

Développements chimiométriques pour améliorer la robustesse des mesures spectrométriques appliquées aux agro-procédés

Jean-Michel ROGER

`jean-michel.roger@montpellier.cemagref.fr`

UMR ITAP - Cemagref Montpellier

Plan général

- Introduction
- Nettoyage de l'espace de mesure
- Discrimination à partir des spectres
- Conclusion

Plan

- Introduction
 - Contexte
 - Problématique
 - Voies de recherche
- Nettoyage de l'espace de mesure
- Discrimination à partir des spectres
- Conclusion

Contexte applicatif

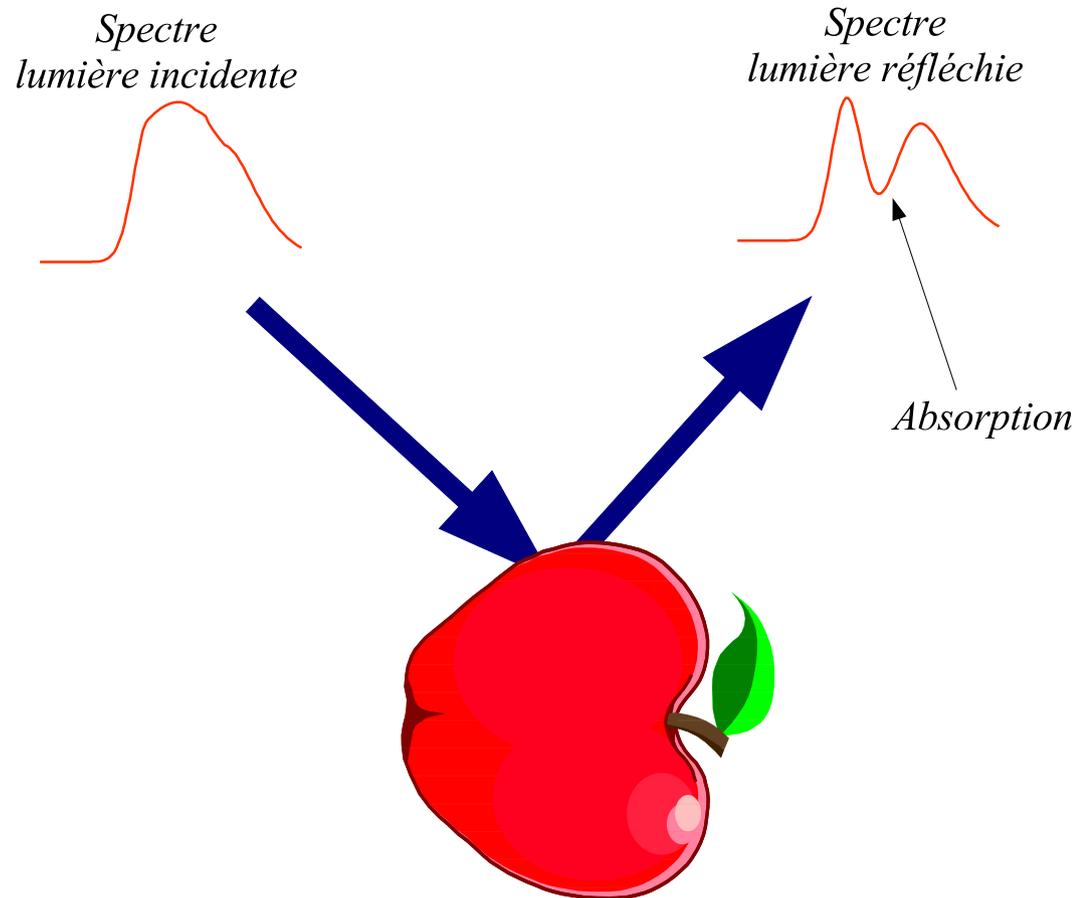
- La gestion des agro-systèmes nécessite des capteurs
 - Non destructifs
 - Rapides
 - Bon marché
 - Robustes

Nous nous intéresserons ici à ceux basés sur la

Spectrométrie proche infrarouge (NIR)

Contexte physique

- Principe de la spectrométrie NIR par rétro diffusion



Contexte physique

- Les problèmes sont nombreux :
 - La complexité du signal
 - Harmoniques et combinaisons
 - Les grandeurs d'influence
 - Température(s), lumière, origine du produit
 - La présentation de l'échantillon
 - Variabilité des trajets optiques
 - La variabilité de l'échantillon
 - Produits complexes, de composition inconnue

Contexte métrologique

- La mesure par spectrométrie est : Indirecte et Multivariée
- Il y a donc besoin d'établir un modèle d'étalonnage

$$\hat{y} = f(\mathbf{x})$$

où y est la concentration cherchée et \mathbf{x} le spectre mesuré

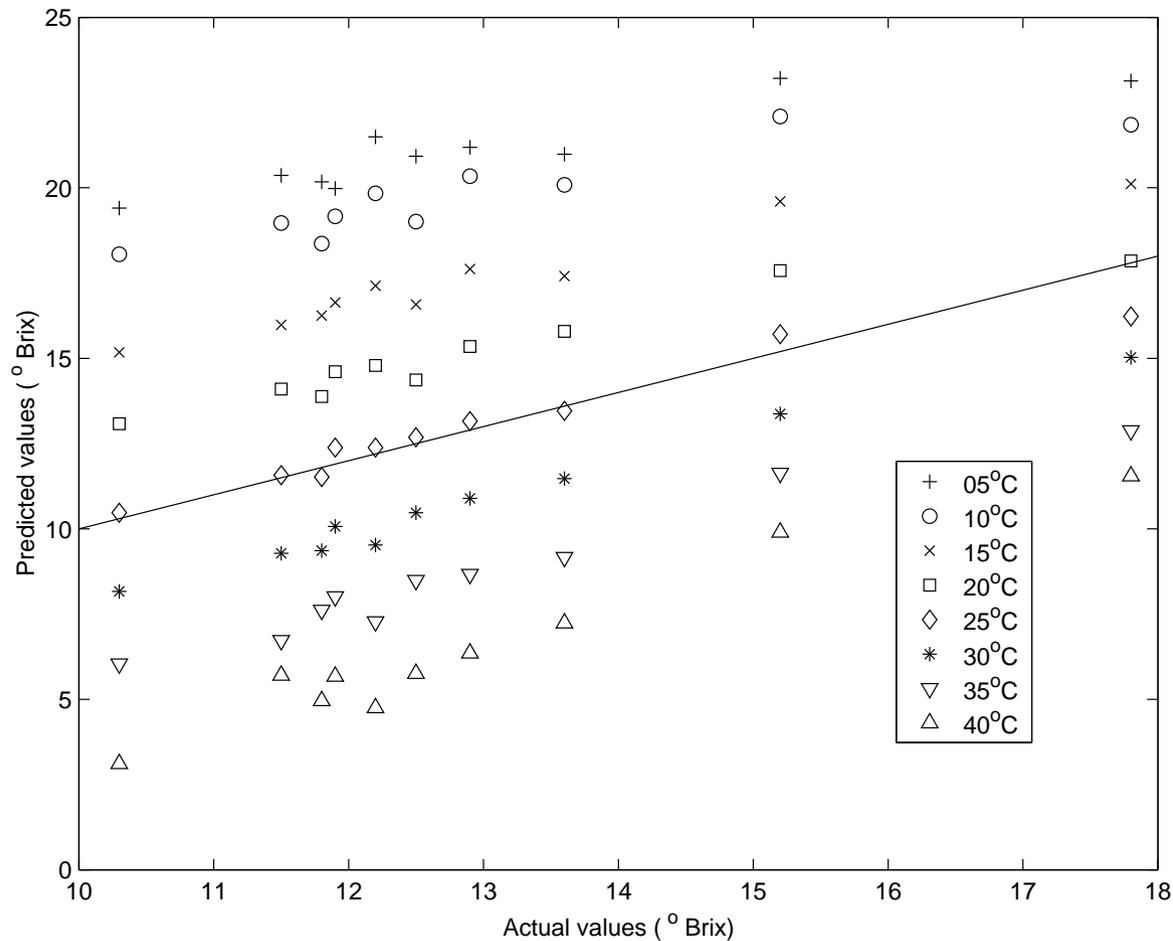
- Nous nous restreindrons aux modèles linéaires :

$$\hat{y} = b_0 + x_1 b_1 + x_2 b_2 + \dots + x_p b_p$$

$$\hat{y} = \mathbf{x}^T \mathbf{b} + b_0$$

Contexte chimiométrique

- La mesure souffre d'un manque de robustesse



[Hernández Sánchez *et al*, 2003]

Problématique

- Améliorer la robustesse de la mesure ; dans le cadre des agro-procédés, i.e. avec un matériel
 - peu coûteux
 - robuste
 - embarquable, en ligne ou portable
- On peut agir à deux niveaux :

Problématique

- Améliorer la robustesse de la mesure ; dans le cadre des agro-procédés, i.e. avec un matériel
 - peu coûteux
 - robuste
 - embarquable, en ligne ou portable
- On peut agir à deux niveaux :
 - Sur la mesure du spectre → Thèse F CHAUCHARD

Problématique

- Améliorer la robustesse de la mesure ; dans le cadre des agro-procédés, i.e. avec un matériel
 - peu coûteux
 - robuste
 - embarquable, en ligne ou portable
- On peut agir à deux niveaux :
 - Sur la mesure du spectre → Thèse F CHAUCHARD
 - **Sur le modèle d'étalonnage**

Problématique

Avant d'aller plus loin,
Une précision sur la définition de la robustesse :

*la stabilité de la capacité prédictive du modèle
vis à vis des perturbations
appliquées au voisinage des conditions standard*

