République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE DE MEDEA
Faculté de technologie
Département de Génie des Procédés et Environnement

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

En vue de l'obtention du Diplôme de Master en Génie des Procédés

Option : Pollution Chimique et Gestion Environnementale

Thème

Modélisation de la rétention des composés organique par les membranes d'osmose inverse et nanofiltration en utilisant les réseaux de neurones multiples (RNM).

Réalisé par :

- **Mlle.** HAMDANI Ahlam
- **Mlle.** ZEKHMI Faiza

Dirigé par :
Dr. KHAOUANE Latifa

Co-dirigé :
Dr. AMMI Yamina

Promotion : 2016/2017

REMERCIEMENT

On remercie ALLAH le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

*Ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu voir le jour sans l'aide et l'encadrement de Dr KHAOUANE Latifa et Dr AMMI Yamina**,** on les remercie pour la qualité de leurs encadrement exceptionnel, pour leurs patiences, leurs rigueurs et leurs disponibilités durant notre préparation de ce mémoire.*

Nous tenons également à remercier messieurs les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre soutenance

.

Nos remerciements s'adressent également à tous nos professeurs pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Nos profonds remerciements vont également à toutes les personnes qui nous ont aidés et soutenue de prés ou de loin.

Ahlam & faiza

Dédicace

A l'aide de ALLAH le tout puissant, qui trace le chemin de ma vie j'ai pu

arriver à réaliser ce modeste travail que je dédie :

Aux êtres les plus chers a mon cœur ,ma mère MASSOUDA et mon père

ABD ELKADER qui ont toujours veillé sur moi, et m'ont

toujours soutenu que ALLAH les protège

A mes sœurs :Naima,Monira.

A mon frère : Said

A mes cousins et cousines

A tous mes amis ainsi qu'à tous mes camarades de "master"

Ahlam

إهداء

إلى من أحمل اسمه بافتخار "**أبي العزيز**" رحمة الله عليه.

إلى من كان دعاؤها سر نجاحي "**أمي الغالية**".

إلى من زرعت في الأمل والإرادة

و كانت لي أختا و أما **أختي**" **ذهبية**".

إلى من كانوا لي سندا وعونا في حياتي **إخوتي**: **الأخضر– قدور– سعيد– حمزة و زوجاتهم**.

إلى توأم روحي **أختي**" **هدى**".

إلي خطيبي " **يوسف**".

إلى **براعم** البيت "مرام– سمية– ميساء – ياسمين– خديجة – محمد عبد القادر" .

إلى كل **صديقاتي** وأخص بالذكر: أحلام– فريدة– حنان.

نشكر الله عز وجل على توفيقه لنا في إتمام هذا العمل.

فـايـزة

الملخص

نمذجة تصريف الجزيئات العضوية بواسطة التناصح العكسي والترشيح الدقيق جدا باستعمال الشبكات العصبية الاصطناعيةالمجمعة.

الغرض من العمل الحالي هو التحقيق الشبكات العصبية المجمعة (RNM) في نمذجة عمليات الرفض المشحونة وغير المشحونة للمركبات العضوية عن طريق الترشيح النانوي والتناضح العكسي واستخدمت المركبات العضوية التي تم جمعها من المقالات العلمية لبناء نموذج (RNM) . حيث تحتوي مجموعة البيانات (278 نقطة بيانات), (23مركب عضوي) باستخدام تقنية التمهيد لتشكيل مجموعات بيانات تدريبية مختلفة لكل تدريب مجموعة، يتم بناء نموذج الشبكة العصبية الواحدة (RNI)، والتحقق من صحتها، واختبارها. ثم يتم الجمع بين النواتج المتوقعة التي تم الحصول عليها من نماذج (RNI) المتقدمة معا عن طريق المتوسط . ثم يتم الجمع بين النواتج المتوقعة التي تم الحصول عليها من نماذج (RNI)المتقدمة معا عن طريق المتوسط.الجيد تم التوصل إلى اتفاق بين الرفض المتوقع والتجريبي لنموذج (RNM) (وكان معامل مجموعة بيانات الاختبار0.9819 =R).

ا لمقارنة بين الشبكات العصبية المجمعة (RNM)، الشبكة العصبية الواحدة (RNS) كشفت تفوق نموذج (RNM) حيث جذر متوسط مربع الخطا لمجموعة بيانات الاختبار5.9043% ل(RNM) ، و 6.294% ل(RNS) .

الكلمات المفتاحية:نمذجة،الجزيئات العضوية،التناضح العكسي،الترشيح الدقيق جدا،الشبكات العصبية الاصطناعية المجمعة

Résumé

Modélisation de la rétention des composés organique par les membranes d'osmose inverse et nanofiltration on utilisant les réseaux de neurones multiples (RNM).

Le but de ce travail est d'utiliser les réseaux neuronaux multiples (RNM) dans la modélisation des rejets des composés organique au cours des processus de nanofiltration et d'osmose inverse. Une base de données totale de 278 rejets et 23 composés organiques ont été recueillis de la littérature pour construire le modèle multiple (RNM). La base d'apprentissage (223 points de données) est ré-échantillonnée à l'aide d'une technique de bootsrap pour former différents ensembles de données de formation. Pour chaque base, un modèle individuell RNI est construit, et testé. Les résultats obtenus à partir des modèles RNI développés sont ensuite combinés par une moyenne simple. Un très bon accord entre les rejets prédits et expérimentaux pour le modèle RNM a été obtenu (le coefficient de corrélation pour l'ensemble de données de test était de 0.9819). La comparaison entre le RNM, le réseau neuronal simple (RNS) a révélé la supériorité du modèle RNM. La racine de l'erreur quadratique moyenne était de 5.9043% pour la RNM, 6.294% pour le RNS pour la base de test.

Mots clés : Modèlisation, composé organique, osmose inverse, nanofiltration, réseaux de neurones multiple.

Abstract : Modeling the Rejection of organic compound by reverse osmoses and nanofiltration membrane using bootstrap aggregated neural networks (BANN).

The purpose of this work is to use of bootstrap aggregated neural networks (BANN) in the modeling of releases of charged and uncharged organic compounds during the processes of nanofiltration and reverse osmosis A total data base of 278 releases and 23 organic compounds were collected in the literature to construct the bootstrap aggregated neural networks (BANN) The learning database (223 data points) is resampled using a bootsrap technique to form different sets of training data. For each base, an individual (INN) model is constructed, trained and tested. The predicted results obtained from the developed (INN) models are then combined by a simple average A very good agreement between the predicted and experimental releases for the RNM model was obtained (the correlation coefficient for the test data set was 0.9819). The comparison between the (BANN), The simple neural network (SNN) revealed the superiority of the (BANN) model. The root of the mean squared error was 5.9043% for the (BANN), 6.294% for the (SNN) for the test base.

Key Word : Modeling, organic compound, reverse osmoses, nanofiltration, membrane, bootstrap ,aggregated neural networks (BANN).

Abréviations i
Nomenclature et symboles iii
Liste des tableaux v
Liste des figures vi

Introduction générale 1

Chapitre I. membranes de séparations

I.1. Introduction 04
I.2. Généralités 04
I.2.1. Définition de la membrane 04
I.2.2. Classification des membranes 05
I.2.2.1. Classification d'après la morphologie 05
I.2.2.2. Classification d'après la nature chimique 06
I.2.2.3. Classification d'après la géométrie de préparation des membranes 06
I.2.2.4. Classification d'après le mécanisme de séparation 10
I.2.3. Osmose inverse et nanofiltration 11
I.2.4. Sélectivité d'une membrane 13
I.2.5. Influence des paramètres opératoires 13
I.2.5.1. Pression 13
I.2.5.2. Température 14
I.2.5.3. Taux de récupération "Taux de conversion" 14
I.3. Interactions et propriétés de séparation 14
I.3.1. Encombrement stériques (effet du tamisage) 15
I.3.1.1. État physique de la membrane 15
I.3.1.2. Taille moléculaire 17
I.3.2. Répulsion électrostatique (effet de charge) 19
I.3.2.1. Charge de la surface 19
I.3.2.2. Charge de soluté 19
I.3.2.3. Influence du pH 20
I.3.3. Interaction hydrophobe/adsorption 20
I.3.3.1. Hydrophobicité de la membrane 20
I.3.3.2. Hydrophobicité des solutés 21
I.4. Applications des procédés d'OI et de NF 22
I.4.1 Applications des procédés d'osmose inverse 22
I.4.2. Applications des procédés de nanofiltration 23
I.5. Avantages et inconvénients des procédés d'OI et de NF 23
I.5.1 .Avantage 23
I.5.2. Inconvénient 23
I.6.conclusion 24

Chapitre II. Réseaux de neurones

II.1. Introduction 25
II.2. Historique 25
II.3. Réseau de neurones artificiels 26
II.3.1. Neurone biologique 26
II.3.2. Neurone formel 27
II.3.3.Architecture d'un réseau de neurone 29
II.3.3.1. Réseau de neurone non bouclé 30
II.3.3.2. Réseau de neurone bouclé 31
II.3.4. Type d'apprentissage des réseaux neurones 32
II.3.4.1. Apprentissage supervisé 32
II.3.4.2. Apprentissage non supervisé 32
II.4. Conception d'un modèle neuronal 32
II.4.1. Détermination des entrer/sorties du réseau de neurones 33
II.4.2. Construction de la base de données et choix des échenillions 33
II.4.3. Définition de la structure du réseau 34
II.4.3.1. Nombre de couches cachées 34
II.4.3.2. Nombre de neurones cachés 34
II.4.4. Apprentissage 37
II.4.5. Evaluation des performances du réseau de neurones 38
II.4.6. Apprentissage et sur-apprentissage 39
II.4.7. Validation du modèle 39
II.5. Revue des travaux de la prédiction par réseaux neurones 39
II.6. Conclusion 41

Chapitre III. Modélisation multiple des rétention

III.1. Introduction 42
III.2. Collecte des données, prétraitement et analyse 42
III.3. Modélisation par réseau de neurones multiple 44
III.4. Résultats et discussions 47
III.4.1. Performances des modèles RNI et RNM 47
III.4.2.Comparaison entre les modèles RNS et RNM 51
III.5. Conclusion 54
Conclusion générale et perspectives 55
Références bibliographiques 57
Annexe A 66
Annexe B 74

