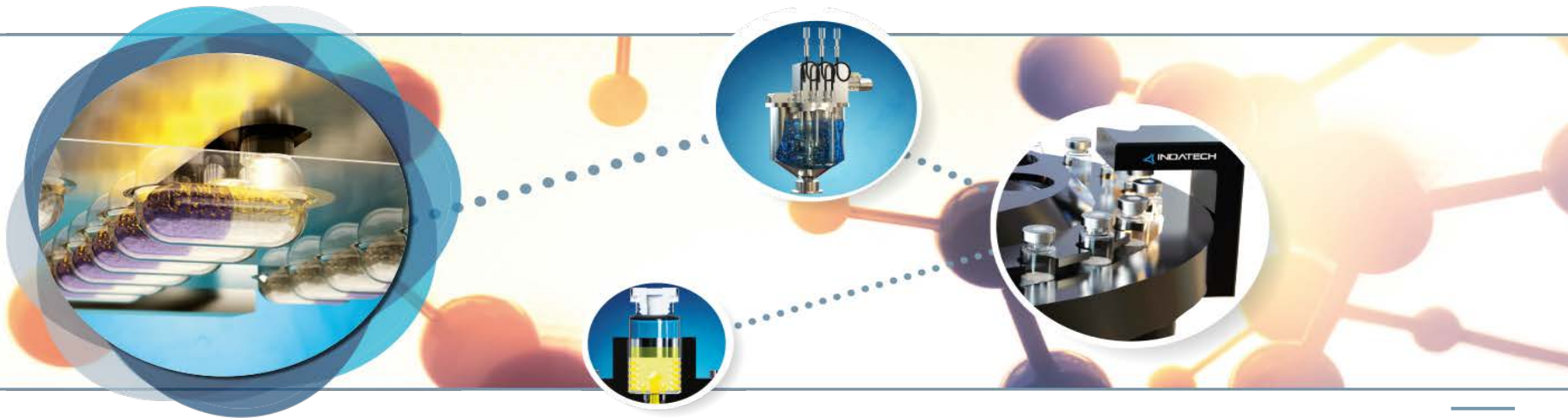
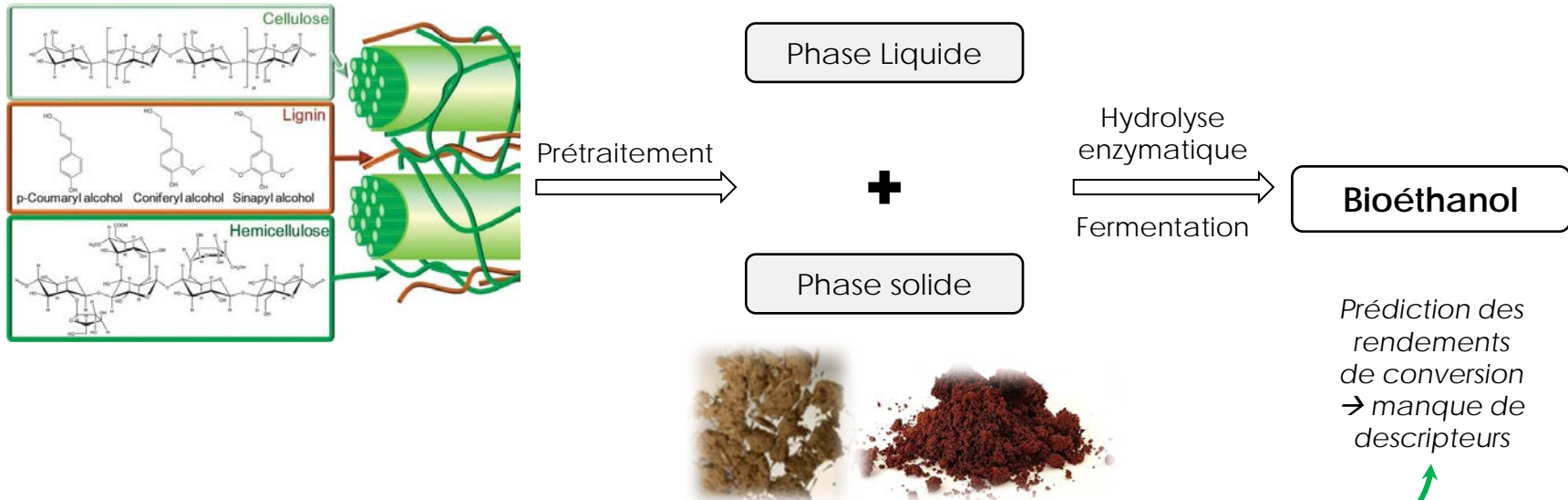


