

Quelques spots sur ICNIRS  
Auckland Nouvelle Zélande  
11-14 avril 2005

Véronique Bellon Maurel

...et...

Pierre Dardenne (CRAGx)

# Un congrès peuplé malgré l'éloignement

- Le congrès ICNIR2005 a réuni 250 personnes.
- La délégation française était composée du CIRAD (Davrieux, Bastianelli), de l'ENS de Chimie de Mulhouse (3 personnes), l'ESA de Purpan (1 personne), de constructeurs (Getspec)
- 
- Ce congrès était consacré à « NIR in action », avec environ 100 présentations orales et 160 posters.

# Points notables (1/4)

- Difficulté de transférer les étalonnages sur des appareils à barrette de diodes. Grand retour de la spectro (N)IR-TF.
- Imagerie (traitement)
  - 2 présentations sur le traitement d'image « classique », pixel à pixel (Dardenne, avec PLS et Bosoon Park) et
  - 2 présentations sur le traitement «spectral/ spatial » Marc Kirchner (étudiant en première année de thèse au TU) et moi.

# Points notables (2/4)

## Recherches sur l'équipement

- Imagerie: Robert Burling-Claridge qui fait de l'imagerie hyperspectrale avec un spectro : soit il déplace le spectro sur la zone qui doit être inspectée, soit il code le signal à l'aide d'une matrice d'Hadamard qu'il réalise de manière mécanique : ça coûte bcp moins cher et ça évite toutes les problèmes d'hétérogénéité des pixels !!
- Autres nouveautés
  - MEMS :
  - NIRES (Pasquini), mais quid des produits biologiques : intéressant sur les sols ??

# Points notables (3/4)

## L'offre en instrumentation

- A noter: la montée en puissance de Büchi. Bruker fait maintenant bien partie du monde NIR (FT NIR).
- Les appareils (de labo) se ressemblent tous : ils ont tous un système de mesure en transmission, en réflexion, et une fibre optique. La spectro FT NIR prend de l'importance.
- Appareils portables nombreux et chers:
  - Zeiss (Diode Array -Corona), a noter : bientôt un système à caméra CCD qui permettra du multivoie
  - Analytical Spectral Devices (rotating grating + Si + InGaAs detector-spectro 2 voies -40 000 US\$), peut également faire de la radiométrie.
  - Brimrose (AOTF -25 000 US\$).
  - KES Analysis (DA avec un amplificateur à chaque diode – KES est la société de Ed Stark et Karen Lucher).

# Points notables (4/4)

## Les applications nouvelles

- Développement des travaux sur les sols.
- Un travail sur détection de mycotoxines
- Enfin, il y a un glissement de la spectro vers la télédétection : 2 ou 3 présentation de keynotes speakers (supposés donner les directions du futur), sur l'intérêt d'appliquer maintenant la spectro dans des espaces géoréférencés.

# 12th International Conference on Near Infrared Spectroscopy



10 - 15 April 2005  
Sky City Auckland, New Zealand

P.Dardenne

## VISION OF THE FUTURE

# **The future is in...**

**\* PAT, Process Analytical Technology**

**\* Instruments**

**Ed Stark & W. Barton**

**\* Chemometrics**

**\* Applications**

**Peter Flinn**



## **Instruments:**

**Ed Stark & W. Barton**

- \* **Time Resolved Spectroscopy**, *Véronique Bellon-Maurel*
- \* **Surface Plasmon Resonance NIRS**, *Akifumi Ikehata*
- \* **Infrared Micro-spectrometers based on MEMS**,  
*Adrian Keating*
- \* **Hadamard Coding with mechanical shutters**,  
*Robert Burling-Claridge*
- \* **Near Infrared Emission Spectroscopy (NIREs)**,  
*Celio Pasquini*

