

THESE

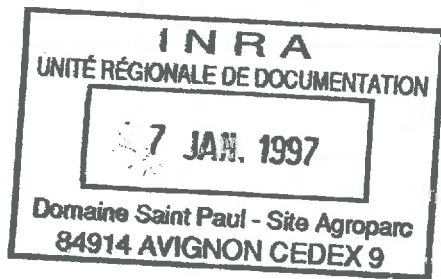
présentée

devant L'UNIVERSITE PAUL SABATIER - TOULOUSE III

pour l'obtention

du DIPLOME DE DOCTORAT
(arrêté du 30.3.92)

par

hierry FOURTY

**Estimation du contenu biochimique
d'un couvert végétal à partir de données haute
résolution spectrale acquises au niveau satellitaire**

Spécialité : Télédétection

Soutenue le 5 novembre 1996 devant le Jury composé de Messieurs :

B. SAUGIER
C. VARLET-GRANCHER
J.P. GASTELLU-ETCHEGORRY
F. BARET
S. JACQUEMOUD
T. PHULPIN

Professeur, Université Paris Sud, Paris
Directeur de Recherche, INRA, Lusignan
Professeur, Université Paul Sabatier, Toulouse
Directeur de Recherche, INRA, Avignon
Maître de Conférence, Université Paris VII, Paris
Ingénieur, CNES, Toulouse

Président et Rapporteur
Rapporteur
Directeur de Thèse
Examineur
Examineur
Examineur

*"Elle était tout ce qu'il avait pu désirer : Belle, Forte, Intrépide, Tendre, Protectrice.
Une femme dans toute l'acceptation du terme."*

(J.M. Auel, "Les enfants de la Terre")

*A ma Compagne et une Promesse
A ma Famille et mes Ami(e)s*

Remerciements

Ayant de remercier les personnes rencontrées pendant cette thèse, je tiens à remercier les personnes m'ayant fait l'honneur de juger ce travail de thèse : Jean-Philippe Gastellu-Etchegorry (directeur de thèse), Frédéric Baret (co-directeur de thèse), Stéphane Jacquemoud, Thierry Phulpin et plus particulièrement Bernard Saugier et Claude Varlet-Grancher pour avoir accepté la lourde charge d'être rapporteurs. Frédéric Baret a été l'initiateur de ce travail. Je ne peux que sincèrement le remercier pour sa patience mais surtout pour son précieux soutien et sa rigueur. Son recul sur la problématique m'impressionnera longtemps. Merci.

L'estimation de la composition biochimique des couverts végétaux est (était ?) un sujet intéressant de nombreuses agences spatiales. Trois d'entre elles se sont particulièrement investies dans ce thème en finançant ces travaux, le CNES (Thierry Phulpin), la NASA et l'ESA (Mike RAST et Pete Keally). Qu'elles soient remerciées, tout comme les sociétés m'ayant employé : SCOT CONSEIL, GEOSYS (Damien Lepoutre et Marie Christine Imbertie, merci) et pour les derniers temps (de rédaction) l'INRA.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Bernard Seguin, directeur de la fameuse station de Bioclimatologie de l'INRA d'Avignon pour m'avoir permis d'y travailler avec toutes les facilités possibles. Ceci a d'ailleurs été grandement facilité par une secrétaire d'une merveilleuse compétence dans l'art de résoudre les problèmes administratifs : Roselyne Olivier. Même à 300 km d'Avignon, la secrétaire du CESR, Marie Claude Cathala, a également toujours tout fait pour que les démarches administratives se déroulent bien. Recevez toutes deux ma sincère gratitude.

Nombreux sont ceux qui, par des discussions que nous avons eues ensemble, ont participé de façon anonyme à mon inspiration et à l'avancement de cette thèse. Je suis fortement reconnaissant à Gérard Guyot, Xin Fa Gu, Jean-Sylvain Frossard, Guido Schmuk.

Je tiens à remercier tout particulièrement Jean-Philippe Gastellu-Etchegorry, et ses étudiants du CESBIO (Véronique, Valérie, Francis) qui m'ont toujours écouté avec attention et esprit critique, ainsi qu'un ami, Stéphane Jacquemoud, qui m'a toujours conseillé, motivé à continuer et soutenu (vive le e-mail) pour relativiser certains résultats.

Je voudrais remercier toutes celles et ceux qui ont participé au soutien moral durant cette thèse, aspect loin d'être négligeable. Je tiens à leur exprimer ma profonde gratitude. Merci à F.M. et C. Sarrouy, J. et J. Saumade et leur fille Christine, Anne, Nathalie, Vanessa, Soraya, Monique, Dominique, Françoise, Nadine, Marisa, Sylvie, Claudine, Philippe C. pour sa précieuse aide en informatique, Albert, Frédéric, Panos, Riadh, Philippe L., Laurent et David.

De Marie Mermier et ses filles, Belkacem Draoui, et Jean-Francois Hanocq, je garderai le souvenir de votre gentillesse et votre simplicité.

Trois personnes, trois amis, ont contribué au bon déroulement de cette thèse. Je leur dois mille remerciements éternels : Marie Weiss (et merci Pathé), Brice Anselme et Loïc Camenen (vive le e-mail bis et le kouïgn amann) pour leur complicité de tous les jours.

En tant qu'initiateur du Club des Pâtisiers (à toi de maintenir et d'entretenir la tradition, Marie), je donne un grand coup de chapeau à celles et ceux qui par leur pâtisserie (toujours bonne, si si ...) ont participé à créer une rare convivialité dans le cadre professionnel (tout en conservant une ambiance très studieuse, je dois le préciser !) . Merci également à Fabien Torriero pour sa collaboration dans la première réalisation des pages des doctorants, effectuées dans le cadre de l'association des doctorants HOT-DOC, pour faire reconnaître le diplôme de doctorat en entreprise. Je ne peux qu'encourager les employeurs et décideurs à regarder ces simples pages (<http://enslapp.ens-lyon.fr/~tchich/HD/>) pour constater l'existence d'un vivier de matière grise, compétante, motivée et "disponible".

Enfin, mes derniers remerciements vont à mes parents et mon frère et à la lectrice (très critique !) qui m'a, chaque jour, aidé à surmonter états d'âme, doutes et fatigues par sa compréhension, son intelligence et son si joli sourire.

SOMMAIRE

Introduction générale	1
1. Problématique des travaux présentés	1
2. Cadre de l'étude	4
3. Plan des travaux présentés	4

Chapitre 1 : Radiométrie et estimation de la biochimie foliaire : éléments théoriques et approches actuelles

7

1. Propriétés optiques d'un matériel végétal : de la feuille au satellite	8
1.1. Propriétés optiques des feuilles.....	8
1.1.1. Description des feuilles	8
1.1.1.1. La structure interne.....	8
1.1.1.2. La composition biochimique	9
1.1.2. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec la feuille.....	9
1.1.2.1. L'absorption	10
1.1.2.2. La diffusion	12
1.1.3. Les modèles de propriétés optiques des feuilles	15
1.1.4. Processus physiques associés aux feuilles : conclusion.....	17
1.2. La réflectance du sol.....	17
1.2.1. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec le sol	18
1.2.1.1. Composition chimique du sol et absorption	18
1.2.1.2. Structure de la surface du sol et diffusion	18
1.2.2. Les modèles de propriétés optiques des sols.....	19
1.2.3. Propriétés optiques des sols : conclusion.....	20
1.3. La réflectance du couvert végétal	21
1.3.1 Les facteurs internes	21
1.3.1.1. L'influence des propriétés spectrales des sols	21
1.3.1.2. L'influence des propriétés spectrales des feuilles	21
1.3.1.3. La structure du feuillage.....	22
1.3.2. Les facteurs externes au couvert végétal	24
1.3.3. Les modèles de propriétés optiques du couvert	24
1.3.4. La réflectance du couvert végétal : conclusion.....	25
1.4. L'interaction du rayonnement avec l'atmosphère.....	25
1.4.1. Description de l'atmosphère	26
1.4.2. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec l'atmosphère	26
1.4.2.1. L'absorption	26
1.4.2.2. La diffusion	27
1.4.3. Les effets de l'atmosphère sur le rayonnement.....	28
1.4.4. L'interaction du rayonnement avec l'atmosphère : conclusion	28
1.5. Les effets du capteur	29
1.5.1. La résolution radiométrique.....	29
1.5.2. La résolution spectrale.....	30
1.5.3. Les effets du capteur : conclusion	30
1.6. Des propriétés optiques d'un matériel végétal à la biochimie, éléments théoriques et approches actuelles : conclusion.....	31

2. Utilisation de la radiométrie pour estimer le contenu biochimique d'un matériel végétal : un état de l'art	33
2.1. Les modèles empiriques d'estimation du contenu biochimique d'un matériel végétal.....	33
2.1.1. Spectrométrie infrarouge et estimation du contenu biochimique d'un matériel végétal : premiers travaux	36
2.1.2. Les applications au niveau de la litière et des feuilles sèches.....	37
2.1.3. Les applications au niveau de la feuille fraîche.....	38
2.1.4. Les applications au niveau du couvert végétal	40
2.1.5. Les approches empiriques de la relation spectrométrie-biochimie : conclusion.....	42
2.2. Des modèles analytiques de propriétés optiques utilisés pour estimer le contenu biochimique d'un matériel végétal	43
2.2.1. Les applications au niveau de la feuille fraîche	43
2.2.2. Les applications au niveau du couvert végétal	45
2.2.3. L'estimation de la biochimie à partir de l'inversion de modèles analytiques : conclusion.....	46
2.3. Les approches actuelles d'estimation de la biochimie foliaire à partir de données radiométriques : conclusion	47

Chapitre 2 : Un modèle de propriétés optiques des feuilles intégrant la biochimie.....

1. Introduction	54
2. Les jeux de données	55
2.1. Mesures des propriétés optiques	55
2.2. Analyses de la composition biochimique.....	56
3. Modéliser les propriétés optiques des feuilles	57
3.1. Estimation du coefficient global d'absorption	57
3.2. Détermination du coefficient spécifique d'absorption de chaque composé biochimique	58
4. Estimer la composition biochimique de la feuille	61
4.1. Estimation de la composition détaillée	61
4.2. Optimiser la façon de décrire la composition biochimique pour son estimation	62
5. Conclusion	63

Chapitre 3 : Adaptation du modèle de propriétés optiques au niveau de la feuille fraîche	81
1. Introduction	84
2. Le jeu de données	86
3. Modéliser les propriétés optiques des feuilles fraîches	86
3.1. Estimation du coefficient d'absorption.....	87
3.2. Détermination du coefficient d'absorption spécifique de l'eau et de la matière sèche.....	88
4. Estimation du poids spécifique de la feuille et de sa teneur en eau	89
4.1. Estimation par des mesures simultanées de réflectance et de transmittance.....	89
4.2. Performances d'estimation en utilisant la réflectance ou la transmittance.....	90
5. Conclusion	91

Chapitre 4 : Un modèle empirique d'estimation de la composition biochimique de la feuille fraîche	101
1. Introduction	104
2. Matériel et méthodes	106
2.1. Le jeu de données.....	106
2.1.1. Résolution radiométrique.....	107
2.1.2. Résolution spectrale.....	107
2.1.3. Transformation des données en valeurs de transmittance.....	108
2.2. Etalonnage et test de la régression multilinéaire.....	108
2.2.1. La régression multilinéaire.....	108
2.2.2. Evaluation des performances d'estimation.....	109
3. Résultats et discussion	109
3.1. Performances d'estimation pour des valeurs radiométriques non bruitées.....	110
3.1.1. Teneurs en eau et en matière sèche.....	110
3.1.2. Composition biochimique détaillée.....	111
3.2. Effet de la résolution radiométrique.....	111
3.2.1. Effet sur l'estimation de la teneur en eau.....	111
3.2.2. Effet sur l'estimation de la teneur en matière sèche.....	112
4. Conclusion	113

Chapitre 5 : Estimation de la biochimie d'un couvert végétal à partir de données satellitaires..... 124

1. Introduction..... 127

2. Méthodologie..... 129

2.1. Les modèles utilisés et la distribution des variables d'entrée 129

2.1.1. Les propriétés optiques des feuilles : le modèle PROSPECT..... 129

2.1.2. La réflectance du sol..... 130

2.1.3. La réflectance du couvert végétal : le modèle SAIL..... 130

2.1.4. Les effets atmosphériques : le modèle 6S..... 131

2.2. Simuler la résolution radiométrique et spectrale..... 131

2.2.1. La résolution radiométrique..... 131

2.2.2. La résolution spectrale..... 132

2.3. Développement et évaluation de relations entre les spectres de réflectance et les variables du couvert végétal..... 132

2.3.1. Régression multilinéaire 133

2.3.2. Réseaux de neurones 133

2.3.3. Evaluation des performances prédictives 134

3. Résultats et discussion 134

3.1. Régression multilinéaire 134

3.1.1. Effet des résolutions radiométrique et spectrale 134

3.1.2. Le nombre optimal de longueurs d'onde 135

3.1.3. Les longueurs d'onde sélectionnées 136

3.2. Comparaison avec une approche de type neuronale 137

3.3. Sensibilité de l'estimation des caractéristiques du couvert végétal à la position des longueurs d'onde 137

3.3.1. Spécificité de la position des longueurs d'onde..... 138

3.3.2. Effet d'un déplacement des longueurs d'onde sur l'estimation des caractéristiques du couvert végétal..... 138

4. Conclusion..... 139

Conclusion générale 153

1. Principaux résultats 153

2. Perspectives de recherche..... 156

3. Télédétection et changements globaux : quel avenir ?..... 158

Bibliographie..... 159

Liste des Tableaux

Liste des Figures

Annexe

Introduction

1. Problématique des travaux présentés

A la surface de la Terre s'effectuent des échanges énergétiques complexes entre la biosphère et l'atmosphère. Avant l'avènement de l'ère industrielle, l'équilibre des échanges énergétiques se traduisait par une stabilité climatique globale. Cet équilibre a depuis été modifié, en grande partie par les activités anthropiques qui consomment de l'énergie fossile, produisent du dioxyde de carbone et utilisent des gaz chloro-fluoro-carbonés détruisant la couche d'ozone. Les échanges énergétiques biosphère-atmosphère évoluent alors rapidement du fait de la modification de la composition chimique de l'atmosphère. Le système terrestre subit ainsi une modification du climat et des cycles biogéochimiques des biosphères océaniques et continentales.

Les communautés scientifiques et politiques internationales ont pris conscience des risques encourus par de telles modifications. Aussi, des programmes de recherche, souvent internationaux, ont été financés pour permettre l'étude des écosystèmes. Parmi ceux-ci, on citera le World Climate Research Programme, Intergovernmental Panel on Climate Change, United Nations Environmental Programme, International Geosphere Biosphere Programme, Science of Global Change et plus récemment le programme Earth Observing System (EOS). Ils doivent permettre la modélisation de l'effet des changements globaux en termes d'échanges énergétiques ou chimiques au sein de la biosphère terrestre. Ces modèles seront utilisés pour identifier les signes précurseurs des changements globaux afin d'adapter ou d'élaborer les politiques de gestion et de surveillance de l'environnement comme des ressources terrestres et océaniques, à court comme à long terme.

Selon le projet EOS (Asrar et Dozier, 1994), le système terrestre peut être décrit par 2 sous-systèmes, l'un "climatique", l'autre "biogéochimique", interconnectés au travers de "régulations hydrologiques". Au sein du sous-système biogéochimique, la végétation de la biosphère terrestre est particulièrement sensible à ces changements globaux. Selon Waring *et al.* (1986), des modifications des processus physiologiques végétaux tels que la photosynthèse, la transpiration, la respiration et le recyclage de la matière organique pourraient servir d'indicateurs des changements globaux.

Les régulations de ces processus font intervenir directement ou indirectement le feuillage du couvert ainsi que certains composés biochimiques. On citera par exemple pour :

- la photosynthèse et de la transpiration :

- la relation étroite entre la production de matière sèche et le niveau de rayonnement photosynthétiquement actif absorbé en phase de croissance (Monteith, 1977) qui dépend de la surface foliaire et de la concentration en chlorophylle;
- l'effet d'un stress induisant une modification de la structure du couvert, de la surface spécifique des feuilles et de la teneur en chlorophylle;
- la relation entre la production primaire et la teneur en azote foliaire (Vitousek, 1982).

- l'allocation des synthétats :

- le changement d'allocation de carbohydrates entre des feuilles, tiges, organes de réserve en fonction la disponibilité des nutriments azotés (Waring *et al.*, 1985);

- la respiration :

- la relation entre la respiration et le contenu azoté foliaire (Pening de Vries *et al.*, 1975; Waring *et al.*, 1986);

- la décomposition de la matière organique et son recyclage :

- le taux de dégradation de la matière organique de la litière dépendant des teneurs en lignine et en azote foliaires (Melillo *et al.*, 1982);
- la relation entre la minéralisation de l'azote du sol des sols tropicaux et la production de gaz à effet de serre (Matson et Vitousek, 1987).

Au regard de ces exemples, les teneurs de certains composés foliaires comme la lignine, et l'azote (ou protéines), mais aussi la matière sèche et l'eau, permettent de caractériser le fonctionnement des processus physiologiques du couvert végétal. De ce fait, des modifications dans l'évolution de ces teneurs sont révélatrices de dysfonctionnement des processus liés.

La compréhension de l'évolution de ces processus physiologiques sous l'effet des changements observés passe par le développement de modèles de fonctionnement global, fondés notamment sur l'évolution de ces teneurs (Wessman, 1992). De tels modèles permettront de mieux appréhender :

- la dynamique des écosystèmes à l'échelle locale comme globale;

- les échanges globaux atmosphère-biosphère.

Selon Asrar et Dozier (1994), ils permettront également de répondre à deux questions primordiales :

- Comment évoluera la relation climat-évaporation-photosynthèse sous l'effet de polluants atmosphériques provenant de l'activité anthropique ?
- quels seront les effets, sur la végétation, d'une augmentation de la teneur atmosphérique en dioxyde de carbone ou d'une baisse de la teneur en ozone ?

La difficulté méthodologique majeure d'une telle modélisation réside dans l'acquisition de données qui permettent d'étalonner et de valider ces modèles. Compte tenu de la variabilité naturelle, ces données doivent être caractérisées par une forte représentativité spatiale et temporelle. Par conséquent, il est nécessaire de développer des outils d'acquisition de telles données. La télédétection spatiale apparaît, aujourd'hui, potentiellement comme un outil bien adapté pour l'étude globale de la végétation. La justification de cette potentialité est double :

- au niveau du laboratoire, les propriétés spectrales (visible et l'infrarouge) d'un matériel foliaire renseignent sur son contenu biochimique. Il est donc possible de développer des algorithmes d'extraction de l'information biochimique foliaire à partir des données spectrales;

- l'information spectrale, correspondant à la biochimie foliaire, est partiellement transmise au niveau du couvert végétal.

Cette potentialité est d'autant plus importante que la technologie des capteurs a particulièrement évolué ces dernières années et qu'à résolution et représentativité spatiale et temporelle égales, le coût d'acquisition de ces données est moins élevé que celui d'une campagne de mesure au sol.

Pour renseigner les modèles de fonctionnement des couverts végétaux et plus généralement mieux décrire les échanges entre la surface et l'atmosphère, l'utilisation de la télédétection passe par une première étape de développement d'algorithmes d'extraction de l'information biochimique des données satellitaires. C'est dans cette perspective que se situe notre thèse.

2. Cadre de la thèse

Le cadre de cette thèse correspond au croisement de préoccupations de diverses agences spatiales internationales (NASA-CNES-ESA), c'est-à-dire la définition des futurs capteurs satellitaires (HIRIS-PRISM) permettant l'estimation du contenu biochimique des couverts végétaux.

Pour répondre à ces préoccupations, nous avons développé nos travaux autour de trois points successifs :

- la production de connaissances sur la relation entre biochimie et propriétés spectrales des feuilles afin de tester l'utilisation possible de la télédétection pour l'estimation du contenu biochimique des couverts végétaux;
- le développement et la validation d'algorithmes d'extraction de l'information biochimique foliaire à partir de données satellitaires;
- la définition des spécifications des capteurs utilisés dans ce cadre.

En d'autres termes, le premier point cherche à produire des connaissances physiques sur la relation entre propriétés spectrales et biochimie d'un matériel végétal. Les deux autres points correspondent davantage à un apport méthodologique et technologique.

3. Plan des travaux présentés

Notre contribution sera présentée sous la forme de 4 publications soumises à des revues internationales. Notre thèse est ainsi divisée en 5 chapitres.

Le chapitre 1 permettra de préciser la problématique de notre recherche par une double synthèse. La première synthèse présentera les connaissances actuelles sur les interactions du rayonnement avec les éléments du couvert végétal, l'atmosphère et le capteur aéroporté ou satellitaire. La seconde synthèse présentera l'état de l'art des travaux portant sur l'estimation de la composition biochimique d'un matériel végétal à partir de mesures radiométriques par des approches physiques ou empiriques.

Dans le chapitre 2, nous développerons un modèle analytique de propriétés optique de feuille qui prenne explicitement en compte la composition biochimique. Pour cette raison, nous nous limiterons dans ce chapitre à la feuille sèche. En effet, c'est dans cet état hydrique que l'on distingue le mieux l'influence spectrale des composés biochimiques foliaires. Nous étudierons successivement les utilisations directes (prédiction des propriétés spectrales) et indirectes (estimation des teneurs biochimiques) de ce modèle.

Le chapitre 3 constituera une adaptation du précédent modèle au cas de la feuille fraîche. Là encore, nous nous attacherons à étudier l'utilisation du modèle dans les sens direct et inverse.

Nous développerons, dans le chapitre 4, une approche empirique d'estimation du contenu biochimique au niveau de la feuille fraîche, c'est-à-dire un modèle estimant directement le contenu biochimique uniquement à partir des données radiométriques.

Le développement et l'évaluation d'algorithmes d'extraction de l'information et la définition des spécifications des capteurs constitueront la matière du chapitre 5. Les développements présentés dans ce chapitre se baseront partiellement sur la comparaison des résultats des chapitres 3 et 4.

Nous concluons finalement ce travail en dégagant les principales perspectives en termes de recherche tout en situant notre apport dans une perspective plus large de l'utilisation de la télédétection comme outil d'acquisition de données pour l'étude des changements globaux.

Le schéma suivant résume la structure choisie pour notre thèse et servira de guide sur la page de garde de chacun des chapitres.

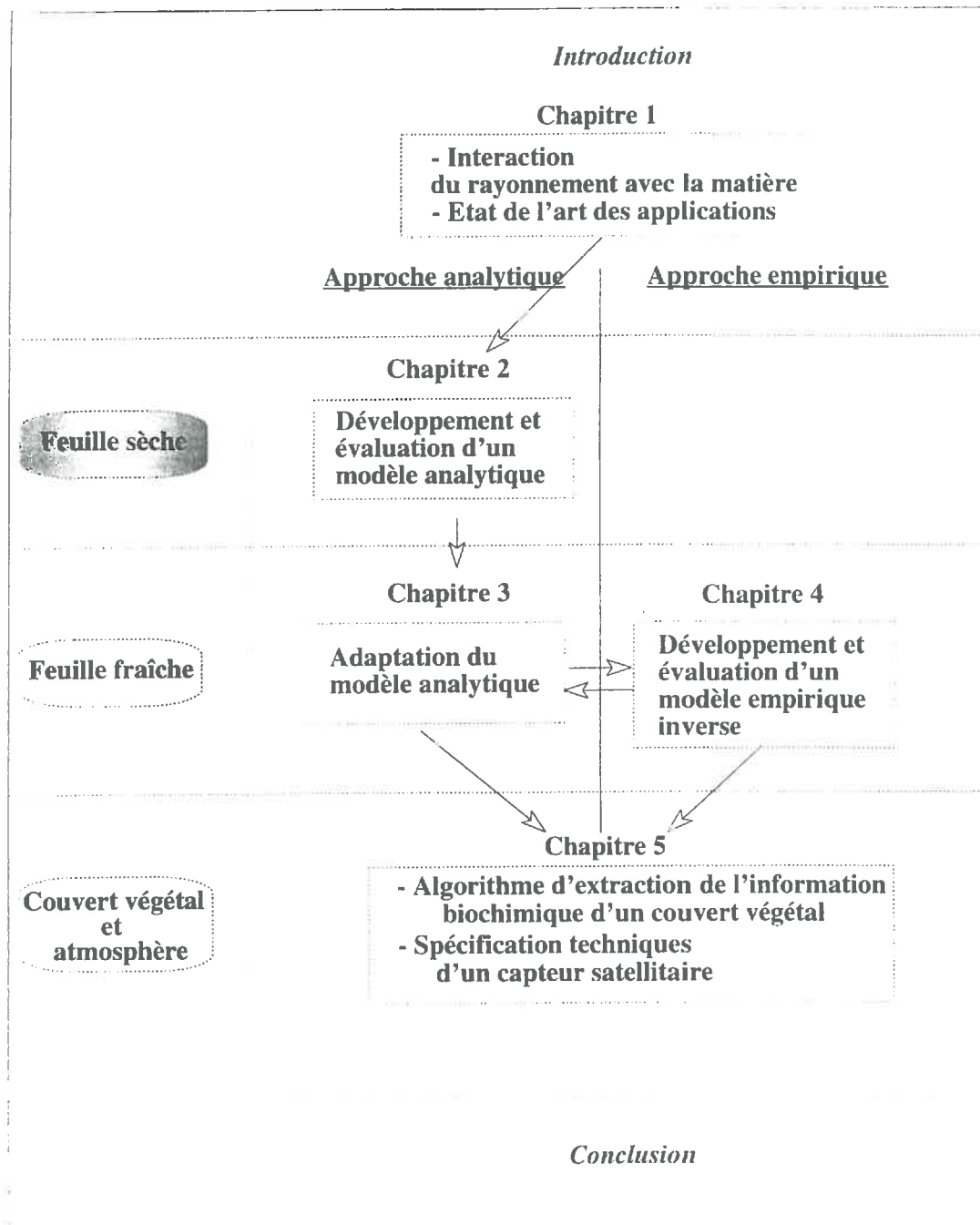
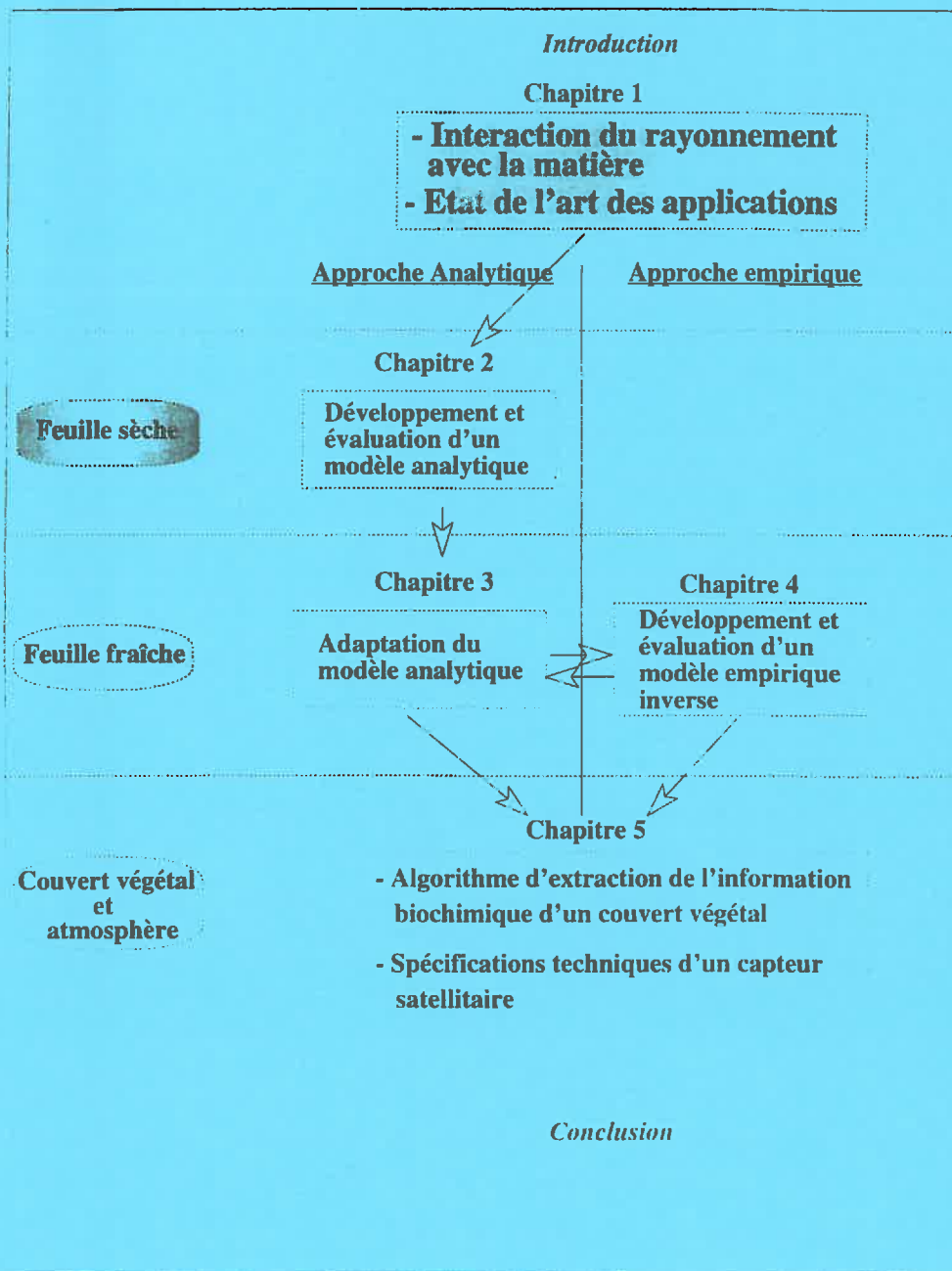


Figure 1 : Schéma conceptuel de la thèse

Chapitre 1

Radiométrie et estimation de la biochimie foliaire : éléments théoriques et approches actuelles



Le matériel végétal ne réfléchit qu'une partie du rayonnement électro-magnétique. Sa composition biochimique influence la quantité de rayonnement réfléchi.

Aussi, afin de comprendre l'influence de la composition biochimique d'un matériel végétal sur sa réflectance mesurée au laboratoire pour la feuille, jusqu'au niveau satellitaire pour le couvert, il est nécessaire d'identifier et de détailler l'effet de chacun des facteurs intervenants. C'est le thème de la première partie de ce chapitre.

Dans un second temps, nous nous attacherons à préciser les différentes approches utilisées actuellement pour estimer le contenu biochimique d'un matériel végétal à partir de données haute résolution spectrale. Nous nous efforcerons de porter un regard critique sur les limites de ces approches, en mettant l'accent sur leur prise en compte des processus physiques d'interaction du rayonnement et sur la robustesse des estimations obtenues.

Nous concluons ce chapitre en faisant ressortir les facteurs prépondérants de la sensibilité de la réflectance du matériel végétal à son contenu biochimique. Cela nous permettra de poser les hypothèses et le choix des approches que nous utiliserons.

1. Propriétés optiques d'un matériel végétal : de la feuille au satellite

Dans cette première partie, nous détaillerons les bases physiques de l'interaction du rayonnement avec le couvert végétal. Cette partie nous permettra de distinguer les facteurs qui sont susceptibles de perturber la sensibilité de la réflectance au signal biochimique foliaire tel qu'enregistré au niveau du satellite.

Nous décrirons tout d'abord les processus physiques d'interaction du rayonnement électromagnétique avec la feuille, en apportant une attention particulière à l'effet de la composition biochimique. Dans une seconde partie, nous nous attacherons à présenter la sensibilité des propriétés optiques du couvert végétal à ses deux constituants majeurs, le feuillage et le sol. Nous finirons cette synthèse en montrant l'influence de l'atmosphère sur le rayonnement réfléchi par le couvert végétal ainsi que les erreurs engendrées par le capteur lui-même.

1.1. Propriétés optiques des feuilles

Après avoir décrit sommairement l'organisation de la feuille, nous présenterons les processus physiques de l'interactions feuille-rayonnement en illustrant leurs effets dans les domaines spectraux du proche et du moyen infrarouge. Les principaux types de modèles de propriétés optiques des feuilles seront présentés en fin de cette section.

1.1.1. Description des feuilles

Les feuilles sont caractérisées principalement par leur structure et par leur composition biochimique.

1.1.1.1. La structure interne

Les feuilles peuvent être classées en deux types suivant l'appartenance des végétaux aux groupes systématiques des gymnospermes ou des angiospermes.

La feuille des gymnospermes, l'aiguille, est formée sur la face supérieure d'un épiderme composé de cellules épaisses, surmontant une couche de cellules aux parois lignifiées. En dessous, se trouve le mésophylle, homogène et chlorophyllien, avec au centre les faisceaux cribro-vasculaires qui permettent la circulation des sèves brutes et élaborées.

La feuille d'un angiosperme monocotylédone et dicotylédone est constituée d'une assise épidermique dépourvue de chloroplastes, recouverte d'une cuticule parfois cireuse. En

dessous, se trouve le mésophylle dont la structure diffère entre les mono et dicotylédones. Pour ces premiers, les cellules sont chlorophylliennes réparties de façon homogène. En revanche pour les dicotylédones, le mésophylle est constitué de deux couches cellulaires. La première, le parenchyme palissadique, est faite de cellules chlorophylliennes et homogènes alors que la seconde couche est constituée de cellules peu chlorophylliennes, irrégulièrement séparées par des lacunes. Le système vasculaire des angiospermes, qui se trouve dans le mésophylle, est formé de nervures principales et secondaires. Enfin, en dessous se trouve l'épiderme, qui à l'inverse de l'épiderme supérieur, est ponctué de stomates chez les dicotylédones.

1.1.1.2. La composition biochimique

Les parois cellulaires et les vaisseaux conducteurs sont essentiellement constitués de polymères comme la cellulose et l'hemicellulose. On y trouve également la lignine. Au sein des cellules et des vacuoles, se trouvent l'eau, les protéines, les acides aminés, l'amidon, les sucres et d'autres composés mineurs. Globalement, ces composés biochimiques sont formés des 4 atomes élémentaires qui sont le carbone, l'hydrogène, l'oxygène et l'azote.

Ainsi, la feuille peut être définie très globalement par un nombre de couches cellulaires et des contenus en eau, cellulose, hemicellulose, lignine, protéines, amidon et autres composés. Comme nous le verrons ci-dessous, ce sont les deux caractéristiques qui expliquent l'interaction du rayonnement avec l'organe foliaire (Gates *et al.*, 1965; Knippling, 1970; Gausman *et al.*, 1971).

1.1.2. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec la feuille

Après avoir atteint une feuille, le rayonnement incident se divise en un rayonnement réfléchi et un rayonnement transmis. Le reste élève la température de la feuille ou contribue à l'activité photosynthétique ou bien encore peut être réémis par fluorescence. Le devenir du rayonnement est dépendant de deux processus physiques d'interaction rayonnement-matière : l'absorption et la diffusion. D'une façon générale, les niveaux de réflectance et transmittance sont contrôlés par la diffusion et atténués par l'absorption (Knippling, 1970; Woolley, 1971).

1.1.2.1. L'absorption

Les composés biochimiques foliaires qui nous intéressent (lignine, protéines, cellulose, eau, etc) sont sensibles au rayonnement du proche et moyen infrarouge. Pour cette raison, nous nous limiterons à décrire l'interaction dans ces deux domaines spectraux.

Dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge, l'absorption correspond à une transformation de l'énergie électromagnétique du rayonnement en une énergie oscillatoire, par changement d'état vibratoire et rotationnel des liaisons biochimiques.

Les liaisons biochimiques correspondent à des échanges mutuels d'électrons entre les atomes. Les oscillations naturelles de ces liaisons se manifestent par les vibrations des atomes le long des liaisons et par des rotations des liaisons autour des axes moléculaires (figure 1).

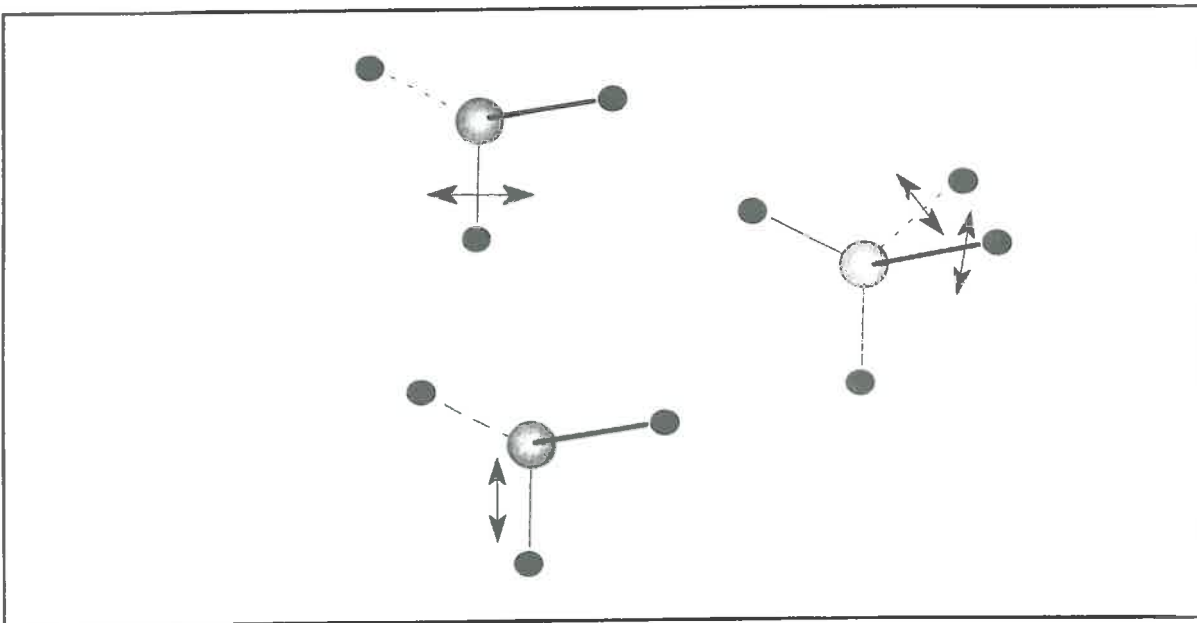


Figure 1 : Vibrations et oscillations d'une liaison électronique

Prise dans son état de repos, une liaison électronique est caractérisée par une énergie de base. Cette énergie correspond exactement à l'énergie de photons dans la gamme de l'infrarouge (2500 et 15000 nm).

La liaison peut absorber l'énergie d'un photon. Son énergie se trouve alors augmentée exactement de l'énergie du photon. Cependant, la liaison ne peut absorber que les photons dont l'énergie (donc la fréquence) correspond à un nombre entier de fois celle de la liaison prise dans son état de repos. Cette énergie correspond à celle de photons dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge.

Ainsi, chaque type de liaison, et par extrapolation chaque molécule, absorbe les photons correspondant à certaines longueurs d'onde bien spécifiques entre le proche et moyen infrarouge. En théorie, chaque molécule possède une signature spectrale distincte des autres molécules. Mais comme la grande majorité des molécules organiques sont constituées des mêmes liaisons biochimiques, beaucoup de molécules présentent des bandes d'absorption très similaires.

Les constituants biochimiques qui nous intéressent présentent des harmoniques d'absorption ($n > 1$) dans les domaines spectraux du proche et du moyen infrarouge (Peterson *et al.*, 1988; Wessman *et al.*, 1988b; Gausman *et al.*, 1972). Parmi ces composés biochimiques, l'eau, par son absorption affecte particulièrement les propriétés spectrales des feuilles. Nous présentons dans la figure 2 l'évolution de la réflectance d'une feuille de coton soumise à une déshydratation constante sur plusieurs jours.

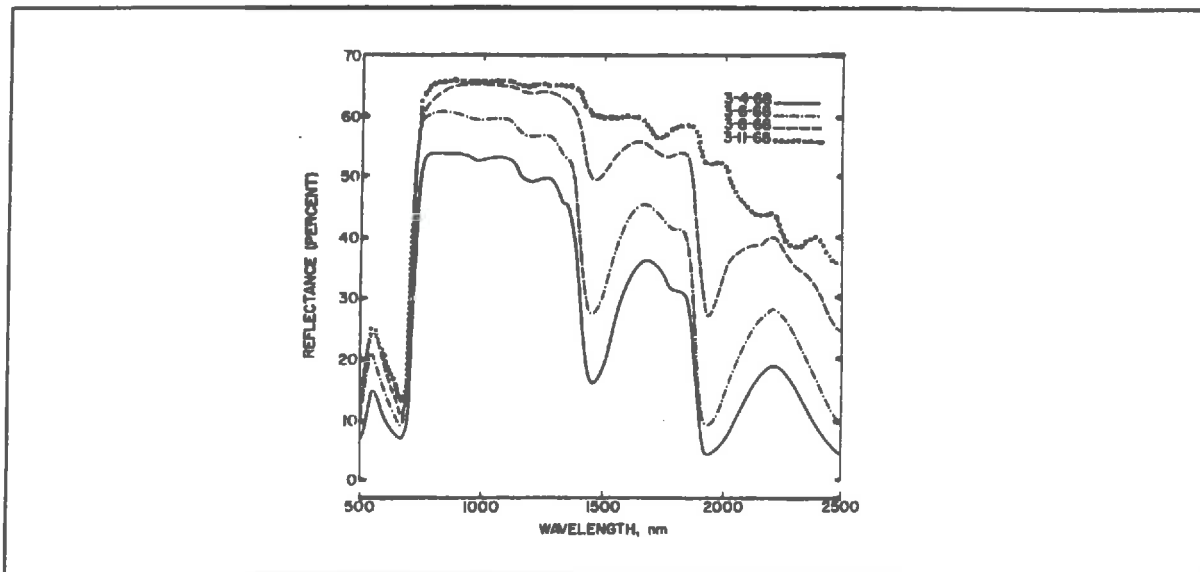


Figure 2 : Effet d'une déshydratation progressive sur les propriétés optiques d'une feuille de coton dans les domaines spectraux du visible au moyen infrarouge pour 4 dates successives (d'après Gausman *et al.*, 1972)

Les principales longueurs d'onde correspondantes à l'absorption des composés biochimiques foliaires, répertoriées par Curran (1989), sont présentées dans le tableau I.

Tableau I : Principaux absorbants foliaires avec leurs bandes d'absorption caractéristiques dans le proche et moyen infrarouge

l'eau	1200-1450-1940-2500 nm
la cellulose	1220-1480-1930 2100-2280-2340-2480 nm
l'hemicellulose	1450-1770-1930-2090-2330-2500 nm
la lignine	1450-1680-1930-~2100 nm
l'amidon	1220, 1450, 1560, 1700, 1770, 1930, 2100, 2320, 2400 nm
autres (faibles absorbants)	
- protéines	910-1020-1510-1690-1940-1980-2060-2130-2180-2240-2300-2350
- les huiles	930-1040-2310
- ...	

Ce tableau permet notamment d'illustrer la non-spécificité de certaines bandes.

La sensibilité à l'absorption n'est pas la même dans les domaines du proche et du moyen infrarouge. Le niveau d'absorption est d'autant plus fort que l'énergie des photons est proche de celui de la liaison dans son état de base. Ceci explique que l'absorption soit très sensiblement plus forte dans le moyen infrarouge que dans le proche infrarouge.

1.1.2.2. La diffusion

La diffusion est un terme générique qui englobe les phénomènes de réflexion, de réfraction et de diffraction du rayonnement incident selon Voglemann et Bjorn (1986).

- A l'échelle macroscopique, les surfaces interceptrices ont des dimensions très supérieures à la longueur d'onde du rayonnement incident. C'est le cas aux interfaces air-parois (diffusion de surface), caractérisées par des changements brusques de l'indice de réfraction. Ces indices de réfraction varient selon la longueur d'onde (Palmer et Williams, 1974; Jacquemoud et Baret, 1990).

- A l'échelle microscopique, les surfaces réceptrices assimilables à des particules ont des dimensions inférieures à celle de la longueur d'onde. Seuls les chloroplastes et les grana ont une dimension proche de celle de l'onde et sont susceptibles de provoquer une diffusion de type "Mie" (diffusion de volume). Ces mécanismes sont complexes et restent mal connus.

La diffusion à l'échelle macroscopique est la plus importante, ce qui explique le rôle prépondérant de la structure foliaire, notamment du parenchyme lacuneux.

Lorsque le rayonnement incident touche la feuille, une partie du rayonnement peut être réfléchi à sa surface alors que l'autre partie pénètre dans la feuille où il est diffusé. De ce fait, la diffusion peut être décomposée en une composante interne et spéculaire.

- Composante interne

La composante diffuse est créée principalement aux interfaces air-parois (Gausman, 1974), c'est-à-dire au sein de la feuille. Ainsi, compte tenu des différences structurelles existantes entre les monocotylédones et les dicotylédones, la sensibilité des propriétés optiques à la diffusion interne n'est pas la même selon le type de feuille. A épaisseur égale, lorsque les tissus sont matures, les multiples réflexions du rayonnement sur le parenchyme lacuneux donnent une réflectance plus forte pour une feuille de dicotylédone que pour une feuille de monocotylédone. En revanche, la transmittance d'une feuille de monocotylédone est plus forte que celle d'une dicotylédone. La figure 3 illustre la sensibilité spectrale à la structure interne (diffusion) selon le modèle PROSPECT (Jacquemoud et Baret, 1990), modèle qui sera présenté ultérieurement.

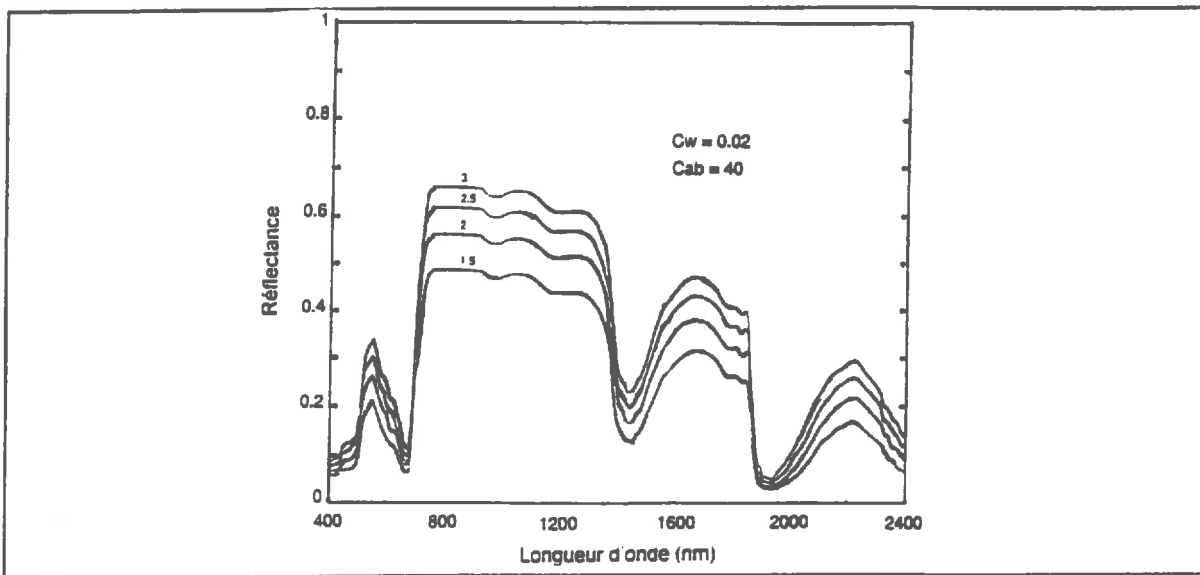


Figure 3 : Sensibilité de la réflectance dans le proche infrarouge à la diffusion selon le modèle PROSPECT (d'après Guyot, 1995)

- Composante spéculaire

Au niveau de l'interface air-épiderme, le rayonnement incident peut être réfléchi spéculairement, c'est-à-dire réfléchi avec le même angle que celui du rayonnement incident (Breece and Holmes, 1971; Woolley, 1971). Ce sont la rugosité de la surface de la feuille et

l'indice de réfraction de la cuticule cireuse des feuilles sont responsables de cette réflexion spéculaire (Rondeaux et Guyot, 1990; Grant, 1987; Grant *et al.*, 1987).

Les propriétés optiques des feuilles sont donc sensibles aux effets directionnels puisque les feuilles montrent une diffusion interne et spéculaire. Cette sensibilité de la diffusion totale pour différents angles d'incidence du rayonnement est illustrée dans la figure 4 pour une feuille de soja.

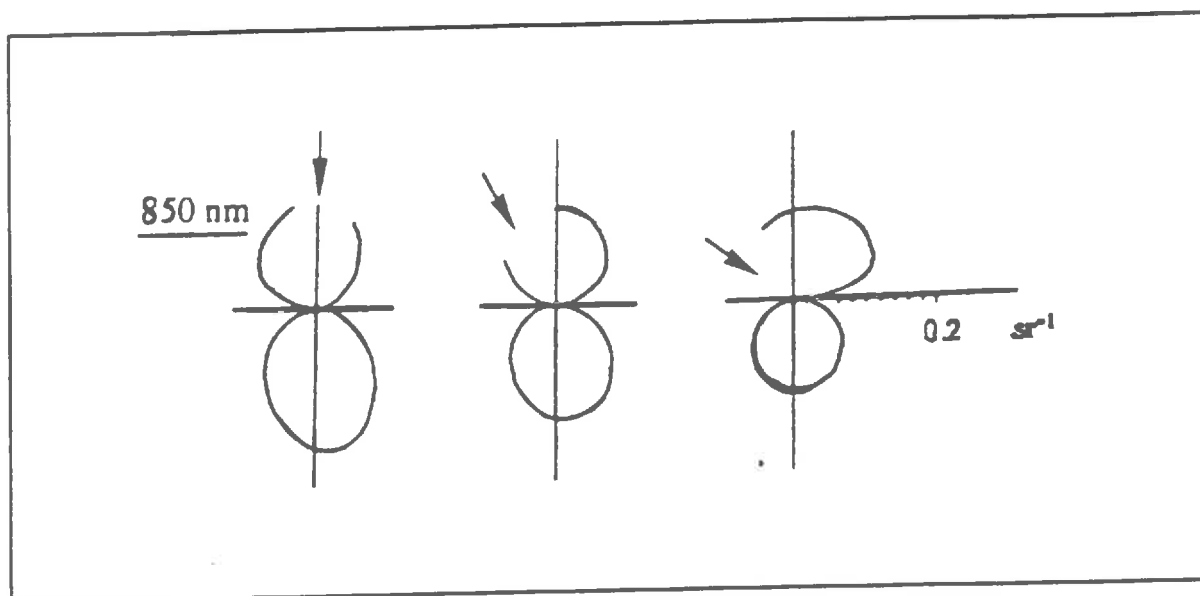


Figure 4 : Variation de l'intensité énergétique transmise ou réfléchie par unité d'angle solide (sr⁻¹) par une feuille de soja pour la longueur d'onde 860 nm et 3 angles d'incidence (adapté de Brece et Holmes, 1971)

Les propriétés spectrales de la feuille dépendent simultanément de l'absorption et de la diffusion. L'absorption est minimale dans le proche infrarouge où l'on trouve deux très faibles harmoniques d'absorption de l'eau (960-1100 nm). Ce fait explique que proportionnellement, ce domaine spectral soit très sensible aux effets de la diffusion, c'est-à-dire la structure du mésophylle.

En revanche, bien que l'eau n'absorbe pas de façon significative, elle joue un rôle important paradoxalement dans la sensibilité à la diffusion. En effet, une variation de teneur en eau entraîne une modification de la structure interne de la feuille, ce qui se traduit par une modification du niveau de diffusion, donc de la réflectance et de la transmittance (Walter-Shea et Norman, 1991).

Nous pouvons ainsi conclure que l'importance des processus de diffusion et d'absorption ne sera pas la même dans le proche et le moyen infrarouge :

- l'absorption par vibration et rotation prédomine dans le moyen infrarouge. La diffusion spéculaire est indépendante de la structure, elle sera ainsi comparativement plus forte dans le moyen infrarouge que dans le proche infrarouge;

- en revanche, dans le proche infrarouge, c'est la diffusion (structure et présence de la cuticule cireuse) qui contribue à modifier les propriétés spectrales des feuilles.

1.1.3. Les modèles de propriétés optiques des feuilles

L'estimation du contenu biochimique d'une feuille à partir de ses propriétés optiques nécessite l'utilisation d'un modèle, qu'il soit analytique ou empirique. Nous nous attacherons dans cette section à présenter succinctement les principaux types de modèles de propriétés optiques existant ainsi que leurs limites.

- Les modèles basés sur des équations du transfert radiatif

Allen *et al.* (1969) introduisent la notion de "plate model", dans laquelle la feuille est assimilée à une couche absorbante et diffusante, compacte et soumise à un rayonnement isotrope. La diffusion a lieu aux interfaces air-parois et parois-air et répond aux équations de Fresnel. Deux paramètres, l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption, suffisent pour simuler les propriétés optiques de feuilles de monocotylédones.

Par la suite, ce concept est amélioré par Allen *et al.* (1970) qui considère la feuille non plus comme une couche unique, mais comme un empilement de N couches, ce qui permet de simuler les réflexions multiples que l'on rencontre dans les feuilles de dicotylédones. Ce modèle fait appel à des variables discrètes. Ses paramètres d'entrée sont l'indice de réfraction, le coefficient d'absorption ainsi que le nombre de couches (N) ou plus exactement le Void Area Index (N-1). Ce modèle est de nouveau amélioré par Jacquemoud et Baret (1990) qui définissent le coefficient d'absorption comme linéairement dépendant des teneurs biochimiques foliaires et le modifient pour éviter la discrétisation de l'indice de structure. Le modèle PROSPECT a alors comme variable d'entrée l'indice de réfraction, l'indice de structure et la teneur en eau. Il permet de simuler précisément les propriétés spectrales des feuilles de mono et dicotylédones dans le proche et moyen infrarouge mais ne prend pas en compte explicitement la composition biochimique. C'est le modèle de propriétés spectrales de feuilles le plus couramment utilisé. De plus, il est inversible.

Allen et Richardson (1968) utilisent les équations de Kubelka-Munk pour simuler les propriétés optiques d'un milieu homogène. Ce système à 2 équations simples, de flux descendant et montant, permet par résolution analytique de calculer la réflectance et la transmittance de la feuille à partir d'un coefficient de diffusion et d'un coefficient d'absorption. Les équations de Kubelka-Munk et le "plate model" amélioré sont en fait équivalents (Bunnik, 1978) : seule la discrétisation des variables les différencie. Yamada et Fujimura (1988) se basent sur les équations de Kubelka et Munk pour développer un modèle décrivant la feuille comme un empilement de quatre couches, possédant chacune des propriétés optiques propres. Plus récemment, Fukshansky *et al.* (1991) utilisent un modèle à 4 flux pour estimer les paramètres optiques d'une feuille considérée comme un empilement de deux couches.

- Les modèles stochastiques

Les propriétés optiques sont ici calculées à partir de probabilités d'interception, de réflexion, ou transmission des photons. Tucker et Garratt (1977) simulent les propriétés optiques d'une feuille considérée comme un empilement de 2 couches optiquement distinctes. Ce type de modèle nécessite une description approfondie de la feuille.

- Modèles informatiques

Ces modèles reposent sur l'hypothèse simple : tous les éléments de la feuille (parois cellulaires, chloroplastes, sève et air) sont optiquement caractérisés. Il est alors possible de simuler le trajet de photons au sein de la feuille et donc de simuler la réflectance et la transmittance. Cette technique s'est développée grâce à l'évolution, d'une part des moyens de calculs informatiques, et d'autre part des techniques graphiques, notamment de lancer de rayon. Avec une description de la feuille résumée aux parois cellulaires et aux espaces intercellulaire, Allen *et al.* (1973) obtiennent des valeurs de réflectance et transmittance surestimées. Kumar et Silva (1973), en ajoutant à la description des chloroplastes et de la sève, simulent très précisément la réflectance et transmittance d'une feuille de soja dans le proche infrarouge.

Une différence importante existe quant aux utilisations de ces différents modèles. Les modèles stochastiques et informatiques fonctionnent dans le sens direct : ils sont utilisés pour simuler les propriétés optiques à partir d'un jeu de paramètres d'entrée. Les autres modèles, de type transfert radiatif, sont utilisés également dans le sens direct mais ils peuvent être inversés. Par conséquent, l'inversion permet une estimation des variables d'entrée telles que la teneur en éléments absorbants à partir de mesures de spectres de réflectance ou de

transmittance. Compte-tenu de nos objectifs, l'inversibilité d'un modèle est, avec la précision, la qualité indispensable que nous recherchons.

1.1.4. Processus physiques associés aux feuilles : conclusion

Cette première partie nous a permis d'identifier le rôle de la composition biochimique et de la structure dans les propriétés spectrales des feuilles.

Le domaine spectral présentant la plus grande sensibilité au contenu biochimique des feuilles reste le moyen infrarouge. Cependant, l'interprétation des propriétés optiques dans le proche infrarouge est également intéressante puisqu'elle nous renseigne sur la diffusion et d'une moindre manière sur l'absorption par l'eau. Ceci suggère que pour exploiter au maximum l'information biochimique des spectres, il est préférable d'utiliser les données radiométriques dans ces deux domaines spectraux. Par conséquent, dans notre étude, nous restreindrons les domaines spectraux utilisés au proche et moyen infrarouge.

La brève synthèse des modèles de propriétés optiques actuels montre qu'il existe de modèles analytiques inversibles utilisant un minimum de paramètres d'entrée pour simuler avec précision des feuilles de mono et dicotylédones.

Maintenant que les propriétés optiques de la feuille ont été étudiées, nous allons nous intéresser aux facteurs susceptibles d'intervenir au niveau de la réflectance du couvert végétal. Le deuxième constituant du couvert végétal, après la feuille, est le sol dont nous allons présenter les propriétés optiques.

