

**Transfert d'étalonnages en spectroscopie proche infrarouge :
du spectromètre de laboratoire aux dispositifs portables pour
l'identification *in situ* des bois précieux à Madagascar**
RANDRIAMBININTSOA Tiavina^{1,2,3}, RAMANANANTOANDRO Tahiana^{1,2},
CHAIX Gilles^{3,4,5}

¹Université d'Antananarivo, Ecole Supérieure des Sciences Agronomiques, Mention
Foresterie et Environnement, Antananarivo 101, Madagascar

²Université d'Antananarivo, Ecole Doctorale Gestion des Ressources Naturelles et
Développement

³ChemHouse, Research Group, Montpellier, France

⁴CIRAD - UMR AGAP Institut, Montpellier, France

⁵UMR AGAP Institut, Univ. Montpellier, CIRAD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France
randriambinintsoat@gmail.com

Mots clefs : bois précieux ; discrimination ; Madagascar ; portable ; spectrométrie proche infrarouge ; terrain ; transfert d'étalonnage

Contexte et objectifs

L'exploitation illégale des bois précieux à Madagascar, tels que les genres *Dalbergia* (bois de rose et palissandre) et *Diospyros* (bois d'ébène), représente une menace majeure pour la biodiversité et les écosystèmes forestiers. Malgré les réglementations comme la CITES (Randriamalala et al 2011), le contrôle reste insuffisant, d'où le besoin d'outils scientifiques rapides et fiables pour identifier ces essences.

Dans la littérature, la spectroscopie proche infrarouge (SPIR) a été largement explorée depuis les années 1990 pour estimer les propriétés du bois et identifier les essences (So et al 2004). Des études récentes ont démontré son efficacité pour différencier des espèces de bois, en analysant leurs signatures spectrales liées à la composition chimique (Raobelina et al 2023, Rasoamanana et al 2021). La miniaturisation des équipements a permis le développement de spectromètres portables pour des analyses *in situ*, facilitant la surveillance sur le terrain et aux points de contrôle (Chaix 2024, Raobelina et al 2023, Rasoamanana et al 2021). Le transfert d'étalonnage entre spectromètres de laboratoire et appareils portables dans le domaine de la spectroscopie proche infrarouge (SPIR) est un sujet clé pour élargir l'application pratique *in situ* des modèles d'identification (Feudale et al 2002, Workman 2018). Si ce transfert est bien étudié pour des mesures quantitatives (comme la densité ou l'humidité du bois) (Pei et al 2023, Zhang et al 2024), il l'est peu pour des identifications qualitatives (espèces, origines géographiques).

Cette étude vise à combler cette lacune en évaluant la faisabilité du transfert d'étalonnage entre un spectromètre de laboratoire Bruker MPA II et trois spectromètres portables Innospectra NIR-SG1 pour identifier des espèces du genre *Dalbergia*, en utilisant une base d'étalonnage complète construite sur le Bruker et un sous-échantillon ciblé sur *Dalbergia*.

Matériels et méthode

Appareils de mesure. Dans cette étude nous avons utilisé un spectromètre de laboratoire Bruker MPA II (Bruker Optik GmbH, Ettlingen, Allemagne, Fig. 1) à transformée de Fourier équipé d'une sphère d'intégration dont la gamme spectrale va de 850 à 2500 nm et trois spectromètres

portables Innospectra NIR-SG1 (InnoSpectra, Hsinchu, Taiwan, Fig. 2) dont la gamme spectrale va de 900 à 1700 nm basés sur la technologie DLP® (Digital Light Processing).



Fig.1 : FT-NIR Bruker MPA II (Bruker Optik GmbH, Ettlingen, Allemagne)

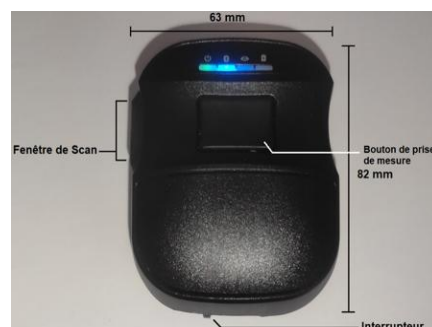


Fig.2 : NIR-SG1 (InnoSpectra, Hsinchu, Taiwan)

