



Simplification de la gestion des modèles NIR dans un réseau multi-instruments et multi-marques: étude de faisabilité

Vincent Larat, Cécile Gady

ADISSEO, AU CŒUR DE LA CHAÎNE ALIMENTAIRE



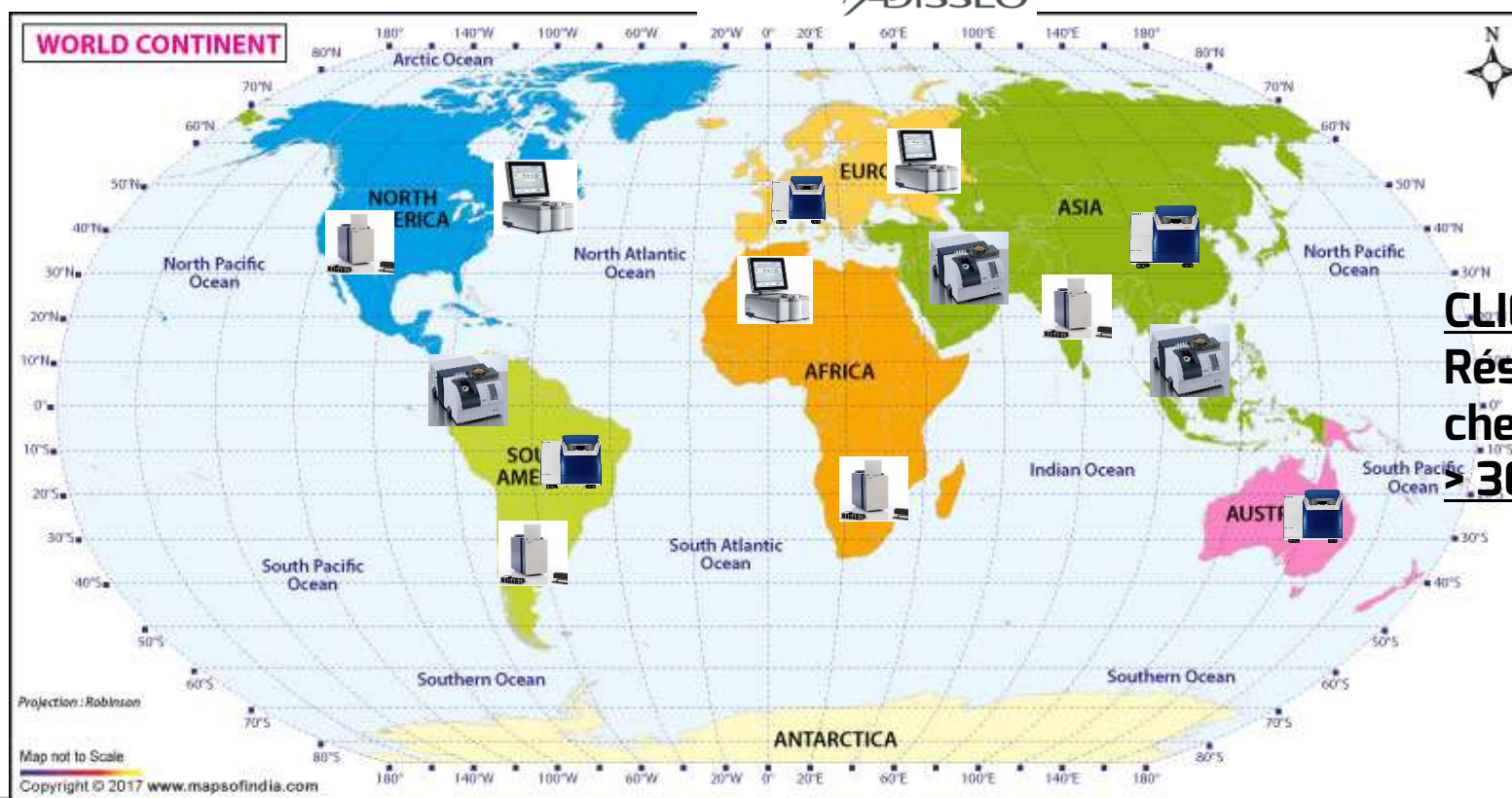
NOS SOLUTIONS & SERVICES



- Réseau Adisseo



ADISSEO – ‘Master instruments’



