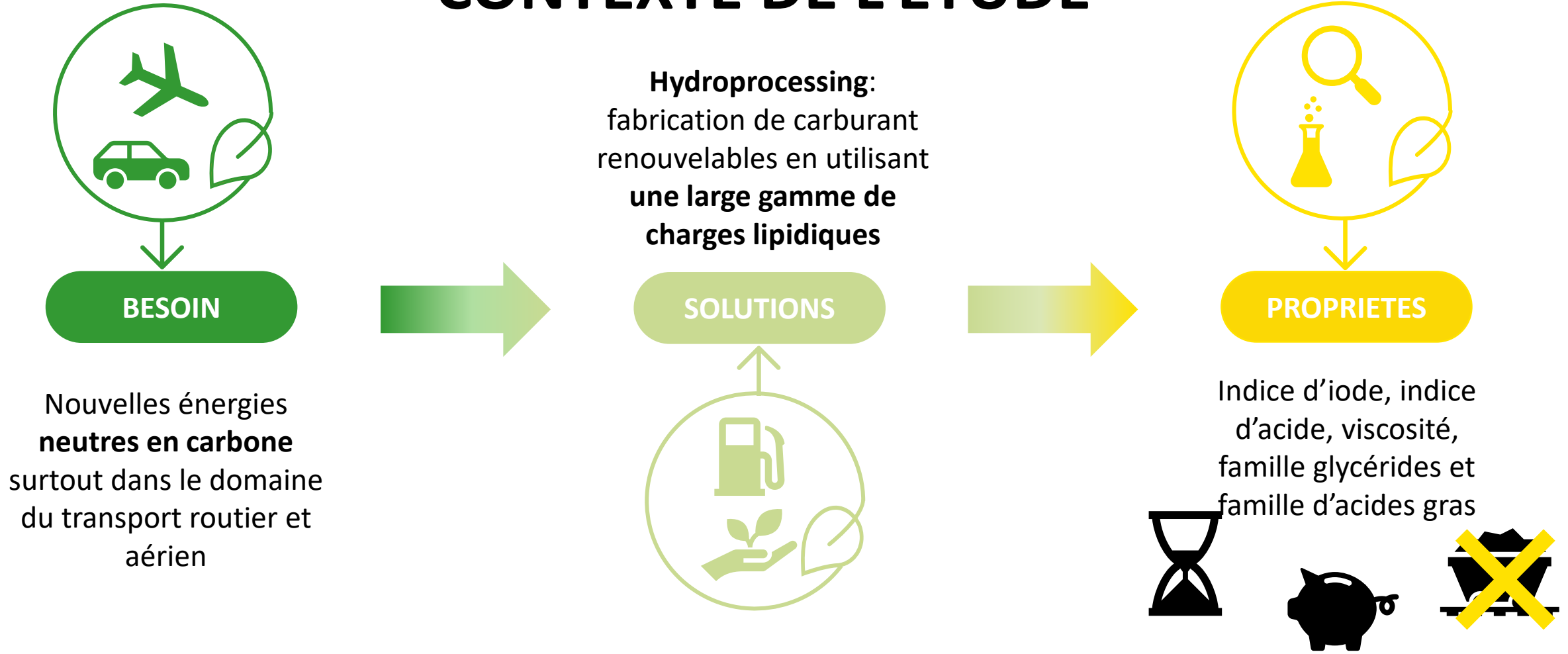


MODELISATION DE PROPRIETES DE CHARGES LIPIDIQUES PAR PIR ET PLS

Présenté par GICQUEL Chloé^{1,2}
LACQUE-NEGRE Marion¹, FERNANDES Joana¹, GONCALVES David¹

¹IFP énergies nouvelles, 69360 Solaize, France
²Ecole Européenne de Chimie, Matériaux et Polymères (ECPM)