1.2. La réflectance du sol

Le sol, support physique de croissance des végétaux, fait partie intégrante du couvert végétal. Il est nécessaire de prendre en compte ses propriétés optiques car il peut représenter pour un capteur la surface relative observable la plus grande. Les propriétés optiques de la surface visée par le capteur dépendent alors plus de ses propriétés optiques que de celles de la végétation. Comme pour les feuilles, nous présenterons en premier lieu les processus physiques d'interaction du rayonnement avec le sol, puis nous porterons notre attention sur les modèles de propriétés optiques existants.

1.2.1. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec le sol

Tout comme pour la feuille, le sol peut être défini globalement par sa composition chimique et par sa structure.

1.2.1.1. Composition biochimique du sol et absorption

Les sols sont le résultat de biodégradations et d'altérations physiques des roches et de l'humus. Baumgardner *et al.* (1985) montrent que ceux-ci ont globalement une triple nature chimique : minérale, ionique et organique.

Les minéraux, comme le quartz, n'absorbent pas le rayonnement dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge (Guyot, 1995). Ils le transmettent ou le réfléchissent. L'absorption observée est le fait d'ions liés aux minéraux, comme les ions ferreux (autour de 1000 nm, et de façon moindre dans le visible), les ions ferriques (700 et 870 nm) et les ions hydroxyl dans le moyen infrarouge (1400, 2200-2600 nm).

La matière organique des sols est principalement d'origine foliaire. Elle est constituée de molécules électroniquement stables qui résistent longtemps à la dégradation microbienne. On retrouve des acides humiques, flaviques et non humiques (Baumgardner *et al.*, 1985). Cette matière organique est très importante dans l'évolution des propriétés spectrales car son absorption diminue sensiblement la réflectance dans le moyen infrarouge. D'autre part, elle masque l'absorption des ions associés aux différents minéraux. Comme pour la feuille, un autre composé très important est l'eau puisque son effet est prépondérant dans l'atténuation de la réflectance du sol (Idso *et al.*, 1975) en masquant l'absorption des composés biochimiques ou ioniques.

1.2.1.2. Structure de la surface du sol et diffusion

La surface du sol est constituée d'une agrégation de particules présentant des tailles et des positionnements entre elles très variables. Les espaces entre les particules sont occupés par de l'air ou de l'eau. Les interactions avec le rayonnement sont le fait de l'indice de réfraction et de la rugosité du sol (figure 5).

Figure 5 : Effet de la diffusion pour trois sols différents: (—) sol argileux, (....) terreau, (---) sable (d'après Jacquemoud, 1992)

C'est la variation d'indice de réfraction observée entre les particules, l'air et l'eau qui provoque, à la surface, une diffusion de premier ordre du rayonnement. Notons qu'il existe également une diffusion multiple du rayonnement entre les particules constituant le sol.

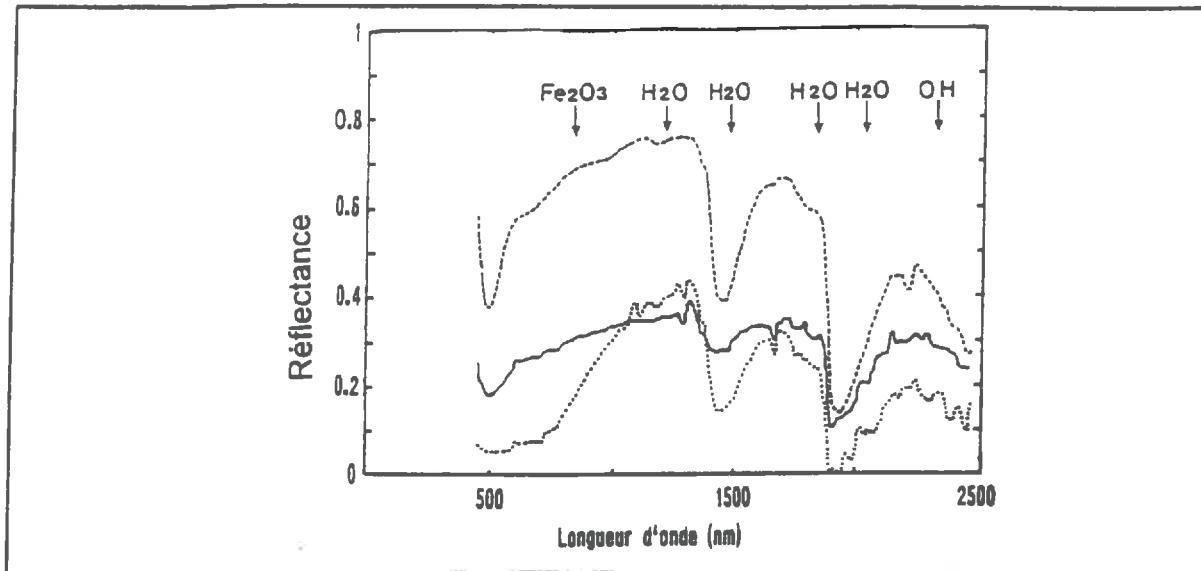


Figure 5 : Effet de la diffusion pour trois sols différents: (—) sol argileux, (....) terreau, (---) sable (d'après Jacquemoud, 1992)

C'est la variation d'indice de réfraction observée entre les particules, l'air et l'eau qui provoque, à la surface, une diffusion de premier ordre du rayonnement. Notons qu'il existe également une diffusion multiple du rayonnement entre les particules constituant le sol.

La rugosité de la surface, créée par l'agencement des particules entre elles rend sensible plus particulièrement les données radiométrique aux effets directionnels (Huete *et al.*, 1985; Jacquemoud, 1992). Cette sensibilité s'explique par l'interception du rayonnement incident par les particules superficielles, autrement dit par la formation de zones d'ombre. L'angle zénithal du soleil et la granulométrie apparaissent ainsi comme des facteurs prépondérants dans la formation de la surface d'ombre. Cette surface d'ombre présente une direction privilégiée. De ce fait, la perception relative des surfaces éclairées et correspondant à l'ombre dépend essentiellement des angles azimutaux et zénithaux du soleil et du capteur. Lorsque le soleil et le capteur sont alignés par rapport à la cible, la surface d'ombre est nulle et la réflectance bidirectionnelle est maximale (Guyot, 1995). Cette position de rétro-diffusion est encore appelée position du "hot spot".

Par ailleurs, il existe des cas de réflexion spéculaire importante, comme par exemple dans certaines surfaces désertiques (Deering *et al.*, 1990).

1.2.2. Les modèles de propriétés optiques des sols

Les travaux de modélisation des propriétés optiques des sols sont rares et plus particulièrement ceux sur les propriétés spectrales.

Ishida *et al.* (1991) proposent un modèle analytique dans lequel la partie complexe de l'indice de réfraction est corrélée avec le contenu chimique. Ishida et Price (1996) développent une formulation plus empirique du modèle précédent. En se limitant au cas de sols secs, la sensibilité au contenu biochimique n'apparaît plus aussi bonne, avec cette nouvelle formulation. Bach et Mauser (1994) développent un modèle de propriétés spectrales en se basant sur la réflexion du rayonnement par l'eau qui enrobe les particules du sol ainsi que sur l'absorption par l'eau du sol. Ce simple modèle permet de déduire les propriétés spectrales d'un sol humide à partir des propriétés spectrales du sol sec en donnant une bonne correspondance entre les spectres simulés et mesurés.

Les modèles de propriétés directionnelles sont beaucoup plus courants. Cierniewski (1987 et 1989) obtient de bonnes simulations en considérant le sol constitué par des particules sphériques. Escadafal (1989) confirme l'hypothèse de variation de la réflectance selon le rapport des surfaces d'ombres et illuminées. Les valeurs de réflectance apparaissent toujours inférieures aux valeurs mesurées, ce qui suggèrent de prendre en compte les diffusions multiples créées par les particules. Ces diffusions multiples sont prises en compte dans les modèles dérivés des équations du transfert radiatif. Le modèle de Hapke (1981, 1984) constitue une solution approchée de l'équation de transfert radiatif. Jacquemoud *et al.* (1992) utilisent le modèle de Hapke en séparant dans la formulation les composantes spectrales et directionnelles. Ce modèle permet de simuler les propriétés directionnelles d'un sol à partir de 6 paramètres. Liang et Townshend (1996) proposent un modèle simple de transfert radiatif de sol qui prend en compte les effets de la composante diffuse du rayonnement incident.

1.2.3. Propriétés optiques des sols : conclusion

Cette partie nous a permis de mettre en évidence le rôle de la structure du sol dans la diffusion simple ou multiple et de la composition chimique, principalement l'eau, dans l'absorption du rayonnement. Nous avons également constaté que les sols présentent des propriétés directionnelles engendrées principalement par la rugosité de surface des particules.

Notons qu'actuellement, aucun modèle ne permet de prendre en compte tous les facteurs de variations des propriétés optiques du sol pour simuler des spectres de réflectance. Néanmoins il existe des concepts simples comme celui de Bach et Mauser (1994) pour simuler les propriétés spectrales d'un sol à partir d'un minimum de paramètres.

Attachons-nous maintenant à montrer la complexité du signal véhiculé par le rayonnement réfléchi par le couvert végétal, c'est-à-dire l'ensemble végétation-sol.

1.3. La réflectance du couvert végétal

Lorsqu'un capteur vise un couvert végétal, deux surfaces relatives sont observables, celles de la végétation et du sol. Nous ne prendrons pas en compte l'effet radiométrique des branches et du tronc qui peut être considéré comme négligeable.

Nous analyserons, dans un premier temps, l'influence des facteurs internes ou externes au couvert sur sa réflectance. Nous finirons cette section en présentant quelques types modèles de transfert radiatif de couvert végétal.

1.3.1. Les facteurs internes

Trois types de facteurs internes doivent être considérés pour expliquer les modifications des propriétés optiques du couvert : les propriétés spectrales du sol, les propriétés spectrales des feuilles et l'effet de la structure du feuillage.

1.3.1.1. L'influence des propriétés spectrales des sols

L'influence des propriétés spectrales du sol, due au contenu en eau et à la diffusion simple, se fait sentir particulièrement lorsque la végétation est rare ou peu développée. Dans ce cas, les niveaux de réflectance mesurés dans le moyen infrarouge sont assez élevés en comparaison de la réflectance dans le proche infrarouge.

1.3.1.2. L'influence des propriétés spectrales des feuilles

Comme cela a été vu précédemment, les propriétés spectrales des feuilles sont dépendantes de la composition biochimique et de la structure cytologique. Ces effets spectraux sont transposables aux propriétés spectrales du couvert et illustrés par l'analyse de sensibilité effectuée par Jacquemoud et Baret (1994) (figure 6). Une augmentation de l'indice de structure de la feuille se traduit par une augmentation de la réflectance particulièrement dans le proche infrarouge. L'effet d'une augmentation des teneurs biochimiques, surtout en eau, diminue sensiblement la réflectance dans le moyen infrarouge mais également dans le proche infrarouge.

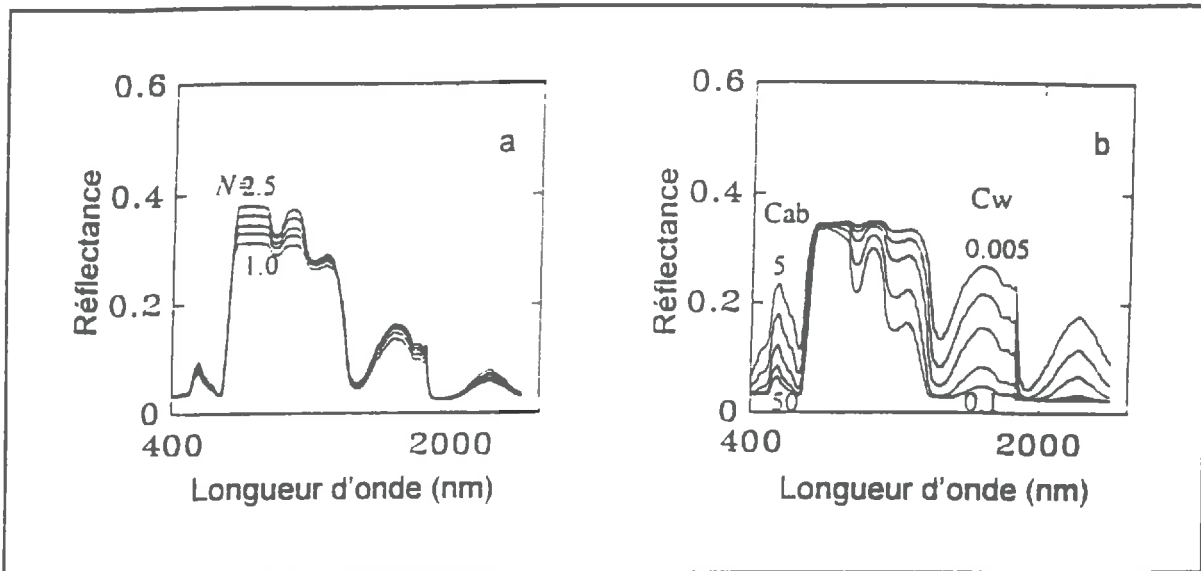


Figure 6 : Analyse de sensibilité de la réflectance du couvert végétal aux propriétés optiques des feuilles (N = indice de structure des feuilles; Cab = teneur en chlorophylle; Cw = teneur en eau) (d'après Guyot, 1995)

1.3.1.3. La structure du feuillage

La taille et l'organisation spatiale des feuilles répond à des règles propres à chaque espèce. L'organisation foliaire est souvent caractérisée par deux critères, qui sont l'indice foliaire et l'angle d'insertion des feuilles.

- La taille des feuilles

La taille relative des feuilles, affecte la distribution angulaire de la réflexion du couvert végétal en modifiant la probabilité d'échappement du rayonnement dans le couvert selon la direction de rétrodiffusion (Kuusk, 1991c). Ce phénomène affecte principalement la diffusion de premier ordre. Plus la taille des feuilles est petite par rapport à celle du couvert, plus le pic de rétro-diffusion est étroit et centré autour de la direction du rayonnement incident.

- L'indice foliaire (Leaf Area Index)

L'indice foliaire est la mesure de la surface foliaire cumulée de la base à la cime du feuillage par unité de surface au sol. Cet indice varie habituellement entre des valeurs proches de zéro (début du développement des végétaux ou végétation dispersée) à des valeurs maximales comprises habituellement entre 8 et 10. L'augmentation de l'indice foliaire diminue la contribution du sol. Elle contribue aussi à augmenter la diffusion et l'absorption par les feuilles, ce qui se traduit par des niveaux de réflectance respectivement forts et faibles dans le proche et moyen infrarouge. Pour les faibles valeurs, les propriétés optiques du

couvert correspondent essentiellement à celles du sol. Dans ce dernier cas, l'information biochimique de la végétation présente est faible, comparativement à l'information totale.

• L'angle d'inclinaison des feuilles

L'angle d'inclinaison des feuilles affecte la surface d'interception du rayonnement mais aussi le taux de couverture au sol. En raison de la variabilité d'angle d'inclinaison des feuilles, dépendant de l'espèce végétale, De Wit (1965, cité par Bunnik, 1978) propose 4 classes selon la fonction de distribution de l'angle d'inclinaison foliaire correspondant à la majorité des feuilles du couvert :

- planophylles : feuilles majoritairement horizontales;
- erectophylles : feuilles majoritairement verticales;
- plagiophylles : feuilles majoritairement inclinées;
- extremophylles : feuilles verticales ou horizontales.

Pour un soleil situé au nadir, la surface interceptrice du rayonnement et la couverture végétale au sol sera maximale pour des feuilles planophylles et minimale pour des feuilles erectophylles.

La sensibilité de la réflectance du couvert végétal à l'indice foliaire et à l'angle d'inclinaison des feuilles est forte.

La figure 7 illustre la sensibilité de la réflectance d'un couvert végétal pour différentes valeurs de l'indice foliaire et l'angle d'inclinaison (Baret et Jacquemoud, 1994).

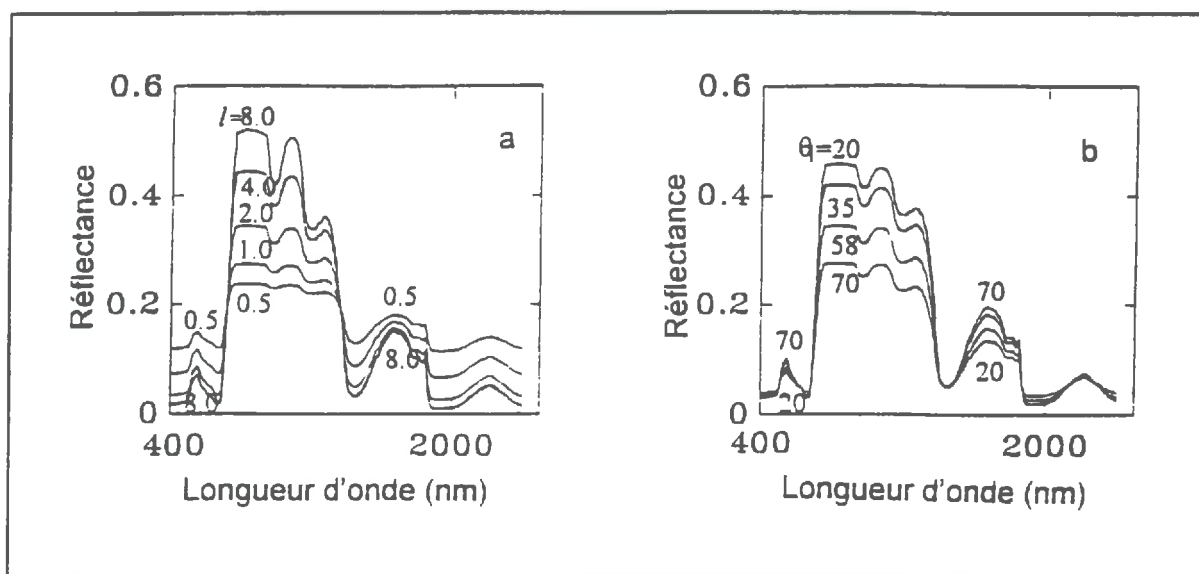


Figure 7 : Analyse de sensibilité de la réflectance d'un couvert végétal à l'indice de végétation et à l'angle d'inclinaison des feuilles (l = indice foliaire; θ = angle d'inclinaison des feuilles) (d'après Guyot, 1995)

1.3.2. Les facteurs externes au couvert végétal

Nous nous limiterons à la sensibilité des propriétés directionnelles à la géométrie soleil-couvert-capteur.

La valeur mesurée de réflectance bi-directionnelle est affectée par la géométrie de la mesure. D'une part, selon la position du capteur, le rapport des surfaces observées, illuminées et ombrées, est très variable. D'autre part, le couvert végétal ne présente pas un comportement lambertien. La réflectance bi-directionnelle mesurée varie donc selon la hauteur du soleil et l'angle azimutal soleil-capteur. Cette réflectance bi-directionnelle tend à être maximale dans la configuration géométrique correspondant au hot-spot, c'est-à-dire quand le soleil et le capteur sont alignés par rapport au couvert (Guyot, 1995).

1.3.3. Les modèles de propriétés optiques du couvert

Dans cette partie, nous présentons certains types de modèles de transfert radiatif des couverts végétaux classés en 4 catégories (Goel, 1988).

- Les modèles en milieu diffusant

Pour ce type de modèle, le couvert végétal est assimilé à des particules absorbantes et diffusantes disposées en couches horizontales parallèles et réparties selon des lois de distribution données. Certains modèles se basent directement sur les équations du transfert radiatif (Myneni *et al.*, 1987; Verstraete *et al.*, 1990; Pinty *et al.*, 1990; Gao, 1993). D'autres sur l'approximation du transfert radiatif par les équations de Kubelka-Munk (Allen *et al.*, 1970; Suits, 1972; Verhoef, 1984, 1985; Zagolski, 1994).

- Les modèles géométriques

Les éléments du couvert végétal sont assimilés à des objets géométriques simples (cylindre, ellipsoïdes, sphères, cônes) posés sur le sol. Ces objets sont disposés entre eux de façon bien définie et possèdent chacun des propriétés optiques connues. On peut citer, par exemple, les travaux de Otterman et Weiss (1984).

- Les modèles hybrides

Ces modèles sont basés sur une description du couvert en formes géométriques simples, elles mêmes diffusantes et homogènes, par exemple des cylindres (Bégué, 1992), des cubes (Arkin *et al.*, 1978) ou encore des ellipsoïdes (Norman et Welles, 1983).

- Les modèles de lancer de rayon

Grâce au développement des moyens informatiques de calcul, il existe maintenant des modèles simulant particulièrement bien les propriétés optiques des couverts végétaux. Ces modèles tridimensionnels sont basés sur une description très fine de la végétation et utilisent les techniques du lancer de rayon pour simuler le comportement optique du rayonnement (Kimes, 1984; Dauzat, 1993, Govaerts, 1996).

1.3.4. La réflectance du couvert végétal : conclusion

En conclusion de cette partie, nous avons identifié un certain nombre de paramètres pouvant altérer l'interprétation de la réflectance du couvert végétal en composition biochimique foliaire. Nous nous baserons sur Sinoquet *et al.* (1993) pour résumer les facteurs intervenant dans les propriétés optiques des couvert :

- le rayonnement incident, défini globalement par la position du soleil (hauteur et angle azimutal) et la position du capteur;
- la géométrie du couvert végétal;
- et enfin les propriétés optiques de la végétation et du sol sous-jacent.

Parmi les modèles de propriétés optiques cités, certains apparaissent relativement simples et précis tout en nécessitant un nombre très réduit de paramètres d'entrée. C'est le cas du modèle SAIL (Verhoef, 1984 et 1985), qui est très largement utilisé et particulièrement efficace pour la simulation des propriétés optiques des couverts homogènes.

La valeur de la réflectance directement mesurée au dessus du couvert et celle mesurée par un capteur satellitaire sont différentes. Cette différence correspond à l'effet de l'atmosphère sur le signal réfléchi par le couvert végétal. La description de cet effet constitue le sujet de partie suivante.

1.4. L'interaction du rayonnement avec l'atmosphère

Dans un premier temps, une brève description de l'atmosphère sera faite, puis nous présenterons les processus physiques d'interaction du rayonnement avec celle-ci. Enfin nous montrerons ses effets sur le signal réfléchi par le couvert.

1.4.1. Description de l'atmosphère

L'atmosphère est décomposée en un ensemble de 6 couches gazeuses situées entre le vide stellaire et la surface terrestre. Chaque couche présente des caractéristiques physiques différentes. On distingue la troposphère (0-11km) où se passe l'essentiel des perturbations atmosphériques. On retrouve à ce niveau l'eau, le dioxyde de carbone, les nuages, le brouillard et les aérosols. Au dessus, se trouve la stratosphère (11-50km), zone caractérisée par un gaz : l'ozone qui maintient la vie sur terre en absorbant le rayonnement ultraviolet. Au delà, se situe la mésosphère (50-90km) suivie par la ionosphère et enfin la thermosphère et l'exosphère.

1.4.2. Les processus physiques d'interaction du rayonnement avec l'atmosphère

La nature gazeuse et la présence de particules dans l'atmosphère modifient, par diffusion et absorption, le rayonnement solaire ainsi que le rayonnement réfléchi par le couvert végétal.

1.4.2.1. L'absorption

L'absorption par les aérosols est très faible en comparaison de celle due aux gaz (Gu, 1991). Par conséquent, nous nous attacherons à décrire l'absorption des gaz, qui est associée à des mécanismes résonnants de vibration et rotation.

On peut classer les gaz atmosphériques en deux catégories selon leurs distributions spatiales et temporelles :

- la première catégorie est constituée de gaz présentant des distributions spatiales et temporelles stables pour une altitude donnée. Ce sont l'oxygène, le dioxyde de carbone, le méthane et l'oxyde de diazote;
- la seconde catégorie est représentée par l'eau et l'ozone. La distribution de ces gaz est dépendante de la période de l'année et de la localisation géographique.

L'eau atmosphérique est le composé qui absorbe majoritairement dans le proche et le moyen infrarouge. Cette absorption, avec celles correspondantes aux autres gaz, est telle que pour certaines longueurs d'onde (1300 et 1400 nm, 1800 et 1900 nm, 2400 et 2900 nm), le rayonnement est complètement absorbé. Ainsi les gammes spectrales pour lesquelles les photons atteignent la surface terrestre sont discontinues et forment des "fenêtres

atmosphériques". Les fenêtres atmosphériques sont représentées par le coefficient de transmission gazeuse de l'atmosphère, correspondant à une visée verticale (figure 8).

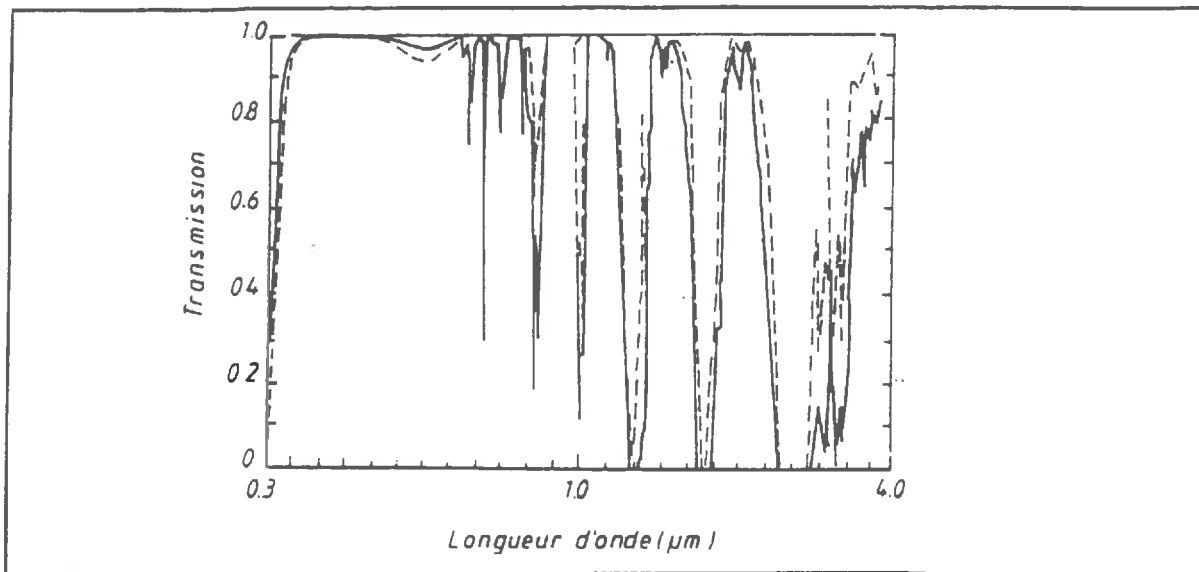


Figure 8 : Coefficient de transmission gazeuse de l'atmosphère pour l'hiver tropical (d'après Tanré *et al.*, 1986)

Les gaz particulièrement absorbants (eau, dioxyde de carbone, etc) ainsi que les aérosols se situent majoritairement dans la troposphère. C'est au niveau de cette couche atmosphérique que se passe l'essentiel de l'interaction avec le rayonnement réfléchi par le couvert végétal.

1.4.2.2. La diffusion

Les aérosols atmosphériques sont par leur dimension des éléments diffusants. On distingue néanmoins, selon la taille des éléments, deux types de diffusion.

- La diffusion de Rayleigh concerne les molécules car elles sont de taille très inférieure à celles de la longueur d'onde. Son intensité décroît selon la puissance quatrième de la longueur d'onde. Sa direction est préférentiellement orientée en avant et en arrière par rapport au sens de propagation du rayonnement incident.

- La diffusion de Mie concerne les aérosols qui ont une dimension comparable à celle de la longueur d'onde. Son intensité est inverse de la longueur d'onde. Elle se trouve préférentiellement orientée dans la direction du rayonnement. On caractérise la diffusion de Mie par une épaisseur optique en aérosols et une fonction de phase qui définit la probabilité de diffusion dans une direction donnée (Deschamps *et al.*, 1983)

1.4.3. Les effets de l'atmosphère sur le rayonnement

Le rayonnement qui atteint le détecteur du capteur ne correspond pas uniquement au signal réfléchi par le couvert végétal. Il correspond à la somme de ce rayonnement et d'un rayonnement "parasite" engendré par les effets optiques de l'atmosphère, à 2 niveaux, celui de la surface terrestre et celui du satellite (Vermote *et al.*, 1994).

- Au niveau du couvert végétal

En premier lieu, le rayonnement est atténué par l'absorption atmosphérique partiellement et globalement selon le domaine spectral. Les phénomènes de la diffusion atmosphérique sont également très importants. Le couvert végétal peut être atteint par un rayonnement correspondant à une diffusion simple ou multiple.

- Au niveau du capteur

Le rayonnement réfléchi par le couvert est atténué par absorption. On constate également l'effet de la diffusion simple et multiple.

Ces effets de l'atmosphère sont illustrés dans la figure 9.

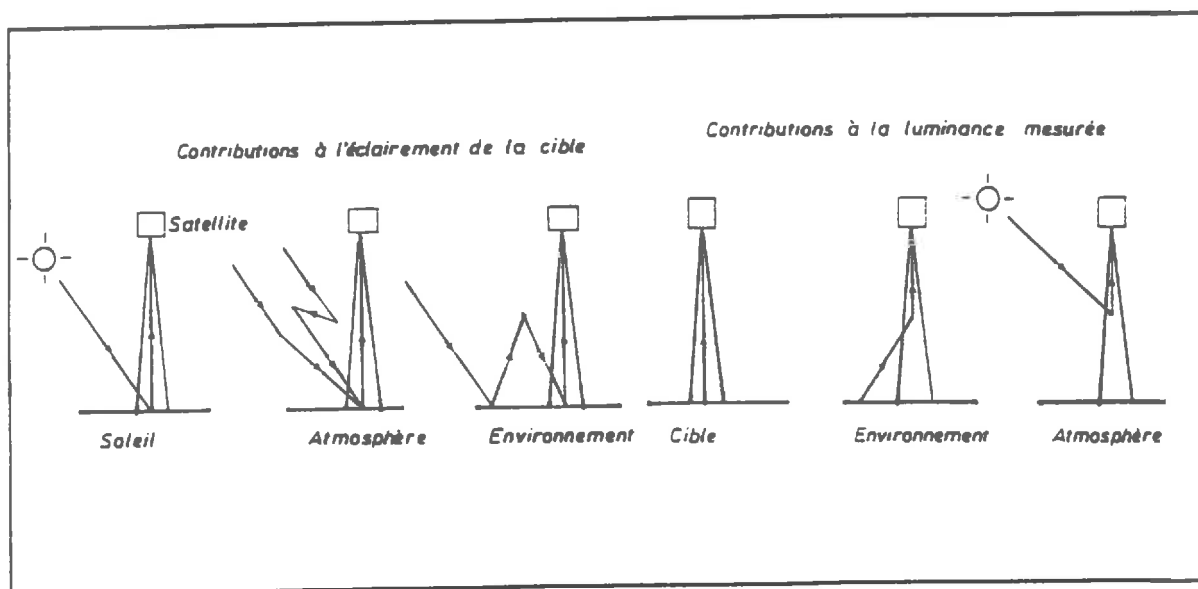


Figure 9 : Effets atmosphériques aux niveaux de la surface et du capteur

1.4.4. L'interaction du rayonnement avec l'atmosphère : conclusion

L'atmosphère apparaît comme excessivement importante pour deux raisons.

D'une part, sa composition modifie le rayonnement incident qui n'atteint la surface terrestre uniquement que pour certains domaines spectraux. Par conséquent, seule l'information

correspondant à ces domaines spectraux est exploitable pour interpréter les données satellitaires. D'autre part, le rayonnement mesuré par le satellite est perturbé par les phénomènes d'absorption et de diffusion atmosphériques.

Ces effets contribuent de façon générale à limiter spectralement l'information biochimique du couvert.

Il reste maintenant à prendre en compte les effets liés au capteur, qu'il soit au niveau du laboratoire, à quelques mètres au dessus du couvert végétal, aéroporté ou satellitaire.

1.5. Les effets du capteur

Le capteur transforme le rayonnement reçu en valeurs numériques exploitables. Il est composé de trois éléments (Guyot, 1996) :

- le système optique, qui collimate et filtre ou disperse le rayonnement avant qu'il n'atteigne les détecteurs;
- le système de détection, qui transforme l'intensité du rayonnement en un signal électrique;
- et le système de traitement du signal qui convertit le signal analogique en signal digital, qui peut de plus être compressé pour réduire les débits de données.

Nous présenterons donc les effets respectifs du bruit instrumental et de l'intégration spectrale.

1.5.1. La résolution radiométrique

Le premier type de perturbation concerne les détecteurs photo-électriques ou à technologie CCD qui présentent un bruit. La carte analogique-numérique de la chaîne de traitement introduit également un bruit par les erreurs de quantification du courant électrique.

Ces différents bruits sont considérés comme aléatoires et de distribution normale. Pour chaque détecteur, les bruits sont quantifiés par un écart-type (σ). Cet écart-type définit la résolution radiométrique du capteur. Différentes techniques de filtrage du bruit peuvent être utilisées dans une phase de pré-traitement des données numériques. Cependant, ces techniques risquent de lisser également l'information contenue dans les spectres. Aussi, seuls des choix technologiques à la conception du capteur permettent de minimiser le niveau de bruit des détecteurs.

A chaque gamme spectrale correspond un type de détecteur. De ce fait, la valeur numérique finale de la réflectance s'exprime de la façon suivante :

$$R_{final}(\lambda) = R(\lambda) + N(0,1) \cdot \sigma(\lambda)$$

avec R_{final} la valeur disponible, R la valeur à l'entrée du capteur, N la fonction normale et σ le niveau de bruit correspondant au détecteur.

1.5.2. La résolution spectrale

Au niveau d'un capteur aéroporté ou satellitaire et pour une longueur d'onde donnée, le nombre de photons qui touchent le détecteur est excessivement faible. Pour éviter ce problème, les photons correspondant aux longueurs d'onde voisines de la longueur d'onde donnée sont également comptés pour arriver à un seuil détectable et exploitable. La largeur spectrale autour de la longueur d'onde donnée définit la résolution spectrale du détecteur.

La réflectance dans une bande spectrale λ s'exprime donc selon la formule suivante :

$$Rf(\lambda) = \frac{\int_{i=-n}^{i=n} S(\lambda) \cdot R(\lambda) \cdot d\lambda}{\int_{i=-n} S(\lambda) \cdot d\lambda}$$

où Rf est la réflectance finale, n le nombre de bandes autour de la longueur d'onde donnée, S est la sensibilité du capteur, R la réflectance avant intégration spectrale. La sensibilité du capteur est souvent comparée à une fonction gaussienne.

La prise en compte de la résolution spectrale est importante pour extraire l'information sur le couvert végétal car elle tend à lisser l'information spectrale. Par conséquent, les pics d'absorption des composés biochimiques foliaires, déjà très atténués par les facteurs que nous avons vu précédemment, tendent à être lissés.

1.5.3. Les effets du capteur : conclusion

La quantification du rayonnement réfléchi collecté par le capteur n'est pas idéale. Le bruit instrumental des détecteurs qui dépend de la longueur d'onde est donc une caractéristique technologique très importante quant à la qualité de l'interprétation des réflectances "au

sommet de l'atmosphère". Un autre type d'erreur provient de la résolution spectrale du capteur qui lisse l'information spectrale.

1.6. Des propriétés optiques d'un matériel végétal à la biochimie, éléments théoriques et approches actuelles : conclusion

Au niveau de la feuille et *a fortiori* au niveau du couvert végétal, un certain nombre de facteurs participent à l'élaboration de la réflectance dans les gammes du proche et du moyen infrarouge. Ces facteurs, et les relations complexes les reliant, sont susceptibles de rendre plus difficile l'interprétation de l'information biochimique véhiculée par la réflectance du couvert, dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge. Cette première partie nous a permis de dégager un certain nombre de facteurs que nous devons prendre en compte pour répondre à nos objectifs. Ces facteurs concernent la feuille, le sol, le couvert, l'atmosphère et le capteur et peuvent être regroupés en 5 classes (figure 10) :

- la géométrie de mesure (position du soleil et du capteur);
- les caractéristiques techniques du capteur;
- les propriétés optiques de l'atmosphère;
- la géométrie du couvert végétal;
- les propriétés optiques du feuillage et du sol.

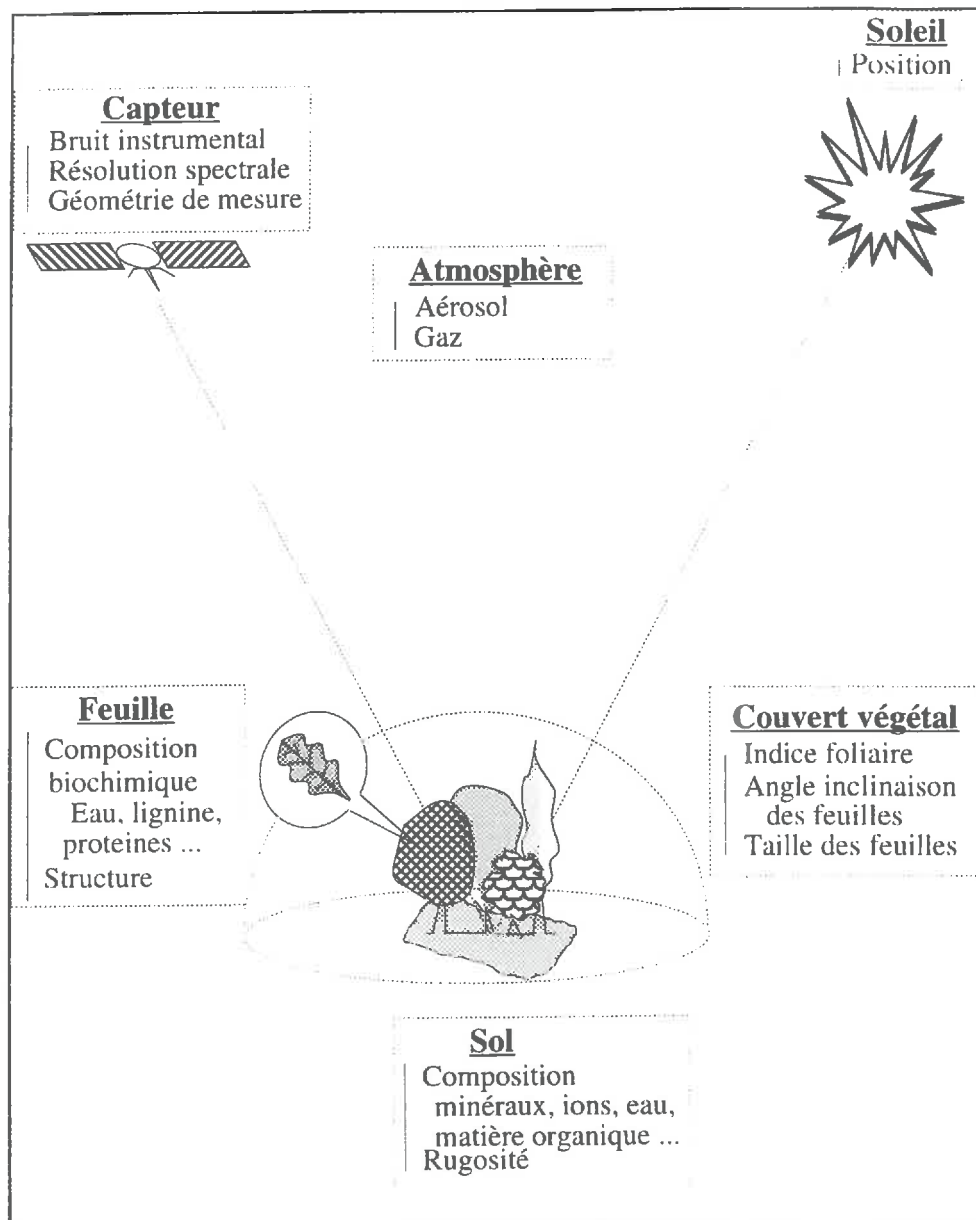


Figure 10 : Récapitulatif des paramètres à utiliser pour les deux objectifs

Dans la seconde partie de ce chapitre, nous allons nous attacher à préciser les différentes approches utilisées pour l'estimation de contenu biochimique d'un matériel végétal à partir de données haute résolution spectrale.

2. Utilisation de la radiométrie pour estimer le contenu biochimique d'un matériel végétal : un état de l'art

Les techniques d'interprétation des données radiométriques pour l'estimation du contenu biochimique des feuilles ont fait l'objet de nombreuses recherches. Les méthodes utilisées furent tout d'abord empiriques pour leur simplicité de mise en oeuvre. Par la suite, une meilleure connaissance des processus d'interaction entre le rayonnement et la matière a permis de développer des techniques d'interprétation basées sur des approches semi-analytiques ou analytiques.

Dans cette partie, nous envisageons l'évolution de ces méthodes d'interprétation en examinant les résultats obtenus pour chaque niveau d'organisation des végétaux, de la feuille au couvert végétal. Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, les composés qui nous intéressent (lignine, protéines, cellulose, eau, etc) absorbent dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge. Par conséquent, nous nous limiterons aux travaux utilisant ces domaines spectraux.

2.1. Les modèles empiriques d'estimation du contenu biochimique d'un matériel végétal

La technique la plus largement utilisée est incontestablement (et reste) la régression multi-linéaire. L'avantage de cette technique est qu'elle ne nécessite aucune connaissance a priori sur les processus physiques de l'absorption du rayonnement par les composés biochimiques. Son principe se décompose en deux étapes.

- La première étape consiste à étalonner le modèle sur des échantillons de référence. Il s'agit de relier linéairement, par un algorithme de régression, une teneur biochimique à des mesures radiométriques, brutes ou transformées, à une sélection de certaines longueurs d'onde. Le critère de sélection des longueurs d'onde est en général la corrélation maximale entre le contenu biochimique et la valeur radiométrique des longueurs d'onde utilisées. Le modèle générique obtenu est de la forme suivante :

$$y = \sum_{i=1}^{i=n} a_i X_i + \varepsilon$$

où y est la teneur mesurée, a_i les coefficients de la régression pour les n bandes spectrales utilisées, X_i les valeurs radiométriques et ε l'erreur résiduelle du modèle.

- La deuxième étape consiste à valider ce modèle sur des échantillons d'un jeu de données indépendant pour tester la robustesse des estimations.

Finalement, la qualité des estimations obtenues pour les échantillons d'étalonnage et de validation est mesurée par différents critères tels que le coefficient de détermination (R^2) ou la racine de la moyenne du carré des erreurs (RMSE).

La précision des estimations issues de ces modèles linéaires peut être améliorée par un pré-traitement des données radiométriques.

- Un pré-traitement classique consiste à transformer la transmittance en équivalent absorbance (Marten *et al.*, 1989). En effet, selon la loi de Beer-Lambert, la transmittance est une forme exponentielle de l'absorbance, elle-même linéairement reliée à la composition biochimique :

$$A(\lambda) = -\log(T(\lambda)) = K(\lambda).C$$

avec A l'absorbance, T la transmittance, C le contenu biochimique et K une constante dépendante de la longueur d'onde.

Cette transformation tend à linéariser la relation entre les valeurs radiométriques et la biochimie, linéarité qui est une condition d'application du modèle linéaire. Cependant, mesurer la transmittance n'est pas toujours possible. Pour cette raison, la réflectance est considérée souvent comme homologue de la transmittance, ce qui permet le calcul d'une absorbance équivalente. Ce pré-traitement est utilisé quel que soit le niveau d'organisation du matériel végétal.

• Un autre type de pré-traitement communément employé consiste à dériver les spectres. Selon Hruschka (1987), cette technique tend à résoudre les deux problèmes principaux de la spectrométrie infrarouge en :

- contrastant des caractéristiques d'absorption qui se chevauchent;
- annulant la variabilité inter-échantillon de la ligne de base spectrale.

Seules les dérivées premières et secondes sont habituellement utilisées mais la capacité de séparation des pics d'absorption est meilleure avec la dérivée seconde (Hruschka, 1987). Les longueurs d'onde correspondant aux minima des dérivées secondes indiquent les pics d'absorption dus aux liaisons électroniques du matériel foliaire. Cette technique tendant à contraster le signal biochimique du reste de l'information, les bandes sélectionnées par l'algorithme de régression sont supposées représentatives d'une information biochimique. Cependant, elle présente le risque de contraster également le bruit instrumental et d'induire la sélection de bandes n'ayant aucun sens biochimique.

Nous avons dit précédemment que l'algorithme de régression sélectionnait des longueurs d'onde lors de l'ajustement du modèle. Or l'influence de la résolution spectrale des spectromètres (cf. 1.1) dans ce type d'application n'est pas en théorie négligeable. Pour un spectromètre présentant une large résolution spectrale, la valeur mesurée correspond à une information radiométrique moyenne. De ce fait, une telle résolution spectrale tend à diminuer la sensibilité à l'information biochimique de certaines bandes. Rappelons qu'actuellement, seuls certains spectromètres de laboratoire disposent d'une résolution spectrale de l'ordre du nanomètre.

Les valeurs radiométriques d'un matériel foliaire (d'une épaisseur optique non infinie) se rapportent à la surface mesurée de ce matériel. L'unité de quantification biochimique correspond ainsi à une teneur, c'est-à-dire une masse par unité de surface. Or comme nous le verrons par la suite, dans la très grande majorité des études basées sur l'approche empirique, les modèles donnent des estimations de concentration (g.g^{-1}). Cet abus, quant aux unités, peut s'expliquer par l'absence de base physique dans ce type d'approche.

Après ce bref rappel, voyons quelles furent les premières utilisations de cette technique d'estimation du contenu d'un matériel biochimique d'origine végétal.

2.1.1. Spectrométrie infrarouge et estimation du contenu biochimique d'un matériel végétal : premiers travaux

Les premiers travaux sur l'utilisation de la spectrométrie infrarouge comme outil d'estimation du contenu biochimique d'un matériel végétal étaient motivés par l'étude de la digestibilité des fourrages.

Les travaux de Akin *et al.* (1975), Barton et Akin (1977) et Barton *et al.* (1981) (cités par Peterson, 1991) sont considérés comme les premiers dans ce domaine. Pour rendre standard les conditions de mesure et éliminer au maximum les facteurs pouvant biaiser les estimations, les échantillons de fourrage à analyser sont systématiquement desséchés et réduits en poudre. Grâce à la technique de régression linéaire appliquée aux spectres de réflectance, des modèles d'estimation de l'"acid detergent fiber" (ADF), de l'extrait protéique et de la matière sèche ont été développés. Les résultats montrent une très bonne reproductibilité ainsi qu'une précision des estimations comparable à celle des dosages chimiques classiques. On peut également citer les travaux de Rabotnikof *et al.* (1995) et Reeves III *et al.* (1991).

D'autres composés peuvent être estimés avec précision par spectrométrie infrarouge :

- l'azote (Hellemans *et al.*, 1990; Biston et Dardenne, 1985; Downey *et al.*, 1989; Korcak *et al.*, 1987);
- la lignine (Rabotnikof *et al.*, 1995; Reeves III, 1988);
- la cellulose (Reeves III, 1988; Biston et Dardenne, 1985).

Il est intéressant de préciser que dans la majorité des travaux ci-dessus, la résolution spectrale des spectromètres employés n'est pas mentionnée.

La technique de spectrométrie infrarouge donne donc de très bons résultats au laboratoire dans des conditions bien contrôlées et standard avec l'avantage de fournir une estimation très rapide pour un coût financier relativement faible.

Examinons maintenant comment ce type d'approche a été utilisé pour estimer le contenu biochimique des litières et feuilles.

2.1.2. Les applications au niveau de la litière et des feuilles sèches

Nous envisageons ici dans un ordre chronologique les principaux travaux effectués sur du matériel végétal dégradé ou sec provenant généralement d'écosystèmes forestiers.

Avant d'appliquer la technique de régression, les échantillons sont séchés puis réduits en poudre comme pour les fourrages. Wessman *et al.* (1988b) obtiennent ainsi de bons résultats pour estimer la concentration en azote et en lignine d'aiguilles de conifères, avec une précision comparable à celle des techniques classiques de dosage biochimique. Card *et al.* (1988), Peterson *et al.* (1988), Martin and Aber, (1990), Mac Lellan *et al.* (1991), Joffre *et al.* (1992) appliquent aussi cette technique sur différents matériaux d'origine foliaire et obtiennent de bons résultats. Il faut préciser que la résolution spectrale des spectromètres utilisés dans ces travaux est en général de l'ordre de 10 nm mais avec un pas d'échantillonnage spectral proche de 2 nm. Ceci peut paraître étonnant car dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge, les valeurs radiométriques correspondant à des longueurs d'onde différentes de 2 nm sont extrêmement corrélées. Aussi, utiliser un tel pas de sur-échantillonnage tend à réduire l'information pertinente, ce qui se traduit par une diminution des performances des modèles. Néanmoins, la précision est telle que les modèles d'estimation des concentrations en protéine, lignine et amidon des feuilles sèches proposés par l'USDA (U.S. Department of Agriculture) sont maintenant certifiés et communément utilisés en routine (Williams et Norris, 1987).

Parallèlement, Williams et Norris (1987) et Himmelsbach *et al.* (1988) identifient les bandes caractéristiques de l'absorption des liaisons moléculaires des composés biochimiques foliaires. Ces longueurs d'onde servent désormais de référence pour tenter de donner une signification physique aux longueurs d'onde sélectionnées par la régression. Plus récemment, par l'étude des corrélations des réflectances de feuilles entre les gammes spectrales du proche et du moyen infrarouge, Barton *et al.* (1992) confirment la position des bandes harmoniques d'absorption dans ces domaines spectraux. Cet important résultat montre que l'information biochimique foliaire peut être considérée comme distribuée dans toute la gamme spectrale du proche et moyen infrarouge. Par conséquent, il rend légitime l'utilisation de l'approche empirique dans ces deux gammes spectrales.

Cette brève synthèse montre l'intérêt de cette technique dans le cas des feuilles sèches. Néanmoins certaines limites importantes demeurent (Curran, 1989), comme par exemple :

- l'instabilité de la sélection des bandes selon le choix du jeu d'étalonnage;
- la difficulté d'interprétation physique des bandes sélectionnées;
- les effets du sur-échantillonnage du jeu d'étalonnage dans la qualité des estimations.

En conclusion, même si l'approche empirique a permis d'obtenir de bons résultats dans des conditions standard, les limites constatées obligent cependant à une très grande prudence.

Dans la partie suivante, nous présenterons l'efficacité de cette technique lorsqu'elle est appliquée à des feuilles fraîches.

2.1.3. Les applications au niveau de la feuille fraîche

Dans ce cas, il n'est plus possible de définir des conditions standard de mesure radiométrique aussi strictes que pour le matériel sec. Par conséquent, appliquer la technique empirique sur ce matériel intact suppose que l'algorithme de régression est capable d'identifier les longueurs d'onde sensibles aux absorbants mineurs malgré l'absorption par l'eau et la diffusion. On voit là l'avantage des prétraitements qui permettent de contraster l'information biochimique des absorbants mineurs et de l'eau par rapport au reste. Cela explique pourquoi, dans la plupart des travaux cités, les données radiométriques sont prétraitées.

Les premières études ont donné des résultats assez médiocres, comme le montrent les travaux de Peterson *et al.* (1988) pour l'estimation de la concentration en lignine d'aiguilles de conifères. Plutôt que d'ajuster un modèle à partir d'échantillons frais, Martin et Aber (1990) regardent si l'information biochimique est cohérente entre les spectres des feuilles sèches et fraîches. Pour cela, des modèles de contenu biochimique de feuilles sèches sont ajustés et appliqués directement (coefficients et longueurs d'onde) sur les spectres des feuilles fraîches. Par cette approche inhabituelle, les estimations de concentration en lignine, azote et cellulose des feuilles fraîches semblent bonnes. Néanmoins de bons résultats sont obtenus également à partir de modèles ajustés directement sur du matériel frais. Curran *et al.* (1992) publient de bonnes estimations de concentrations en amaranthine et en amidon sur des feuilles d'*Amaranthus*, malgré l'influence de l'eau. Pour l'érable, Yoder et Pettigrew-Crosby (1995)

estiment très correctement les concentrations foliaires en azote et chlorophylle. Une autre formulation du modèle linéaire est employée par Gastellu-Etchegorry *et al.* (1995) pour estimer le contenu biochimique d'aiguilles de pin. Le modèle n'est plus considéré comme une somme pondérée de valeurs radiométriques pour certaines longueurs d'onde mais comme un rapport de réflectances, ce qui facilite la comparaison entre échantillons. Ces auteurs publient des estimations de concentration en lignine très correctes.

Jusqu'en 1995, la majorité des travaux publiés se base sur des données radiométriques provenant de spectromètres ayant des résolutions spectrales de 10 nm et un pas d'échantillonnage de 2 nm. Or, depuis 1995, la littérature montre l'utilisation de données radiométriques caractérisées par une résolution spectrale et un pas d'échantillonnage de l'ordre du nanomètre. Avec de telles données, Jacquemoud *et al.* (1995) obtiennent des estimations intéressantes de concentrations en azote, protéines et cellulose d'échantillons correspondant à de très nombreuses espèces végétales. Les estimations des concentrations de ces mêmes composés publiées par Grossman *et al.* (1994 et 1995) sont du même ordre. Cette dernière étude se singularise par deux aspects : d'une part ses auteurs obtiennent également des estimations excellentes pour les teneurs en azote, en protéines, en cellulose, en eau, et en matière sèche; d'autre part, ils montrent le danger des pré-traitements radiométriques qui peuvent engendrer des modèles très efficaces basés principalement sur du bruit.

Il est intéressant de remarquer que ces trois derniers travaux (Jacquemoud *et al.*, 1995; Grossman *et al.*, 1994 et 1995) concernent l'estimation du contenu biochimique d'espèces pluri-spécifiques, ce qui n'est habituellement pas le cas.

Au travers de ces exemples, on aura noté le développement de différentes techniques toutes basées initialement sur l'utilisation du modèle linéaire. La précision des estimations obtenues dans la majorité des cas est telle que les auteurs concluent généralement à l'efficacité de l'approche empirique. Il faut néanmoins pondérer ces résultats par le fait que rares sont les études proposant une réelle validation des modèles. En s'inspirant des longueurs d'onde publiées dans différents travaux, Grossman *et al.* (1995) montrent l'inefficacité de leur utilisation pour ajuster un modèle robuste sur un jeu de données autre que celui d'étalonnage. Curran *et al.* (1992) essaient en vain de valider leur modèle.

Par conséquent, au niveau de la feuille fraîche, la potentialité de cette technique empirique n'est pas encore prouvée. Intéressons-nous maintenant au dernier niveau d'organisation des végétaux : le couvert végétal.

2.1.4. Les applications au niveau du couvert végétal

Aux facteurs intervenant dans la construction du signal radiométrique de la feuille s'ajoutent maintenant des facteurs architecturaux du feuillage, d'effet des propriétés optiques du sol sous-jacent et enfin des facteurs atmosphériques (cf. 1.1). Le niveau du signal biochimique de la feuille se trouve très nettement affaibli par ces signaux parasites. Comme pour la feuille fraîche, ceci explique l'utilisation des techniques de pré-traitement pour séparer l'information biochimique du reste. D'un point de vue technologique, il n'existe pas actuellement de spectro-imageurs satellitaires haute résolution spectrale dans le proche et le moyen infrarouge. C'est pourquoi, nous verrons dans cette partie les principaux travaux relatifs aux spectro-imageurs aéroportés AIS, AVIRIS et GERS. La résolution spectrale de ces capteurs est en moyenne de 10 nm.

Compte-tenu de la différence technologique entre un spectromètre de laboratoire et un spectro-imageur aéroporté, il est surprenant de constater que les travaux sur l'estimation de la biochimie des couverts végétaux et des feuilles sèches en laboratoire ont débuté pratiquement simultanément. En effet, dès 1988, les premiers modèles prédictifs sont ajustés à partir des données du capteur aéroporté AIS ("Airborne Imaging Spectrometer"). Avec de telles données, Peterson *et al.* (1988) montrent la possibilité d'estimer des concentrations en eau et en amidon de feuilles de forêts boréales ou tempérées froides et chaudes. Wessman *et al.* (1988b) obtiennent des estimations correctes de la concentration en lignine d'une forêt de conifères.

Par la suite, de nombreuses études basées sur les données radiométriques du spectro-imageur AVIRIS ("Airborne Visible Infra-Red Imaging Spectrometer") sont engagées. Gao et Goetz (1990) identifient des caractéristiques spectrales correspondant à l'absorption du rayonnement par la cellulose ou la lignine d'une forêt de chênes. Matson *et al.* (1994) montrent des corrélations entre les teneurs en azote et lignine et les spectres mesurés le long d'un transect en Orégon comprenant différents types de végétation. A partir de données acquises au dessus de Harvard Forest et de Blackawk Island, deux sites de l'Est des

Etats Unis, Martin et Aber (1993) publient de très bonnes estimations des concentrations en azote, chlorophylle et lignine. De bonnes estimations des concentrations mais également des teneurs de ces mêmes composés sont obtenues par Johnson *et al.* (1994) sur le transect Orégon. Gastellu-Etchegorry *et al.* (1995) développent une approche indirecte basée sur le principe du passage de l'information biochimique entre les différents niveaux d'organisation de la matière foliaire. Pour cela, ils ajustent au préalable en laboratoire des modèles de teneurs biochimiques d'aiguilles de pins. Ces modèles sont ensuite appliqués à des données AVIRIS d'un couvert de pin. Cependant, cette technique ne fut pas suffisante pour obtenir de bonnes estimations. D'un point de vue plus théorique, Kupiec et Curran (1995) étudient l'évolution de la réponse radiométrique d'une parcelle de conifères pour différents niveaux de fertilisation avec ce spectro-imageur. Les résultats suggèrent que la variation quantitative de la biochimie foliaire induite par la fertilisation modifie les propriétés optiques des conifères.

Ces derniers résultats sont contradictoires avec ceux de Yoder et Pettigrew-Crosby (1995) qui étudient également l'effet de la fertilisation sur des parcelles d'érables mais avec le spectromètre GERS ("Geophysical Environmental Research spectrometer"). Contrairement à Kupiec et Curran (1995), les résultats de cette étude ne permettent pas d'affirmer qu'il existe un passage de l'information biochimique foliaire au niveau du couvert végétal. D'ailleurs, les estimations des concentrations et teneurs en chlorophylle et azote sont très médiocres, ce qui permet à Yoder et Pettigrew-Crosby (1995) de s'interroger sur la signification de l'approche empirique.

