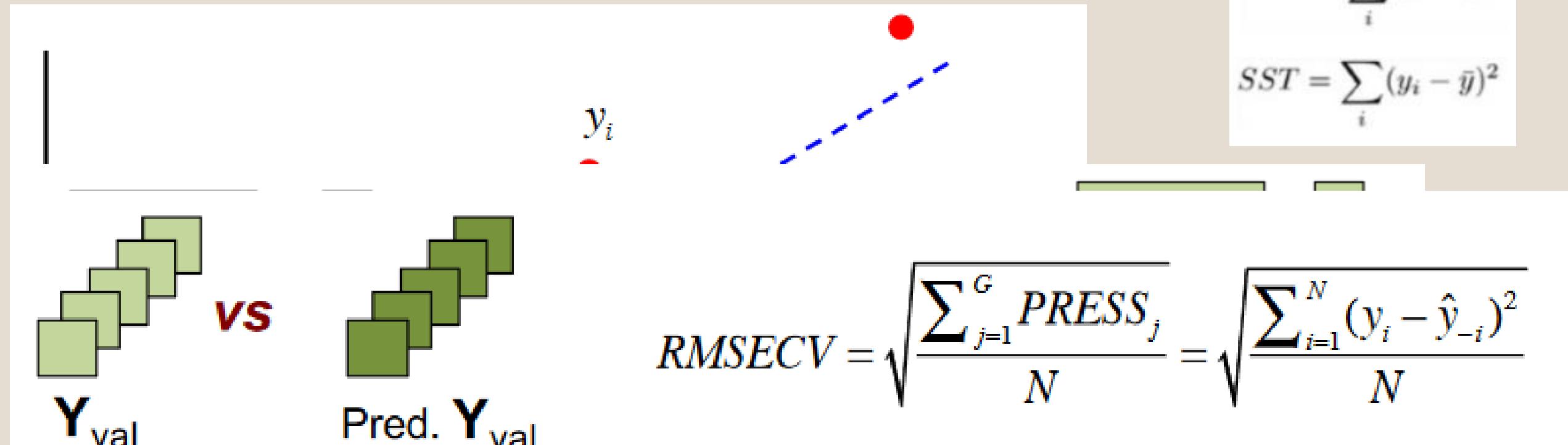
- ✓ Cross validation

➤ Leave one out

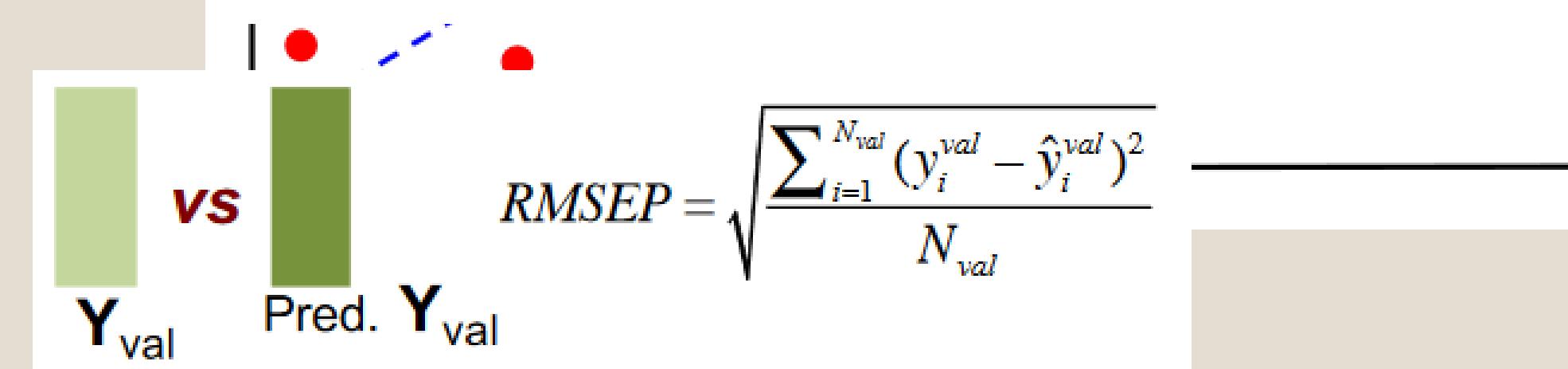
➤ Leave a group out

■ Validation Externe

- ✓ Use a test set