CONTEXTE DE L'ÉTUDE



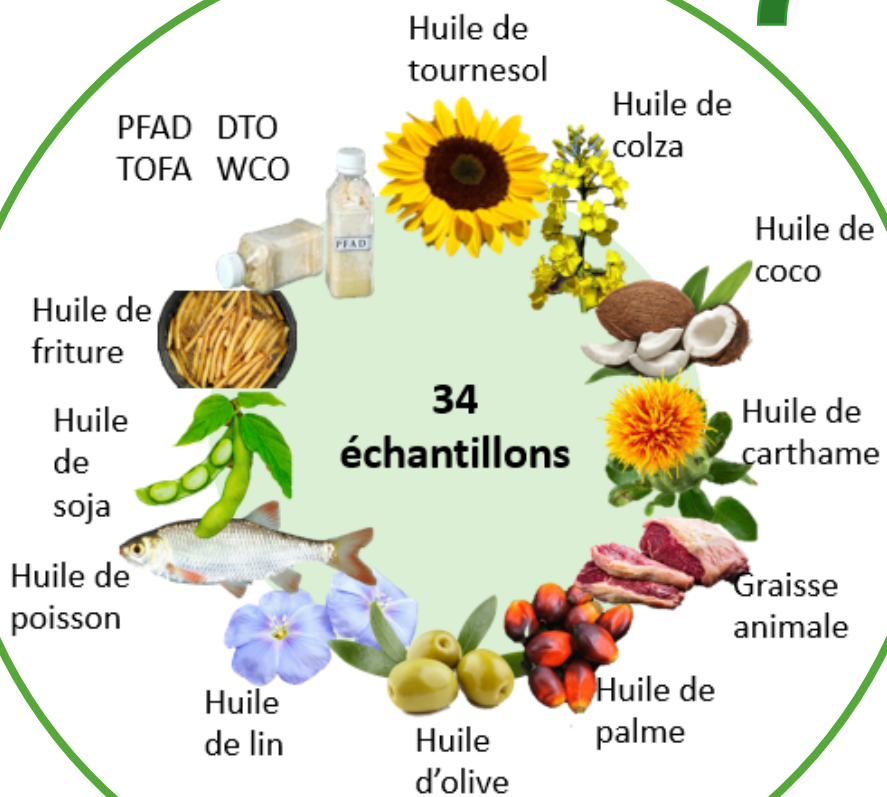
OBJECTIFS

Faire une analyse PIR et obtenir plusieurs propriétés

→ **Indice d'iode** = mesure du nombre d'insaturations dans les lipides

MATÉRIELS

BASE D'ÉCHANTILLONS



Indice d'iode: 1.8 à 185 g/100g



Spectromètre ABB
avec vialholder

T=70°C

BASE DE DONNEES

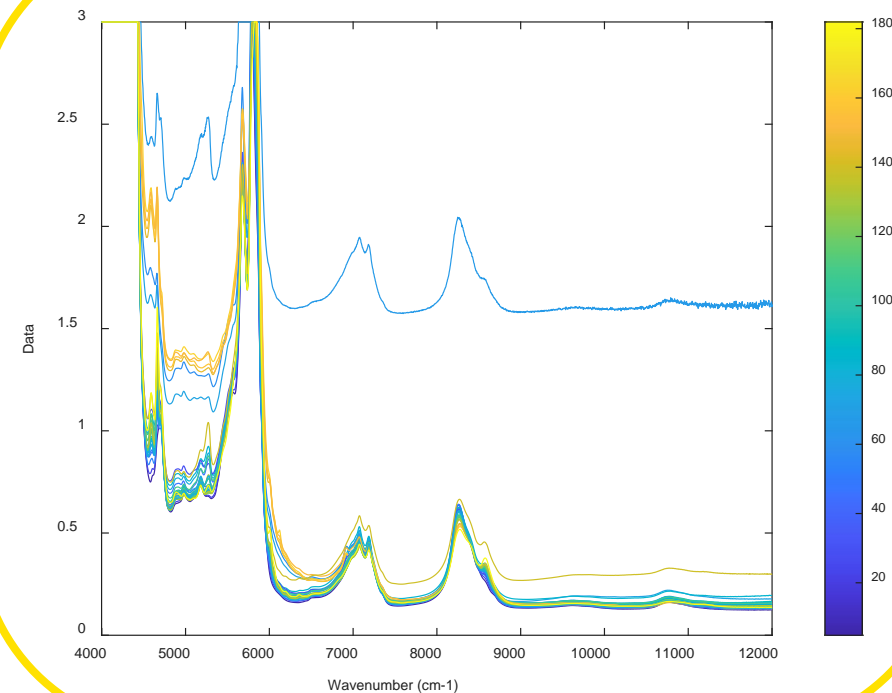
