

Une fois les données spectrales collectées, une ACP a été appliquée afin de discriminer les différentes zones du tubercule. Ensuite, des modèles prédictifs ont été développés pour évaluer les performances de quantification de MS, polyphénols et sucres sur des tranches d'igname frais. Les résultats obtenus ont montré une différence significative entre les zones proximale, centrale et distale mais pas de différence significative entre les tanches radiales.

Références

Graham-Acquaah, S., Ayernor, G.S., Bediako-Amoa, B., Saalia, F.K., and Afoakwa, E.O. (2014). Spatial distribution of total phenolic content, enzymatic activities and browning in white yam (*Dioscorea rotundata*) tubers. *J. Food Sci. Technol.* 51, 2833–2838.

Assembler la diversité des modèles classiques et « deep learning » pour développer un pipeline de calibration SPIR performant et générique.

Cornet D.¹, Desfontaines L.², Cormier F.¹, Marie-Magdeleine C.³, Arnau G.¹, Meghar K.⁴, Davrieux F.⁴, Beurier G.¹

1. CIRAD, UMR AGAP, F- 34398 Montpellier, France
2. INRA, UR 1321 ASTRO, Centre de recherche Antilles-Guyane, Petit-Bourg, France.
3. URZ Recherches Zootechniques, INRA, 97170 Petit-Bourg (Guadeloupe), France.
4. CIRAD, UMR Qualisud, Montpellier, France

La calibration d'un nouveau modèle de prédiction basé sur des spectres proche infrarouge, requiert une bonne dose de savoir expert et beaucoup de patience. En effet la grande diversité de prétraitements des spectres et des modèles de calibration offre un nombre très élevé de combinaisons à tester. Et même si le savoir expert peut aider à orienter les choix de combinaisons, l'identification du meilleur modèle reste très empirique et repose sur la comparaison d'un grand nombre de tentative.

Traditionnellement, la construction des modèles et leur comparaison est réalisée manuellement par des experts. Cependant, la démocratisation des spectromètres et leur vulgarisation amène un nombre grandissant d'utilisateurs provenant de disciplines souvent éloignée de la chimie (e.g. améliorateur, agronome). Leur objectif n'est pas toujours d'identifier le meilleur modèle mais bien de construire, sans savoir expert et avec un minimum d'investissement en temps, un modèle prédictif remplissant une

exigence de performance connue préalablement. Dans ce contexte particulier, et afin de tirer le meilleur parti des avancées récentes en science des données et en capacités de calcul, cette communication présente les arguments théoriques et méthodologiques justifiant la construction d'un pipeline de calibration performant mais surtout suffisamment générique pour s'appliquer à une grande diversité d'analytes, de spectromètres, de taille de jeux de données et de produits.

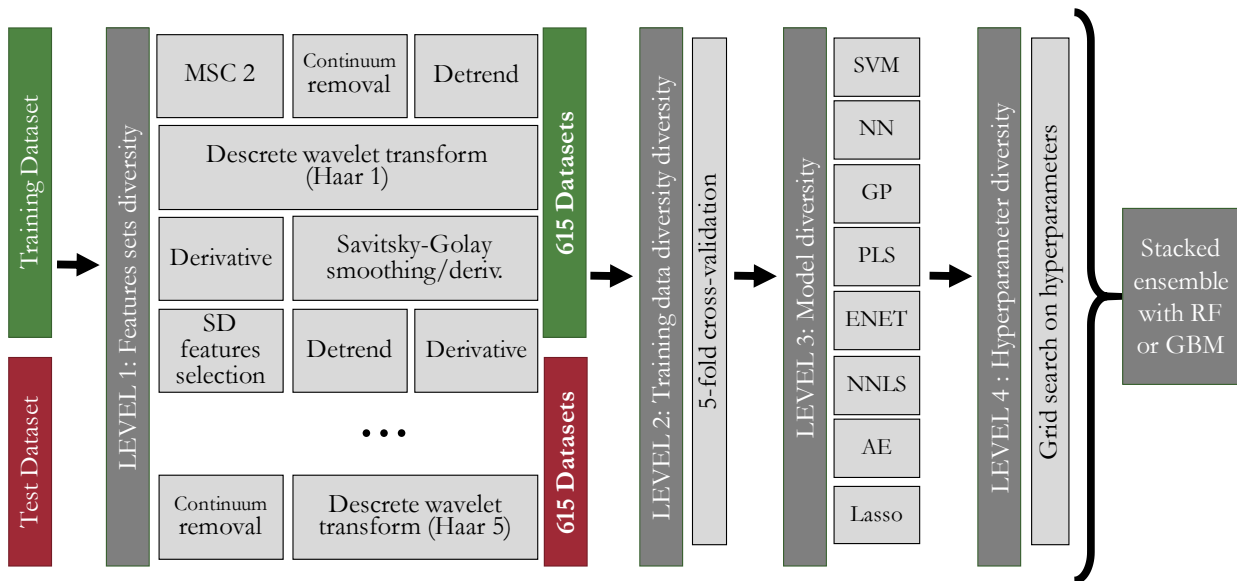


Figure 1 : Représentation schématique du pipeline de calibration.

Le pipeline doit permettre de combiner les avantages des approches traditionnelles et les techniques modernes d'apprentissage profond. Ainsi les algorithmes spatio-temporels dédiés à l'analyse de signaux 2D et 3D seront utilisés afin de mieux intégrer les informations de position des spectres. En outre, les améliorations apportées aux algorithmes de recherche heuristique offrent la possibilité d'étudier un plus vaste espace de combinaisons de prétraitements des spectres, de type de modèles et d'hyper-paramètres. Afin de tirer parti de cette diversité d'approches, nous utiliserons des techniques d'assemblage de modèles (i.e. stacking). Ces méthodes permettront de capitaliser les informations complémentaires apportées par les multiples modèles de base au sein d'un méta-modèle. Enfin, la généricité d'un tel « pipeline » offrira la possibilité d'effectuer une calibration directement sur un vecteur d'analytes plutôt que de les traiter un par un. Cette approche permettra de mieux gérer les valeurs aberrantes et le bruit de fond, et d'utiliser les possibles liens entre variables (e.g. covariance).

Cette communication présente la structure du pipeline et les premiers résultats appliqués dans le cadre du projet RTBfoods (BMGF), axés sur les cultures des plantes à racines et tubercules et des bananes en Afrique subsaharienne.