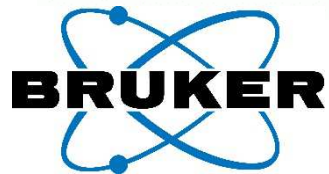
CLIENTS
Réseau d'appareils
chez les clients:
> 300 appareils



- Implications



Jeu d'équations spécifiques pour les instruments FOSS



Jeu d'équations spécifiques pour les instruments Bruker

- Double charge de travail pour développement / mise à jour des équations
- → Possibilité d'avoir un seul jeu d'équations – **modèles uniques** – pour les différents appareils ?
- → Etude à partir de cas concrets pour estimer la faisabilité



- Modèles 'uniques' Mais appareils aux caractéristiques différentes



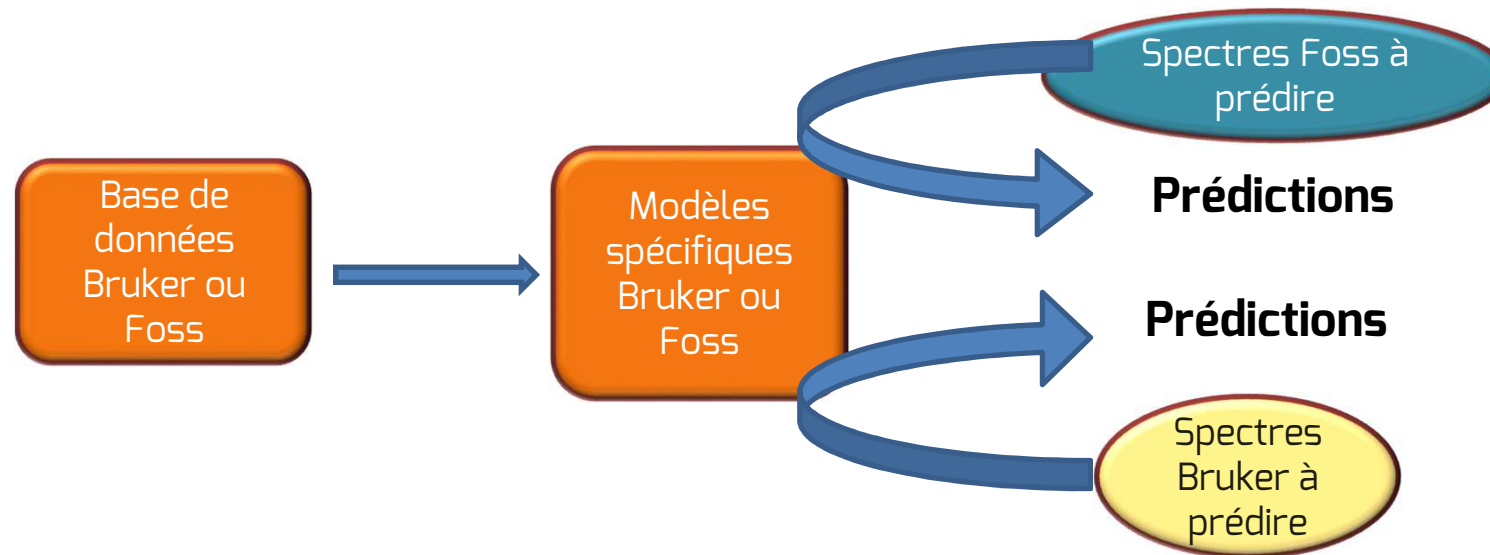
FOSS

	BRUKER	FOSS
Unité	cm-1	nm
Gamme spectrale	Min: 9000 - 4000 cm-1 / Max: 12500 - 3600 cm-1 (Min: 1100 - 2500 nm / Max: 800 - 2775 nm)	1100 - 2500 nm (9090 - 4000 cm-1)
Pas	constant en cm-1 (variable en nm) 7.714 cm-1 ou 3.857 cm-1	constant en nm (variable en cm-1) 2 nm
Nb de points	Variable - Min: 649 - Max: 1284	Constant - 700

- Interpolation des données
 - Interpolation des données Bruker de cm-1 vers nm avec pas de 2nm