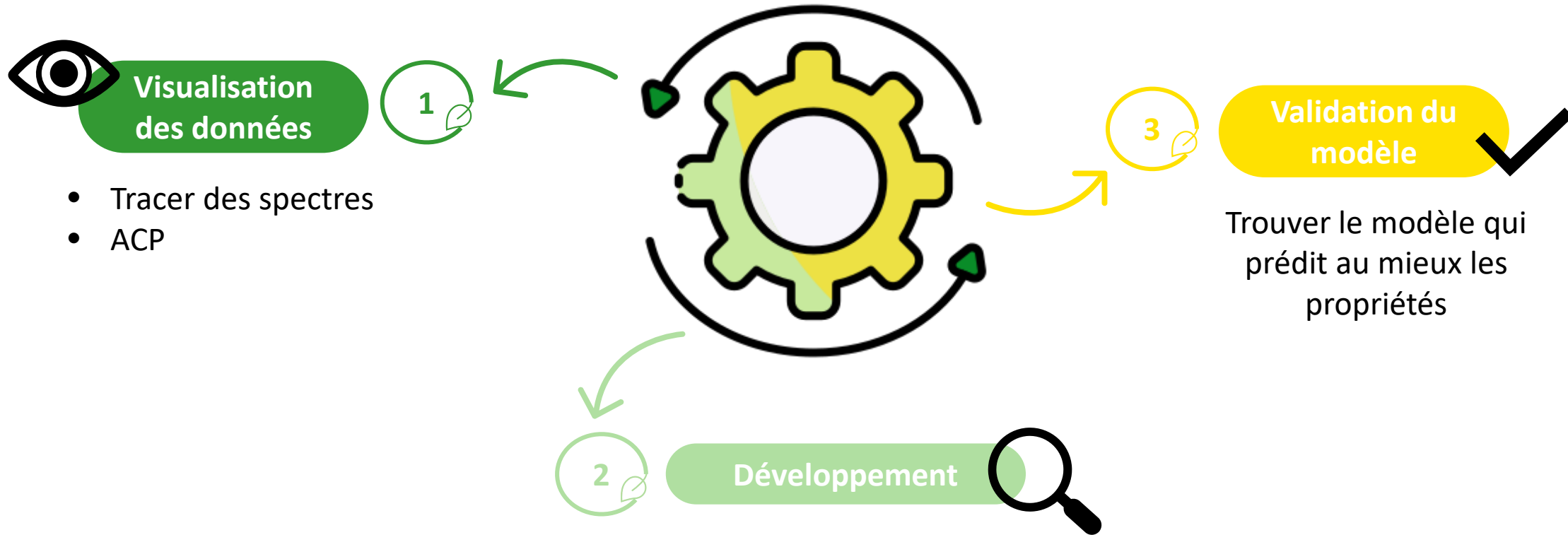


Fig 1. Spectres des différentes charges colorés en fonction de leur indice d'iode. Plus le spectre est jaune plus l'indice est élevé.

MÉTHODOLOGIE



- Base de calibration/validation: 26 spectres en cal et 8 spectres en val
- Cross-validation
- Pré-traitement: AWSL-B, SNV, MSC, dérivée ?