Il n'est donc pas évident que l'absorption biochimique au niveau des feuilles soit observable au niveau du couvert végétal. D'autre part, comme pour les feuilles fraîches, la grande majorité des modèles ne sont pas validés. Par conséquent, dans l'état actuel des recherches, il est trop tôt pour affirmer qu'estimer la composition d'un couvert végétal mono- ou pluri-spécifique en utilisant des modèles linéaires simples et empiriques est possible.

2.1.5. Les approches empiriques de la relation spectrométrie-biochimie : conclusion

De l'examen de tous ces travaux fondés sur une approche empirique, la principale limite est l'absence de signification physique des bandes sélectionnées. D'autre part, lorsqu'on considère certaines conditions d'application du modèle linéaire, c'est-à-dire :

- la linéarité de la relation entre les mesures radiométriques (brutes ou transformées) et le contenu biochimique;
- l'absence de sensibilité des mesures aux facteurs externes (bruit du capteur, géométrie de la mesure) ou facteurs internes (diffusion, description du couvert végétal, des feuilles, influence du sol sous-jacent, nature du sol, etc);
- le nombre d'échantillons du jeu d'étalonnage supérieur au nombre de bandes spectrales pour éviter les problèmes de sur-ajustement,

on constate que dans la majorité des travaux présentés, aucune de ces conditions n'est vérifiée. Néanmoins, dans certains cas, comme pour les matériaux foliaires séchés et réduits en poudre, le nombre de facteurs intervenant est faible et peut expliquer la précision des estimations ainsi que la robustesse des modèles. En revanche avec des feuilles fraîches ou les couverts végétaux, rien ne permet de valider cette technique même si de bons résultats d'étalonnage ont été obtenus. Cette conclusion rejoint celles du programme "Accelerated Canopy Chemistry Program" de la NASA (A.C.C.P., 1994).

Compte tenu des limites de l'approche empirique, de nombreux auteurs (Curran, 1989; Peterson, 1991; Peterson et Hubbard, 1992; Johnson *et al.*, 1994; Jacquemoud *et al.*, 1995), les chercheurs ont suggéré de développer une approche plus rigoureuse utilisant la connaissance de l'interaction du rayonnement électromagnétique avec le matériel végétal.

2.2. Des modèles analytiques de propriétés optiques utilisés pour estimer le contenu biochimique d'un matériel végétal

Le principe de l'approche analytique se décompose en deux étapes :

- la première étape consiste à modéliser les interactions (absorption et diffusion) du rayonnement électromagnétique avec le matériel végétal. Le modèle ainsi obtenu doit être inversible et sa formulation valable pour l'ensemble des échantillons. Seule la paramétrisation du modèle est propre à chaque échantillon;

- dans la seconde étape, le modèle est inversé, pour chaque échantillon, afin d'obtenir une estimation des paramètres d'entrée permettant de simuler des valeurs radiométriques les plus proches des valeurs expérimentales. Le paramètre correspondant à l'absorption est ensuite interprété en masse de composé par unité de surface, c'est-à-dire une teneur.

Les paramètres statistiques utilisés pour mesurer la qualité des estimations obtenues sont les mêmes que pour l'approche empirique.

La théorie nous montre que les propriétés optiques des couverts végétaux dépendent en partie des propriétés optiques des feuilles (Baret *et al.*, 1994). Aussi, nous commencerons cette partie par les études portant sur l'estimation de la biochimie au niveau foliaire avant de passer au niveau du couvert végétal.

2.2.1. Les applications au niveau de la feuille fraîche

Les études portant sur l'estimation analytique de composés biochimiques foliaires sont en nombre relativement faible en comparaison de celles basées sur l'approche empirique.

Ces travaux peuvent être classés en 2 groupes selon leur finalité : ceux qui testent la potentialité de l'approche analytique et ceux qui concrètement estiment le contenu biochimique.

- Le premier groupe est composé de travaux qui étudient la sensibilité radiométrique aux absorbants foliaires. Par exemple, Gao et Goetz (1994) montrent qu'il est possible d'obtenir une relation correcte entre le spectre d'une feuille fraîche de chêne et celui de la

même feuille sèche en se basant sur une relation non-linéaire. En utilisant un modèle basé sur la théorie de Kubelka-Munk, Conel *et al.* (1993) testent la sensibilité des propriétés optiques des absorbants mineurs foliaires dans la définition de l'absorption. Les résultats de ces deux études suggèrent que les propriétés optiques des feuilles fraîches sont non seulement sensibles à l'absorption de l'eau mais également de la biochimie (lignine, protéines, cellulose, etc). Cette conclusion semble très encourageante pour les applications concrètes.

- L'autre groupe d'étude concerne les travaux sur l'estimation des teneurs biochimiques par inversion de modèles. Par inversion du modèle de propriétés optiques des feuilles PROSPECT, Jacquemoud et Baret (1990) estiment très correctement la teneur en eau de feuilles fraîches de mono et dicotylédones. Jacquemoud *et al.* (1996) redéfinissent la description de l'absorption du modèle PROSPECT : elle n'est plus uniquement dépendante de l'eau dans le proche et moyen infrarouge mais également des protéines, de la cellulose et de la lignine. Néanmoins cette formulation semble trop forte car les résultats de l'inversion sont médiocres pour les composés biochimiques autres que l'eau. Dans un autre domaine spectral que celui qui nous intéresse, le visible, de bonnes estimations des teneurs en chlorophylle sont publiées par Yamada et Fujimura (1991) à partir d'un modèle basé sur la théorie de Kubelka-Munk.

Ainsi, des estimations correctes peuvent être obtenues pour l'eau dans le NIR et MIR par inversion des modèles analytiques. Pour les absorbants mineurs, tels que la lignine, les protéines, la cellulose, les rares études existantes, toutes très récentes, montrent que même si l'infrarouge paraît sensible à leurs effets spectraux, les estimations restent médiocres.

Dans l'état actuel des recherches, on ne peut pas encore comparer les performances des approches empiriques et analytiques du fait de l'absence de validation de la plupart des modèles empiriques, ce qui est, rappelons-le, trop souvent le cas.

Intéressons-nous maintenant au dernier niveau d'organisation du matériel foliaire : le couvert végétal.

2.2.2. Les applications au niveau du couvert végétal

Le développement de modèles de propriétés optiques des feuilles tenant compte des absorbants mineurs est trop récent pour qu'il existe des tentatives d'estimation de cette biochimie au niveau du couvert végétal par une approche purement analytique.

Même pour l'eau, absorbant majeur dans le proche et moyen infrarouge, les travaux restent rares. Voici néanmoins quelques travaux présentés dans la littérature. Comme pour les feuilles, il est possible de les séparer en 2 groupes.

- Dans le premier groupe de travaux mettant en évidence l'information biochimique dans les propriétés optiques, celui de Baret *et al.* (1994) semble le plus pertinent. Ces auteurs montrent, à partir de simulations avec le modèle de transfert radiatif PROSPECT (feuille) + SAIL (couvert végétal), de fortes analogies entre la réflectance du couvert et celle des feuilles correspondantes. Ils suggèrent également des zones spectrales permettant la quantification de la biochimie foliaire à partir des valeurs radiométriques du couvert végétal. Cependant, dans cette étude, les influences du sol et de l'atmosphère ont été négligées. On peut citer également Verdebout *et al.* (1994) qui analysent des données AVIRIS à partir d'un modèle de couvert végétal basé sur les équations de Kubelka-Munk. L'erreur résiduelle d'absorption pour la longueur d'onde 1700 nm semble fortement corrélée avec la teneur en lignine des aiguilles de conifères.

D'un point de vue théorique et expérimental, il semble donc bien y avoir une sensibilité du signal radiométrique du couvert au signal biochimique de la feuille, ce qui suggère la possibilité de réaliser des estimations.

- Dans le second groupe qui concerne l'inversion des modèles, on peut distinguer les études théoriques des études expérimentales.

Parmi les études théoriques, citons celles de Jacquemoud (1992 et 1993). A partir de l'inversion du modèle PROSPECT+SAIL sur des spectres de réflectance synthétiques. Cet auteur obtient des estimations correctes des teneurs en eau et en pigments photosynthétiques. Ces bons résultats doivent être cependant pondérés pour trois raisons : les données spectrales utilisées sont simulées, les effets atmosphériques sont négligés, et la nature du sol est supposée connue ce qui n'est pratiquement jamais le cas dans les études expérimentales.

Cependant, ces résultats restent encourageants pour l'estimation du contenu biochimique foliaire d'un couvert végétal à partir de données expérimentales.

Les travaux portant sur l'estimation de la composition biochimique foliaire d'un couvert végétal à partir de données expérimentales utilisent des données acquises avec le spectro-imageur AVIRIS. A partir de données radiométriques équivalentes AVIRIS d'un champ de betteraves, Jacquemoud *et al.* (1995b) inversent le modèle PROSPECT+SAIL et estiment correctement les teneurs en eau et en chlorophylle à partir des 188 bandes AVIRIS ou les 6 bandes équivalentes TM. Il faut cependant souligner le rôle prépondérant de la nature du sol dans la précision des estimations. Plutôt que d'utiliser une approche purement analytique, Gastellu-Etchegorry *et al.* (1995) et Zagolski (1994) développent une approche semi-analytique pour estimer le contenu biochimique d'une forêt de pins. A partir de données AVIRIS, ils inversent un modèle de transfert radiatif du couvert végétal pour estimer les spectres de réflectance des aiguilles de pin. Ils appliquent ensuite les modèles empiriques ajustés au préalable en laboratoire sur les spectres provenant de l'inversion. Cette approche semi-empirique ne permet pas en revanche d'obtenir une précision d'estimation satisfaisante des concentrations pour l'ensemble des absorbants foliaires mineurs (lignine, cellulose, protéines).

En conclusion, les travaux théoriques suggèrent que le signal biochimique foliaire est observable au niveau des spectres radiométriques correspondant aux couverts végétaux, si l'influence du sol est négligée. Néanmoins, l'intérêt de l'approche analytique pour l'estimation du contenu en absorbants autres que l'eau reste encore à démontrer.

2.2.3. L'estimation de la biochimie à partir de l'inversion de modèles analytiques : conclusion

Au niveau de la feuille comme au niveau du couvert végétal, les modèles analytiques développés suggèrent une sensibilité des mesures radiométriques à l'absorption par les composés biochimiques foliaires. Ce point de vue théorique est donc encourageant. Cependant, les travaux basés sur des données expérimentales ne permettent pas de conclure d'une façon aussi satisfaisante. Même au niveau de la feuille où le signal biochimique est le

moins perturbé par des facteurs internes et externes, les seules estimations satisfaisantes concernent l'absorbant foliaire prépondérant : l'eau.

Trois raisons majeures peuvent être suggérées pour expliquer ces résultats :

- la première est l'utilisation d'un nombre restreint de paramètres pour décrire le matériel foliaire, ce qui entraîne des approximations dans les simulations ou dans l'inversion des modèles;
- la seconde tient à l'utilisation des techniques numériques d'inversion. Les erreurs résiduelles des modèles rendent le critère d'inversion minimal pour plusieurs combinaisons des paramètres du modèle, certaines n'ayant aucune signification physique;
- enfin, la troisième tient à la qualité des mesures acquises par les spectromètres ou spectro-imageurs aéroportés. Ces appareils présentent un bruit instrumental qui devient source d'erreur dans la procédure d'inversion (Renders *et al.*, 1992).

2.3. Les approches actuelles d'estimation de la biochimie foliaire à partir de données radiométriques : conclusion

Dans cette synthèse, nous nous sommes attaché à faire un état de l'art des tentatives représentatives de l'estimation du contenu biochimique foliaire à partir de données radiométriques. Nous avons considéré successivement les travaux basés sur les approches empiriques et analytiques, pour une organisation de plus en plus complexe du matériel végétal.

Cette revue bibliographique a montré que, dès le niveau de la feuille fraîche, les résultats ne sont guère satisfaisants pour les absorbants mineurs (protéines, lignine, cellulose, hemicellulose, sucre, amidon), et ceci quel que soit le type d'approche :

- en ce qui concerne l'approche empirique, hormis l'absence de signification physique, la principale limite actuelle provient de l'absence de validation des modèles d'estimation du contenu biochimique foliaire. De ce fait, nous ne pouvons actuellement rien affirmer sur l'utilisation potentielle d'une telle approche, même si les estimations d'étalonnage apparaissent très bonnes:

- la limite de l'approche analytique repose, quant à elle, sur l'intégration très récente de la contribution de la biochimie détaillée dans les modèles analytiques. Ces développements sont donc trop récents pour conclure clairement.

Néanmoins, l'approche analytique semble plus satisfaisante. A l'inverse de l'approche empirique, elle intègre l'utilisation des processus physiques du transfert radiatif et ne fonctionne pas sur le principe de la "boite noire". D'autre part, à terme, le développement de l'approche physique permet également une amélioration des connaissances des processus physiques.

*

* *

Des propriétés optiques d'un matériel végétal à la biochimie, éléments théoriques et approches actuelles : conclusion

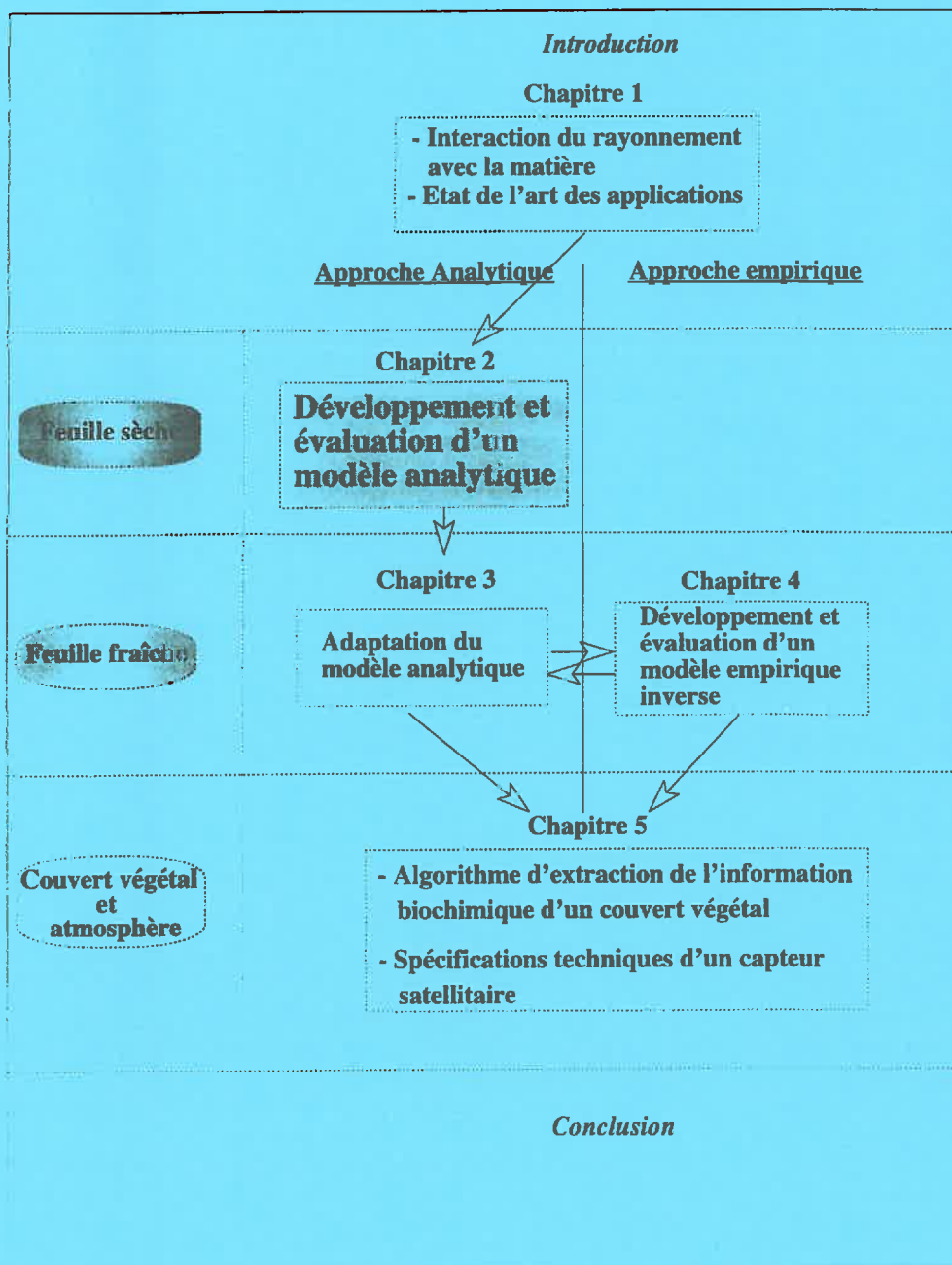
Nous nous sommes attaché dans ce chapitre à identifier, en premier lieu, les facteurs participant à l'élaboration complexe des propriétés optiques des éléments du couvert végétal : feuille, sol, feuillage, tout en prenant en compte l'effet de l'atmosphère et du capteur. Ces nombreux facteurs (figure 10) participent à rendre l'interprétation délicate des données radiométriques du couvert végétal en termes de contenu biochimique foliaire.

La seconde partie de ce chapitre se rapportait aux techniques d'interprétation des données radiométriques haute résolution spectrale en termes de contenu biochimique. Cette partie nous a montré d'une part, que le contenu en absorbants tels que les protéines, lignine, cellulose n'a été correctement estimé et de façon robuste que dans le cas de feuilles sèches par l'approche empirique. Dès le niveau des feuilles fraîches, les travaux montrent des résultats contradictoires dans la robustesse des modèles empiriques mais aussi dans la capacité de approche analytique.

Face aux limites et aux qualités respectives des approches empiriques et analytiques pour le niveau feuilles fraîches, nous considérons nécessaire de développer l'approche analytique pour notre application. Puisque les modèles de propriétés optiques de la feuille, matériel simple en comparaison du couvert végétal, ne prennent pas en compte explicitement la biochimie, nous développerons un tel modèle. Dans un second temps, un modèle empirique d'estimation du contenu biochimique de la feuille fraîche sera également développé à partir du même jeu de données. Ceci permettra de lever certaines contradictions sur les capacités respectives des modèles analytiques et empiriques à estimer le contenu biochimique.

Chapitre 2

Un modèle de propriétés optiques des feuilles intégrant la biochimie



La modélisation est un passage obligé pour estimer le contenu biochimique foliaire à partir des propriétés optiques du couvert végétal.

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, on peut procéder de différentes manières, dont une consiste à développer des modèles analytiques de propriétés optiques du couvert végétal. Une telle approche présente l'avantage de produire une estimation fondée sur de réelles connaissances des processus physiques de l'interaction du rayonnement avec la matière. Son inconvénient est alors la nécessité de développer des modèles aux différents niveaux d'organisation d'un couvert végétal. Plus précisément, en ce qui concerne notre sujet, ceci passe par le développement préalable de modèles de propriétés optiques de feuilles qui prennent en compte la biochimie foliaire.

Or l'eau masque une grande partie de l'absorption due aux autres composés biochimiques des feuilles (lignine, protéines, hemicellulose, cellulose, sucres, amidon). Nous avons donc tout d'abord développé un modèle de propriétés optiques de feuilles sèches. C'est ce que nous présentons dans ce chapitre 2.

Le modèle PROSPECT (cf. chapitre 1 et annexe 1) présente l'avantage d'être simple, largement utilisé et permet de simuler la réflectance et la transmittance d'une feuille à partir d'un indice de structure et un coefficient d'absorption dans le proche et moyen infrarouge. C'est ce modèle que nous avons utilisé et adapté en fonction de nos objectifs.

Dans ce modèle, l'absorption de la feuille est définie par un coefficient égal à la somme pondérée des teneurs des composés biochimiques par leurs coefficients d'absorption spécifiques. Cette définition repose sur une hypothèse de répartition homogène des différents composés dans la feuille. Or, dans la version initiale de PROSPECT, le seul composé absorbant pris en compte est l'eau. Notre travail a donc consisté à intégrer explicitement l'effet des autres composés biochimiques en estimant leurs coefficients d'absorption spécifiques.

Afin d'obtenir un modèle de propriétés optiques qui soit général, nous avons cherché à estimer des coefficients spécifiques d'absorption utilisables quelle que soit l'espèce végétale. Nous avons ainsi utilisé le jeu de données LOPEX qui regroupe les compositions et propriétés spectrales d'échantillons d'espèces très différentes. On y trouve aussi bien des échantillons de plantes cultivées (trèfle, maïs, etc) que de couverts spontanés (pin, peuplier, etc).

La publication constituant le corps de ce chapitre 2 est composée de deux parties principales.

Dans la première partie, nous avons estimé les coefficients d'absorption spécifiques des composés biochimiques foliaires à partir de l'estimation du coefficient global d'absorption obtenu par inversion du modèle PROSPECT. La qualité de l'estimation de ces coefficients spécifiques a été testée par la reconstruction des propriétés spectrales des feuilles sèches et leur comparaison avec les données expérimentales.

Dans la seconde partie, nous avons étudié la précision des estimations obtenues par inversion du modèle PROSPECT ainsi adapté, dans un premier temps pour les composés détaillés (lignine, protéines, hemicellulose, cellulose, sucres, amidon), puis pour des regroupements de ces composés.

Leaf optical properties with explicit description of its biochemical composition: direct and inverse problems

Fourty Th.^{1,2}, Baret F.¹, Jacquemoud S.³, Schmuck G.⁴, Verdebout J.⁴

¹ INRA Bioclimatologie, Site Agroparc, 84 914 Avignon Cedex 9, France.

² GEOSYS, Parc technologique, 31526 Ramonville Cedex, France

³ University of California, Dept. of Land, Air and Water Resources, Davis CA 95616, U.S.A.

⁴ IRSA/AT, Joint Research Centre, Ispra 21 020 Varese, Italy.

Article publié en 1996 dans la revue *Remote Sensing of the Environment*, 56:104-117.

ABSTRACT

This study presents a methodology to estimate the leaf biochemical compounds specific absorption coefficients and to use them to predict leaf biochemistry.

A wide range of leaves was collected including variations in species and leaf status. All the leaves were dried out. The biochemical composition was measured using classical wet chemistry techniques to determine lignin, cellulose, hemicellulose, starch, and protein contents. Concurrently, leaf reflectance and transmittance were measured with a high spectral resolution spectrophotometer in the 800-2500 nm range with approximately 1 nm spectral resolution and sampling interval. In addition, infinite reflectance achieved by stacking leaves was also measured.

The PROSPECT leaf optical properties model was first inverted over a selection of wavebands in the 800-2400 nm domain to provide estimates of the scattering characteristics using leaf reflectance, transmittance and infinite reflectance data. Then, the model was inverted again over all the wavelengths to estimate the global absorption coefficient, using the previously estimated scattering properties. The global absorption coefficient was eventually explained using the measured biochemical composition by fitting the corresponding specific absorption coefficients after subtraction of the measured contribution of the residual structural water absorption.

Results show that the derived specific absorption coefficients are quite robustly estimated. Further, they are in good agreement with known absorption features of each biochemical compound. The average contribution of each biochemical compound to leaf absorption feature is also evaluated. Sugar, cellulose and hemicellulose are the main compounds that contribute to absorption. Results demonstrate the possibility of modeling leaf optical properties of dry leaves with explicit description of leaf biochemistry.

Estimates of the detailed biochemical composition obtained by model inversion over the 1300-2400 nm spectral domain show poor predictive performances. In particular, the protein content is very poorly retrieved. The retrieval performances of several combinations of the biochemical compounds are investigated. Results show that the total amount of dry matter per unit leaf area is the only variable to be accurately retrieved. Possible improvements of these results are discussed.

Keywords: *Leaf reflectance, transmittance, biochemical composition, lignin, cellulose, protein, sugar, starch, specific absorption coefficients, model inversion*

1. Introduction

Knowledge of the canopy biochemical composition may provide critical informations to describe and predict vegetation productivity, litter decomposition processes or nutrient cycles within an ecosystem (Running *et al.*, 1985). The understanding of biogeochemical cycles involved in an ecosystem requires the measurement of canopy biochemical composition generally estimated by ground level sampling techniques. However, these techniques are tedious and time consuming. For that reason, the representativeness of ground measurements, as well as the fine spatial and temporal distribution of the biochemical are generally poorly achieved, particularly when large ecosystems are investigated.

Remote sensing allows large and continuous radiometric measurements from which the biophysical and biochemical characteristics of canopy may be derived. Since Peterson *et al.* (1988) many experimental results showed statistical correlations between the canopy biochemical composition and the corresponding reflectance spectra recorded by spectro-imaging systems (Gastellu-Etchegorry *et al.*, 1995; Gastellu-Etchegorry *et al.*, 1994; Johnson *et al.*, 1994; Wessman *et al.*, 1988; Zagolski, 1994; Martin and Aber, 1993, 1994; Smith and Curran, 1992). However, recent developments demonstrate that the relationships elaborated on one site on fresh leaves had very poor predictive performances when applied to another site or even to another year (Grossman *et al.*, 1994). The lack of consistency and robustness of these empirical approaches forces to propose a more analytical way to describe the possible relationships between canopy reflectance and its biochemical composition.

Deformations of the biochemical bonds (stretching, rotations, or vibrations) between light atoms (C, H, O, N) absorb at specific fundamental frequencies and their harmonics (Curran, 1989). In the near-infrared domain (800-2500nm), the absorption features result from the combination of harmonics and overtones of the fundamental frequencies of each chemical bond. Since many years, near infrared spectroscopists have developed a successfully large body of knowledge based on statistical relationships between the biochemical composition of dried and powder materials and their reflectance spectra analysis (Williams and Norris, 1987; Norris *et al.*, 1976; Marten *et al.*, 1989; Weyer, 1985). However, due to the statistical nature of these relationships, their robustness is always questionable. Further, when applied to intact leaves or to canopies, retrieval of the biochemical composition is much more complex due to the strong water absorption that masks the weakest absorption features of compounds such as lignin, protein, cellulose, starch. Canopy structure, soil background or the atmosphere disturbances act as additionally confounding factors that complicate the interpretation of the radiometric signal.

Canopy reflectance results from elementary scattering processes that take place at leaf or soil levels. Thus, modeling leaf optical properties will allow to investigate canopy

reflectance sensitivity to its biochemical composition and will potentially provide a tool to design algorithms dedicated to the retrieval of canopy biochemical composition.

This study aims at developing a model of leaf optical properties that takes explicitly into account leaf biochemical composition. We will use the PROSPECT model (Jacquemoud and Baret, 1990) to describe the radiative transfer in the leaf. This simple model assumes that the leaf is made up of a pile of elementary layers separated by air spaces. The number of layers (N) mimics the scattering processes within the leaf internal structure. Each layer is characterized by a refraction index (n), and an absorption coefficient $K(\lambda)$. Assuming random spatial distribution of each compound, this global absorption coefficient ($K(\lambda)$) is determined by the leaf biochemical composition:

$$K(\lambda) = \sum_{i=1}^{i=n} k_i(\lambda) \cdot C_i \quad (1)$$

where k_i and C_i are respectively the specific absorption coefficient and concentration (in weight per unit leaf area) of compound i . Thus, the modeling reduces to the estimation of the specific absorption coefficients for each compounds. This will be achieved through inversion of the PROSPECT model. To minimize the strong masking effect of water absorption, we will mostly consider dry leaf materials. To enhance the absorption features of weak absorbers, we measured the reflectance of a semi-infinite medium made up of stacked leaves.

In the first part of this paper we will describe the data set. The second part will present the methodology used to estimate the specific absorption coefficients. The third part will investigate the performances of model inversion to estimate the leaf biochemical composition. Discussion and conclusion will then follow with a special emphasis to the possible remote detection of canopy biochemical composition.

2. The data sets

Forty three leaf types corresponding to a wide range of species and biophysical status were collected by the Joint Research Centre at Ispra (Italy) (Hosgood *et al.*, 1995). The leaves were subjected to a gentle drying to remove most of the water without changing too much the biochemical composition. Two kinds of measurements were performed on each leaf type: leaf optical properties and biochemical composition analyses.

2.1. Optical properties measurements

Reflectance and transmittance measurements were performed in the 400-2500 nm range using a Perkin-Elmer spectrophotometer equipped with an integrating sphere. This type of measurement configuration minimizes problems related to the non-lambertian properties of

plant leaves. This instrument provides a spectral resolution around 2 nm depending on the wavelength, with a 1 nm sampling interval. The output signal was calibrated into absolute directional/hemispherical reflectance or transmittance using spectralon references. The reflectance and transmittance of five leaves for each leaf type were acquired and then averaged after calibration. The noise was very small, close to 0.05% of the signal. Additional measurements of infinite reflectance were collected over a pile of more than 20 leaves for each leaf type.

2.2. Biochemical composition analyses

For each leaf type, a sub sample of leaf materials was sent for analyses to a laboratory (C.R.A Gembloux, 100 Serpont road, B-6800 Libramont-Chevigny, Belgium). The following were measured:

cellulose	Weende (1985)
hemicellulose	NDF-ADF (Van Soest and Masson, 1967; Van Soest and Wine, 1991)
Lignin	Van Soest (Van Soest and Masson, 1967; Van Soest and Wine, 1991)
protein	Kjeldhal (A.O.A.C, 1970)
starch	Ewerts (1985)
ash	elemental microanalysis

The remaining dry matter was explained as being made of 2% lipid (average value taken from the literature (Penning de Vries *et al.*, 1973; Williams *et al.*, 1987) and of cell solubles. For convenience, we used the generic name "sugar" for cell solubles, sugar representing most of it.

The remaining structural water content was evaluated after drying the samples at 85°C during 48 hours. It represented an average of 4.15 % of the dry mass. The biochemical concentration originally expressed in mass of compound per unit leaf dry mass was transformed into mass of compound per unit leaf area using measurements of the specific leaf area. We eventually came up with the average biochemical composition as presented in table 1.

Almost no correlation between the concentrations of the biochemical compounds were observed, except for cellulose and hemicellulose, and for lipid (figure 1). The correlation with the lipid concentration can be explained by the fact that it was not actually measured but was set to 2% of the dry mass.

3. Modeling leaf optical properties

Modeling leaf optical properties amounts to estimate the specific absorption coefficients, used in the PROSPECT model as described earlier. This will be achieved in two steps: the first one consists in estimating for each sample a global absorption coefficient $K(\lambda)$ through inversion of the PROSPECT model. In the second step, we will compute the specific absorption coefficients for each biochemical compound using the retrieved $K(\lambda)$ spectra and the measured concentrations of each biochemical compound.

3.1. Estimation of the global absorption coefficient

The PROSPECT model computes the leaf optical properties as a function of a structural parameter (N) that mimics the scattering process and a global absorption coefficient $K(\lambda)$:

$$[\rho(\lambda), \tau(\lambda)] = \text{PROSPECT}(K(\lambda), N) \quad (2)$$

where $[\rho(\lambda), \tau(\lambda)]$ are respectively leaf spectral reflectance and transmittance.

It also simulates the reflectance of semi-infinite medium by assigning large values of the N parameter. In that case, the radiative transfer theory shows that only an unscaled absorption coefficient can be retrieved. For example, the simple two stream Kubelka and Munk (1931) model states that infinite reflectance is a simple function of the ratio between the absorption and the scattering coefficients. Infinite reflectance depends obviously on the mixing ratio between the scatterers and the absorbers. To mimic this process, the PROSPECT model can be run using a large value of the N parameter (N_{∞}), and a multiplicative coefficient (α) that accounts for the mixing ratio between scatterers and absorbers:

$$\rho_{\infty}(\lambda) = \text{PROSPECT}(K(\lambda), \alpha, N_{\infty}) \quad (3)$$

where $\rho_{\infty}(\lambda)$ is the infinite reflectance. After some tests, we fixed $N_{\infty} = 300$ that provides accurate simulation of the infinite reflectance while avoiding numerical problems occurring with greater values. Inverting the PROSPECT model consists in finding the set of parameters $K(\lambda)$, N and α , that minimizes the distance between the measured and simulated values of reflectance, transmittance and infinite reflectance of the leaves. The inversion is performed using the simplex algorithm (Nelder and Mead, 1963), a very good compromise between the robustness of the solution and the computing time. However, since an inversion applied simultaneously over the 800-2400 nm domain would be very computer time consuming, we decided to select a few wavelengths for the estimation of the structural

parameters N and α . Ten wavelengths were chosen to represent well the scattering and the absorption features: four of them located in the near-infrared plateau where minimum absorption occurs (780-820-880-920 nm); the other ones along the near-infrared region (1400-1500-2100-2200-2300-2400 nm). We noticed that this approach provide more robust estimates of the structural parameters N and α than the inversion applied only over the near-infrared plateau where absorption is minimum. Subsequently, we used the N and α values previously estimated to invert the model a second time and retrieve the global absorption coefficient $K(\lambda)$ at each wavelength.

The effect of the spectral sampling interval was investigated on the retrieved global absorption coefficients values, by comparing the original 1 nm sampling interval data with those obtained by linear interpolation between 10 nm spectral sampling interval data. Figure 2 shows that the corresponding root mean square errors (*RMSE*) values are very small. It mostly corresponds to the instrumental noise and to that associated with the inversion process for the retrieval of the absorption coefficient, especially in the water absorption bands. These *RMSE* values being globally very small, we concluded that a spectral resolution lower than 10 nm would not provide any significant additional information. To reduce the computing time, we thus used a 10 nm sampling interval instead of the original 1 nm.

To evaluate the performances of the inversion process, we reconstructed the reflectance, transmittance and infinite reflectance spectra using the retrieved values of the absorption coefficient and structural parameters N and α and compared them with the original spectra. The little scatter around the 1:1 line observed mainly for the infinite reflectance (Figure 3) is due to the higher sensitivity of infinite reflectance to slight inaccuracies in the absorption coefficient. The *RMSE* values associated with leaf reflectance, transmittance and infinite reflectance reconstruction are very small and respectively: 0.011, 0.012, 0.01544. This demonstrates that the PROSPECT model describes quite accurately the optical properties of dry leaves. In conclusion, this inversion process provides 43 global absorption coefficients spectra corresponding to the 43 leaf types investigated. Using the measured biochemical composition, we will now derive the specific absorption coefficients of each leaf biochemical compound.

3.2. Determination of the specific absorption coefficients for individual biochemical compound

For each leaf sample, the contribution of the remaining structural water absorption to the global absorption coefficient $K(\lambda)$ was removed to provide the actual dry leaf global absorption coefficient $K_d(\lambda)$:

$$K_d(\lambda) = K(\lambda) - k_w(\lambda)C \quad (4)$$

where C_w is the remaining structural water equivalent thickness of the softly dried leaf and $k_w(\lambda)$ is the specific absorption coefficient of water taken from Curcio and Petty (1951). The resulting 43 absorption coefficients spectra (l wavelengths) were stored in a matrix $K_d[l,43]$ corresponding to the biochemical composition matrix $C[n,43]$, where n is the number of biochemical compounds. Solving equation (1) to derive the specific absorption coefficients $k_i(\lambda)$, reduces to:

$$[K_d(\lambda) = \sum_{i=1}^n k_i(\lambda).C_i] \Leftrightarrow [K_d = k.C] \Rightarrow [k = K_d.C^{-1}] \quad (5)$$

where the matrix $k[l,n]$ is the matrix of the specific absorption coefficients.

The lack of significative correlations between the concentrations of each biochemical compound make the inversion of matrix $[C]$ possible. The value of k were constrained to be positive to avoid a physically meaningless negative value. We used the non negative linear least square algorithm to perform this matrix inversion (Lawson and Hanson, 1974).

Figure 4 shows the specific absorption coefficient spectra of six leaf biochemicals except lipid and ash. As a matter of fact the lipid fraction is small and its concentration is highly correlated with the other ones as explained earlier; the ash fraction is also very small. Plus, because of the mineral nature of ash, no well defined and strong absorption features are expected. It follows that taking into account these constituents might have decreased the retrieval performances for the other constituents.

We present only the results corresponding to the 1300-2400 nm domain. Brown pigments (polyphenols) appeared during the drying process of the leaves and for wavelengths below 1300 nm, their absorption features overlapped the absorption features of the other biochemical constituents (results not presented).

The specific absorption coefficients range from 0 to 50 $\text{cm}^2.\text{g}^{-1}$, except for starch that reaches 70 $\text{cm}^2.\text{g}^{-1}$. However, these high values do not compensate enough the small mass fraction of starch in the leaf (Table 1) to provide a significant contribution to leaf absorption (Figure 5).

From a general point of view, in the 1300-1850 nm region, absorption is low and smooth, without strong spectral features. Conversely, between 1850 and 2400 nm, absorption is more important and spectral features are more marked, probably because this spectral domain is closer to the fundamental frequencies domain. Strong analogies are observed among the specific absorption coefficients of cellulose, hemicellulose, starch and sugar, especially around 2100 nm. All these compounds are made of C-O, C-H, O-H bonds. Table 4 shows that most of the absorption features in this spectral domain correspond to the O-H bonds. The specific absorption coefficient of lignin differs from that of the other compounds

by the low level of absorption observed around 2050 nm. Proteins have quite distinct absorption features with the highest absorption levels in the 1900-2000 nm range that corresponds to N-H bonds. Figure 5 shows the contribution (γ_i) of each biochemical compound to the global absorption coefficient. It has been computed as the product of the specific absorption coefficient ($k_i(\lambda)$) and the average concentration ($\overline{C_i}$) divided by the average global absorption coefficient (\overline{K}):

$$\gamma_i = \frac{k_i(\lambda) \cdot \overline{C_i}}{\overline{K}} \quad (6)$$

Sugar has the highest contribution over the whole wavelength range considered. It is also the compound that contributes the more to the leaf mass (Table 1). Its specific absorption coefficient pattern confirms that assumption. The contributions of starch, lignin, sugar and hemicellulose are very smooth and constant over the 1300-2400 nm range. They do not exhibit important characteristic peaks. In contrast, cellulose shows a strong peak in the 1300-1400 nm domain, related to the higher specific absorption coefficients values observed over the same spectral domain. The same observation applies for the protein in the 1900-2000 nm.

Table 2 shows the correspondence between the absorption peaks reported in the literature for pure and mixed material (Curran, 1989; Himmelsbach *et al.*, 1988) and those derived as described previously. We interpreted hemicellulose absorbing peaks according to the cellulose, sugar and starch specific absorbing features, these three compounds having similar chemical bonds. We find generally a good agreement within a 10 nm window between the position of peaks reported in the literature and ours. The 10 nm window roughly corresponds to the accuracy with which the absorption peaks can be located, in view of the 10 nm spectral sampling interval used. Despite this general good agreement, some observed absorption peaks do not correspond to well identified absorption peaks.

These results demonstrate that modeling dry leaf optical properties with explicit description of the biochemical composition is possible. We will now investigate the performances of model inversion for the retrieval of leaf biochemical composition.

4. Retrieval of leaf biochemical composition

4.1. Retrieval of the detailed biochemical composition

The PROSPECT model using the set of specific absorption coefficients previously determined is inverted to retrieve the leaf biochemical composition. The inversion is performed using the same set of leaf reflectance and transmittance spectra as described earlier. The inversion is achieved again in two successive steps: the first one over the ten spectral bands selected to get the leaf structural parameters N and the mixing ratio α . The model is then inverted in the second step over each wavelength, using the previous N and α values to estimate the global absorption coefficient. The concentration of each biochemical compound is computed using the linear equation (5). The retrieval performances associated to each biochemical compound are characterized by the following T statistic:

$$T = 1 - \frac{\text{var}\left(\hat{C} - C\right)}{\text{var}(C)} \quad (7)$$

where C and \hat{C} are respectively the measured and estimated concentrations.

The usually computed R^2 statistic characterizes well the relationship between 2 variables according to a linear model, whereas the T statistic is more appropriate to evaluate the equality of two variables that are in our case the measured and estimated values. T is a normalized measure of the distance between the estimated and the observed values. In contrast to the R^2 , T values can be negative when $\text{var}(\hat{C} - C) > \text{var}(C)$, indicating very poor retrieval performances. To better evaluate the predictive performances of the inversion, we used a cross validation technique (Wallach and Goffinet, 1987), and computed the corresponding T values. Results indicate that none of the biochemical compound is accurately retrieved (row 1-8 of table 4). Nevertheless, the orders of magnitude are preserved. This can be explained by the weakness of the absorption observed for each individual biochemical compound, as compared to the relatively small range of variation we would like to be sensitive to. To bypass these dramatic limitations, we will investigate the possibility of grouping some biochemical compounds together to enhance their absorption features. This will possibly lead to define a simplified way to describe leaf biochemical composition.

4.2. Optimizing the way to describe the biochemical composition for its retrieval

The estimation of the specific absorption coefficients was performed for several combinations of biochemical groupings. We started from the more detailed description of the leaf biochemical composition using individual compounds, then progressively degraded the description by grouping similar compounds together. For instance, we started with cellulose and hemicellulose that are well correlated (Figure 1) and have similar chemical structures and specific absorption coefficients. We keep protein and lignin separate from the other compounds because their chemical structures and absorption coefficients are different. This process finally end with the simplest description of the biochemical composition that corresponds to the sum of all compounds, thus leaf dry weight per unit leaf area, that is the specific leaf area. Table 3 presents the several groupings investigated and the associated reconstruction performances for the absorption coefficient, single leaf reflectance and transmittance as well as infinite reflectance spectra. We also investigated the cases where lipid and ash are taken explicitly into account, although that was not done for the detailed composition formerly analyzed.

The accuracy of the reconstructions of the spectral variables such as reflectance, transmittance and infinite reflectance depends obviously on the accuracy of the global absorption coefficient reconstruction. Figure 6 shows that infinite reflectance is significantly more sensitive to errors in the global absorption coefficient than are single leaf reflectance and transmittance. This can be explained by multiple scattering that enhances the absorption features (Baret *et al.*, 1994). As illustrated in Figure 7, the accuracy of the reconstruction depends also on the number of biochemical groups accounted for. The more groups or individual compounds are separately taken into account, the lower is the associated *RMSE*. However, the increase in the accuracy becomes very small when the number of groups exceeds 4 to 5. Moreover, the accuracy is higher when lipid or ash are ignored, which is in good agreement with our previous observations when studying the detailed biochemical composition.

For each grouping investigated, we characterized the retrieval performances of the concentration using the *T* statistics. As in the previous section, we used the same cross validation technique to get a predictive value and to compute the associated *T* statistic. The more detailed biochemical composition are associated to very small *T* values corresponding to very poor retrieval performances. Good results ($T > 0.7$) appear when cellulose, hemicellulose and sugar are grouped together. This group of biochemicals represents from 50 to 60% of the whole leaf dry mass and almost all the carbonated molecules. We notice that adding the starch fraction to these three last compounds does not improve the *T* values, while adding the lignin fraction increases *T* up to 0.88. Taking the other compounds into consideration does not lead to significant improvements.

The best retrieval performance of concentration is observed when grouping protein, cellulose, hemicellulose, sugar, starch and lignin together. The associated T value reaches 0.9. This way to describe simply the biochemical composition corresponds to the total dry matter per unit of leaf area.

The specific absorption coefficient corresponding to the dry matter (protein+cellulose+hemicellulose+sugar+starch+lignin) results mostly from the absorption features of each individual biochemical compound. The comparison between the specific absorption coefficient of the dry matter and that computed as a weighted sum of the specific absorption coefficients of each individual compound is excellent (figure 8). This means that it is possible to interpret accurately the absorption peaks of the specific absorption coefficient derived for the dry matter according to the absorption peaks of the detailed composition.

5. Conclusion

This study demonstrates that it is possible to use a physically based approach to describe the effects of the biochemical composition on the leaf optical properties. We propose to incorporate the specific absorption coefficients of most leaf biochemical families such as cellulose, hemicellulose, sugar, starch, lignin and protein into the PROSPECT leaf optical properties model. These specific absorption coefficients features are in good agreement with those described in the literature, proving the soundness of the approach used. Further, the wide range of leaf types used in this study ensures the result to be applied over most of the leaves encountered over the Earth's surface.

A spectral resolution lower than 10 nm does not bring any significant amount of information since the absorption features observed for the biochemical compounds are quite broad.

The inversion of the PROSPECT model using the retrieved specific absorption coefficients spectra to estimate the detailed biochemical composition leads to very poor performances. The order of magnitude of the composition is roughly approximated, but the fine variations of the biochemical composition observed among the various leaves are not well estimated. This may be due to the low sensitivity of leaf optical properties to minor variations of the biochemical composition. Further, cellulose, hemicellulose, starch, sugar and lignin have similar absorption features. Only protein has distinct absorption patterns with an important peak around the 1900-2000 nm corresponding to the N-H bonds. However, even for this compound, the retrieval performances are very poor. This is quite unfortunate since protein (nitrogen) is a key factor governing many physiological processes at the leaf level such as photosynthesis (Aber and Federer, 1992).

The poor retrieval performances observed for the detailed biochemical composition disagree with results issued from Near Infrared Spectrometric (NIRS) techniques commonly

applied on dried ground or fresh samples (Norris *et al.*, 1976; Jacquemoud *et al.*, 1994; Wessman *et al.*, 1987; Peterson *et al.*, 1988; Gastellu-Etchegorry *et al.*, 1995; Grossman *et al.*, 1994; Martin and Aber, 1994; Curran, 1989,1992), some of them being official methods for biochemistry agricultural products analysis (Williams and Norris, 1987; Norris *et al.*, 1976; Marten *et al.*, 1989; Weyer, 1985). This apparent contradiction is mostly explained by the difference between our physically based approach and the statistical / empirical approach associated with NIRS techniques. While improvements in the estimation of leaf biochemistry may be achieved by using an empirical approach, there is no certainty about the predictive performances of that approach when applied to independent data sets (Grossman *et al.*, 1994). Another way to improve the biochemical composition retrieval performances consists in grouping similar compounds together to strengthen their absorption features. We thus investigated various combinations to describe the biochemical composition by grouping progressively the biochemicals together according to their absorption similarities. Results show that the highest accuracy of the concentration estimates is achieved when all the compounds are grouped together. It amounts to estimate the specific leaf area, a very interesting variable that participates to many physiological processes occurring in canopy functioning models.

The results presented in this study were obtained over dry leaves. To apply these findings to fresh leaves, one has obviously to take into account the absorption of water inside the leaf. This was beyond the objectives of this paper but will be the next issue to be investigated before going up to canopy level.

Acknowledgments

We thank very much the agencies that participated to the funding of this study: European Space Agency (Europe) under the "plant canopy biochemistry" contract 10661/93/NL/SF, Centre National de la Recherche Spatiale (France), and the NASA through the LEAF MOD project. We thank also the Joint Research Centre (Europe) for kindly providing the data set used in this study. We are grateful to G. Andreoli, B. Hoosgood, A. Pedrini, and S. E. Horning for their assistance during the JRC experiment. Special thanks also to Lee Johnson, Bary Ganopol, D. Peterson, Vern Vanderbilt and D. Himmelsbach who provided constructive comments on this study.

References

- A.O.A.C. (1970), Official method of analysis (11 th Ed.) Association of official analytical chemists, Washington D. C.
- Aber, J. D., Federer, C. A., (1992). A generalized, lumped-parameter model of photosynthesis, evapotranspiration and net primary production in temperate and boreal forest ecosystems, *Oecologia*, 92:463-474.

- Baret, F., Vanderbilt, V. C., Steven, M. D., Jacquemoud, S. (1994). Use of spectral analogy to evaluate canopy reflectance sensitivity to leaf optical properties, *Remote Sens. Environ.* 47:1-25.
- Curran, P. J. (1989), Remote sensing of foliar chemistry: Review, *Remote sens. Environ.* 30:271-278.
- Curran, P. J., Dungan, J. L., Macler, B. A., Plummer, S. E., Peterson, D. L. (1992), Reflectance spectroscopy of fresh whole leaves for the estimation of chemical concentration, *Remote Sens. Environ.*, 39:153-166.
- Cursio, J. A., Petty, C. C. (1951). The near infrared absorption spectrum of liquid water, *J. Opt. Soc. Am.*, 41(5): 302-304.
- Ewerts (1985), 3^{eme} Directive avec rectification (J.O.C.E. du 27 novembre 1980), in *Recueil des normes francaises-AFNOR.*
- Gastellu-Etchegorry, J. P., Zagolski, F., Mougín, E., Marty, G., (1995), Assessment of canopy chemistry using AVIRIS, a case study in the landes forest, south-west France, *Int. J. Remote Sensing*, 16(3):487-501.
- Gastellu-Etchegorry, J. P., Zagolski, F., Pinel, V., Giordano, G., Romier, J., Marty, G., Mougín S., (1994), Assessment of forest canopy chemistry with ISM, *IEEE*, 2/94:999-1001.
- Grossman, Y. L., Ustin, S. L., Sanderson, E., Jacquemoud, S., Schumck, G., Verdebout, J., (1994), Examination of regression and correlation approaches for extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data, *submitted to Remote Sens. Environ.*
- Himmelsbach, D. S., Boer, J. D., Akin, D. E., Barton II, F. E. (1988). Solid -state carbon-13 NMR, FTIR and NIR spectroscopic studies of ruminant silage digestion, in *Analytical Applications of spectroscopy*, (C.S. Creaser and A. M. C. Davies Eds.), Royal Society of Chemistry, London, pp: 410-413.
- Hosgood, B., Jacquemoud, S., Andreoli, G., Verdebout, J., Pedrini, G., Schmuck, G. (1995), Leaf Optical Properties Experiment 93 (LOPEX 93), European Commission, Joint Research Centre, Institute For Remote Sensing Applications, Ispra (Italy), Report EUR-16095-EN.
- Jacquemoud, S., Baret, F. (1990), PROSPECT: a model of leaf optical properties, *Remote sens. environ.* 34:75-91.
- Jacquemoud, S., Verdebout, J., Schmuck, J., Andreoli, G., Hosgood, B. (1994), Investigation of leaf biochemistry by statistics. *Submitted to Remote Sens. Environ.*
- Johnson L. F., Hlavka, C. A., Peterson, D. L. (1994), Multivariate analysis of AVIRIS data for the canopy biochemical estimation along the Oregon transect, *Remote Sens. Environ.*, 47:216-230.
- Kubelka, P., Munk, F. (1931), Ein Beitrag zur Optik de Farbanstriche, *Zeitschr. Tech. Physik*, 12:593.
- Kupiec, J., Smith, G. M., Curran, P. J. (1993), Aviris spectra correlated with the chlorophyll concentration of a forest, in *Summaries of the fourth annual JPL airborne geoscience workshop, october 25-29, Green (Eds.)*, 105-108.
- Lawson, C. L., Hanson, R. J. (1974), Solving least squares problems, Prentice-Hall, chapter 23.
- Nelder, J. A., Mead, R. (1963), A simplex method for function optimization. *Computation Journal*, 7:308-313.
- Marten, G. C., Shenk, J. S., Barton, F. E. (1989), Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality, USDA Handbook 643. U.S. Departement of agriculture. Washington. DC.
- Martin, M. E., Aber, J. D. (1994), Analyses of forest foliage III: Determing nitrogen, lignin and cellulose in fresh leaves using near infrared reflectance data. *J. Near Infrared Spectrosc.*, 2:25-32.

- Martin, M. E., Aber, J. D. (1994)**, High spectral resolution remote sensing of canopy chemistry, in *Proceedings of the 6th international symposium, Physical measurements and signatures in remote sensing, Val d'Isere, France, 17-21 janvier*, 201:207.
- Martin, M. E., Aber, J. D. (1993)**, Measurements of canopy chemistry with 1992 aviris data at blackhawk island and harvard forest, in *Summaries of the fourth annual JPL airborne geoscience workshop, october 25-29, Green (Eds.)*, 113-116.
- Norris, K. H., Barnes, R. F., Moore, J. E., Shenk, J. S. (1976)**, Predicting forage quality by infrared reflectance spectroscopy, *J. Animal Sci.*, 43:839-878.
- Pening de Vries, F. W. T., Brunsting, A. H. M., Van Laar, H. H. (1974)**, Products, requirements and efficiency of biosynthesis: A quantitative approach, *J. Theoretical biol.*, 45:339-377.
- Peterson, D. L., Aber, J. A., Matson, P. A., Card, D. H., Swanberg, N., Wessman, C., Spanner, M. (1988)**, Remote sensing of forest canopy and leaf biochemical contents, *Remote sens. environ.* 24:85-108.
- Running, S. W., Aber, J. D., Peterson, D. L., Matson, P. A., Vitousek, P. M. (1985)**, A simulated model integrating carbon, water and nitrogen cycles in forest, in *Proc. Symp. IUFRO Whole Plant Physiology*, Oak Ridge, TN.
- Smith, G. M., Curran, P. J. (1992)**, Exploring the remote sensing of foliar biochemical concentrations with AVIRIS data, in *Summaries of the third annual JPL airborne geoscience workshop, June 1-5, Green (Eds.)*, 50-52.
- Van Soest, P. J., Masson, V. C. (1967)**, The influence of the Maillard reaction upon the nutritive values of fibrous feed. *Feed Sci. and Technol.*, 32:45-53.
- Van Soest, P. J., Wine, R. (1991)**, Use of detergent in the analysis of fibrous feeds. IV Determination of plant cell wall constituents, *J. Ass. Off. Agric. Chem.* 50:50-55.
- Wallach, D., Goffinet, B. (1987)**, Mean squared error of prediction in models for studying ecological and agronomic systems, *Biometrics*, 43:561-573.
- Weende, P. (1985)**, NF V03-400, in *Recueil des normes francaises-AFNOR*.
- Wessman, C. A., Aber, J. D., Peterson, D. L., Mellilo, J. M., (1988)**, Remote sensing of canopy chemistry and nitrogen cycling in temperate forest ecosystems, *Nature*, 335:154-156.
- Weyer, L. G. (1985)**, Near infrared spectroscopy of organic substances, *Appl. Spectrosc. Rev.* 21:1-43.
- Williams, K., Percival, F., Merino, J., Mooney, H. A. (1987)**, Estimation of tissue construction cost from heat of combustion and organic nitrogen content, *Plant, Cell and Environment.* 10:725-734.
- Williams, P., Norris, K. H., Eds. (1987)**, Near-Infrared technology in the Agricultural and Food Industries, American Association of Cereal Chemists, St. Paul, MN, USA.
- Zagolski, F., (1994)**. Evaluation des concentrations chimiques d'un couvert forestier à l'aide de la haute résolution spectrale, *Thesis, University Paul Sabatier, France, Speciality in spatial remote sensing*, pp 173.

Biochemical compound	Minimum	Average	Maximum
Cellulose	9.1	18.9	33.8
Hemicellulose	0.3	14.3	38.7
Lignin	1.1	9.93	27.5
Protein	7.1	20.13	36.8
Starch	0	1.7	6.5
Sugar	0	26.5	48.6
Lipid	2	2	2
Ash	0.9	5.6	13.6

Table 1: Minimum, average and maximum mass fraction (in % of the total dry mass) of the main biochemical compounds observed over the 43 leaf types studied

$\lambda(\text{nm})$ measured	$\lambda(\text{nm})$ literature	absorption mechanisms	absorbing compounds
PROTEIN			
1420	?	?	?
1520	1510	stretch NH	protein, nitrogen
1730	1730	stretch CH	protein
1940	1940	stretch OH, deformation OH	water, lignin, protein, nitrogen, starch, cellulose
1960	1980	asymmetrie NH	protein
2060	2060	rotation N=H, NH, stretch NH	protein, nitrogen
2200	2180	rotation NH, stretch CH, CO, C=O, NH	protein, nitrogen
2270	2240	stretch CH	protein
2290	2300	stretch NH, C=O, rotation CH	protein, nitrogen
2350	2350	rotation CH ² , deformation CH	cellulose, protein, nitrogen
CELLULOSE			
1410	?	?	?
1470	1490	stretch OH	cellulose, sugar
1550	1540	stretch OH	starch, cellulose
1730	1736	stretch OH	cellulose
1770	1780	stretch CH, OH, deformation HOH	cellulose, sugar, starch
1820	1820	stretch OH, stretch CO	cellulose
1920	1924	stretch OH, deformation OH	cellulose
1950	1950	stretch OH, deformation OH	water, lignin, protein, nitrogen, starch, cellulose
2020	?	?	?
2090	2100	rotation OH, deformation OH, stretch COC, CH	starch, cellulose
2260	2270	rotation CH, CH ² , stretch OH, CH ²	starch, cellulose
2300	2280	stretch CH, deformation CH ²	starch, cellulose
2340	2340	stretch OH, CH, deformation CH, OH	cellulose
2360	2350	rotation CH ² , deformation CH	cellulose, protein, nitrogen
2390	?	?	?
HEMICELLULOSE			
1460	?	?	?
1500	1490	stretch OH	cellulose
1540	1540	stretch OH	starch, cellulose
1580	1580	stretch OH	starch, sugar
1780	1780	stretch OH, CH, deformation HOH	cellulose, starch, sugar
1830	1820	stretch OH, CO	cellulose
1910	?	?	?
1960	1960	stretch OH, bond OH	sugar, starch
2000	2000	deformation OH, CO	starch
2120	2100	rotation O=H, stretch CO, C=O	starch, cellulose
2140	?	?	?
2280	2280	stretch OH, deformation CH ²	starch, cellulose
2330	2340	stretch OH, CH, deformation OH, CH	cellulose
2380	?	?	?