Evaluation de la réactivité enzymatique sur des échantillons de biomasse par imagerie proche-infrarouge



Ilyes BICHARI, Arnaud BONET, Indatech
Marion LACOUÉ-NEGRE, David GONCALVES, IFPEN

Conversion de la biomasse lignocellulosique en bioéthanol



Caractérisation physico-chimique de la biomasse prétraitée : RMN, Infrarouge, Porosimétrie, MALDI, FLIM...

Prédiction des rendements de conversion → manque de descripteurs

Y a-t-il un lien entre les propriétés physico-chimiques du solide et la réactivité en hydrolyse enzymatique?

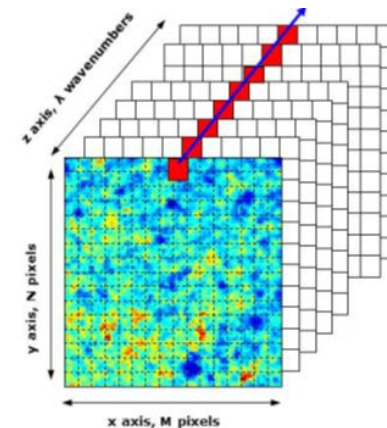
- L'objectif principal de cette étude est de classer des pastilles de biomasse en fonction de leur réactivité à l'hydrolyse. En effet, il semble que certaines structures et la présence d'inhibiteurs puissent entraver le processus d'hydrolyse et limiter la production de bioéthanol
- L'imagerie hyperspectrale dans le NIR présente l'avantage de réaliser des mesures simultanées sur plusieurs échantillons tout en permettant la création d'une cartographie détaillée de chaque échantillon mesuré

- Système unique d'imagerie hyperspectrale dans le proche infrarouge (PIR) à l'échelle du laboratoire qui mesure les échantillons par le dessous
- Combinaison d'informations spectrales et spatiales des échantillons via une technologie d'imagerie *pushbroom*
- Une solution idéale pour :
 - la caractérisation des mélanges de poudres
 - garantir l'absence de contamination
 - évaluer la teneur et la distribution d'humidité résiduelle
 - détecter les aspects physiques tels que les défauts des lyocakes



Rappel technique: l'imagerie hyperspectrale

- L'imagerie hyperspectrale proche infrarouge (IC-PIR) est une association entre l'imagerie numérique et la spectroscopie optique.
- Une combinaison d'**informations spectrales** (i.e. chimiques) de la région proche infrarouge du spectre électromagnétique avec les **informations spatiales** d'imagerie est ainsi obtenue.
- La technologie IC-PIR permet de collecter une image de l'ensemble de vos échantillons dans laquelle **un spectre est acquis pour chaque pixel** dans cette image. Cela permet non seulement d'identifier les composés chimiques dans les échantillons mais aussi d'inspecter leur distribution et leur (in)homogénéité.
- L'HypeReal fonctionne **comme une photocopieuse**, où l'échantillon est placé dans un tiroir et la caméra à balayage linéaire se déplace sous l'échantillon afin d'obtenir une image complète de vos échantillons en quelques secondes.



- Description des échantillons reçus
 - Biomasse en poudre et en pastilles (issues de la compaction des poudres) de couleur marron
 - Origine variée: paille de blé, peuplier, pin maritime, maïs...



- Tableau des échantillons en pastilles avec leur réactivité enzymatique (HE):
 - Définition de 2 classes de réactivité: faible et standard

Sample	HE
SP0036L	Faible
SP0037L	Faible
SP0043L	Faible
SP0052L	Faible
SP0060L	Faible
SP0061L	Faible
SP0062L	Faible
SP0068L	Faible
SP0069L	Faible

Sample	HE
SP0021L	Standard
SP0022L	Standard
SP0031L	Standard
SP0033L	Standard
SP0034L	Standard
SP0047L	Standard
SP0048L	Standard
SP0049L	Standard