RÉSULTATS

RESULTATS OBTENUS EN VALIDATION

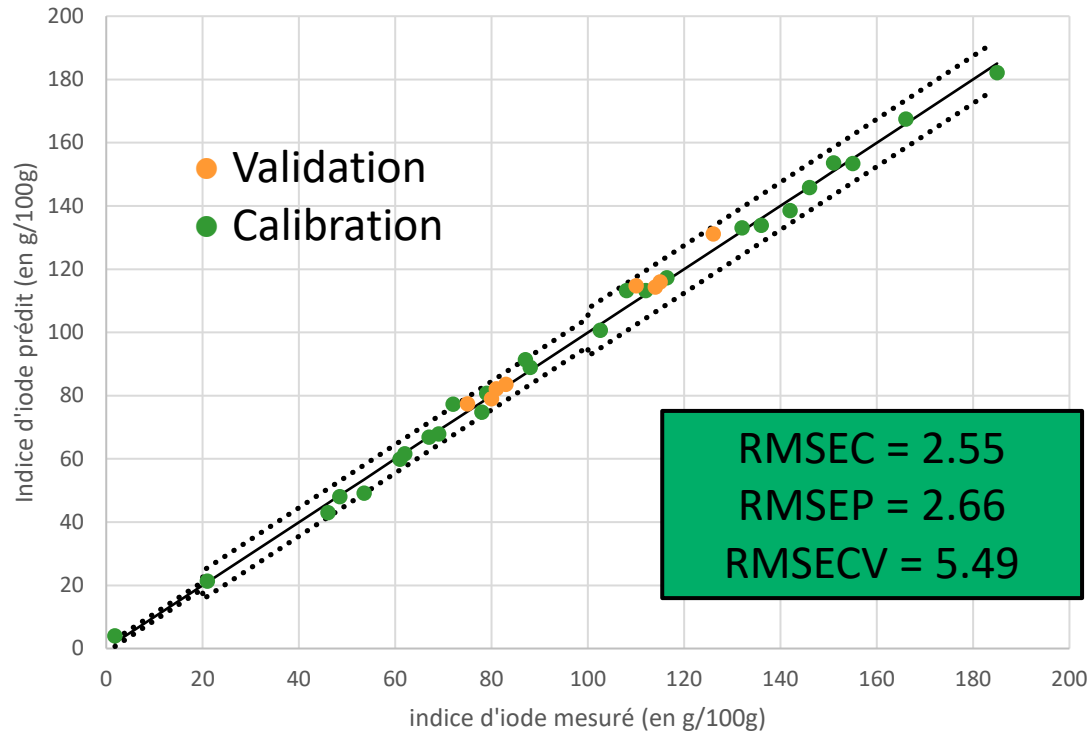


Fig 2. Droite de parité obtenue après correction de ligne de base AWLS suivie d'un centrage par la moyenne. En pointillés l'incertitude de la méthode de référence.



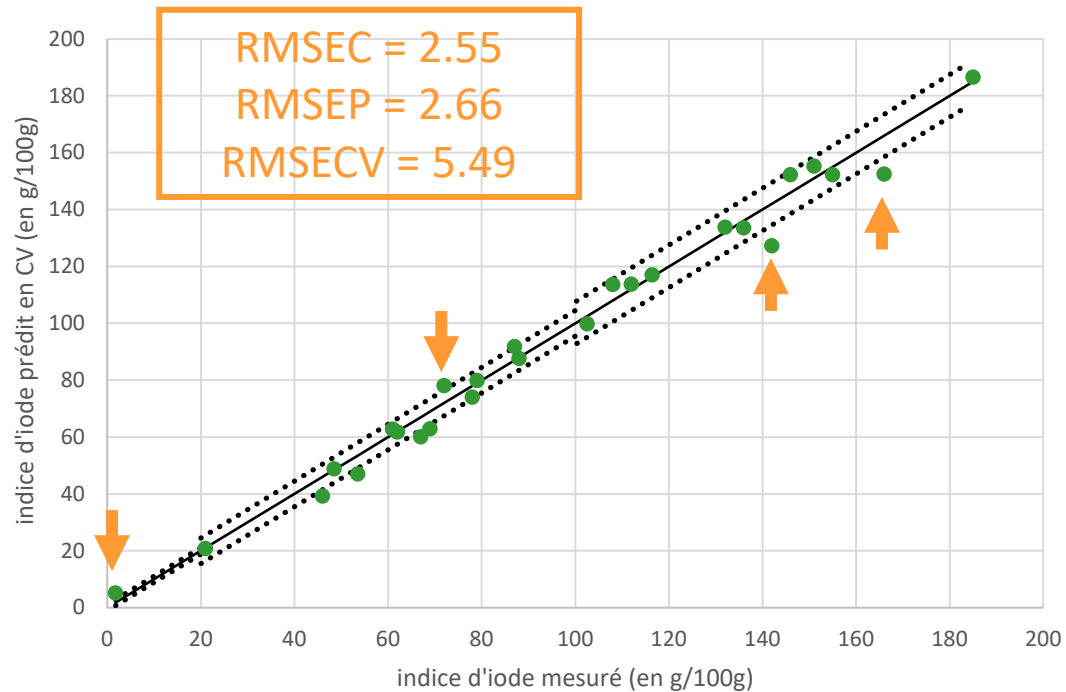
Tous les points de prédiction se trouvent entre les courbes en pointillés qui représentent les incertitudes sur la méthode de référence*



Modèle PLS validé

RÉSULTATS

RESULTATS OBTENUS EN CROSS-VALIDATION



La cross-validation est à améliorer



La sélection de variables est-elle une solution ?