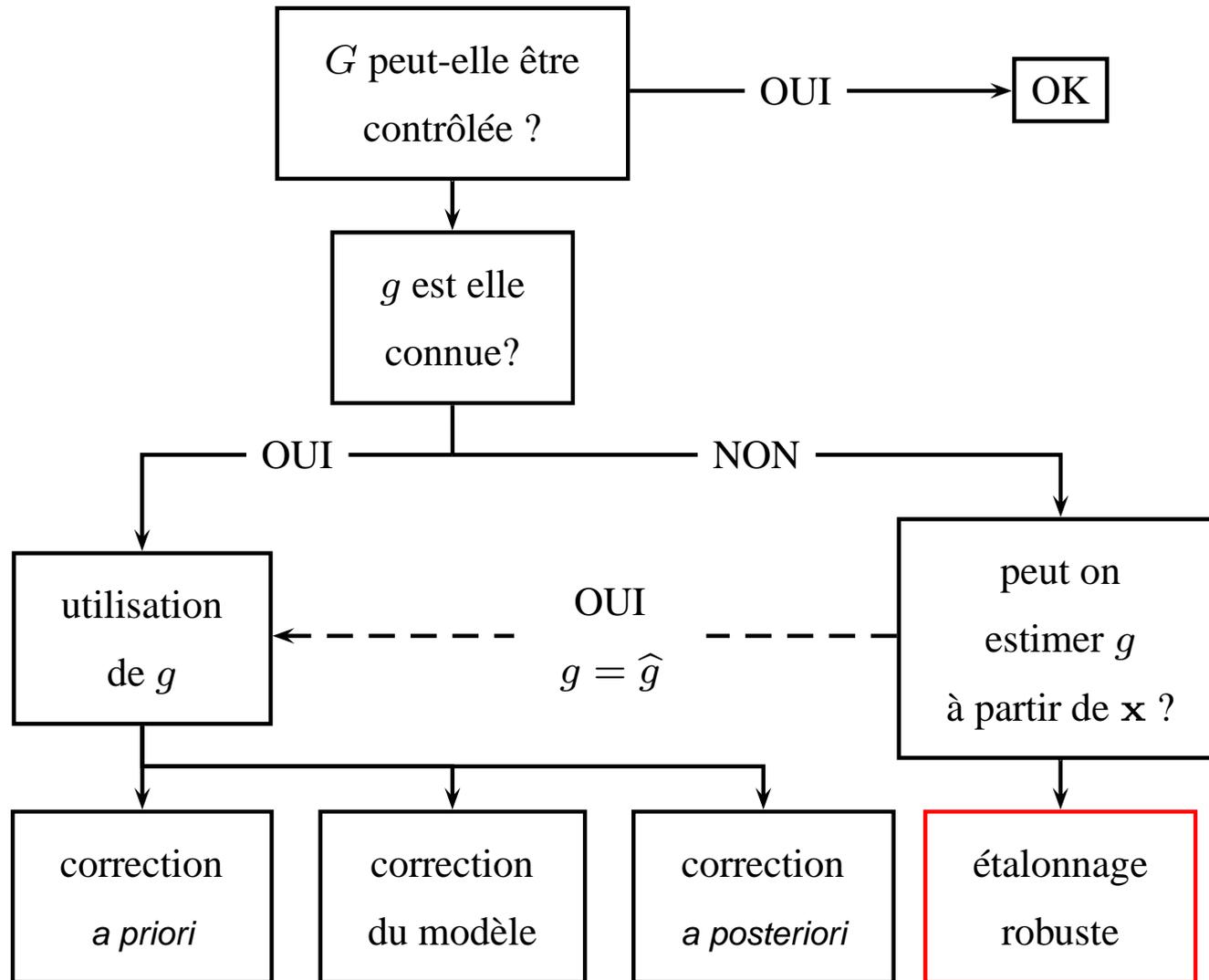
[Zeaiter et al, 2004]

Problématique

- Soit
 - G une grandeur d'influence
 - g sa valeur

- Une variation de G entraîne une altération δx du spectre

Une stratégie



[Chauchard *et al*, 2004]

Voies de recherche

3 objectifs

Améliorer la robustesse / G connue
Maintenir la robustesse / G inconnue

Réaliser un diagnostic

Voies de recherche

3 objectifs

2 solutions

Nettoyage de l'espace de mesure

Améliorer la robustesse / G connue
Maintenir la robustesse / G inconnue

Réaliser un diagnostic

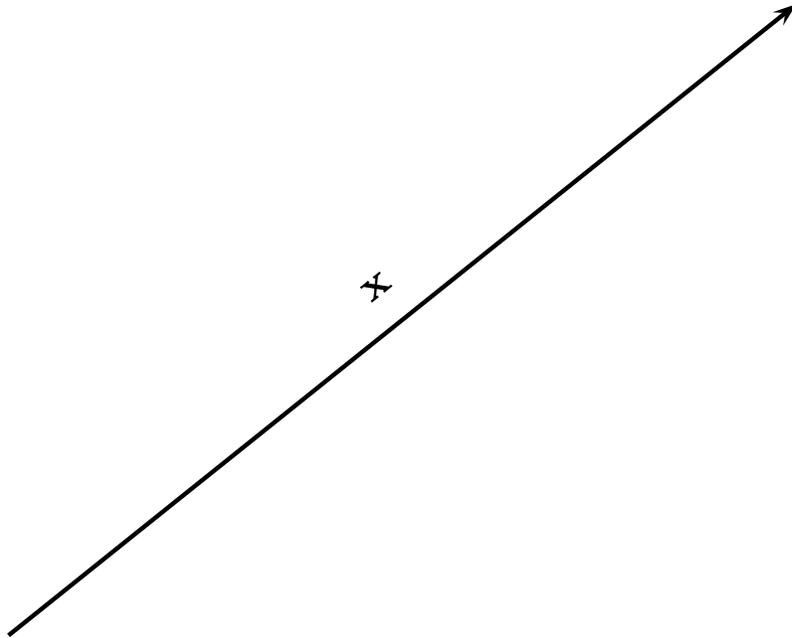
Discrimination à partir des spectres

Plan

- Introduction
- Nettoyage de l'espace de mesure
 - Présentation géométrique du problème
 - Orthogonalisation explicite
 - Application à l'étalonnage
 - Application en ligne
- Discrimination à partir des spectres
- Conclusion

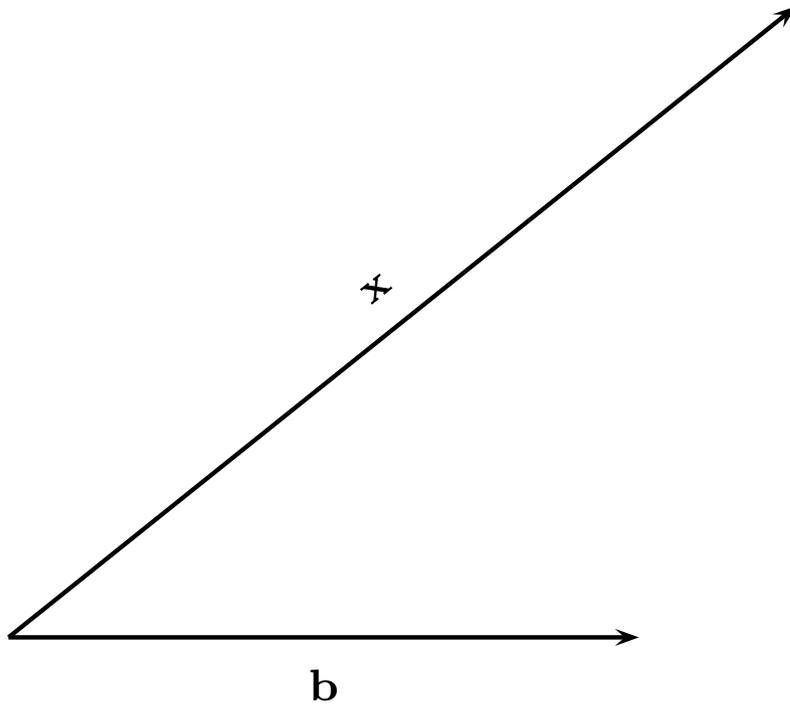
Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



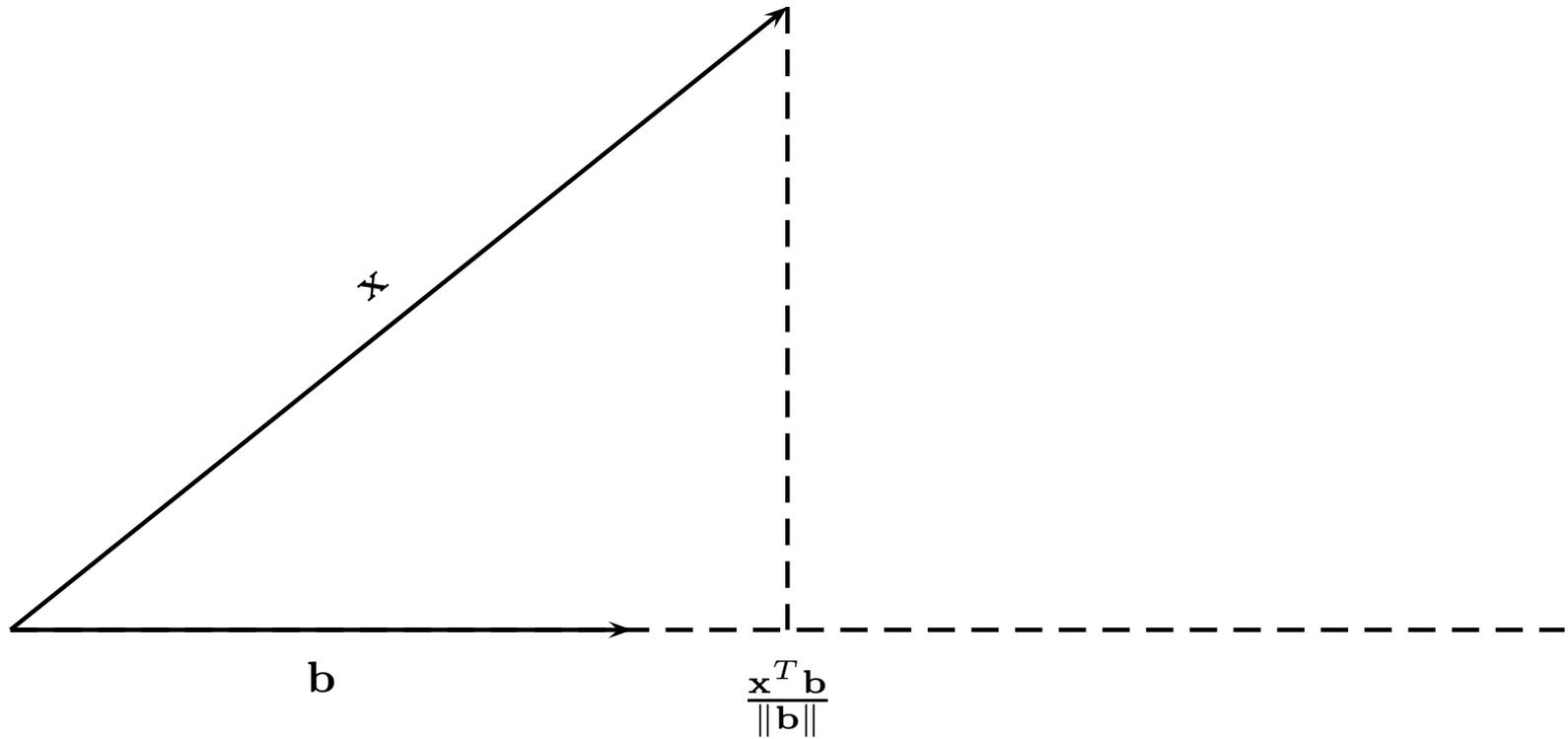
Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