# Chemometrics

## - **LWR**

*Isaksson et al.*

Locally **W**eighted **R**egression

## - **Simulated Annealing**

*Brenchley et al.*

## - **Wavelets**

*Alsberg et al.*

## - **Genetic Algorithm**

*Jouan-Rimbaud et al.*

## - **UVE-PLS**

*Centner et al.*

**U**ninformative **V**ariable **S**election

## - **IVS-PLS**

*Lindgren et al.*

**I**nteractive **V**ariable **S**election

## - **Unscrambler 7.05**

*Martens H.*

**variable significance testing - Jackknife**

- **ILS - PLS**

*Frank I. et al.*

Intermediate **L**east **S**quares

- **ISE - PLS**

*Boggia R. et al.*

Iterative **S**tepwise **E**limination

- **AVS-PLS**

*Forina et al.*

Automatic **V**ariable **S**election

- **IPW-PLS**

*Forina et al.*

Iterative **P**redictor **W**eighting

- ....

# **Chemometrics**

## **MWPLSR**

**Moving Window PLSR, *Yukihiro Ozaki***

# Chemometrics

**New method for Multivariate Calibration, *Ralf Marbach***

**Excellent method**

**Condition: known vector  $g$  (pure analyte)**

**What is  $g$  for meat tenderness or forage OMD?**

# **Chemometrics**

**The big gap between published algorithms  
and what the manufacturers can propose**

## **Quantification**

**MLR (Norris MLR: ratio of derivatives)**

**PLS**

**ANN or SVM**

## **Classification**

**PLS2**

**ANN or SVM,**

**SIMCA, kNN,**

# Chemometrics

## **Low-Cost Approaches to Robust Temperature Compensation in NIR Calibration,**

*Vegard Setgnan*

**Temperature,  
Particle Size,  
Instrument,**

....

....