Abréviations

Symbole	Signification
BANN	**B**ootstrap **A**ggregated **N**eural **N**etworks
COT	**C**oncentration en Carbone **O**rganique **T**otal
DS	**D**éviation **S**tandard
HB	**H**ydropho**b**e
HL	**H**ydrophi**l**e
INN	**I**ndividual **N**eural **N**etworks
MAE	**M**ean **A**bsolute **E**rror (Erreur Absolue Moyenne)
MD	**M**oment **D**ipolaire
MO	**M**embrane **O**rganique
MON	**M**atière **O**rganique **N**aturel
MW	**M**asse **M**olaire
MWCO	**M**olecular **W**eight **C**ut-**O**ff (Poids Moléculaire De Coupure)
NF	**N**ano**f**iltration
OI	**O**smose **I**nverse
PES	**P**olyether**s**ulfane
PM	**P**oids **M**oléculaire
PMC	**P**erceptron **M**ulti-**C**ouches
Ptm	**P**ression **T**rans**m**embranaire
RBF	**R**adial **B**asis **F**unction Network
RFR	**R**éseau à **F**onctions de base **R**adiales
RMSE	**R**oot **M**ean **S**quared **E**rror (Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne)
RNFF	**R**éseau de **N**eurones de Type **F**eed **F**orward
RNI	**R**éseaux de **N**eurone **I**ndividuel
RNM	**R**éseaux de **N**eurones **M**ultiple
RNS	**R**éseaux de **N**eurones **S**imple

RMSE	**R**oot **M**ean **S**quared **E**rror (Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne)
SNN	**S**imple **N**eural **N**etwork
SPE	**S**tandard **E**rror of **P**redection (Erreur Standard de Prédiction)
SR	**R**étention des **S**els
TFC	**T**hin-**F**ilm **C**omposite
UF	**U**ltra **F**iltration

Nomenclature et symboles

Lecture		Unitée
α	Angle de contact	**(°)**
b_0	Biais	(-)
C	Concentration de la solution	(mol.m^{-3})
C_0	Concentration des molécules dans la couche de octanol	(mol.m^{-3})
C_{SA}	Concentration d'un soluté dans l'alimentation	(kg/m^3)
C_{sp}	Concentration d'un soluté dans le perméat	(kg/$\mathbf{m^3}$)
C_w	Concentration des molécules dans la couche de l'eau	(mol.m^{-3})
DCO	Demande Chimique en Oxygène	(mg.L^{-1})
$Depth$	Profondeur moléculaire	(nm)
EAM	Erreur Absolue Moyenne	(-)
EQM	Erreur Quadratique Moyenne	(-)
$Eqwidth$	Largeur équivalente moléculaire	(nm)
ESP	Erreur Standard de Prédiction	(%)
$Length$	Longueur moléculaire	(nm)
$Log\ D$	Logarithme du coefficient de distribution	(-)
$logk_{ow}$ $Log\ p$	Logarithme du coefficient de partage octanol-eau	(-)
MV	Volume molaire	(cm^3/mol)
MW	Masse molaire	(g.mol^{-1})
N	ensemble de formation	(-)
n_{appr}	les nombres de données constituant les bases d'apprentissag	(-)
n_{valid}	les nombres de données constituant les bases validation	(-)
Q_A	Débit volumique d'Alimentation	(m^3/h)
Q_P	Débit volumique de permeat	(m^3/h)
R	Coefficient de corrélation	(m^3/h)
R	Constante des gaz parfait	$mol.m^{-3}$
S	Surface	(nm^2)
SR	Rejet de Sel	(-)
T	Température	(k)
T_r	Taux de rétention	(%)
y	Variables de sortie (rétention)	(%)
Y	Taux de récupération (Taux de conversion)	(%)
ye	moyenne des Données expérimentales de la sortie	(%)
$y_{observée}$	les valeurs mesurées par le modèle	(-)
y_{pred}	la valeur estimée par le modèle	(-)
$width$	largeur	(nm)
w_i	poids de connexions	(-)
x_i	Variables entrées	(-)

Lettres Grecques

Lecture	Désignation	Unité
$\Delta\Pi$	Différence de pression osmotique de part et d'autre de la membrane	(Pa)
α	Pente de la droite du meilleur ajustement inéaire	(-)
β	Ordonnée à l'origine de la droite du meilleur ajustement linéaire	(-)
Π	Pression osmotique	(Pa)
(ζ)	Potentiel zêta	(Mv)

Exposants

Lecture	Désignation
cal	Calculée
exp	Expérimentale

Indices

Lecture	Désignation
i	Élément i d'un vecteur
i, exp	Élément i d'un vecteur de valeurs expérimentales
i, cal	Élément i d'un vecteur de valeurs calculées
$\bar{y}$	moyennes arithmétiques des vecteurs Y
$\bar{z}$	moyennes arithmétiques des vecteurs *Z*

Chapitre I. Description de la technologie membranaire

Tableau I.1. Avantages et inconvénients des différents modules membranaires 09

Chapitre II. Réseaux de neurones

Tableau II.1. Fonctions de transfert usuelles a = f(n) 28

Tableau II.2. Résumé des caractéristiques des algorithmes d'apprentissage de rétro-propagation implantés dans MATLAB 36

Tableau II.3. Vue d'ensemble des travaux antérieurs sur les modèles de prédiction de la rétention des molécules organiques lors d'osmose inverse et de nanofiltration. 40

Chapitre III. Modélisation multiple des retentions

Tableau III.1. Analyse statistique des données d'entrée et de sortie 43

Tableau III.2. Vecteurs de régression linéaire issue de l'équation linéaire 51

Tableau III.3. Les erreurs calculées pour la valeur moyenne, max, min de la base d'apprentissage, test et totale pour les deux modèles neuronaux (RNS, RNM) 52

Chapitre I. Description de la technologie membranaire

Figure I.1.	Schéma du principe du fonctionnement dune membrane sélective	04
Figure I.2.	Représentation schématique des différentes structures membranaires	05
Figure I.3.	Représentation schématique d'une membrane multicouche	06
Figure I.4.	Représentation schématique d'un module plan	07
Figure I.5.	Représentation schématiqued'un module tubulaire .	08
Figure I.6.	Représentation schématique d'un module à fibres creuses	08
Figure I.7.	Représentation schématique d'un module spiralé	09
Figure I.8.	Montre schématiquement la correspondance entre les opérations de filtration par membrane, la taille des pores et les composés retenus.	11
Figure I.9.	Principe des phénomènes d'osmose et d'OI	12
Figure I.10.	Principe de phénomène de nanofiltration	13
Figure I.11.	Courbes de coupure de différents poids moléculaires de lamembrane	16
Figure I.12.	Mesure de l'angle de contact par la méthode de la goutte déposée	21

Chapitre II. Réseaux de neurones

Figure II.1.	Schéma d'un neurone biologique	27
Figure II.2.	Neurone formel.	27
Figure II.3.	Réseaux de neurones les plus utilisés	30
Figure II.4.	Structure d'un réseau de neurones non bouclé	31
Figure II.5.	Un réseau de neurones bouclé à deux entrées.	31
Figure II.6.	Algorithme de rétro-propagation du gradient d'erreur	36
Figure II.7.	Généralisation optimale	38

Chapitre III. Modélisation multiple des retentions

Figure III.1.	Représentation des pourcentages de division de la base de données	44
Figure III.2.	Représentation schématique de la procédure utilisée dans la conception et l'optimisation de l'architecture de RNI, RNS et RNM.	45
Figure III.3.	Schéma du RNM.	46

Figure III.4. Comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par le RNS : (a) la phase d'apprentissage, (b) la phase de test, (c) la phase total 49

.

Figure III.5. Comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par RNM : (a) la phase d'apprentissage, (b) la phase de test, (c) la phase totale. 50

Figure III.6. Comparaison des résultats de la base totale entre le modèle de RNS et le modèle RNM: (a) *EAM*, (b) *REQM*, (c) *ESP*. 53

Introduction générale

Les technologies membranaires ont conquis, en l'espace de 3 décennies, une place de choix dans le domaine du traitement de l'eau. Si aujourd'hui moins de 1% de l'eau potable distribuée dans le monde est produite par un procédé faisant intervenir l'ultra ou la microfiltration, plus d'une usine sur deux construite en 2011 fait intervenir une technologie membranaire. De la même manière, le dessalement d'eau de mer par osmose inverse, mis au point dans les années 60, représente plus de la moitié de la capacité de production mondiale d'eau potable, ayant dépassé les procédés thermiques en 2009. La raison à cela est une consommation énergétique par mètre cube d'eau dessalée environ 7 fois inférieure en osmose inverse qu'en évaporation multiple effets. Ces quelques chiffres démontrent la viabilité industrielle de ces procédés, qualifiés jusqu'à ce qu'il y a encore récemment des "technologies nouvelles". Aujourd'hui, une amélioration constante des matériaux et une meilleure conduite des procédés contribuent à diminuer les coûts de fonctionnement et à fiabiliser les installations de traitement (Axel 2011).

La littérature met en lumière plusieurs points. D'une part, la nanofiltration et l'osmose inverse sont des procédés de plus en plus répandues et de nombreuses études indiquent qu'il est possible de traiter différents types d'effluents en retenant à la fois les molécules inorganiques et organiques. La compréhension fondamentale et quantitative des mécanismes de transfert et des performances des membranes d'osmose inverse et de nanofiltration sont nécessaires à la sélection, au dimensionnement, au fonctionnement et au contrôle des systèmes industriels. D'autre part, le rôle complexe et encore mal cerné de nombreuses interactions qui peuvent s'établir entre les solutés, l'eau et la membrane. De nombreux modèles de transferts existent (thermodynamique irréversible, solubilisation-diffusion ou de pores), mais ils ne décrivent ou n'expliquent pas toujours correctement le procédé et les résultats obtenus dans le cas du transfert de molécules organiques nécessitent des modifications importantes. Le comportement du procédé d'osmose inverse et de nanofiltration pour les solutions complexe plus difficile à décrire et prédire, du fait du grand nombre de mécanismes mis en jeu. De plus, peu de travaux font le lien entre les mécanismes révélés par l'étude de solutions-modèles et les performances de traitement de rejets industriels. Ils ne se concentrent que sur l'un ou l'autre de ces aspects.

Pour surmonter ces problèmes, des tentatives ont été faites pour proposer des approches de modélisation permettant de diminuer le nombre d'expériences à effectuer pour déterminer les paramètres optimaux pour le traitement d'un effluent industriel. Si elle représente bien le procédé, les influences des paramètres opératoires pourront être évaluées sans aucune expérience et n'auront qu'à être validées sur le site. De plus, la modélisation peut également permettre de valider les

hypothèses simplificatrices émises lors de la formulation mathématique des phénomènes de transfert. Pour cela, il faut chercher d'autres méthodes de modélisation telles que les sciences cognitives.