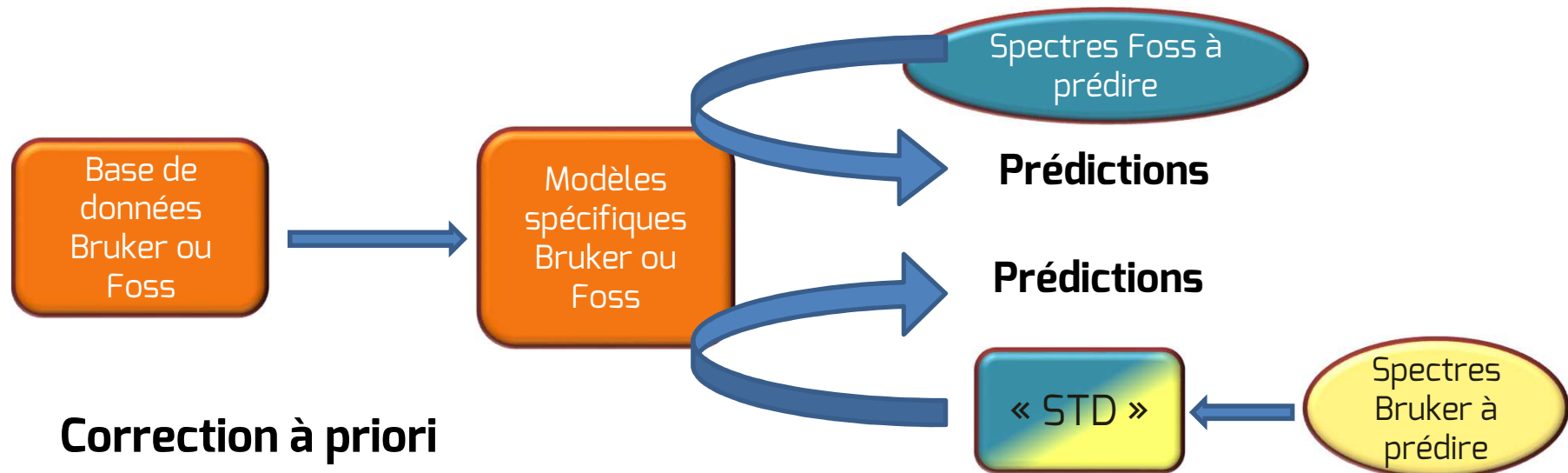
- Stratégie 1 – Modèles spécifiques d'un seul fournisseur
 - Utiliser le jeu de modèles spécifiques d'un fournisseur pour prédire les spectres de l'autre fournisseur



- Avantages
 - Ne nécessiterait pas de redévelopper des modèles, car on utiliserait des modèles déjà existant.



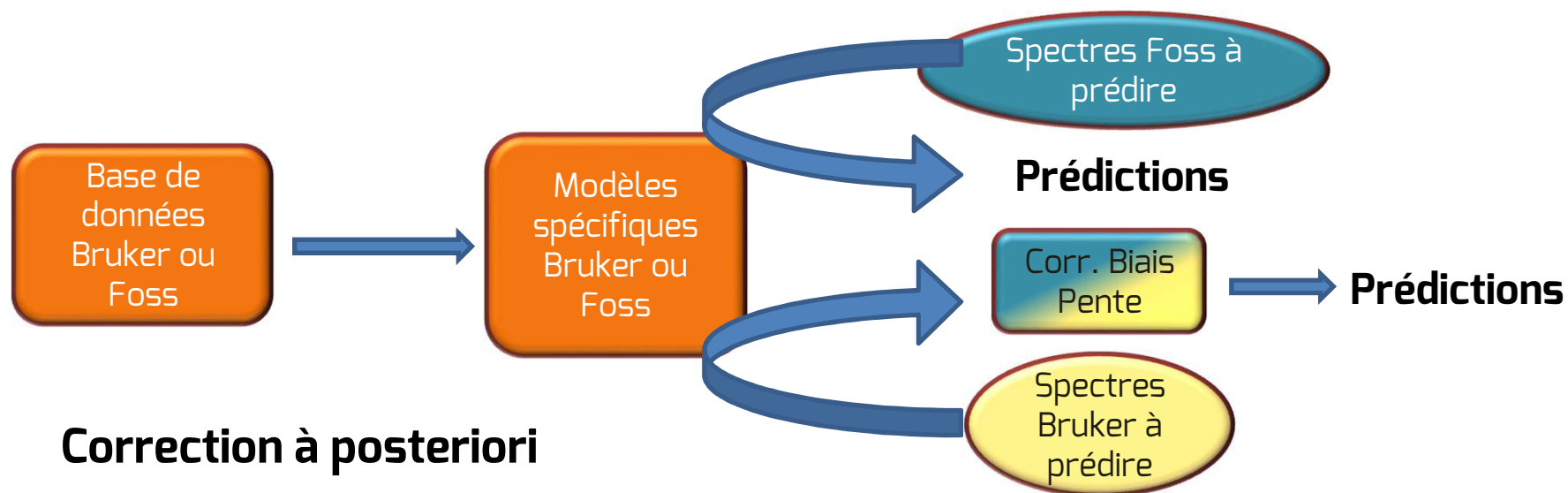
- Stratégie 1 – Modèles spécifiques d'un seul fournisseur
 - Utiliser le jeu de modèles spécifiques d'un fournisseur pour prédire les spectres de l'autre fournisseur