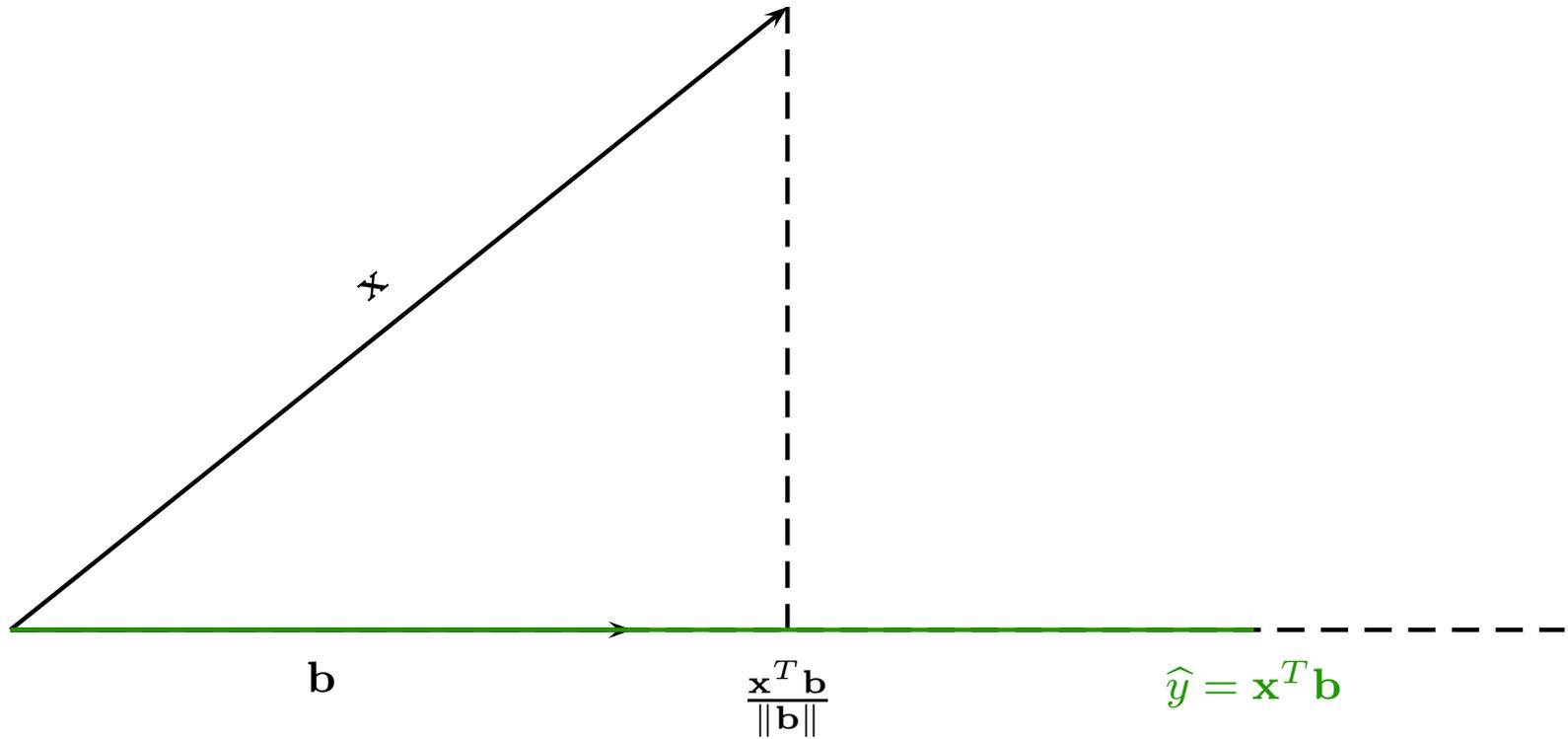
Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



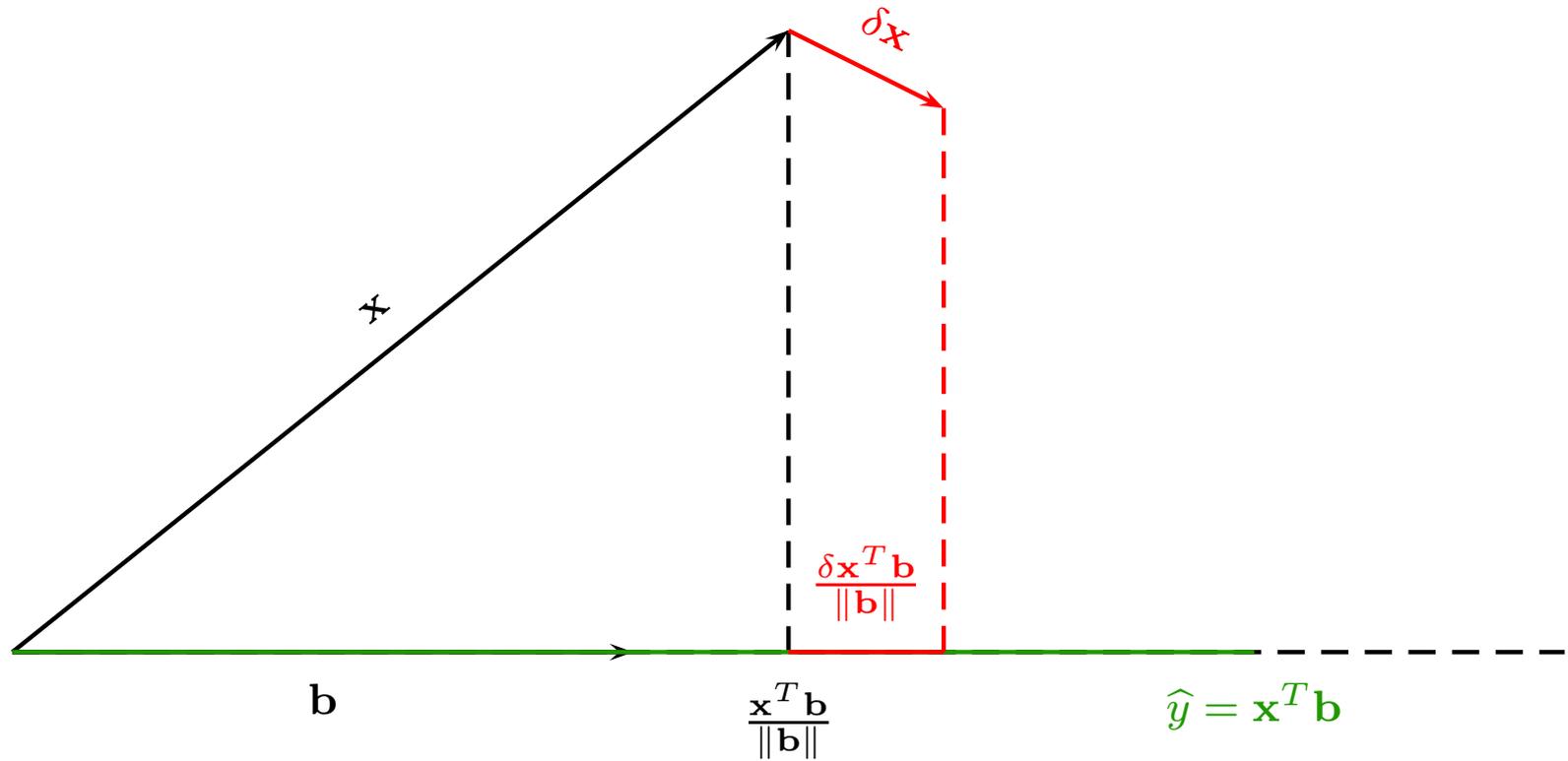
Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



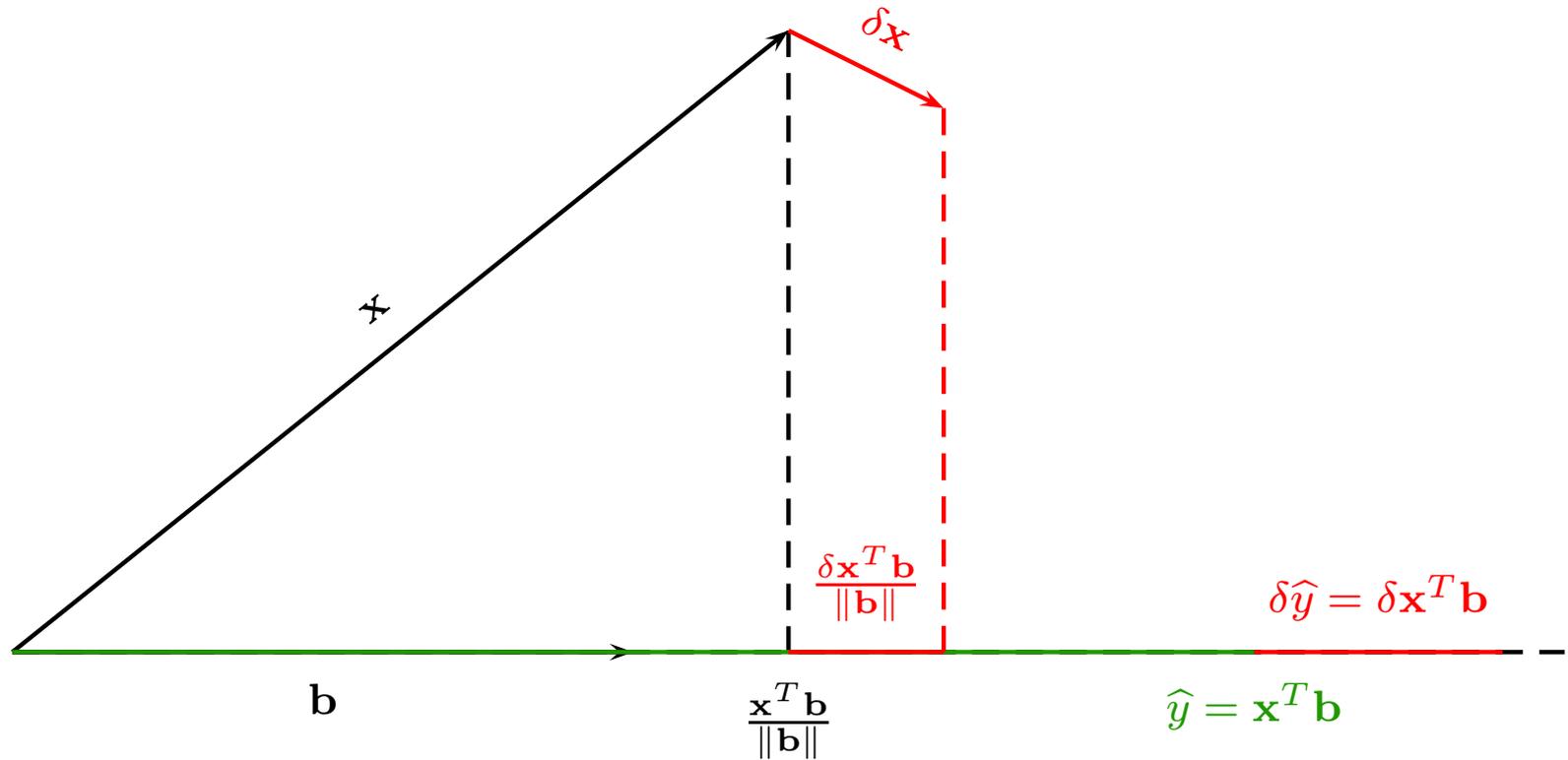
Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



Le problème...