**Repeatability file, WinISI, *Mark Westerhaus***

*Published in 1991,*

# Chemometrics

**Supervised Classification Algorithms for  
poultry hyperspectral image analysis, *Park. B et  
al.***



# Chemometrics

## Calibration Strategies For Prediction of amino acid Content of poultry feed. *Denis Bastianelli*

### **INTERNAL CORRELATION:**

**Amino acids & total protein**

**Fatty acid & total fat**

**Oses & total sugars**

**Minerals & total ash**

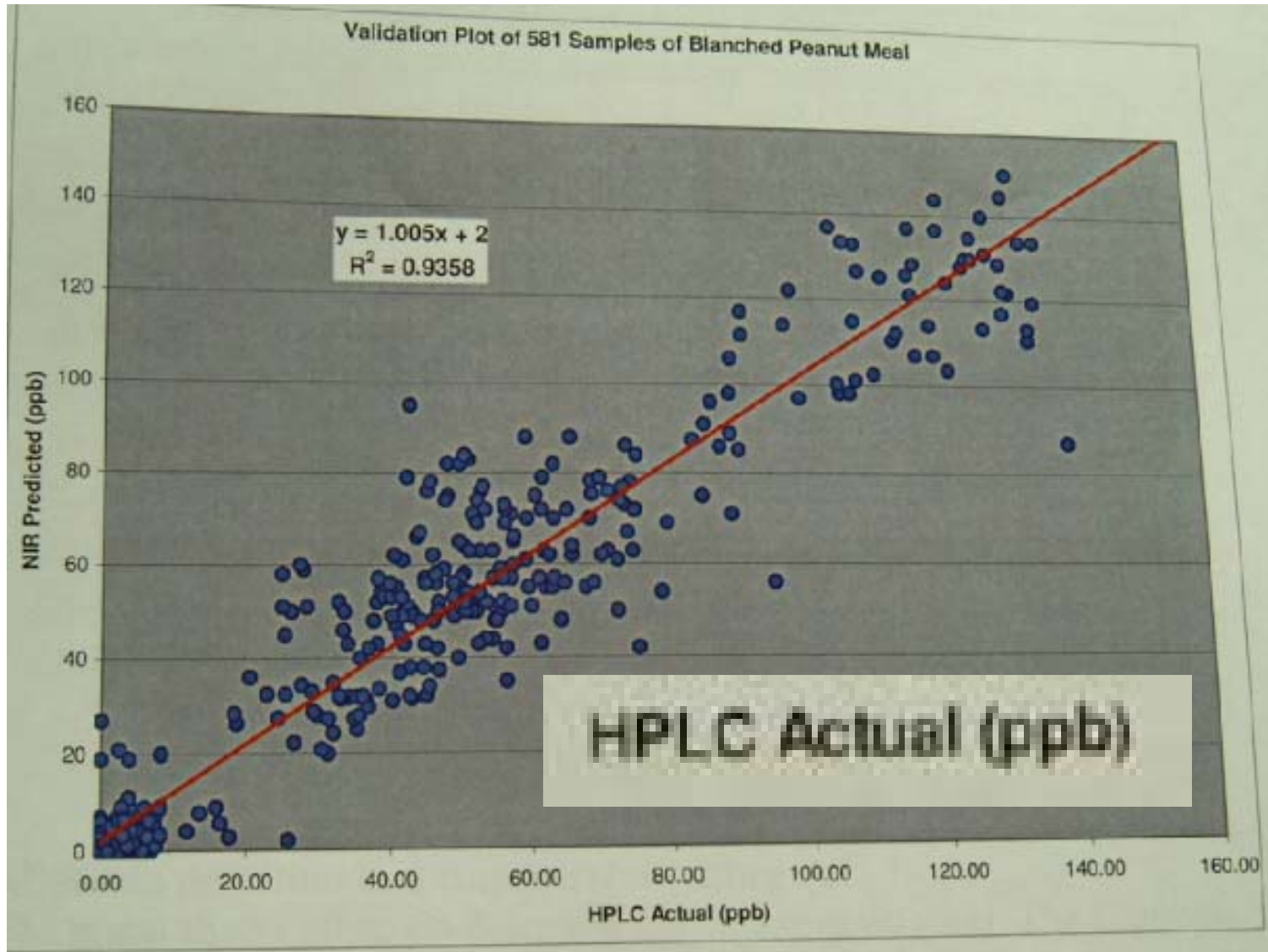
## **INTERNAL CORRELATION:**

**Look at Y correlation matrix (biplots, PCA)  
before calibrating**

**Look at predicted Y predicted  
after calibration**

# Rapid and Non-destructive Mycotoxin Assay with NIRS,

*Russel Wilkie*



# Chemometrics

## **Multiway Analysis using Near Infrared Spectra,**

*P. Geladi*

**Interpretation of multispectral  
or hyperspectral images**

# Applications & Instrumentations

NIR imaging :

**More applications**

**→ on-line**

**Fast computing**

**Complex algorithms, →  
longer training**

**Cheaper!!!**

**InGaAs array**



# **Applications & Instrumentations**

**Many papers on portable instruments:**

- identification in pharma**
- fruits**

# Applications & Instrumentations

To protect our environment :