La révolution de l'informatique et le développement de nouvelles méthodes de calcul numérique basé sur l'intelligence artificielle et les sciences cognitives ont donné naissance durant les dernières décennies à des nouvelles méthodes de calcul et de modélisation telles que les réseaux de neurones artificiels "RNA", les algorithmes génétiques et la logique floue. L'efficacité, la fiabilité et la robustesse de ces méthodes par rapport aux difficultés de l'utilisation des approches classiques, ont été démontrées par leurs nombreuses applications dans le domaine du génie des procédés (Bouamar et Ladjal 2007). Le principal avantage des RNA, comparé aux modèles de connaissance classique, est leur capacité à modéliser ces procédés sans avoir une connaissance approfondie de la phénoménologie mise en jeu. Un autre avantage important des RNA, comparé à d'autres approximateurs universels tels que les régressions linéaires ou polynomiales, est qu'ils sont des approximateurs non-linéaires parcimonieux, permettant une modélisation de procédés non-linéaires quel que soit le nombre de paramètres indépendants utilisés (Dreyfus et *al*. 2002).

Bien que les réseaux de neurones artificiels (RNA) et les régressions linéaires multiples (RLM) soient très appliqués dans le domaine du génie des procédés en raison de la précision des résultats qu'ils produisent et de la simplicité relative de la mise en œuvre. Peu de travaux de recherche utilisent les RNA comme moyen de calcul des phénomènes de transports par d'osmose inverse et de nanofiltration lors de la rétention des molécules organiques (Libotean et *al*. 2008 ; Yangali-Quintanilla et *al*. 2008, 2009a et 2010a ; Shahmansouri et *al*. 2013 ; Sadmani et *al*. 2014a et 2014b ; Ammi et *al*. 2015 ; Khaouane et *al*. 2016).

L'objectif de ce travail est l'application des RN de type feedforward et RLM pour modéliser la rétention des molécules organiques (neutres et ioniques) par les membranes d'OI et de NF. Ainsi, nous avons organisé ce mémoire en trois chapitres :

- Le premier chapitre concerne les procédés de séparation par les membranes d'osmose inverse et de nanofiltration.
- Le deuxième chapitre est dédié à la présentation de la théorie des réseaux de neurones.
- Le troisième chapitre prétend la méthodologie ainsi que les résultats obtenus lors de la modélisation de la rétention des molécules organiques par les membranes

d’osmose inverse et de nanofiltration, en utilisant les modèles de réseaux de neurones simples et multiples.

Les conclusions tirées de ce travail ainsi que les études qui peuvent être envisagées à l’avenir sont présentées à la fin de ce mémoire.

Chapiter I

Description de la technologie membranaire

I.1. Introduction

Depuis long temps, les procédés de séparation jouent un rôle important dans le milieu industriel. Nous retrouvons parmi ces procédés l'application des membranes comme élément principal de séparation. Cela a été d'un apport enrichissant au niveau des techniques conventionnelles de séparation.

Ce chapitre s'attache à faire les points sur les généralités des membranes d'osmose inverse et de nanofiltration, les interactions et les propriétés de séparation des molécules organiques, les applications des procédés d'OI/NF, les avantages et les inconvénients des procédés d'OI/NF.

I.2. Généralités sur les membranes

I.2.1. Définition de la membrane

Une membrane peut être définie comme étant une couche mince de matière, permettant l'arrêt ou le passage sélectif de substances dissoutes, sous l'action d'une force motrice de transfert (Figure I.1). Les critères de séparation des particules, des molécules et/ou des ions peuvent être (Audinas et *al*. 1986).

- La dimension et la forme ;
- La nature chimique ;
- L'état physique ;
- La charge électrique.

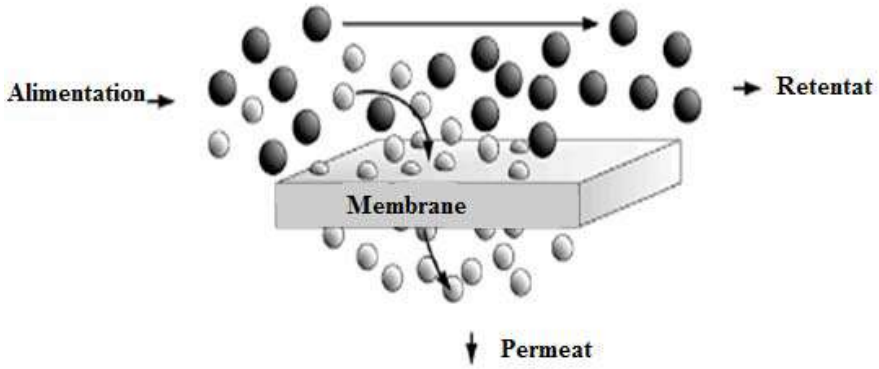


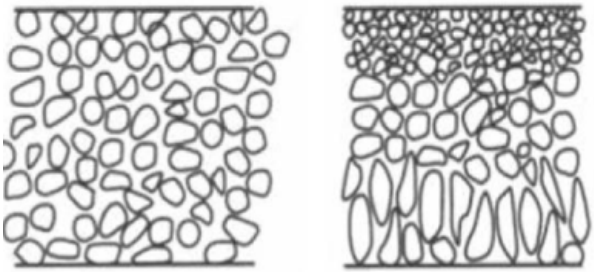
Figure I.1.schéma du principe du fonctionnement dune membrane sélective (https://www.google.dz/search).

I.2.2. Classification des membranes

I.2.2.1. Classification d'après la morphologie

Les membranes peuvent être également classées en fonction de la structure des différents matériaux, on distingue :

- **Membranes à structure symétrique "isotrope " :** ce sont des membranes denses ou poreuses ayant la même structure (structure homogène) sur toute leur épaisseur (Chikhi 2008) (Figure I.2 "a").
- **Membranes à structure asymétrique "anisotrope" :** la structure de la membrane varie d'une couche à une autre (Figure I.2 "b"). Celles-ci présentent une structure hétérogène.



a. Membrane symétrique b .Membrane asymétrique

Figure I.2. Représentation schématique des différentes structures membranaires (Baker 2004, Bouranene 2008).

On peut distinguer deux sous-types de membrane asymétriques (Annane 2015).

- Membranes préparées à partir du même matériau.
- Membranes composites : ce sont des membranes constituées principalement de deux couches :
  - ✓ **Peau :** une couche de très faible épaisseur en contact direct avec l'eau à traiter. Cette couche donne à la membrane sa sélectivité.
  - ✓ **Couche support :** une couche plus épaisse, d'une perméabilité beaucoup plus grande, qui supporte la peau et confère à la membrane sa mécanique.

La plupart des membranes commerciales de MF, UF et de NF sont des membranes à structure asymétrique, car ce type de structure permet d'avoir des perméabilités plus élevées. Une membrane asymétrique est en général constituée d'une couche support macroporeuse (assurant une bonne résistance mécanique) et d'une couche active (régissant les propriétés de

rétention entre lesquelles s'insèrent une ou plusieurs couches intermédiaires dont le rôle est de permettre le dépôt de la couche active et sa tenue en pression (Figure I.3) (Chikhi 2008).

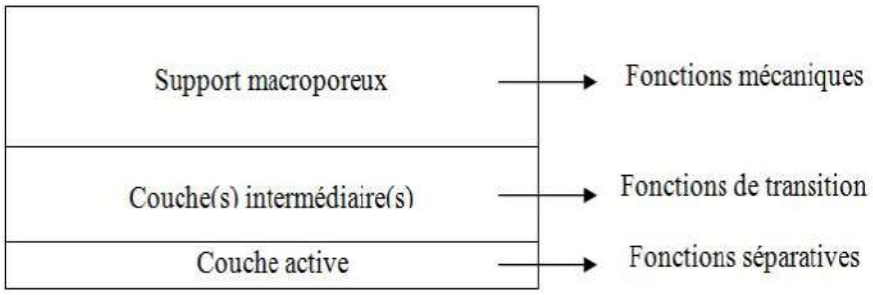


Figure I.3. Représentation schématique d'une membrane multicouche (Lanteri 2009).

I.2.2.2. Classification d'après la nature chimique

Les membranes sont fabriquées à partir de polymères organiques et de matières inorganiques. Les principaux polymères utilisés pour la fabrication de membranes sont :

a. Dérivés de la cellulose : ces polymères considérés généralement comme plus hydrophiles, peu coûteux et possédant une faible tendance à l'adsorption (Ammi 2016).

b. Polysulfone (PS) et polyethersulfone (PES) : qui ont une tendance à l'adsorption plus élevée que les membranes ci-dessus, mais avec une meilleure stabilité chimique, mécanique et thermique (Aptel et Buckley 1996).

c. Les membranes inorganiques : sont fabriquées à base de céramique (oxydes d'aluminium, de zirconium ou de titane). Ces membranes ont une stabilité chimique, mécanique et thermique supérieure que les membranes organiques (Hamlaoui 2002).

I.2.2.3. Classification d'après la géométrie de préparation des membranes

Les membranes peuvent se présenter sous forme des feuilles (membranes organiques), des plaques (membranes céramiques), des tubes (membranes organiques et céramiques) ou des fibres creuses (membranes organiques et céramiques). Selon leur géométrie, elles sont mises en œuvre dans les modules suivants (Kaba 2014) :

- Membranes planes ;
- membranes spirales ;
- membranes tubulaires (ayant le diamètre interne plus grand que 3 mm) ;
- membranes creuses (ayant le diamètre plus petit que 3 mm).

La forme des membranes conditionne la manière dont elles sont assemblées pour fabriquer des modules (Ammi 2016).

- **Modules membranaire**
  - **Module plan :** Les modules plans sont les plus anciens et les plus simples : les membranes sont empilées en millefeuilles séparées par des cadres intermédiaires qui assurent la circulation des fluides (Figure I.4) (Aurélie 2011).

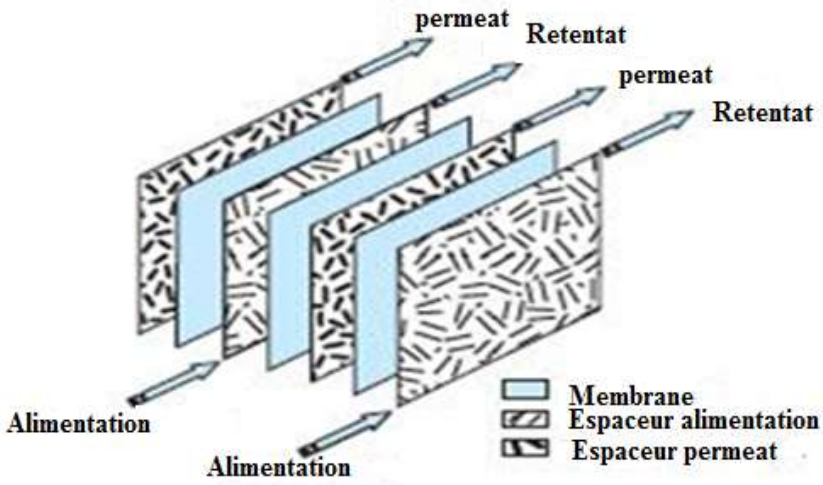


Figure I.4 : Représentation schématique d'un module plan (https://www.google.dz/search).