Dans \mathbb{R}^p



Les solutions...

On a $|\delta\hat{y}| = \|\delta\mathbf{x}\| \times \|\mathbf{b}\| \times |\cos(\delta\mathbf{x}, \mathbf{b})|$

- Trois solutions :
 - Réduire $\|\delta\mathbf{x}\|$
 - Prétraitements dédiés
 - Réduire $\|\mathbf{b}\|$
 - Sélection de variables, lissages, parcimonie du modèle
 - Réduire $|\cos(\delta\mathbf{x}, \mathbf{b})|$
 - Orthogonalisation ...

Réduction de $|\cos(\delta\mathbf{x}, \mathbf{b})|$

- Étalonnage exhaustif :
 - Méthode “naturelle”, qui consiste à introduire $\delta\mathbf{x}$ dans la base d'étalonnage
 - L'apprentissage réalise seul l'orthogonalisation
- **Orthogonalisation explicite**
 - Identifier le sous espace porteur de $\delta\mathbf{x}$
 - Enlever ce sous espace par projection orthogonale

Orthogonalisation explicite

Le principe de base repose sur la décomposition :

$$\mathbb{R}^p = \vec{C} \oplus \vec{N} \oplus \vec{R}$$

- \vec{C} contient les informations chimiques
- \vec{N} contient les perturbations
- \vec{R} contient des résidus

Au niveau matriciel :

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^+ + \mathbf{X}^- + \mathbf{R}$$

Orthogonalisation explicite

\mathbf{X}^- est un nuage de points représentatif de \vec{N} .

Une ACP sur \mathbf{X}^- fournit une estimation d'une base de \vec{N} .

De plus, cette base est orthonormée

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^- &= \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} \\ \tilde{\mathbf{X}} &= \mathbf{X} \left(\mathbf{I} - \mathbf{PP}^T \right)\end{aligned}$$

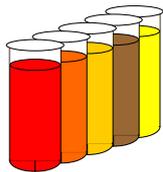
On étalonne ensuite un modèle sur $\tilde{\mathbf{X}}$

EPO : Améliorer la robustesse

- Si on veut diminuer l'effet d'une grandeur G spécifique
- Au moment de l'étalonnage
- EPO : External Parameter Orthogonalisation permet de construire X^- à partir de quelques expériences simples, où il n'est besoin de mesurer ni Y , ni G .

EPO : Améliorer la robustesse

n échantillons	k valeurs de G	k matrices de n spectres	k spectres moyens	k spectres de différence
---------------------	-----------------------	---------------------------------	------------------------	-------------------------------

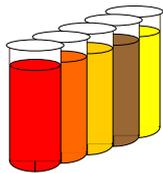


$$G = g^1$$

$$\mathbf{X}^1$$

$$\mathbf{m}_1^T$$

$$\mathbf{m}_1^T - \mathbf{m}_1^T$$



$$G = g^2$$

$$\mathbf{X}^2$$

$$\mathbf{m}_2^T$$

$$\mathbf{m}_2^T - \mathbf{m}_1^T$$

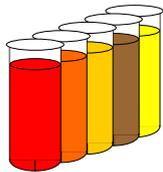
...

...

...

...

...



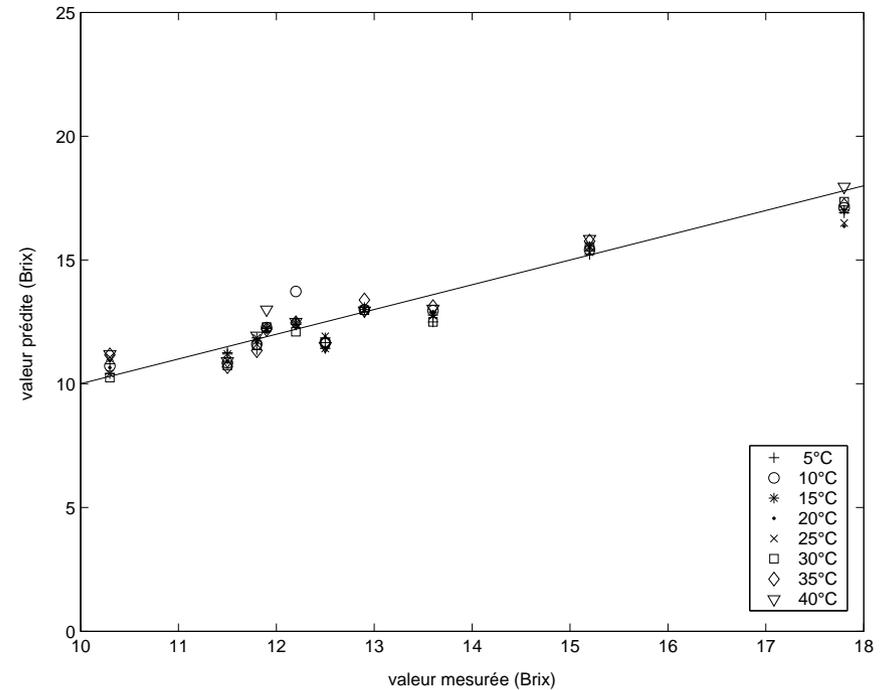
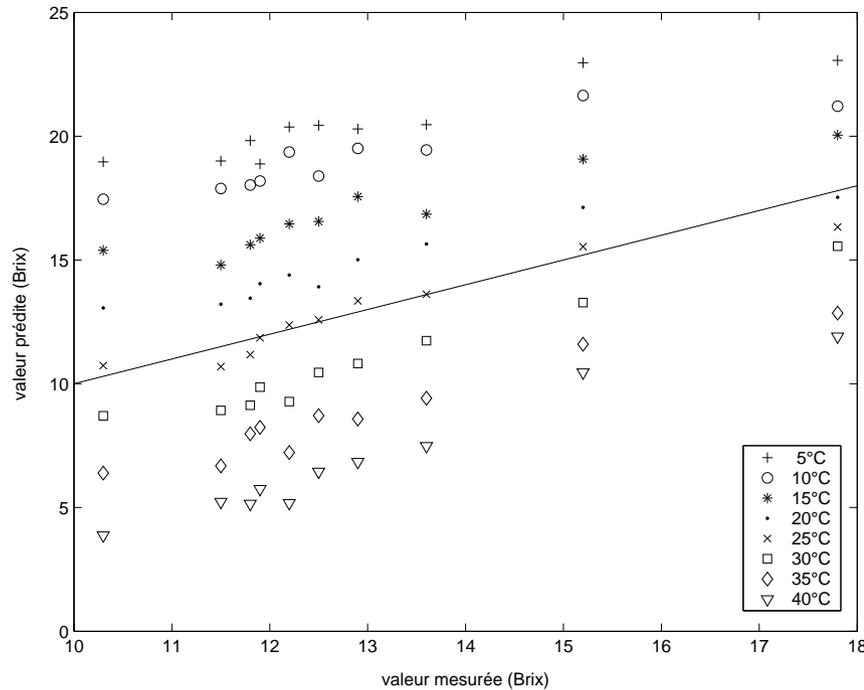
$$G = g^k$$

$$\mathbf{X}^k$$

$$\mathbf{m}_k^T$$

$$\underbrace{\mathbf{m}_k^T - \mathbf{m}_1^T}_{\mathbf{X}^-}$$

EPO : Améliorer la robustesse



Application à l'effet de la température des pommes sur la
prédiction de leur taux de sucre.

DOP : Maintenir la robustesse

- Si on veut recalibrer un modèle soumis à une ou plusieurs grandeurs d'influence
- Pendant l'utilisation de la mesure, en ligne
- DOP : Dynamic Orthogonal Projection identifie X^- à partir de quelques valeurs de recalage.

DOP : Maintenir la robustesse

- Hypothèse :

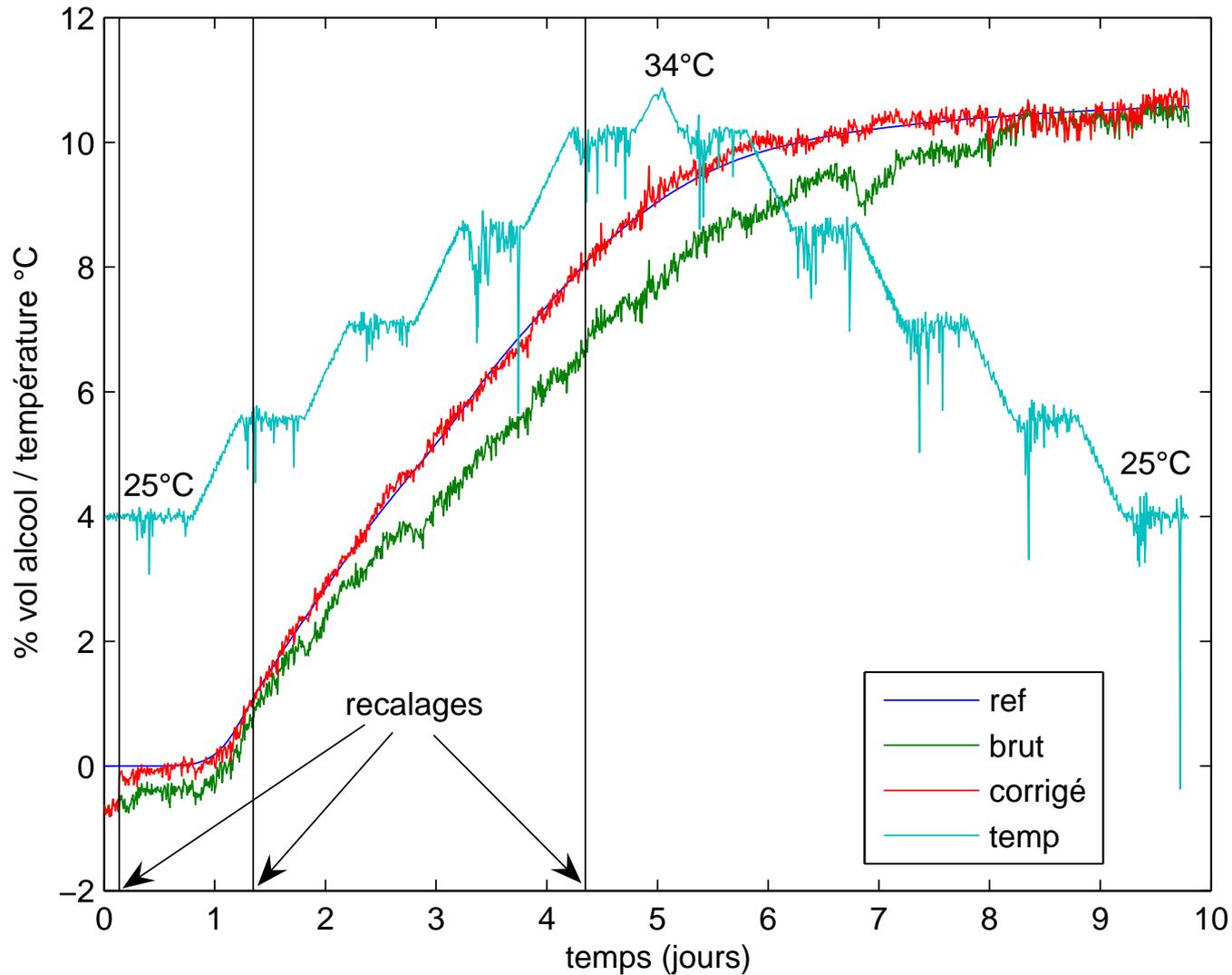
- On dispose d'une base d'étalonnage $(\mathbf{X}_0, \mathbf{y}_0)$
- On dispose de k valeurs “vraies” de Y : (y_1, \dots, y_k)
- Soient $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ les k spectres correspondants, acquis en ligne.