STARCH			
1470	1450	stretch OH, CH	starch, sugar, lignin, water
1450	1450	stretch OH, stretch CH	starch, sugar, lignin, water
1670	1690	stretch CH	lignin, starch, protein, nitrogen
1760	?	?	?
1950	1940	stretch OH, deformation OH	water, lignin, protein, nitrogen, starch, cellulose
1980	?	?	?
2100	?	?	?
2180	?	?	?
2270	?	?	?
2350	?	?	?
2380	?	?	?
SUGAR			
1450	1450	stretch OH, stretch CH	starch, sugar, lignin, water
1560	1580	stretch OH	starch, sugar
1720	?	?	?
1750	1780	stretch CH, stretch OH, deformation HOH	cellulose, sugar, starch
1910	?	?	?
1950	1960	stretch OH, bond OH	sugar, starch
2110	?	?	?
2140	?	?	?
2280	2270	rotation CH, CH ² , stretch OH, CH ²	cellulose, sugar, starch
2310	?	?	?
2340	?	?	?
2380	?	?	?
LIGNIN			
1450	1450	stretch OH, stretch CH	starch, sugar, lignin, water
1670	1690	stretch OH	lignin, starch protein
1710	?	?	?
1760	1754		lignin
1950	1940	stretch OH, deformation HOH	water, lignin, protein, starch cellulose
1980	?	?	?
2050	?	?	?
2150	?	?	?
2270	2262	stretch CH, stretch C=C	lignin
2310	?	?	?
2350	2232	stretch C	?
2380	2380	stretch OH, aromatic deformation	lignin

Table 2 : Interpretation of the absorption peaks according to Curran (1989) and Himmelsbach *et al.* (1988)

	Biochemical groups	$K(\lambda)$	$\rho_s(\lambda)$	$\tau_s(\lambda)$	$\rho_\infty(\lambda)$
1	protein cellulose hemicellulose starch sugar lignin lipid ash	0.0110	0.0110	0.0126	0.0346
2	protein (cellulose+hemicellulose) starch sugar lignin lipid ash	0.0111	0.0111	0.0126	0.0346
3	protein (cellulose+hemicellulose+starch) sugar lignin lipid ash	0.0113	0.0111	0.0127	0.0351
4	protein (cellulose+hemicellulose+sugar) starch lignin lipid ash	0.0111	0.0112	0.0127	0.0347
5	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar) lignin lipid ash	0.0114	0.0111	0.0127	0.0352
6	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar) lignin (lipid+ash)	0.0114	0.0111	0.0127	0.0352
7	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar) (lignin+lipid +ash)	0.0123	0.0115	0.0134	0.0363
8	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lipid) lignin ash	0.0114	0.0111	0.0127	0.0352
9	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+ lignin+lipid) ash	0.0117	0.0114	0.0131	0.0351
10	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin+lipid +ash)	0.0125	0.0117	0.0136	0.0360
11	(protein+cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin+lipid +ash)	0.0127	0.0119	0.0138	0.0370
12	<i>protein cellulose hemicellulose starch sugar lignin ash</i>	<i>0.0110</i>	<i>0.0110</i>	<i>0.0126</i>	<i>0.0346</i>
13	<i>protein (cellulose+hemicellulose) starch sugar lignin ash</i>	<i>0.0111</i>	<i>0.0111</i>	<i>0.0126</i>	<i>0.0346</i>
14	<i>protein (cellulose+hemicellulose+starch) sugar lignin ash</i>	<i>0.0113</i>	<i>0.0111</i>	<i>0.0127</i>	<i>0.0351</i>
15	<i>protein (cellulose+hemicellulose+sugar) starch lignin ash</i>	<i>0.0111</i>	<i>0.0112</i>	<i>0.0127</i>	<i>0.0347</i>
16	<i>protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar) lignin ash</i>	<i>0.0114</i>	<i>0.0111</i>	<i>0.0127</i>	<i>0.0352</i>
17	<i>protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin) ash</i>	<i>0.0117</i>	<i>0.0114</i>	<i>0.0130</i>	<i>0.0350</i>
18	<i>protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin+ash)</i>	<i>0.0125</i>	<i>0.0117</i>	<i>0.0136</i>	<i>0.0360</i>
19	<i>(protein+cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin+ash)</i>	<i>0.0127</i>	<i>0.0119</i>	<i>0.0138</i>	<i>0.0370</i>
20	protein cellulose hemicellulose starch sugar lignin	0.0110	0.0110	0.0126	0.0347
21	protein (cellulose+hemicellulose) starch sugar lignin	0.0111	0.0112	0.0127	0.0347
22	protein (cellulose+hemicellulose+starch) sugar lignin	0.0113	0.0111	0.0127	0.0352
23	protein (cellulose+hemicellulose+sugar) starch lignin	0.0111	0.0112	0.0127	0.0347
24	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar) lignin	0.0114	0.0112	0.0127	0.0352
25	protein (cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin)	0.0117	0.0113	0.0130	0.0351
26	(protein+cellulose+hemicellulose+starch+sugar+lignin)	0.0119	0.0115	0.0132	0.0359

Table 3 : *RMSE* values associated to the reconstruction performances for the absorption coefficient $K(\lambda)$, the single leaf reflectance $\rho_s(\lambda)$ and transmittance $\tau_s(\lambda)$ and the infinite reflectance $\rho_\infty(\lambda)$. Several ways to describe the leaf biochemical composition are compared. Italic numbers correspond to biochemical composition for which lipids are not accounted for. Bold numbers correspond to biochemical composition for which lipid and ash are not accounted for.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
protein	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.03	-0.07	-0.09		-0.07	-0.06
cellulose	0.27											0.27	
hemicellulose	-0.30											-0.30	
starch	-0.72	-0.51		-0.26								-0.73	-0.51
sugar	-0.13	-0.03	-0.47									0.13	-0.03
lignin	-1.42	-1.02	-0.70	-0.7	-0.61	-0.60		-0.61				-1.42	-1.02
lipid	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00								
ash	-33.3	-27.3	-21.3	-33.7	-22.4			-23.5	-31.6			-33.3	-27.3
cellulose+hemicellulose		0.35											0.35
lipid+ash						-19.3							
cellulose+hemicellulose +starch			0.25										
cellulose+hemicellulose +sugar				0.73									
lignin+ash+lipid							-0.43						
cellulose+hemicellulose +sugar+starch					0.73	0.73	0.71						
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lipid								0.74					
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lignin													
cellulose+hemicellulose +starch+lignin+lipid									0.88				
protein+cellulose +hemicellulose +sugar+starch+lignin													
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lignin+ash													
cellulose+hemicellulose +starch+sugar+lignin +lipid+ash										0.87			
protein+cellulose +hemicellulose +sugar+starch+lignin+ash													
protein+cellulose +hemicellulose+sugar +starch+lignin+lipid+ash											0.88		

...

	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
protein	-0.06	-0.02	-0.03	-0.06	-0.08		-0.06	-0.07	-0.07	-0.02	-0.05	-0.08	
cellulose							0.05						
hemicellulose							-0.28						
starch		-0.25					-1.05	-0.42		-0.19			
sugar	-0.47						0.32	-0.2	-0.71				
lignin	-0.70	-0.70	-0.61				-1.72	-1.44	-0.98	-1.06	-0.80		
lipid													
ash	-21.3	-33.7	-22.4	-29.6									
cellulose+hemicellulose								0.21					
lipid+ash													
cellulose+hemicellulose +starch	0.25								0.02				
cellulose+hemicellulose +sugar		0.72								0.65			
lignin+ash+lipid													
cellulose+hemicellulose +sugar+starch			0.73								0.67		
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lipid													
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lignin				0.88								0.88	
cellulose+hemicellulose +starch+lignin+lipid													
protein+cellulose +hemicellulose +sugar+starch+lignin													0.90
cellulose+hemicellulose +sugar+starch+lignin+ash					0.87								
cellulose+hemicellulose +starch+sugar+lignin +lipid+ash													
protein+cellulose +hemicellulose +sugar+starch+lignin+ash						0.88							
protein+cellulose +hemicellulose+sugar +starch+lignin+lipid+ash													

Table 4 : T values associated to the retrieval of the biochemical composition using the model inversion and the previously estimated specific absorption coefficients. The model was inverted over single leaf reflectance $\rho_s(\lambda)$ and transmittance $\tau_s(\lambda)$ and the infinite reflectance $\rho_\infty(\lambda)$. Several ways to describe the leaf biochemical composition are compared. They are described by the number presented in the first row which was explained previously in table 3 (first column). Italic numbers correspond to biochemical composition for which lipids are not accounted for. Bold numbers correspond to biochemical composition for which lipid and ash are not accounted for.

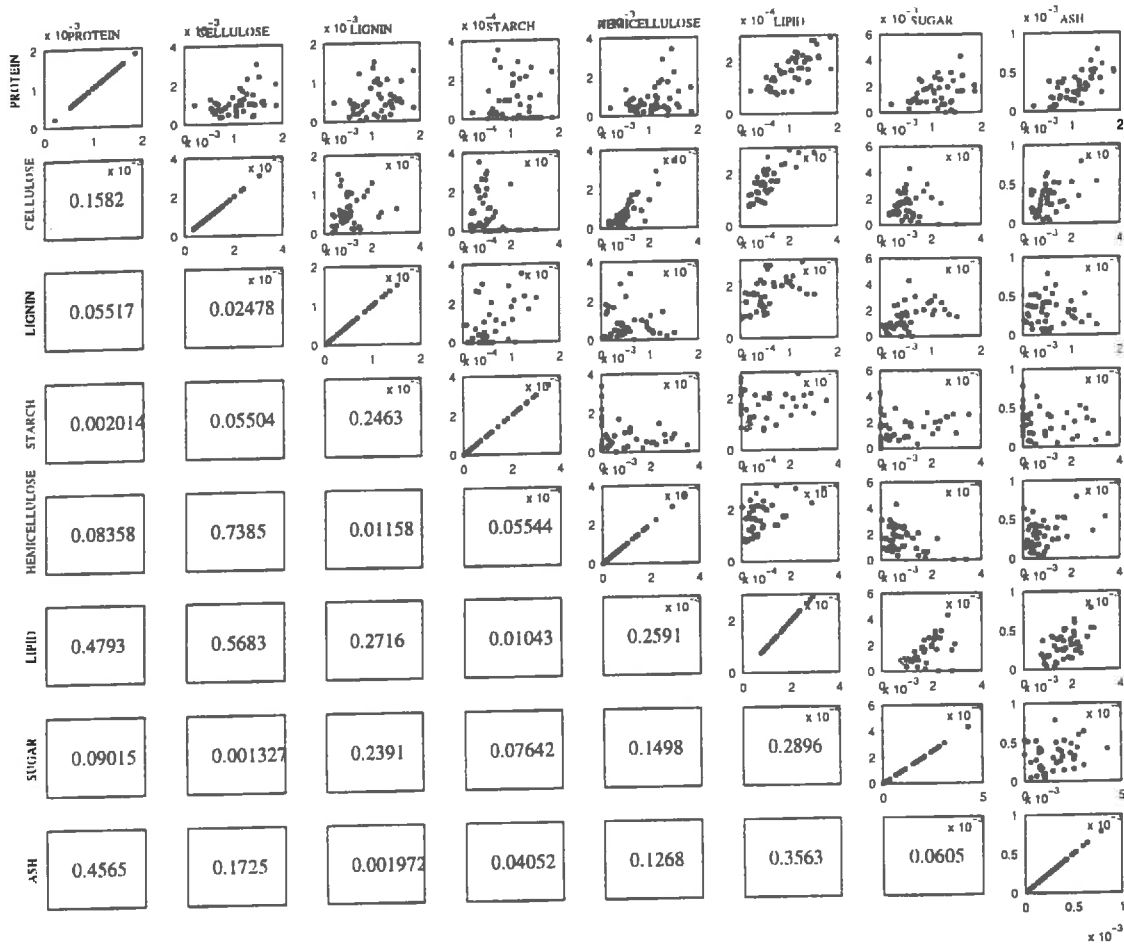


Figure 1 : Correlations between the concentrations observed over the 43 leaves. The concentrations are expressed in g.cm^{-2} . The number in the lower diagonal matrix is the associated R^2 value.

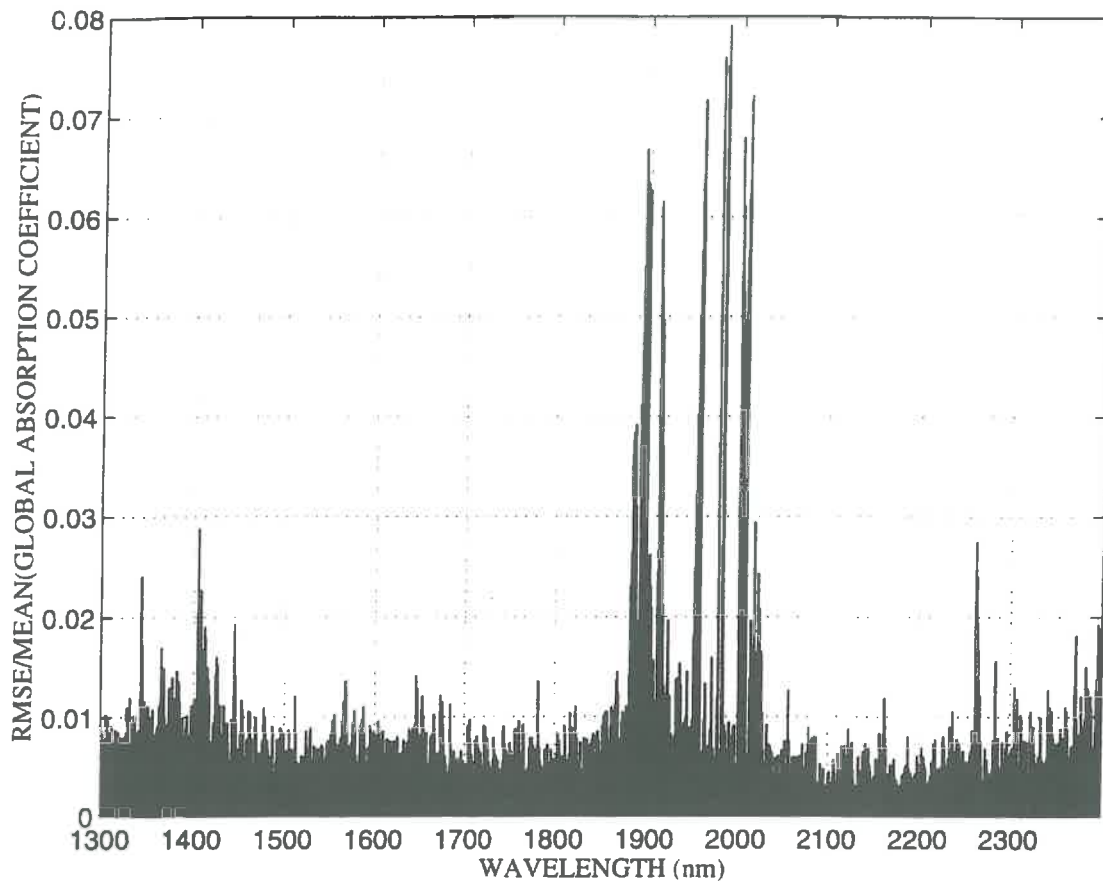


Figure 2 : *RMSE* values associated to the comparison between the absorption coefficients evaluated at a 10nm spectral sampling interval after interpolation at 1nm interval and that obtained originally at 1nm spectral sampling interval. This is computed over the 43 leaves investigated.

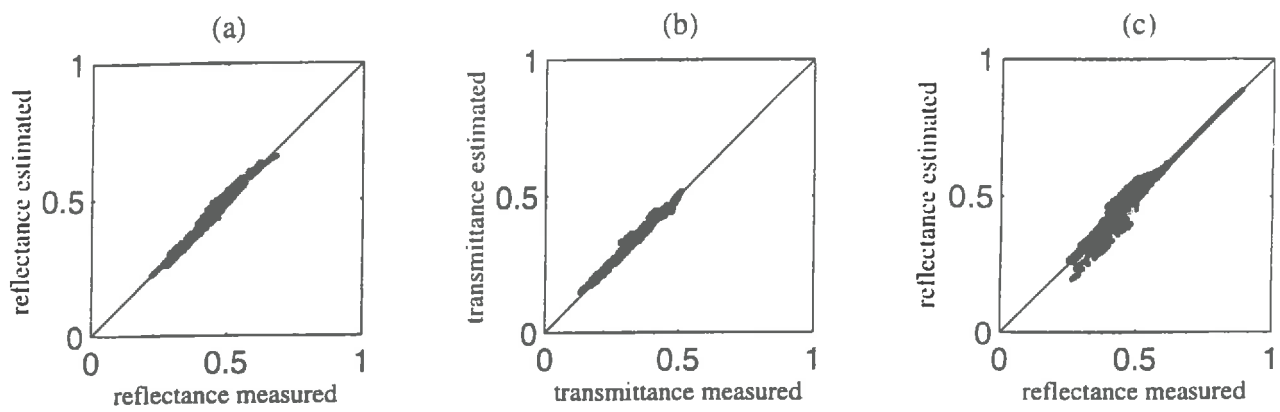


Figure 3 : Comparison between the measured reflectance (a), transmittance (b) and infinite reflectance (c) and the corresponding values simulated using the PROSPECT model using the retrieved values of $K(\lambda)$, N and α parameters

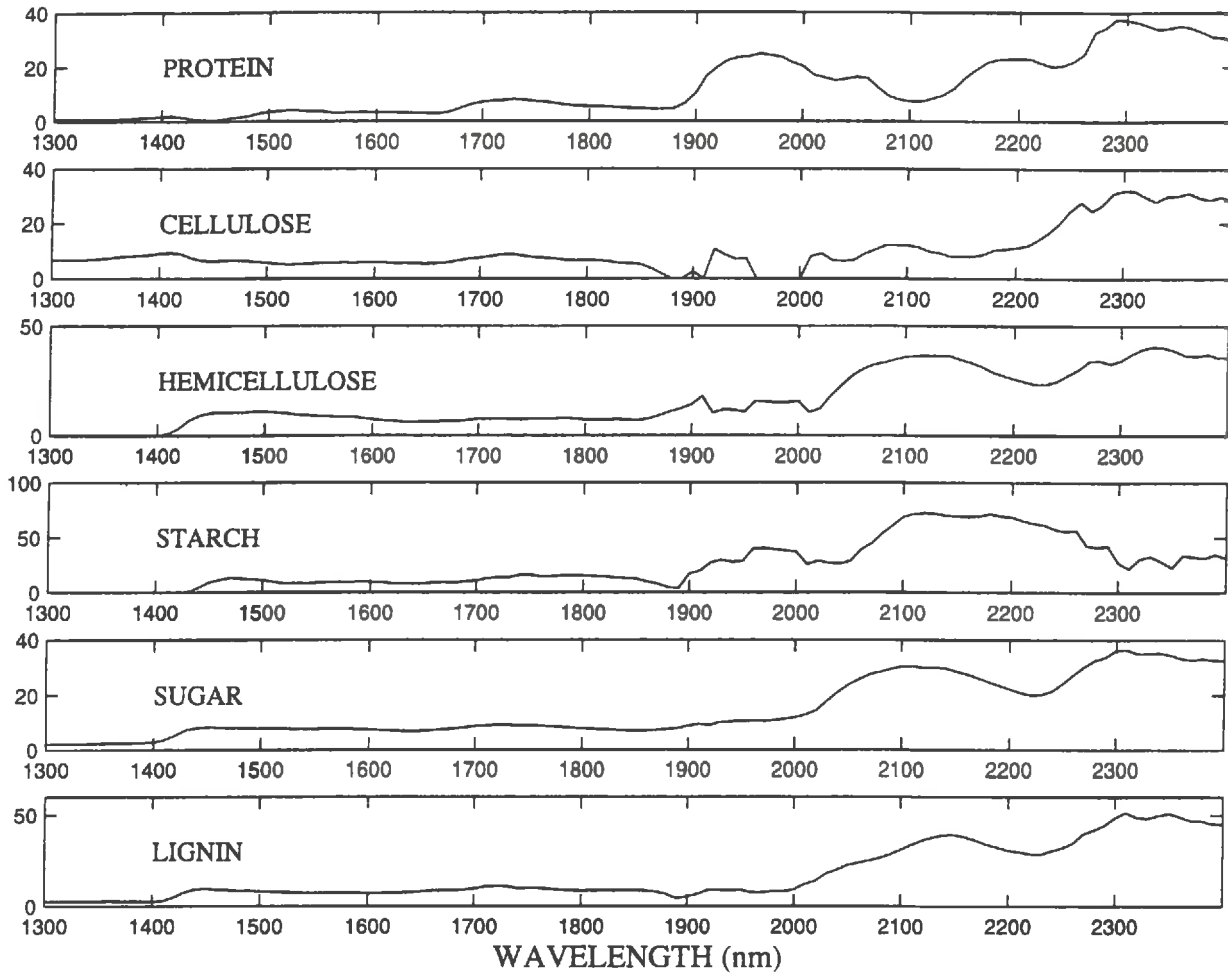


Figure 4 : Specific absorption coefficients ($\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) of each biochemical compound.

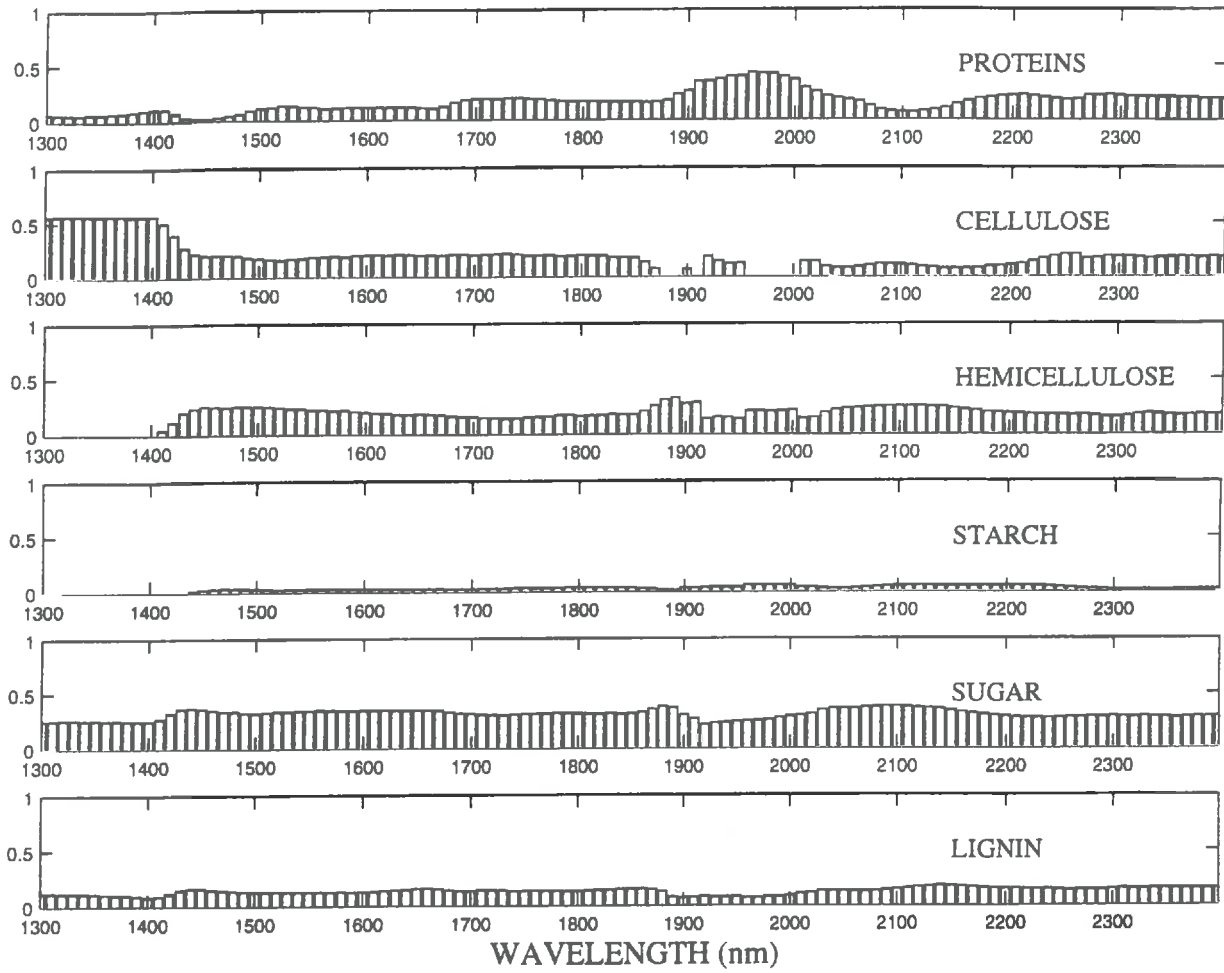


Figure 5 : Contribution (γ_i) of each biochemical compound to the global absorption coefficient. The contribution of each compound is computed as the product of the specific absorption coefficient ($k_i(\lambda)$) and the average concentration ($\overline{C_i}$) divided by the average global absorption coefficient (\overline{K}):

$$\gamma_i = \frac{\overline{k_i(\lambda)} \cdot \overline{C_i}}{\overline{K}}$$

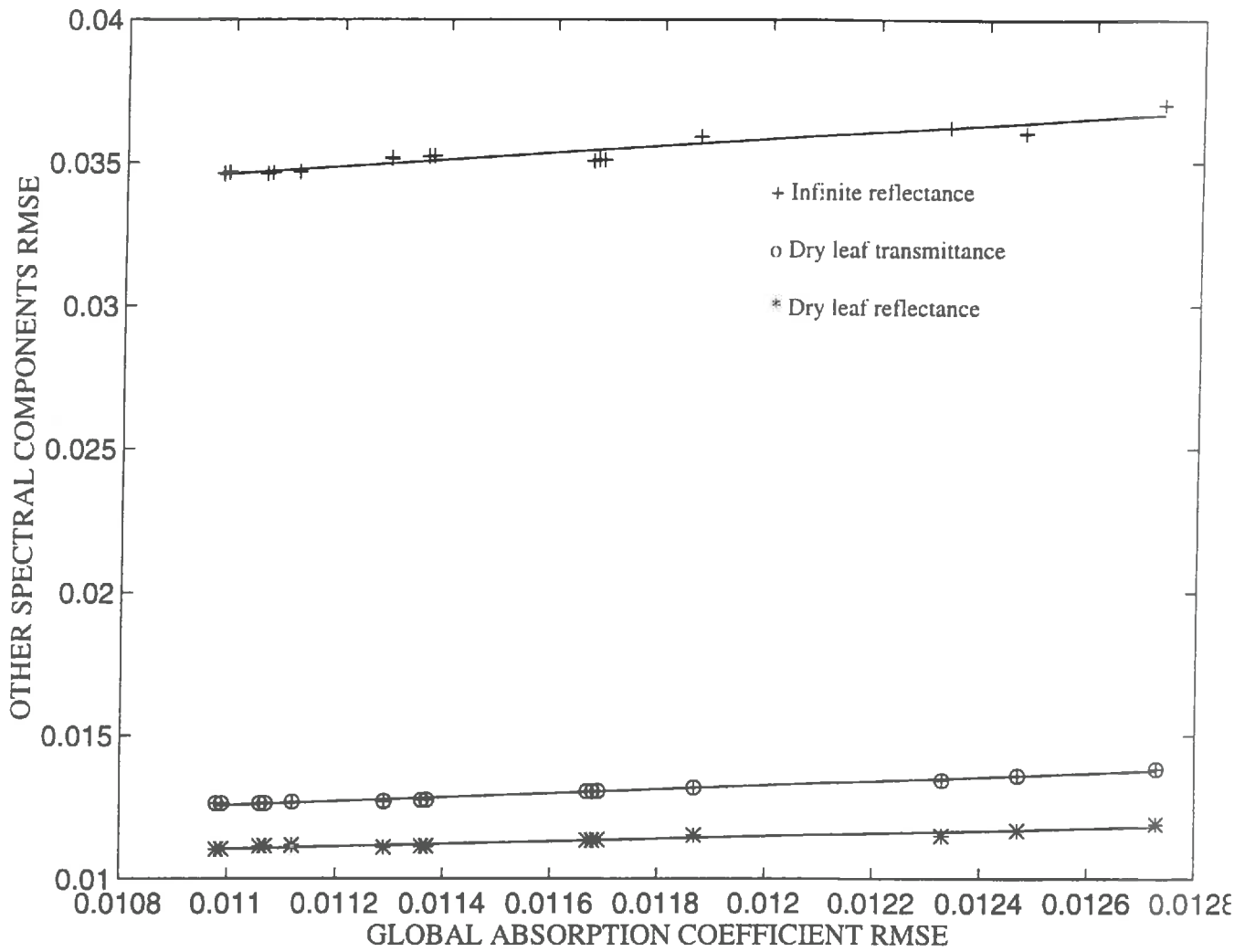


Figure 6 : Sensitivity of the reconstruction performances of single leaf reflectance, transmittance and infinite reflectance to the accuracy with which the global absorption coefficient is reconstructed. Each data point corresponds to one of the biochemical composition presented in table 3.

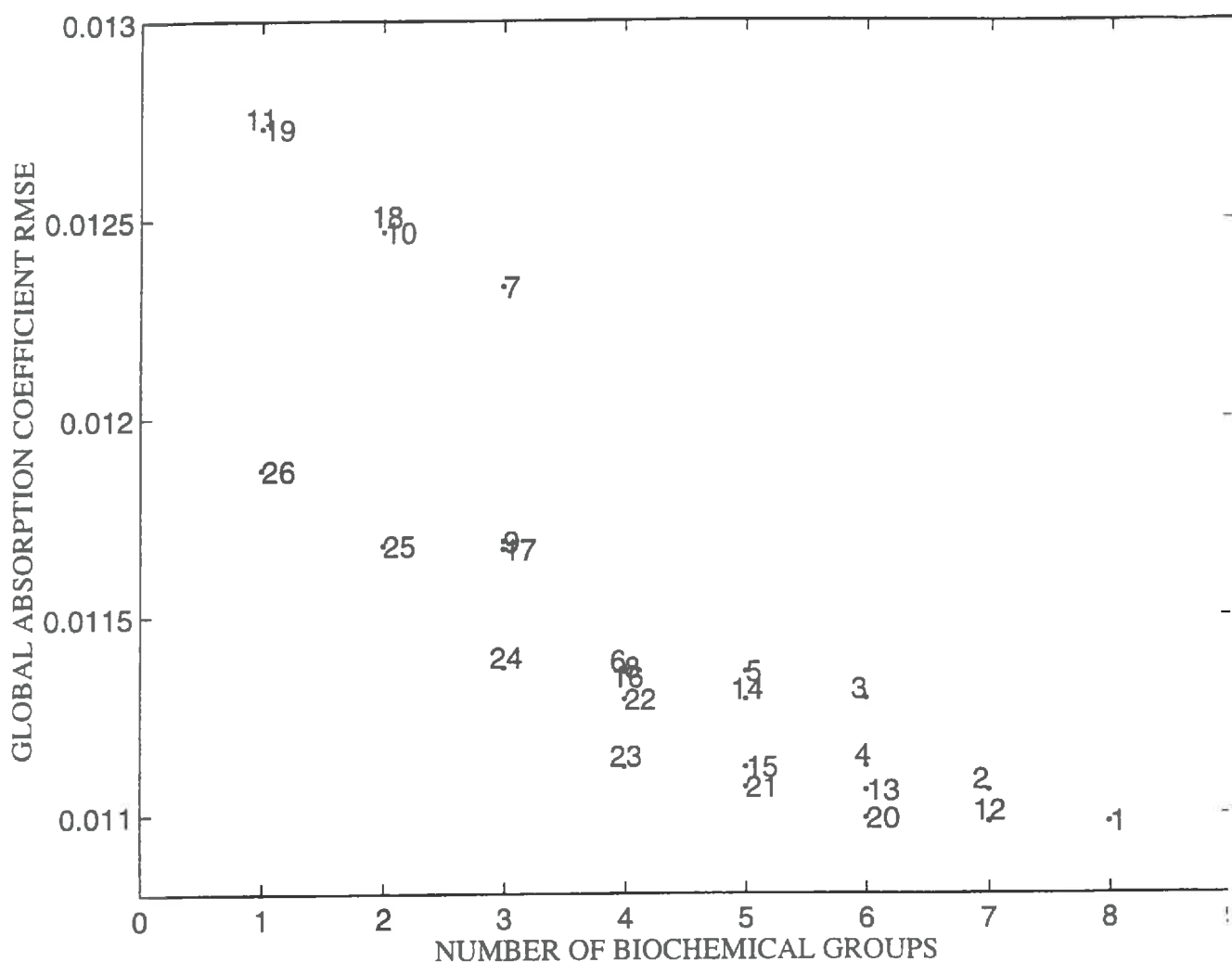


Figure 7 : *RMSE* values associated to the global absorption coefficient reconstruction as a function of the number of compounds or biochemical groups taken into account (described by a label which was explained in table 3)

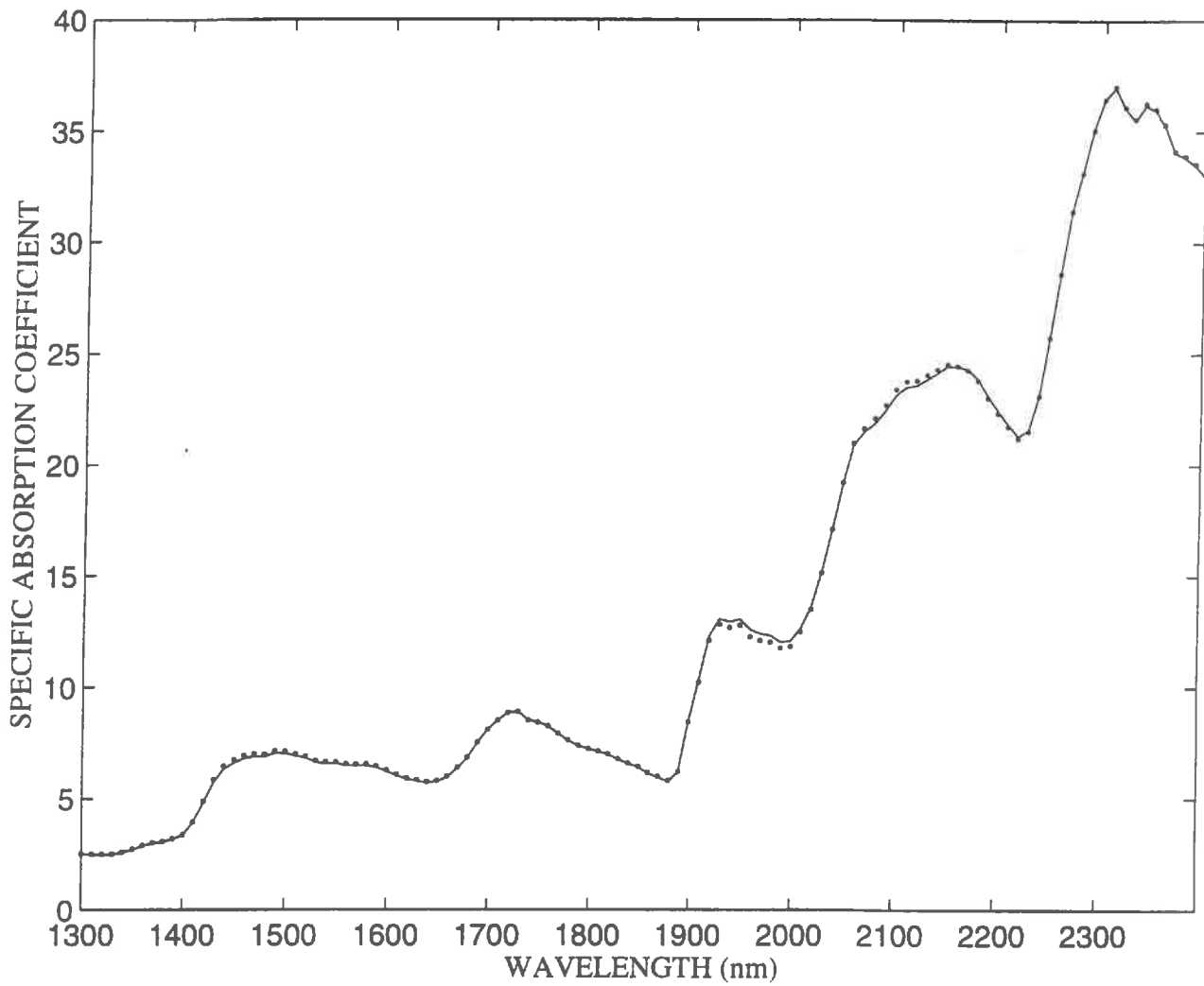
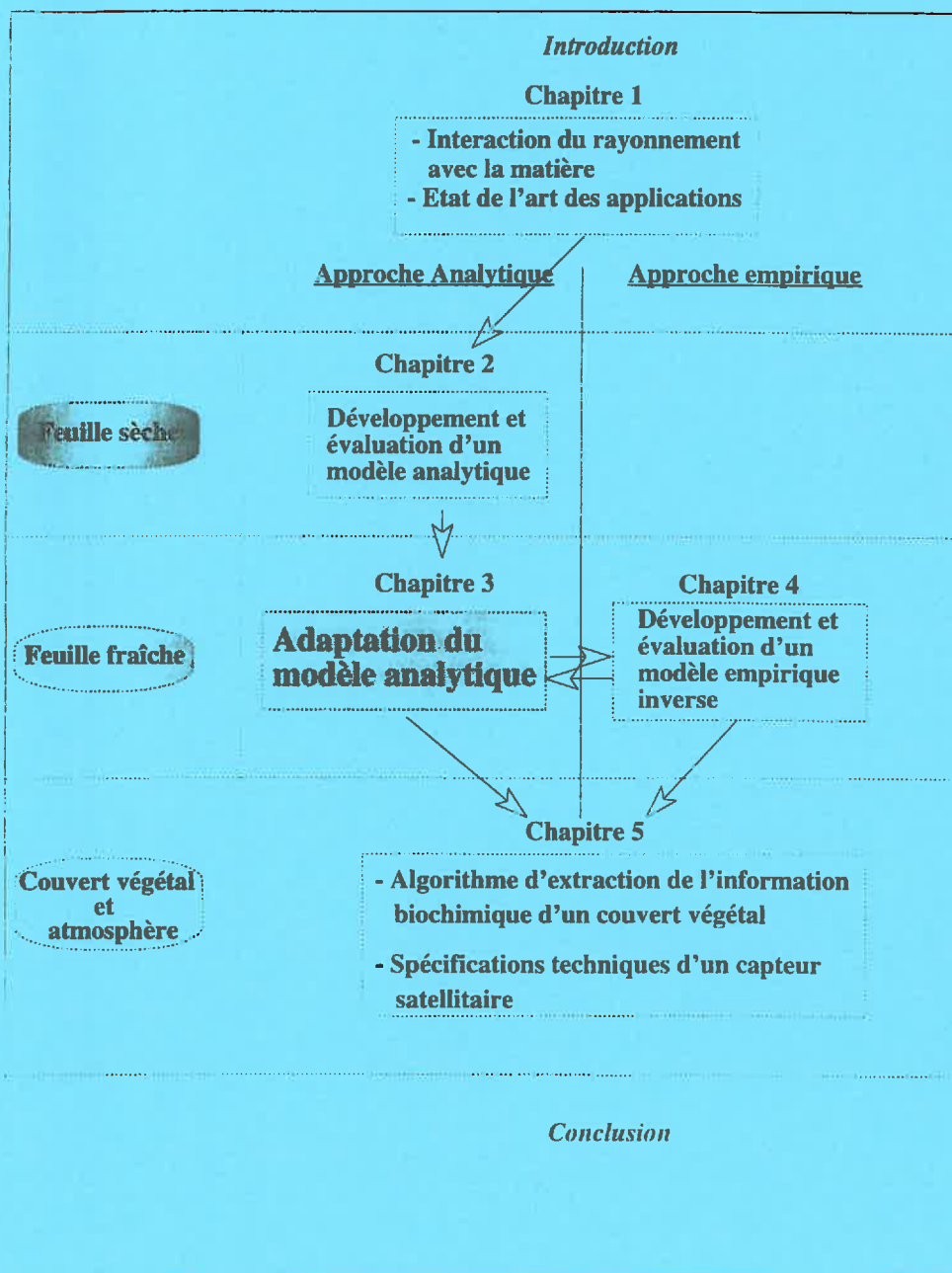


Figure 8 : Comparison between the specific absorption coefficient computed for dry matter (all biochemicals (except lipid and ash) grouped together), and that computed using individual specific absorption coefficients and the average biochemical composition

Chapitre 3

Adaptation du modèle de propriétés optiques au niveau de la feuille fraîche



Nous avons montré, dans le chapitre précédent, qu'il est possible, par une approche analytique, de simuler avec précision les propriétés spectrales d'une feuille sèche. Cependant, l'inversion d'un tel modèle ne permet d'estimer correctement que la teneur en matière sèche.

Afin d'intégrer l'effet de l'eau, nous allons maintenant reprendre cette démarche sur des feuilles fraîches. Ce n'est qu'après avoir franchi cette étape que nous pourrions définir la potentialité de l'utilisation de la télédétection pour estimer le contenu biochimique d'un couvert végétal.

Compte tenu de la très faible sensibilité des propriétés spectrales à la composition détaillée de la feuille sèche (cf. chapitre 2), nous avons restreint la définition de la composition biochimique de la feuille fraîche à ses deux absorbants majeurs : l'eau et la matière sèche totale (cf. annexe 1). Ce sont les deux composés dont nous avons cherché à estimer les teneurs.

La structure de cette publication, et notre démarche, sont similaires à celles adoptées dans le chapitre 2 : il s'agissait d'abord d'adapter PROSPECT au cas de la feuille fraîche, puis de l'inverser pour estimer la biochimie à partir de données radiométriques de feuilles.

Dans la première partie de cette publication, nous estimons les coefficients d'absorption spécifiques de l'eau et de la matière sèche totale à partir de l'estimation du coefficient global d'absorption obtenu par inversion du modèle PROSPECT. Nous testons également, comme dans le chapitre précédent, la qualité de l'estimation des deux coefficients spécifiques en reconstruisant les spectres de réflectance et de transmittance des feuilles fraîches pour les comparer aux données expérimentales.

Dans la seconde partie, le modèle PROSPECT est inversé pour estimer les teneurs en utilisant les coefficients d'absorption spécifiques de l'eau et de la matière sèche estimés dans la première partie. A titre de comparaison, nous avons également utilisé le coefficient spécifique d'absorption de la matière sèche estimé dans le chapitre 2. Le modèle est inversé de différentes manières : sur les spectres de réflectance ET de transmittance, sur les spectres de réflectance OU de transmittance.

Spectral estimates of leaf water content and specific weight

Baret F.¹, Fourty Th.^{1,2}

¹ INRA Bioclimatologie, Site Agroparc, 84 914 Avignon Cedex 9, France.

² GEOSYS, Parc technologique, 31526 Ramonville Cedex, France

Article soumis à la revue *Remote Sensing of the Environment*

Abstract

Specific absorption coefficients for water and dry matter were estimated using a wide range of variation of fresh leaves. The coefficients were derived from the inversion of the PROSPECT leaf optical properties model (Jacquemoud and Baret, 1990) using reflectance and transmittance spectra measured over the 1300-2400nm domain and the corresponding water content (g.cm⁻²=cm) and specific leaf weight (mass of dry matter per unit area, g.cm⁻²). Results show that the retrieved values of the specific absorption coefficient are not accurate in the water absorption bands, particularly for the dry matter, although good agreement was observed where water contributes moderately to leaf absorption. We thus decided to use the values proposed by Fourty et al. (1996) for the specific absorption coefficient of dry matter. Estimated values of the specific absorption coefficient of water were systematically higher than the values proposed by Curcio and Petty (1951) for pure water (k_w^{Curcio}). This was explained by differences in the actual optical path as compared to that used in the PROSPECT model and possible residual water of constitution. We thus proposed to correct Curcio and Petty's coefficient according to: $k_w = 1.12 \cdot k_w^{Curcio}$. These specific absorption coefficients allow accurate simulation of leaf reflectance and transmittance spectra in the 1300-2400nm domain with water and dry matter contents as inputs for the PROSPECT model.

We then investigated the possibility of estimating leaf water content and specific weight by inverting the PROSPECT model using concurrently or separately reflectance and transmittance spectra measured over fresh leaves. Results show accurate and robust estimates of both water content and specific leaf weight. Small differences were observed when using concurrently reflectance and transmittance as compared to the separate use of reflectance or transmittance. However Transmittance appeared more sensitive than reflectance to water and dry matter contents. Possible applications of these results are discussed.

Key words: *Reflectance, transmittance, leaf, model inversion, specific absorption coefficient, water content, specific leaf weight.*

1. Introduction

Remote sensing techniques allow large and continuous monitoring of vegetation. They are expected to provide biophysical and biochemical characteristics of canopies that could help describing ecosystems functioning. Since the last decade, many studies attempted to derive canopy biochemical information from high spectral resolution imaging systems. Sensors such as AVIRIS provided very new information that was intensively used to evaluate the feasibility of retrieving absorption features that could be exploited to estimate canopy biochemical composition. Since Peterson *et al.*, (1988) several experimental results showed statistical correlation between canopy biochemical composition and the corresponding reflectance spectra recorded by spectro-imaging systems (Wessman *et al.*, 1988; Smith and Curran, 1992; Smith, 1992; Martin and Aber, 1993, 1994; Zagolski, 1994; Gastellu-Etchegorry *et al.*, 1994, Johnson and Billow, 1995 among others). However, recent developments demonstrate that the relationships elaborated on one site had very poor predictive performances when applied to another site or even to another year (NASA, 1994; Grossman *et al.*, 1995). Therefore, questions arise about the actual causal relations between variation in canopy biochemical composition and reflectance spectra observed at canopy, airborne, or indeed satellite levels. At the same time, Fourty *et al.* (1996) used a leaf optical properties model to investigate leaf absorption in relation to its biochemical composition. This physical approach allows to explain leaf absorption as a function of its biochemical composition, namely cellulose, hemicellulose, lignin, starch, protein, contents per unit leaf area. However, the absorption signals corresponding to each of these biochemical compounds are too weak and not enough specific to allow accurate biochemical composition retrieval from leaf optical properties spectra when applied to a broad range of leaf types. The only biochemical variables that could be reliably estimated from leaf reflectance or transmittance spectra were the total mass per unit area (namely the specific leaf weight, or dry matter content) and the water content. However, these results were derived from almost dry leaves. In this paper, we would like to investigate how these results can be transferred to fresh leaves. Estimates of leaf specific weight and water content are interesting at leaf level because it is the first step before investigating the problem of retrieving leaf characteristics from canopy or satellite level observations. Further, it provides a tool to develop in situ non destructive measurements of leaf characteristics for ecophysiological studies.

The specific leaf weight (SLW , $g.cm^{-2}$) and its reciprocal, the specific leaf area (SLA , $cm^2.g^{-1}$), are key parameters that are involved or related to physiological processes occurring in the functioning of canopies. The specific leaf area directly governs the change in leaf area index, LAI ($m^2.m^{-2}$), through the building of new leaf area from freshly allocated assimilates. The SLA and SLW are variables very sensitive to plant nitrogen status, light climate and several other stresses (Field and Mooney, 1986). Thus, the estimation of this variable is very

important. Very little literature is devoted to this subject. However, because leaf dry mass is very strongly correlated to carbon content, carbon atoms being obviously widely used in any living tissue, we will also look for studies investigating relationships between leaf optical properties and carbon content. Grossman *et al.* (1995) showed strong correlation between carbon content and leaf reflectance or transmittance.

Leaf water content is generally not considered as a driving variable in canopy functioning models. For example, small to moderate water stress generally do not change very much leaf water content (Beaumont, 1995). However this variable can be derived from canopy functioning models. Therefore, it can be used in data assimilation strategies to force canopy functioning models to simulate what remote sensing sensors will actually observe. Few studies attempt to relate leaf reflectance or transmittance spectra to leaf water content. (Thomas *et al.*, 1971; Hunt *et al.*, 1987; Hunt and Rock, 1989) correlated the relative water content (RWC) to leaf reflectance in the 1300-2400nm spectral domain. Leaf relative water content is the actual leaf water content relative to the leaf water content at full turgescence. The relationships were fitted using several types of leaves, ranging from succulent to low water content leaves and provide good performances. However, the results were not evaluated on other independent data sets to test their predictive performances. Further, the relative water content is not a variable directly and physically linked to the absorption processes thus to reflectance or transmittance. Therefore, it will not be surprising to observe that no universal and robust relationship exists between RWC and leaf reflectance or transmittance. Allen *et al.* (1969) and Tucker (1980) proposed to use the leaf water content or equivalent water thickness to describe the absorption in the 1300-2400nm spectral domain. This variable is the one that actually is physically related to the absorption processes because it is a measure of the optical path.

Jacquemoud and Baret (1990) and Jacquemoud *et al.* (1995) used an other approach through the inversion of a simple leaf optical property model. They demonstrated the feasibility of the estimation of leaf water content from the inversion of the PROSPECT model over fresh leaf reflectance and transmittance spectra.

This study will focus on the estimation of both leaf specific weight and water content from fresh leaf reflectance or transmittance spectra. We will attempt to first derive a physical model that explicitly takes into account water and dry matter absorption features. This will be achieved using the PROSPECT model in the same way as we already did for the detailed biochemical composition (Fourty *et al.*, 1996). Then, we will evaluate the performances of model inversion for the estimation of these two leaf characteristics. We will first present the data set that will be used to derive the specific absorption coefficients for water and dry matter and then invert the model.

2. The data set

Fifty eight leaf types corresponding to a wide range of species and physiological status were collected by the Joint Research Center at Ispra (Italy) (Hosgood *et al.*, 1995). Reflectance and transmittance measurements were performed in the 400-2500 nm range using a Perkin-Elmer spectrophotometer equipped with an integrating sphere. This type of measurement configuration minimizes problems related to the non-lambertian properties of plant leaves. This instrument provides a spectral resolution around 2 nm depending on the wavelength, with a 1 nm sampling interval. However, to compress the data set, we resampled each spectra every 10 nm. The output signal was calibrated into absolute directional/hemispherical reflectance or transmittance using spectralon references. The reflectance and transmittance of five leaves for each leaf type were acquired and then averaged after calibration. The radiometric noise was very small, close to 0.05% of the signal. The area of the leaves was measured. The water content was evaluated after drying the samples at 85°C during 48 hours. Both dry matter and water mass were expressed per unit fresh leaf area. This resulted into the specific leaf weight (g.cm^{-2}) and water content also called equivalent water thickness ($\text{g.cm}^{-2}=\text{cm}^3.\text{cm}^{-2}=\text{cm}$). In the following, specific leaf weight and water content will be noted respectively *SLW* and *C_w*. We eventually came up with the average biochemical composition as presented in table 1. Almost no correlation between the contents of water and dry matter were observed.

3. Modeling fresh leaf optical properties

We used the PROSPECT model (Jacquemoud and Baret, 1990) to describe the radiative transfer in the leaf. This model assumes the leaf composed of *N* homogeneous identical layers separated by air spaces. Each layer is characterized by a refraction index and an absorption coefficient *K*. The absorption coefficient is explained as the sum of specific absorption coefficients (*k*) weighed by the contents of each absorbing material. In our case, since water and dry matter are the only leaf absorbing materials considered, modeling leaf optical properties amounts to estimate the specific absorption coefficients k_{SLW} and k_w such as:

$$N[K]=[k_{SLW}].[SLW]+[k_w].[C_w] \quad [1]$$

The product $N.[K]$ takes into account the fact that the absorption coefficient K is associated to a single elementary layer, N being the number of equivalent layers. The N parameter governs leaf scattering that depends on leaf mesophyll structure. N is thus often termed as the structure index.

In the following, we will first retrieve the absorption coefficient K , and then estimate the specific absorption coefficients k_{SLW} and k_w using the measured contents SLW and C_w . The approach used here is very similar to that used in our previous study (Fourty *et al.*, 1996) for the detailed biochemical composition.

3.1. Estimation of the absorption coefficient

The PROSPECT model computes leaf reflectance and transmittance $[\rho(\lambda), \tau(\lambda)]$ as a function of the structure index (N) and the absorption coefficient $K(\lambda)$:

$$[\rho(\lambda), \tau(\lambda)] = \text{PROSPECT}(K(\lambda), N) \quad [2]$$

The refraction index is fixed to the values proposed by Jacquemoud and Baret, (1990). PROSPECT model inversion allows to retrieve the two input variables $K(\lambda)$ and N . We used the simplex algorithm (Nelder and Mead, 1965), to estimate concurrently $K(\lambda)$ and N from the measured reflectance and transmittance spectra. This algorithm provides a good compromise between the robustness of the solution and the computing time. The merit function used is the simple quadratic sum of the residual between measured and estimated spectra of, both reflectance and transmittance. The inversion process is performed over each of the 58 leaves. Inverting the model over the whole spectra takes a lot of computing time. We therefore decided to invert the model in two steps:

1. In the first step, the model is inverted over a selection of few wavelengths to provide estimates of N . We used the 10 wavelengths proposed in Fourty *et al.* (1996) to well describe the scattering process. This saves significant computer time while keeping consistent values of N as compared to the inversion performed over the full spectra.
2. In the second step, we used the previously estimated N value to invert the model for each wavelength to get the absorption coefficient $K(\lambda)$. The inversion was restricted to the spectral domain where pigments do not absorb: 860nm-2500nm.

To evaluate the performances of the inversion process, we simulated the 58 fresh leaves reflectance and transmittance spectra using the retrieved values of the absorption coefficient

and structure parameters N . The simulated spectra are then compared with the measured spectra (figure 1). The $RMSE$ values associated to the reconstruction of reflectance and transmittance are small, respectively 0.011 and 0.010, with high R^2 (respectively 0.989 and 0.993).

3.2. Determination of the specific absorption coefficients for water and dry matter

The resulting 58 absorption coefficients spectra $K(\lambda)$ and the corresponding specific leaf weight and water content were used to solve equation [1] according to:

$$[N][K]=[k_{SLW}][SLW]+[k_w].[C_w]=[k].[C]\Rightarrow[[k]=N[K].[C]^{-1}] \quad [3]$$

where the matrix $[k]$ is the matrix of the specific absorption coefficients, and $[C]$ the matrix of the water and dry matter contents. The lack of significative correlation between water and dry matter contents allows to invert matrix $[C]$. We used the non negative linear least square algorithm (Lawson and Hanson, 1974) to constrain the specific absorption coefficients to be positive. We thus avoid physically meaningless negative values.

The specific absorption coefficients estimated for water using our data set has very similar shapes as compared to Curcio and Petty's (1951) values (figure 2). However, our estimated values of k_w are systematically higher than Curcio and Petty's coefficients. The regression between our estimates and Curcio and Petty's coefficients demonstrates the systematic bias:

$$k_w=1.12 * k_w^{Curcio} \quad (R^2=0.993, n=110, RMSE=3.46) \quad [4]$$

These problems could be due to inaccuracies in the modeling of the radiative transfer. In particular, the actual optical path might be different from the one implicitly used in the modeling, since fluxes inside the leaf are assumed isotropic. Vogelmann (1993) shows that light fluxes within the leaves are not strictly isotropic. Further, water in the leaf is not at the same temperature as Curcio and Petty's experiment, and is not pure water because it is in the leaf matrix as a solution. Further, some small fraction of water of constitution should remain after the drying.

The corresponding estimated values of the dry matter specific absorption coefficients (figure 3) are quite smooth except in the 1900-2000nm region. A good agreement is observed

with values estimated by Fourty *et al.* (1996) over dry leaves except in strong water absorption regions (1400-1600nm; 1900-2000nm). This can be explained by the very small contribution around 10% of dry matter to the total leaf absorption in these spectral regions (figure 4). The specific absorption coefficients estimated by Fourty *et al.* (1996) were only computed in the 1300-2400 nm spectral domain. Brown pigments (polyphenols) were appearing during the drying process of the leaves and absorbing for wavelengths below 1300 nm. They prevented from retrieving reliable k_{SLW} values below 1300nm. However, the good agreement observed between k_{SLW} estimated over fresh and dry leaves around 1300nm would allow to extrapolate dry leaf k_{SLW} from the one estimated here from fresh leaves down to 860 nm when chlorophyllian pigments are absorbing.

From the comparison between the several ways to get the specific absorption coefficients, it seems that the best solution would be to use Curcio and Petty's coefficients corrected using equation [4] for water, and Fourty *et al.* (1996) coefficients for dry matter. Both values are quite smooth and present no singularities in the strong water absorption bands. The reconstruction performances for reflectance ($R^2=0.979$, $n=58*110$; $RMSE= 0.015$) and transmittance ($R^2= 0.970$, $n=58*110$; $RMSE= 0.021$) are quite good and in the same order of magnitude as those observed in the previous section when using only the estimated value of the absorption coefficient K . This shows that the PROSPECT model could be used for accurate simulation of reflectance and transmittance using these two specific absorption coefficients as inputs.

Once the PROSPECT model is calibrated for taking into account water and dry matter contents, we will investigate the performances of model inversion for the retrieval of leaf biochemical composition.

4. Retrieval of specific leaf weight and water content

4.1. Retrieval using concurrent measurements of reflectance and transmittance

The PROSPECT model using Curcio and Petty's (1951) and Fourty *et al.* (1996) specific absorption coefficients respectively is inverted to retrieve the fresh leaf water and dry matter content. The inversion is performed concurrently over reflectance and transmittance measurements in all the wavelengths from 1300 to 2400 nm with a 10 nm sampling interval. Here again we used the simplex algorithm for convergence and the same merit function as in

section 3.1. We used the T statistic to evaluate the distance between the measured and the estimated values of the contents:

$$T = 1 - \frac{\sum (C - \hat{C})^2}{\sum (C - \bar{C})^2} \quad [5]$$

where C , \hat{C} and \bar{C} are respectively the measured, estimated and average measured contents. As compared to the classical R^2 that characterizes the linear correlation between two variables, the T statistic characterizes the equality of two variables. Thus, good retrieval performances of our model inversion will be associated to T values close to 1.0. Conversely, poor performances will show low T values that could even be negative when $\sum (C - \hat{C})^2 > \sum (C - \bar{C})^2$. The retrieval performances could also be characterized by the classical $RMSE$ value that has the same unit as the variables considered.

The inversion of the model using Curcio and Petty's water specific absorption coefficient and Fourty's specific absorption coefficient for dry matter provide good estimates of water and dry matter content. However, water content was slightly overestimated. When using the proposed correction for Curcio and Petty's specific absorption coefficient, we improved significantly the estimation (Table 2). Further, figure 5 shows that water content estimates are unbiased. This result is in good agreement with previous findings of Jacquemoud and Baret (1990) and Jacquemoud *et al.* (1995). Estimates of specific leaf weight are not affected by the correction used for water specific absorption coefficient since this correction does not change the shape of absorption features. We observe a slight overestimation of the specific leaf weight.