  - **Module tubulaire** Ils sont constitués par des faisceaux des tubes de 4 à 25 mm de diamètre intérieur. Ils sont basés sur une technologie simple, facile a utilisé et nettoyé, mais ils sont grands consommateurs d'énergie pour une très faible surface d'échange par unité de volume "compacité réduite" (Figure I.5) (Ammi 2016).

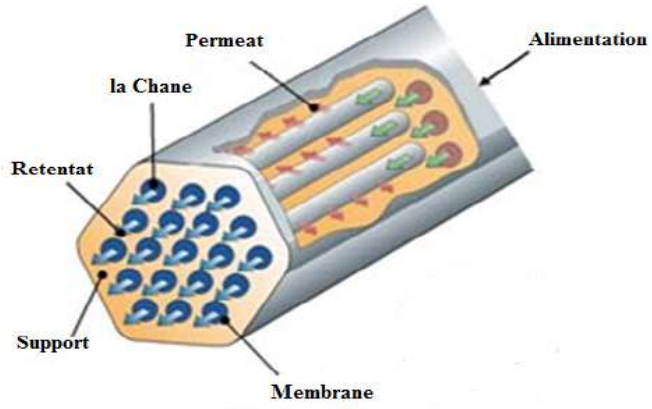


Figure I.5. Représentation schématique d'un module tubulaire (https://www.google.dz/search).

- **Fibre creuse :** ces modules sont constitués de quelques milliers jusqu'à plusieurs millions de membranes tubulaires de très petit diamètre (< 2mm) appelées fibres creuses. La compacité de ces modules varie de 1000 a10000. m^2/m^3 (Figure. I.6).

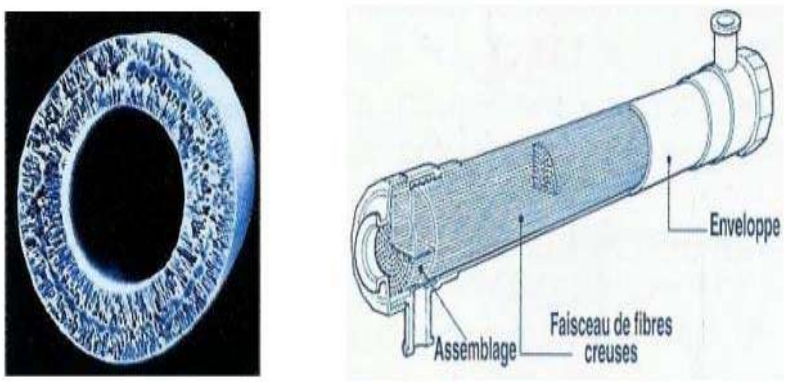


Figure I.6. Représentation schématique d'un module à fibres creuses (Ammi 2016).

- **Module spiralé :** une ou plusieurs membranes planes sont enroulées autour d'un tube poreux et creux destiné à collecter le permet. Ce type de module permet d'obtenir des surfaces filtrantes importantes pour un faible encombrement et un coût peu élevé. C'est une solution typiquement choisie dans l'industrie agro-alimentaire pour le traitement de fluides clarifiés (Figure I.7) (Ferrarini 2001. Guu 1996 ; Jeantet 1996).

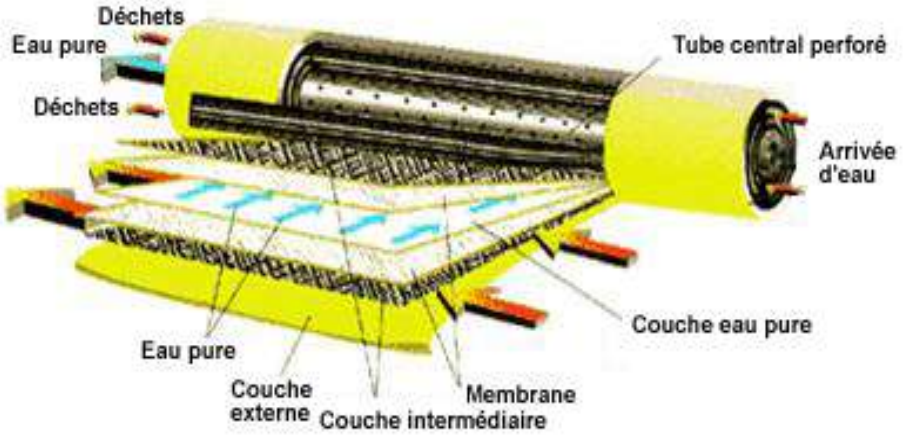


Figure I.7. Représentation schématique d'un module spiralé (https://www.google.dz/search).

Les principaux avantages et inconvénients des modules adaptés aux quatre géométries de membranes énoncées ci-dessus sont regroupés dans le tableau suivant :

Tableau I.1 : Avantages et inconvénients des différents modules membranaire (Lanteri2009, Chabane 2015).

Géométrie	Avantages	Inconvénients
Plan	– Possibilité de récupérer le perméat – produit par chaque élément membranaire	– Nettoyage in situ assez difficile
Spiral	– Compacité faible cout d'investissement	– Prétraitement nécessaire – nettoyage in situ très difficile
Tubulaire	– Très peu d'exigences de prétraitement – nettoyage in situ facilité	– Consommation énergétique élevée – compacité limitée
Fibre creuse	– Compacité élevée – faible consommation énergétique – faible cout d'investissement	– Prétraitement nécessaire en mode interne/externe

I.2.2.4. Classification d'après le mécanisme de séparation

Les mécanismes de séparation dans les membranes sont complexes et encore partiellement compris. Les processus qui jouent un rôle dans la séparation membranaire sont le tamisage, la friction sur les parois des pores des membranes, la diffusion dans le matériau membranaire ou dans les pores des membranes, les forces de surface répulsives ou attractives, notamment la répulsion électrostatique. La classification la plus répandue des membranes d'après le mécanisme de séparation est la suivante (Nachade 2009) :

a. Membranes poreuses (MF, UF, NF) : où les effets de tamisage et de friction jouent des rôles importants, comme en NF, les forces de surface peuvent jouer un rôle important. Les pores peuvent être subdivisés en plusieurs catégories (Bouranene 2008) :

- Micropores-plus grands que 50 nm (MF) ;
- Méso pores-2 à 50 nm (UF) ;
- Micropores-plus petits que 2 nm (NF).

b. Membranes denses : Membranes non poreuses (perméation de gaz, pervaporation, osmose inverse (OI)), ces membranes peuvent être considérées comme des milieux denses où la diffusion des espèces a lieu dans les volumes libres situés entre les chaînes moléculaires du matériel de la membrane (Benhaddou 2014).

c. Membranes échangeuses des ions : ces membranes sont considérées comme un type spécial de membranes non poreuses. Elles sont constituées de gels denses ayant une charge positive (échangeuses d'anions) ou négative (échangeuses des cations).

Il a noté que la communauté scientifique ne s'entende pas sur cette classification. Aptel et Buckley 1996 considèrent que les membranes d'OI sont des membranes poreuses. La figure I.8 montre schématiquement la correspondance entre les opérations de filtration par membrane, la taille des pores et les composés retenus.

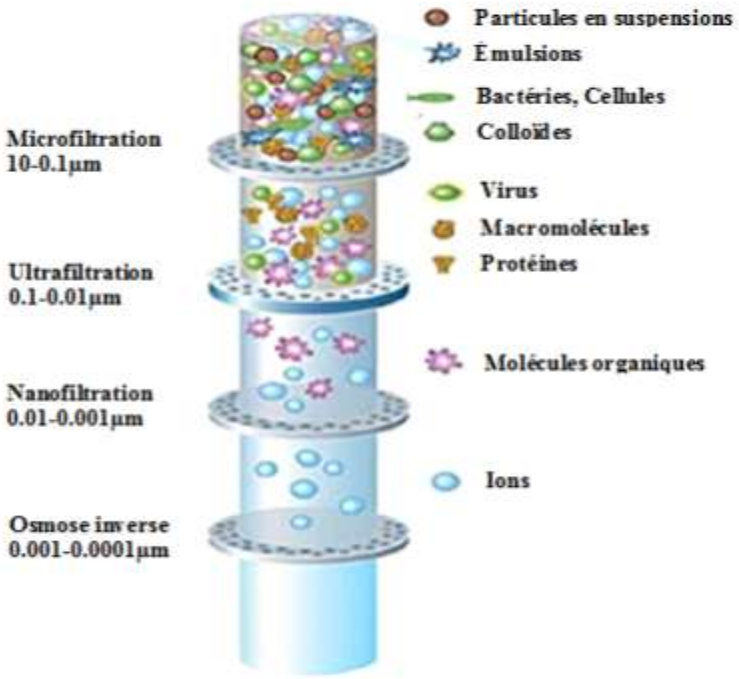


Figure I.8. Montre schématiquement la correspondance entre les opérations de filtration par membrane, la taille des pores et les composés retenus (Ammi 2016).

I.2.3. Osmose inverse et nanofiltration

L'osmose inverse est un procédé de filtration tangentielle qui permet l'extraction d'un solvant, le plus souvent l'eau, par perméation sélective à travers une membrane dense sous l'action d'un gradient de pression (Fell 1995). Elle s'oppose au phénomène naturel d'osmose qui tend à transférer le solvant d'une solution diluée vers une solution concentrée mises en contact par une membrane sélective sous l'action du gradient de concentration (Figure I.9). Lorsqu'une pression est appliquée sur le compartiment le plus concentré, le flux de solvant diminue jusqu'à s'annuler pour une pression égale à la pression osmotique de la solution. Lorsque la pression appliquée est supérieure à cette pression osmotique, le flux s'inverse : c'est le phénomène d'osmose inverse. La pression efficace correspond donc à la pression de part et d'autre de la membrane (pression transmembranaire, Ptm) diminuée de la différence de pression osmotique ($\Delta\Pi$) de part et d'autre de la membrane (Sagne 2008).