DOP : Maintenir la robustesse

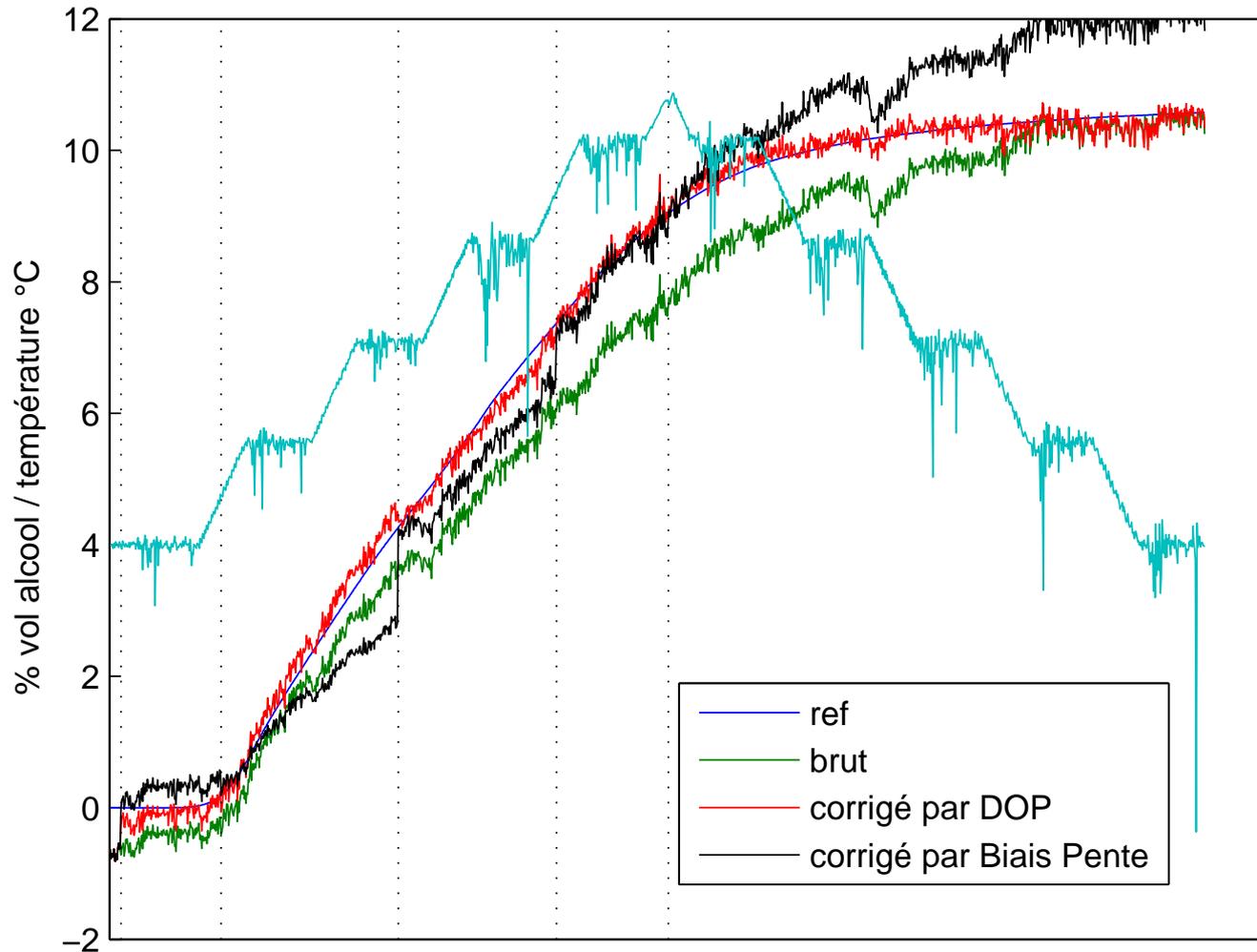
- Principe :
 - Pour chaque i de 1 à k , on estime y_i par une combinaison linéaire de y_0
 - On applique cette combinaison sur \mathbf{X}_0 , pour estimer le spectre $\tilde{\mathbf{x}}_i$ que l'on aurait dû avoir
 - \mathbf{X}^- est donné par :

$$\mathbf{X}^- = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T & - & \tilde{\mathbf{x}}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T & - & \tilde{\mathbf{x}}_2^T \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{x}_k^T & - & \tilde{\mathbf{x}}_k^T \end{bmatrix}$$

DOP : Suivi de vinification anisotherme



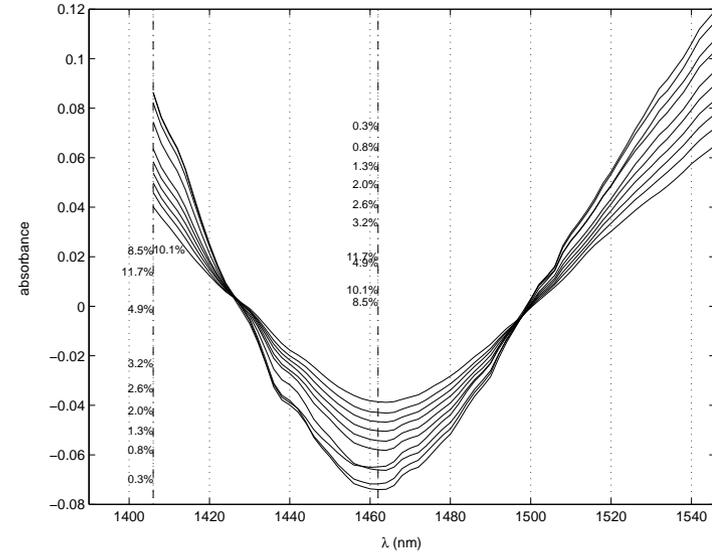
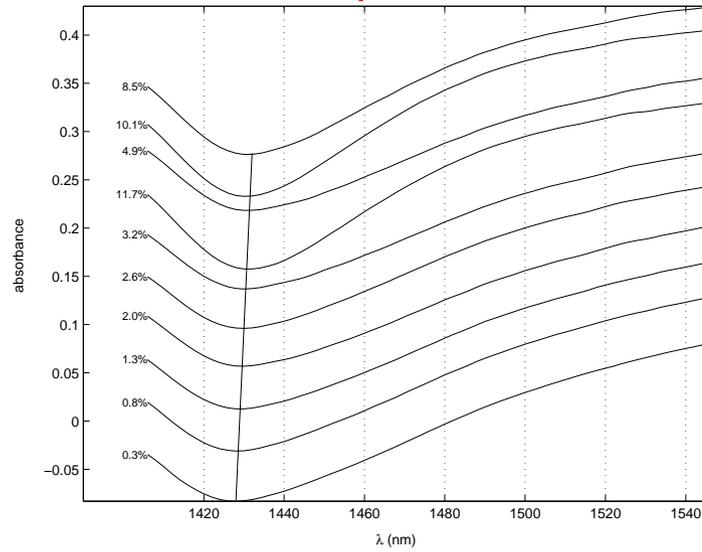
DOP : Suivi de vinification anisotherme



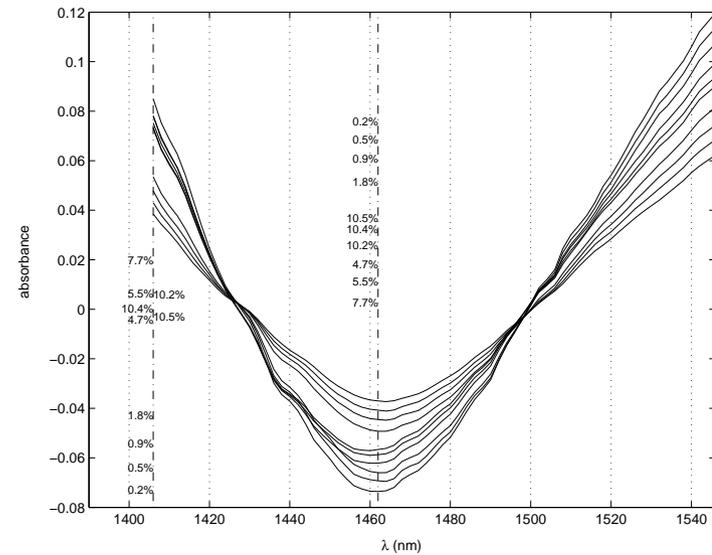
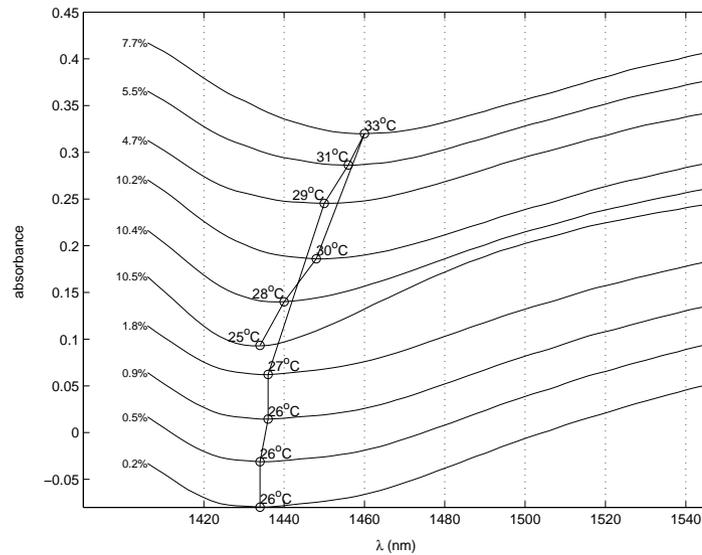
DOP : Suivi de vinification anisotherme

