

# Spectroscopie Proche InfraRouge « low-cost » et analyse de données multivariées pour prédire le taux de rétention de produits de préservation dans le bois

## Contexte de l'étude

- **Contexte** : Actuellement, il n'y a pas d'appareil qui permet de quantifier de manière fiable et rapide les taux de rétention de produits de préservation dans le bois
- **Objectif** : Le but de ce travail est de démontrer qu'un spectromètre proche infrarouge « low-cost » (SCiO, Consumer Physics), couplé avec de l'analyse de données multivariées, peut être utilisé pour quantifier le taux de rétention de produits de préservation dans le bois
- **Méthodologie** : Cinq produits de préservation du bois commerciaux ont été étudiés. Différents modèles d'étalonnage ont été créés à l'aide d'une régression des moindres carrés partiels (PLS)

## Matériels

- **Préparation des échantillons**
  - Pin maritime (*Pinus Pinaster*)
  - Produits de préservation : composition organique (3V3, GRI, XYL), ou inorganique (MAR, VER)
- **Acquisition spectrale en Proche InfraRouge**
  - SCiO (Consumer Physics, Israël) [Fig. 1]
  - Gamme spectrale : 740 à 1070 nm
  - Réflexion diffuse



Fig. 1 : Photographie du spectromètre SCiO molecular sensor (Consumer Physics, Israël)

## Méthodes

- **Préparation des échantillons**
  - Pin maritime (*Pinus Pinaster*) : ~ 50 x ~ 25 x ~ 8 mm (L x l x h)
  - 5 produits de préservations (3V3, GRI, MAR, VER, XYL) [Tab. 1]
  - 5 concentrations différentes (10, 30, 50, 70, 100 %) [Fig. 2]

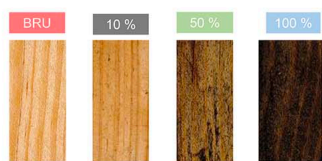


Fig. 2 : Exemple d'imprégnation avec le produit GRI à 3 concentrations différentes (10, 50, et 100 %) et comparaison avec BRU

Tab. 1 : Caractéristiques des produits de préservation du bois utilisés

Produits de préservation du bois	Molécules actives dans le produit de préservation
GRI	3,38 % de propiconazole, et 1,25 % de perméthrine
MAR	16,3 % de carbonate de cuivre, 3,5 % de bis-(N-Cyclohexyldiazaniumdioxy)-cuivre, et 5,0 % d'acide borique
VER	
3V3	0,645 % perméthrine
XYL	0,1 % cyperméthrine, 0,15 % propiconazole, 0,05 % tébuconazole, et 0,05 % IPBC

- **Acquisition spectrale en Proche InfraRouge**
  - Acquisition de 6 spectres sur chaque face radiale de l'échantillon
  - Spectre représentatif = médiane des 12 spectres

- **Analyse de données multivariées**
  - **Preprocessing** : prétraitements appliqués aux spectres pour les corriger (SNV, DT2, SNV-DT2, MSC, SG1, SG2)
  - DUPLEX : sélection des données pour calibrer et valider le modèle
  - Modèle mathématique : régression Partial Least Squares (PLS)
  - Calculs fait sur Matlab 2019a (Mathworks Inc., USA)

## Partenaires/Financiers



## Références

Zahri, S. (2007), « Analyse quantitative et qualitative des substances chimiques responsables des durabilités naturelle et conférée des bois de chêne européen (*Quercus robur* et *Quercus petraea*) et de pin maritime (*Pinus pinaster*) par la spectroscopie dans le proche infrarouge » (<http://www.theses.fr/2007PAUU3024>)

## Résultats et discussion

- **Description des spectres acquis en proche infrarouge [Fig. 3]**
  - BRU, 3V3 et XYL : 972 nm pour les motifs « méthyl », « méthylène » ; 942-955 nm, 969-980 nm, et 985-1006 nm pour les motifs « alcool »
  - GRI, MAR, VER : motifs spectraux semblent masqués en comparaison avec les spectres de BRU
    - Proviens de la composition des produits de préservations inorganiques (MAR, VER)
    - Proviens de la couleur sombre de ces mêmes produits (GRI, MAR, VER)