Sample	HE
SP0050L	Standard
SP0051L	Standard
SP0053L	Standard
SP0054L	Standard
SP0055L	Standard
SP0056L	Standard
SP0057L	Standard
SP0058L	Standard

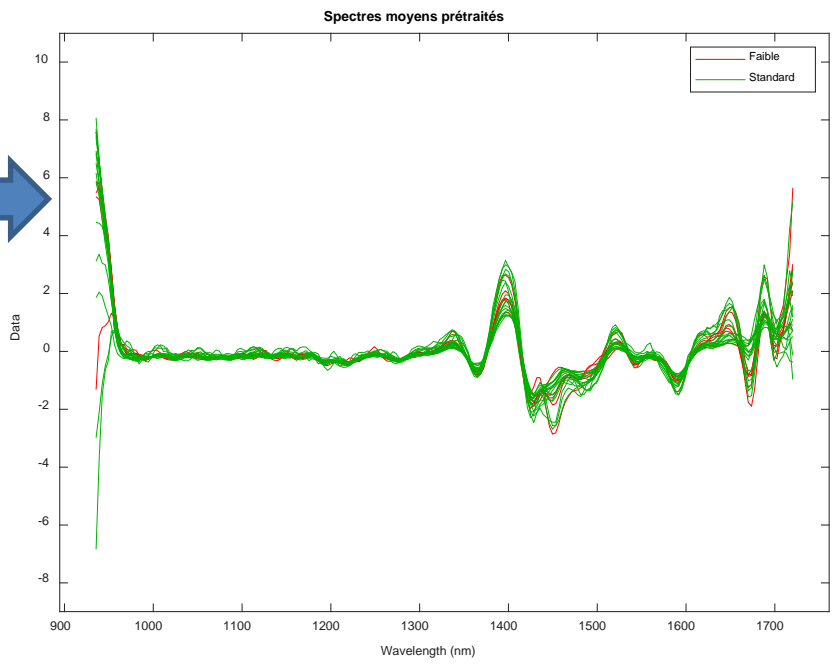
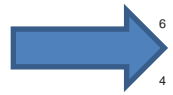
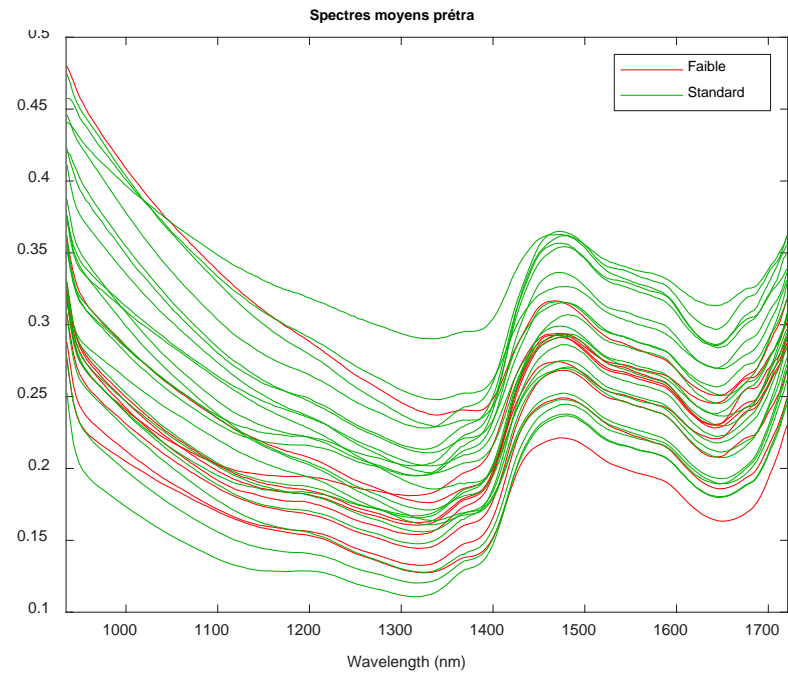
Sample	HE
SP0059L	Standard
SP0063L	Standard
SP0064L	Standard
SP0065L	Standard
SP0066L	Standard
SP0067L	Standard

- HypeReal: imagerie hyperspectrale dans le proche-infrarouge
- Gamme spectrale: 935 – 1720 nm
- Les échantillons sont mesurés par-dessous en utilisant une plaque en Quartz pour les pastilles et poudres
- Temps d'intégration : 9000 ms avec un fps (frame per second) de 25/s
- Référence : spectralon de réflectance 99%