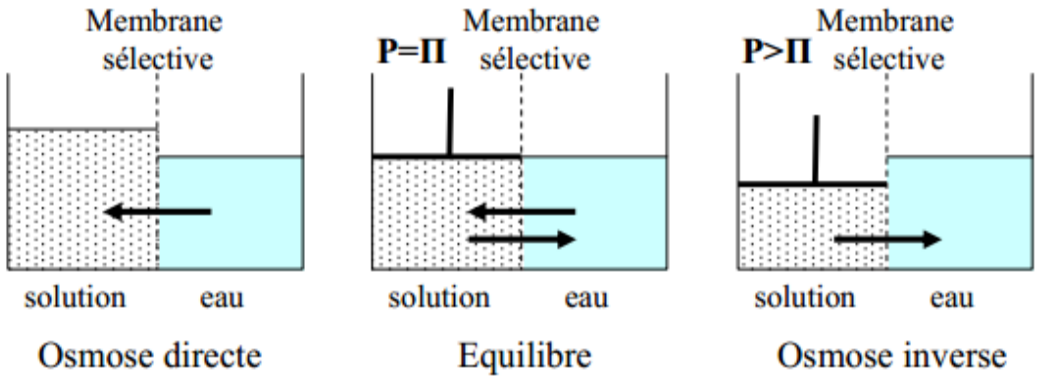


Figure I.9. Principe des phénomènes d'osmose et d'OI (Fell 1995 ; Azizi 2011).

Pour les solutions diluées, considérées comme thermodynamiquement idéales, la pression osmotique est calculée à partir de l'équation de Van't Hoff (Maurel 1998) :

$$\pi = CRT \qquad \text{(I.1)}$$

π **:** Pression osmotique de la solution Pa.

C **:** Concentration de la solution $mol.m^{-3}$.

R **:** Constante des gaz parfait 8.31 $j.mol^{-1}.k^{-1}$.

T:Température *k*.

La NF est deuxième procède membranaire en importance (Mallevialle et *al.* 1996), les membranes de NF sont fabriquées habituellement a partir de polymères. Ces membranes ont des seuil de coupure entre 300 et 1000 Dalton en plus de permettre un enlèvement des particules et des macromolécules comme en UF, les membranes de NF sont conçues pour assurer un enlèvement poussé des ions multivalents ($Ca^{+2}, Mg^{+2}, Mn^{+2}, Fe^{+2}$) ce qui fait de la NF un excellent choix pour le traitement des eaux dures une conséquence de la rétention des ions multivalents est une augmentation de la pression osmotique qui peut être signification par rapport a la pression d'opération. La NF permet aussi un enlèvement poussé de la matière organique naturel (MON) et donc une forte réduction de la concentration en carbone organique total (COT) la couleur, en relation avec le fer et la mon est très bien enlevée par ce procédé ce qui en fait un choix intéressant pour les eaux colorées (Figure I.10) les ions monovalents sont retenus partiellement par les membranes de NF. Phénomène qui limite l'augmentation de la pression osmotique la pression d'opération en NF varie de 500 à 1500 Kpa.

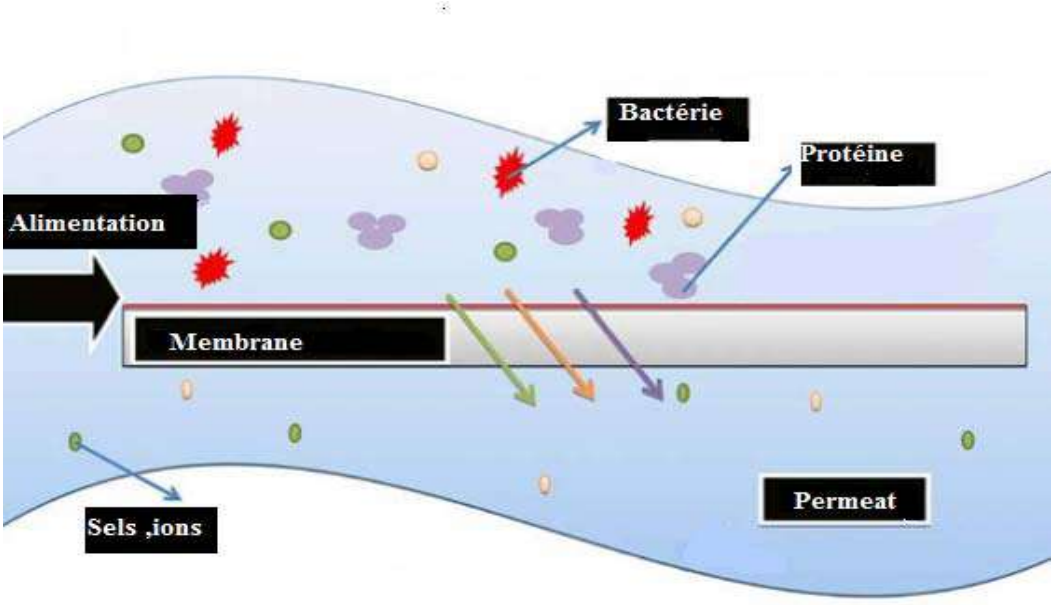


Figure I.10. Principe de phénomène de nanofiltration (Sedra 2016).

I.2.4. Sélectivité d'une membrane

La sélectivité d'une membrane pour une substance donnée dépend de sa nature et de sa structure, de l'environnement chimique à proximité de la membrane et des propriétés de la substance à séparer. La sélectivité s'exprime par un taux de rétention *Tr* ou par un facteur de sélectivité (Pontié et *al*. 2001).

$$T_r = \frac{C_{SA} - C_{SP}}{C_{SA}} = 1 - \frac{C_{SP}}{C_{SA}} \qquad \text{(I.2)}$$

Où

C_{SP} : Concentration d'un soluté dans le perméat kg/m^3.

C_{SA} : Concentration d'un soluté dans l'alimentation kg/m^3.

I.2.5. Influence des paramètres opératoires

I.2.5.1. Pression

La pression de fonctionnement (Ptm) doit avant tout être supérieure à la pression Osmotique. Ainsi la pression efficace (Ptm-ΔΠ) correspond à la pression qui conduit réellement à la production de permet. Plus cette pression est élevée, plus le flux de permet est important (Padilla et Tavani 1999 ; Galambos et *al*. 2004 ; Lin et yang 2004) De même le taux de rétention augmente

lorsque la pression augmente (Sridhar et *al*. 2002) expliquent l'augmentation du taux de rétention de la manière suivante :

Lorsque la pression transmembranaire augmente, le flux de solvant augmente proportionnellement tandis que le flux de solutés augmente moins rapidement. La concentration en soluté dans le perméat s'en trouve diminuée et par conséquent le taux de rétention augmenté (Azizi 2011).

I.2.5.2. Température

L'augmentation de la température engendre une diminution de la viscosité des solutions, et par conséquent une augmentation de la densité de flux de perméat (Bilstad 1995), d'environ 3% par degré Celsius. Le taux de rétention diminue. En effet, la diffusivité de l'eau et des solutés augmente avec la température (Girard et Fukumoto 2000). Pour une pression donnée, le compactage de la membrane est d'autant plus important que la température est élevée. Il est donc important de vérifier que la membrane et le module aient une tenue suffisante à la température de fonctionnement choisie. En général, la température maximale conseillée est de l'ordre de 50°C.

I.2.5.3. Taux de récupération

Le taux de récupération d'eau est un terme de production qui relie le débit du perméat et le débit d'alimentation (Équation I.3). Ce facteur est fonction du temps (Absar 2012).

$$y = \frac{Q_P}{Q_A} \qquad \text{(I.3)}$$

L'augmentation du débit d'alimentation engendre une augmentation de la vitesse de circulation le long de la membrane. Plus elle est importante, plus la concentration aux abords de la membrane sont moins importantes aussi que la densité de flux du perméat au cours du temps (Cornelissen et *al*. 2001) Plus le taux de récupération est élevé, plus le flux diminue, aussi la concentration côté retentât augmente (Azizi 2011).

I.3. Interactions et propriétés de séparation

En général, les trois principales interactions affectant principalement soluté- rejet de la membrane peut être pointé comme suit encombrement stérique (effet tamisage), la répulsion électrostatique (effet de charge) et hydrophobe /interactions d'adsorption (Amy et *al*. 2007). Ces interactions soluté-membrane sont déterminées par les propriétés de soluté (poids moléculaire, la

taille moléculaire (longueur et largeur), coefficient de diffusion et hydrophobie (exprimé par logKow), les propriétés membranaires (seuil de coupure de poids moléculaire (MWCO), taille des pores, la charge de surface(potentiel zêta), hydrophobie (angle de contact), morphologie de surface (rugosité) et les conditions opératoires (pression, flux, et la récupération…) (Gur-Reznik et *al.* 2011).

I.3.1. Encombrement stériques (effet du tamisage)

Le rejet de traces organiques non chargées par des membranes NF est influencée par encombrement stérique / exclusion de taille (Berg et *al.* 1997). Des expériences de rejet sont effectuées par Kiso et al en utilisant des composés hydrophobes, y compris aromatique pesticides, non phényliques, et les pH d'alkyle avec des membranes NF, et ont conclu que le rejet composé a été corrélée de façon significative avec largeur moléculaire en plus au composé hydrophobe (Kiso et *al.* 2000). Une de leurs études a montré que le rejet des solutés hydrophiles a été contrôlé par la largeur moléculaire plutôt que le poids moléculaire. D'autre part (Ozaki et Li 2002) ont traité des composés organiques de faible masse moléculaire (150 Dalton) en utilisant une membrane d'osmose inverse à basse pression. Ils ont observé que le rejet de composés organiques non chargées augmenté linéairement avec le poids moléculaire et de la largeur moléculaire.

Kimura et *al.* 2003 ont démontré par des expériences de rejet avec des sous-produits de désinfection et les perturbateurs endocriniens que le rejet de composés non chargés a été influencé par leur taille moléculaire. Cependant, leur prochaine étude a révélé que l'encombrement stérique peut ne pas être le seul facteur à quantifier le rejet de micropolluants organiques. De ces études, il convient de noter que l'encombrement stérique représenté par le poids moléculaire (PM) et / ou la largeur moléculaire est l'un des principaux facteurs qui influent sur l'enlèvement de contaminants organiques non chargées (Yangali-Quintanilla 2010).

I.3.1.1. État physique de la membrane

Les propriétés physiques de la membrane comme le nombre de pores, leur forme ainsi que la rugosité de la surface, jouent un grand rôle dans la rétention des solutés. La porosité est exprimée par la taille, la distribution de taille et le nombre de pores effectifs dans la couche active. Le terme "pore" pour les membranes d'osmose inverse correspond à un espace vide dans le polymère par lequel le transport du fluide peut avoir lieu sous l'action d'une force motrice. Dans une membrane dense, les pores sont des vides de moins de 0,5 nm de diamètre, qui sont formés naturellement dans les polymères solides. Ces pores, ou défauts de densité, sont causés par des irrégularités de

l'entremêlement des chaînes de polymères. Ils peuvent aussi être créés par les contractions locales des polymères cristallisables lors de leur cristallisation. Ces pores peuvent être circulaires ou non, fermés ou ouverts, et former un réseau continu d'interconnections. Ils sont susceptibles d'accueillir de petites molécules qui au cours de leur transport à travers ce pore interagissent fortement avec ses parois (Kosutic et *al*. 2000).