- Avantages
 - Ne nécessiterait pas de redévelopper des modèles, car on utiliserait des modèles déjà existant.



- Stratégie 1 – Modèles spécifiques d'un seul fournisseur
 - Utiliser le jeu de modèles spécifiques d'un fournisseur pour prédire les spectres de l'autre fournisseur

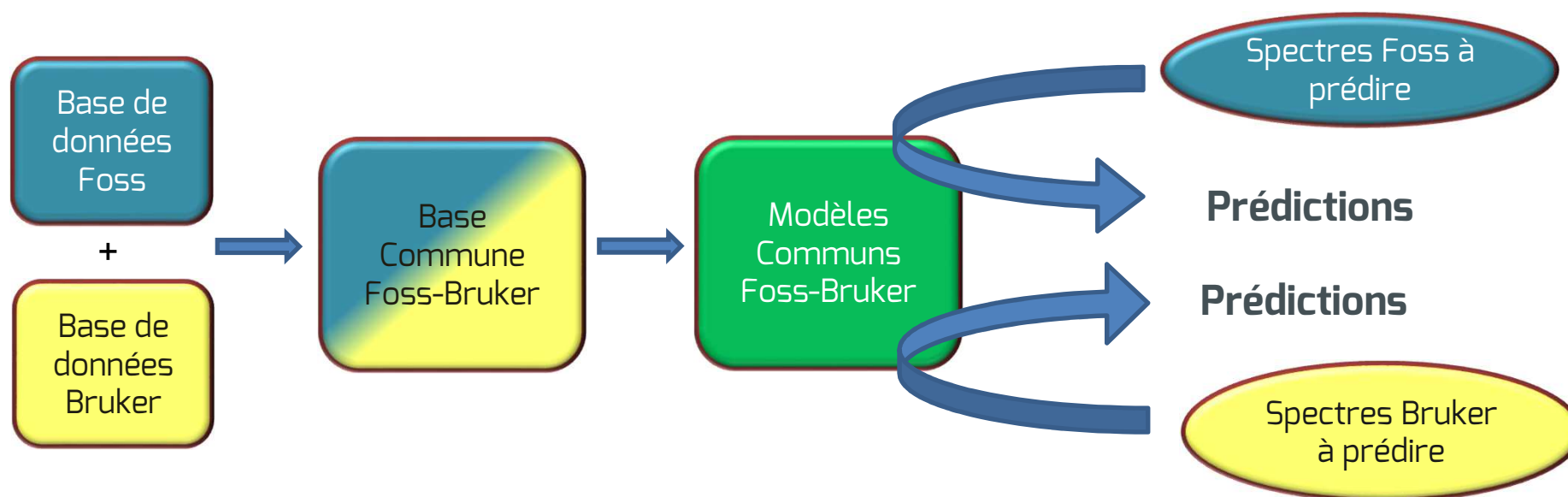


- Avantages
 - Ne nécessiterait pas de redévelopper des modèles, car on utiliserait des modèles déjà existant.



- Stratégie 2 – Modèles communs

- Mettre en commun les bases de données Foss et Bruker et développer des modèles 'communs' permettant de prédire les spectres de chaque fournisseur



- Avantages

- Utiliserait les données Foss ainsi que les données Bruker
 - Pas de Standardisation ou correction biais/pente

- Les deux stratégies sont évaluées simultanément à l'aide de jeux de test
- Les erreurs de prédictions SEP des jeux de test sont calculées:
 - En utilisant les modèles initiaux – modèles Foss et Bruker spécifiques
 - En utilisant les modèles calculés pour chaque stratégie (1 et 2)
- Différentes bases de données / modèles sont testés, répondant à différents cas de figures