Echantillons et données spectrales. Pour les besoins de l'étude, nous avons constitué 3 groupes d'échantillons : un groupe d'étalonnage, un groupe de standards, et un groupe de test. Au total, nous avons utilisé deux cent carottes de bois de 5 mm de diamètre récoltées à 1,3 m de hauteur depuis l'écorce au centre de l'arbre. Au total, nous avons sélectionné 4 espèces de *Dalbergia* appartenant au groupe des bois précieux à Madagascar (Tab.1). La base d'étalonnage a été constituée à partir des spectres de cent trente-huit micro-carottes appartenant aux quatre espèces, acquis antérieurement avec le spectromètre Bruker. L'utilisation de ces données spectrales préexistantes a évité une nouvelle campagne de mesures complète, seuls quelques échantillons communs étant nécessaires pour établir les standards partagés entre les appareils. Trente-deux carottes de bois comme échantillons standards communs pour le transfert d'étalonnage mesurées sur le spectromètre de laboratoire Bruker MPA II et trois spectromètres portables Innospectra NIR-SG1. Enfin trente-deux micro-carottes de bois mesurées également sur tous les spectromètres constituent le groupe de test qui sera utilisé en validation des modèles.

Tab. 1 : Effectifs des spectres par espèces, par lots et par spectromètres

Espèces Répartition en Lot	Spectromètre de mesure	<i>Dalbergia greveana</i>	<i>Dalbergia monticola</i>	<i>Dalbergia orientalis</i>	<i>Dalbergia purpurascens</i>
Etalonnage	Bruker	108	204	282	234
Standards	Bruker	36	48	48	60
	Innospectra 01	36	48	48	60
	Innospectra 02	36	48	48	60
	Innospectra 03	36	48	48	60
Test	Bruker	30	48	48	54
	Innospectra 01	30	48	48	54
	Innospectra 02	30	48	48	54
	Innospectra 03	30	48	48	54

Méthodologie d'étalonnage et du transfert d'étalonnage.

Le Bruker a été assigné comme spectromètre « source » et les 3 Innospectra NIR-SG1 comme spectromètres « cibles ». Il convient de noter qu'au-delà des technologies, sources, capteurs, le Bruker et l'Innospectra diffèrent en termes de gamme spectrale et de résolution. Pour pallier ces différences, les données spectrales du Bruker ont été transformées de façon à correspondre à la gamme et à la résolution des Innospectra, notamment en ajustant la gamme spectrale et la résolution (Fig. 3). L'analyse des données a reposé sur la méthode des moindres carrés partiels (PLS, *Partial Least Squares*), une technique de régression multivariée qui maximise la

séparation entre classes (espèces ici) en établissant une relation quantitative entre les matrices des données spectrales (X) et les matrices des variables cibles (Y), correspondant aux espèces de *Dalbergia*. Les identifications des espèces ont été validées à partir d'échantillons d'herbiers par des experts en taxonomie du Missouri Botanical Garden (MBG) à Madagascar et du Muséum National d'Histoire Naturelle (MNHN) à Paris. En raison du caractère qualitatif et multiclasse des variables, la méthode PLS-DA (*Partial Least Squares Discriminant Analysis*), implémentée à l'aide de l'algorithme NIPALS (*Non-linear Iterative Partial Least Squares*), a été utilisée pour établir les modèles de discrimination.

Pour l'étalonnage, il faut définir le nombre de variables discriminantes (VD) du modèle PLS-DA et le meilleur prétraitement des données spectrales. Pour cela, nous avons utilisé la validation croisée à quatre blocs répétée 20 fois. Le meilleur prétraitement est choisi sur celui qui donne l'erreur minimale de classification (accuracy) globale et le nombre de VD (=facteurs du modèle de régression PLS) correspondant à cette erreur minimale. A part les étalonnages de modèles PLS-DA à partir des spectres bruts, les prétraitements suivants ont été aussi testés sont : De-trending (Dt), Standard Normal Variate (SNV), lissage de Savitzky Golay (SG0), première dérivation suivie d'un lissage de Savitzky Golay (SG1), deuxième dérivation suivie d'un lissage de Savitzky Golay (SG2), puis les prétraitements ont été combinés deux à deux. Les analyses ont été réalisées avec les logiciels R (version R-4.5.0, (R Core Team, 2024), RStudio (Posit Team 2024) à l'aide du package rchemo (version 0.1-3, (Brandolini-Bunlon et al 2023)). Une fois le prétraitement sélectionné et le nombre de VD, nous avons appliqué le prétraitement aux spectres de test et nous avons prédit les espèces pour chaque spectre avec le modèle PLS-DA. L'erreur globale est calculée à partir du rapport entre le nombre de spectre mal prédits et le nombre total de spectres de test. Pour le transfert de l'étalonnage nous avons utilisé la méthode UPDATE et double UPDATE (Giordanengo et al 2008, Roger 2010). La première consiste à concaténer avec les spectres X_source les spectres X_standard_cible. La seconde consiste à concaténer avec les spectres X_source les spectres X_standard_cible et les spectres X_source_standard. Une fois les 4 modèles établis, nous les avons testés sur les spectres de test transformés ou non selon le cas. Ces étapes concernent seulement un transfert d'étalonnage entre le Bruker et un Innospectra ; face à 3 Innospectra, ces étapes ont été répétées 3 fois tout en changeant le spectromètre cible en fonction de l'Innospectra utilisé pour le transfert. Les erreurs globales présentées dans la Fig. 3 illustrent les performances des différents cas de test :