DOP

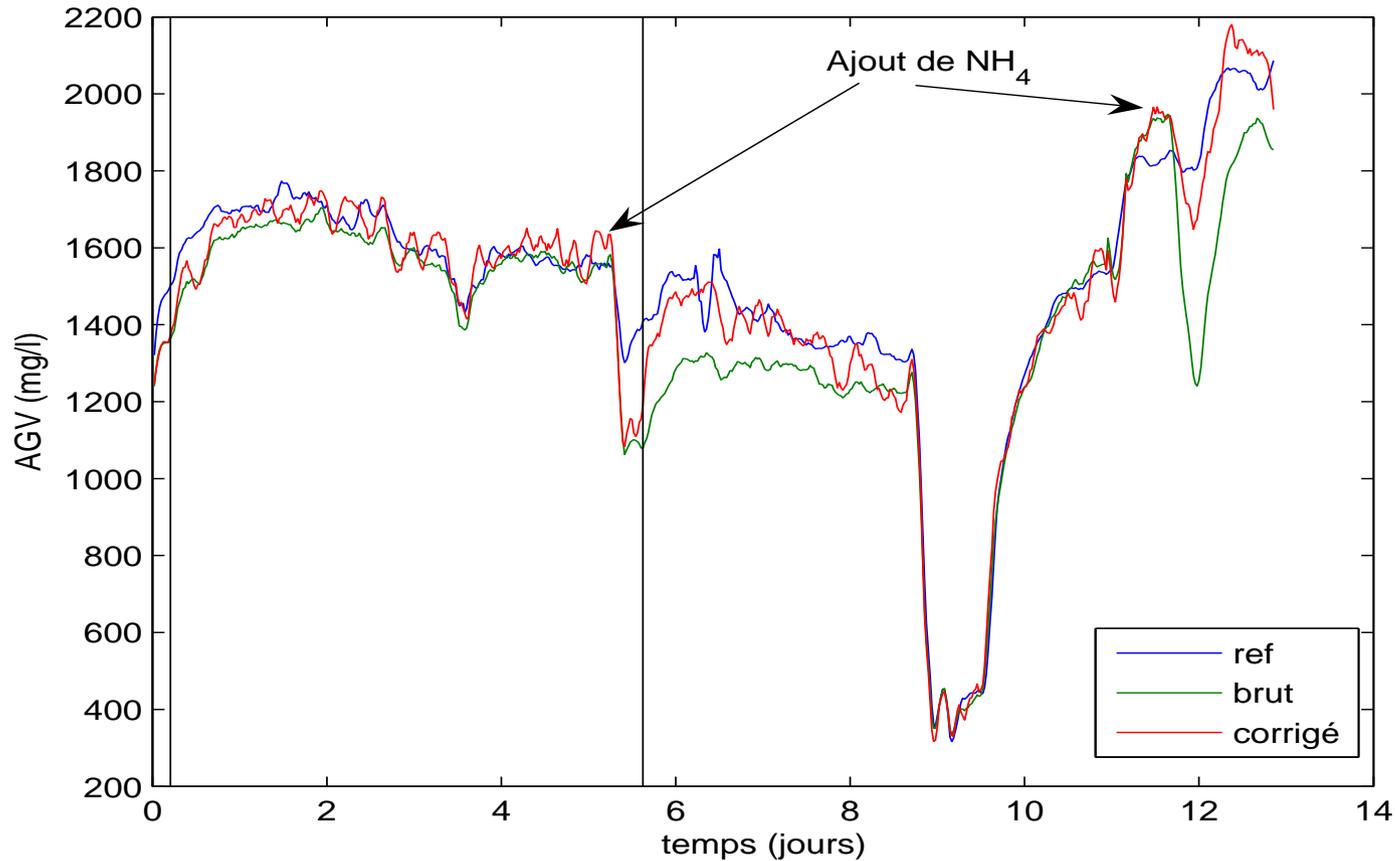
ISOTHERME



ANISOTHERME



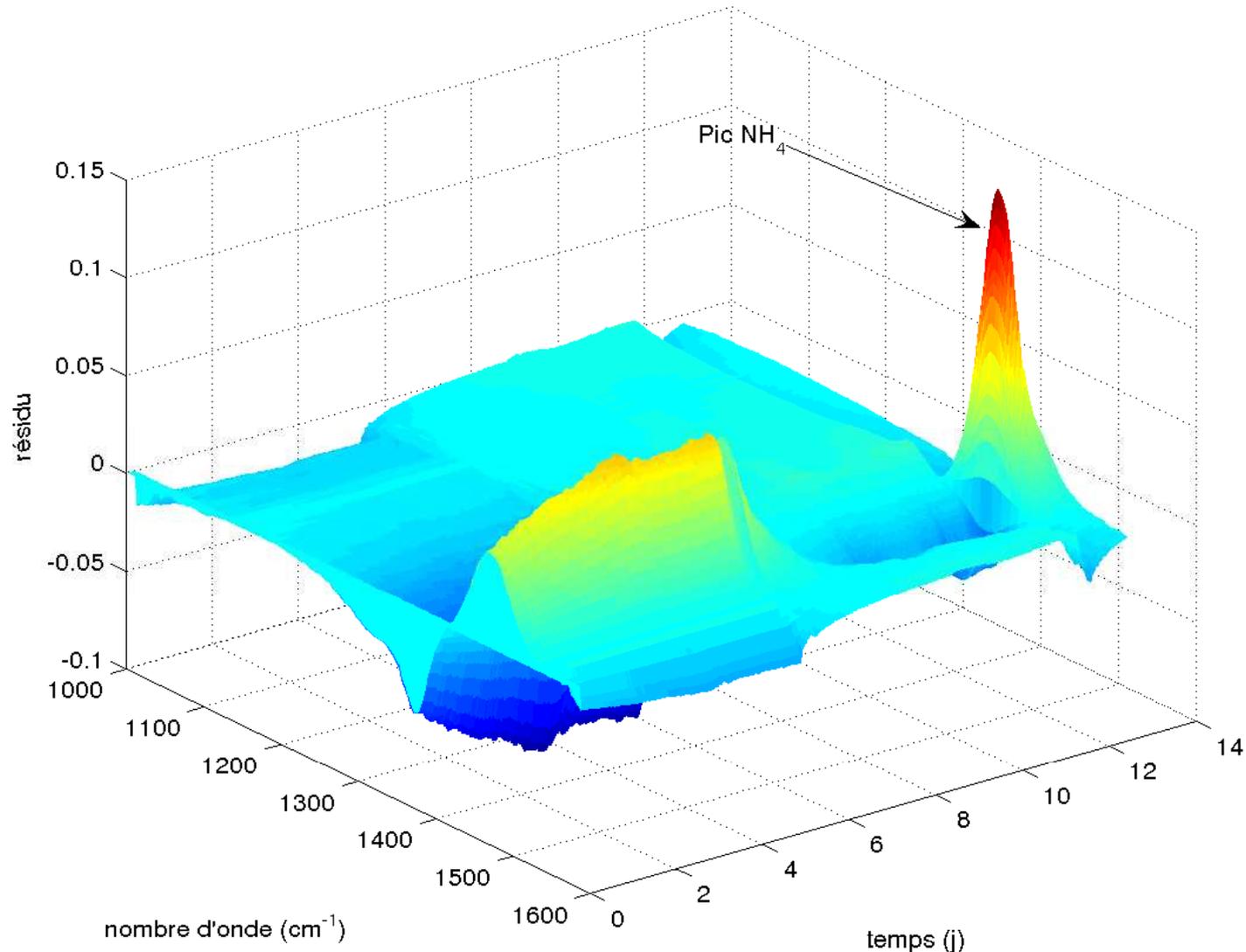
DOP : Suivi de fermentation anaérobie



Dépollution de vinasses - LBE - INRA Narbonne

DOP : Suivi de fermentation anaérobie

Résidus enlevés par la projection



Orthogonalisation explicite / Conclusion

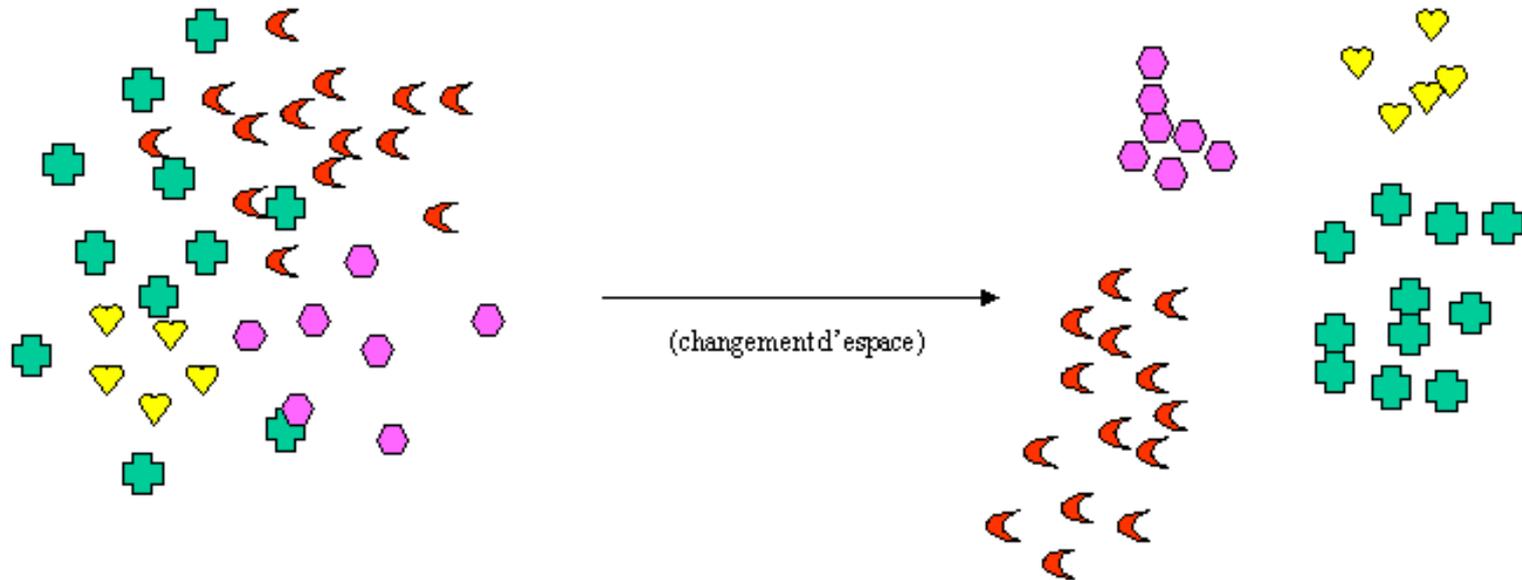
- Avantages de l'orthogonalisation :
 - Le modèle devient indépendant de δx
 - Le modèle fonctionne encore en l'absence de perturbation
 - La correction est “embarquée” dans le modèle
 - Plusieurs influences peuvent être corrigées simultanément
 - La partie corrigée (X^-) est riche d'informations
 - On peut “traiter” des bases d'étalonnage existantes
- Défauts de l'orthogonalisation :
 - Suppose un certain degré d'indépendance entre les effets de G et de Y
 - L'identification de X^- peut être délicate

Plan

- Introduction
- Nettoyage de l'espace de mesure
- Discrimination à partir des spectres
 - Présentation du problème
 - Fonctions Propres Focales
 - Discrimination de cépages
- Conclusion

Le problème

- Sachant que les individus de X sont organisés en c groupes (classes), trouver le sous espace Z de \mathbb{R}^p qui maximise la séparation de ces classes



Le problème

- La méthode classique est l'Analyse Discriminante, où une base de Z est donnée par les vecteurs propres de :

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{B}$$

- C'est à dire qui maximisent le rapport de la variance inter-classes (\mathbf{B}) à la variance totale (\mathbf{T}).