- Cas 'Additif' – Bases identiques

- Additif dans blé/soja broyé
- Echantillons identiques



- Cas 'Blé broyé' – Bases non identiques

- Protéines et Matière sèche dans blé broyé
- N sensiblement équivalent entre les 2 bases mais échantillons non identiques



- Cas 'Farines de poisson' – Bases non identiques et déséquilibrées

- Proxinales dans farines de poissons
- N nettement supérieur pour Bruker et échantillons non identiques



- Cas 'Maïs grains' – Bases sur échantillons grains entiers

- Protéines et Matière sèche dans maïs grains entiers
- Echantillons identiques



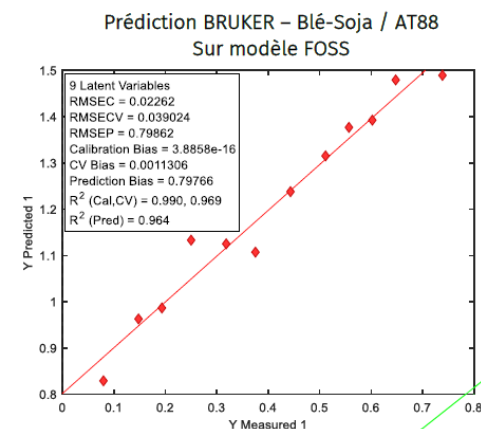
- Cas 'Additif' – Bases identiques
 - Stratégie 1 - Modèles spécifiques d'un fournisseur (FOSS)**

Additif dans matrice blé/soja:

N Cal = 50 éch. Moyenne: 0.36% - Stdev: 0.21%
N Test = 12 éch.

Modèles initiaux:

RMSEP Foss = 0.041 % et RMSEP Bruker = 0.037 %



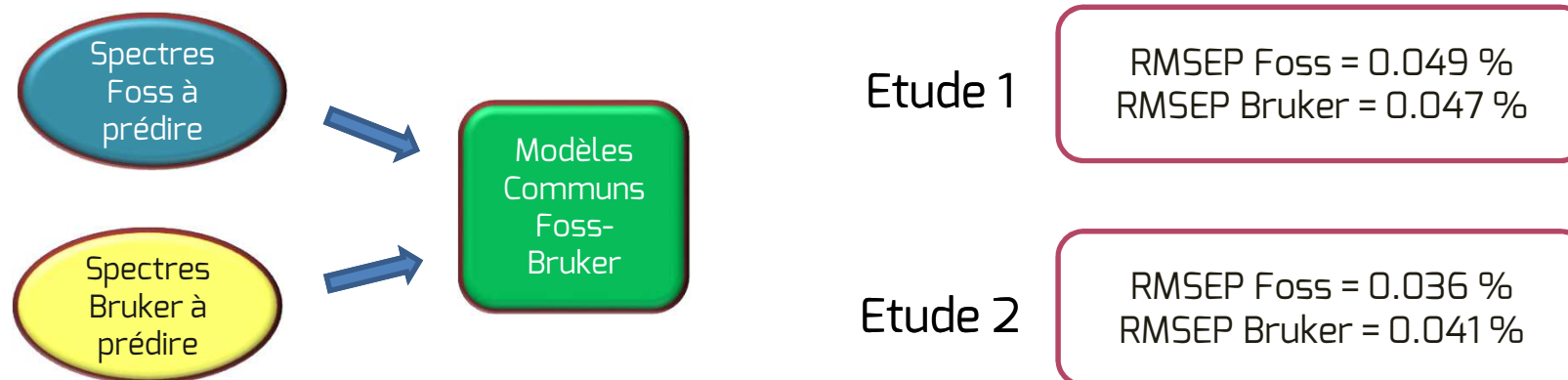
- Cas 'Additif' – Bases identiques
 - **Stratégie 2 - Modèles uniques**

Additif dans matrice blé/soja:

N Cal = 50 éch. Moyenne: 0.36% - Stdev: 0.21%
N Test = 12 éch.