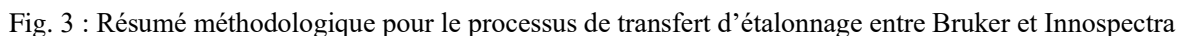
ERR1 est l'erreur de globale du modèle PLS-DA étalonné sur les données spectrales du Bruker, et testé sur les spectres de test du Bruker.

ERR2 est l'erreur globale obtenue avec le modèle PLS-DA étalonné sur les données spectrales transformées du Bruker (gamme et résolution spectrales de l'Innospectra), testé sur les spectres transformés du Bruker.

ERR3 est l'erreur de ce même modèle testé sur les spectres des spectromètres Innospectra.

ERR4 est l'erreur globale du modèle PLS-DA UPDATE testé sur les spectres des spectromètres Innospectra.

ERR5 est l'erreur globale du modèle PLS-DA Double UPDATE testé sur les spectres des spectromètres Innospectra.



Le modèle PLS-DA conçu à partir des spectres Bruker pour distinguer quatre espèces de *Dalbergia* présente une erreur (ERR1) de 54%, assez élevée. Cette performance modérée s'explique par plusieurs facteurs : différences d'opérateurs entre la constitution initiale des données et les mesures actuelles, difficulté à localiser précisément les répliques sur les micro-carottes de bois, ainsi que l'identification incertaine des plans ligneux (radial ou tangentiel).

Avec UPDATE (ERR4), l'erreur peut descendre jusque 39%, bien que variable selon le spectromètre utilisé. Avec la double UPDATE (ERR5), les résultats deviennent plus stables autour de 45%, quel que soit le spectromètre portable Innospectra employé.

En se penchant sur les variables discriminantes (VD) pour chaque modèle, on peut constater qu'au fur et à mesure où on intègre de nouvelles données spectrales dans l'étalonnage (par Update ou double Update), le VD tend à s'accroître aussi du fait que le modèle est contraint de prendre en compte des variations supplémentaires (ici la variation de spectromètres) en incorporant des composantes supplémentaires pour compenser ces variations.

Tab.2 : Erreur globale des modèles de discrimination en fonction des données d'étalonnage et de tests (en %)

Tests	Pret / VD	X_source _test_10 00-2500	X_source_ conv_test	X_cible_1 _test	X_cible_2 _test	X_cible_ 3_test
Etalonnage						
Gamme : 1000-2500		N=180 (30/48/48/54)				
X_source N=828 108/204/282/234	SG1SN V / 18	ERR1 54				
Gamme : 900-1700			ERR2	ERR3	ERR3	ERR3
X_source N=828 108/204/282/234	SG2SN V / 12		49	58	67	60
Gamme : 900-1700				ERR4	ERR4	ERR4
Upt1 (X_source + X_cible) N=1020 144/252/330/294	SG2SN V / 19			43	46	39
Gamme : 900-1700				ERR5	ERR5	ERR5
Upt2 (X_source + X_cible + X_source_standard) N=1212 180/300/378/354	SG0SN V / 24			45	45	45

Conclusion et perspectives

Le transfert d'étalonnage fondé sur la concaténation des données spectrales a démontré un potentiel prometteur pour transférer les modèles développés sur le spectromètre laboratoire Bruker MPA II vers les spectromètres portables Innospectra NIR-SG1. Cette approche a permis de retrouver des niveaux de discrimination des quatre espèces de *Dalbergia* proche du modèle développé sur le spectromètre source.

Nos résultats ouvrent plusieurs perspectives. À Madagascar, la diversité des espèces de *Dalbergia* est importante, et leur intégration complète dans les modèles renforcerait encore la robustesse des discriminations. En outre, l'étude devrait être étendue aux autres genres de bois précieux, notamment les bois d'ébène du genre *Diospyros*, pour couvrir l'ensemble des ressources forestières à protéger.

