

Intérêt de la spectrométrie proche infrarouge pour caractériser les propriétés physico-chimiques d'une gamme variée de sols

Brunet Didier¹, Szwarc Marc², Babre Daniel², Alary Karine², Barthès Bernard¹

1 : UR SeqBio (Séquestration du carbone et bio-fonctionnement du sol), IRD, BP 64501, 34394 Montpellier cedex 5 ; courriels : didier.brunet@mpl.ird.fr, barthes@mpl.ird.fr.

2 : US 49 Analyse (Laboratoire d'analyses physico-chimiques de sols, eaux, végétaux), CIRAD, TA 40/01, 2477 avenue Agropolis, 34398 Montpellier cedex 5 ; courriels : marc.szwarc@cirad.fr, daniel.babre@cirad.fr, karine.alary@cirad.fr.

Introduction

La spectrométrie proche infrarouge (SPIR) est une technique de caractérisation des matériaux d'après leur absorption dans le proche infrarouge. Elle comporte un étalonnage, qui construit une régression entre une propriété mesurée conventionnellement et l'absorbance à différentes longueurs d'onde du domaine proche infrarouge ; cette régression est ensuite utilisée pour prédire la propriété sur d'autres échantillons d'après leur spectre. Cette technique rapide et peu coûteuse connaît de nombreuses applications industrielles, et semble promise à un bel avenir en science du sol. Toutefois, son aptitude à caractériser les constituants minéraux reste incertaine. Par ailleurs, il semble que les étalonnages sur des jeux d'échantillons variés pourraient être médiocres. L'objectif du travail présenté était d'évaluer le potentiel de la SPIR pour déterminer 26 propriétés sur un jeu varié de sols tropicaux.

Matériels et méthodes

Les 436 échantillons étudiés proviennent de 40 pays d'Afrique, d'Amérique et d'Asie. Ils ont été prélevés à profondeur variable dans des sols rattachés à 13 groupes : Andosols, Cambisols, Ferralsols, Gleysols, Luvisols, Nitisols, Podzols, Vertisols, etc. Les analyses suivantes ont été réalisées sur ces échantillons : granulométrie cinq fractions (Arg, LF, LG, SF, SG) ; pH eau et KCl ; teneurs en C organique (méthode par oxydation sulfochromique sur sols carbonatés, CHN sinon) et N total (Kjeldahl) ; bases échangeables et CEC (méthode à l'acétate d'ammonium à pH 7) ; teneurs en Al et Fe totaux (fluorescence X), en Al extractible (acétate d'ammonium à pH 4,8) et en Fe libre (méthode de Tamm-Deb) ; teneurs en P total, P assimilable Olsen-Dabin, P assimilable Bray 2, P extrait à l'eau et P organique (différence entre extrait H₂SO₄ avant et après calcination).

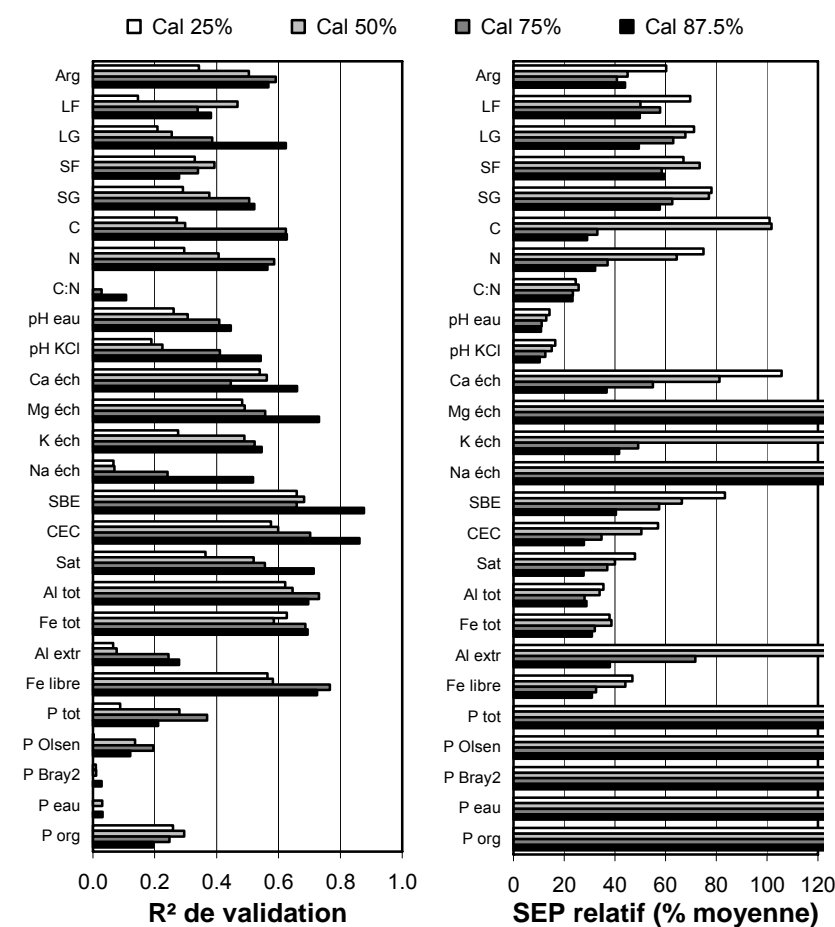
L'absorbance des échantillons a été déterminée entre 1100 et 2500 nm à l'aide d'un spectromètre Foss NIRSystems 5000 sur des aliquotes de 5 g environ séchées à l'air et tamisées à 2 mm. L'analyse de données a été réalisée avec le logiciel WinISI III, le jeu d'échantillons étant divisé en deux sous-jeux, l'un d'étalonnage et l'autre de validation. L'étalonnage a été réalisé par la méthode des moindres carrés partiels (PLS), qui exprime chaque propriété comme une combinaison linéaire de facteurs orthogonaux, eux-mêmes combinaisons linéaires d'absorbances ayant une covariance maximale avec la propriété ; le nombre optimal de facteurs à utiliser est celui optimisant une validation croisée effectuée au sein du sous-jeu d'étalonnage. L'étalonnage a été réalisé avec un effectif de 25, 50, 75 ou 87,5% du jeu total, mais toujours sur les échantillons les plus représentatifs spectralement (méthode des plus proches voisins). La qualité de l'étalonnage est évaluée en comparant prédictions et mesures (R² d'étalonnage, R²cal, et erreur standard de validation croisée,