Fig 3. Droite de parité obtenue en cross-validation. En pointillés l'incertitude de la méthode de référence.

RÉSULTATS

APPORT DE LA SÉLECTION DE VARIABLES



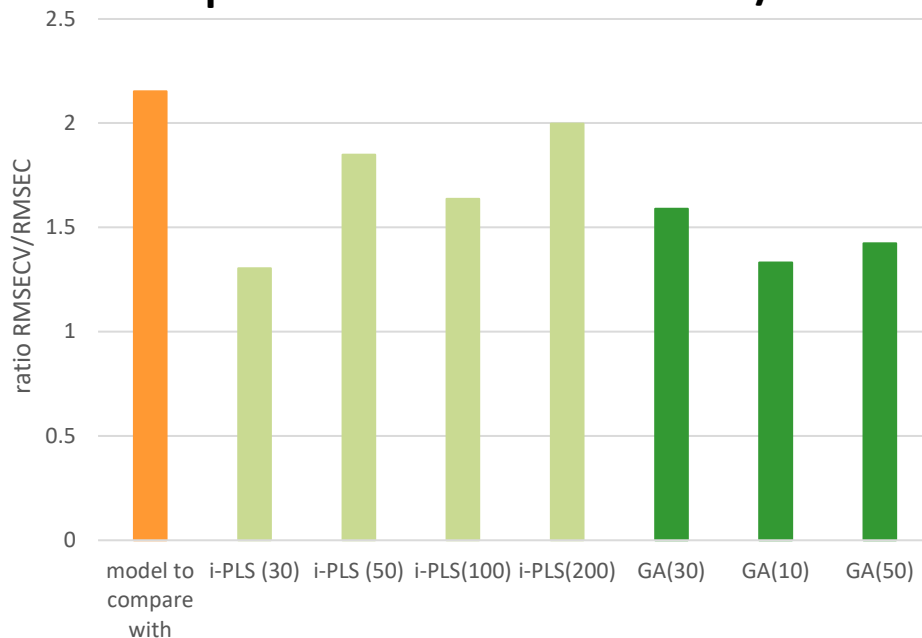
OBJECTIFS

- Améliorer la cross-validation
- Comprendre notre modèle



- Test de 2 méthodes de sélection de variables:
- **i-PLS** (intervalle: 30, 50, 100 et 200)
 - **algorithme génétique** (fenêtre: 10, 30 et 50)

Comparaison des ratios RMSECV/RMSEC



Tous les ratios sont inférieurs à celui du modèle précédent
→ la cross-validation est meilleure

Fig 4. Histogramme du ratio RMSECV/RMSEC. Chaque bâton représente une sélection de variables différentes.

RÉSULTATS

APPORT DE LA SÉLECTION DE VARIABLES



La sélection de variables est-elle adaptée à notre base de données? Est-ce que les modèles sur-paramètrent ?