Le problème

- La méthode classique est l'Analyse Discriminante, où une base de Z est donnée par les vecteurs propres de :

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{B}$$

- C'est à dire qui maximisent le rapport de la variance inter-classes (\mathbf{B}) à la variance totale (\mathbf{T}).

Le problème, avec des données telles que les spectres,
c'est que \mathbf{T}^{-1} n'existe pas

Des solutions

- Réduire le nombre de dimensions de X , par une ACP ou une PLS, puis appliquer une Analyse Discriminante
 - Cela conduit à la PCA-DA ou la PLS-DA
- Une autre voie consiste à construire directement des vecteurs discriminants (une base de Z) à partir des spectres.

Des solutions

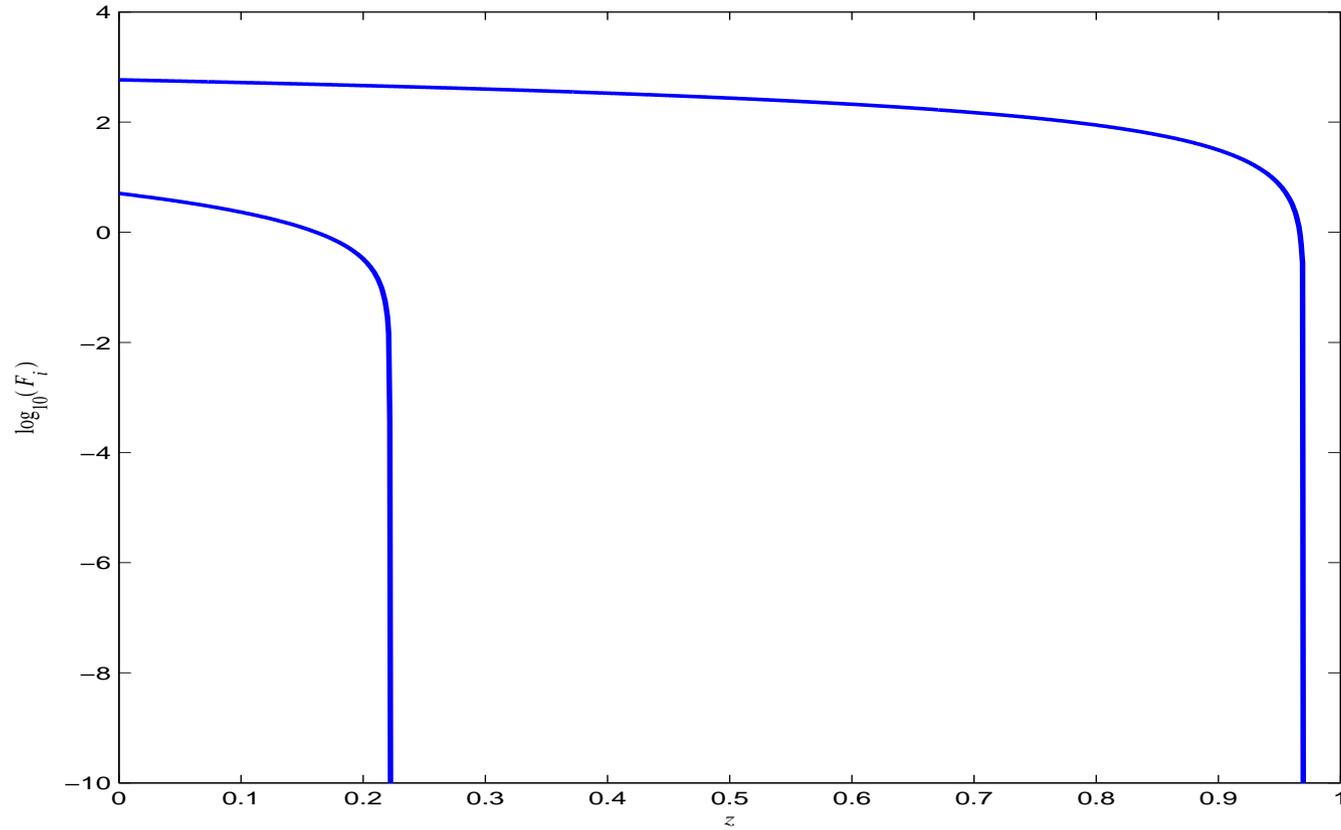
- Réduire le nombre de dimensions de X , par une ACP ou une PLS, puis appliquer une Analyse Discriminante
 - Cela conduit à la PCA-DA ou la PLS-DA
- Une autre voie consiste à construire directement des vecteurs discriminants (une base de Z) à partir des spectres.

C'est l'idée suivie dans la discrimination par Fonctions Propres Focales (FEF-DA)

Fonctions Propres Focales :

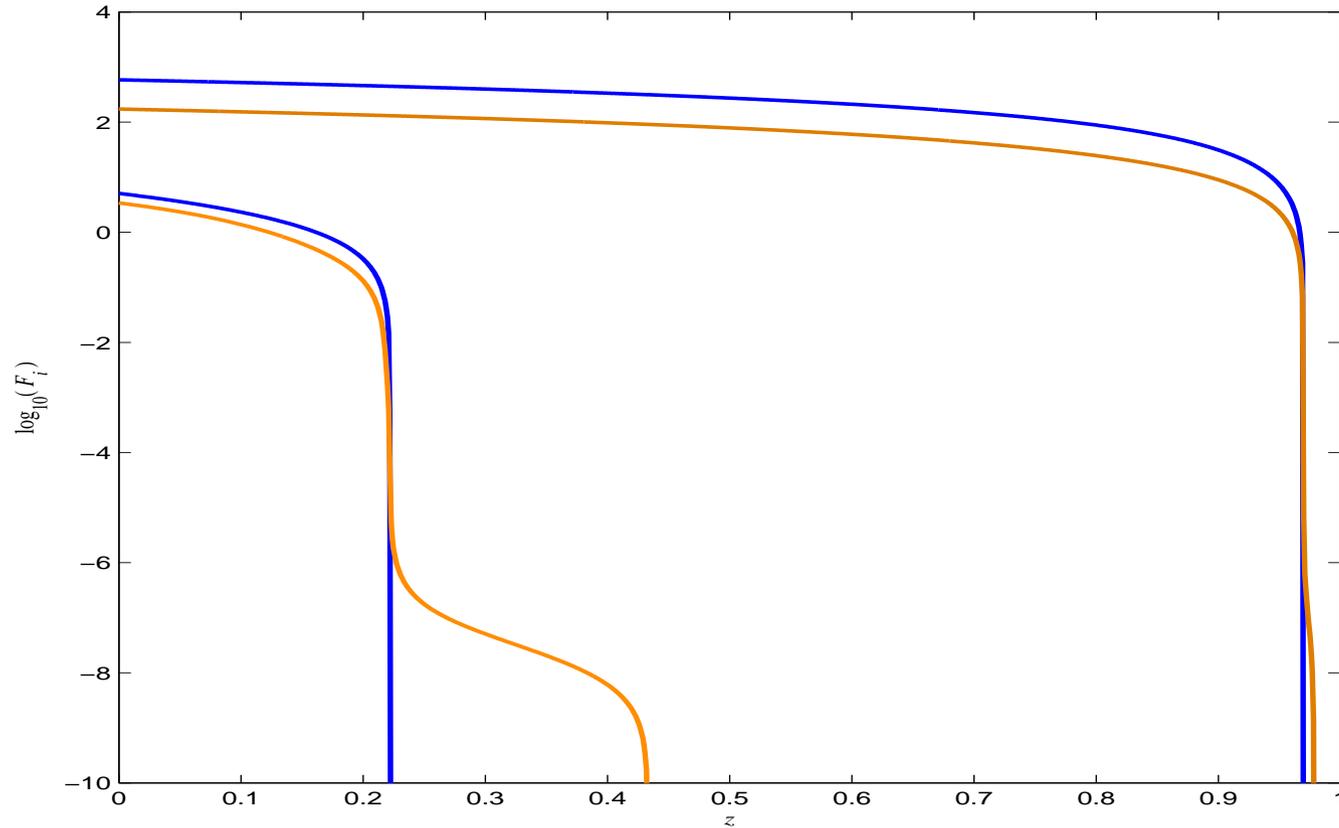
Valeurs propres positives de $B - zT$, avec $z \in [0, 1]$