A. Seuil de coupure ou Seuil de rétention "Sc ou MWCO"

Le poids moléculaire de coupure (MWCO) (en anglais : Moléculaire Wight Cut-Off) d'une membrane est un paramètre qui indique l'importance relative des pores de la membrane. Il correspond à la masse moléculaire d'un soluté avec une rétention de 90%. MWCO est pris comme une mesure pour les propriétés de rétention de la membrane. Le MWCO parfois appelée limite nominale du poids moléculaire, est définie par sa capacité à retenir un pourcentage donné, par exemple 90% d'un soluté de poids moléculaire défini (Van der Bruggen et *al.*1999). Toutefois, cette définition n'est pas explicite car le pourcentage de rejet peut varier entre 60% et 90% (Bellona et *al* . 2004) (Figure I.11) montre un schéma des courbes de coupure sur la base duquel les membranes sont parfois caractérisées. La coupure est souvent identifiée comme une discontinuité ; Cependant, il sera difficile d'identifier une discontinuité même si la membrane contient une distribution étroite de pores (non dispersée) lorsque la polarisation de concentration se produit (Cardew et *al*. 1998).

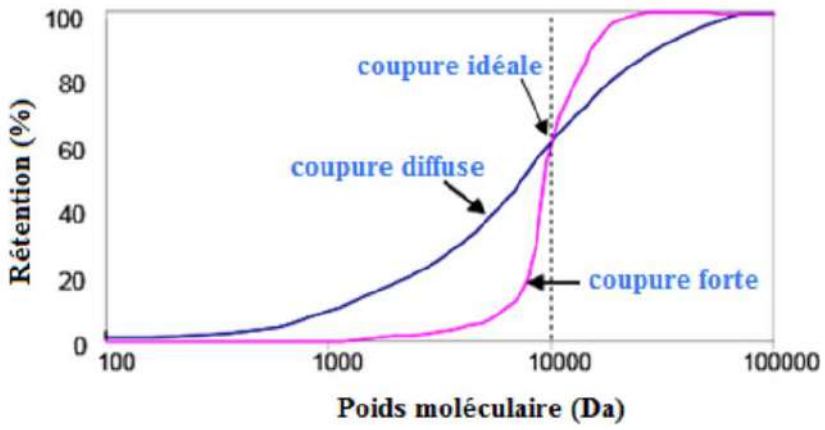


Figure I.11. Courbes de coupure de différents poids moléculaires de la membrane (Cardew et *al.*1998).

B. Rejets des sels

✓ **Rejet du sel de chlorure de sodium SR (Na Cl)**

Le premier paramètre donnant une indication sur la "porosité" de la membrane est son taux de rétention en chlorure de sodium (Na Cl), mesuré par le fabricant dans des conditions standards, qui lui sont spécifiques. Il a été bien corrélé au taux de rétention de certains pesticides (Kiso et *al*. 2000), de polysaccharides et d'alcools (Kiso et *al*. 2001a ; Bellona et *al*. 2004). Étude (Agenson et *al*. 2003) sur 36 composés organiques semi-volatils et volatils d'intérêt environnemental, de mase molaire (MW) comprise entre 70 et 300 g/mol a montré qu'en général les taux de rétention les plus forts sont obtenus pour les membranes ayant un taux de rétention en Na Cl le plus élevé.

✓ **Rejet du sel de sulfate de magnésium SR($MgSO_4$)**

Le rejet du sel de sulfate de magnésium incorpore les encombrements stériques et les effets de répulsion électrostatique qui sont liés à la structure de la membrane et les conditions d'exploitation. L'utilisation du seuil de coupure était acceptable à des fins de modélisation, toute fois les membranes d'OI/NF avec une large gamme de MWCO est difficile à estimer la rétention de contaminants. Le rejet du sel de sulfate de magnésium peut être plus approprié (Yangali et *al.* 2009b et 2010b). Kosutic et *al*. 2000 ont étudié la porosité des membranes commerciales en polyamides et ont rapporté que les différences de performances sont principalement dues par des différences de porosité. Par ailleurs, ils ont indiqué que la variation de la pression du travail a une influence sur cette porosité et donc sur les performances des membranes. Pour certaine membrane, l'augmentation de la pression conduit à un effet de compaction qui fait diminuer la densité de flux du perméat et la taille des pores tout en augmentant leur nombre. Le pH peut avoir une influence sur la porosité à pH élevé, la répulsion entre les groupements acides au sein de la membrane peut entrainer une augmentation de la taille des pores (Berg et *al.* 1997).

I.3.1.2. Taille moléculaire

La taille moléculaire est un paramètre principal qui détermine la rétention de molécules organiques avec les membranes d'OI/NF. Plusieurs paramètres peuvent être utilisés pour représenter la taille moléculaire : le poids, la longueur, la largeur, la profondeur et la largeur équivalente qui sont calculés à partir de la structure moléculaire (Vander Bruggen et *al*. 1998).

A. Poids moléculaire "MW"

Le poids moléculaire est un paramètre facilement disponible, il fournit seulement une estimation approximative de la taille moléculaire. Il est utilisé pour avoir une première idée sur la taille relative des molécules étudiées (Va der Bruggen et *al*. 1998). Il ne peut pas être utilisé pour la modélisation, car il ne représente pas la géométrie de la molécule (Van der Bruggen et *al*. 1999). Pour les molécules non chargées, peu polaires, la masse molaire peut fournir une première information sur la rétention (Kiso et *al*. 2001a) avec de bonnes corrélations (Ozaki et Li 2002 ; Sadmani 2014b). Cependant, il ne renseigne pas sur l'encombrement stérique de la molécule. L'évaluation de la taille et de la géométrie de la molécule couplée à la taille de pores peut être un meilleur descripteur que la masse molaire (Bellona et *al*. 2004). En effet des pesticides ayant une section et non une masse molaire plus faible sont moins bien retenus (Berg et *al*. 1997). Le poids moléculaire est considéré comme une variable de descripteur moins significatif pour la modélisation de la rétention (Yangali-Quintanilla et *al*. 2008).

B. Longueur moléculaire "*Length*"

La longueur moléculaire (*Length*) a été définie comme la distance entre les deux atomes les plus éloignés de la molécule (en tenant compte des forces des Van der Waals). La ligne droite reliant les deux atomes les plus éloignés a été définie comme la L-axe (Santos et *al*. 2006 ; Kiso et *al*. 1992 et 2001b).

C. Largueur moléculaire "*Width*"

La molécule est projetée sur le plan perpendiculaire à l'axe L. Le rectangle de surface minimale entourant la projection de la molécule est sélectionné. L'aire du rectangle (*S*) est calculée et la largeur moléculaire (*Width*) est définie comme étant la moitié de la racine carrée de S. La racine carrée de S correspond à la longueur du côté du carré dont la superficie est égale à la surface du rectangle (Santos et *al*. 2006 ; Kiso et *al*. 1992 ; kiso et *al*. 2010) :

$$width = \frac{1}{2}\sqrt{S_{min}} \qquad \text{(I.4)}$$

D. Profondeur moléculaire "*Depth*"

La largeur moléculaire et la profondeur moléculaire (la largeur supérieure à la profondeur) sont mesurées par la projection de la molécule sur le plan perpendiculaire à l'axe de la longueur (Kiso et *al*. 1992 ; Santos et *al*. 2006) :

$$Depth = \frac{1}{2}\sqrt{S_{max}} \quad \text{(I.5)}$$

E. Largeur équivalente moléculaire "*EqWidth*"

La largeur moléculaire équivalente est définie comme étant la moyenne géométrique de la largeur et de la profondeur (Kiso et *al*. 1992 ; Santos et *al*. 2006 ; Linares et *al*. 2011).
On calculer la largeur équivalente par la formule suivante (Linares et *al*. 2011) :

$$Eqwidth = \sqrt{width * Depth} \quad \text{(I.6)}$$

I.3.2. Répulsions électrostatiques (effet de charge)

Les interactions électrostatiques ont souvent été rapportées comme participant de manière importante au mécanisme de rétention. Elles s'établissent entre deux entités chargées : dans notre cas les solutés ionisés et la membrane, qui peut porter une charge.

I.3.2.1. Charge de la surface

En général les membranes d'OI/NF thin-film composite (TFC) portent une charge négative qui permet de minimiser l'adsorption des composés colmatant chargés négativement et d'augmenter la rétention des sels ionisés dans l'eau. La charge de la membrane est généralement quantifiée par mesure du potentiel zêta (ζ) (Ammi 2016).

Le *pH* de l'alimentation a une influence sur la charge de la membrane, il joue sur la protonation des groupes fonctionnels (Childress et Elimelech 1996). À *pH* élevé, la membrane est chargée négativement du fait de la dissociation du groupement carboxylique et à *pH* faible elle est chargée positivement du fait de l'ionisation du groupement amines (Ozaki et li 2002). Le *pH* pour lequel le potentiel zêta est nul est appelé point isoélectrique ou *pH* d'ionisation de la membrane (Desmukh et Childress 2001).

I.3.2.2.Charge du soluté

Comme nous venons de voir, les membranes d'osmose inverse et de nanofiltration présentent une charge généralement négative. Il est donc clair qu'un soluté chargé négativement sera mieux retenu, par répulsion électrostatique, qu'un soluté neutre. Le respect de l'électro neutralité implique que les composés chargés positivement le seront également (Shim et *al*. 2002). Les molécules inusables sont donc en général mieux retenues sous leur forme ionisée (Berg et *al*. 1997 ; Ozaki et Li 2002). Cet effet est d'autant plus marqué que la molécule est petite, car sa

densité de charge est alors plus élevée. Pour des molécules de masses molaires proches, celles de même signe que la membrane sont mieux retenues que les neutres, elles-mêmes mieux retenues que celles de charges opposées à celles de la membrane (Van der Bruggen et *al*. 1999 ; Hu et *al*. 2003). Pour ces dernières, l'attraction électrostatique favorise leur passage. Pour les plus grosses molécules les effets stériques restent prédominants (Van der Bruggen et *al*. 1999).

I.3.2.3. Influence du *pH*

Comme nous l'avons vu précédemment, la charge des membranes dépend du *pH* de la solution avec laquelle elles sont en contact (Childress et Desmukh 1996 ; Childress et Desmukh1998 ; Schäfer et *al*. 2004 ; Bellona et Drewes 2005). Suite à cela, il peut se créer des interactions électrostatiques entre la membrane et les solutés chargés, ionisés ou non, présents en solution. Le positionnement de ceux-ci près de la surface modifie alors la charge apparente de la membrane (Sagne 2008). Par ailleurs, si le *pH* n'a pas d'influence sur le taux de rétention des molécules non chargées (Kiso et *al*. 2001b ; Agenson et *al*. 2003) alors il joue un grand rôle sur celui des molécules ion sables puisqu'il gouverne leur ionisation, En effet, la charge des espèces acido-basiques faibles varie avec le *pH*.