These results demonstrate that inversion of the PROSPECT model provides good estimates of water and dry matter contents from fresh leaf reflectance and transmittance measurements over the 1300-2400 nm spectral range. We will now investigate how the inversion behaves when using only reflectance or transmittance measurements. This could have potential interest for the design of a device that could estimate leaf water and dry matter contents.

4.2. Retrieval performances using reflectance or transmittance

The same model inversion procedure was repeated for the retrieval of the water and dry matter contents from the reflectance and transmittance spectra measurements.

We compared the estimates of the N parameter retrieval when using concurrently reflectance and transmittance to that estimated when using separately reflectance or transmittance. Results show that inversion using only reflectance spectra underestimated the N

values retrieved when using concurrently reflectance and transmittance (figure 6). Conversely, the N parameter values retrieved using only transmittance are overestimated. This could be explained by the strong approximations made by the PROSPECT model for the description of leaf structure and the isotropy of the fluxes within the leaf.

Water and dry matter are accurately estimated (table 2). The correction proposed for Curcio and Petty's water specific absorption coefficient does not improve significantly water content estimates particularly for reflectance. This can be explained by a the underestimation of the N parameter for reflectance (respectively overestimation for transmittance) that is compensated for by a decrease in the absorption coefficient driven by a decrease in the water content to maintain the reflectance (respectively transmittance) levels. The same mechanism can be involved to explain the slight improvement of dry matter content estimates due to the slight decrease of the absorption coefficient driven by a decrease of the dry matter content that corrects the slight overestimation of SLW noticed earlier when using concurrently reflectance and transmittance. Here again, the correction proposed for the specific absorption coefficient has no effect on the estimate of the specific leaf weight because the shape of the water absorption is not changed. Transmittance performs often better than reflectance for the estimation of water and particularly for dry matter contents. This can be explained by the fact that transmittance is less influenced by the surface effects than reflectance. Further, model simulations show that transmittance is generally more sensitive than reflectance to the content of absorbing material, particularly for weak absorbers in regions not too affected by other absorbing materials.

5. Conclusion

This study demonstrates that a simple radiative transfer model, the PROSPECT model, could be used to simulate accurately fresh leaf reflectance and transmittance in the 1300-2400nm spectral domain using as inputs 3 variables: the N structure index that characterizes the scattering within leaf internal structure, water (C_w) and dry matter (SLW) contents. This confirms the conclusion of our previous study performed over dry leaves: the contribution of each individual biochemical compound is not strong enough and not sufficiently well defined to significantly improve the accuracy of reflectance or transmittance computations. Such a model could be used to more accurately describe leaf optical properties in the computation of canopy radiative transfer, both for remote sensing and canopy functioning applications.

We estimated the specific absorption coefficients for water and dry matter over a wide range fresh leaves. For dry matter, the values retrieved were in good agreement with values

proposed by Fourty *et al.* (1996) except in the water absorption bands. This was explained by the important contribution of water to the leaf absorption as compared to that of the dry matter. We thus proposed to use the specific absorption coefficient estimated by Fourty *et al.* (1996) that was derived from dry leaf measurements. The good agreement with our estimates in domains where water is not absorbing too much allows to extrapolate the 1300-2400nm range of values proposed by Fourty *et al.* (1996) to the 860-1300nm range using our values. For characterizing water absorption we proposed to use Curcio and Petty (1951) specific absorption coefficient for pure water with a slight correction that compensates for the approximations made within the PROSPECT model about leaf internal structure, isotropy of the fluxes and remaining water of constitution. Similar problems were encountered when comparing estimates of the N structure parameter through model inversion using either reflectance or transmittance. This implies that the modeling of the radiative transfer within the leaf should be improved by using a more realistic leaf internal structure description, and by taking into account the directionality of the photon fluxes.

Inversion of the PROSPECT model using concurrently or separately reflectance and transmittance measurements provides good estimates of water content and leaf specific weight. These conclusions might be considered as robust because of the physical model used, the large range of leaf characteristics observed in the data set, and the fact that the specific absorption coefficients used derived from independent studies. Water content and specific leaf weight are both important variables involved in many physical and physiological processes. Thus, future applications of these findings could be investigated. For remote sensing applications, we should determine if water and dry matter contents retrieval is possible from reflectance measurements performed over canopies. This could drive the design of future space missions dedicated to the monitoring of vegetation. An other potential application is the measurement in situ of leaf water content and specific weight. Because transmittance might be more sensitive than reflectance to changes in the water or dry matter contents, transmittance should be preferred when designing a device that would measure these leaf characteristics. Further, in situ transmittance measurements are easier to perform than reflectance measurements. The principle of such a device has already been developed to estimate chlorophyll concentration (Minolta Camera Co., 1991) from red and near infrared transmittance. However, to be simple and cost effective an optimal set of bands should be selected and adapted for water content and specific leaf weight.

Acknowledgments

We thank very much the agencies that fund this study: European Space Agency under the "plant canopy biochemistry" contract 10661/93/NL/SF. Centre National de la Recherche

Spatiale (France), and National Aeronautic and Space Administration through the LEAF MOD project. We thank also S. Jacquemoud, G. Schmuck, J. Verdebout, G. Andreoli, B. Hosgood, A. Pedrini, and S. E. Horning from the Joint Research Centre at Ispra (Italy) for kindly providing the data set used in this study.

References

- Allen W. A., Gausman H.W., Richardson A.J., Thomas J.R., 1969. Interaction of isotropic light with a compact plant leaf.. *J. Opt. Soc. Am.*, 59(10):1376-1379.
- Beaumont P., 1995. Réflectance foliaire et acclimatation à un déficit hydrique: cas des feuilles de tournesol. Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse, 129 p.
- Curcio J. A., Petty C.C., 1951. The near infrared absorption spectrum of liquid water. *J. Opt. Soc. Am.* 41(5):302-304.
- Field C., Mooney H.A., 1986. The photosynthesis-nitrogen relationship in wild plants. *On the economy of plant form and function*. T. V. Givnich. New York (USA), Cambridge university press: 25-55.
- Fourty, T., F. Baret, Jacquemoud S., Verdebout J., 1996. Leaf optical properties with explicite description of its biochemical composition: direct and inverse problems. *Remote Sens. Environ.* in press.
- Gastellu-Etchegorry J. P., Zagolski F., Pinel V., Giordano G., Romier J., Marty G., Mougin S., 1994. Assessment of forest canopy chemistry with ISM, *IEEE*, 2/94:999-1001.
- Grossman Y. L., Ustin S.L., Jacquemoud S., Sanderson E., Schmuck G., Verdebout J., 1995. Critique of stepwise linear regression for the extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, in press.
- Hosgood B., Jacquemoud S., Andreoli G., Verdebout J., Pedrini G., Schmuck G., 1995. Leaf Optical Properties EXperiment 93 (LOPEX 93), European Commission, Joint Research Centre, Institute For Remote Sensing Applications, Ispra (Italy), Report EUR-16095-EN.
- Hunt E. R., Rock B.N., 1989. Detection of changes in leaf water content using near and middle-infrared reflectances. *Remote Sens. Environ.*, 30:43-54.
- Hunt E. R., Rock B.N., Nobel P.S., 1987. Measurement of leaf relative water content by infrared reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 22:429-435.
- Jacquemoud S., Baret F., 1990. PROSPECT: a model of leaf optical properties. *Remote Sens. Environ.*, 34:75-91.
- Jacquemoud S., Ustin S.L., Schmuck G., Andreoli G., Hosgood B., 1995. Estimating leaf biochemistry using the PROSPECT leaf optical properties model. *Remote Sens. Environ.* in press.
- Johnson L., Billow C.R., 1995. Spectrometric estimation of total nitrogen concentration in Douglas-fir foliage. *Int. J. Remote Sens.*
- Lawson C. L., Hanson R. J., 1974. Solving least squares problems. Prentice-Hall. chapter 23.
- Martin M. E., Aber J. D., 1993. Measurements of canopy chemistry with 1992 aviris data at blackhawk island and harvard forest, in *Summaries of the 4th annual JPL airborne geoscience workshop, Pasadena (CA), october 25-29, Green (Eds.)*, 113-116.

- Martin M. E., Aber J.D., 1994.** High spectral resolution remote sensing of canopy chemistry. *International symposium of the ISPRS*, Val d'Isère (France), CNES.
- Minolta Camera Co., 1991.** Manual for Chlorophyll meter SPAD-502. Osake. Japon. Minolta Camera Co.
- NASA, 1994.** Accelerated canopy chemistry program. Final report to NASA-EOS-IWG. Washington (DC). NASA.
- Nelder J. A., Mead R.A., 1965.** A simplex method for function optimization. *Computer/computation Journal*, 7:308-313.
- Peterson D. L., Aber J. A., Matson P. A., Card D. H., Swanberg N., Wessman C., Spanner M., 1988.** Remote sensing of forest canopy and leaf biochemical contents. *Remote Sens. Environ.*, 24:85-108.
- Smith M., 1992.** Spectral mixture analysis-New strategies for the analysis of multi-spectral resolution data. *Imaging spectrometry as a tool for environmental observations*. Kluwer.
- Smith G.M., Curran P.J., 1992.** Exploring the remote sensing of foliar biochemical concentrations with AVIRIS data. in *Summaries of the 3rd annual JPL Airborne Geoscience Workshop, June 1-5, Green (Eds.)*, 50-52.
- Thomas J.R., Namken L.N., Oerther G.F., Brown R.G., 1971.** Estimating leaf water content by reflectance measurements. *Agron. J.*, 63:845-847.
- Tucker C.J., 1980.** Remote sensing of leaf water content in the near infrared. *Remote Sens. Environ.*, 10:23-32.
- Vogelman T.C., 1993.** Plant tissue optics. *Annual Review of plant physiology and molecular biology*, 44: 231-251.
- Wessman C. A., Aber J.D., Peterson D.L., Melillo J.M., 1988.** Foliar analysis using near infrared reflectance spectroscopy. *Can. J. For. Res.*, 18: 6-11.
- Zagolski F., 1994.** Evaluation des concentrations chimiques d'un couvert forestier à partir de la haute résolution spectrale. Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse (France), 173 p.

	Minimum	Average	Maximum
Cw : water content (cm)	0.0048	0.012	0.0248
SLW : specific leaf weight (g.cm⁻²)	0.0022	0.005	0.0128

Table 1 : Minimum, average and maximum values of specific leaf weight and water content of our 58 leaves data set

	Water content (Cw)		Specific leaf weight (SLW)	
	$k_w = k_w^{Curcio}$	$k_w = 1.12 k_w^{Curcio}$	$k_w = k_w^{Curcio}$	$k_w = 1.12 k_w^{Curcio}$
Refl. & Transmit.	0.757 (0.0022)	0.915 (0.0013)	0.579 (0.0014)	0.759 (0.0014)
Refl.	0.760 (0.0022)	0.834 (0.0018)	0.656 (0.0013)	0.657 (0.0013)
Transmit.	0.896 (0.0014)	0.752 (0.0022)	0.793 (0.0010)	0.793 (0.0010)

Table 2 : T and $RMSE$ (in parenthesis) values characterizing the retrieval performances of water content (Cw) and specific leaf weight (SLW) from concurrent measurements of reflectance and transmittance (Refl. & Transmit.) or using only reflectance (Refl.) or transmittance (Transmit.) measurements. We used the specific absorption coefficient for water provided by Curcio and Petty ($k_w = k_w^{Curcio}$) or the one corrected for the optical path ($k_w = 1.12 k_w^{Curcio}$).

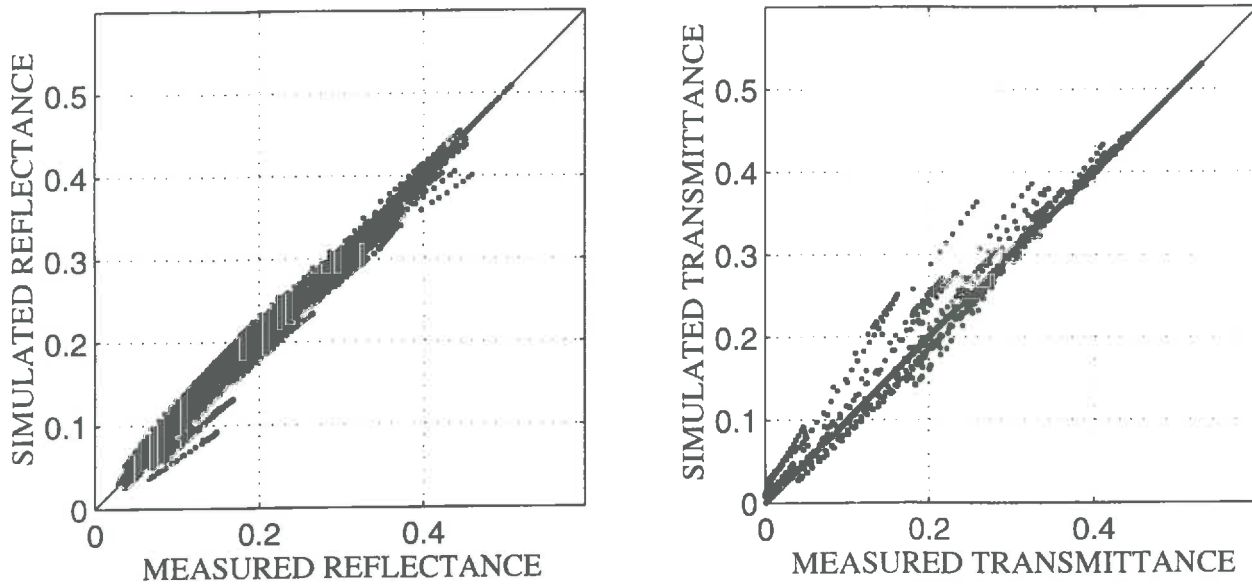


Figure 1 : Comparison between the measured leaf reflectance (transmittance) and the values simulated using the PROSPECT model and the estimated values of $K(\lambda)$ and N

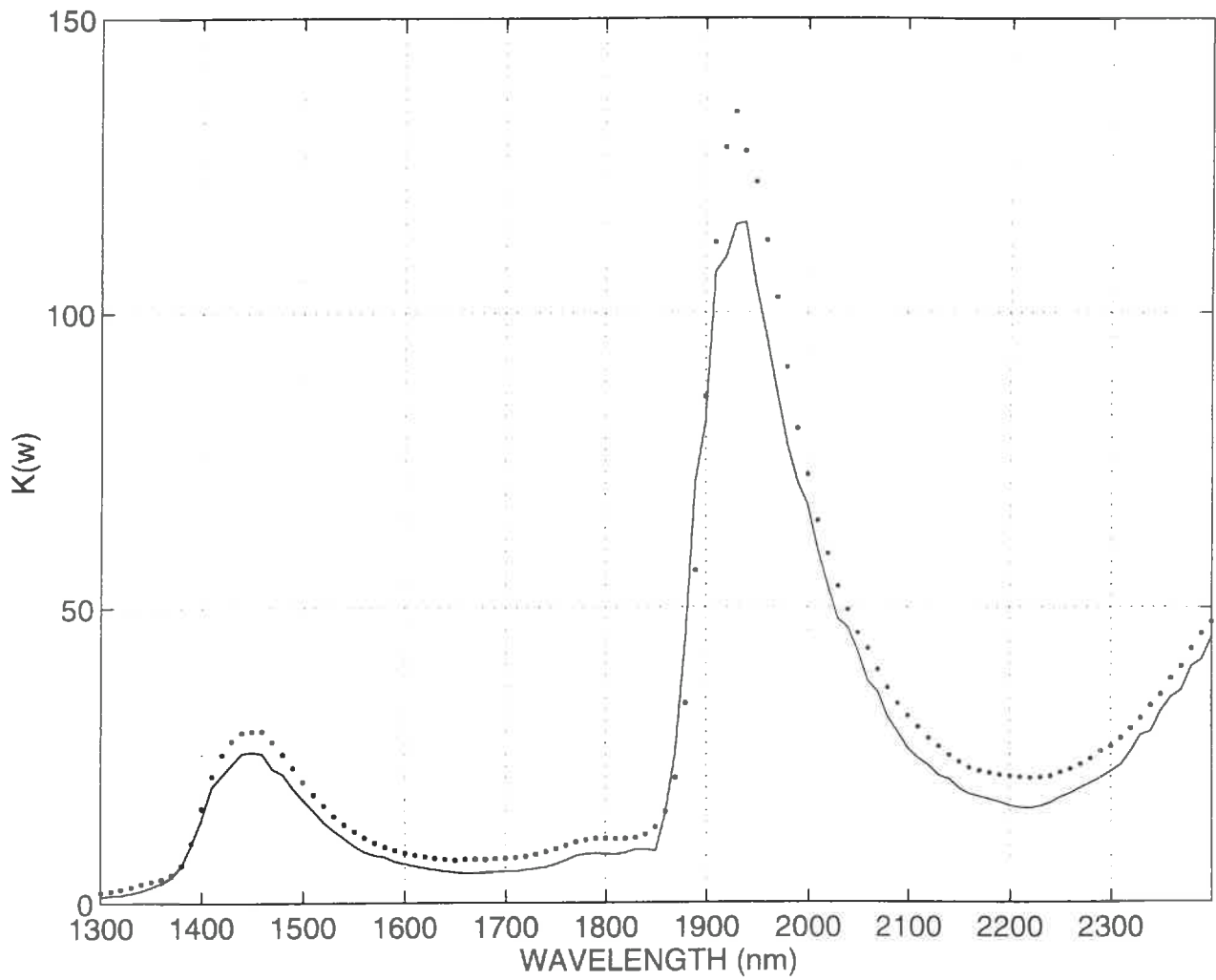


Figure 2 : Comparison between the specific absorption coefficients of water (k_w) given by Curcio and Petty (1951) (solid line) and that estimated in this study (dotted line)

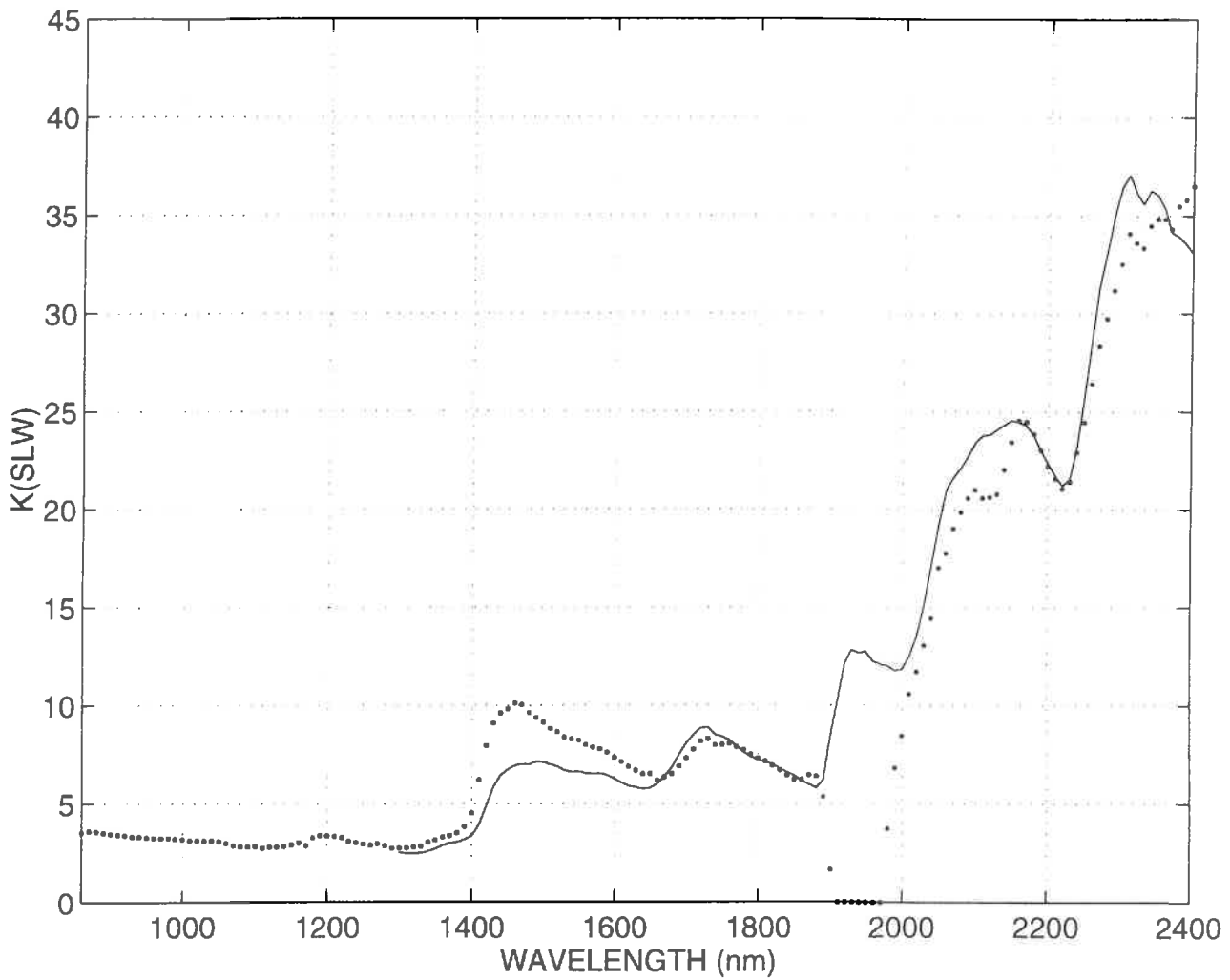


Figure 3 : Comparison between specific absorption coefficients of dry matter (k_{SLW}) provided by Fourty *et al.* (1996) (solid line) and the values estimated in this study (dotted line)

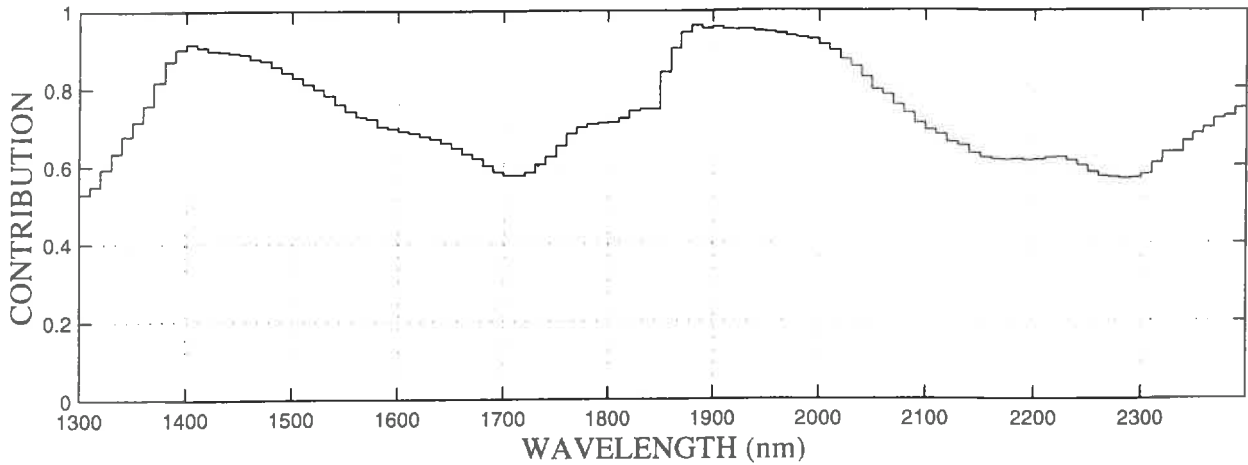


Figure 4 : Contribution of the water to the total leaf absorption. The contribution is computed as: $k_w(\lambda) \cdot \overline{C_w} / (k_{SLW}(\lambda) \cdot \overline{SLW} + k_w \cdot \overline{C_w})$ where \overline{SLW} and $\overline{C_w}$ are the average SLW and C_w values. k_w and k_{SLW} are respectively the specific absorption coefficients proposed by Curcio and Petty (1951) and Fourty *et al.* (1996).

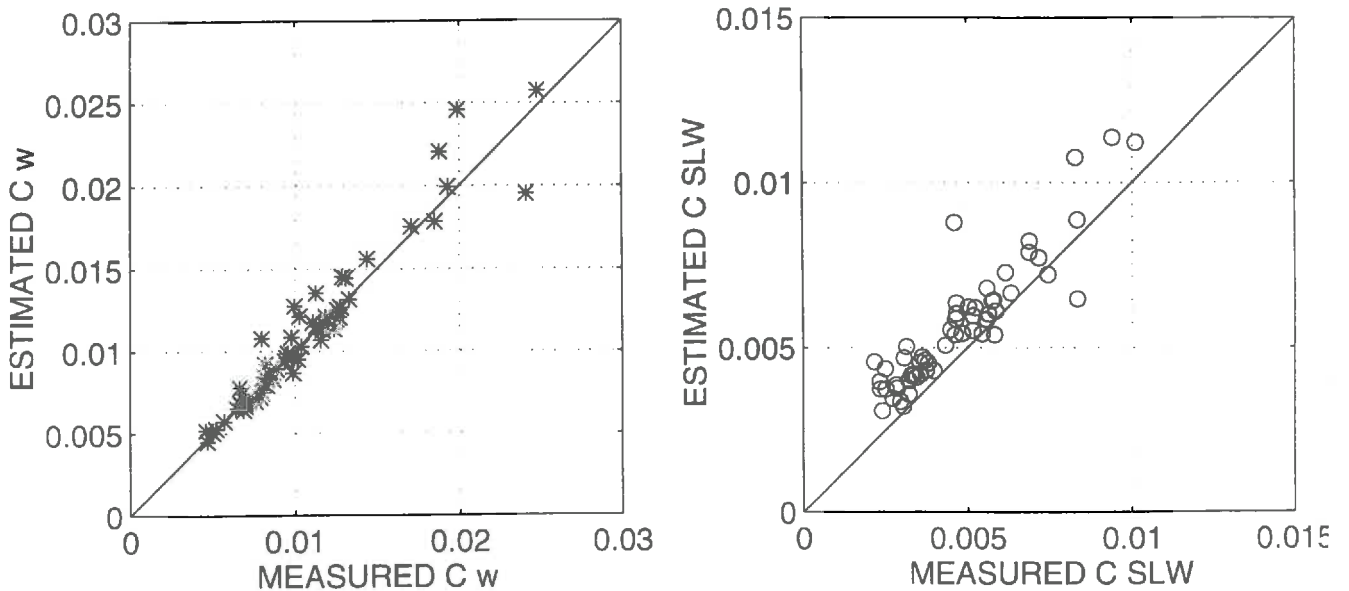


Figure 5 : Water (C_w) and dry matter (SLW) contents retrieved from model inversion using concurrently reflectance and transmittance spectra compared to the measured values of C_w and SLW . The solid line is the 1:1 line.

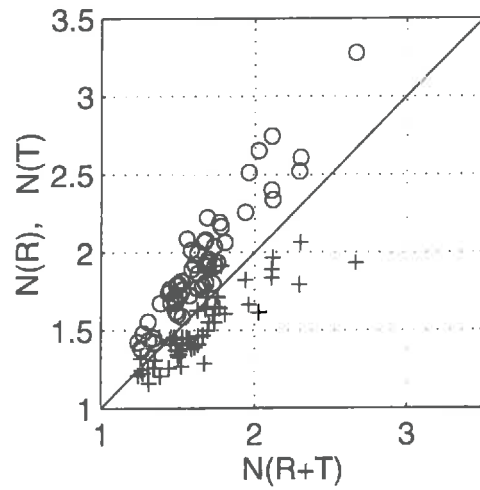
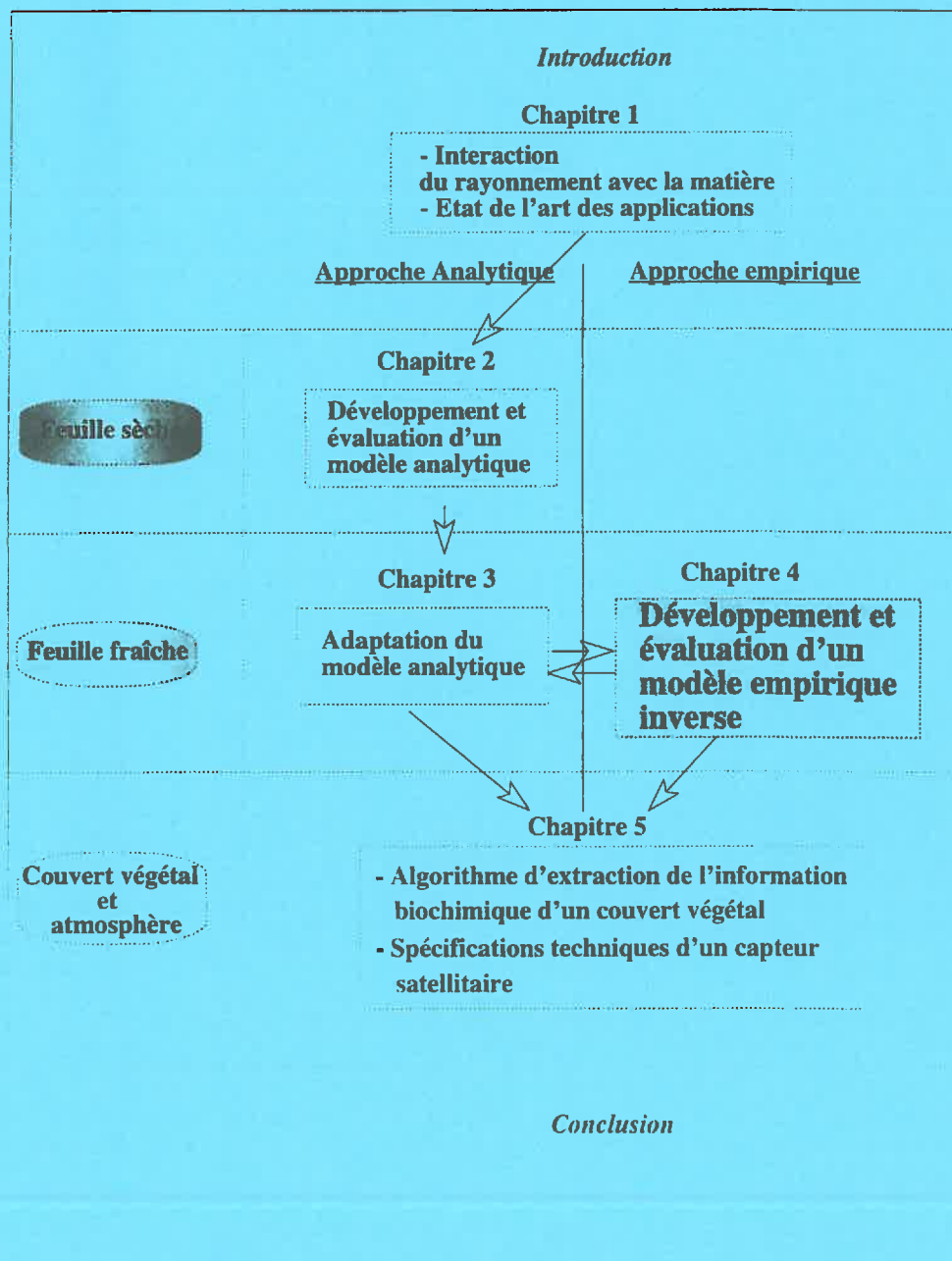


Figure 6 : Comparison between the values of the N structure parameter retrieved from model inversion using concurrently reflectance and transmittance ($N(R+T)$) and those retrieved using from inversion using either reflectance ($N(R)$, +) or transmittance ($N(T)$, o). The solid line is the 1:1 line.

Chapitre 4

Un modèle empirique d'estimation de la composition biochimique de la feuille fraîche



Les résultats du chapitre précédent montrent qu'il est possible d'utiliser une approche analytique pour estimer correctement, par inversion d'un modèle de propriétés optiques, les teneurs en eau et matière sèche d'une feuille fraîche.

Cependant, ce n'est pas la seule approche possible. En effet, comme nous l'avons vu au chapitre 1, de nombreux travaux développent des modèles linéaires pour estimer, de façon empirique, le contenu biochimique de feuilles fraîches directement à partir de données radiométriques.

Nous avons choisi de développer une telle approche parallèlement à l'approche analytique présentée dans les deux chapitres précédents. C'est cette approche empirique que nous présentons dans ce chapitre 4. Deux raisons essentielles ont motivé ce choix méthodologique.

La première raison était de lever des contradictions apparaissant dans la littérature sur la robustesse de l'approche empirique dans ce domaine d'application. Pour cela, nous avons développé des modèles linéaires en mettant l'accent sur la validation de ceux-ci, ce qui nous assurait de la robustesse de nos conclusions.

En second lieu, comparer les estimations sur un même jeu de données par les deux approches nous semblait intéressant. D'un point de vue pratique, l'estimation par l'approche analytique repose en effet sur l'inversion d'un modèle, opération longue et qui doit être faite pour chaque échantillon. Face à cette lourdeur, le modèle empirique présente l'avantage d'être directement valable pour tous les échantillons et de permettre des estimations rapides. C'est donc aussi un souci d'efficacité qui a motivé le développement parallèle des deux approches.

La publication présentée dans ce chapitre 4 est composée de deux parties.

Dans une première partie, nous ajustons et validons des modèles linéaires d'estimation pour les composés biochimiques foliaires suivants : lignine, protéines, cellulose, hemicellulose, amidon, sucre, hemicellulose+cellulose (annexe 1), sans prendre en compte l'effet du bruit instrumental. Les spectres utilisés provenaient en effet tous du même spectromètre, considéré comme non bruité. Nous comparons dans cette partie la variation de la précision des estimations selon l'utilisation des spectres de réflectance, de transmittance ou des spectres respectifs d'absorbance équivalente.

Dans la seconde partie, nous étudions la sensibilité des estimations au bruit instrumental. Pour cela, nous comparons les estimations obtenues lorsque les spectres du jeu d'étalonnage, ou de validation, ou les deux, sont bruités, et ceci pour trois niveaux de bruit.

Spectral estimates of fresh leaf biochemistry

Fourty Th. 1,2, Baret F. 1

1 INRA Bioclimatologie, Site Agroparc, 84 914 Avignon Cedex 9, France.

2 GEOSYS, Parc Technologique, 31526 Ramonville cedex, France

Article soumis à la revue *International Journal of Remote Sensing*

Abstract

Protein, lignin, cellulose, hemicellulose, sugar, starch contents per unit leaf area of fresh leaves were related to the corresponding reflectance and transmittance spectra using multiple linear regressions. When the regressions are evaluated over the data set used for calibrating, they show relatively good performances. However, applying these relations to an independent data set lead to very poor performances. It was concluded that the detailed canopy biochemistry was not accessible in a robust way from fresh leaf optical properties measurements over a large range of leaf types. The only variables that can be accurately derived from leaf reflectance or transmittance measurements are water and dry matter (i.e. the specific leaf weight) contents per unit leaf area. Transforming reflectance (ρ) or transmittance (τ) values into the corresponding absorbance ($\log(1/\rho)$ or $\log(1/\tau)$) values improves the accuracy of the estimates. Using transmittance rather than reflectance provides better retrieval performances. We investigated the sensitivity of the relationships to the radiometric noise associated to reflectance or transmittance measurements. It appears, particularly for water, that the estimates are quite sensitive to the radiometric resolution of the instrument used. We propose a technique that minimises the sensitivity of the estimates to the radiometric noise and improves their robustness. It consists in enlarging the calibration data set by randomly adding instrumental noise similar to that observed over the test data set. Results show that, this way, three wavebands (1910, 1380 and 900 nm for water; 2310, 2160 and 1870 nm for dry matter) allow good estimates of water (RMSE=0.0011 g.cm⁻²) and dry matter contents (RMSE=0.0008 g.cm⁻²).

Keywords: *biochemical composition, fresh leaf, reflectance, absorbance, transmittance, radiometric resolution, multiple linear regression, water content, dry matter content, specific leaf weight.*

1. Introduction

Biochemicals such as lignin, protein, cellulose, sugar, starch or nitrogen and carbon, are directly and indirectly involved in bio-geo-chemical cycles. Knowledge of the biochemical composition of the canopy is a key issue when describing, understanding and predicting ecosystems functioning. For instance, litter degradation is governed by the contents in lignin and nitrogen (Melillo *et al.*, 1982). In the same way, net primary production depends strongly on the availability of nitrogen (Vitousek, 1982). Remote sensing techniques represent a very convenient way of data acquisition able to cover large areas several time during the season. Estimates of the canopy biochemical composition from such data is therefore recognized as a challenge.

Leaves represent the main area seen by plane or satellite borne sensors. Therefore, the spectral signature of leaf biochemical composition may transfer to the canopy level, and potentially provides a way to remotely sense canopy biochemistry (Baret *et al.*, 1994; Borel and Gerstl, 1994). Wessman *et al.* (1988), Peterson *et al.* (1988), Martin and Aber (1994), Johnson *et al.* (1994) Gastellu-Etchegorry *et al.* (1995) developed statistical multivariate analysis to estimate the biochemical composition from airborne high spectral resolution sensors. However, these relationships appear to have very poor predictive performances when applied to other sites (NASA, 1994). This is the reason why efforts are now oriented towards a better understanding of the physical processes that govern the spectral response in connection with the biochemical composition. For this reason, leaf level studies were carried out to model leaf optical properties and to develop robust algorithms to retrieve leaf biochemical composition from their optical properties.

Classical near infrared spectroscopy techniques applied on dry ground leaf material, demonstrated the possibility to retrieve the concentration of many biochemical compounds (Marten *et al.*, 1989). These techniques were applied by researchers in the remote sensing community either using ground material or dry but intact single or stacked leaves, and show reasonable estimates of the biochemical composition (Wessman *et al.*, 1987; Peterson *et al.*, 1988; Card *et al.*, 1988; Mac Lellan *et al.*, 1991). These techniques are based on empirical relationships such as the multiple linear regression. Therefore their portability depends on the level of representativity of the data set on which the relationships were calibrated. Grossman *et al.* (1995) show that it is difficult to apply a relationship developed on one data set to an other independent data set. Fourty *et al.* (1996) used a leaf radiative transfer model to retrieve dry leaf biochemical composition. They concluded however that the retrieval from model inversion was not efficient for the detailed biochemical composition due to the weakness and lack of specificity of the absorption features. The main absorber that can be robustly estimated

is the dry matter content that obviously contains all individual absorbers already cited (cellulose, hemicellulose, protein, sugar, lignin and starch).

Only few works were dedicated to the retrieval of the biochemical composition of intact fresh leaves. Curran *et al.* (1992) and Zagolski (1994) and Jacquemoud *et al.* (1995) used here again classical multiple linear regression techniques. However, Grossman *et al.* (1995) show limited robustness of the relationships developed this way. Baret and Fourty (1996) show also good estimates for water and dry matter contents through model inversion. Jacquemoud and Baret (1990) using the same type of leaf model conclude similarly that water content can be accurately estimated from fresh leaf reflectance spectra. However, the inversion of leaf radiative transfer model lead to poor estimates of the detailed biochemical composition. These poor performances observed for the estimation of the detailed biochemical composition from fresh leaf spectra might be due to the strong water absorption features that mask those of weaker absorbers. Further, instrumental noise, i.e. the radiometric resolution, may drastically degrade the retrieval performances. Several data preprocessing techniques have been used to minimize the effect of the instrumental noise. Wessman *et al.* (1987), Jacquemoud *et al.* (1995) and Grossman *et al.* (1995) averaged several spectra. Spectral smoothing using least square curve or spline curve fitting and Fourier spectral decomposition were also used (Wessman *et al.*, 1987; Peterson *et al.*, 1988; Curran *et al.*, 1992). However, these techniques smooth weak absorption features. In the same way, approximations introduced in the modeling of radiative transfer of the leaf might also induce errors that confound the effect of a variation in the biochemical composition, and lead to unrealistic contents through model inversion process.

This study aims at evaluating the possibilities of extracting in a robust way the biochemical information from the optical properties of fresh and intact leaves. We chose an empirical approach based on classical multiple linear regression developed over a data set representing the widest and independent variation of leaf biochemical composition, using a large range of species and environmental conditions. We will pay particular attention to the effect of the instrumental noise. We will investigate the 860-2400nm spectral domain that corresponds to the absorption signature of most biochemicals as well as water (Curran, 1989; Himmelsbach *et al.*, 1988).

2. Material and methods

2.1. The data set

We have used the LOPEX data set (Hosgood *et al.*, 1995) that provides detailed biochemistry content and directional hemispherical reflectance and transmittance of 57 leaf types providing a large range of nutrient availability, sun exposure, and species, including mono and dicotyledones.

Radiometric measurements in the 860-2400 nm range were performed using a Perkin-Elmer spectrophotometer equipped with an integrating sphere. This configuration minimizes problems related to the non-Lambertian properties of leaves by measuring the directional hemispherical reflectance or transmittance. This instrument provides a spectral resolution around 2 nm depending on the wavelength, with a 1 nm sampling interval. The output signal was calibrated into absolute directional/hemispherical reflectance or transmittance using spectralon references. The reflectance and transmittance of five samples for each leaf type were acquired and then averaged after calibration. The absolute spectral noise level was very small, close to 0.0005 both for reflectance and transmittance.

The following biochemical contents were estimated using classical wet chemistry methods: cellulose (Weende, 1985); hemicellulose and lignin (Van Soest and Masson, 1967; Van Soest and Wine, 1991); protein (A.O.A.C., 1970); starch (Ewerts, 1985). We considered the remaining dry matter as being made of ash (measured by elemental microanalysis), 2% lipid (Pening de Vries *et al.*, 1974; Williams and Norris, 1987) and of the cell soluble. For convenience, we use the generic name "sugar" for the soluble cell, sugar representing most of it.

Leaf reflectance or transmittance are directly governed by the contents of absorber per unit leaf area ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) rather than concentration ($\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$). Therefore, we converted concentration of each compound into contents per unit leaf area using the dry matter content per unit leaf area, i.e. the specific leaf weight (*SLW*). It results to the distribution of biochemical contents presented in Table 1. We did not present results for carbon and nitrogen that were measured by elemental micro analysis, because they are highly correlated respectively to dry matter ($C_{\text{Carbon}}=0.5065\cdot SLW$, $R^2=0.995$) and protein contents ($C_{\text{Nitrogen}}=0.1584\cdot C_{\text{Protein}}$, $R^2=0.963$).

We split the data set into two subsets, one used for calibrating the relationships (28 samples), the other to test the retrieval performances (29 samples). This enables to evaluate the robustness of the relationships using a test data set independent from the calibration data

set. We split the data set in order to get similar distributions of the biochemical contents for the calibration and test data sets.

2.1.1. Radiometric resolution

Because the retrieval of the biochemical composition is implicitly based on differential absorption, it should be sensitive to the instrumental noise that characterizes its radiometric resolution. We considered a Gaussian noise independent from the wavelength and computed as:

$$V_{noisy} = V + (0, \sigma) \quad [2]$$

where V and V_{noisy} are respectively the actual and noisy reflectance or transmittance values, $(0, \sigma)$ is the Gaussian distribution function, with a zero mean and a standard deviation σ characterizing the level of noise, i.e. the radiometric resolution. We investigated a range of radiometric resolution: 0.000, 0.001 and 0.010.

2.1.2. Spectral resolution

We degraded the original spectral resolution to reduce the size of the data set and to be more comparable to current spectrophotometers measurements routinely used for laboratory level estimation of the biochemical composition from classical near infrared spectrophotometry techniques (Marten *et al.*, 1989). We used a 10 nm spectral resolution which is also more comparable with current spectro-imaging systems capabilities while keeping the ability to resolve absorption features of the order of 20 to 40 nm such as those observed in the near and short wave infrared domains. We applied a Gaussian filter defined by a half transmission at $\lambda \pm \frac{1}{2} \Delta \lambda$ and truncated at ± 20 nm around λ . Thus, more than 60% of the signal comes from the $\lambda \pm \frac{1}{2} \Delta \lambda$ area. We chose a spectral sampling interval of 10 nm centered on each round 10 nm wavelength. Due to this spectral integration, the center wavelengths studied are in the 880 to 2380 nm range rather than in the original 860-2400 nm domain. The reflectance spectra are thus made of 151 contiguous wavebands. The addition of the noise was performed before this spectral integration. Therefore, the effective noise levels at the 10 nm spectral resolution are 0.00026 and 0.00260 respectively for the 0.001 and 0.010 noise levels at 1nm spectral resolution.

For the calibration data set, we repeated ten random drawings of the noise which extends the original 29 sample size to $10 \times 29 = 290$ spectra on which the relationship is developed. For the test data set, we similarly repeated ten random drawings of the noise.

2.1.3. Transformation into absorbance values

The relationship between reflectance or transmittance and the content in a given absorber is known to be non linear, with classical saturation occurring for the higher values of contents. Following near infrared spectrophotometry techniques (Marten *et al.*, 1989), this non linear behavior is minimized when transforming reflectance, $\rho(\lambda)$, or transmittance, $\tau(\lambda)$, into the corresponding absorbance values ($\alpha_\rho(\lambda)$ or $\alpha_\tau(\lambda)$):

$$\alpha_\rho(\lambda) = \log\left(\frac{1}{\rho(\lambda)}\right); \quad \alpha_\tau(\lambda) = \log\left(\frac{1}{\tau(\lambda)}\right) \quad [1]$$

In the following, we will investigate the possible increase of the estimation performances when using absorbance values rather than the simple reflectance or transmittance values.

2.2. Calibration and test of the multiple linear regression

2.2.1. Multiple linear regression

The multiple linear regression explained a variable (C) as a linear combination of a selection of n independent variables ($\alpha(\lambda)$) corresponding to n wavebands λ :

$$C = \gamma_0 + \sum_{i=1}^n \gamma_i \cdot \alpha(\lambda_i) + \varepsilon \quad [2]$$

where γ_i are coefficients to be determined and ε is the residual error. The multiple linear regression used is an iterative process. First, a correlation matrix between the dependent variable (C) and all the independent variables ($\alpha(\lambda)$) is computed. The waveband (λ) having the highest R^2 value is selected. The γ_0 and γ_i coefficient are then estimated through a least square algorithm. The residual error is computed. A new correlation matrix is computed between the residual error and the remaining wavebands. The band that corresponds to the highest correlation coefficient value is selected, and a new linear model is fitted to estimate the γ_0 , γ_i and γ_j coefficients. The new residual error is computed and the procedure is iterated up to a certain number of wavebands selected. Hruschka (1987) advised to select one regressor (waveband) per 10 samples available. In this study, this criteria would lead to select

up to three wavebands. Nevertheless, we selected up to six wavebands in order to evaluate the stability of retrieval performances. Further, in the case of spectra contaminated with radiometric noise, the ten random drawings of the radiometric noise allow to extend the number of bands selected due to the larger size of the data set (280 individuals).

2.2.2. Evaluation of retrieval performances.

We computed a statistics, the T value, which is similar to the R^2 value, except that it measures the scattering around the 1:1 line. The T value is defined as:

$$T = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (C - \hat{C})^2}{\sum_{i=1}^n (C - \bar{C})^2} \quad [3]$$

where \hat{C} and \bar{C} are respectively the estimated and average value of the dependent variable, and C is the actual value in the test data set. A perfect fit will result in $T=1.0$. Poor estimation performances result in low T values, that can be even negative. The use of T is here preferred because it allows a direct evaluation of the equality between variables. The T values can be computed for the calibration data set over the 280 samples in the case of noisy spectra. For the test data set, the T value was computed over the 29 samples when not contaminated by the radiometric noise, and for each of the ten random drawings of the noise when noise is induced. This allows to calculate the average T value and its confidence interval.

3. Results and discussion

We will first concentrate on the estimates of water and dry matter contents using reflectance or transmittance spectra not contaminated by instrumental noise ($\sigma=0$). This will provide a better comparison with previous results obtained using the physical approach, i.e. leaf optical properties model inversion (Baret and Fourty, 1996; Fourty *et al.*, 1996). This will also help to decide whether or not the transformation of spectral data into absorbance values increases the retrieval performances of the biochemical composition.

3.1. Retrieval performances using radiometric values not contaminated by noise

We will first concentrate on water (C_w) and dry matter (SLW) contents per unit leaf area which are the stronger absorbing materials.

3.1.1. Water and dry matter contents.

Results show that C_w or SLW are generally well estimated from the corresponding reflectance, transmittance, or their transforms into absorbance values (Figure 1). This is in good agreement with our previous results obtained using the PROSPECT model inversion (Baret and Fourty, 1996). This is also in good agreement with previous results obtained using empirical approaches (Curran *et al.*, 1992; Grossman *et al.*, 1995). We observe an increase of the T values up to two or three wavebands selected, and then a plateau or a slight decrease particularly for the test data set. This decrease can be explained by overfitting problems, when the relationship describes individual features of the calibration data set rather than the pertinent trend we are looking for. It is particularly important for C_w as derived from α_τ . Calibration data sets have obviously higher T values than the test data sets. We observe that for both reflectance and transmittance, the transformation into the corresponding absorbance values generally increases the accuracy of the estimates, except for water content over the test data set using transmittance where the overfitting problems were noticed. Therefore, we will mainly use absorbance values in the following, which is in good agreement with classical results coming from near infrared spectroscopy laboratory techniques (Marten *et al.*, 1989).

Using the transmittance (α_τ) improves the estimation performances as compared to reflectance (α_ρ). This is very true for the calibration data set, although it is also verified for the test data set. This result is explained when considering the light effective path in the leaf: in contrast to the light reflected by the leaf, most of the light transmitted through the leaf interact with the whole leaf structure due to scattering. Therefore the light transmitted provides more information on the absorption signature than the light reflected.

Water is slightly better retrieved as compared to dry matter. This agrees well with results obtained through model inversion by Baret and Fourty (1996). This is easily explained by the more specific absorption features and the stronger contribution of water to absorption. The main role played in leaf absorption process by water explains why retrieval performances are quite satisfactory since the first band selected, in opposition to the two bands required for dry matter. Retrieval of dry matter implicitly forces to correct for variation in the water content.

3.1.2. Detailed biochemical composition.

The T values computed over the calibration data set show good retrieval performances (Figure 2). This agrees well with the results obtained by Curran *et al.* (1992), Gastellu-Etchegorry *et al.* (1995), Jacquemoud *et al.* (1995) and Grossman *et al.* (1995). However, when investigating the portability of these relationships over independent data sets such as our test data sets, we observe very poor performances (Figure 2). This is in good agreement with results obtained by model inversion over dry leaves by Fourty *et al.* (1996) who showed very inaccurate estimates of the detailed biochemical composition. The lack of robustness of the empirical relationships developed illustrates the danger of extrapolating such relationships without preliminary evaluation over independent data sets. The worse performances are observed for starch, hemicellulose and sugar that have small contribution to the leaf absorption or not very specific absorption features (Fourty *et al.*, 1996). Cellulose, protein, lignin have slightly higher T values, cellulose+hemicellulose having the highest one but it does not exceed 0.7. Cellulose+hemicellulose represents about one third of the leaf dry mass. For these biochemicals, there is no clear advantage of using transmittance (α_T) over reflectance (α_R) either for the calibration or test data sets. We observe also that the number of wavebands necessary to reach the maximum T value is higher than for water or dry matter. This is explained by the weakness and non specificity of absorption features of those biochemicals. Further, they might be masked by the strong water absorption.

In the next section, we will consider the effect of the radiometric resolution on the retrieval performances. Because of the very poor results observed for the detailed biochemical composition, we will focus only on water and dry matter contents. We will also mainly consider transmittance (α_T) that generally provides better retrieval performances for water and dry matter.

3.2. Effect of the radiometric resolution

3.2.1. Effect on water content estimates

When the test data set is contaminated by radiometric noise, retrieval performances of water degrades drastically since the first waveband selected when using the relationship established over the original calibration data set ($\sigma=0.000$) (figure 3a). This is explained by the fact that the regression selects wavebands characterizing small differential absorption features (i.e. 1920 and 1940 nm, see table 2) that can be masked by even small radiometric noise levels. This behavior could be corrected by calibrating the relationships over data sets

that are also contaminated with similar radiometric noise. Results show, as expected, that adding noise when calibrating the relationships confers robustness and minimizes the effect of the radiometric noise over the test data sets (Figure 3b and 3c). Table 2 shows that the bands selected are quite different from those selected by the regression applied on the unnoisy calibration data set. The T values observed over the test data sets contaminated or not with noise are high ($T > 0.95$) for the three first wavebands selected with calibration spectra contaminated with 0.001 or 0.010 noise levels. Confidence interval of the T values computed from the ten replicates of noise over the test data sets are lower than 0.02 when T is higher than 0.7. The reduction of the noise effect is more efficient if the level of noise considered in the calibration data set is at least on the same range as the one associated to the test data set: the third to sixth wavebands selected using calibration spectra contaminated with $\sigma = 0.001$ induce a drastic decrease of the retrieval performances over the test data set contaminated with $\sigma = 0.010$ (Figure 3b). However, the three first wavebands selected by the regression established over noisy calibration data sets (Figure 3b and 3c) provide accurate estimates of the water content independently of the noise levels considered in the test data set. The corresponding positions of the three first bands selected is relatively stable (Table 2), which is not the case for the next wavebands selected. Figure 5 shows the high quality ($RMSE = 0.0011$) of the estimates with three wavebands selected and the level of noise $\sigma = 0.010$ associated to the calibration data set. As observed previously, using transmittance (α_{τ}) rather than reflectance (α_{ρ}) measurements improves the retrieval performances (Table 3). The bands selected are spread out over the whole spectral domain and they span over the whole range of variation of the absorption coefficient of water (Figure 4 and table 2).

3.2.2. Effect on dry matter content estimates

When the relationship is calibrated over data sets not contaminated by radiometric noise, the retrieval performances are still quite high even when applied to test data sets with significant radiometric noise (Figure 3d). This is in opposition to what was found for water and is explained by the fact that for dry matter, the positions of the wavebands selected are not sensitive to the level of radiometric noise associated to the calibration data set (Table 2). Therefore, the regressions express a very small sensitivity to the radiometric noise (Figure 3d, 3e and 3f). Nevertheless, similarly to water, the reduction of the noise effect is more efficient if the level of noise considered in the calibration data set is at least on the same range as the one associated to the test data set: the sixth waveband selected using calibration spectra not contaminated with noise (figure 3d) or contaminated with $\sigma = 0.001$ (Figure 3e) induce a significant decrease of the retrieval performances over the test data set contaminated with $\sigma = 0.010$. The confidence interval of the T values are larger for dry matter than for water, but

are anyway lower than 0.04 for T values higher than 0.7. Figure 6 shows the high quality ($RMSE=0.0008$) of the estimates with three wavebands selected and the level of noise $\sigma=0.010$ associated to the calibration data set. As observed on water, using transmittance (α_{τ}) rather than reflectance (α_{ρ}) measurements improves the retrieval performances (Table 3). The bands selected are here preferentially located in the 1400-2400nm spectral domain where dry matter absorbs the most and span also over the whole range of variation of the dry matter specific absorption coefficient (Figure 4 and table 2).

4. Conclusion

This study shows that the detailed biochemistry (protein, lignin, starch, sugar, cellulose, hemicellulose) is not accessible in a robust and accurate way from fresh leaf reflectance or transmittance measurements when observing within a large range of species. Good performances are observed only when testing the relationships over the data set on which they were established which is in good agreement with previous empirical studies for which generally no evaluation was performed on an independent data set. However, when extrapolating these relationships to an independent data set, the retrieval performances are very poor. This is in good agreement with results obtained from model inversion by Fourty *et al.* (1996) over dry leaf samples. The weakness and the poor specificity of biochemical absorption features prevent from accurately estimating the contents from leaf optical properties measurements. Further, in the case of fresh leaves, the strong water absorption features mask most of the other weaker absorption features. However, these results obtained on a very wide range of leaf types have to be moderated in more particular cases. For example, it might be possible to empirically derive accurate and robust detailed biochemistry composition from fresh leaf reflectance or transmittance spectra over a limited set of species and under controlled conditions. In this case, we thus have to make sure that the leaves on which they apply actually belong to the domain of variation of the calibration data set.

The only leaf constituents that are robustly accessible from fresh leaf reflectance or transmittance measurements are water and dry matter (i.e. specific leaf weight). For water, this is in good agreement with results from empirical approaches such as those of Tucker (1980) and model inversion approaches. (Jacquemoud and Baret, 1990; Baret and Fourty, 1996). However, the accuracy of the estimates are very sensitive to the radiometric resolution of the sensor used to measure reflectance or transmittance spectra. This was explained by the fact that the regression may select small absorption features that are easily confounded by even a small level of radiometric noise. This was particularly true for water. This sensitivity to

the radiometric resolution was minimized by inducing similar noise levels on the data set used to calibrate the relationships. This simple technique provides more robust relationships that can be applied with better results on noisy data sets as well as unnoisy data sets. The non linear behavior of the relationship between reflectance or transmittance and water or dry matter contents is better accounted for when transforming the radiometric measurements into the corresponding absorbance values which agrees well with classical results of near infrared spectroscopy techniques. Using transmittance improves the retrieval of water and dry matter contents as compared to reflectance. Finally, three wavelengths selected by the linear multiple regression appear to allow good and robust estimates of water and dry matter contents from fresh leaf transmittance spectra (900, 1380 and 1910 nm for water; 1870, 2160 and 2310 nm for dry matter).

This study was performed over a limited data set expressing however a large range of species and physiological states of leaves. More tests over other independent data sets are required. Then, we should focus on the transfer of this approach to the canopy and satellite levels for which many other variables such as canopy structure, soil optical properties, atmospheric characteristics may confound the leaf absorption signal.

Acknowledgments

We thank very much the agencies that participated to the funding of this study: European Space Agency (Europe) under the "plant canopy biochemistry" contract 10661/93/NL/SF, CNES (France). We thank also the Joint Research Center (Europe) for kindly providing the LOPEX data set. We are grateful to J.S. Frossard and M. Vandame for elemental composition measurements. Special thanks also to Nathalie Girard and Marie Weiss for efficient writing assistance.