SECV). L'étalonnage a ensuite été testé sur le sous-jeu de validation, la qualité de la validation étant évaluée par R^2 de validation (R^2_{val}) et l'erreur standard de prédiction (SEP).

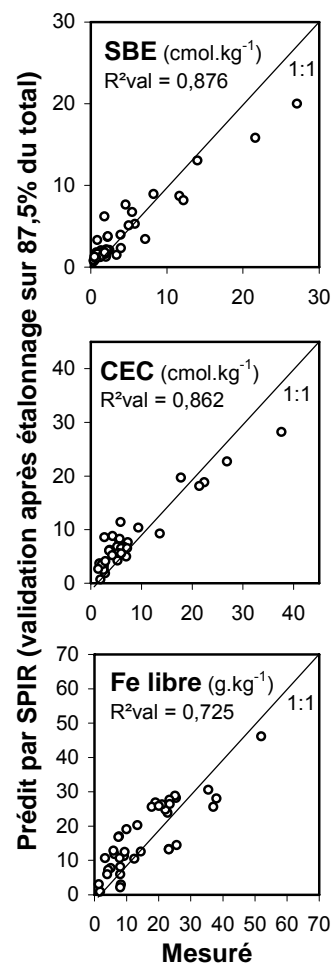
Résultats, discussion et conclusion

Malgré l'extrême diversité des échantillons étudiés ($0,3\% \leq \text{Arg} \leq 89\%$, $4 \leq \text{pH}_{\text{eau}} \leq 8$, $0,01\% \leq C \leq 24\%$), la SPIR prédit correctement plusieurs propriétés (cf. fig.) : CEC, taux de saturation (Sat), Al tot, Fe tot et Fe libre peuvent être estimés avec $R^2_{val} \geq 0,7$ et $\text{SEP} \approx 30\%$ de la moyenne ; Arg, C, N, Ca éch, K éch et somme des bases (SBE) avec $R^2_{val} \geq 0,55$ et $\text{SEP} \approx 40\%$. En revanche, P est mal prédit ($\text{SEP} > 100\%$). L'accroissement de l'effectif d'étalonnage améliore en général les prédictions (SECV et SEP diminuent, R^2 augmente), du fait de la diversité des échantillons ; mais un seuil d'étalonnage existe pour certaines propriétés, au-delà duquel étalonnage et validation ne sont pas améliorés (par exemple 75% pour Arg et Fe libre), du fait probablement d'une moindre variabilité de ces propriétés. Par ailleurs, la division du jeu total en deux jeux texturaux (Arg < ou > 30%), étalonnés et validés séparément, diminue la précision des prédictions pour quelques propriétés (Ca éch, Sat, Al tot, Fe tot) et n'a pas d'effet clair pour les autres (N, SBE et CEC mieux prédits sur le jeu argileux et moins bien prédits sur le jeu sableux que sur le jeu total ; le contraire pour Arg) ; ceci contraste avec la littérature, qui rapporte des prédictions plus précises sur jeux homogènes, suggérant que les jeux texturaux étudiés ici restent hétérogènes. Ce travail montre donc que, même en conditions atypiques en raison d'une extrême diversité, la SPIR prédit correctement certaines propriétés des sols, parfois malaisées à caractériser conventionnellement.

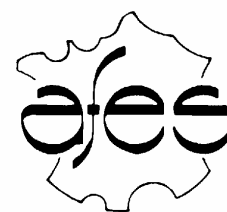
Statistiques de validation pour 26 propriétés et 4 effectifs d'étalonnage



Mesures vs. prédictions (SPIR) pour 3 propriétés



Association Française pour l'Etude des Sols



Actes des 9^{es} J^{nes}

Journées Nationales de l'Etude des Sols



3 au 5 avril

2007

ANGERS

**Institut National d'Horticulture
UMR SAGAH**

© AFES – INH, 2007

Actes des 9^{es} Journées Nationales de l'Etude des Sols, 3-5/4/2007

J.P. Rossignol (ed) Angers