Comparaison des différences entre RMSEC et RMSEP

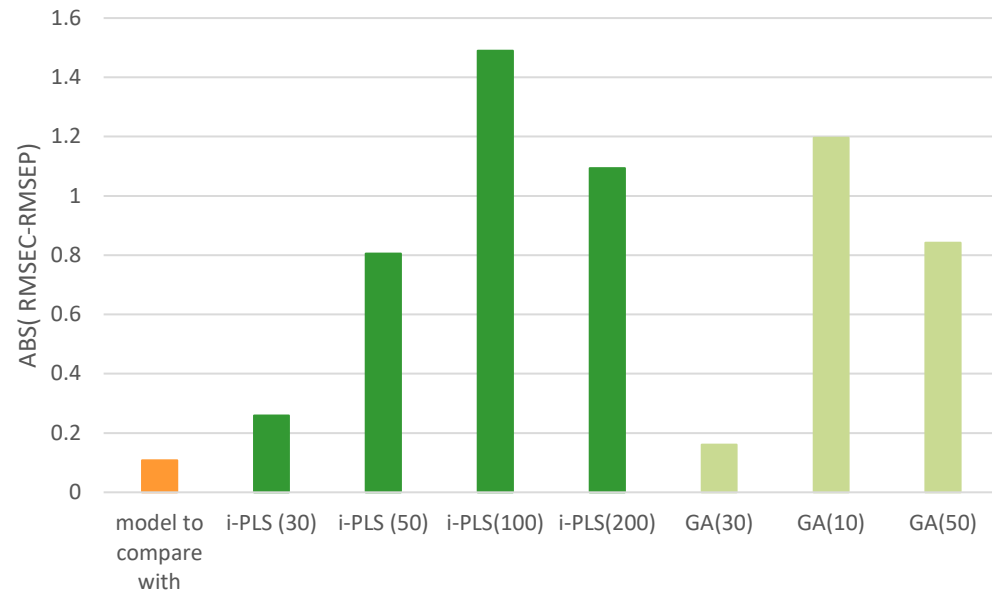


Fig 5. Histogramme de la valeur absolue de la différence entre RMSEC et RMSEP. Chaque bâton représente une sélection de variables différente.

Les différences sont systématiquement supérieures à celle du premier modèle

→ Avec la sélection de variables il y a une tendance à overfitter
→ Manque de robustesse dans le temps

RÉSULTATS

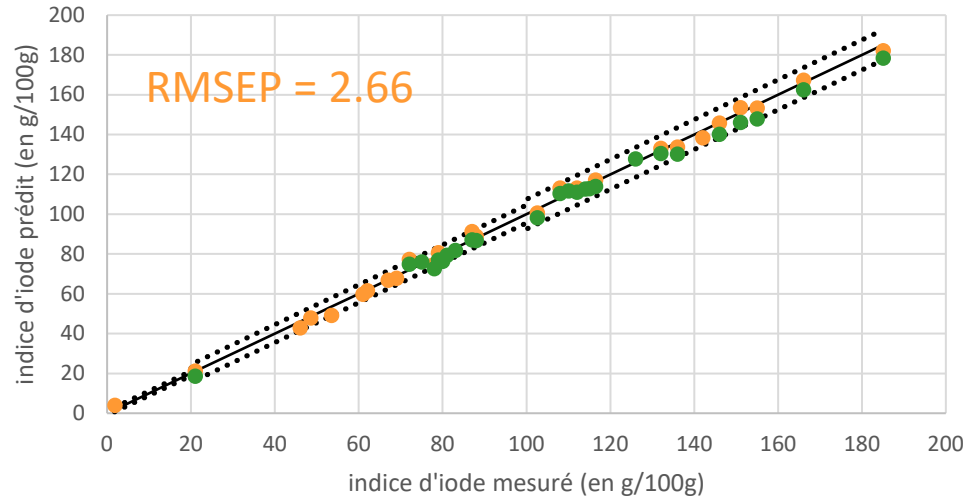
ROBUSTESSE DU MODÈLE – IMPACT DE LA TEMPÉRATURE



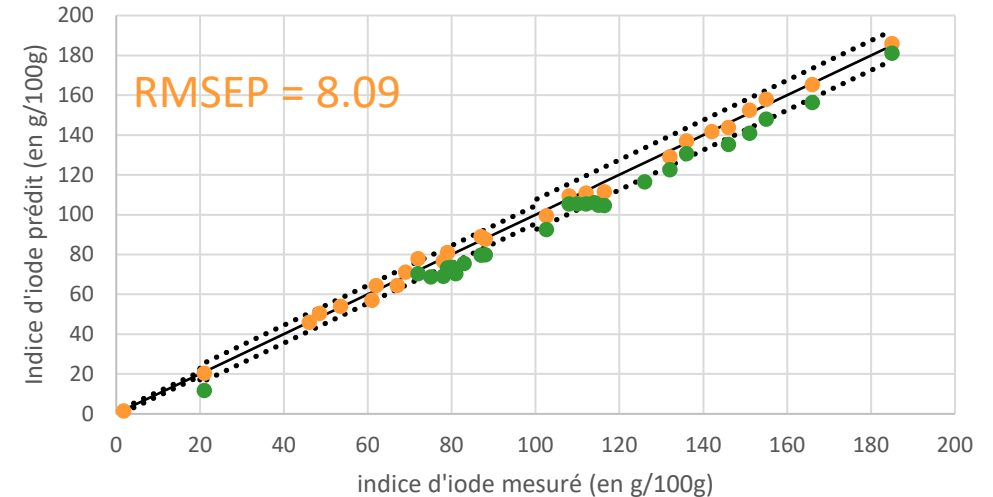
Nos modèles sont-ils robustes ?