References

- A.O.A.C., 1970. Official method of analysis (11 th Ed.) Association of official analytical chemists, Washington D. C.
- Baret F., Fourty T., 1996. Spectral estimates of leaf water content and specific weight. *Remote Sens. Environ.*, submitted.
- Baret F., Vanderbilt V. C., Steven M. D., Jacquemoud S., 1994. use of spectral analogy to evaluate canopy reflectance sensitivity to leaf optical properties. *Remote Sens. Environ.*, 47:1-25.
- Borel C.C., Gerstl S.A.W., 1994. Are leaf chemistry signatures preserved at the canopy level? *IEEE Transactions on Geosciences and Remote Sensing*.

- Card D.H., Peterson D.L., Matson P.A., Aber J.D., 1988.** Prediction of leaf chemistry by use of visible and near infrared reflectance spectroscopy. *Remote Sens. Environ.*, 26:123-147.
- Curran P. J., 1989.** Remote sensing of foliar chemistry: Review. *Remote sens. Environ.*, 30:271-278.
- Curran P. J., Dungan J. L., Macler B. A., Plummer S. E., Peterson D. L., 1992.** Reflectance spectroscopy of fresh whole leaves for the estimation of chemical concentration. *Remote Sens. Environ.*, 39:153-166.
- Ewerts, 1985.** 3ème Directive avec rectification (J.O.C.E. du 27 novembre 1980), in *Recueil des normes francaises-AFNOR*.
- Fourty T., Baret F., Jacquemoud S., Schmuck G., Verdebout J., 1996.** Leaf optical properties with explicite description of its biochemical composition: direct and inverse problems. *Remote Sens. Environ.*, 56:104-117.
- Gastellu-Etchegorry J. P., Zagolski F., Mougín E., Marty G., 1995.** Assessment of canopy chemistry using AVIRIS, a case study in the landes forest, south-west France, *Int. J. Remote Sensing*, 16(3):487-501.
- Grossman Y. L., Ustin S.L., Jacquemoud S., Sanderson E., Schmuck G., Verdebout J., 1995.** Critique of stepwise linear regression for the extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, in press.
- Himmelsbach D. S., Boer J. D., Akin D. E., Barton II F. E., 1988.** Solid -state carbon-13 NMR, FTIR and NIR spectroscopic studies of ruminant silage digestion, in *Analytical Applications of spectroscopy*, (C.S. Creaser and A. M. C. Davies Eds.), Royal Society of Chemistry, London,410-413.
- Hosgood B., Jacquemoud S., Andreoli G., Verdebout J., Pedrini G., Schmuck G., 1995.** Leaf Optical Properties EXperiment 93 (LOPEX 93), European Commission, Joint Research Centre, Institute For Remote Sensing Applications, Ispra (Italy), Report EUR-16095-EN.
- Hruschka W.R., 1987.** Data analysis: wavelength selection methods. *Near infrared technology in the agricultural and food industries*. Williams P.C. and Norris K.H. eds. St. Paul MN (USA), American association of cereal chemists, inc.: chapter 3.
- Jacquemoud S., Baret F., 1990.** PROSPECT: a model of leaf optical properties, *Remote Sens. Environ.*, 34:75-91.
- Jacquemoud S., Verdebout J., Schmuck J., Andreoli,G., Hosgood B., 1995.** Investigation of leaf biochemistry by statistics. *Remote Sens. Environ.*, 54(3):180-188.
- Johnson L.F., Hlavka C.A., Peterson D.L., 1994.** Multivariate analysis of AVIRIS data for the canopy biochemical estimation along the Oregon transect, *Remote Sens. Environ.*, 47:216-230.
- Marten, G. C., Shenk, J. S., Barton, F. E., 1989.** Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality, USDA Handbook 643, U.S. Departement of agriculture. Washington, DC.
- Martin M. E., Aber J.D., 1994.** High spectral resolution remote sensing of canopy chemistry. *International symposium of the ISPRS*, Val d'Isère (France), CNES.
- Mc Lellan T.M., Aber J.D., Martin M.E., Melillo J.M., Nadelhoffer K.J., 1991.** Determination of nitrogen, lignin and cellulose content of decomposing leaf material by near infrared reflectance spectroscopy. *Canadian Journal of Forest Research*, 21:1684-1689.
- Melillo J.M., Aber J.D., Muratore J.F., 1982.** Nitrogen and lignin control of hardwood leaf litter decomposition dynamics. *Ecology*, 63:621-630.
- NASA, 1994.** Accelerated canopy chemistry program. Final report to NASA-EOS-IWG. Washington (DC), NASA.
- Pening de Vries F. W. T., Brunsting A. H. M., Van Laar H. H., 1974.** Products, requirements and efficiency of biosynthesis: A quantitative approach. *J. Theoretical biol.*, 45:339-377.

- Peterson D. L., Aber J. A., Matson P. A., Card D. H., Swanberg N., Wessman C., Spanner M., 1988.** Remote sensing of forest canopy and leaf biochemical contents. *Remote Sens. Environ.*, 24:85-108.
- Tucker C.J., 1980.** Remote sensing of leaf water content in the near infrared. *Remote Sens. Environ.*, 10:23-32.
- Van Soest P.J., Masson V.C., 1967.** The influence of the Maillard reaction upon the nutritive values of fibrous feed. *Feed Sci. and Technol.*, 32:45-53.
- Van Soest P. J. , Wine R., 1991.** Use of detergent in the analysis of fibrous feeds. IV Determination of plant cell wall constituents. *J. Ass. Off. Agric. Chem.*, 50:50-55.
- Weende P., 1985.** NF V03-400, in *Recueil des normes francaises-AFNOR*.
- Wessman C.A., Aber J.D., Peterson D.L., Melillo J.M., 1988.** Remote sensing of canopy chemistry and nitrogen cycling in temperate forest ecosystems. *Nature*, 335:154-156.
- Wessman C. A., Aber J.D., Peterson D.L., Melillo J.M., 1988.** Foliar analysis using near infrared reflectance spectroscopy. *Can. J. For. Res.*, 18: 6-11.
- Williams P., Norris K.H., 1987.** Near-Infrared technology in the Agricultural and Food Industries, American Association of Cereal Chemists, St. Paul, MN, USA.
- Vitousek P.M., 1982.** Nutrient cycling and nutrient use efficiency. *American Nature*, 119:553-572.
- Zagolski F., 1994.** Evaluation des concentrations chimiques d'un couvert forestier à l'aide de la haute résolution spectrale. Thèse de l'University Paul Sabatier, Toulouse (France), 173 p.

Chemical	Minimum	Average	Maximum
Protein	0.0005	0.0009	0.00017
Cellulose	0.0003	0.0010	0.0028
Lignin	0.0000	0.0006	0.0026
Starch	0.0000	0.0001	0.0004
Hemicellulose	0.0000	0.0008	0.0025
Sugar	0.0000	0.0013	0.004
Hemicellulose+Cellulose	0.0005	0.0018	0.0047
Nitrogen	0.0001	0.0002	0.0003
Carbon	0.0010	0.0024	0.0052
Dry matter (SLW)	0.0022	0.0047	0.0101
Water	0.0046	0.0104	0.0248

Table 1 : Minimum, average and maximum contents (g.cm⁻²) of the main biochemical compounds observed in the data set (57 leaf types)

Wavebands selected	Water			Dry matter		
	$\sigma=0.000$	$\sigma=0.001$	$\sigma=0.010$	$\sigma=0.000$	$\sigma=0.001$	$\sigma=0.010$
1	1920	1920	1910	2300	2300	2310
2	1940	1070	900	1870	1870	1870
3	910	1390	1380	2160	2160	2160
4	1990	1960	1260	1410	1410	1400
5	1880	1900	1300	1930	1930	1900
6	1390	1890	1010	2200	2200	2150

Table 2 : Wavebands (nm) selected to explain water and dry matter contents by the multiple linear regression when calibrating over spectra contaminated with the three levels of noise ($\sigma=0.000$; $\sigma=0.001$; $\sigma=0.010$)

Level of noise		Water		Dry matter	
Calibration	Test	α_p	α_t	α_p	α_t
0.000	0.000	0.8676	0.8880	0.7618	0.8550
	0.001	0.8659	-1.5159	0.7607	0.8549
	0.010	0.8319	-8.5165	0.6488	0.8108
0.001	0.000	0.8683	0.9561	0.7645	0.8550
	0.001	0.8671	0.9558	0.7629	0.8546
	0.010	0.8294	0.9391	0.6717	0.8004
0.010	0.000	0.8894	0.9517	0.7513	0.8497
	0.001	0.8895	0.9518	0.7510	0.8493
	0.010	0.8593	0.9493	0.6715	0.8013

Table 3 : T values observed for water and dry matter using the three first wavebands selected as a function of the level of radiometric noise applied to the calibration and test data sets. Values are presented for absorbance computed with reflectance (α_p) or transmittance (α_t).

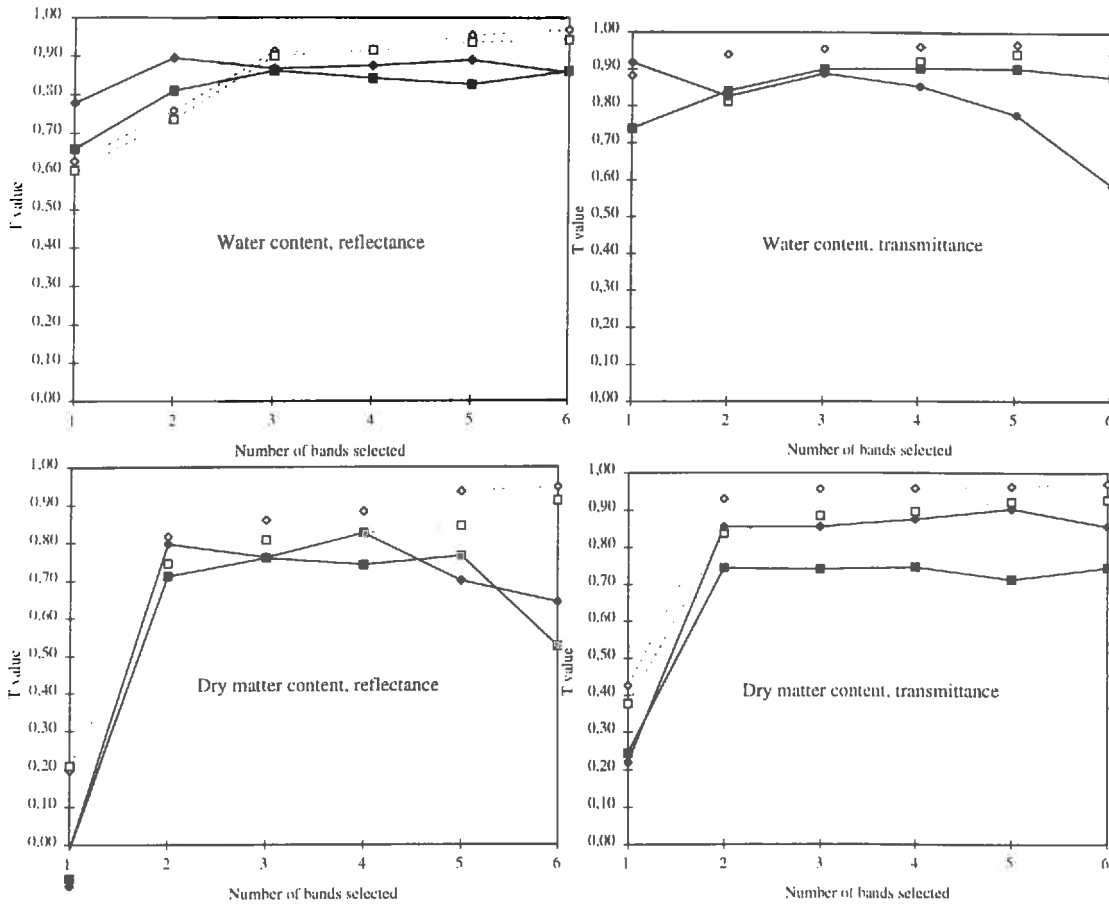


Figure 1 : T values obtained for the estimation of water or dry matter contents using reflectance or transmittance values. Dashed (open symbols) and solid (plain symbols) lines correspond respectively to the calibration and test data sets. Squares and diamonds correspond respectively to the use of ρ (or τ) and α_ρ (or α_τ).

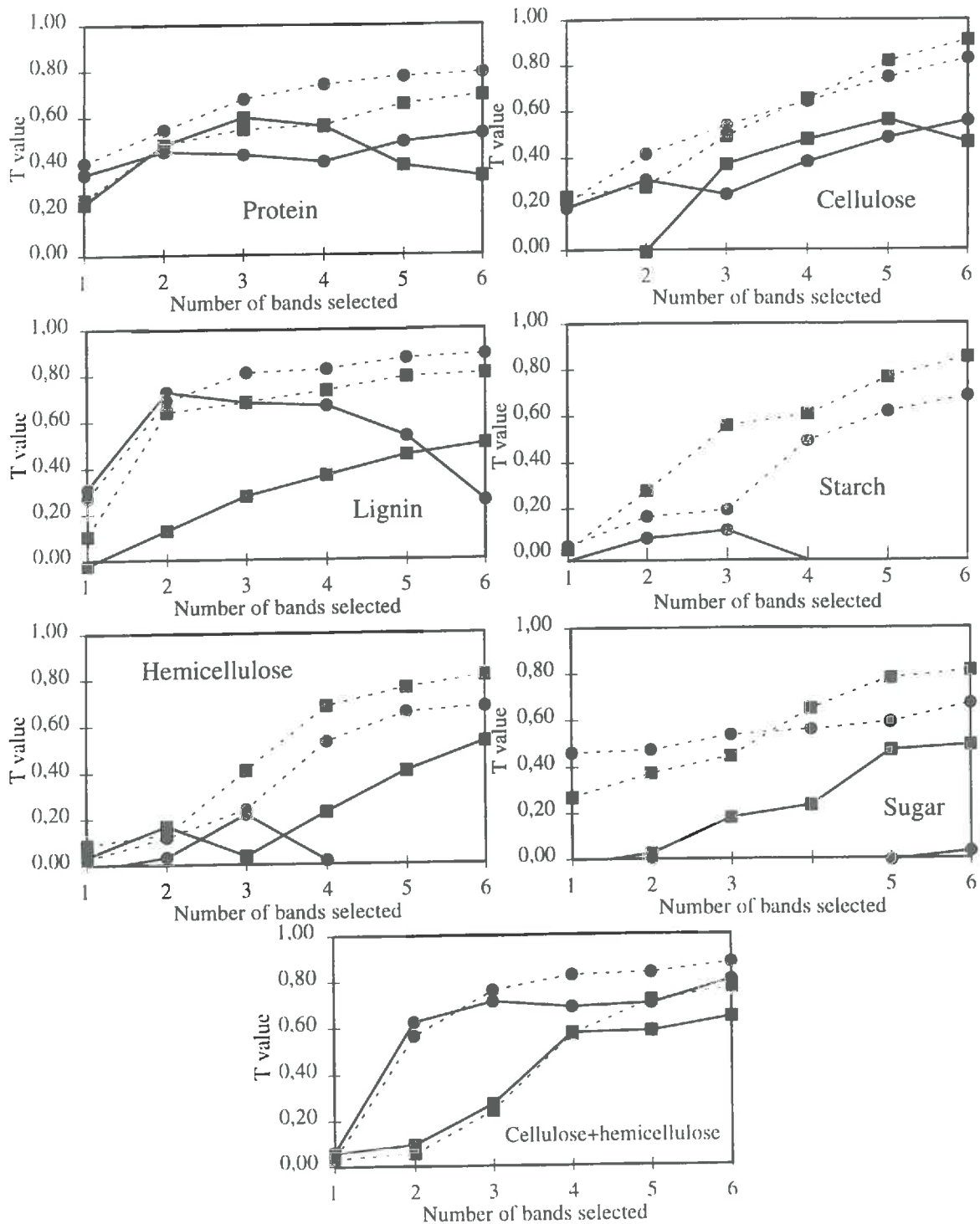


Figure 2 : T values computed over the calibration (dashed lines) and test (solid lines) for the several biochemical contents estimated using α_ρ (■) or α_τ (●) values

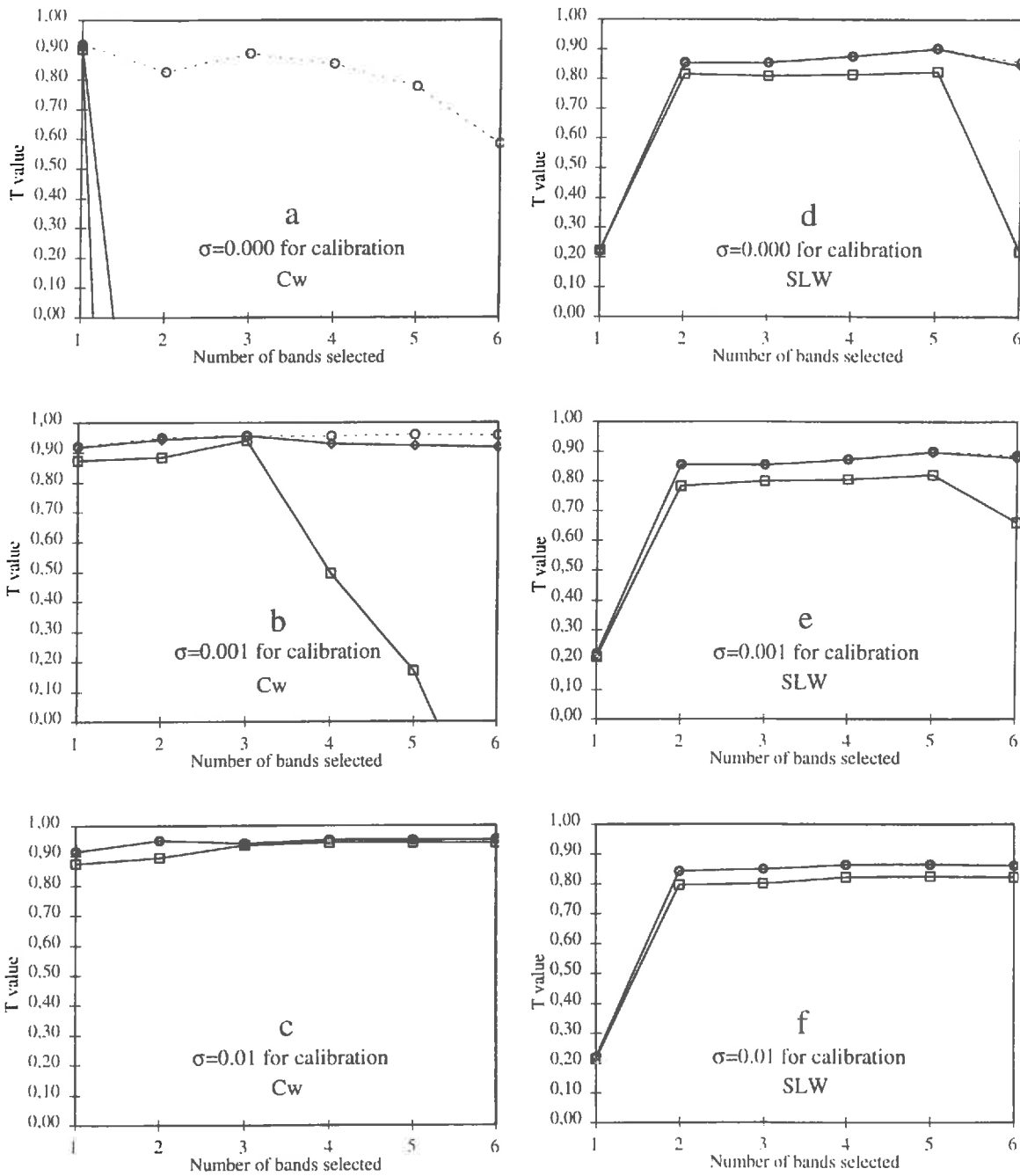


Figure 3 : Average T values obtained on the test data set for the estimation of water (Cw: figure 3a, 3b and 3c) and dry matter (SLW figure 3d, 3e and 3f) as a function of the number of wavebands selected for the three levels of radiometric noise induced in the calibration data set ($\sigma=0.000$, figure 3a and 3d; $\sigma=0.001$, figure 3b and 3e; $\sigma=0.010$, figure 3c and 3f). Results presented on the test data set associated with the three levels of radiometric noise: $\sigma=0.000$ (---O---); $\sigma=0.001$ (—◇—); $\sigma=0.010$ (—┘—). The average T values are computed over ten replicates of the test data set.

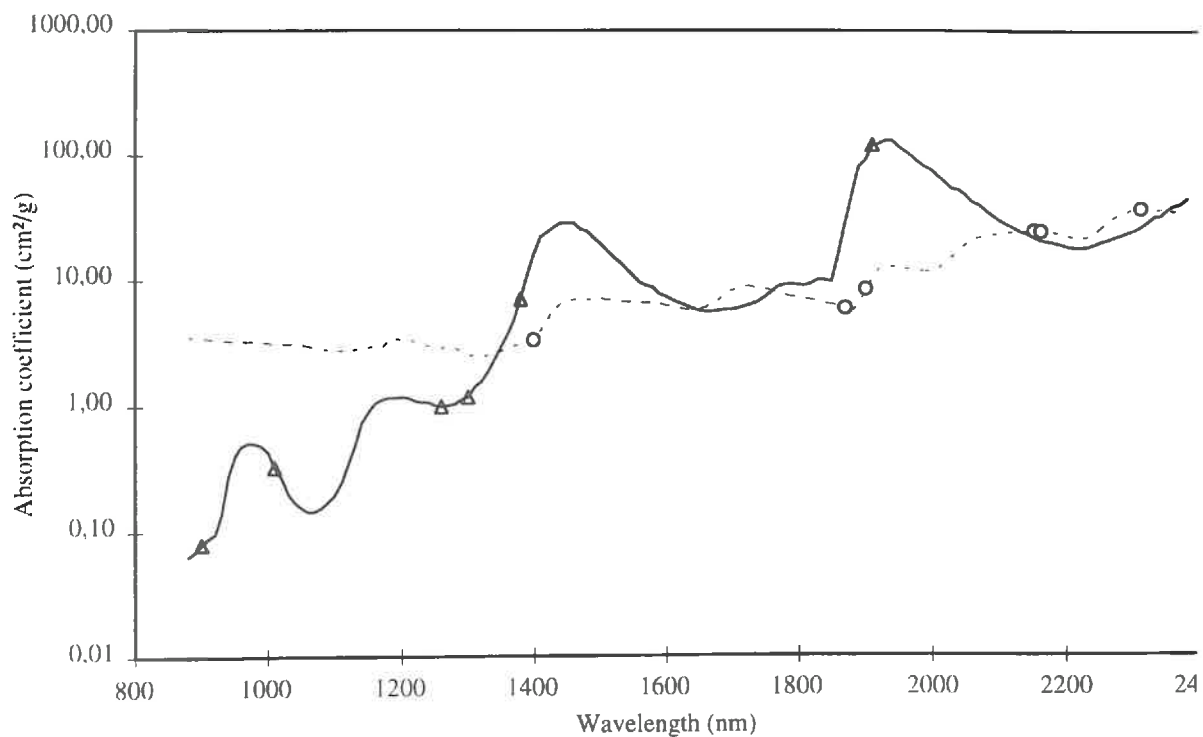


Figure 4 : Specific absorption coefficients ($\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$, logarithmic scale) as a function of wavelength for water (solid line) and dry matter (dashed line) (from Baret and Fourty, 1996). The positions of the 6 bands selected by the linear regression calibrated using spectra contaminated by $\sigma=0.010$ noise level are indicated for water (Δ) and dry matter (O)

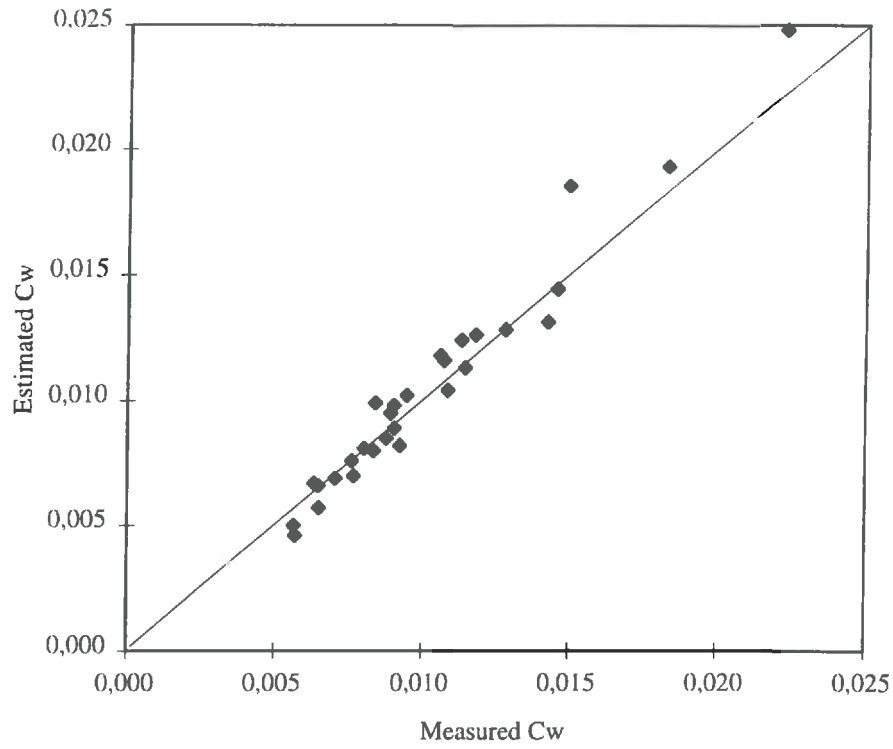


Figure 5 : Comparison between water contents (g.cm^{-2}) estimated from the linear regression, and the measured values. The regression was developed on the calibration data set with $\sigma=0.010$ using three wavebands. The comparison is performed over the test data set without noise ($\sigma=0.000$).

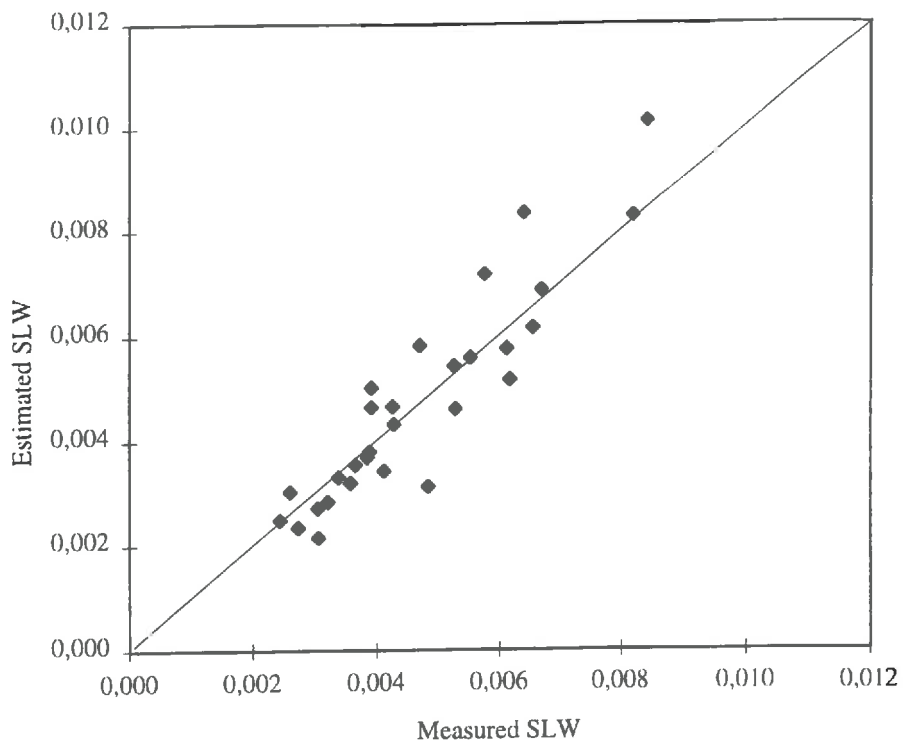
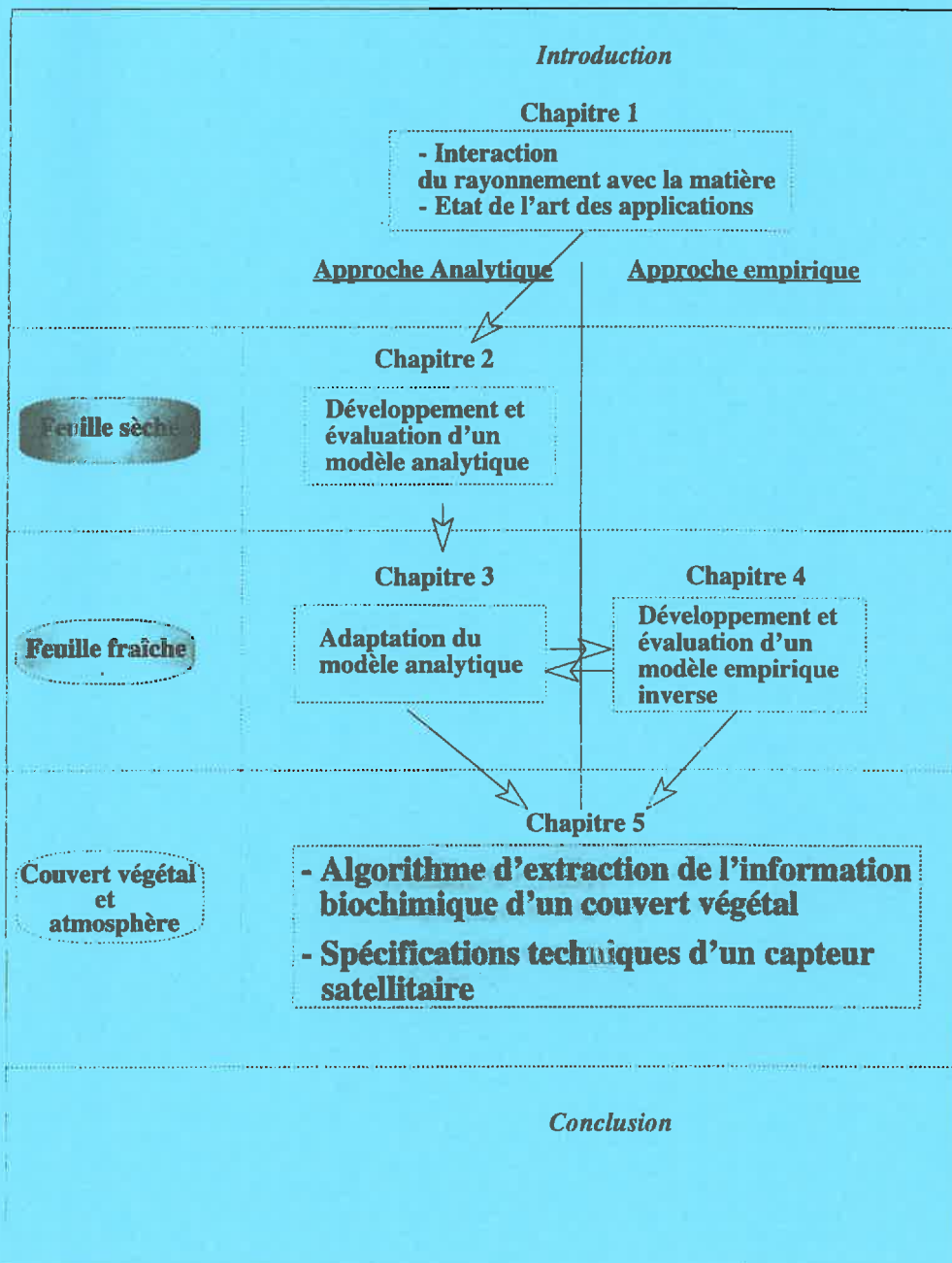


Figure 6 : Comparison between Dry matter contents (g.cm^{-2}) estimated from the linear regression, and the measured values. The regression was developed on the calibration data set with $\sigma=0.010$ using three wavebands. The comparison is performed over the test data set without noise ($\sigma=0.000$).

Chapitre 5

Estimation de la biochimie d'un couvert végétal à partir de données satellitaires



Après avoir développé différents modèles au niveau de la feuille (sèche ou fraîche), il convient à présent de nous intéresser au niveau plus complexe du couvert végétal, en tenant compte des effets atmosphériques et du capteur (cf. chapitre 1).

Pour cela, nous avons choisi de développer une approche semi-analytique pour deux raisons.

D'une part, bien que l'approche analytique permette d'intégrer la connaissance sur les processus physiques d'interaction du rayonnement avec la matière dans le mode d'estimation du contenu biochimique, c'est une technique lourde et d'une efficacité équivalente à celle de l'approche empirique (cf. chapitres 3 et 4). L'approche empirique semble donc la plus appropriée pour développer un algorithme général d'extraction de l'information biochimique au niveau du satellite.

Cependant, à ce niveau, il n'existe pas de jeu de données suffisamment représentatif de la diversité des situations rencontrées dans le milieu naturel qui puisse convenir pour notre application. Nous avons donc tout d'abord utilisé une approche analytique pour construire un jeu de données synthétiques par un emboîtement de différents modèles de propriétés optiques.

Dans l'objectif de proposer des spécifications techniques pour des futurs capteurs, nous avons également testé la sensibilité des estimations aux caractéristiques techniques du capteur utilisé.

L'eau et la matière sèche étant les deux seuls composés que l'on peut estimer de façon satisfaisante au niveau de la feuille, matériel simple, nous nous limiterons à l'estimation de ces deux absorbants majeurs au niveau du couvert végétal.

Comme dans les chapitres précédents, nous avons mis l'accent sur la validation, ici numérique, des modèles proposés afin d'obtenir des estimations robustes.

La publication de ce chapitre 5 est composée de quatre parties.

Nous exposons tout d'abord le mode de construction du jeu synthétique par la combinaison des modèles PROSPECT, SAIL et 6S (cf. annexe 2), et d'un modèle de sol.

Nous examinons ensuite les effets de la résolution spectrale et radiométrique sur les estimations obtenues à partir du modèle linéaire sur le jeu de validation.

Dans la troisième partie, nous comparons ces estimations à celles obtenues avec des modèles neuronaux qui utilisent les longueurs d'onde sélectionnées par le modèle linéaire.

Enfin, dans la dernière partie, nous testons la sensibilité des estimations obtenues avec le modèle neuronal à un décalage des longueurs d'onde sélectionnées par le modèle linéaire.

Vegetation water and dry matter contents estimated from top of the atmosphere reflectance data

Fourty Th. 1,2, Baret F. 1

1 INRA Bioclimatologie, Site Agroparc, 84 914 Avignon Cedex 9, France.

2 GEOSYS, Parc Technologique, 31526 Ramonville Cedex, France.

Article à paraître dans la revue *Remote Sensing of the Environment*

Abstract

Leaf (PROSPECT), soil, canopy (SAIL) and atmosphere (6S) models were coupled and used to create a large data set made of reflectance spectra and the corresponding water (Cw), dry matter contents (SLW, i.e. the specific leaf weight) per unit area, leaf area index (LAI), canopy integrated contents of water (Cw.LAI) and dry matter (SLW.LAI). Multiple linear regression was used to estimate these canopy variables from satellite level reflectance spectra within the 880-2380nm domain. Calibration data set was independent from the test data set to actually evaluate the robustness of the relationships. Results show that canopy level variables (Cw.LAI, SLW.LAI, LAI) are retrieved with a reasonable accuracy while leaf level variables (Cw, SLW) have poorer performances. The radiometric resolution of the sensor greatly influences the performances of the estimation. Conversely the spectral resolution between 10 to 20 nm is not critical, the largest spectral resolution providing the best performances because it smooths the instrumental noise. The multiple linear regression selected between 5 to 8 wavebands for each canopy variable investigated. Several wavebands selected were common to different canopy variables. Therefore, a set of 10 wavebands centered around 890, 1080, 1210, 1290, 1535, 1705, 2035, 2205, 2260, 2295 nm would efficiently allow reasonable estimates of the variables investigated. For each variable, neural networks were trained over the wavebands selected by the multiple regression. Results show better performances than classical multiple linear regression. Shifting by 10 or 20 nm the wavebands when calibrating and testing the networks slightly degrades the accuracy of the estimation. The difference is more pronounced for Cw and SLW. Conversely, the relationships calibrated on the wavebands at their optimal position provide very poor results except for LAI, when applied on wavebands shifted by 10 or 20 nm. These results are discussed with emphasis on the design of future sensor.

KEY WORDS: *reflectance, spectral resolution, radiometric resolution, band selection, water content, dry matter leaf area index, neural network, linear multiple regression*

1. Introduction

Remote sensing techniques are expected to provide canopy biophysical and biochemical characteristics that could improve the description and understanding of ecosystems functioning. Estimation of biophysical characteristics such as the leaf area index (*LAI*), the fraction of photosynthetically active radiation absorbed by the canopy, or the fraction cover, have been investigated since the past decade, either through empirical or semi-empirical approaches (Baret and Guyot, 1991; Huete and Lui, 1994; Myneni and Williams, 1994) or more recently with physically based approaches using radiative transfer models (Kuusk, 1991b; Jacquemoud *et al.*, 1995). Fewer studies were dedicated to the retrieval of canopy biochemical composition from high spectral resolution imaging systems. The approach most currently used consists in fitting empirical linear models between the spectral signature or its derivatives and the biochemical composition of the vegetation. It is a direct transposition of classical near infrared spectroscopy techniques (Marten *et al.*, 1989) applied at laboratory level on dry ground vegetation material. Since Peterson *et al.* (1988) several experimental results show correlations between canopy biochemical composition and the corresponding reflectance spectra (Wessman *et al.*, 1988; Smith and Curran, 1992; Martin and Aber, 1993; Zagolski, 1994). However, it has been recently demonstrated that the linear relationships elaborated on one site had very poor predictive performances when applied to another site or even to another year (NASA, 1994; Grossman *et al.*, 1995).

The alternative approach based on the analysis of the physical processes involved is expected to provide more robustness. Radiative transfer models within the soil, leaf, canopy and atmosphere describe the physics of the interaction of photons with the soil-canopy-atmosphere system. Leaf radiative transfer models that take into account explicitly the biochemical composition of the leaf are thus required. Fourty *et al.* (1996) propose such a model, taking into account the detailed biochemical composition (lignin, cellulose, protein, starch, soluble cell). Unfortunately, even in the simple case of dry leaves, inversion of the leaf model did not provide accurate estimates of the content of biochemicals per unit leaf area. This was explained by the poor specificity of the absorption signature associated to those biochemical species, and to the weakness of their absorption features. The only characteristics that can be accurately retrieved from fresh leaf reflectance or transmittance spectra were leaf water and dry matter contents per unit leaf area (Baret and Fourty, 1996). However, the transposition to the canopy or the space levels of these results obtained at the leaf level has not yet been fully investigated.

Further, the amount of pertinent information provided by these canopy variables on vegetation state and functioning has not yet been deeply investigated.

Moderate water stress generally do not change very much water content per unit leaf area. the plant trying to maintain a water content compatible with its basic functioning (Beaumont, 1995). Therefore, water content per unit leaf area, is generally not considered as a driving variable in canopy functioning models. However, canopy functioning models could be adapted to simulate leaf water content. Estimates of leaf water content could then be used to force canopy functioning models to match actual remote sensing observations using a data assimilation strategy.

The specific leaf weight (SLW , $g.cm^{-2}$) or its reciprocal, the specific leaf area (SLA , $cm^2.g^{-1}$), are key variables that are involved or related to canopy physiological processes. Field and Mooney, (1986) and Aber and Federer (1992) reported that SLA and SLW are variables very sensitive to plant nitrogen status, light climate and several other environmental conditions. The leaf specific weight, is also the variable that governs the development of leaf area from the mass of assimilates allocated to the leaf. Because carbon is the most important atom of living material, carbon content per unit leaf area is very strongly correlated to SLW (Fourty and Baret, 1996). Grossman *et al.* (1995) showed strong correlation between carbon content and leaf reflectance or transmittance of fresh leaves. This confirms the finding of Fourty *et al.* (1996) and Baret and Fourty (1996).

Only very few studies are devoted to the estimates of these canopy variables from canopy or satellite level reflectance spectra. Gao and Goetz (1990) and Jacquemoud *et al.* (1995) showed the possibility to retrieve leaf water content from the spectral variation of the signal reflected by canopies. But no studies are devoted to SLW estimates at canopy or space scale. Therefore, this study aims at evaluating the possibility of retrieving leaf water content and specific leaf weight from high spectral resolution data observed from space.

We will use a semi-empirical approach that should compromise the advantages and drawbacks of pure empirical or analytical approaches. The lack of robustness of empirical approaches is mostly due to the lack of physical basis. Further, the sampling within the space generated by the variables such as canopy structure, atmospheric conditions, configuration of the measurement, optical properties of the soil, is obviously limited to what was present during the experiment and is generally poor. On the other hand, the inversion of physical models is difficult because of the number of unknowns as compared to the amount of independent information embedded in the spectral signature. The estimation of canopy biophysical or biochemical variables from inversion of radiative transfer models generates ambiguities in the solution, partly due to compensation between several variables that could influence canopy reflectance the same way. To reduce these ambiguities, Baret (1994) and Jacquemoud *et al.* (1995) propose to combine canopy variables into more synthetic characteristics such as the canopy level content of absorbing materials, which is the product between the content of absorbing material per unit leaf area and the leaf area index. In this study, we will evaluate this suggestion. We will compare the performances of multiple linear

regression and neural networks to relate equivalent reflectances as observed at the top of the atmosphere by a satellite, to water or dry matter content at the leaf or canopy levels. We will restrict the study to the 860-2400nm spectral domain where water and dry matter absorb. The multiple regressions and neural networks will be established over a simulated data set obtained by computing top of atmosphere equivalent reflectance using soil, leaf, canopy and atmosphere radiative transfer models. To test the predictive performances of such empirical relationships, we will use an independent data set obtained by running the same models on independent set of input variables. In the scope of defining the characteristics of satellite sensors dedicated to the estimation of leaf water and dry matter of canopies, we will investigate the influence of the radiometric and spectral resolution, as well as the effect of a possible shift in the position of the band.

2. Methodology

We will develop a data set made of reflectance spectra as observed at the top of the atmosphere and corresponding to a wide range of leaf, soil, canopy and atmospheric conditions. We will first describe the models used to simulate the radiative transfer up to the satellite as well as the distribution of input variables. We will then describe how we manipulated the simulated reflectance spectra to derive satellite-like measurements, taking into account the radiometric and spectral resolutions. We will finally describe the statistical methods used to relate equivalent reflectance to canopy characteristics.

2.1. Models used and distribution of input variables

To simulate top of the atmosphere reflectance, we will use leaf, soil, canopy and atmosphere radiative transfer models. We will describe briefly these models and the corresponding distribution of input variables.

2.1.1. Leaf optical properties: the PROSPECT model

We used the PROSPECT model (Jacquemoud and Baret, 1990). This simple model provides leaf reflectance and transmittance spectra as a function of a structure index (N) and an absorption coefficient K . Following Baret and Fourty (1996), K is expressed as:

$$K = k_w \cdot C_w + k_{slw} \cdot SLW \quad [1]$$

Where k_w and k_{slw} are the specific absorption coefficients respectively for water and dry matter, and C_w is the water content per unit leaf area (g.cm^{-2}) and SLW is the specific leaf weight (g.cm^{-2}). The values for k_w and k_{slw} are those proposed by Baret and Fourty (1996). The model does not take into account the directional features of leaf reflectance and transmittance, assuming a lambertian behavior. It was tested several times and provides a good description of leaf optical properties in relation with its biochemical composition (Jacquemoud and Baret, 1990; Baret and Fourty, 1996; Fourty and Baret, 1996). The distribution of the input variables (N , C_w and SLW) are those observed on the LOPEX data set (Hosgood *et al.*, 1995) that provides a large range of species, and environmental or phenological conditions. Table 1 shows the distribution used. Leaf optical properties were computed at a 1nm spectral resolution.

2.1.2. Soil reflectance

Similarly to the leaf optical properties, we will focus on the spectral variation of the soil reflectance, assuming a lambertian behavior. We used a linear mixing model with two components: a bright sandy and a dark peat soils. This model provides a simple way to vary soil brightness within a large range of variation. Soil moisture effect was simulated by introducing an attenuation factor in the same way as proposed by Bach and Mauser (1994):

$$\rho_s = (p \cdot \rho_{s,b} + (1-p) \rho_{s,d}) \cdot e^{-k_w \cdot m} \quad [2]$$

Where $\rho_{s,b}$ and $\rho_{s,d}$ are respectively the reflectance of the dry bright (sand) and dark (peat) soils as provided by (Jacquemoud *et al.*, 1992), p is the abundance of bright soil, m is the soil moisture (cm) and k_w is the specific absorption coefficient of pure water (cm^{-1}) given by Curcio and Petty (1951). The abundance p was assumed to follow a uniform distribution law in the [0,1] range. The soil moisture parameter was assumed to follow a uniform distribution within the [0, 0.02 cm] range corresponding to the extreme values observed. The soil reflectance were available at a 1nm spectral resolution.

2.1.3. Canopy reflectance: the SAIL model

We used the SAIL model (Verhoef, 1984; Verhoef, 1985) to compute top of the canopy reflectance. This four stream radiative transfer model provides a good compromise between realism and complexity. It runs fast and requires only few parameters to describe canopy architecture. It assumes the canopy to be an homogeneous semi-infinite medium, with lambertian leaves described by their reflectance and transmittance. Leaves are described by the leaf area index (LAI), an ellipsoidal leaf inclination distribution with random azimuth

orientation characterized by the average leaf angle (θ_l). The original model was modified to take into account the hot-spot feature according to Kuusk (1991a) using the ratio (s) between the average size of the leaf and canopy height. The distribution of the input variables (table 1) represents a wide range of canopies. The sensor was assumed to observe from nadir, with the sun at 45° zenith. The influence of the diffuse radiation was neglected. Canopy reflectance was computed at a 1 nm spectral resolution according to leaf and soil optical properties characteristics.

2.1.4. Atmospheric effects: the 6S model

We used the 6S model (Vermote *et al.*, 1994) to compute top of the atmosphere equivalent reflectance spectra. We considered that the environment of the target has the same radiometric characteristics as the target itself. The model is defined with a spectral resolution of 2.5 nm. The input variables are:

- (i) the type of atmospheric model that defines the amount of absorbing gases such as CO₂, ozone, water and oxygen as well as the pressure governing the Rayleigh scattering. We randomly selected one of the three standard atmosphere proposed by 6S: tropical, mid latitude winter and mid latitude summer.
- (ii) the aerosol model defines the size distribution and the refraction index of the particles, thus the phase function. We randomly selected the continental and oceanic aerosol models.
- (iii) the aerosol optical thickness is derived from the horizontal visibility. We randomly selected among five possible values: 3, 5, 10, 20 and 30 km that ranges from hazy to clear sky conditions.

The top of the atmosphere equivalent reflectance spectra were computed at a 1 nm spectral sampling interval by interpolating the 6S model outputs.

2.2. Simulating the radiometric and spectral resolutions

2.2.1. Radiometric resolution

The transformation of the signal that enters the front optics of the sensor, into digital counts adds several sources of noise to the input signal. Del Bello *et al.* (1995) provide estimates of this noise for a typical satellite-borne spectro-imaging sensor. We used the maximum, medium and minimum values proposed to compute three levels of noise (figure 1). The noise is assumed Gaussian according to:

$$\rho_{\sigma}(\lambda) = \rho(\lambda) + \mathfrak{N}(0, \sigma(\lambda)) \quad [3]$$

where $\rho_{\pi}(\lambda)$ is the equivalent reflectance output from the sensor corresponding to the input equivalent reflectance at the entrance of the sensor, $\rho(\lambda)$, $\mathcal{N}(0, \sigma(\lambda))$ is a Gaussian function with mean=0, and standard deviation $\sigma(\lambda)$ corresponding to the noise used.

2.2.2. Spectral resolution

We simulated several spectral resolution ($\Delta\lambda$) ranging from 10, 12, 15 and 20 nm that corresponds to current performances of hyper-spectral imaging technology. We used a Gaussian filter defined by a half transmission at $\lambda \pm \frac{1}{2}\Delta\lambda$ and truncated at $\pm 20\text{nm}$ around λ . Thus, more than 60% of the signal comes from the $\lambda \pm \frac{1}{2}\Delta\lambda$ area. We chose a spectral sampling interval of 10 nm independently of the spectral resolution, centered on each round 10nm wavelength. Due to this spectral integration, the center wavelengths studied are in the 880 to 2380 nm range rather than in the original 860-2400 nm domain. The reflectance spectra are thus made of 151 contiguous wavebands. The common center wavelengths will facilitate the evaluation of the effect of the spectral resolution on the retrieval of canopy characteristics.

2.3. Development and evaluation of the relationships between the reflectance spectra and canopy variables

Using the distributions of input variables presented in table 1, we randomly drawn 2000 sets of input variables. The four previous models were then coupled to compute the corresponding top of the atmosphere reflectance spectra at a 1 nm spectral resolution. Then, the instrumental noise defining the radiometric resolution is added and the resulting reflectance is convoluted to the Gaussian filter to produce the reflectance for a given spectral and radiometric resolutions.

The relationship between reflectance and water or dry matter content is supposed to be non linear, with classical saturation behavior occurring for the higher values of contents. Following near infrared spectrophotometry techniques (Marten *et al.*, 1989), this non linear behavior is minimized when transforming reflectance ($\rho(\lambda)$) into absorbance ($\alpha(\lambda)$):

$$\alpha(\lambda) = \log\left(\frac{1}{\rho(\lambda)}\right) \quad [4]$$

The data sets result eventually in a collection of 2000 equivalent top of the atmosphere absorbance spectra with a given radiometric and spectral resolution, along with canopy characteristics we are interested in: C_w , SLW , LAI , $C_w.LAI$ and $SLW.LAI$.

For each spectral and radiometric resolution, we split the 2000 samples data set into two sub-data sets. One is used to calibrate the relationships. The other is used to independently evaluate their predictive performances.

We will investigate two empirical techniques currently used to relate absorbance spectra to the characteristics of the objects sensed: multiple linear regression and neural networks.

2.3.1. Multiple linear regression

The multiple linear regression explained a variable (C) as a linear combination of a selection of n independent variables corresponding to n wavebands λ :

$$C = \sum_{i=1}^n \gamma_i \cdot \alpha(\lambda_i) + \varepsilon \quad [5]$$

where γ_i are coefficients to be determined and ε is the residual error. The multiple linear regression used is an iterative process. First, a correlation matrix between the dependent variable (C) and all the independent variables ($\alpha(\lambda)$) is computed. The waveband (λ) having the highest R^2 value is selected. The γ_i coefficient is then estimated through a least square algorithm. The residual error is computed. A new correlation matrix is computed between the residual error and the remaining wavebands. The band that corresponds to the highest correlation coefficient value is selected, and a new linear model is fitted to estimate the γ_1 and γ_2 coefficients. The new residual error is computed and the procedure is iterated up to a certain number of wavebands selected. Hruschka (1987) advised to select one independent variable per 10 data points (spectra) available. In this study, we selected up to 15 wavebands which is far below this criteria.

This regression algorithm was applied for each canopy variable (C_w , SLW , $C_w.LAI$, $SLW.LAI$ and LAI), for all the spectral and radiometric resolutions investigated.

2.3.2. Neural networks

We will use classical backpropagation neural networks (Rummelhart *et al.*, 1986). We chose a 2 layer neural network that is recognized to be able to fit most situations, and is not too demanding in computer time during the learning process. The selection of the wavebands used as input for the neural network is not trivial. It should be theoretically possible to select the bands from the synaptic weights associated. However, running a network with 151 inputs will result in a large number of weights leading to instability and very long computation time. We thus decided to select the same wavebands as those selected using the multiple linear regression. We investigated two possibilities for the first layer, either using $n+2$ or $n-2$ sigmoidal neurons. The second layer is made of one single linear neuron. The independent

and dependent variables were normalized before being used by the network. The learning process was iterated 300 times, allowing good convergence while preventing too much overfitting. The calculations were performed for each situation, i.e. each variable of interest (C_w , SLW , LAI , $C_w.LAI$ and $SLW.LAI$), and for a given radiometric and spectral resolution.

2.3.3. Evaluation of predictive performances.

The robustness of the empirical relationships developed previously were evaluated over the test data set. We computed a statistics, the T value, which is similar to the R^2 value, except that it measures the scattering around the 1:1 line. The T value is defined as:

$$T = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (C - \hat{C})^2}{\sum_{i=1}^n (C - \bar{C})^2} \quad [6]$$

where \hat{C} and \bar{C} are respectively the estimated and average value of the dependent variable, and C is the actual value in the test data set. A perfect fit will result in $T=1.0$. Poor predictive performances result in low T values, that can be even negative. The use of T is here preferred because it allows a direct evaluation of the equality between variables.

3. Results and discussion

3.1. Multiple linear regression

3.1.1. Effect of spectral and radiometric resolutions

We repeated 5 times the random drawing of the noise applied to the test data set, to improve the representativity of the T values that characterize the retrieval performances. The resulting confidence interval computed this way for the T value is small, lower than 0.02.

For each dependent variable, Figure 2 shows that all the curves exhibit a similar trend. T values increase rapidly up to four wavebands selected. Then the increase is less important and T values plateaued between four to height wavebands selected, depending on the canopy variable and radiometric resolution considered. The maximum T values are close to 0.9 and always obtained with the maximum number (15) of bands selected.

For each variable of interest and spectral resolution, relaxing the radiometric resolution lowers the T values. The effect is very important for the largest level of instrumental noise, particularly when estimating the dry matter content. A decrease of the radiometric resolution is only partly counterbalanced by increasing the spectral resolution. For any radiometric resolution level, the performances of the estimation of canopy variables are slightly affected by the spectral resolution. A larger bandwidth allows a better smoothing of the instrumental noise, thus increases slightly the accuracy of canopy variables estimation. The 20 nm spectral resolution provides always the best performances for a given radiometric resolution.

Water is more accurately estimated than dry matter (figure 2). This could be explained by the fact that water is much more absorbing than dry matter over most of the spectral domain, and has more specific absorption features (Baret and Fourty, 1996). The canopy integrated water ($C_w.LAI$) or dry matter ($SLW.LAI$) contents are better estimated than the water or dry matter contents per unit leaf area (Figure 2). Leaf area index (LAI) is slightly less accurately estimated as compared to the other variables. We investigated the gain due to the direct estimate of canopy level variables ($C_w.LAI$ or $SLW.LAI$) as compared to an indirect estimate computed from the product of leaf level estimates of contents (C_w or SLW) by LAI estimates. Figure 3 shows that direct estimates of canopy level contents are generally more accurate than indirect estimates obtained by multiplying leaf level contents by LAI . However, the difference between these two estimates of $C_w.LAI$ or $SLW.LAI$ vanishes when the number of wavebands used increases, particularly for $SLW.LAI$.

3.1.2. Optimal number of wavebands

We investigated the way to define the optimal number of wavebands to predict accurately water and dry matter contents as well as LAI . We used the sensitivity of the T statistics to the number of wavebands selected. The T values are here computed over the test data set. We observed first that all T curves exhibit similar asymptotic trend as a function of the number of wavebands (figure 3). We considered that the optimal number of wavebands is reached when the T values are at the beginning of the plateau. For this purpose, we adjusted the T values as a function of the number n of wavebands selected according to:

$$T = a + b \cdot e^{nc} \quad [7]$$

where a , b and c are parameters. For each variable, equation [7] was fitted to actual T values and provided good fit. Thus, the derivative of T as a function of n can be approximated using equation [7] and the adjusted values of the parameters b and c :

$$\frac{dT}{dn} = b \cdot c \cdot e^{nc} \quad [8]$$

Except for water at the leaf level (C_w), the plateau is reached when the first derivative is close to $dT/dn=0.018$ (Figure 4). This threshold value was used to define the optimal number of wavebands for each variable. The water content at leaf level (C_w) exhibit a particular behavior. The T values are decreasing more progressively than for the other variables. Nevertheless, the threshold $dT/dn=0.018$ is reached for less than three wavebands selected. However, using five wavebands significantly improves the estimation of water content and we will eventually prefer this optimal number of wavebands. The optimal number of wavebands ranges between five to height (Table 2). We also note that dry matter requires more wavebands than water for its estimation. This can be explained by the increasing difficulty to estimate materials that absorbs not very strongly such as dry matter. The corresponding T values are poorer for the leaf level contents (C_w , SLW) than for the canopy level contents ($C_w.LAI$, $SLW.LAI$) as noticed earlier.

The number of wavelengths selected we propose for LAI is higher than the one reported in other studies. For instance, Gong *et al.* (1992) using a multivariate approach obtained determination coefficients higher than 0.98 with only four bands on pine forests. Johnson *et al.* (1994) obtained a comparable determination coefficients using three bands along the Oregon transect. However, no validation of these models has been performed, and questions arise about their robustness.

3.1.3. Wavebands selected

Table 2 and figure 5 present the wavebands selected. We observe that the optimal wavebands selected for each variable are not contiguous and relatively well distributed over the spectrum. This means that if the contents are evaluated through differential absorption, this occurs between wavebands that are not very close together. They are located in areas where enough energy is reflected to the sensor, avoiding regions of strong water absorption where almost no information exists. It appears that the bands selected are not very specific to particular well registered absorption features such as those reported by Curran (1989). This is in good agreement with many studies such as that of Yoder and Pettigrew-Crosby (1995). The interaction between the several confounding factors resulting from canopy structure, soil optical properties, leaf biochemical composition and atmospheric characteristics explains this result. However, we notice that when considering the whole set of five variables (C_w , SLW , $C_w.LAI$, $SLW.LAI$, LAI), the selected wavebands are largely overlapping. This suggests that a minimum subset of about ten wavebands could lead to efficient estimates of those variables. These wavebands are listed in table 2, ranked by order of appearance. Here again, we notice that the bands are quite well spread over the whole spectral domain, mostly sampling around the main water absorption features.

All these results were derived using classical multiple linear regression algorithms. It provides a convenient way to select wavebands. In the following, we will investigate the possible improvements of the estimation of the five biochemical/biophysical variables when using neural networks applied over the set of optimal wavebands previously selected. We will then analyze the sensitivity of the performances to possible spectral shifts of the position of the wavebands of the sensor.

