## Repousser les limites de la spectroscopie grâce à la chimiométrie

Sylvie ROUSSEL, AGROMETRIX

La S.A.R.L. AGROMETRIX a été fondée en avril 2003 par Sylvie ROUSSEL. Cette société de services en analyse de données (chimiométrie) est issue du transfert de technologie et de savoir-faire du Cemagref et de l'Iowa State University (USA). Ce projet a été soutenu par le Languedoc-Roussillon Incubation (financements Région Languedoc-Roussillon et MNRT), Montpellier Méditerranée Technopole grâce à un accompagnement du CEEI Cap Alpha, et l'ANVAR. Ses locaux sont situés au Cemagref de Montpellier, sur le campus AGROPOLIS, afin de bénéficier pleinement de la dynamique de collaboration avec des partenaires de recherche scientifique et des équipements présents sur le campus.

AGROMETRIX s'adresse aux industriels désirant contrôler leurs produits et procédés de façon précise, robuste et à moindre coût ainsi qu'aux équipementiers voulant optimiser le traitement des données issues de leurs capteurs.

## Notre Mission : aider les industriels à extraire toute la valeur de leurs mesures

La valorisation des mesures instrumentales effectuées sur les produits et procédés industriels permet de les améliorer et de faciliter leur traçabilité, tout en maximisant la compétitivité de l'entreprise. Pour satisfaire ces besoins, AGROMETRIX développe des techniques avancées d'analyse de données (chimiométrie) et d'intelligence artificielle issues directement de la recherche internationale.



## Notre Métier : développer des solutions à façon pour l'analyse de mesures spectrales

Le métier d'AGROMETRIX est de développer des solutions à façon pour exploiter des mesures instrumentales, en particulier issues de spectromètres, effectuées sur des produits industriels. Ces solutions s'articulent autour de

- services en analyse de données spectrales, en vue de caractériser de façon précise et robuste des produits industriels, et de pouvoir transférer ces modèles entre spectromètres;
- data-mining, pour l'exploitation de larges banques de données ;
- sessions de formation en chimiométrie, afin de d'augmenter et de pérenniser les compétences en analyse de données au sein de chaque entreprise.

L'application de traitements de données avancés aux mesures spectrométriques permet d'aller plus loin dans la caractérisation des produits, grâce à l'amélioration de la précision et la stabilité de ces mesures.

Chaque problématique nécessite un analyse adaptée, faisant appel à des pré-traitements précis (par exemple: sélection de variables par algorithmes génétiques<sup>1</sup>) et à des modèles appropriés. Dans le cas de large bases de données, des méthodes locales permettent d'intégrer la variabilité des divers échantillons en tenant compte de leur voisinage (Exemple de la discrimination de soja OGM par spectroscopie proche infrarouge<sup>2,3</sup>). La résolution de problèmes non linéaires peut faire appel à des techniques liées au domaine de l'intelligence artificielle (Exemple de la caractérisation des céréales américaines par réseaux de neurones<sup>4</sup>). Enfin, pour améliorer la caractérisation des produits, l'information issue de plusieurs capteurs peut être combinée grâce à des méthodes de fusion multi-capteur (Exemple de la fusion Bayésienne de données issues de nez électronique, et de spectromètres infrarouge et UV pour la discrimination de cépages<sup>5</sup>).

- 1. Roussel, S., 1998. Optimisation des capteurs d'arômes et fusion multisensorielle appliquée à la caractérisation des produits agro-alimentaires. Thèse en Sciences Pour l'Ingénieur de l'Ecole Nationale Supérieure Agronomique de Montpellier -Cemagref Montpellier, 166p.
- 2. Roussel S, Hardy CL, Rippke GR, Hurburgh CR Jr., 2001. Detection of Roundup Ready™ Soybeans by Near-Infrared Spectroscopy. Appl. Spec., vol. 55 (10), 1425-1430.
- 3. Roussel S, Cogdill, RP, 2003. Chapitre d'ouvrage: "Near-Infrared Spectroscopic Methods", In Genetically Modified Organism Detection In Food, Ahmed FE (Ed.). A paraître en 2003.
- 4. Roussel S, Rippke GR, Hurburgh CR Jr., 2000. Accuracy and Transferability Comparison of Various Multivariate Processing Algorithms for Corn Quality Assessment, 10th International Diffuse Reflectance Conference, Chambersburg, PA, 14-18 août 2000.
- 5. Roussel S, Roger JM, Bellon-Maurel V, Grenier P, 2003. Fusion of Aroma, FT-IR and UV Sensor Data Based on the Bayesian Inference. Application to the Discrimination of White Grape Varieties, 2003. Chemom. Intell. Lab. Syst., vol. 65 (2), pp 209 – 219.