Modèles initiaux:

RMSEP Foss = 0.041 % et RMSEP Bruker = 0.037 %



- Cas « Farines de Poissons » – Bases non identiques et déséquilibrées
 - **Stratégie 2 - Modèles uniques**

CP dans matrice Farine de Poisson:

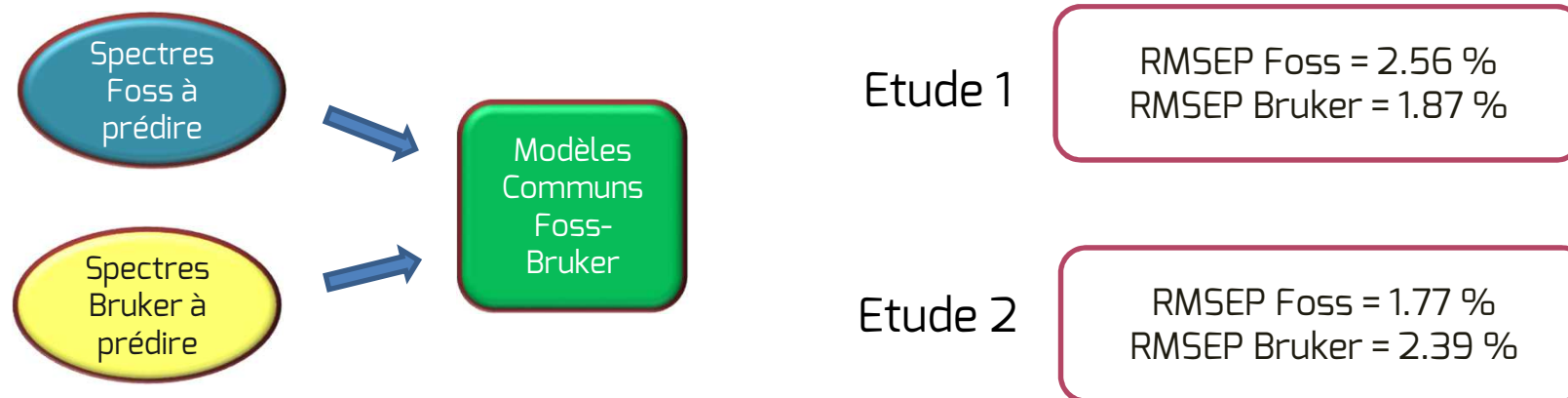
N. Cal Bruker= 907 Moyenne: 64.5% - Stdev: 4.98%

N. Cal Foss= 260 Moyenne: 62.4% - Stdev: 6.79%

N. Test = 13 éch.

Modèles initiaux:

RMSEP Foss = 3.14 % et RMSEP Bruker 1.93 %



Pour Foss, résultats meilleurs en utilisant le modèle commun que sur le modèle spécifique.

- Récapitulatif des différents cas

Cas	Critère	Stratégie 1	Strategie 1 - corr à priori	Strategie 1-corr à posteriori	Stratégie 2 Etude 1	Stratégie 2 Etude 2
Bases identiques	Additif	×	×	×	●	✓
Bases non identiques (blé broyé)	Protéine	×	N/A	N/A	✓	✓
	Mat Sèche	×	N/A	✓	●	✓
Bases très déséquilibrées (farine de poisson)	Protéine	×	N/A	N/A	✓	●
	Mat Sèche	×	N/A	×	✓	✓
	Mat Grasses	×	N/A	N/A	●	●
	Cendres	×	N/A	N/A	×	✓
Bases non broyées (maïs non broyé)	Protéine	×	×	●	●	✓
	Mat Sèche	×	N/A	N/A	✓	✓



RMSEP < 1.1 * RMSEP Référence



RMSEP < 1.25 * RMSEP Référence



RMSEP > 1.25 * RMSEP Référence

Sauf dans un cas donné, la stratégie 2 conduit à des résultats de prédictions proches de ceux obtenus sur les modèles de référence

- L'utilisation de modèles développés à partir des données d'un seul fournisseur ne semble pas être la stratégie la plus pertinente pour prédire les spectres issus d'instruments d'autres fournisseurs, même en effectuant des corrections spectrales (à priori via STD) ou des corrections des prédictions (à posteriori via biais/pente).
- En revanche, les modèles issus de la mise en commun des bases de données spectrales acquises sur des appareils différents donnent des prédictions proches de celles obtenues sur des modèles spécifiques à chaque fournisseur.
 - Nécessite de redévelopper les modèles à partir de bases de données fusionnées
 - Nécessite d'optimiser la conversion de fichiers (interpolation) afin de mettre les données au même format



- Remerciements
 - LENSKEM (T. Signour)
 - GREENTROPISM (E. Chernysheva, C. Mercier, Y. Cote, F. Perez, A. Laborde, E. Machefer, A. Boulanger)
- Avez-vous des questions ?