Résultats (1) : Prétraitements

- Prétraitement : 2nd dérivée (w=9 ; p=2) + normalisation SNV



Résultats (2) : PLS-DA_Données de calibration et de validation

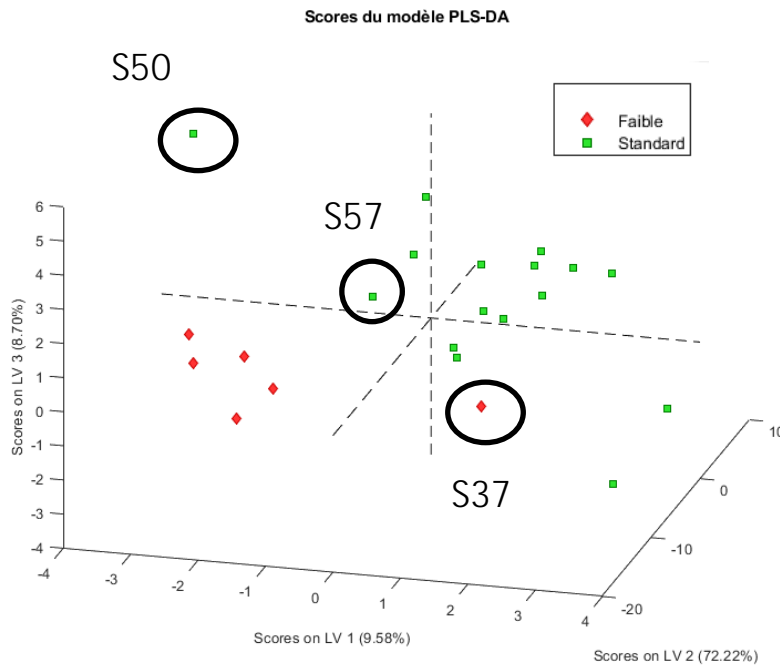
Set de calibration (22)

S36	Faible	Epicéa
S37	Faible	Paille
S43	Faible	Pin maritime
S60	Faible	Peuplier
S62	Faible	Peuplier
S69	Faible	Bouleau
S22	Standard	Paille de riz
S31	Standard	Paille de maïs
S34	Standard	Bambou
S48	Standard	Paille
S49	Standard	Paille
S50	Standard	Peuplier
S51	Standard	Peuplier
S53	Standard	Paille
S54	Standard	Paille
S55	Standard	Paille
S57	Standard	Peuplier
S59	Standard	Peuplier
S63	Standard	Paille
S64	Standard	Paille
S65	Standard	Paille
S66	Standard	Paille

Set de validation (9)

S52	Faible	Paille	
S61	Faible	Peuplier	
S68	Faible	Bois mix	
S21	Standard	Peuplier	(Modérée)
S33	Standard	Canne à sucre	
S47	Standard	Paille	
S56	Standard	Paille	
S58	Standard	Peuplier	(Modérée)
S67	Standard	Miscanthus	(Modérée)

- Modèle à 3 LVs
- Toute la gamme spectrale



Confusion Table (CV):

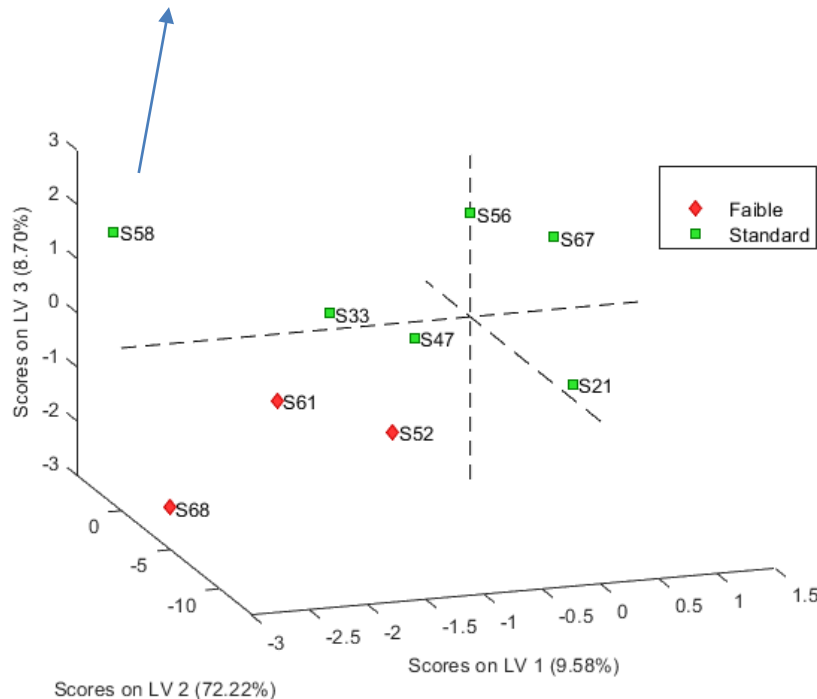
	Actual Class	
	Faible	Standard
Predicted as Faible	4	1
Predicted as Standard	2	15
Predicted as Unassigned	0	0