I.3.3. Interaction hydrophobes/adsorption

L'adsorption est fortement liée à l'hydrophobicité des molécules, à leur capacité à former des liaisons hydrogènes et à leur polarité.

I.3.3.1. Hydrophobicité de la membrane

La mesure de l'angle de contact α que forme l'eau sur une membrane permet d'avoir une idée de l'hydrophobicité de cette membrane. Cette dernière est supposée gouverner la mouillabilité de la membrane en particulier par l'eau, et donc avoir une influence sur ses performances (Ardhaoui et *al*. 2003). Il existe trois méthodes de mesure de l'angle de contact la bulle captive, la technique de la lame de Wilhelmy et la goutte posée (Gumi et *al*. 2003). Avec la méthode de la goutte posée et l'eau (Figure I.12), si α est supérieur à 90°, la membrane est dite hydrophobe et s'il est inférieur à 90° la membrane est dite hydrophile.

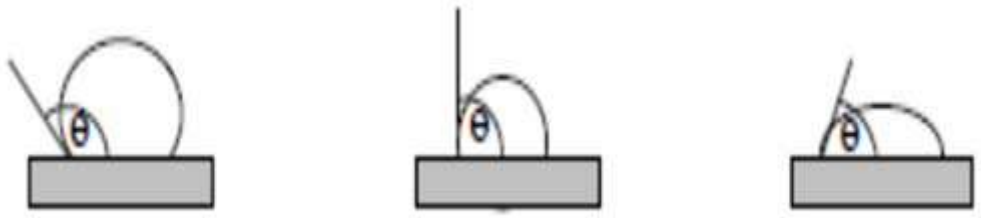


Figure I.12. Mesure de l'angle de contact par la méthode de la goutte déposée (Mulder 1996).

La plupart des membranes d'OI sont hydrophiles avec des valeurs d'angle de contact généralement comprises entre 40 et 70° (Norberg et *al*. 2007).Des mesures d'angle de contact avec des solutions de pH différents permettent également d'avoir accès au pH_i, correspondant au point d'inflexion de la courbe a=f (pH) Les résultats sont proches de ceux obtenus avec les mesures de potentiel zêta (Ardhaoui et *al*. 2003). En effet, lors du retrait, la force capillaire des pores augmente la résistance au mouvement de la goutte sur la surface de la membrane. Cette hystérésis est d'autant plus importante que la porosité et la rugosité sont élevées, sa mesure donne donc une information directe sur la structure de la membrane (Gumi et *al*. 2003).

La variation de l'angle de contact au cours de la durée d'utilisation de la membrane peut également permettre d'évaluer l'adsorption (Van der Bruggen et *al*. 2002b) et le colmatage (Ardhaoui et *al*. 2003).

I.3.3.2. Hydrophobicité des solutés

Le caractère hydrophobe ou hydrophile des solutés va donc jouer un rôle sur leur rétention. Il est évalué par le logarithme du coefficient de partage octanol-eau ($logk_{ow}$) plus souvent exprimé sous forme logarithmique ($logk_{ow}\ ou\ \log p$).

S'il est supérieur à 2, la molécule est hydrophobe (HB) ; s'il est inférieur, la molécule est hydrophile (HL) (Connell 1989 et 1990 ; Yangali-Quintanilla et *al*. 2009b).

Le logarithme du coefficient de partage n-octanol/eau, *LogP*, a été utilisé comme un indice hydrophobe, et est défini comme suit (Équation I.7) (Taheran et *al*. 2016) :

$$logk_{ow=}log(\frac{c_o}{c_w}) \qquad (I.7)$$

Où c_o et c_w sont les concentrations des molécules dans les couches n-octanol et l'eau (Kiso et *al*. 2001a ; Yangali-Quintanilla et *al*. 2010b ; Taheran et *al*. 2016).

Pour les solutés ionisables, le caractère hydrophobe est fonction du pourcentage des chargé contre les espèces non chargées, il dépend donc du *pH*. Par conséquent, un coefficient de partage apparent à un *pH* donné est calculé pour les solutés ionisables. Le coefficient de distribution octanol-eau dépend du *pH*, *D*, est le rapport entre les concentrations d'équilibres de toutes les espèces (ionisé et non) d'une molécule dans l'octanol à la même espèce dans la phase aqueuse. Le logarithme du coefficient de distribution peut être calculé à partir du *pKa* et ($logk_{ow}$) du soluté (Équations I.8 et I.9) (Verliefde et *al*. 2008).

- **Pour les acides :**

$$logD_{(pH)} = logk_{ow} - log(1 + 10^{(pH-pka)}) \quad \text{(I.8)}$$

- **Pour les basses :**

$$logD_{(pH)} = logk_{ow} - log(1 + 10^{(pKa-pH)}) \quad \text{(I.9)}$$

On parle également des molécules polaires/apolaires. Les molécules hydrophobes sont en général apolaires (Sagne 2008). Le dipôle est dirigé vers la membrane de telle sorte que le côté du dipôle de charge opposée est plus proche de la membrane. Cette orientation n'est pas statique, afin elle doit être considérée comme une tendance statistique des molécules en mouvement rapide d'avoir cette orientation préférentielle. Le dipôle dirigé est donc attiré dans les pores et entre ainsi plus facilement dans la structure de la membrane (Van der Bruggen et *al*.1998).

Les molécules ayant un moment dipolaire élevé ont des rétentions inférieures par rapport à des molécules non polaires. Cet effet, est indépendant du signe de la charge de la membrane (positif ou négatif) (Van der Bruggen et *al*. 1999).

I.4. Applications des procédés d'OI et NF

I.4.1. Applications des procédés d'osmose inverse

- ✓ Dessalement des eaux de mer ;
- ✓ dessalement des eaux saumâtres ;
- ✓ production d'eau ultra pure ;
- ✓ concentration de solutions (concentration de jus de fruits par exemple) ;
- ✓ production d'eau ;

- ✓ clarification et concentration de jus de fruits et légumes (Metaiche 2014).

I.4.2. Applications des procédés de nanofiltration

- ✓ Déminéralisation sélective (adoucissement des eaux) ;
- ✓ concentration de composés organiques de faible masse molaire (antibiotiques) ;
- ✓ adoucissement des eaux ;
- ✓ séparation d'acides aminés et de peptides du lait.

I.5. Avantages et inconvénients des procédés d'OI et NF

I.5.1. Avantages

- ✓ Taux de conversion élevé (supérieur à 55%) ;
- ✓ consommation spécifique d'énergie basse (3 à 5 KWh/m3) ;
- ✓ coût d'investissement relativement bas ;
- ✓ durée de mise en œuvre réduite ;
- ✓ opération à température ambiante ce qui évite la dégradation de molécules fragiles dans le domaine agro-alimentaire ;
- ✓ pas d'intervention de réactifs chimiques comme des agents d'extraction qui sont des sources de pollution (Aimar 2008 ; Aptel 2008 ; Audinos 2008).

I.5.2. Inconvénients

- ✓ Sensibilité à la variation de la qualité d'eau brute et surtout aux pollutions ;
- ✓ nécessité d'un personnel qualifié ;
- ✓ exploitation relativement difficile surtout au niveau du prétraitement ;
- ✓ un coût d&e maintenance élevé dû aux frais de renouvellement des membranes d'une durée de vie ne dépassant pas 7 ans à présent ;
- ✓ baisse de la perméabilité et modification de la sélectivité en cas de colmatage des Membranes (Aimar 2008 ; Aptel 2008 ; Audinos 2008).

I.6. Conclusion

À partir de ce chapitre on résume que la rétention des molécules organiques par des membranes d'osmose inverse et de nanofiltration dépend d'un grand nombre de facteurs liés à la fois à la membrane (structure physique, charge, hydrophobicité) et à la molécule (taille, structure, charge, polarité ou hydrophobicité) et aux conditions expérimentales (*pH*, pression, taux de récupération et température). Les interactions mises en place sont à la fois d'ordre stérique, électrostatique et dues au caractère hydrophobe/hydrophile.

Chapitre II
Réseaux de neurones

II.1. Introduction

Les réseaux de neurones connaissent depuis quelques années un succès croissant dans divers domaines des sciences de l'ingénieur, celui du génie des procédés n'échappe pas à cette règle. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'application des réseaux de neurones aux procédés membranaires.

Dans un premier temps, nous rappelons l'historique puis les définitions et notations de bases relatives aux réseaux de neurones. Nous poursuivons en exposant les architecteurs d'un réseau de neurones. Nous présentons aussi, d'une manière générale, les étapes de conception d'un réseau de neurones, le choix des entrées et des sorties, l'élaboration de la base de données et la structure du réseau…etc. Nous terminons ce chapitre par la présentation d'une revue des travaux de la prédiction de la rétention par réseaux neurones simples et multiples.

II.2. Historique

En 1943, Mac Culloch et Pitts ont proposé le premier modèle de neurone biologique (Davalo et Naïm 1989). Ce dernier, appelé aussi neurone à seuil, a été inspiré des récentes découvertes en biologie. Ce sont des neurones logiques (0 ou 1). Ces deux physiciens ont montré que les neurones formels peuvent réaliser des fonctions logiques.

En 1949, le psychologue Donald Hebb a introduit, dans son ouvrage "The Organization of Behavior", le terme connexionisme pour parler des modèles massivement parallèles et connectés. Il a proposé de nombreuses règles de mise à jour des poids dont la plus connue à cette époque est la "règle de Hebb" (Hebb 1949 ; Davalo et Naïm 1989).

En 1958, le psychologue Frank Rosenblatt a développé le modèle du perceptron (Rosenblatt 1958). Il s'agit d'un réseau de neurones, capable d'apprendre à différencier des formes simples et à calculer certaines fonctions logiques. Il est inspiré du système visuel. Il a réussi à l'appliquer dans la reconnaissance des formes. Au début des années 60, les travaux de Rosenblatt ont vécu un grand intérêt dans le milieu scientifique. Mais en 1969, deux scientifiques américains appelés Minsky et Papert (Minsky et Papert 1969 ; Davalo et Naïm 1989) ont publié un livre dans lequel ont démontré les limites du perceptron proposé par Rosenblatt. En particulier, son incapacité réside à la résolution des problèmes non linéaires.

Les travaux se sont ralentis considérablement jusqu'aux années 80. En 1982, Hopfield a fini par démontrer l'intérêt des réseaux entièrement connectés (Hopfield 1982 ; Davalo et Naïm 1989).