3.2. Comparison with a neural network approach

We first have to define the neural network architecture. We compared two alternatives that differ by the number of neurons in the first layer $n-2$ and $n+2$, where n is the number of wavebands used. We observed that the performances were not very dependent on the number of neurons in the first layer, with a slight advantage for the $n-2$ architecture. For this reason, we will use in the following only neural network with $n-2$ neurons in the first layer.

To allow a rigorous comparison between the previous multiple linear regression and the neural network approach, the calibration and test data sets used were the same for both approaches. We will use the "standard" sensor characterized by a 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution. This will be performed for the four to eight first wavebands selected previously by the linear multiple regression (Table 2) for each variable.

Results (figure 6) show that neural networks provide more accurate and robust estimates than multiple linear regressions. The increase does not vary much as a function of the number of wavelength selected. The improvement is more pronounced for the contents integrated at the canopy level ($C_w.LAI$ and $SLW.LAI$) and for LAI . This should be related to more pronounced non linearity introduced by taking into consideration the LAI .

At this point, we demonstrated the ability to estimate canopy biochemical variables from a few wavebands optimally placed. In the following, we will investigate how a possible shift of the position of the wavebands on the sensor can affect the estimation.

3.3. Sensitivity of canopy characteristics estimates to the waveband position

In this part, we will address two questions.

- what is the sensitivity of the retrieval performances when the algorithm is calibrated and applied using data acquired in wavebands that are shifted from their optimal position

proposed earlier? This question will provide arguments on the specificity of the bands selected when designing and building the device.

- How the retrieval performances degrade when applying over shifted wavebands the algorithm fitted on the optimal band positions? This question will provide arguments on the necessity to check and maintain the wavelength calibration of the sensor during its use.

In this section, we will use the neural network approach applied on the "standard" case defined by a 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution.

3.3.1. Specificity of the waveband position

We compared here the performances of the estimation of the five canopy characteristics when the algorithm is adjusted on the optimal set of wavebands (Table 2) or on waveband that are shifted 10 nm or 20 nm from the optimal position. Performances are evaluated using the T statistics computed on the previously used test data set.

The performances of the estimation are sensitive to the shift of the position of the optimal wavebands (Figure 7). Except for LAI , a shift leads to a nearly symmetric decrease of the T values, which indicates that the bands selected by the multiple regression were also optimal for the neural network approach. The apparent non optimal selection of bands by the regression for the neural network applied for LAI estimates, can be partly explained by the fact that canopy structural variables such as LAI influence the magnitude of the reflectance over the whole spectra and should therefore be less sensitive to the position of the wavebands selected. We also note that the contents at the leaf level (Cw , SLW) are more sensitive to a waveband shift than when integrated over the canopy ($Cw.LAI$, $SLW.LAI$). This may be also explained similarly to the LAI .

3.3.2. Effect of a shift of the wavebands on canopy characteristics estimates

We will investigate here how a shift of 10 nm or 20 nm of the optimal waveband positions (Table 2) affects the estimates of canopy characteristics when the neural networks used were developed over the optimal waveband position. This situation corresponds for example to shifts of the waveband position occurring after launch, and for which there is no way to evaluate accurately its magnitude. Performances are evaluated using the T statistics computed on the same test data set.

We observe (Figure 8) that LAI is the only canopy variable that is relatively little sensitive to a shift of the waveband position. This can be explained again by the fact that LAI

is a canopy structural variable affecting the magnitude of canopy reflectance over the whole spectral domain. Conversely, for the biochemical variables (C_w , SLW , $C_w.LAI$, $SLW.LAI$), we observe drastic decrease in the estimation performances when the neural network is applied to wavebands shifted from their optimal positions. Even the smallest shift tested (10 nm) degrades so much the estimation ($T < 0$) that they are no more meaningful. This very high sensitivity of the canopy biochemical contents estimates to the waveband position might explain why in many cases, relationships developed on one site with one sensor does not apply on other sites and other sensors (NASA, 1994).

4. Conclusion

As reported by Curran (1994), current emphasis is on the estimation of both nitrogen and lignin concentration as these two biochemical are indicators of the rate of carbon fixation by canopies, and the rate of litter decomposition. However, results obtained at the leaf level (Fourty *et al.*, 1996) reveal that it is very unlikely to get robust and accurate estimates of the content of the detailed biochemical composition. That is the reason why we focused on the main absorbers in the near infrared and short wave infrared domains that are water and dry matter. This work was therefore an extension to the satellite scale, of a previous work (Baret and Fourty, 1996) where we demonstrated the ability to get accurate and robust estimates of water content per unit leaf area and specific leaf weight from leaf level reflectance or transmittance measurements. However, in this study, we did not use the analytical approach developed at the leaf level. Model inversion of satellite level data requires too many leaf, soil, canopy and atmosphere variables to be retrieved with regards to the amount of spectral information available as demonstrated by Jacquemoud *et al.* (1995). For this reason, we adopted a semi-empirical approach as the one we developed in an earlier work (Baret *et al.*, 1995). It is based on radiative transfer model simulations that represent the physical processes involved. However, the canopy characteristics are not extracted through a classical iterative inversion technique, but by developing sets of empirical relationships.

Water and dry matter contents at the leaf (C_w , SLW) or canopy ($C_w.LAI$, $SLW.LAI$) levels as well as LAI are estimated with a reasonable accuracy from satellite level reflectance spectra using classical linear multiple regressions. Water contents are better estimated than dry matter contents because the absorption features are stronger and more specific. Canopy variables were more accurately retrieved than the leaf level variables because canopy variables are more synthetic variables that are able to implicitly take advantage of the compensations between the leaf level contents and leaf area index. We showed that the spectral resolution was not very critical because the spectral features are quite broad.

Conversely, the accuracy of canopy variables retrieval is very sensitive to the radiometric resolution. For this reason, the largest spectral resolution investigated (20 nm) provides the better smoothing of the instrumental noise and appears to be the most efficient. Therefore, great attention has to be paid to the design of the instrument to get the best signal to noise ratio. It is possible that a spectral resolution larger than 20 nm will provide a better reduction of the instrumental noise while keeping the ability to retrieve the canopy variables investigated.

Two layers backpropagation neural networks applied on the wavebands previously selected by the linear regression, allow better estimation of each canopy variable as compared to the multiple linear regression.

The multiple linear regression shows that five to eight wavebands distributed over the whole 880-2380 nm spectral domain are enough for accurately estimating each canopy biophysical variables. Several wavebands selected appear to be common or very close together for different canopy variables. Therefore, the compilation of all the wavebands selected shows that a minimum set of 10 wavebands would provide robust and accurate estimates of all the canopy variables investigated.

Using selected wavebands shifted by 10 or 20 nm from their original position in the calibration and test processes, we showed that the performances of canopy level variables estimates ($C_w.LAI$, $SLW.LAI$, LAI) degrades only slightly. The influence is more pronounced for leaf level variables (C_w , SLW), showing more specificity of the band selected. However, when shifting the bands by 10 or 20 nm between the calibration and the test processes, degrades drastically the retrieval performances for all the variables investigated except LAI which was less affected. Therefore, when considering the design and calibration procedures for imaging spectrometers dedicated to the monitoring of canopy biochemical variables, great care must be taken about the wavelength calibration.

This study is based on model simulation, with restrictions to the domain of validity of the models and to the set of input variables used. However, this approach is designed to implicitly retain most of our knowledge on the physics of radiative transfer through the use of soil, leaf, canopy and atmosphere models, and to sample within large and independent range of variation of input variables. Therefore, the main conclusions are expected to be quite general in terms of spectral and radiometric resolutions, as well as for the number and position of the wavelengths selected. Nevertheless, these results have to be validated over ground truth in order to actually test their robustness. Further, complementary work has to be done to investigate how these new canopy variables help the description and understanding of vegetation functioning.

Acknowledgments

We thank very much the agencies that fund this study: European Space Agency under the "plant canopy biochemistry" contract 10661/93/NL/SF, Centre National de la Recherche Spatiale (France), and National Aeronautic and Space Administration through the LEAF MOD project. We thank also the GEOSYS Company (Toulouse) for its help.

References

- Aber J. D., Federer C. A., 1992. A generalized, lumped-parameter model of photosynthesis, evapotranspiration and net primary production in temperate and boreal forest ecosystems. *Oecologia*, 92:463-474.
- Bach H., Mauser W., 1994. Modelling and model verification of the spectral reflectance of soils under varying moisture conditions. *IGARSS'94*, Pasadena (USA), 2354-2356.
- Baret F., 1994. Use of reflectance spectral variation to retrieve canopy biophysical characteristics. *Advances in Environmental Remote Sensing*. Danson F.M. and Plummer S.E. Chichester (U.K.), John Willey & sons: 33-51.
- Baret F., Clevers J.G.P.W, Steven M.D., 1995. The robustness of canopy gap fraction estimates from red and near infrared reflectances: a comparison of approaches. *Remote Sens. of Environ.*, 54: 141-151.
- Baret F., Fourty T., 1996. Spectral estimates of leaf water content and specific weight. *Remote Sens. Environ.*, submitted.
- Baret F., Guyot G., 1991.. Potentials and limits of vegetation indices for LAI and APAR assessment. *Remote Sens. Environ.*, 35(2-3):161-173.
- Beaumont P., 1995. Réflectance foliaire et acclimatation à un déficit hydrique: cas des feuilles de tournesol. Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse, 129 p.
- Curcio J. A., Petty C.C., 1951. The near infrared absorption spectrum of liquid water. *J. Opt. Soc. Am.* 41(5):302-304.
- Curran P. J., 1989. Remote sensing of foliar chemistry: Review. *Remote sens. Environ.*, 30:271-278.
- Curran P.J., 1994. Attempts to drive ecosystem simulation models at local to regional scales. *Environmental Remote Sensing Models at Local Scale to Regional Scales*. Foody G.M. and Curran P.J. Chichester, Wiley & Sons Ltd: 149-166.
- Del Bello U., Kealy P., Meynart R., Rast M., 1995. PRISM: a hyperspectral imager for a future ESA land observation mission. *European Satellite Remote Sensing Conference*, Paris.
- Field C., Mooney H.A., 1986. The photosynthesis-nitrogen relationship in wild plants. *On the economy of plant form and function*. T. V. Givnich. New York (USA), Cambridge university press: 25-55.
- Fourty T., Baret F., Jacquemoud S., Schmuck G., Verdebout J., 1996. Leaf optical properties with explicite description of its biochemical composition: direct and inverse problems. *Remote Sens. Environ.*, 56:104-117.
- Gao B.C. and A.F.H. Goetz, 1990. Column atmospheric water vapor and vegetation liquid water retrievals from Airborne Imaging Spectrometer data. *Journal of Geophysical Research.*, 95(D4):3549-3564.
- Gong P., Pu R., Miller J.R., 1992. Correlating leaf area index of ponderosa pine with hyperspectral CASI data. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 18(4): 276-282.

- Grossman Y. L., Ustin S.L., Jacquemoud S., Sanderson E., Schmuck G., Verdebout J., 1995. Critique of stepwise linear regression for the extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, in press.
- Hosgood B., Jacquemoud S., Andreoli G., Verdebout J., Pedrini G., Schmuck G., 1995. Leaf Optical Properties EXperiment 93 (LOPEX 93), European Commission, Joint Research Centre, Institute For Remote Sensing Applications, Ispra (Italy), Report EUR-16095-EN.
- Hruschka W.R., 1987. Data analysis: wavelength selection methods. *Near infrared technology in the agricultural and food industries*. Williams P.C. and Norris K.H. eds. St. Paul MN (USA), American association of cereal chemists, inc.: chapter 3.
- Huete A.R., Lui H.Q., 1994. An error and sensitivity analysis of the atmospheric and soil correcting variants of the NDVI for the MODIS-EOS. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 32(4):897-905.
- Jacquemoud S., Baret F., 1990. PROSPECT: a model of leaf optical properties, *Remote Sens. Environ.*, 34:75-91.
- Jacquemoud S., Baret F., Andrieu B., Danson F.M., Jaggard K., 1995. Extraction of vegetation biophysical parameters by inversion of the PROSPECT+SAIL models on sugar beet canopy reflectance data. Application to TM and AVIRIS sensors. *Remote Sens. Environ.*, 52:163-172.
- Jacquemoud S., Baret F., Hanocq J.F., 1992. Modeling spectral and directional soil reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 41:123-132.
- Johnson L.F., Hlavka C.A., Peterson D.L., 1994. Multivariate analysis of AVIRIS data for the canopy biochemical estimation along the Oregon transect, *Remote Sens. Environ.*, 47:216-230.
- Kuusk A., 1991a. The hot spot effect in plant canopy reflectance. *Photon-Vegetation Interactions. Applications in Optical Remote Sensing and Plant Ecology*. Myneni, R. B. and J. Ross eds. Berlin, Springer Verlag: 139-159.
- Kuusk A., 1991b. Determination of vegetation canopy parameters from optical measurements. *Remote Sensing of Environment*, 37:207-218.
- Marten, G. C., Shenk, J. S., Barton, F. E., 1989. Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality, USDA Handbook 643, U.S. Department of agriculture, Washington, DC:1-96.
- Martin M. E., Aber J. D., 1993. Measurements of canopy chemistry with 1992 aviris data at blackhawk island and harvard forest, in *Summaries of the 4th annual JPL airborne geoscience workshop, Pasadena (CA), october 25-29, Green (Eds.)*, 113-116.
- Myneni R.B., Williams D.L., 1994. On the relationship between FAPAR and NDVI. *Remote Sens. Environ.*, 49:200-211.
- NASA, 1994. Accelerated canopy chemistry program. Final report to NASA-EOS-IWG. Washington (DC), NASA.
- Peterson D. L., Aber J. A., Matson P. A., Card D. H., Swanberg N., Wessman C., Spanner M., 1988. Remote sensing of forest canopy and leaf biochemical contents. *Remote Sens. Environ.*, 24:85-108.
- Rummelhart D.E., Hinton G.E., Williams R.J., 1986. Learning internal representations by error propagation. *Parallel Data Processing*. Rummelhart D. and Mc Clelland J. eds. Cambridge, MA (USA), M.I.T. press., 1:318-362.
- Smith G.M., Curran P.J., 1992. Exploring the remote sensing of foliar biochemical concentrations with AVIRIS data. in *Summaries of the 3rd annual JPL Airborne Geoscience Workshop, June 1-5, Green (Eds.)*, 50-52.
- Verhoef W., 1984. Light scattering by leaf layers with application to canopy reflectance modeling: the SAIL model. *Remote Sens. Environ.*, 16:125-141.

- Verhoef W., 1985.** Earth observation modeling based on layer scattering matrices *Remote Sens. Environ.*, 17:165-178.
- Vermote E., Tanré D., Deuzé J.L., Herman M., Mockette J.J., 1994.** Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum (6S). Lille (France), Report Laboratoire d'optique atmosphérique.
- Wessman C.A., Aber J.D., Peterson D.L., Mellilo J.M., 1988.** Remote sensing of canopy chemistry and nitrogen cycling in temperate forest ecosystems. *Nature*, 335:154-156.
- Yoder B.J., Pettigrew-Crosby R.E., 1995.** Predicting nitrogen and chlorophyll content and concentration from reflectance spectra (400-2500 nm) at leaf and canopy scales. *Remote Sens. Environ.*, 53:199-211.
- Zagolski F., 1994.** Evaluation des concentrations chimiques d'un couvert forestier à l'aide de la haute résolution spectrale. Thèse de l'University Paul Sabatier, Toulouse (France), 173 p.

Variable	Minimum	Average	Maximum	Distribution Law
N	1.1	1.67	2.29	Gaussian
C_w (g.cm ⁻²)	0.003	0.010	0.025	Gamma
SLW (g.cm ⁻²)	0.002	0.005	0.011	Gamma
p	0.0	0.5	1.0	Uniform
m (g.cm ⁻²)	0.00	0.01	0.02	Uniform
LAI	0.13	2.96	9.73	Gamma
θ_i (°)	25°	49°	75°	Uniform
s	0.01	0.25	0.50	Uniform

Table 1 : Distribution of the input variables

n	C_w	$C_w.LAI$	SLW	$SLW.LAI$	LAI	<i>Optimal set</i>
1	1530	2040	880	2290	2300	2290-2300
2	1720	900	2290	1540	880	1530-1540
3	2040	1190	1540	1710	1230	1690-1720
4	2200	1100	2210	1100	1530	880- 900
5	2290	2260	2030	1190	1690	2030-2040
6	1990	2380	1060	1300	2210	1190-1230
7	2160	1300	1690	1730	1280	1060-1100
8	2140	1530	1280	1210	1990	2200-2210
9	1650	2300	2080	1080	2170	1280-1300
10	1790	1370	2170	1570	1710	2260
11	1310	1210	1520	1490	1080	
12	880	1080	1190	1640	2030	
13	1090	1240	1310	1230	1210	
14	1690	1760	890	2210	1290	
15	1580	880	1490	1980	1430	

Table 2 : The first 15 wavebands (nm) selected by the multiple linear regression from a "standard sensor" radiometric data set. Bold numbers correspond to the optimal set of wavebands selected.

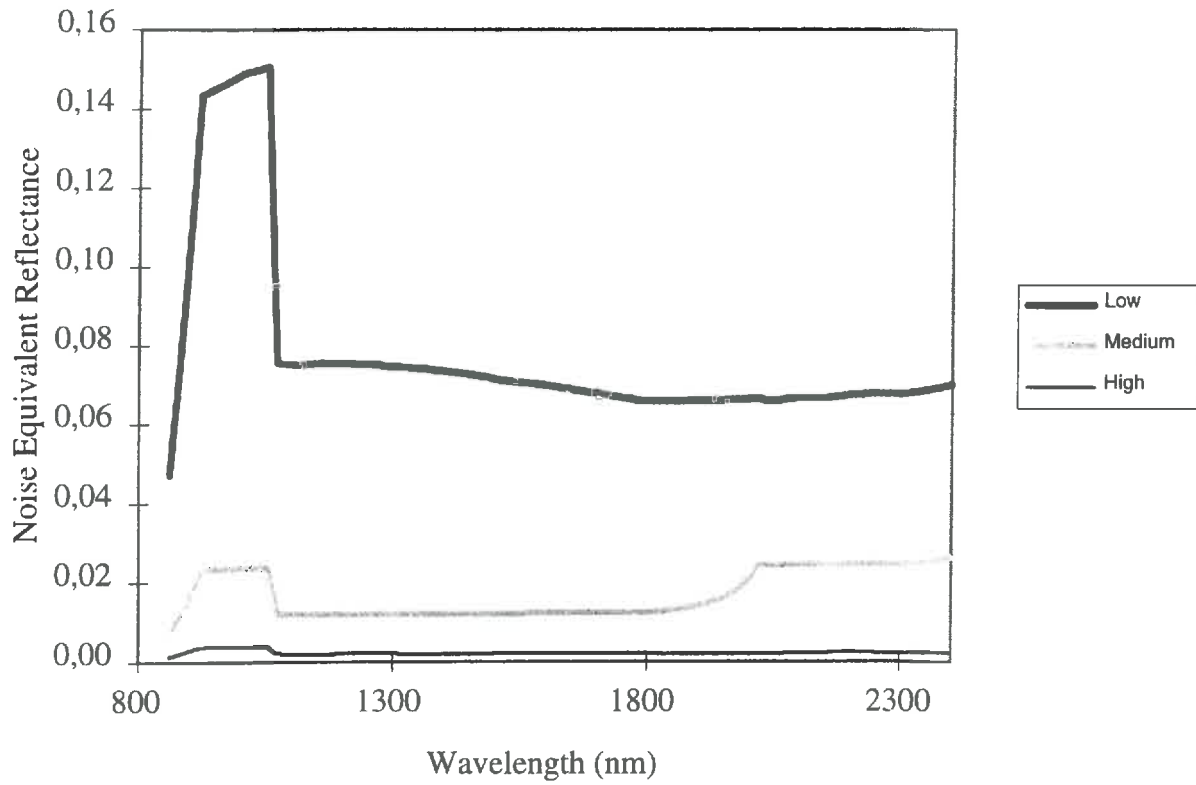


Figure 1 : Noise equivalent reflectance for three levels of radiometric resolution (Low, Medium and High) as a function of wavelength (from Del Bello *et al.*, 1995)

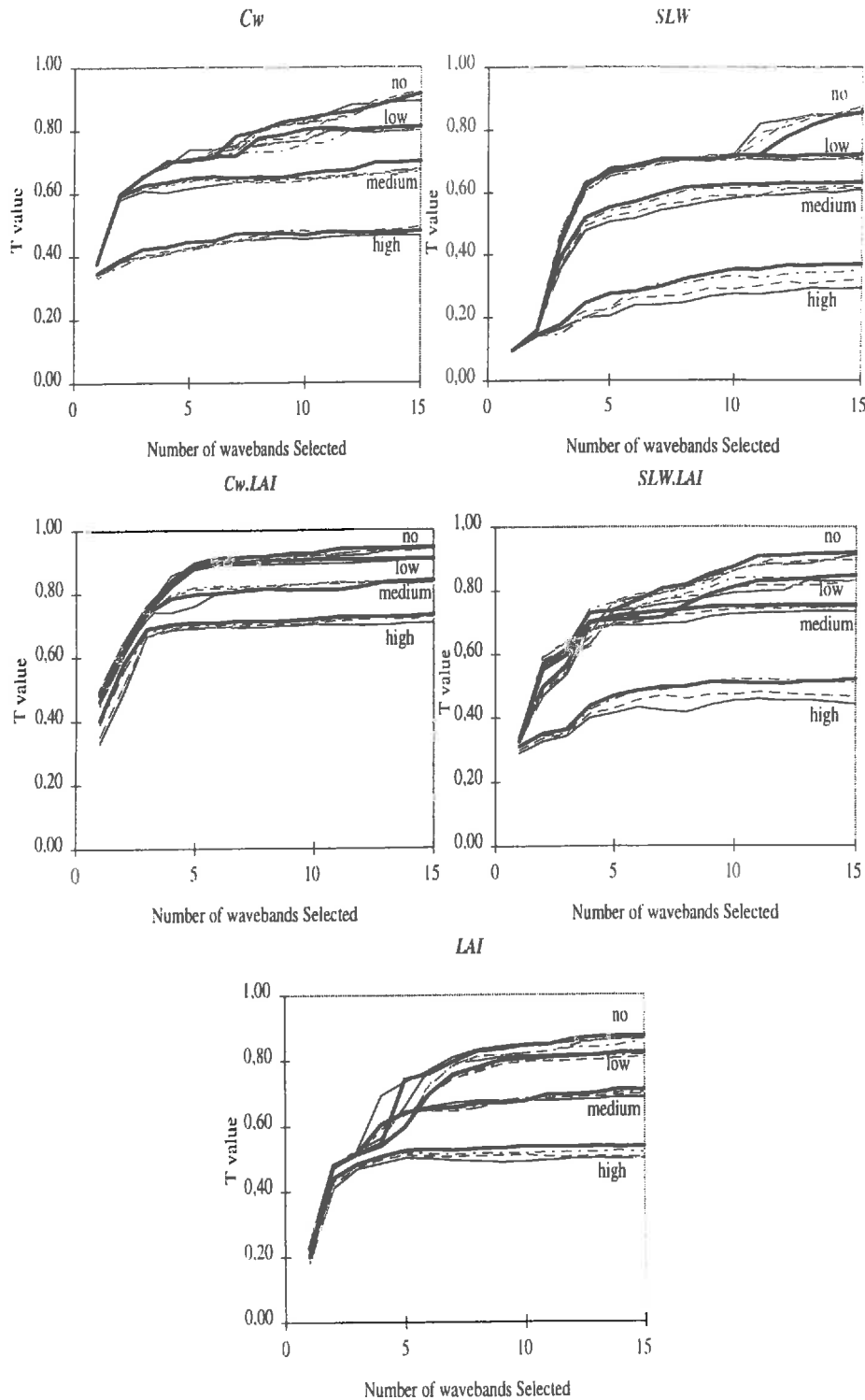


Figure 2 : T values obtained for each canopy variable, spectral and radiometric resolutions, as a function of the number of wavebands selected. Thin solid lines correspond to 10nm, dashed to 12nm, dashed dashed to 16nm and thick solid line to 20nm spectral resolution. "no" correspond to no instrumental noise, "low", "medium" and "high" correspond to the corresponding radiometric resolutions investigated.

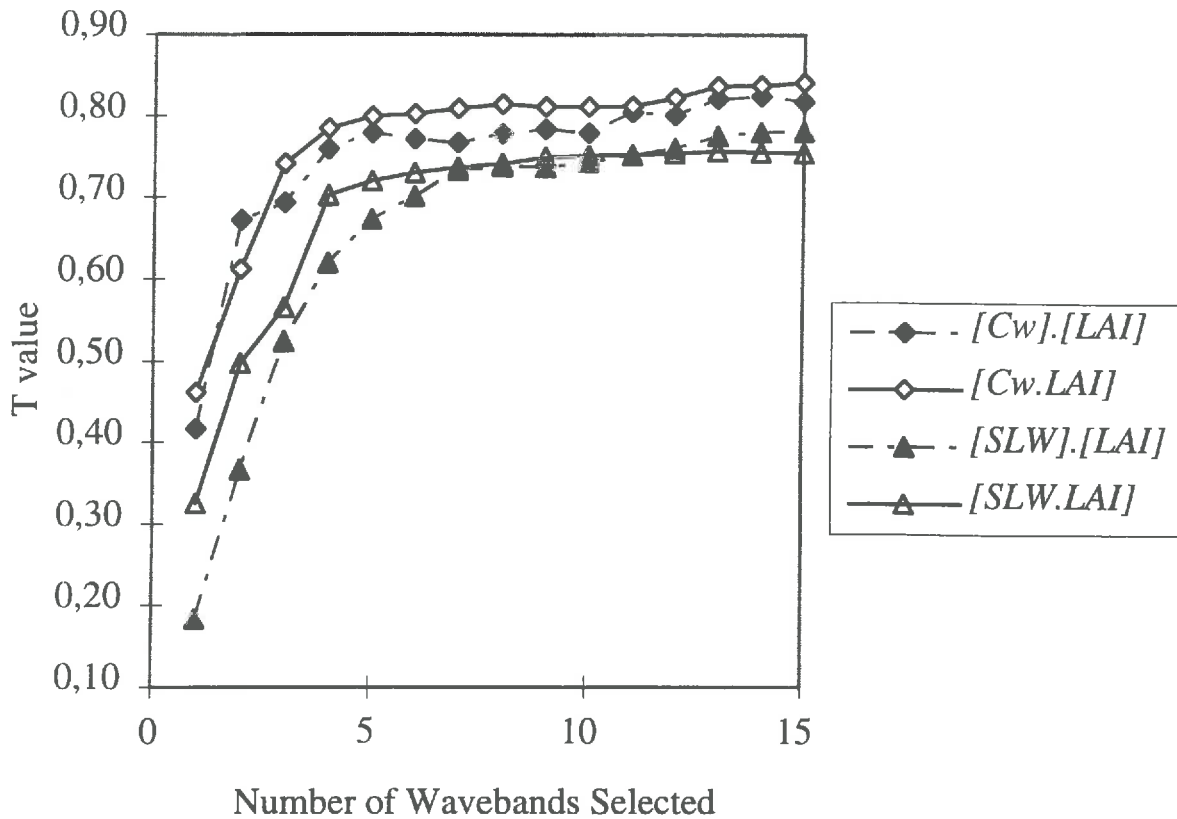


Figure 3 : Comparison of the T values associated to a direct estimation of canopy level contents (solid lines) and an indirect estimates computed from the multiplication of the leaf level contents (Cw or SLW) by LAI . Results obtained for 20nm spectral resolution and medium radiometric resolution.

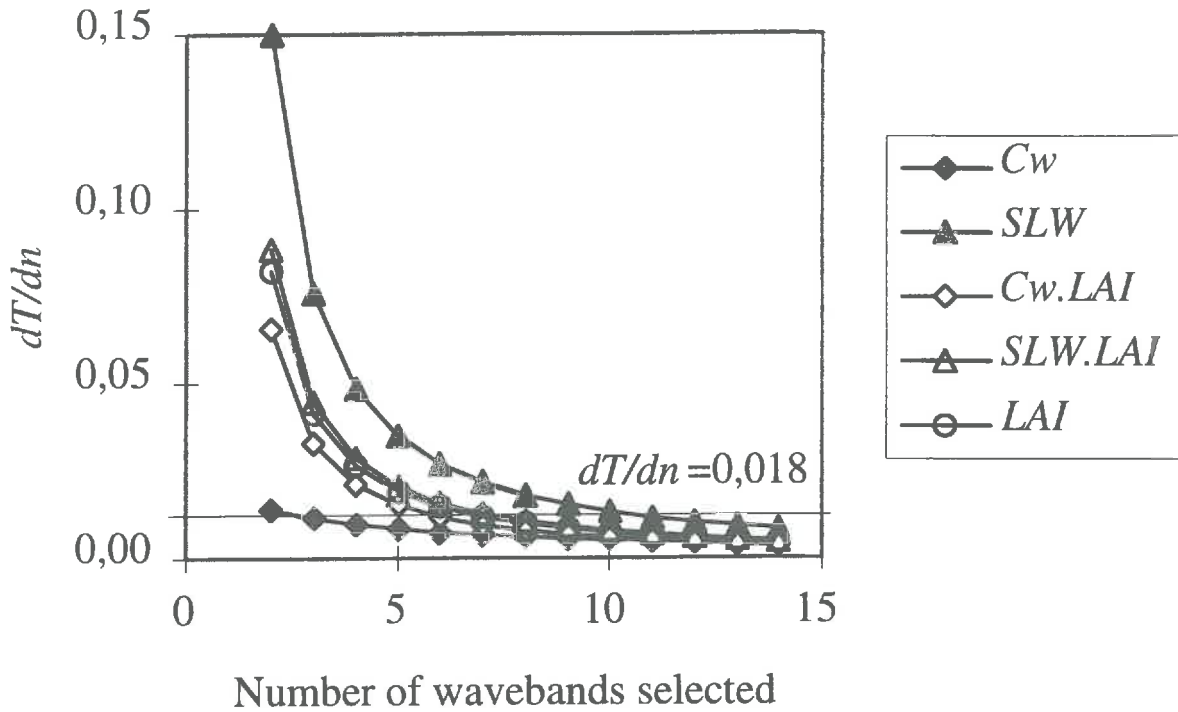


Figure 4 : Sensitivity of the T value to the number of bands selected. The lines presented correspond to equation [8] with the parameters b and c adjusted over the actual T values corresponding to 20 nm spectral resolution and medium radiometric resolutions using equation [7].

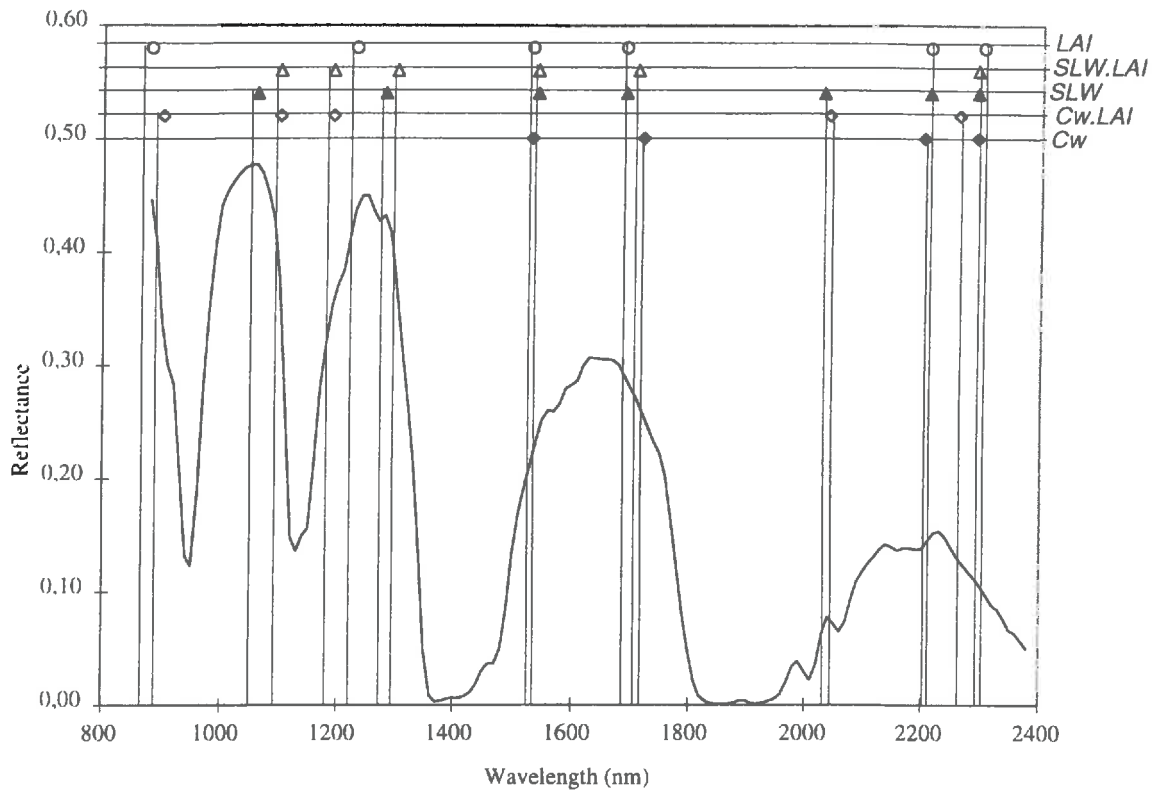


Figure 5 : Position of the wavebands selected by the linear multiple regression for the five canopy variables. The solid line represents a typical satellite level equivalent reflectance spectra.

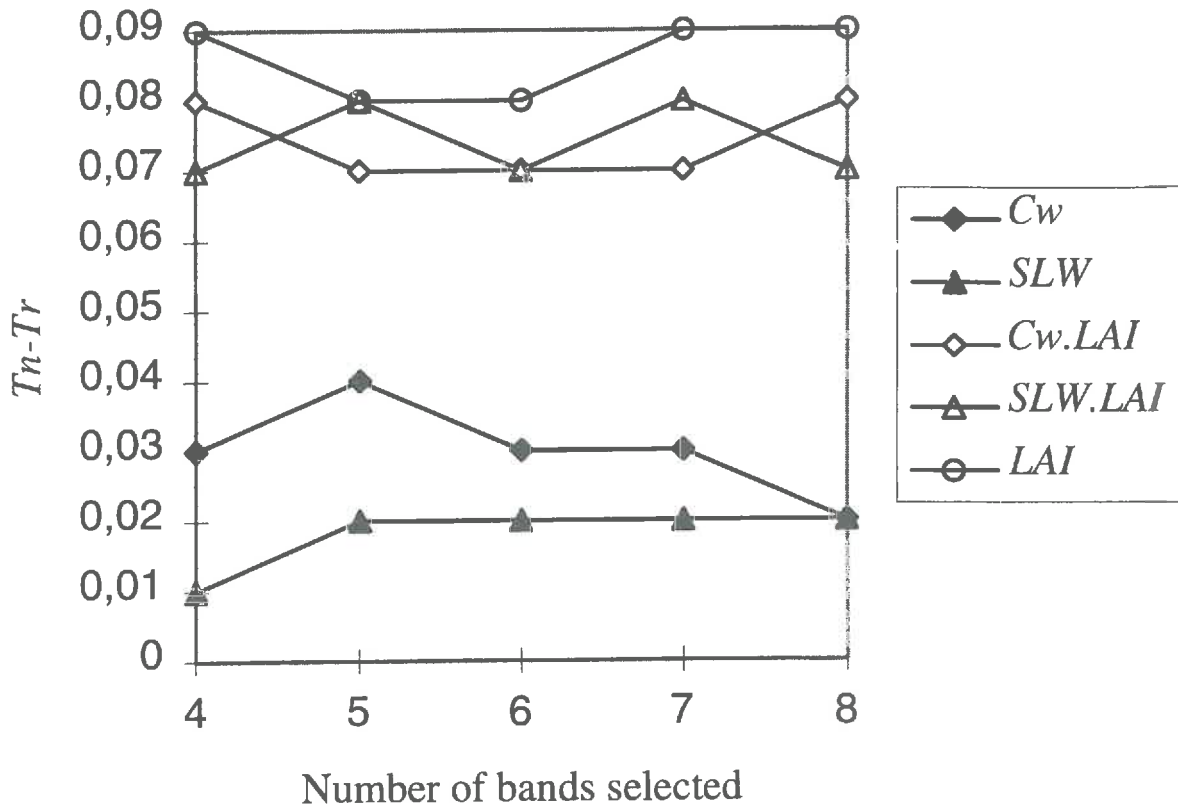


Figure 6 : Comparison between T values corresponding to the neural network (T_n), and the linear multiple regression (T_r) approaches. The difference $T_n - T_r$ is presented here for the five canopy characteristics (C_w , SLW , $C_w.LAI$, $SLW.LAI$, LAI). Results obtained over the same test data sets with 20 nm spectral resolution and no instrumental noise. The bands selected are those presented in Table 2.

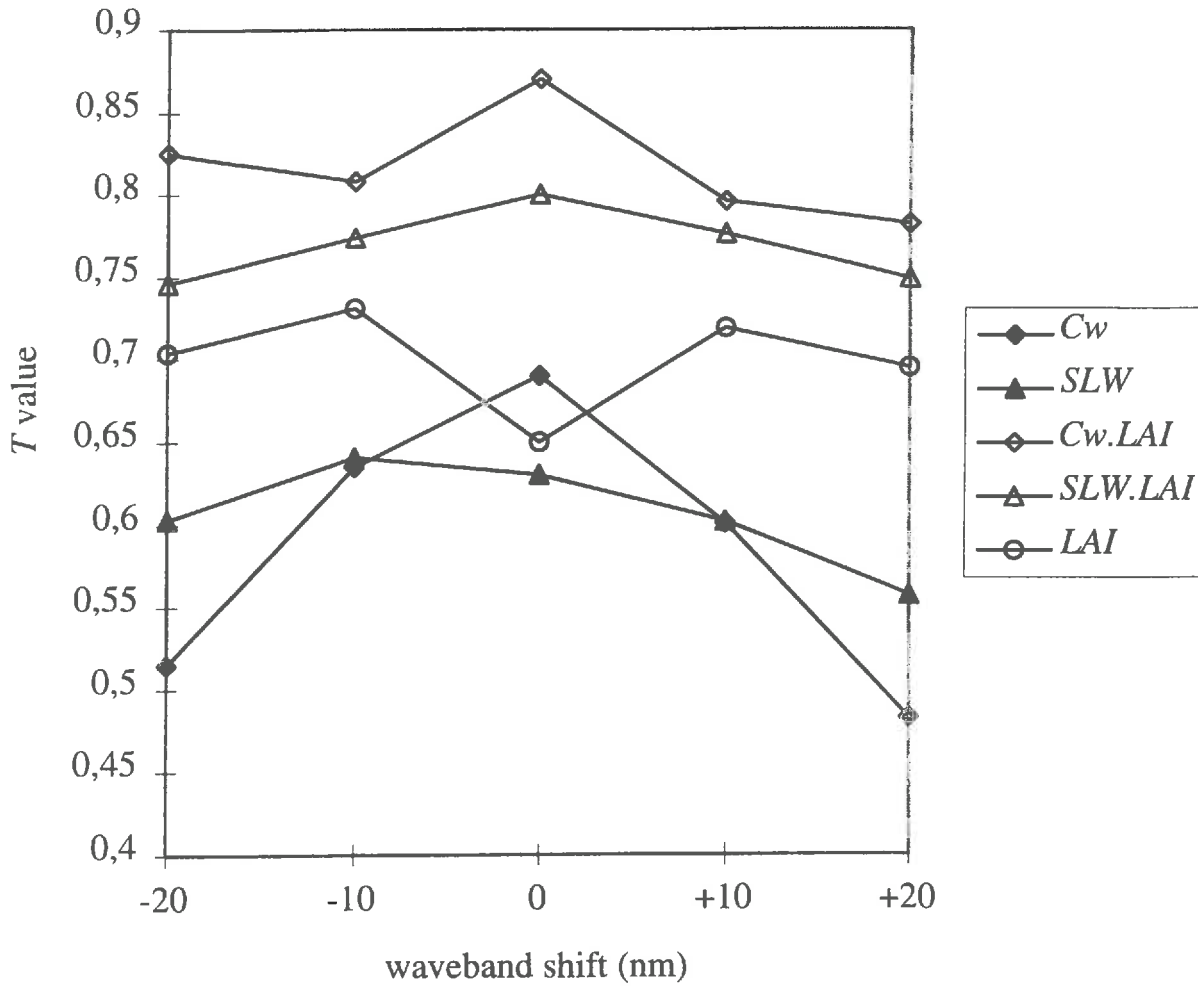


Figure 7 : Sensitivity of the estimation of the five canopy characteristics (*Cw*, *SLW*, *Cw.LAI*, *SLW.LAI*, *LAI*) when the neural networks are trained and applied on wavebands shifted from their optimal position by ± 10 nm or ± 20 nm. *T* values are computed over the test data sets for 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution. The optimal wavebands are those presented in Table 2.

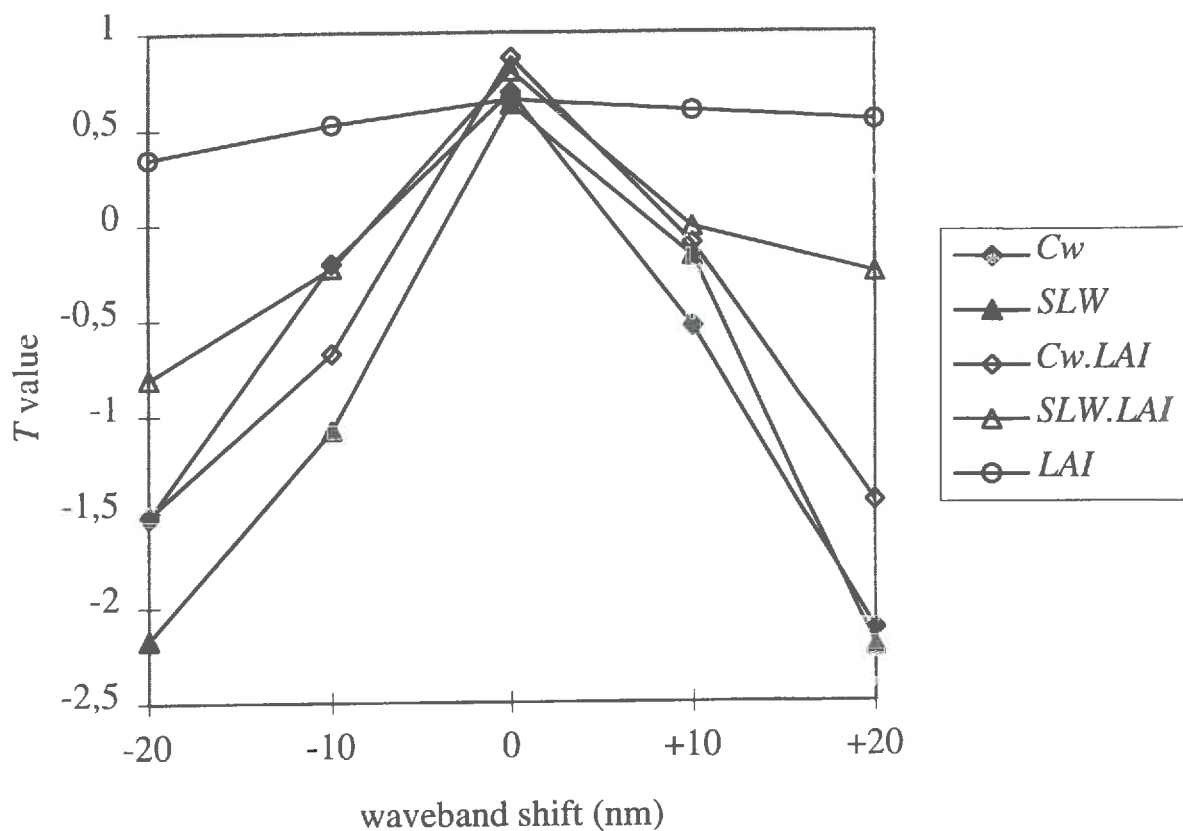


Figure 8 : Sensitivity of the estimation of the five canopy characteristics (C_w , SLW , $C_w.LAI$, $SLW.LAI$, LAI) when the neural networks are trained over the optimal wavebands selected and applied on wavebands shifted from their optimal position from ± 10 nm or ± 20 nm. T values are computed over the test data sets for 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution. The optimal wavebands are those presented in Table 2.

Conclusion

Cette thèse a tenté de répondre à deux objectifs. Le premier était de produire des connaissances sur la relation entre la biochimie et les propriétés optiques des feuilles. Ces connaissances devaient nous permettre d'évaluer la potentialité de la télédétection à estimer la biochimie foliaire à partir de mesures radiométriques haute résolution dans les domaines spectraux du proche et moyen infrarouge. Le second objectif consistait à développer un algorithme d'extraction de l'information biochimique foliaire à partir de données de futurs capteurs satellitaires. Cet aspect méthodologique a été plus particulièrement appliqué au projet du capteur PRISM de l'ESA.

1. Principaux résultats

Produire des connaissances sur la relation entre la biochimie et les propriétés optiques des feuilles

Pour répondre au premier objectif, nous avons procédé selon 2 approches, l'une analytique et l'autre empirique :

- la première approche a consisté à **adapter le modèle analytique de propriétés optiques des feuilles PROSPECT par l'intégration explicite de l'absorption des composés biochimiques foliaires** (protéines, lignine, cellulose, hemicellulose, amidon, sucres).

Dans cette phase de modélisation, nous avons estimé les coefficients spécifiques d'absorption de ces composés en nous basant sur des mesures radiométriques de feuilles sèches d'espèces très différentes, issues du jeu de données LOPEX. Ce choix nous permettait dans un premier temps d'éliminer l'absorption due à l'eau et de rendre ainsi les propriétés spectrales sensibles à la biochimie foliaire. Les pics des différents coefficients spécifiques obtenus correspondent en très grande majorité à des bandes d'absorption référencées comme

telles dans la littérature. De plus, ce modèle utilisé dans le sens direct simule remarquablement bien les propriétés spectrales de feuilles sèches à partir d'un indice de structure et des teneurs des différents composés biochimiques.

Cette phase de modélisation a été suivie par une phase d'inversion de ce modèle pour définir sa capacité à estimer les teneurs biochimiques. Les estimations des teneurs obtenues de cette manière sont très médiocres, notamment pour les composés biochimiques pris séparément. Nous avons alors regroupé de diverses manières ces composés biochimiques. Cependant, seule l'estimation correspondant au regroupement total des composés biochimiques, c'est-à-dire la matière sèche, est correcte. Les mauvaises estimations des teneurs pour les composés biochimiques détaillés peuvent être expliquées par la faible contribution respective à l'absorption globale de la feuille de chacun des composés. Une autre raison pouvant être avancée est la forte similarité pour tous les composés biochimiques des caractéristiques d'absorption. Cette similarité crée un biais dans la technique d'inversion du modèle.

Nous nous sommes ensuite placé au niveau des feuilles fraîches, pour lequel l'absorption de l'eau tend à masquer celle des autres composés foliaires. En tenant compte des conclusions obtenues au niveau de la feuille sèche, nous avons adapté le modèle de propriétés optiques PROSPECT en résumant la biochimie de la feuille fraîche uniquement aux teneurs en eau et matière sèche totale. Ce modèle permet ainsi de reconstruire les propriétés spectrales avec de très bonnes performances. Une fois inversé, ce modèle permet également d'estimer les teneurs de ces deux composés de façon très correcte, et plus particulièrement la teneur en eau.

Ces résultats montrent qu'il est possible avec un modèle simple de propriétés optiques de simuler précisément les réflectances et transmittances de feuilles sèches ou fraîches en tenant compte de la biochimie, quelle que soit l'espèce végétale. Néanmoins, les seules estimations correctes obtenues se limitent à un absorbant majeur, l'eau, et à un regroupement d'absorbants mineurs, la matière sèche totale (ce qui correspond au poids spécifique de la feuille sèche). Il n'apparaît pas possible, même pour des feuilles sèches où le signal biochimique est le plus marqué, d'estimer les teneurs en lignine et protéines.

- Nous avons développé parallèlement une approche alternative, de type empirique. Elle a consisté, au niveau des feuilles fraîches, à **développer directement**, pour chacun des composés biochimiques, **une relation empirique** correspondant au sens indirect, c'est-à-dire **donnant une estimation du contenu biochimique à partir des données radiométriques**.

Nous avons choisi de développer cette approche empirique parallèlement à l'approche analytique pour deux raisons. La première raison consistait à lever certaines contradictions sur

les performances des modèles empiriques présentés dans la littérature : nous avons ainsi mis l'accent sur la validation des modèles proposés, ce qui nous assurait de la robustesse de nos conclusions. La seconde raison était motivée par la comparaison de la précision des estimations obtenues par des approches très différentes (empirique et analytique) sur un même jeu de données.

Les estimations obtenues sur le jeu de validation ne sont robustes que pour les teneurs en eau et en matière sèche. Les estimations des teneurs en lignine et protéines restent quant à elles très médiocres et peu robustes. Ces résultats répondent d'une part à l'ambiguïté de certains résultats présentés dans la littérature et d'autre part suggèrent une certaine cohérence dans les estimations obtenues par les deux approches. Enfin, la sensibilité à la résolution radiométrique est variable selon le composé biochimique. Néanmoins il est possible de se soustraire de l'effet du bruit en dupliquant artificiellement le jeu d'étalonnage et en le bruyant. La faible taille du jeu d'étalonnage pourrait expliquer les mauvaises estimations obtenues pour les autres composés biochimiques autres que l'eau et la matière sèche. Dans la limite de la sélection de 3 bandes spectrales pour ajuster le modèle linéaire, la très forte variabilité biochimique inter-échantillons (espèces végétales différentes) suggère que les bandes sélectionnées correspondent à une information réelle. Par conséquent, les conclusions obtenues peuvent être considérées comme convenables. Cependant, un jeu d'étalonnage de taille supérieure permettrait d'affiner la sélection des bandes et l'ajustement des coefficients pondérateurs ainsi que la sélection d'un plus grand nombre de longueurs d'onde.

Utiliser cette connaissance pour développer un algorithme d'estimation de la biochimie d'un couvert végétal par satellite et proposer des spécifications techniques : une étude de simulation.

Pour répondre au second objectif, nous avons choisi :

- d'utiliser une approche semi-analytique pour extraire l'information biochimique de mesures radiométriques acquises au niveau satellitaire. Ce choix était basé d'une part sur la nécessité de simuler des données radiométriques au niveau satellitaire. Nous avons utilisé pour cela les modèles analytiques existants. Nous avons également choisi de développer des modèles empiriques d'estimation de la biochimie foliaire pour la simplicité de mise en oeuvre de l'approche et sa capacité d'estimation des teneurs des feuilles fraîches;

- de tester les effets des résolutions spectrales et radiométriques pour proposer des spécifications techniques des futurs capteurs.

Pour cela, nous avons créé un jeu de données synthétiques provenant de simulations à l'aide d'un emboîtement de modèles de propriétés optiques de feuilles (PROSPECT), de sol, de couvert végétal (SAIL), et d'effets atmosphériques (6S). Nous pouvions ainsi faire varier tous les paramètres d'entrée de ces modèles, à savoir :

- la composition en eau, matière sèche ainsi que la structure des feuilles;
- le type de sol et son humidité;
- l'architecture du couvert végétal;
- et la composition en eau et aérosols de l'atmosphère.

Finalement le jeu de données obtenu est considéré comme représentatif d'une grande majorité des situations naturelles. Les données radiométriques ainsi obtenues ont été intégrées pour correspondre à 4 niveaux de résolutions spectrales et 3 niveaux de résolutions radiométriques.

Deux approches ont été successivement testées : la première correspond à la régression linéaire et la seconde à l'association de la régression linéaire et de la modélisation neuronale. Les modèles ont été étalonnés sur une partie du jeu de teneurs biochimiques et d'absorptances équivalentes et validés sur l'autre partie.

Nous avons tout d'abord évalué les performances du modèle linéaire à estimer le contenu biochimique. Ceci nous a permis ensuite d'identifier la résolution spectrale optimale. Les estimations des teneurs en eau et matière sèche des échantillons du jeu de validation sont apparues satisfaisantes pour les feuilles et bonnes au niveau du couvert. Ces estimations obtenues à partir du modèle linéaire ont montré une faible sensibilité au regard de la résolution spectrale du capteur mais à l'inverse une sensibilité très importante au regard la résolution radiométrique. L'utilisation conjointe des modèles linéaires et neuronaux a permis d'améliorer significativement les estimations des teneurs des deux composés, eau et matière sèche.

2. Perspectives de recherche

... dépasser les limites des modèles utilisés et de la démarche suivie

Au terme de ce travail, subsistent néanmoins un certain nombre de limites dues à la fois aux modèles utilisés et aux hypothèses et choix réalisés lors de notre démarche.

● *Les limites des modèles utilisés*

Le modèle de propriétés optiques de feuille PROSPECT suppose tout d'abord une répartition homogène des absorbants dans la feuille, ce qui n'est pas totalement exact. De plus, les valeurs radiométriques simulées correspondent à des réflectances et transmittances hémisphériques. Il conviendrait ainsi de développer un modèle qui prenne en compte les propriétés directionnelles.

Au niveau du couvert, le modèle SAIL, qui n'est pas directement basé sur les équations du transfert radiatif, suppose un couvert homogène et le définit à partir d'une architecture qui simplifie largement la réalité. Par exemple, il ne suppose pas l'existence d'un sous-bois. Prendre en compte une description plus fine des couverts végétaux ne pourrait qu'apporter un meilleur réalisme dans les simulations et l'interprétation radiométrique en termes de biochimie foliaire.

Enfin, en ce qui concerne les effets atmosphériques, nous avons fait le choix, pour des questions de temps de calcul, de ne prendre en compte ni les effets du rayonnement diffus, ni ceux de l'environnement.

● *Les limites de la démarche suivie*

La première limite tient à la composition du jeu de données LOPEX. Ce jeu est constitué d'une soixantaine de feuilles d'espèces globalement différentes, par conséquent montrant une grande variabilité biochimique. Nos résultats montrent qu'il n'est pas possible d'estimer d'autres teneurs que celles de l'eau et de la matière sèche avec de telles données. Aussi, serait-il très intéressant de reprendre cette étude en se limitant à un jeu formé d'échantillons d'une même espèce afin de diminuer la variabilité biochimique. A l'inverse, il conviendrait de tester notre démarche sur un jeu de données, pluri-spécifiques, plus important pour tester l'effet de la taille du jeu de données sur la qualité des estimations obtenues à partir de l'approche empirique au niveau des feuilles, notamment pour celles de l'azote et de la lignine.

La deuxième limite tient au fait que nous avons fait l'hypothèse, par économie de temps de calcul, d'une géométrie couvert-soleil-capteur fixe, le capteur étant placé au nadir et le soleil à 45 degrés. Cette géométrie correspond, en effet, à un cas très particulier puisque la géométrie couvert-soleil-capteur varie avec le jour d'acquisition des données et la position (latitude, longitude) du couvert sur la Terre. D'autre part, cette géométrie a tendance à favoriser la contribution du sol, ce qui peut expliquer les meilleures estimations lorsqu'elles sont exprimées en gr par unité de surface de feuillage. Par conséquent, prendre en compte d'autres géométries de mesure et positions du soleil ne pourrait qu'améliorer la représentativité des estimations.

Enfin, avant de lever ces deux limites, il conviendrait, en tout premier lieu, de procéder à une validation expérimentale des modèles élaborés puisque seule une validation numérique a été réalisée.

... extraire l'information à partir d'un minimum de bandes

Il nous semblerait intéressant d'orienter les recherches sur la signification de l'information spectrale, autrement dit sur l'utilité de la haute résolution spectrale.

Au travers de nos résultats, il ne semble pas nécessaire de développer des capteurs possédant une résolution spectrale particulièrement élevée pour estimer quantitativement la biochimie foliaire. En effet, à partir de l'information radiométrique correspondant globalement à 10 bandes, on obtient des estimations très correctes. Ceci reste à être confirmé par l'expérimentation. Néanmoins, cette conclusion est cohérente avec les travaux de Price (1990, 1992) qui suggèrent que le contenu informatif d'un spectre peut être résumé en quelques bandes. Ainsi, il conviendrait de procéder à l'optimisation du domaine spectral informatif pour définir plus spécifiquement le nombre de détecteurs (longueurs d'onde) nécessaires ainsi que leurs résolutions radiométrique et spectrale.

Néanmoins, la haute résolution spectrale peut être intéressante pour la discrimination des types de couverts sur la base de leurs spectres de réflectance.

3. Télédétection et changements globaux : quel avenir ?

La communauté scientifique concernée par les changements globaux attend énormément de la télédétection pour obtenir des estimations de composés biochimiques foliaires tels que l'azote et les protéines mais aussi l'eau et la matière sèche. Les travaux présentés dans cette thèse suggèrent que, d'un point de vue théorique, la télédétection ne pourra répondre que partiellement à ces attentes. L'information spectrale, en tout cas pour la lignine et l'azote foliaire, semble trop faible pour être convenablement estimée. En revanche, on peut maintenant, sous réserve de validation expérimentale, estimer correctement les teneurs foliaires en l'eau et en matière sèche d'un couvert végétal. Il reste alors à intégrer les estimations de ces teneurs dans les modèles de fonctionnement global.

Cette conclusion reste donc globalement positive et contribue à motiver la poursuite des travaux sur l'utilisation de la télédétection pour l'étude des changements globaux.