Fonctions Propres Focales



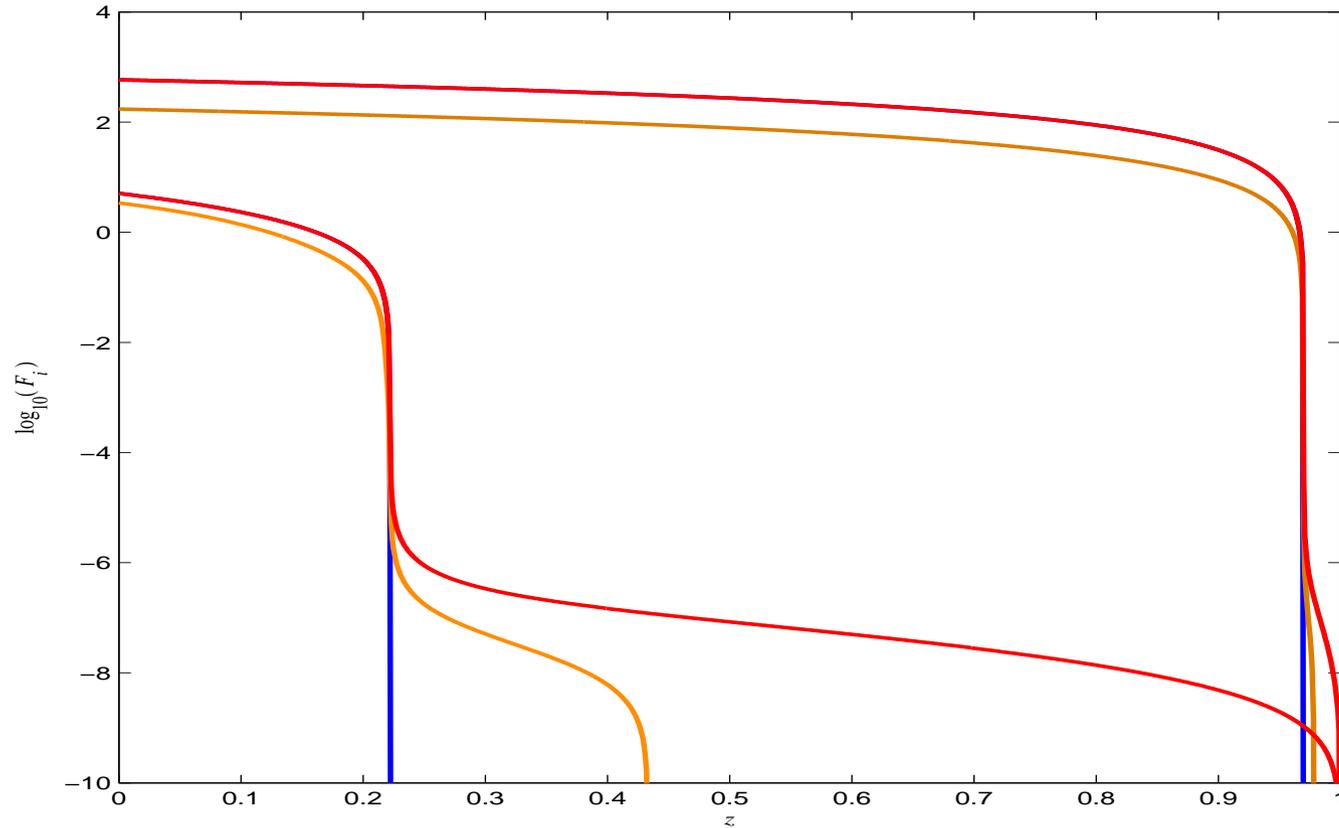
Iris de Fisher

Fonctions Propres Focales



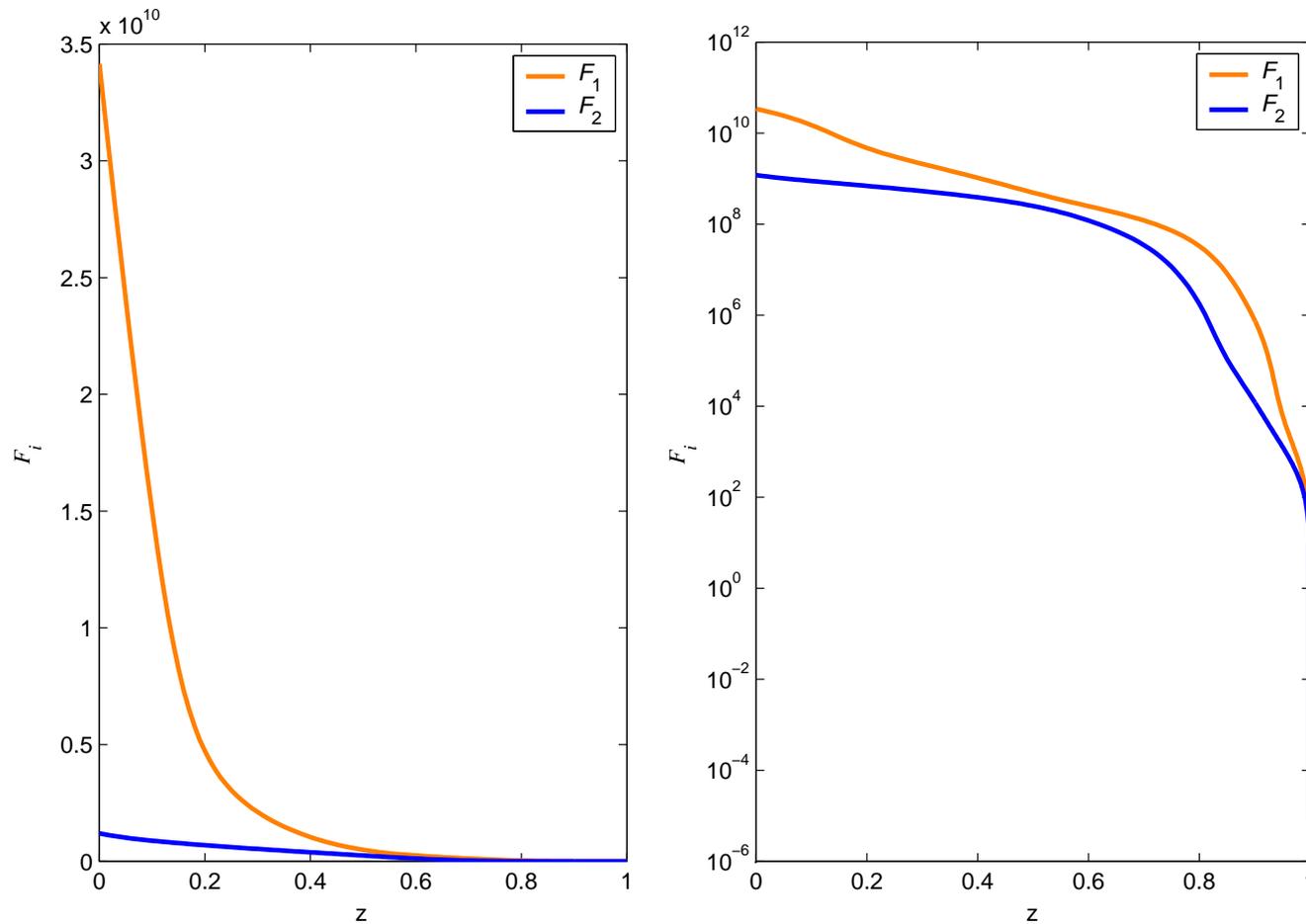
Iris de Fisher mal conditionnés

Fonctions Propres Focales



Iris de Fisher mal dimensionnés

FEF-DA : exemple d'application

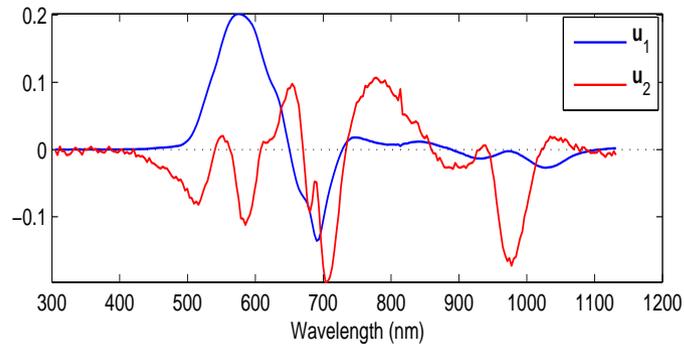
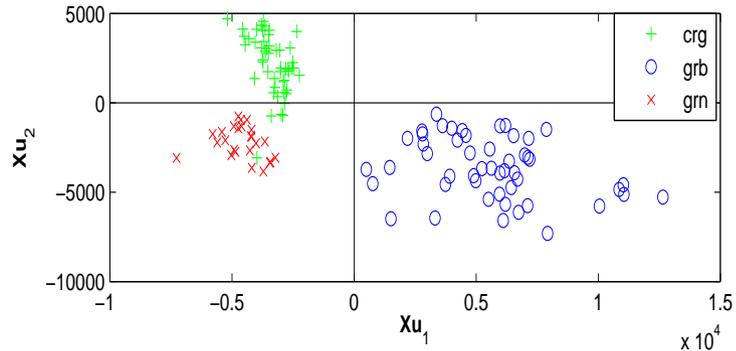


Discrimination de trois cépages à partir des spectres VIS/NIR

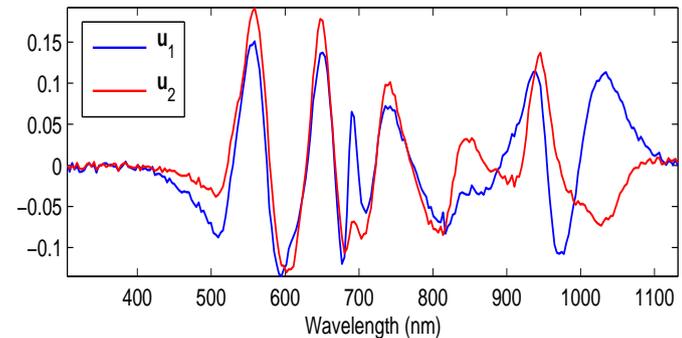
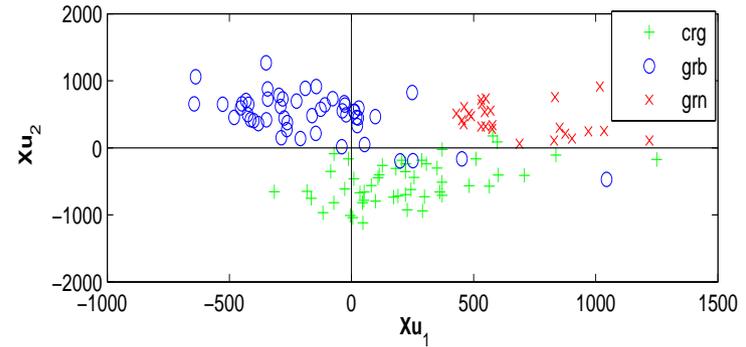
Fonctions Propres Focales

- On montre que les Fonctions Propres Focales sont :
 - Dérivables et décroissantes
 - Positives sur $[0, 1[$ et nulles en 1 dans le cas mal dimensionné
 - À courbure positive
- On montre également que les vecteurs propres $u_i(z)$ associés ont un pouvoir discriminant croissant.
- Ces propriétés permettent de réaliser des algorithmes de parcours, avec apprentissage croissant et critère d'arrêt (comme une erreur de validation croisée).

FEF-DA : exemple d'application



FEF-DA



PLS-DA

Discrimination de trois cépages à partir des spectres VIS/NIR

Discrimination / Conclusion

- La discrimination à partir des spectres utile pour :
 - détection d'outliers
 - diagnostic
 - prédiction de grandeurs symboliques
- Sujet moins étudié que la régression
- Des marges de progrès existent
- FEF-DA est un premier essai ... à concrétiser

Conclusion générale

- Mes recherches ont été guidées par un problème pratique :
Rendre fonctionnels les capteurs à base de spectro NIR
- Une stratégie très pragmatique a permis de gérer les grandeurs d'influence
- L'orthogonalisation a permis d'améliorer sensiblement la robustesse
 - Vis à vis de grandeurs d'influences spécifiques
 - Mais aussi en présence d'influences inconnues
- En matière de discrimination, une méthode originale a été développée
 - Ses performances sont bonnes
 - Elle ouvre de nombreuses possibilités

Perspectives

- Application de l'orthogonalisation à d'autres problèmes
- Autres algorithmes de discrimination
- Prise en compte des connaissances *a priori*
- Application au traitement d'images hyperspectrales