S37 : Paille - Faible

S50 : Peuplier - **Modérée**

S57 : Peuplier - **Modérée**

Peuplier - Modérée



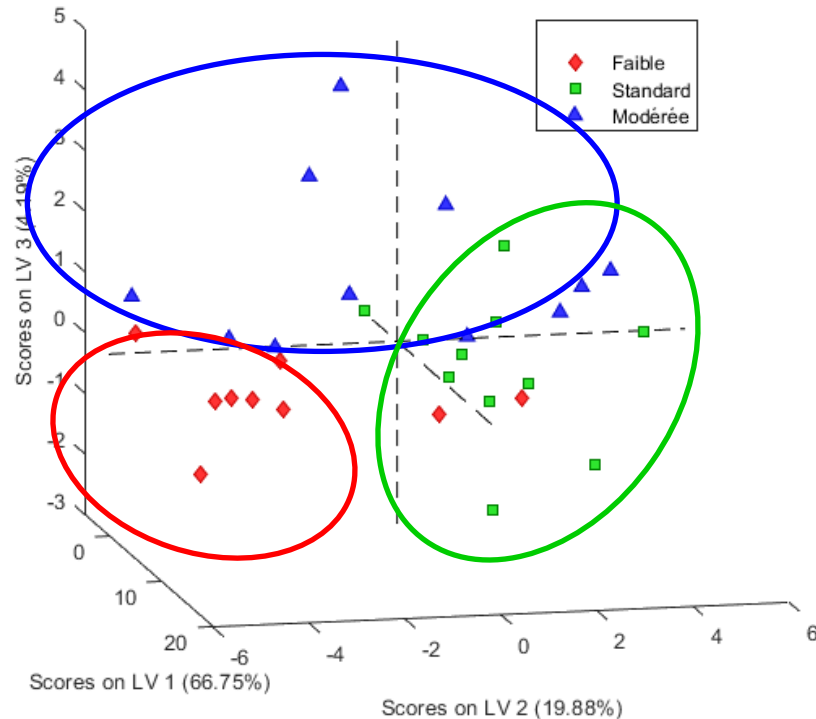
Confusion Table:

	Actual Class	
	Faible	Standard
Predicted as Faible	3	0
Predicted as Standard	0	6
Predicted as Unassigned	0	0