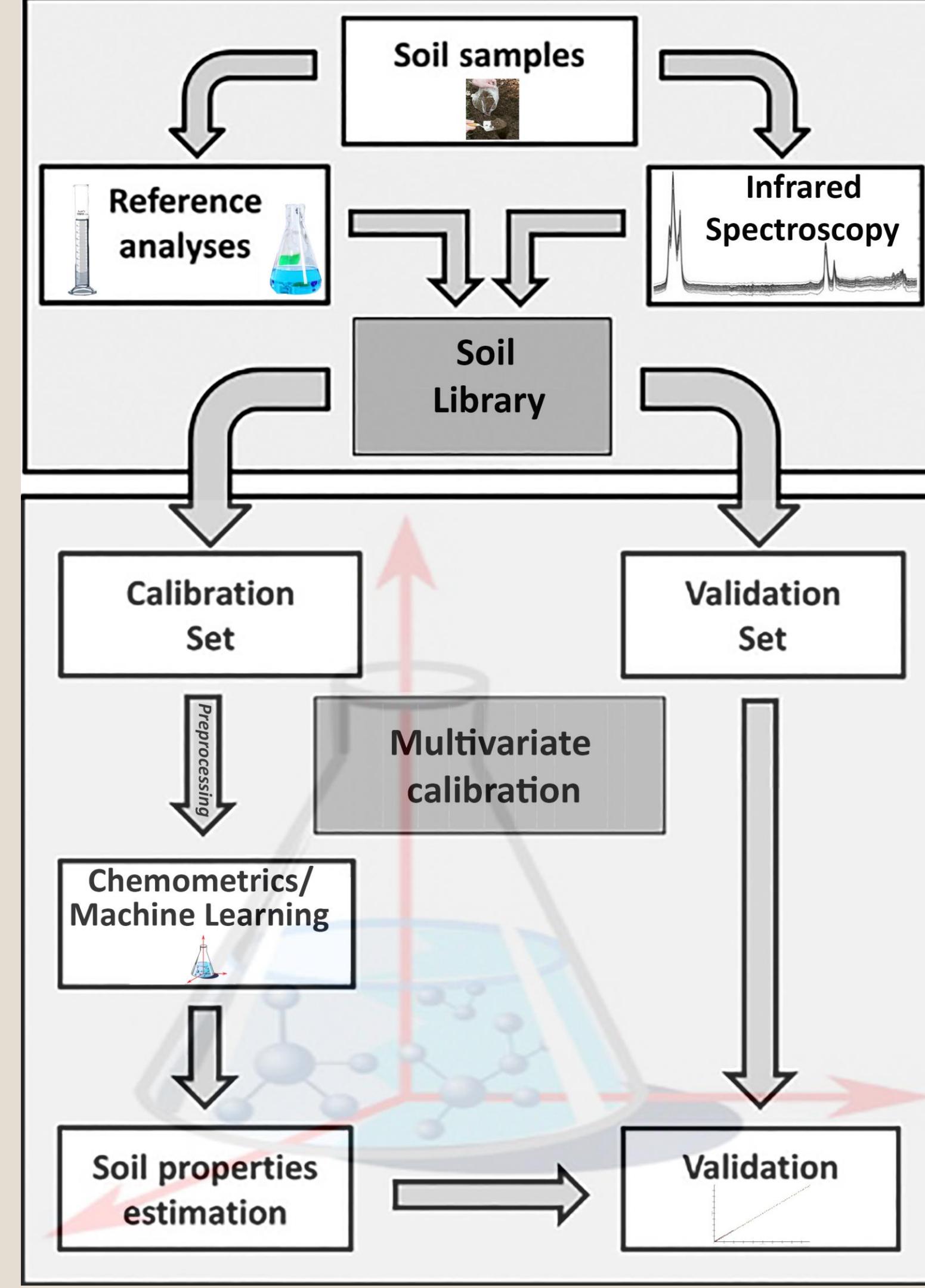
$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^G \text{PRESS}_j}{N}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}}$$