Références bibliographiques

A

- A.C.C.P., 1994. Accelerated canopy chemistry program. Final report to NASA-EOS-IWG. 19 October 1994, 33 p.
- A.O.A.C., 1970. Official method of analysis (11 th Ed.) Association of official analytical chemists, Washington D. C.
- Aber J. D., Federer C. A., 1992. A generalized, lumped-parameter model of photosynthesis, evapotranspiration and net primary production in temperate and boreal forest ecosystems. *Oecologia*, 92:463-474.
- Allen W. A., Gausman H.W., Richardson A.J., Thomas J.R., 1969. Interaction of isotropic light with a compact plant leaf.. *J. Opt. Soc. Am.*, 59(10):1376-1379.
- Allen W.A., Gausman H.W., Richardson A.J., 1973. Willstätter-Stoll theory of leaf reflectance evaluation by ray tracing. *Appl. Opt.*, 12(10):2448-2453.
- Allen W.A., Gayle T.V., Richardson A. J., 1970. Plant canopy irradiance specified by the Duntley equation. *J. Opt. Soc. Am.*, 60(3):372-376.
- Allen W.A., Richardson A.J., 1968. Interaction of light with a plant canopy. *J. Opt. Am.*, 58(8):1023-1028.
- Asrar G., Dozier J., 1994. Earth observing system, science strategy for the earth observing system. American Institute of Physics Press, Woodbury (NY).

B

- Bach H., Mauser W., 1994. Modelling and model verification of the spectral reflectance of soils under varying moisture conditions. *IGARSS'94*, Pasadena (USA), 2354-2356.
- Baret F., 1994. Use of reflectance spectral variation to retrieve canopy biophysical characteristics. *Advances in Environmental Remote Sensing*. Danson F.M. and Plummer S.E. Chichester (U.K.), John Willey & sons: 33-51.
- Baret F., Clevers J.G.P.W, Steven M.D., 1995. The robustness of canopy gap fraction estimates from red and near infrared reflectances: a comparison of approaches. *Remote Sens. of Environ.*, 54: 141-151.
- Baret F., Fourty T., 1996. Spectral estimates of leaf water content and specific weight. *Remote Sens. Environ.*, submitted.
- Baret F., Guyot G., 1991.. Potentials and limits of vegetation indices for LAI and APAR assessment. *Remote Sens. Environ.*, 35(2-3):161-173.
- Baret F., Jacquemoud S., 1994. Modeling canopy spectral properties to retrieve biophysical and biochemical characteristics. In *inaging spectrometry - a tool for environmental observations* (J. Hill and J. Mégier (Eds.)), ECSC. EEC. EAEC. Netherland. 145-167.
- Baret F., Vanderbilt V. C., Steven M. D., Jacquemoud S., 1994. use of spectral analogy to evaluate canopy reflectance sensitivity to leaf optical properties. *Remote Sens. Environ.*, 47:1-25.
- Barton II F.E., Himmelsbach D.S., Duckworth J.H., Smith M.J., 1992. Two-dimensional vibration spectroscopy: correlation of mid- and near-infrared regions. *Applied Spectroscopy*, 46:420-429.
- Baumgardner M.F., Silva L.F., Biehl L.L., Stoner E.R., 1985. Reflectance properties of soils. *Adv. Agron.*, 38:1-44.

- Beaumont P., 1995.** Réflectance foliaire et acclimatation à un déficit hydrique: cas des feuilles de tournesol. Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse, 129 p.
- Bégué A., 1992.** Modeling hemispherical and directional radiative fluxes in regular-clumped canopies. *Remote Sens. Environ.*, 40:219-230.
- Biston R., Dardenne P., 1985.** Application de la spectrométrie de la réflexion dans le proche infrarouge. Prevision de la qualité des fourrages en vue de leur exploitation rationnelle, *Bull. Reche. Agron. Gembloux*, 20(1/2):23-41
- Borel C.C., Gerstl S.A.W., 1994.** Are leaf chemistry signatures preserved at the canopy level? *IEEE Transactions on Geosciences and Remote Sensing*.
- Breece H.T. III, Holmes R.A., 1971.** Bidirectional scattering characteristics of healthy green soybean and corn leaves in vivo. *Appl. Optics.*, 10:119-127.
- Bunnik N. J. J., 1978.** The multispectral reflectance of shortwave radiation by agricultural crops in relation with their morphological and optical properties. Thèse de l'Université de Wageningen, 176 p.

C

- Card D.H., Peterson D.L., Matson P.A., Aber J.D., 1988.** Prediction of leaf chemistry by use of visible and near infrared reflectance spectroscopy. *Remote Sens. Environ.*, 26:123-147.
- Cierniewski J., 1987.** A model for soil surface roughness influence on the spectral response of bare soils in the visible and near infra red range. *Remote Sens. Environ.*, 23:98-115.
- Cierniewski J., 1989.** The influence of the viewing géométry of bare soil surfaces on their spectral response in the visible and near infrared. *Remote Sens. Environ.*, 27:135-142.
- Conel J.E., Vand den Bosch J., Grove C.I., 1993.** Application of a two stream radiative transfert model for leaf lignin and cellulose concentrations from spectral measurements, in *Summaries 4th Annual Jpl Airborne Geoscience Workshop, Vol. 1. AVIRIS Workshop* (R. O. Green, Ed.), JPL Publication 93-26, Pasadena (CA), pp. 39-51.
- Curcio J. A., Petty C.C., 1951.** The near infrared absorption spectrum of liquid water. *J. Opt. Soc. Am.* 41(5):302-304.
- Curran P. J., 1989.** Remote sensing of foliar chemistry: Review. *Remote sens. Environ.*, 30:271-278.
- Curran P.J., 1994.** Attempts to drive ecosystem simulation models at local to regional scales. *Environmental Remote Sensing Models at Local Scale to Regional Scales*. Foody G.M. and Curran P.J. Chichester, Wiley & Sons Ltd: 149-166.
- Curran P. J., Dungan J. L., Macler B. A., Plummer S. E., Peterson D. L., 1992.** Reflectance spectroscopy of fresh whole leaves for the estimation of chemical concentration. *Remote Sens. Environ.*, 39:153-166.

D

- Dauzat J., 1993.** Simulated plants ad radiative transfer simulations. In *Crop structure and light microclimate, characterisation and Applications*. C. Varlet-Granchet, R. Bonhomme et H. Sinoquet, Ed., Science Update. INRA Editions, Paris, 271-278.
- Deering D.W., Eck T.F., Otterman J., 1990.** Bidirectional reflectance of selected desert surfaces and their three-parameter soil characterization. *Remote Sens. Environ.*, 27:135-142.

Del Bello U., Kealy P., Meynart R., Rast M., 1995. PRISM: a hyperspectral imager for a future ESA land observation mission. *European Satellite Remote Sensing Conference*, Paris.

Deschamps P.Y., Herman M., Tanré D., 1987. Modélisation du rayonnement solaire réfléchi par l'atmosphère et la Terre, entre 0.35 et 4 mm. Rapport du contrat ESA 4369/80/F/DD. 188 p.

E

Escadafal R., 1989. Caractérisation de la surface des sols arides par observations de terrain et par télédétection. Applications : exemple de la région de Tataouine (Tunisie), ORSTOM.

Ewerts, 1985. 3ème Directive avec rectification (J.O.C.E. du 27 novembre 1980), in *Recueil des normes francaises-AFNOR*.

F

Field C., Mooney H.A., 1986. The photosynthesis-nitrogen relationship in wild plants. *On the economy of plant form and function*. T. V. Givnich. New York (USA), Cambridge university press: 25-55.

Fourty T., Baret F., Jacquemoud S., Schmuck G., Verdebout J., 1996. Leaf optical properties with explicite description of its biochemical composition: direct and inverse problems. *Remote Sens. Environ.*, 56:104-117.

Fukshansky L., Fukshansky-Kazarinova N., Remisowsky A.M., 1991. Estimation of optical parameters in a living tissue by solving the inverse problem of the multiframe radiative transfer. *Appl. Opt.*, 30(22):3145-3153.

G

Gao W., 1993. A simple bidirectional-reflectance model applied to a tallgrass canopy. *Remote Sens. Environ.*, 45:209-224.

Gao B.C., Goetz A.F.H., 1990. Column atmospheric water vapor and vegetation liquid water retrievals from Airborne Imaging Spectrometer data. *Journal of Geophysical Research.*, 95(D4):3549-3564.

Gao B.C., Goetz A.F.H., 1994. Extraction of dry leaf spectral features from reflectance spectra of green vegetation. *Remote sens. Env.*, 47:369-374.

Gastellu-Etchegorry J. P., Zagolski F., Mougín E., Marty G., Giordano G., 1995. Assessment of canopy chemistry using AVIRIS, a case study in the landes forest, south-west Franc. *Int. J. Remote Sensing*, 16(3):487-501.

Gastellu-Etchegorry J. P., Zagolski F., Pinel V., Giordano G., Romier J., Marty G., Mougín S., 1994. Assessment of forest canopy chemistry with ISM. *IEEE*, 2/94:999-1001.

Gates D.M., Keegan H.J., Schleter J.C., Weidner V.R., 1965. Spectral properties of plants. *Appl. Optics.*, 4:11-20.

Gausman H.W., 1974. Leaf reflectance of near-infrared. *Photogr. Eng.*, 41:183-191.

- Gausman H.W., Allen W.A., Escobar D.E., Rodriguez R.R., Cardenas R., 1971.** Age effects of cotton leaves on light reflectance, transmittance, and absorbance and on water content and thickness. *Agron. J.*, 63:465-469.
- Gausman H.W., Allen W.A., Wiegand C.L., 1972.** Plant factors affecting electromagnetic radiation. SWC research report 432, 1-41.
- Goel N.S., 1988.** Models of vegetation canopy reference and their use in estimation of biophysical parameters from reflectance data. *Remote Sens. Reviews*, 4(1):1-222.
- Gong P., Pu R., Miller J.R., 1992.** Correlating leaf area index of ponderosa pine with hyperspectral CASI data. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 18(4): 276-282.
- Govaerts Y.M., 1996.** A model of light scattering in three-dimensional plant canopies : a monte carlo ray tracing approach. Thèse de doctorat. Joint Research Center, EUR16394EN.
- Grant L., 1987.** Review article : diffuse and specular characteristics of leaf reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 22:309-322.
- Grant L., Daughtry C.S.T., Vanderbilt V.C., 1987.** Polarized and non-polarized leaf reflectance of Sorghum bicolor. *Remote Sens. Environ.*, 21:333-339.
- Grossman Y.L., Sanderson E.W., Ustin S.L., 1994.** Relationships between leaf chemistry and reflectance for plant species from jasper ridge biological preserve, California, in *Proc. 14 th Int. Geosci. Remote Sens. Symp. (IGARSS'94), Pasadena (CA), 8-12 August 1994.* 2:2357-2359.
- Grossman Y.L., Ustin S.L., Sanderson E., Jacquemoud S., Schumck G., Verdebout J., 1994.** Examination of regression and correlation approaches for extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, submitted.
- Grossman Y.L., Ustin S.L., Jacquemoud S., Sanderson E., Schmuck G., Verdebout J., 1995.** Critique of stepwise linear regression for the extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, in press.
- Gu X.F., 1991.** Etalonnage et intercomparaison des données satellitaires en utilisant le site test de la Crau. Thèse de doctorat de l'Université de Paris VII. 249 p.
- Guyot G., 1989.** Les signatures spectrales des surfaces naturelles, Paradigme. Caen. 178 p.
- Guyot G., 1995.** Synthèse sur les propriétés optiques des couverts végétaux dans le spectre solaire. 43 p.
- Guyot G., 1996.** Capteurs optiques : notes de cours. DEA méthodes physiques en télédétection. Université Paris VII. 107 p.

H

- Hapke B., 1981.** Bidirectional reflectance spectroscopy. 2. Experiments and observations. *J. Geophys. Res.*, 86:3055-3060.
- Hapke B., 1984.** Bidirectional reflectance spectroscopy. 3. Correction for macroscopic roughness. *Icarus*, 59:41-59.
- Hellemans K., Dardenne P., Rivas A., Dieng A., Lobet P., Haineaux E., Biston R., Compere R., 1990.** prediction de la composition chimique des fourrages tropicaux par la spectrometrie de reflexion dans le proche infra-rouge. *Bull. Rech. Agron. Gembloux*, 25(4):473-487.

- Himmelsbach D.S., Boer J.D., Akin D.E., Barton II F.E., 1988.** Solid -state carbon-13 NMR, FTIR and NIR spectroscopic studies of ruminant silage digestion, in *Analytical Applications of spectroscopy*. (C.S. Creaser and A. M. C. Davies Eds.), Royal Society of Chemistry, London,410-413.
- Hosgood B., Jacquemoud S., Andreoli G., Verdebout J., Pedrini G., Schmuck G., 1995.** Leaf Optical Properties EXperiment 93 (LOPEX 93), European Commission, Joint Research Centre, Institute For Remote Sensing Applications, Ispra (Italy), Report EUR-16095-EN.
- Hruschka W.R., 1987.** Data analysis: wavelength selection methods. *Near infrared technology in the agricultural and food industries*. Williams P.C. and Norris K.H. eds. St. Paul MN (USA), American association of cereal chemists, inc.: chapter 3.
- Huete A.R., Jackson R.D., Post D.F., 1985.** Spectral response of plant canopies with different soil backgrounds. *Remote Sens. Environ.*, 17:37-53.
- Huete A.R., Lui H.Q., 1994.** An error and sensitivity analysis of the atmospheric and soil correcting variants of the NDVI for the MODIS-EOS. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 32(4):897-905.
- Hunt E. R., Rock B.N., 1989.** Detection of changes in leaf water content using near and middle-infrared reflectances. *Remote Sens. Environ.*, 30:43-54.
- Hunt E. R., Rock B.N., Nobel P.S., 1987.** Measurement of leaf relative water content by infrared reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 22:429-435.

I

- Idso S.B., Jackson R.D., Reginato R.J., Kimball B.A., Nakayama F.S., 1975.** The dependance of bare soil albedo on soil water content. *J. Appl. Meteor.*,14:109-113.
- Ishida T., Ando H., Fukuhara M., 1991.** Estimation of complex refractive index of soil particles and its dependence on soil chemical properties. *Remote Sens. Environ.*, 38:173-182.
- Ishida T., Price J.C., 1996.** A procedure to infer complex refractive index and mean particle raduis of soils from visible and near infrared reflectance data. *Int. J. Remote Sensing*, 17(11):2145-2164.

J

- Jacquemoud S., 1992.** Utilisation de la haute résolution spectrale pour l'étude des couverts végétaux: Développement d'un modèle de reflectance. *Thèse de doctorat de l'Université Paris VII*, 92 pages.
- Jacquemoud S., 1993.** Inversion of the PROSPECT+SAIL canopy reflectance model from AVIRIS equivalent spectra: theoretical study. *Remote Sens. Environ.*, 44:281-292
- Jacquemoud S., Baret F., 1990.** PROSPECT: a model of leaf optical properties. *Remote Sens. Environ.*, 34:75-91.
- Jacquemoud S., Baret F., Andrieu B., Danson F.M., Jaggard K., 1995a.** Extraction of vegetation biophysical parameters by inversion of the PROSPECT+SAIL models on sugar beet canopy reflectance data. Application to TM and AVIRIS sensors. *Remote Sens. Environ.*, 52:163-172.
- Jacquemoud S., Baret F., Hanocq J.F., 1992.** Modeling spectral and directional soil reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 41:123-132.
- Jacquemoud S., Verdebout J., Schmuck J., Andreoli,G., Hosgood B., 1995b.** Investigation of leaf biochemistry by statistics. *Remote Sens. Environ.*, 54(3):180-188.

- Jacquemoud S., Ustin S.L., Schmuck G., Andreoli G., Hosgood B., 1995.** Estimating leaf biochemistry using the PROSPECT leaf optical properties model. *Remote Sens. Environ.*, in press.
- Joffre R., Gillon D., Dadrenne P., Agneessens R., Biston R., 1992.** The use of near-infrared reflectance spectroscopy in litter decomposition studies. *Ann. Sci. For.*, 49:481-488.
- Johnson L.F., Hlavka C.A., Peterson D.L., 1994.** Multivariate analysis of AVIRIS data for the canopy biochemical estimation along the Oregon transect, *Remote Sens. Environ.*, 47:216-230.
- Johnson L.F., Billow C.R., 1995.** Spectrometric estimation of total nitrogen concentration in Douglas-fir foliage. *Int. J. Remote Sens.*

K

- Kimes D.S., 1984.** Modeling the directional reflectance from complete homogeneous vegetation canopy structure. *Int. J. Remote Sens.*, 4:299-311.
- Knipling E.B., 1970.** Physical and physiological basis for the reflectance of visible and near-infrared radiation from vegetation. *Remote Sens. Environ.*, 1:155-159.
- Korcak R.F., Norris K.H., Walker V., Bhargava J.N., 1987.** Measurement of apple leaf total nitrogen by near infrared reflectance. *HortScience*, 22(2):308-309.
- Kubelka P., Munk F., 1931.** Ein Beitrag zur Optik de Farbanstriche, *Zeitschr. Tech. Physik*, 12:593.
- Kumar R., Silva L., 1973.** Light ray tracing through a leaf cross section. *Appl. Opt.*, 12(12):2950-2954.
- Kupiec J.A., Curran P.J., 1995.** Decoupling effects of the canopy and foliar biochemicals in AVIRIS spectra. *Int. J. Remote Sensing*, 16:1723-1739.
- Kupiec J.A., Smith G.M., Curran P.J., 1993.** Aviris spectra correlated with the chlorophyll concentration of a forest, in *Summaries of the fourth annual JPL airborne geoscience workshop, october 25-29, Green (Eds.)*,105-108.
- Kuusk A., 1991a.** The hot spot effect in plant canopy reflectance. in *Photon-Vegetation Interactions. Applications in Optical Remote Sensing and Plant Ecology*. Myneni, R. B. and J. Ross eds. Berlin, Springer Verlag: 139-159.
- Kuusk A., 1991b.** Determination of vegetation canopy parameters from optical measurements. *Remote Sensing of Environment*, 37:207-218.
- Kuusk A., 1991c.** The hot-spot effect in plant canopy reflectance. Abstract of Ph.D. thesis, Université de Tartu (Estonie), 16 p.

L

- Lawson C. L., Hanson R. J., 1974.** Solving least squares problems, Prentice-Hall, chapter 23.
- Liang S., Yownshned J.R.G., 1996.** A parametric soil BRDF model : a four stream approximation for multiple scattering. *Int. J. Remote Sensing*, 17(7):1303-1315.
- Lichtenthaler H.K., 1987.** Chlorophylls and Carotenoids: pigments of photosynthetic biomembranes. *Methods Enzymol.*, 148:350-382.

M

- Mac Lellan T.M., Aber J.D., Martin M.E., Melillo J.M., Nadelhoffer K.J., 1991.** Determination of nitrogen, lignin and cellulose content of decomposing leaf material by near infrared reflectance spectroscopy. *Canadian Journal of Forest Research*, 21:1684-1689.
- Marten, G. C., Shenk, J. S., Barton, F. E., 1989.** Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality, USDA Handbook 643, U.S. Department of agriculture, Washington, DC:1-96.
- Martin M.E., Aber J.D., 1990.** Effect of moisture content and chemical composition on the near infrared spectra of forest foliage. SPIE. *Imaging Spectrometry of the Terrestrial Environment*. 1298:171-177.
- Martin M.E., Aber J.D., 1993.** Measurements of canopy chemistry with 1992 aviris data at blackhawk island and harvard forest, in *Summaries of the 4th annual JPL airborne geoscience workshop, Pasadena (CA), october 25-29, Green (Eds.)*, 113-116.
- Martin M.E., Aber J.D., 1994.** Analyses of forest foliage III: Determining nitrogen, lignin and cellulose in fresh leaves using near infrared reflectance data. *J. Near Infrared Spectrosc.*, 2:25-32.
- Martin M.E., Aber J.D., 1994.** High spectral resolution remote sensing of canopy chemistry, in *Proceedings of the 6th international symposium, Physical measurements and signatures in remote sensing, Val d'Isere, France, 17-21 janvier*, 201-207.
- Martin M.E., Aber J.D., 1994.** High spectral resolution remote sensing of canopy chemistry. *International symposium of the ISPRS, Val d'Isère (France), CNES*.
- Matson P.A., Johnson L.F., Billow C., Miller J., Pu R., 1994.** Seasonal patterns and remote spectral estimation of canopy chemistry across the Oregon transect. *Ecological Applications*, 4:280-288.
- Matson P.A., Vitousek P.M., 1987.** Cross-system comparisons of soil nitrogen transformations and nitrous oxide flux in tropical forest ecosystems. *Global Biogeochem. Cycles*, 1:163-170.
- Melillo J.M., Aber J.D., Muratore J.F., 1982.** Nitrogen and lignin control of hardwood leaf litter decomposition dynamics. *Ecology*, 63:621-630.
- Minolta Camera Co., 1991.** Manual for Chlorophyll meter SPAD-502. Osake, Japon, Minolta Camera Co.
- Monteith J.L., 1977.** Climate and the efficiency of crop production in Britain. *Phil. Trans. R. Soc. Lond., B*, 281:277-294.
- Myneni R.B., Asrar G., Burnett R.B., Kanemasu E.T., 1987.** Radiative transfer in an anisotropically scattering vegetative medium. *Agric. For. Meteorol.*, 41:97-121.
- Myneni R.B., Williams D.L., 1994.** On the relationship between FAPAR and NDVI. *Remote Sens. Environ.*, 49:200-211.

N

- NASA, 1994.** Accelerated canopy chemistry program. Final report to NASA-EOS-IWG. Washington (DC), NASA.
- Nelder J.A., Mead R.A., 1965.** A simplex method for function optimization. *Computer/computation Journal*, 7:308-313.
- Norman J.M., Welles J.M., 1983.** Radiative transfer in an array of canopies. *Agron. J.*, 75:481-488.
- Norris K.H., Barnes R.F., Moore J.E., Shenk J.S., 1976.** Predicting forage quality by infrared reflectance spectroscopy. *J. Animal Sci.*, 43:839-878.

O

Otterman J., Weiss G.H., 1984. Reflection from a field of randomly located vertical protusions. *Appl. Opt.*, 23:1931-1936.

P

Palmer K.F, Williams D., 1974. Optical properties of water in the near infrared. *J. Opti. Soc. Am.*, 64(8):1107-1110.

Pening de Vries F.W.T., 1975. The cost of maintenance processes in plant cells. *Ann. Bot. Lond.*, 39:77-92.

Pening de Vries F.W.T., Brunsting A. H. M., Van Laar H. H., 1974. Products, requirements and efficiency of biosynthesis: A quantitative approach. *J. Theoretical biol.*, 45:339-377.

Peterson D.L., 1991. Report on the workshop remote sensing of plant biochemical content: Theoretical studies and empirical studies. *Marconi conference center, Marshall California USA*, 51 pages.

Peterson D.L., Aber J.A., Matson P.A., Card D.H., Swanberg N., Wessman C., Spanner M., 1988. Remote sensing of forest canopy and leaf biochemical contents. *Remote Sens. Environ.*, 24:85-108.

Peterson D.L., Running S.W., 1989. Application in forest science and management. in *Theory and Application of Optical Remote Sensing* (G. Asrar, Ed.), Wiley, N. Y., pp. 429-473.

Peterson D.L., Scott Hubbard G., 1992. Scientific issues and potential remote-sensing requirements for plant biochemical content. *J. Imaging Science Technology*, 36 (5): 446-456.

Pinty B., Verstraete R.E., Dickinson R.E., 1990. A physical model of the directional reflectance of vegetation canopies. 2. Inversion and validation. *J. Geophys. Res.*, 95:11767-11775.

Price J.C., 1990. Information content of soil spectra. *Remote Sens. Environ.*, 33:113-121.

Price J.C., 1992. Variability of high resolution crop reflectance spectra. *Int. J. Remote Sens.*, 14:2593-2610.

R

Rabotnikof C.M., Planas G.M., Silva Colomer J., Stritzler N.O., 1995. Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for predicting forage quality of perennial warm-season grasses in La Lampa, Argentina. *Ann. Zootech.*, 44:97-100.

Reeves III J.B., 1988. Near Infrared reflectance spectroscopic analysis of sodium chlorite-treated forages and other plant materials. *J. Dairy Sci.*, 71:143-151.

Reeves III J.B., Blosser T.H., Balde A.T., Glenn B.P., Vandersall J., 1991. Near infrared spectroscopic analysis of forage samples digested in situ (Nylon bag). *J. Dairy Sci.*, 74:2664-2673.

Rondeaux G., Guyot G., 1990. Polarisation de la lumière par les couverts végétaux : possibilités d'application agronomiques. *Canad. J. of Remote Sensing*, 16(2):32-41.

Rummelhart D.E., Hinton G.E., Williams R.J., 1986. Learning internal representations by error propagation. *Parallel Data Processing*. Rummelhart D. and Mc Clelland J. eds. Cambridge. MA (USA), M.I.T. press., 1:318-362.

Running S.W., Aber J.D., Peterson D.L., Matson P.A., Vitousek P.M., 1985. A simulated model integrating carbon, water and nitrogen cycles in forest. in *Proc. Symp. IUFRO Whole Plant Physiology*, Oak Ridge, TN.

S

Sinoquet H., 1993. Modelling radiative transfer in heterogeneous canopies and intercropping systems. In *Crop structure and light microclimate, characterization and applications*, C. Varlet-Grancher, R. Bonhomme and H. Sinoquet, eds, INRA Editions, 513 p.

Suits G.H., 1972. The calculation of the directional reflectance of a vegetative canopy. *Remote Sens. Environ.*

Smith M., 1992. Spectral mixture analysis-New strategies for the analysis of multi-spectral resolution data. *Imaging spectrometry as a tool for environmental observations*. Kluwer.

Smith G.M., Curran P.J., 1992. Exploring the remote sensing of foliar biochemical concentrations with AVIRIS data. in *Summaries of the 3rd annual JPL Airborne Geoscience Workshop, June 1-5, Green (Eds.)*, 50-52.

Suits G.H., 1972. The calculation of the directional reflectance of a vegetative canopy. *Remote Sens. Environ.*, 2:117-125.

T

Tanré D., Deroo C., Herman, M., Morcrette J.J., Deschamps P.Y., 1986. Simulation of Satellite signal in the solar spectrum. User's guide. 264 p.

Thomas J.R., Namken L.N., Oerther G.F., Brown R.G., 1971. Estimating leaf water content by reflectance measurements. *Agron. J.*, 63:845-847.

Tucker C.J., 1980. Remote sensing of leaf water content in the near infrared. *Remote Sens. Environ.*, 10:23-32.

Tucker C.J., Garratt H.W., 1977. Leaf optical system modeled as a stochastic process. *Appl. Opt.*, 16(3):635-642.

V

Van Soest P.J., Masson V.C., 1967. The influence of the Maillard reaction upon the nutritive values of fibrous feed. *Feed Sci. and Technol.*, 32:45-53.

Van Soest P. J. , Wine R., 1991. Use of detergent in the analysis of fibrous feeds. IV Determination of plant cell wall constituents. *J. Ass. Off. Agric. Chem.*, 50:50-55.

Verdebout J., Jacquemoud S., Andreoli G., Hosggod B., Schmuck G., 1994. Investigations on the biochemical components NIR absorption features in AVIRIS and laboratory reflectance spectra of vegetation. *IEEE, (IGARSS'94)*. pp. 993-995.

Verhoef W., 1984. Light scattering by leaf layers with application to canopy reflectance modeling: the SAIL model. *Remote Sens. Environ.*, 16:125-141.

Verhoef W., 1985. Earth observation modeling based on layer scattering matrices *Remote Sens. Environ.*, 17:165-178.

- Vermote E., Tanré D., Deuzé J.L., Herman M., Mocrette J.J., 1994.** Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum (6S). Lille (France), Report Laboratoire d'optique atmosphérique.
- Verstraete M.M., Pinty B., Dickinson R.E., 1990.** A physical model of the bidirectional reflectance of vegetation canopies, 1. Theory. *J. Geophys. Res.*, 95:11755-11765.
- Vitousek P.M., 1982.** Nutrient cycling and nutrient use efficiency. *American Nature*, 119:553-572.
- Vogelman T.C., 1993.** Plant tissue optics. *Annual Review of plant physiology and molecular biology*, 44: 231-251.
- Vogelmann T.C., Bjorn L.O., 1986.** Plant as light traps. *Plant Physiol.*, 68:704-708.

W

- Wallach D., Goffinet B., 1987.** Mean squared error of prediction in models for studying ecological and agronomic systems. *Biometrics*, 43:561-573.
- Walter-Shea E.A., Norman J.M., 1991.** Leaf optical properties, In *photon-vegetation interactions, application in optical remote sensing and plant ecology*, R.B. Myneni and J. Ross Eds., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 230-251.
- Waring R.H., McDonald A.J.S., Larsson S., Ericsson T., Wiren A., Arwidsson E., Ericsson A., Lohammar T. 1985.** Differences in chemical composition of plants grown at constant relative growth rates with stable mineral nutrition. *Oecologia*, 66:157-160.
- Waring R.H., Aber J.D., Mellilo J.M., More III B., 1986.** Precursors of change in terrestrial ecosystems: remote sensing offers new ways to estimate basic ecological parameters that signal change in terrestrial systems. *Bioscience*, 36:433-438.
- Weende P., 1985.** NF V03-400, in *Recueil des normes francaises-AFNOR*.
- Wessman C.A., 1992.** Remote sensing and the estimation of ecosystem parameters and functions, Eurocourse, Imaging spectrometry as a tool for environmental observations, Ispra, 23-27 november 1992, ISE/92/5.
- Wessman C.A., Aber J.D., Peterson D.L., Mellilo J.M., 1988a.** Remote sensing of canopy chemistry and nitrogen cycling in temperate forest ecosystems. *Nature*, 335:154-156.
- Wessman C.A., Aber J.D., Peterson D.L., Melillo J.M., 1988b.** Foliar analysis using near infrared reflectance spectroscopy. *Can. J. For. Res.*, 18: 6-11.
- Weyer L. G., 1985.** Near infrared spectroscopy of organic substances. *Appl. Spectrosc. Rev.*, 21:1-43.
- Williams K., Percival F., Merino J., Mooney H.A., 1987.** Estimation of tissue construction cost from heat of combustion and organic nitrogen content. *Plant, Cell and Environment*, 10:725-734.
- Williams P., Norris K.H., 1987.** Near-Infrared technology in the Agricultural and Food Industries. American Association of Cereal Chemists. St. Paul, MN. USA, 330 p..
- de Wit C.T., 1959.** potential photosynthesis of crop surfaces. *Neth. J. Agric. Sci.*, 7:141-149.
- de Wit C.T., 1965.** Photosynthesis of leaf canopies. Agr. Res. Report 663, Centre for Agricultural Publications and documentation (PUDOC). Wageningen.
- Woolley J.T., 1971.** Reflectance and transmittance of light by leaves. *Plant Physiol.*, 47:656-662.

Y

- Yamada N., Fujimura S., 1988.** A mathematical model of reflectance and transmittance of plant leaves as a function of chlorophyll pigment content, in *Proc of IGARSS '88 Symposium, Edinburg, Scotland, 13-16 sept.*, ESA SP-284.
- Yamada N., Fujimura S., 1991.** Non destructive measurement of chlorophyll pigment content in plant leaves from three-color reflectance and transmittance. *Appl. opt.*, 30(27):3964-3973.
- Yoder B.J., Pettigrew-Crosby R.E., 1995.** Predicting nitrogen and chlorophyll content and concentration from reflectance spectra (400-2500 nm) at leaf and canopy scales. *Remote Sens. Environ.*, 53:199-211.

Z

- Zagolski F., 1994.** Evaluation des concentrations chimiques d'un couvert forestier à l'aide de la haute résolution spectrale. *Thèse de l'University Paul Sabatier, Toulouse (France)*, 173 p.

Annexes

<i>Urtica gabra</i>	D				3.6477	3.124e-05	4.151e-04	1.409e-03	3.550e-03	5.700e-03	1.760e-03	9.958e-05	1.098e-03
<i>Urtica dioica</i>	D				3.058e-04	7.356e-05	1.450e-04	7.9106	2.484e-03	6.900e-03	1.188e-03	1.244e-04	5.301e-04
<i>Vitis silvestris</i>	D				1.040e-03	2.506e-04	2.355e-04	1.994e-03	4.664e-03	1.240e-02	2.247e-03	9.479e-05	7.998e-04
<i>Vitis silvestris</i>	D				1.180e-03	1.454e-04	1.555e-04	1.479e-03	4.483e-03	1.110e-02	2.221e-03	1.492e-04	7.832e-04
<i>Vitis vinifera</i>	D				1.339e-03	1.994e-04	3.173e-04	1.351e-03	4.663e-03	1.180e-02	2.310e-03	1.574e-04	8.410e-04
<i>Bambusa acudinacea</i>	M				4.506e-04	0.000e+0	2.505e-03	5.289e-05	6.325e-03	8.200e-03	3.147e-03	1.634e-04	4.741e-03
<i>Bambusa acudinacea</i>	M				3.232e-04	0.000e+0	2.281e-03	5.887e-07	5.436e-03	6.600e-03	2.733e-03	1.565e-04	4.098e-03
<i>Musa ensete</i>	M				1.799e-04	4.797e-05	1.150e-03	4.594e-04	3.529e-03	1.280e-02	1.738e-03	1.296e-04	2.018e-03
<i>Oryza sativa</i>	M				6.249e-05	0.000e+0	1.295e-03	4.238e-04	3.736e-03	1.040e-02	1.784e-03	1.514e-04	2.359e-03
<i>Oryza sativa</i>	M				3.492e-04	0.000e+0	1.800e-03	5.380e-04	5.022e-03	8.000e-03	2.489e-03	9.529e-05	3.536e-03
<i>Phleum pratense</i>	M				9.4877e-05	1.189e-05	8.723e-04	2.998e-04	2.711e-03	1.020e-02	1.329e-03	8.536e-05	1.759e-03
<i>Phragmites communis</i>	M				5.185e-04	0.000e+0	2.222e-03	1.700e-03	8.354e-03	7.900e-03	4.189e-03	2.5929e-04	4.612e-03
<i>Sorghum halepense</i>	M				1.379e-04	1.541e-05	1.415e-03	2.851e-05	3.609e-03	1.250e-02	1.812e-03	1.275e-04	2.572e-03
<i>Zea mays</i>	M				1.180e-04	0.000e+0	1.366e-03	3.4680	3.976e-03	1.330e-02	1.988e-03	1.566e-04	2.477e-03
<i>Zea mays</i>	M				1.133e-04	0.000e+0	1.164e-03	1.619e-04	3.370e-03	1.440e-02	1.692e-03	1.645e-04	2.158e-03
<i>Zea mays</i>	M				9.766e-05	0.000e+0	1.084e-03	4.736e-04	3.200e-03	8.700e-03	1.599e-03	7.315e-05	2.034e-03
<i>Zea mays</i>	M				1.002e-04	0.000e+0	1.236e-03	8.347e-04	3.799e-03	8.000e-03	1.846e-03	7.319e-05	2.386e-03
<i>Zea mays</i>	M				1.109e-04	1.464e-05	1.134e-03	2.182e-04	3.424e-03	1.310e-02	1.722e-03	1.596e-04	2.108e-03

Les échantillons utilisés dans les études portant sur les feuilles fraîches et sèches sont respectivement signalés par les rectangles



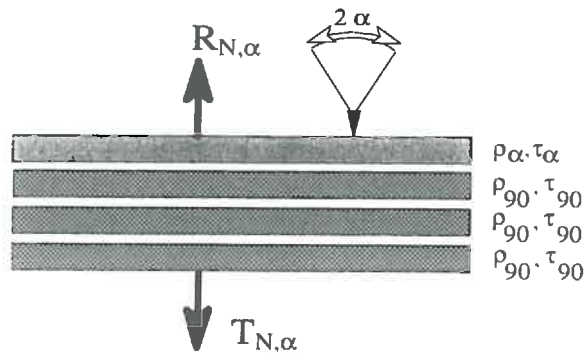
M et D indiquent l'appartenance des échantillons aux groupes des Mono et Dicotylédones.

Annexe 2 : Les différents modèles analytiques utilisés

PROSPECT (Jacquemoud et Baret, 1992)

Le modèle de propriétés optiques de feuilles PROSPECT est une version améliorée du "plate modèle" généralisé de Allen *et al.* (1970).

Dans ce modèle, la feuille est assimilée à un empilement de couches cellulaires diffusantes et absorbantes.



La diffusion, principalement due aux changements brutaux d'indice de réfraction (n) dans la feuille est caractérisée par le nombre de couches cellulaires (N) et d'un indice de réfraction (n).

L'absorption est quantifiée par un coefficient d'absorption avec l'hypothèse que les composés absorbants sont répartis homogènement dans la feuille. Dans la version initiale de PROSPECT, le coefficient d'absorption est égal au produit de la teneur en eau foliaire par le coefficient spécifique d'absorption de l'eau.

Les valeurs radiométriques se calculent par la résolution du système suivant :

$$\frac{R_{N,90}}{b_{90}^N - b_{90}^{-N}} = \frac{T_{N,90}}{a_{90} - a_{90}^{-1}} = \frac{1}{a_{90} b_{90}^N - a_{90}^{-1} b_{90}^{-N}}$$

où $R_{N,90}$ et $T_{N,90}$ sont respectivement la réflectance et la transmittance de la feuille pour un rayonnement incident de demi angle 90° , a et b des constantes dépendantes de la réflectance et de la transmittance d'une couche élémentaire interne (ρ_{90}, τ_{90}).

$R_{N,90}$ et $T_{N,90}$ sont ensuite utilisés pour calculer la réflectance et la transmittance de la feuille $R_{N,\alpha}$ et $T_{N,\alpha}$ pour un rayonnement incident de demi angle α .

$$R_{N,\alpha} = x \cdot R_{N,90} + y$$

$$T_{N,\alpha} = x T_{N,90}$$

où x et y sont dépendant de la transmittivité d'une surface plane diélectrique.

Ce simple modèle est précis, rapide et numériquement inversible.

SAIL (Verhoef, 1984 et 1986) ("Scattering by Arbitrarily Inclined Leaves")

Ce modèle de transfert radiatif de couvert végétal est dérivé du système d'équation de kubelka-munk (1931).

Les hypothèses de ce modèle sont :

- un couvert horizontal, homogène et infiniment étendu;
- des feuilles lambertiennes, de même propriétés optique sur les deux faces, de petite dimension, plates et de distribution azimutale aléatoire.

Il permet de calculer la réflectance directionnelle du couvert dans le cas d'un rayonnement incident directionnel à partir du système de quatre équations suivantes :

$$\frac{dE_s}{dx} = k.E_s$$

$$\frac{dE_-}{dx} = -s.E_s + a.E_- - \sigma.E_+$$

$$\frac{dE_+}{dx} = s'.E_s + \sigma.E_- - a.E_+$$

$$\frac{dE_o}{dx} = w.E_s + v.E_- + u.E_+ - K.E_o$$

avec E_s le flux directionnel incident, E_- le flux diffus descendant, E_+ le flux diffus ascendant, et E_o le flux directionnel dans la direction de l'observateur, x la profondeur du couvert végétal. Aux processus physiques d'extinction et de diffusion correspondent respectivement les coefficients k , K et s , a , σ , s' , w , v , u .

Tous ces coefficients sont définis à partir de l'architecture du couvert végétal et des propriétés optiques des feuilles et du sol.

Les paramètres d'entrée du modèle sont tous expérimentalement mesurables : l'indice foliaire, l'angle d'inclinaison des feuilles, les propriétés spectrales des feuilles et du sol, les angles azimutaux et zénithaux du soleil et du capteur, et un paramètre de hot-spot (dans sa version modifiée).

Ce modèle présente l'avantage d'être relativement simple, de ne nécessiter qu'un nombre limité de paramètres d'entrée, et de fournir la réflectance du couvert pour un temps de calcul très court.

6S (Vermote *et al.*, 1994) ("Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum")

Le modèle 6S est une amélioration du modèle 5S (Tanré *et al.*, 1985). Il permet de simuler avec précision le rayonnement reçu par le capteur en tenant compte des effets atmosphériques (absorption-diffusion).

Des modèles de distribution des gaz et aérosols sont utilisés pour définir l'absorption et la diffusion du rayonnement incident et réfléchi par le couvert végétal.

La réflectance équivalente, pour une altitude, une géométrie du soleil et du capteur données, est calculée par la relation suivante :

$$\rho = T_g \cdot \left[\rho_r + \rho_a + \frac{\rho_t}{1 - S \cdot T_s T_v} \right]$$

avec ρ la réflectance équivalente, T_g le coefficient de transmission, ρ_r la contribution de l'environnement, ρ_a la contribution intrinsèque de l'atmosphère, ρ_t la réflectance du couvert, S un coefficient de diffusion, et T la fonction de transmission.

Les paramètres d'entrée du modèle sont les propriétés optiques du couvert végétal, les angles azimutaux et zénithaux du soleil et du capteur, le modèle de distribution des gaz et aérosols atmosphériques choisi, l'épaisseur optique de l'atmosphère.

Ce modèle, relativement rapide d'exécution, simule la réflectance "top of the atmosphere" pour un échantillonnage spectral de 2.5 nanomètres.

Liste des Tableaux

Chapitre 1

Tableau I : Principaux absorbants foliaires avec leurs bandes d'absorption caractéristiques dans le proche et moyen infrarouge

Chapitre 2

Tableau I : Minimum, average and maximum mass fraction (in % of the total dry mass) of the main biochemical compounds observed over the 43 leaf types studied

Tableau II : Interpretation of the absorption peaks according to Curran (1989) and Himmelsbach *et al.* (1988)

Tableau III : *RMSE* values associated to the reconstruction performances for the absorption coefficient $K(\lambda)$, the single leaf reflectance $\rho_s(\lambda)$ and transmittance $\tau_s(\lambda)$ and the infinite reflectance $\rho_\infty(\lambda)$. Several ways to describe the leaf biochemical composition are compared. Italic numbers correspond to biochemical composition for which lipids are not accounted for. Bold numbers correspond to biochemical composition for which lipid and ash are not accounted for.

Tableau IV : T values associated to the retrieval of the biochemical composition using the model inversion and the previously estimated specific absorption coefficients. The model was inverted over single leaf reflectance $\rho_s(\lambda)$ and transmittance $\tau_s(\lambda)$ and the infinite reflectance $\rho_\infty(\lambda)$. Several ways to describe the leaf biochemical composition are compared. They are described by the number presented in the first row which was explained previously in table 3 (first column). Italic numbers correspond to biochemical composition for which lipids are not accounted for. Bold numbers correspond to biochemical composition for which lipid and ash are not accounted for.

Chapitre 3

Tableau I : Minimum, average and maximum values of specific leaf weight and water content of our 58 leaves data set

Tableau II : T and $RMSE$ (in parenthesis) values characterizing the retrieval performances of water content (C_w) and specific leaf weight (SLW) from concurrent measurements of reflectance and transmittance (Refl. & Transmit.) or using only reflectance (Refl.) or transmittance (Transmit.) measurements. We used the specific absorption coefficient for water provided by Curcio and Petty ($k_w = k_w^{Curcio}$) or the one corrected for the optical path ($k_w = 1.12k_w^{Curcio}$).

Chapitre 4

Tableau I : Minimum, average and maximum contents ($g.cm^{-2}$) of the main biochemical compounds observed in the data set (57 leaf types)

Tableau II : Wavebands (nm) selected to explain water and dry matter contents by the multiple linear regression when calibrating over spectra contaminated with the three levels of noise ($\sigma=0.000$; $\sigma=0.001$; $\sigma=0.010$)

Tableau III : T values observed for water and dry matter using the three first wavebands selected as a function of the level of radiometric noise applied to the calibration and test data sets. Values are presented for absorbance computed with reflectance (α_ρ) or transmittance (α_τ).

Chapitre 5

Tableau I : Distribution of the input variables

Tableau II : The first 15 wavebands (nm) selected by the multiple linear regression from a "standard sensor" radiometric data set. Bold numbers correspond to the optimal set of wavebands selected.

Liste des Figures

Introduction

Figure 1 : Schéma conceptuel de la thèse

Chapitre 1

Figure 1 : Vibrations et oscillations d'une liaison électronique

Figure 2 : Effet d'une déshydratation progressive sur les propriétés optiques d'une feuille de coton dans les domaines spectraux du visible au moyen infrarouge pour 4 dates successives (d'après Gausman et al., 1972)

Figure 3 : Sensibilité de la réflectance dans le proche infrarouge à la diffusion selon le modèle PROSPECT (d'après Guyot, 1995)

Figure 4 : Variation de l'intensité énergétique transmise ou réfléchi par unité d'angle solide (sr^{-1}) par une feuille de soja pour la longueur d'onde 860 nm et 3 angles d'incidence (adapté de Breece et Holmes, 1971)

Figure 5 : Effet de la diffusion pour trois sols différents: (—) sol argileux, (...) terreau, (---) sable (d'après Jacquemoud, 1992)

Figure 6 : Analyse de sensibilité de la réflectance du couvert végétal aux propriétés optiques des feuilles (N = indice de structure des feuilles; C_{ab} = teneur en chlorophylle; C_w = teneur en eau) (d'après Guyot, 1995)

Figure 7 : Analyse de sensibilité de la réflectance d'un couvert végétal à l'indice de végétation et à l'angle d'inclinaison des feuilles (l = indice foliaire; θ = angle d'inclinaison des feuilles) (d'après Guyot, 1995)

Figure 8 : Coefficient de transmission gazeuse de l'atmosphère pour l'hiver tropical (d'après Tanré *et al.*, 1986)

Figure 9 : Effets atmosphériques aux niveaux de la surface et du capteur

Figure 10 : Récapitulatif des paramètres à utiliser pour les deux objectifs

Chapitre 2

Figure 1 : Correlations between the concentrations observed over the 43 leaves. The concentrations are expressed in $\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. The number in the lower diagonal matrix is the associated R^2 value.

Figure 2 : RMSE values associated to the comparison between the absorption coefficients evaluated at a 10nm spectral sampling interval after interpolation at 1nm interval and that obtained originally at 1nm spectral sampling interval. This is computed over the 43 leaves investigated.

Figure 3 : Comparison between the measured reflectance (a), transmittance (b) and infinite reflectance (c) and the corresponding values simulated using the PROSPECT model using the retrieved values of $K(\lambda)$, N and α parameters

Figure 4 : Specific absorption coefficients ($\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$) of each biochemical compound.

Figure 5 : Contribution (γ_i) of each biochemical compound to the global absorption coefficient. The contribution of each compound is computed as the product of the specific absorption coefficient ($k_i(\lambda)$) and the average concentration ($\overline{C_i}$) divided by the average global

absorption coefficient (\overline{K}):
$$\gamma_i = \frac{k_i(\lambda) \cdot \overline{C_i}}{\overline{K}}$$

Figure 6 : Sensitivity of the reconstruction performances of single leaf reflectance, transmittance and infinite reflectance to the accuracy with which the global absorption coefficient is reconstructed. Each data point corresponds to one of the biochemical composition presented in table 3.

Figure 7 : RMSE values associated to the global absorption coefficient reconstruction as a function of the number of compounds or biochemical groups taken into account (described by a label which was explained in table 3)

Figure 8 : Comparison between the specific absorption coefficient computed for dry matter (all biochemicals (except lipid and ash) grouped together), and that computed using individual specific absorption coefficients and the average biochemical composition

Chapitre 3

Figure 1 : Comparison between the measured leaf reflectance (transmittance) and the values simulated using the PROSPECT model and the estimated values of $K(\lambda)$ and N

Figure 2 : Comparison between the specific absorption coefficients of water (k_w) given by Curcio and Petty (1951) (solid line) and that estimated in this study (dotted line)

Figure 3 : Comparison between specific absorption coefficients of dry matter (k_{SLW}) provided by Fourty et al. (1996) (solid line) and the values estimated in this study (dotted line)

Figure 4 : Contribution of the water to the total leaf absorption. The contribution is computed as: $k_w(\lambda) \cdot \overline{C_w} / (k_{SLW}(\lambda) \cdot \overline{SLW} + k_w(\lambda) \cdot \overline{C_w})$ where \overline{SLW} and $\overline{C_w}$ are the average SLW and Cw values. k_w and k_{SLW} are respectively the specific absorption coefficients proposed by Curcio and Petty (1951) and Fourty et al. (1996).

Figure 5 : Water (Cw) and dry matter (SLW) contents retrieved from model inversion using concurrently reflectance and transmittance spectra compared to the measured values of Cw and SLW. The solid line is the 1:1 line.

Figure 6 : Comparison between the values of the N structure parameter retrieved from model inversion using concurrently reflectance and transmittance (N(R+T)) and those retrieved using from inversion using either reflectance (N(R), +) or transmittance (N(T), o). The solid line is the 1:1 line.

Chapitre 4

Figure 1 : T values obtained for the estimation of water or dry matter contents using reflectance or transmittance values. Dashed (open symbols) and solid (plain symbols) lines correspond respectively to the calibration and test data sets. Squares and diamonds correspond respectively to the use of ρ (or τ) and $\alpha\rho$ (or $\alpha\tau$).

Figure 2 : T values computed over the calibration (dashed lines) and test (solid lines) for the several biochemical contents estimated using $\alpha\rho$ (■) or $\alpha\tau$ (●) values

Figure 3 : Average T values obtained on the test data set for the estimation of water (Cw: figure 3a, 3b and 3c) and dry matter (SLW figure 3d, 3e and 3f) as a function of the number of wavebands selected for the three levels of radiometric noise induced in the calibration data set ($\sigma=0.000$, figure 3a and 3d; $\sigma=0.001$, figure 3b and 3e; $\sigma=0.010$, figure 3c and 3f). Results presented on the test data set associated with the three levels of radiometric noise: $\sigma=0.000$ (--O--); $\sigma=0.001$ (—◇—); $\sigma=0.010$ (—□—). The average T values are computed over ten replicates of the test data set.

Figure 4 : Specific absorption coefficients ($\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, logarithmic scale) as a function of wavelength for water (solid line) and dry matter (dashed line) (from Baret and Fourty, 1996). The positions of the 6 bands selected by the linear regression calibrated using spectra contaminated by $\sigma=0.010$ noise level are indicated for water (Δ) and dry matter (O).

Figure 5 : Comparison between water contents ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-2}$) estimated from the linear regression, and the measured values. The regression was developed on the calibration data set with $\sigma=0.010$ using three wavebands. The comparison is performed over the test data set without noise ($\sigma=0.000$).

Figure 6 : Comparison between Dry matter contents ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-2}$) estimated from the linear regression, and the measured values. The regression was developed on the calibration data set with $\sigma=0.010$ using three wavebands. The comparison is performed over the test data set without noise ($\sigma=0.000$).

Chapitre 5

Figure 1 : Noise equivalent reflectance for three levels of radiometric resolution (Low, Medium and High) as a function of wavelength (from Del Bello et al., 1995)

Figure 2 : T values obtained for each canopy variable, spectral and radiometric resolutions, as a function of the number of wavebands selected. Thin solid lines correspond to 10nm, dashed to 12nm, dashed dashed to 16nm and thick solid line to 20nm spectral resolution. "no" correspond to no instrumental noise, "low", "medium" and "high" correspond to the corresponding radiometric resolutions investigated.

Figure 3 : Comparison of the T values associated to a direct estimation of canopy level contents (solid lines) and an indirect estimates computed from the multiplication of the leaf level contents (Cw or SLW) by LAI. Results obtained for 20nm spectral resolution and medium radiometric resolution.

Figure 4 : Sensitivity of the T value to the number of bands selected. The lines presented correspond to equation [8] with the parameters b and c adjusted over the actual T values corresponding to 20 nm spectral resolution and medium radiometric resolutions using equation [7].

Figure 5 : Position of the wavebands selected by the linear multiple regression for the five canopy variables. The solid line represents a typical satellite level equivalent reflectance spectra.

Figure 6 : Comparison between T values corresponding to the neural network (Tn), and the linear multiple regression (Tr) approaches. The difference Tn-Tr is presented here for the five canopy characteristics (Cw, SLW, Cw.LAI, SLW.LAI, LAI). Results obtained over the same test data sets with 20 nm spectral resolution and no instrumental noise. The bands selected are those presented in Table 2.

Figure 7 : Sensitivity of the estimation of the five canopy characteristics (Cw, SLW, Cw.LAI, SLW.LAI, LAI) when the neural networks are trained and applied on wavebands shifted from their optimal position by ± 10 nm or ± 20 nm. T values are computed over the test data sets for 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution. The optimal wavebands are those presented in Table 2.

Figure 8 : Sensitivity of the estimation of the five canopy characteristics (Cw, SLW, Cw.LAI, SLW.LAI, LAI) when the neural networks are trained over the optimal wavebands selected and applied on wavebands shifted from their optimal position from ± 10 nm or ± 20 nm. T values are computed over the test data sets for 20 nm spectral resolution and the medium radiometric resolution. The optimal wavebands are those presented in Table 2.

RESUME

Estimation du contenu biochimique d'un couvert végétal à partir de données haute résolution spectrale acquises au niveau satellitaire.

Comprendre les cycles bio-géo-chimiques des écosystèmes terrestres, et au delà les effets des changements globaux, nécessite la connaissance des teneurs des composés biochimiques foliaires (protéines, lignine, cellulose, etc). Ces composés participent à l'élaboration de la signature spectrale des couverts végétaux. Pour cette raison, la télédétection satellitaire haute résolution spectrale et les techniques associées d'interprétation des données constituent potentiellement un outil novateur d'estimation du contenu biochimique de ces composés.

L'objectif de cette thèse est donc de cerner les potentialités de la télédétection satellitaire haute résolution spectrale dans l'infrarouge (860-2400 nm) pour estimer le contenu biochimique des couverts végétaux. Pour cela, nous avons développé et validé des modèles analytiques ou semi-analytiques valables pour tout type de feuille, basés sur l'analyse de la relation entre la composition biochimique et les propriétés spectrales. Nous avons travaillé successivement à deux échelles, celui de la feuille et celui du couvert végétal qui prend en compte les effets atmosphériques.

Au niveau de la feuille, nous avons développé en premier une approche analytique. Nous nous sommes tout d'abord focalisé sur la feuille sèche, puisque l'eau de la feuille masque l'absorption des autres composés biochimiques foliaires. A partir du jeu de données LOPEX, constitué d'échantillons d'espèces très variées, le modèle physique de propriétés optiques de feuilles PROSPECT a été amélioré pour prendre en compte les effets des composés biochimiques dans les propriétés optiques des feuilles. Cette amélioration a consisté à estimer les coefficients d'absorption spécifiques des composés biochimiques foliaires. Les caractéristiques d'absorption obtenues, pour chacun des composés, sont bien corrélées avec les bandes d'absorption référencées dans la littérature. Utilisé en mode direct, la précision du modèle est très bonne. Par contre, l'estimation de la biochimie foliaire (protéines, lignine, etc) obtenue par son inversion est très médiocre. Seule celle de la matière sèche totale est précise. Au niveau des feuilles fraîches, nous avons appliqué cette même approche en restreignant la composition foliaire à l'eau et la matière sèche. Utilisé en mode direct, ce modèle simule précisément les propriétés spectrales et en mode indirect, il permet de bonnes estimations de ces deux composés biochimiques. Parallèlement, pour répondre à certaines ambiguïtés observées dans la littérature sur la potentialité de l'approche empirique et pour comparer l'approche analytique et empirique. Nous avons développé un modèle empirique (linéaire) sur les mêmes données de feuilles fraîches. Les résultats contrastent avec ceux des autres auteurs qui utilisent l'approche empirique. Par contre, ils restent cohérents avec ceux de l'approche analytique.

Au niveau satellitaire, nous avons évalué les possibilités d'estimation de la teneur en eau et matière sèche du feuillage à partir de données simulées en utilisant le modèle de propriétés optiques de feuille précédemment ajusté, un modèle de réflectance de sol, un modèle de transfert radiatif dans le couvert et l'atmosphère. Les caractéristiques du signal mesuré (résolutions spectrales et radiométriques) correspondent à celles du futur capteur PRISM de l'ESA. Nous avons ainsi construit une base de données biochimique regroupant des teneurs en eau et matière sèche associées aux spectres de réflectance tels que mesurés par un satellite. Ces données simulées peuvent être considérées comme représentatives de la diversité naturelle des propriétés optiques des sols, de structure de couverts, et d'effets atmosphériques. Nous avons développé ensuite un algorithme empirique d'extraction de l'information biochimique combinant modèles linéaires et neuronaux. Les résultats montrent qu'une dizaine de bandes spectrales suffisent pour fournir de bonnes estimations des teneurs en eau et matière sèche, indépendamment de la nature du sol, de la structure du couvert et des effets atmosphériques. Cependant, il existe une forte sensibilité à la résolution radiométrique ainsi qu'une forte sensibilité à la position des bandes spectrales. Par contre, la résolution spectrale (de 10 à 20 nm) n'apparaît pas limitante.

L'utilisation de la haute résolution spectrale infrarouge au niveau satellitaire semble donc être actuellement limitée à l'estimation de la teneur en eau et en matière sèche intégrée sur l'ensemble du couvert.

Abstract

Understanding bio-geo-chemical cycles in terrestrial ecosystems, therefore the effects of global changes, requires data about the canopy biochemical contents (proteins, lignin, cellulose, etc.). Since these compounds define the spectral signature of canopies, the main objective of this thesis was then to investigate the use of near infrared satellite data (high spectral resolution) to retrieve the canopies biochemical contents.

For this purpose, we therefore have developed and validated analytical or semi-empirical models, based on the analysis of the relationship between the biochemical composition and the corresponding spectral properties of a wide range of type of leaves. We worked at two scales, the leaf one and the satellite one (canopy and atmosphere).

At the leaf level, two approaches were developed, an analytical one (inversion of the leaf optical properties model PROSPECT) and an empirical one (multi-linear regression). Results for both approaches are similar and show that only dry matter and water contents can be robustly retrieved.

At the satellite level, thanks to simulated radiometric data (using leaf, soil, canopy and atmosphere radiative transfer models) transformed to correspond to the PRISM sensor characteristics, we developed a semi-empirical algorithm to retrieve the canopy biochemical composition (water and dry matter) by combining linear and neuronal models. Results indicate that ten wavebands used in models are sufficient to provide good estimations of the water and dry matter contents (g. per unit of canopy surface). However, the accuracy of estimation is sensitive to the radiometric resolution of the sensor, conversely to the spectral resolution.

The use of infrared remote sensing data appears limited to the estimation of water and dry matter content integrated over the whole canopy.