➤ Tout le set de validation a été bien prédit par le modèle

Résultats (5) : PLS-DA-3 classes

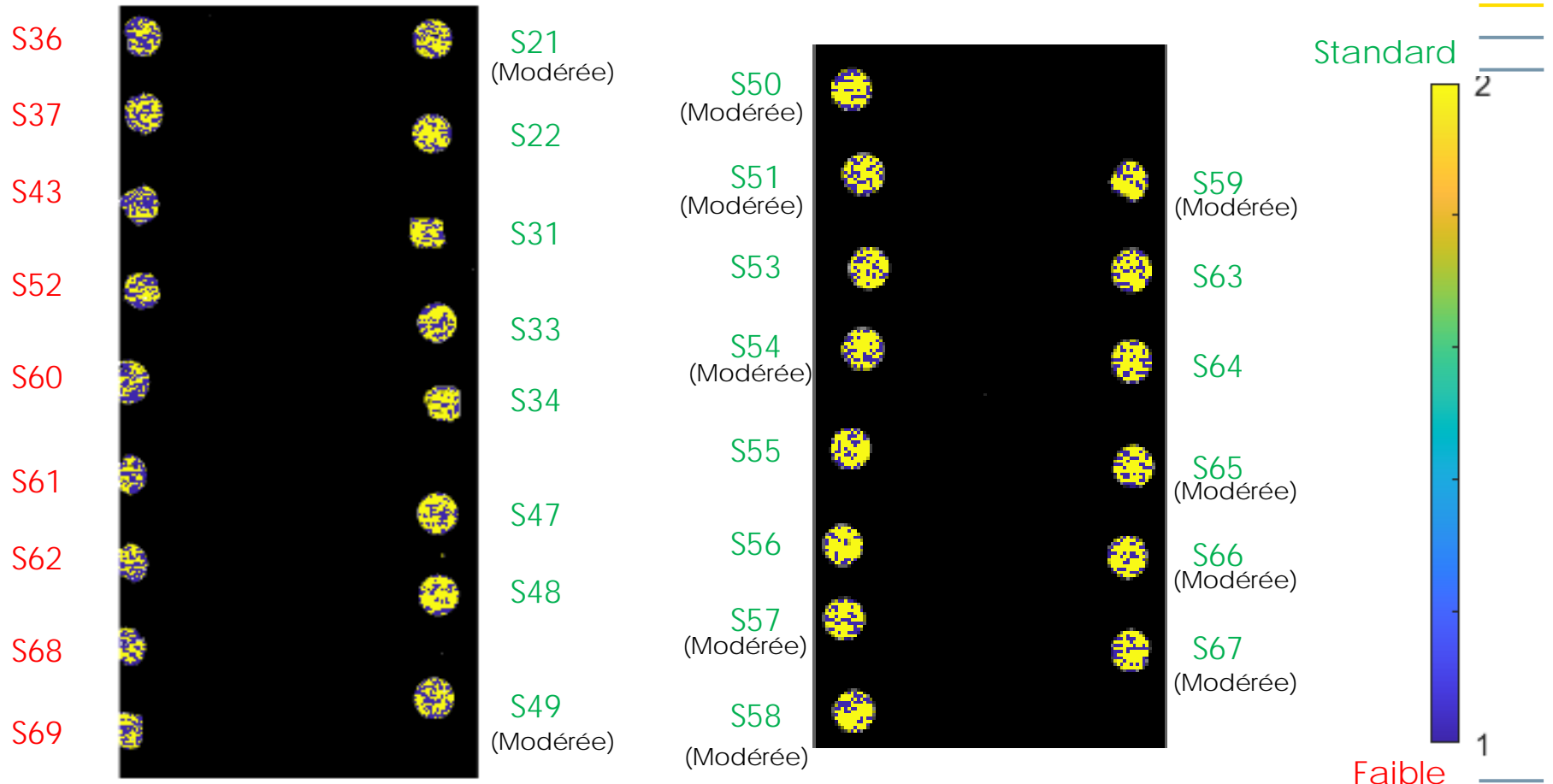
- Modèle à 4 LVs
- Toute la gamme spectrale



➤ Discriminer les trois classes est réalisable, mais cela demeure assez difficile en raison de la présence d'échantillons modérés qui peuvent être standards ou faible

Résultats (6) : PLS-DA-Prédiction des images

- Le set de calibration et de validation ont été fusionnés pour créer un modèle PLS-DA final



Résultats (6) : PLS-DA-Prédiction des images

- La prédiction de l'ensemble de l'image permet de différencier les échantillons standards des échantillons modérés. Plus il y a de pixels prédits en bleu (faible HE), plus la transition de standard à modéré est marquée
- L'imagerie fournit des informations supplémentaires sur les endroits où se trouvent de potentiels descripteurs de réactivité
- L'imagerie permet de mettre en avant facilement l'hétérogénéité des échantillons

Conclusions

- L'étude a démontré la capacité de l'imagerie hyperspectrale à différencier la réactivité enzymatique entre divers échantillons de biomasse
- Un modèle PLS-DA a été développé et validé, permettant ainsi de classifier les échantillons en deux catégories : "Standard" et "Faible" en termes de réactivité en hydrolyse enzymatique
- Grâce à l'imagerie hyperspectrale, il est également possible d'identifier plus aisément les échantillons classifiés comme présentant une réactivité "Modérée"
- Le logiciel Breeze de l'HypeReal permet d'intégrer des modèles chimiométriques (classification/quantification) afin de réaliser des prédictions at-line de la biomasse