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



Spectroscopie de sol



Spectroscopie de sol: Solutions

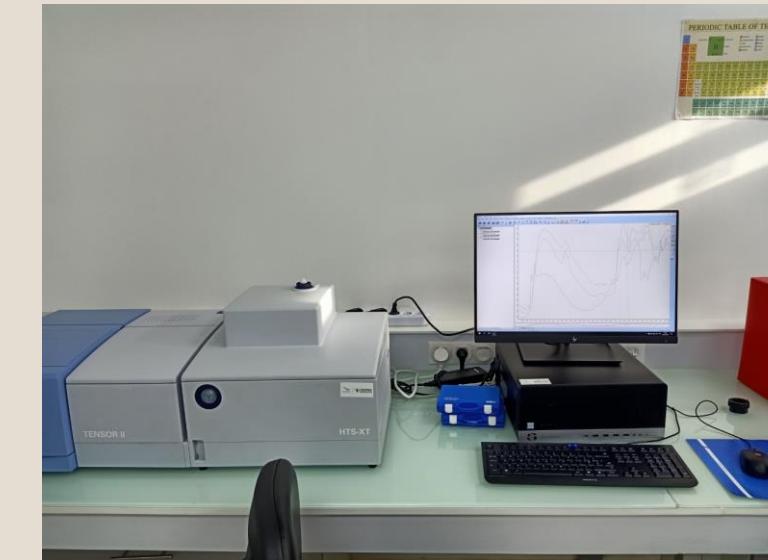
Dispersive VNIR



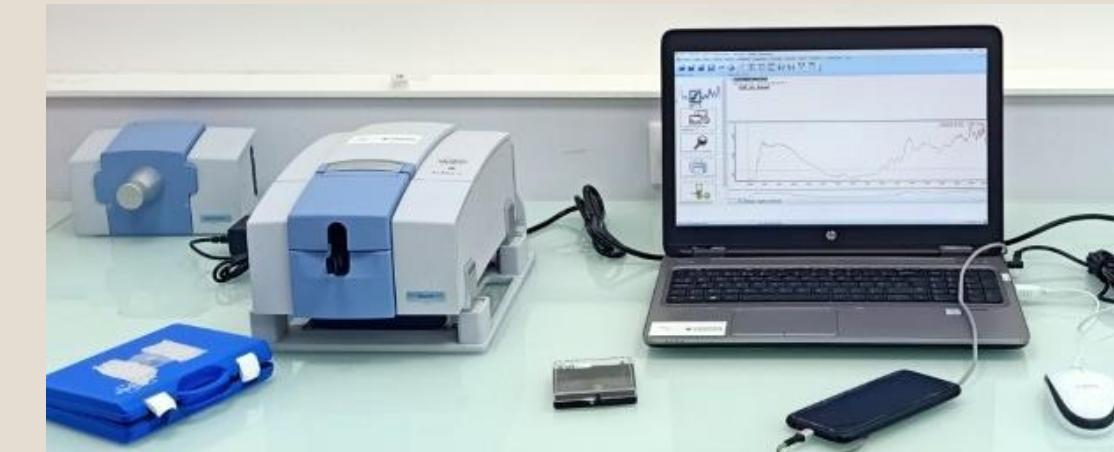
FT-NIR



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 - 2300 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
 - Bluetooth wireless connectivity
 - Battery operated
- Implementation**
 - Hardware & software ready solution
 - Non-destructive analysis
 - Continuous analysis of various parameters
 - Various materials can be measured.

Thank you



Introduction à la spéctroscopie de sol

Issam Barra, PhD

Expert en spectroscopie de Sol, GSP-FAO

Issam.barra@fao.org