Il est néanmoins essentiel de reconnaître les limites inhérentes à la méthode PLS-DA utilisée ici. Celle-ci, construite uniquement sur des modèles de bois précieux, tend à mal classifier des échantillons hors domaine, tels que des plastiques, du métal, ou même des bois ordinaires comme le pin, en les identifiant à tort comme bois précieux. Cette limitation souligne l'importance de combiner la PLS-DA avec d'autres méthodes de classification, comme les approches One-Class basées sur SVM ou SIMCA, afin d'exclure efficacement les échantillons non concernés en amont.

Ces développements permettront d'améliorer la précision et la fiabilité des modèles, contribuant ainsi à une meilleure protection des bois précieux malgaches, tout en fournissant des outils adaptés à un usage en terrain dans le cadre des contrôles forestiers.

References

Brandolini-Bunlon M, Jallais B, Roger JM, Lesnoff, M (2023) rchemo: Dimension Reduction, Regression and Discrimination for Chemometrics R package version 0.1-2. <https://cran.r-project.org/package=rchemo>

Chaix G (2024) Near infrared spectroscopy applied to forest products identification and quality assesment. International Conference on Tropical Wood - Advancing the Sustainable Use of Tropical Forests. Book of Abstracts; University of Antananarivo. <https://agritrop.cirad.fr/613027/>

Feudale RN, Woody NA, Tan H, Myles AJ, Brown, SD, Ferré J (2002) Transfer of multivariate calibration models: A review. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 64(2), Article 2. [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(02\)00085-0](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(02)00085-0)

Giordanengo T, Charpentier J-P, Roger J-M, Roussel S, Brancheriau L, Chaix G, Baillères H (2008) Correction of moisture effects on near infrared calibration for the analysis of phenol content in eucalyptus wood extracts. Annals of Forest Science, 65(8), 803-803. <https://doi.org/10.1051/forest:2008065>

Pei Z, Han G, Mao H, Chen C, Shi T, Yang K, Ma X, Gong W (2023) Improving quantification of methane point source emissions from imaging spectroscopy. Remote Sensing of Environment, 295, 113652. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2023.113652>

Posit Team (2024) RStudio: Integrated Development Environment for R (Version 2024.04.0). Posit Software, PBC. <https://www.posit.co/>

R Core Team (2024) R: A Language and Environment for Statistical Computing (Version 4.5.0). R Foundation for Statistical Computing. <https://www.R-project.org/>

Randriamalala H, Rasarely E, Ratsimbazafy J, Brizzi A, Ballet J, Razakamanarina N, Ratsifandrihamanana N, Schuurman D (2011) Stocks de bois précieux de Madagascar – quelle voie emprunter ? Madagascar Conservation & Development, 6(2), 88-96. <https://doi.org/10.4314/mcd.v6i2.8>

Raobelina AC, Chaix G, Razafimahatratra AR, Rakotoniaina SP, Ramananantoandro, T(2023) Use of a portable near infrared spectrometer for wood identification of four *Dalbergia* species from Madagascar. Wood and Fiber Science, 55(1),

Rasoamanana LP, Chaix G, Randriambintsoa T, Raobelina AC, Filho MT Razafimahatratra AR, Ramananantoandro T (2021) Evaluation des potentialités d'un spectromètre portatif à faible coût sur la discrimination de 3 espèces de *Dalbergia* et 3 espèces de *Diospyros* de Madagascar : Essais sur des échantillons non stabilisés. Journées scientifiques du GDR 3544 Sciences du bois, 219-222. <https://hal.science/hal-05179530>

Roger J-M (2005) Développements chimiométriques pour améliorer la robustesse des mesures spectrométriques appliquées aux agro-procédés, Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc. <https://theses.hal.science/tel-00120263>

Roger J-M (2010) Robustesse des étalonnages multidimensionnels : Application aux données spectrales. Qualité et sécurité au laboratoire. <https://doi.org/10.51257/a-v1-sl265>

So C-L, Via BK, Groom LH, Schimleck LR, Shupe TF, Kelley SS, Rials TG (2004) Near infrared spectroscopy in the forest products industry. Forest Products Journal 54(3):6-16. <https://research.fs.usda.gov/treearch/8295>

Workman JJ (2018) A Review of Calibration Transfer Practices and Instrument Differences in Spectroscopy. Applied Spectroscopy, 72(3), 340-365.

Zhang Z, Zhong H, Avramidis,S, Wu S, Lin W, Li, Y (2024) Transfer learning for predicting wood density of different tree species: Calibration transfer from portable NIR spectrometer to hyperspectral imaging. Wood Science and Technology, 59(1), 19. <https://doi.org/10.1007/s00226-024-01615-5>