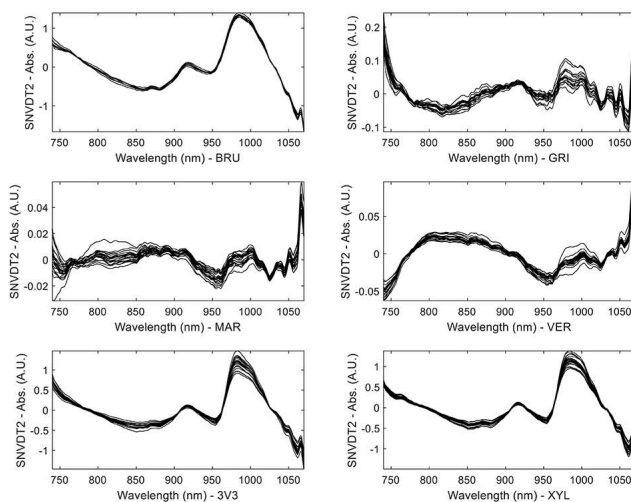


Fig. 3 : Spectres du bois brut (BRU), et des bois imprégnés avec différents produits d'imprégnation (GRI, MAR, VER, 3V3 et XYL). Le prétraitement appliqué sur ces spectres est une combinaison de deux prétraitements « SNV + DT2 ». Ces prétraitements permettent de centrer et normaliser les spectres, en plus de corriger leur ligne de base.

- **Performance du modèle de régression PLS [Tab. 2]**
  - Le **Preprocessing** permet de corriger les spectres et améliorer significativement les performances des modèles
  - Les valeurs modélisées ( $y_{Modélisé}$ ) sont très homogènes quand elles sont sélectionnées par DUPLEX
  - Les coefficients de détermination sont assez élevées ( $R_x^2 > 0,8$ ) => Bonne linéarité entre «  $y_x$  prédit » et «  $y_x$  observé »
  - Les erreurs quadratiques moyennes ( $RMSEX$ ) sont relativement faibles en comparaison avec les valeurs modélisées ( $y_{Modélisé}$ )
  - La RPD permettent de connaître la pertinence du modèle pour des applications (GRI > 3V3 > MAR > VER > XYL)
  - Il en découle que certains modèles peuvent être utilisés avec de très bonnes performances quantitatives (pour par exemple, du **process control**)

Tab. 2 : Statistiques des modèles pour l'étalonnage des différents taux de rétention

	Preprocessing	LVs	$y_{Modélisé}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$R_{cv}^2$	$R_{val}^2$	RMSECV (kg/m <sup>3</sup> )	RMSEP (kg/m <sup>3</sup> )	RPD
GRI	SG1	5	1,23 – 19,75	0,93	0,96	1,53	1,06	3,72
MAR	DT2	8	13,75 – 110,44	0,90	0,94	10,53	7,51	3,09
VER	SG1	6	13,90 – 73,10	0,90	0,92	6,73	4,63	2,45
3V3	SNV	6	0,15 – 2,44	0,91	0,84	0,19	0,26	3,39
XYL	SG1	7	0,08 – 1,10	0,74	0,90	0,17	0,10	1,97

**Preprocessing** indique le prétraitement sélectionné pour améliorer les performances du modèle ; LVs est le nombre de variables latentes utilisées dans le modèle de régression PLS ;  $y_{Modélisé}$  représente l'étendu des taux de rétention modélisé ;  $R_x^2$  est le coefficient de détermination calculé entre les valeurs des taux de rétention observés et prédites par le modèle ;  $RMSEX$  représente les erreurs quadratiques moyennes ; RPD représente la robustesse et la pertinence du modèle

## Conclusion et perspectives

- **Objectif** atteint grâce à l'analyse de données multivariées
- Certains modèles peuvent être utilisés avec de très bonnes performances quantitatives (pour par exemple, du **process control** - avec RPD > 3,5)
- Ces résultats sont encourageants, et le prochain objectif sera de comparer les performances du SCiO avec un appareil de pailleuse qui servira de référence