- Validation (spectres à 40°C)
- Calibration (spectres à 70°C)

Sans sélection de variables



Avec sélection de variables

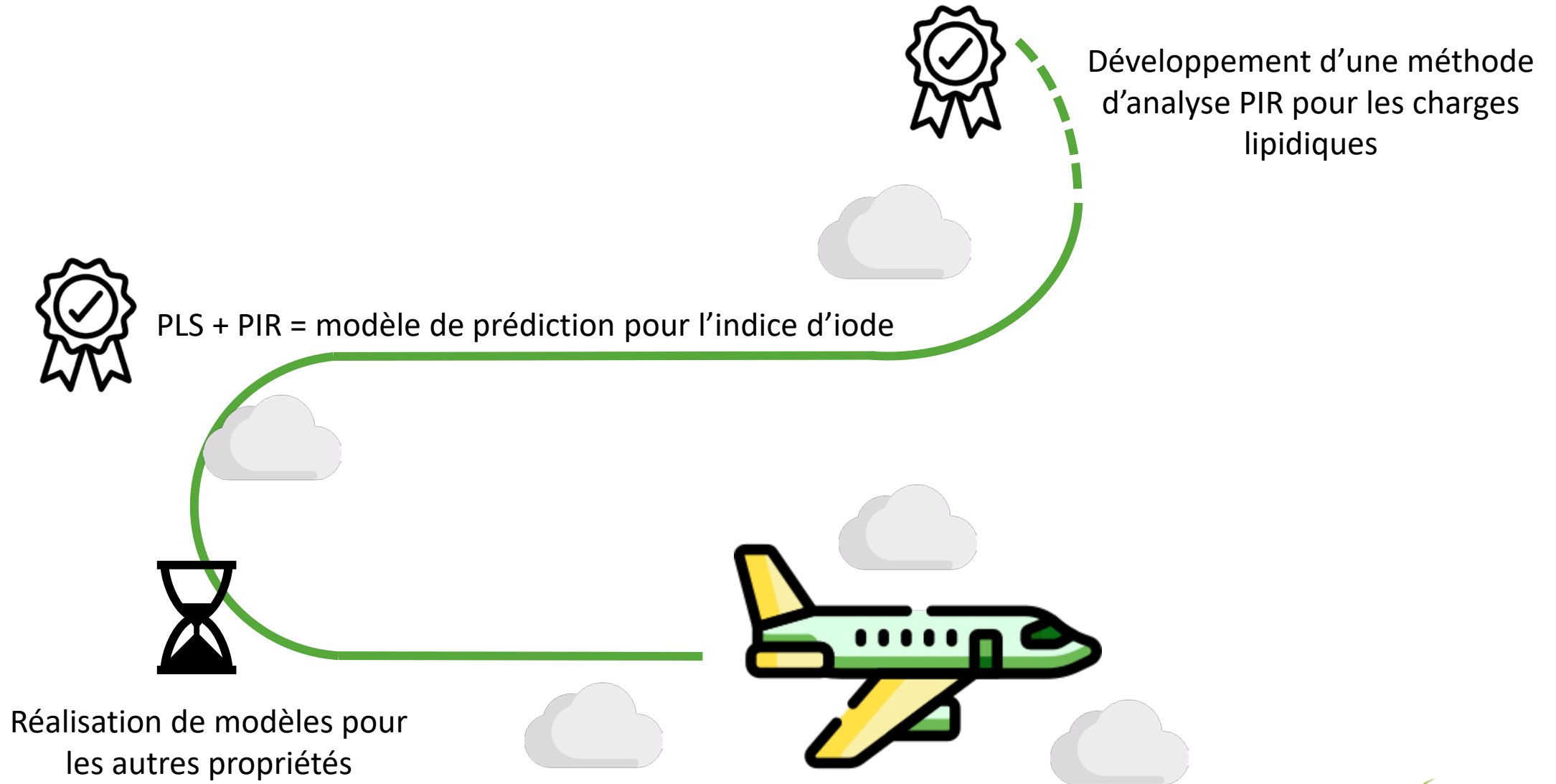


Le changement de température pendant l'acquisition des spectres a un impact



Modèle sans sélection de variables plus robuste

CONCLUSION - PERSPECTIVES



Merci !!

Avez-vous des questions ?