**Pesticide: 1**

**Contaminated soils : 2**

**Soils : 1 1 1 1 1 1**

**Compost: 1 1 1**

**Manures : 1 1**

**Biofuels: 1 1 1 1**

**Mycotoxines: 1**

**19 C or P**

# Applications & Instrumentations

Low cost spectrometer – farm level





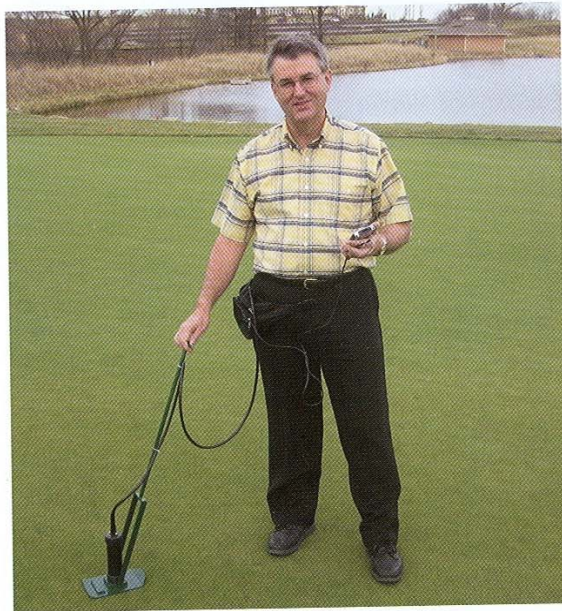


Courtesy of Dr John Schenk

Are you tired of wasting valuable time and money shipping turfgrass samples to a lab for analysis and then having to wait for results?

What if you were able to get the results you needed **FAST** – in the time it took you to walk across your golf course green.

It's possible with **Mobile Turf**, the newest turfgrass analyzer in the industry. On the cutting edge of technology, **Mobile Turf** allows the golf course superintendent or sports turf manager to **measure the essential nutrients in turfgrass (N, P, K, Ca, Mg, and micronutrients) plus moisture**, quickly and easily.



# Mobile TURF

## HOW IT WORKS:

**Mobile Turf** is a portable, lightweight instrument that uses the visible and near-infrared (NIR) spectrum of light to analyze the turfgrass it contacts.

The operator simply pulls the instrument over the turf that he wishes to analyze and the results are **INSTANTLY** recorded in the hand-held PDA.

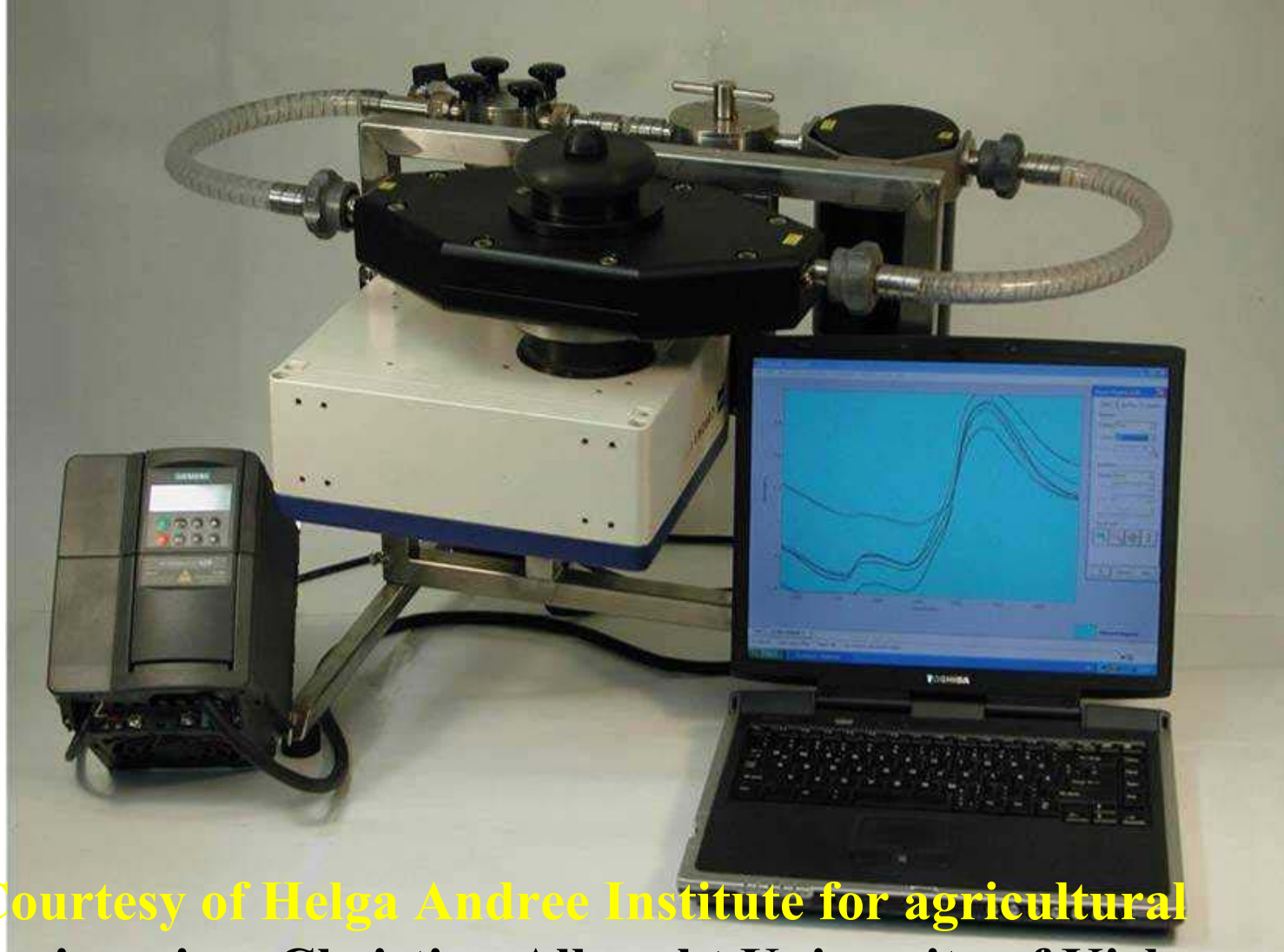
## ADVANTAGES:

Because of all the capabilities of **Mobile Turf**, the advantages are numerous.

- **Fast results**/No waiting  
Results when you need them.
- **More accurate results** because it actually measures the nutrients in the **living plant**.
- **More convenient**  
Allows you to take measurements in the field. Measure specific areas or average results across an area.
- **Portable/Hand-Held/Lightweight**  
Weights less than 5 lbs.
- **Easy to Use and Operate**  
No complicated system to learn.
- **Allows you to fine tune your fertility management**  
Eliminates guesswork and the possibility of over or under-fertilizing.
- **Helps with irrigation water management** because it measures the moisture content of the turfgrass.
- **Reduces pesticide costs** because healthy turf is less susceptible to disease.
- Finally **Mobile Turf gives you peace of mind, confidence, and assurance** that you are growing quality turf, tournament turf.
- Best of all, **Mobile Turf is affordable** and will quickly pay for itself.

# Applications & Instrumentations

## Sampling device for Liquid Manure, *Peter Tillman*



Courtesy of Helga Andree Institute for agricultural engineering, Christian Albrecht University of Kiel

# Manure analyser



Courtesy of Dr John Schenk



Courtesy Dr John Schenk

# **Applications & Instrumentations**

**A novel Approach to On-Line Monitor Milk  
Composition During Milking,**

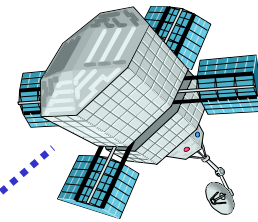
*Roberto Giangiacomo*

**Calibration of On-line Milk Spectra Using ANN,**

*Kyle Spitzer*



**NIR  
Spectrometer**



**GPS**

**Precision agriculture**



# Precision agriculture

**In-Line NIR Measurement to determine the forage quality on a forage harvester,**

*Piet Reyns*

**1 site : 10000 plots**

**Oven drying**

**DM SEP= 1.3 %**

**+ Protein, Starch, OMD, ...**







*Next: Feb 2007  
FAL, Germany  
Christian Paul*

## **2nd International Conference on "Embedded Near Infrared Spectroscopy"**

CRAW - Gembloux – Belgium 18th and 19th November



LAKE TEKAPO, New Zealand, 2 April 2005