Parallèlement, Werbos a conçu un mécanisme d'apprentissage pour les réseaux multicouches de type perceptron : la rétro-propagation (en anglais back-propagation). Cet algorithme, qui permet de propager l'erreur vers les couches cachées, sera popularisé en 1986 dans un livre "Parallel Distributed Processing" par Rumelhart et McClelland (Rumelhart et McClelland 1986).

En 1989, Moody et Darken (Moody et Darken 1989) exploitent quelques résultats de l'interpolation multi variables pour proposer le Réseau à Fonctions de base Radiales (RFR), connu sous l'appellation anglophone "Radial Basis Function network" (RBF). Ce type de réseau se distingue des autres types de réseaux de neurones par sa représentation locale (Talbi 2011).

Depuis ces travaux, les applications des réseaux de neurones n'ont cessé de croître. Les applications en sont multiples et variées.

II.3 Réseau de neurones artificiels

II.3.1. Neurone biologique

L'idée de réseaux neuraux artificiels a été inspirée de la manière par laquelle les neurones biologiques traitent les informations. Ce concept est utilisé pour mettre en œuvre des logiciels de simulations des processus massivement parallèles qui impliquent des éléments de traitement connectés dans une architecture de réseau. L'apprentissage dans le cerveau humain se fait à travers un réseau des neurones qui sont connectés par l'axone, les synapses et des dendrites (Figure II.1) (Khaouane 2013).

L'information est traitée alors par le corps cellulaire. Si le potentiel d'action dépasse un certain seuil, le corps cellulaire répond par un stimulus. Le signal transmis par le neurone est cheminé ensuite le long de l'axone (unique) pour être transmis aux autres neurones. La transmission entre deux neurones n'est pas directe. En fait, il existe un espace intercellulaire de quelques dizaines d'Angströms entre l'axone du neurone afférent et les dendrites du neurone Defférent. La jonction entre deux neurones s'appelle synapse (Tzanakou 2000).

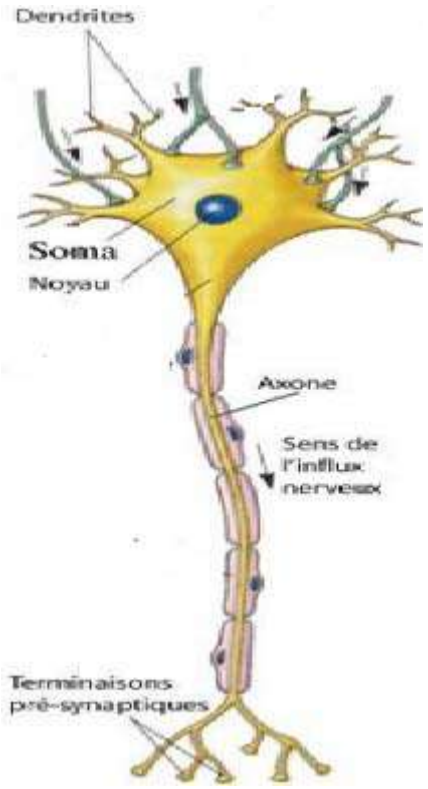


Figure II.1. Schéma d'un neurone biologique (Azizi 2011).

II.3.2. Neurone formel :

Le neurone formel est l'élément essentiel d'un réseau de neurones. C'est un opérateur mathématique très simple, dont on peut facilement calculer la valeur numérique (Hamadache 2014). Son fonctionnement est schématisé sur la figure II.2.

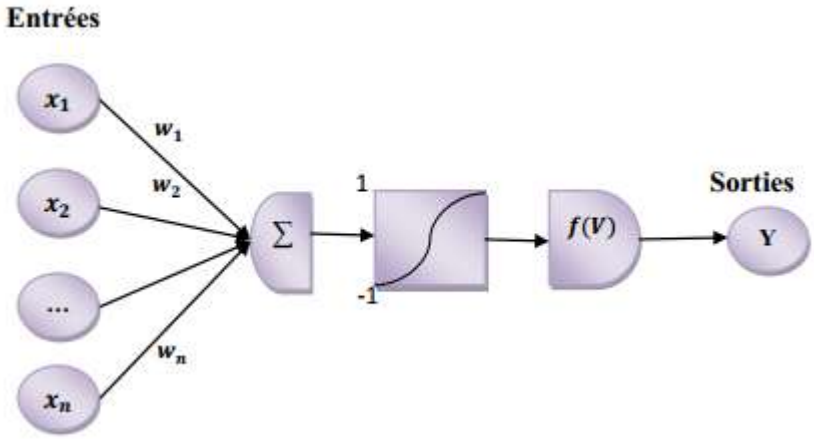


Figure II.2. Neurone formel (Ammi 2016).

Un neurone formel est une fonction algébrique paramétrée, non linéaire en ses paramètres. Ses entrées peuvent être les sorties d'autres neurones ou des entrées de signaux extérieurs. Sa sortie

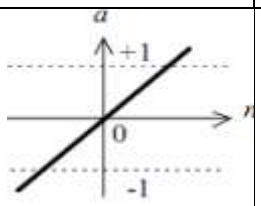
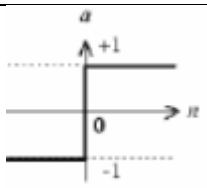
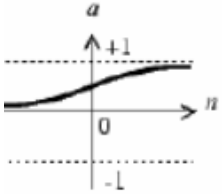
est une fonction non linéaire f d'une combinaison linéaire v des entrées (x_i). Le potentiel v le plus fréquemment utilisé est la somme pondérée des entrées (x_i) pondérées par les coefficients (w_i) également appelés poids de connexions (Hamadache 2014).

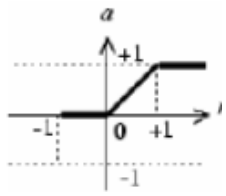
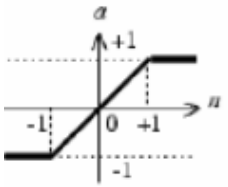
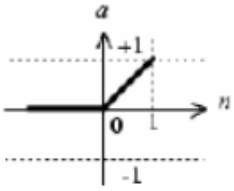
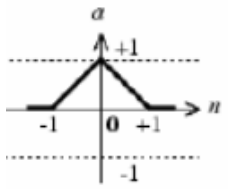
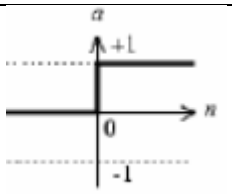
$$v = b_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \qquad \text{(II.1)}$$

Précisons que le poids b_0 est affecté à une entrée constante appelée "biais". Une fonction f appelée fonction d'activation, est appliquée à ce potentiel v. Le choix d'une fonction d'activation se révèle dans certains cas être un élément constitutif important des réseaux de neurones. Les fonctions mathématiques les plus souvent utilisées dans notre travail sont regroupées dans le tableau II.1. À la différence des neurones biologiques dont l'état est binaire, la plupart des fonctions de transfert sont continues, offrant une infinité de valeurs possibles comprises dans l'intervalle [0, +1] ou [-1, +1] (Khaouane 2013). Un neurone formel, réalise donc l'opération suivante :

$$y = f(v) = f(b_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i) \qquad \text{(II.2)}$$

Tableau II.1. Fonctions de transfert usuelles a = f(n) (Demuth et *al*. 2010).

Nom de la Fonction	**Relation entrée /sortie**	**Graphe de la fonction**	**Fonction MATLAB correspondante**
Linéaire	$a = n$		Purelin
Seuil symétrique	$a = -1$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		Hardlims
Logistique (Sigmoïde logarithmique)	$e^x = \frac{1}{1+e^{-n}}$		Logsig

Linéaire saturée	*a = 0 si n < 0* *a = n si 0 ≤ n ≤1* *a =1 si n > 1*		Satlins
Linéaire saturée symétrique	*a = -1 si n < -1* *a = n si -1≤ n≤1* *a =1 si n >1*		Satlins
Linéaire positive	*a* = 0 si *n < 0* *a = n* si *n* ≥0		Poslin
Triangulaire De base	a=1- /n/,-1≤ n ≤ +1 a= 0, autrement		Tribas
Seuil	*a = 0 si n < 0* *a =1 si n ≥0*		Hardlim

II.3.3. Architecture d'un réseau de neurones

On distingue deux grandes familles de réseaux de neurones : les réseaux bouclés et les réseaux non bouclés (Figure II.3).

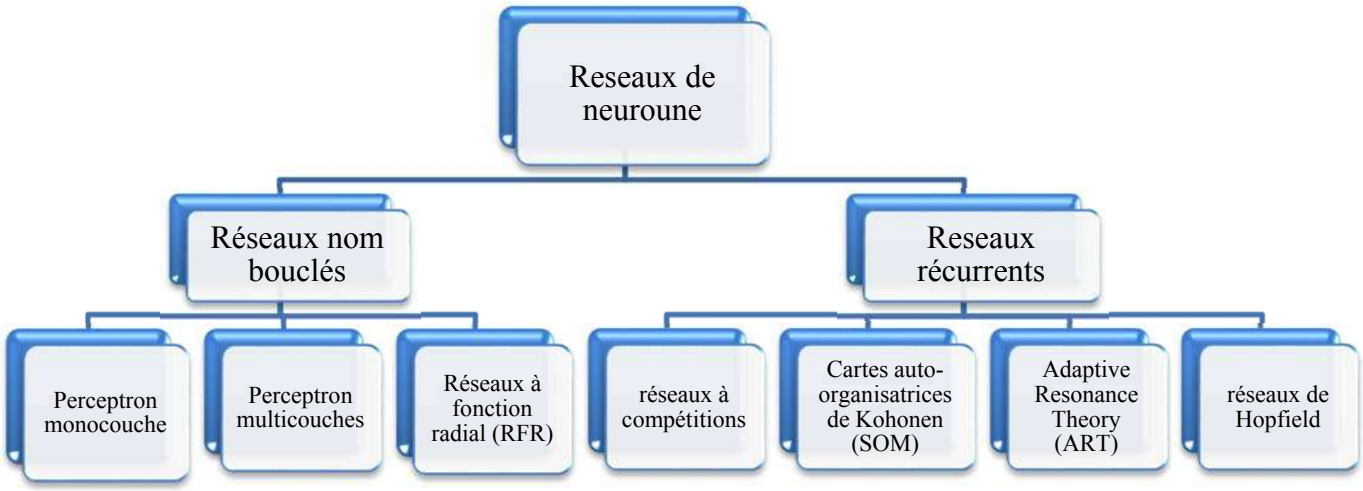


Figure II.3. Réseaux de neurones les plus utilisés (Talbi 2011).

II.3.3.1. Réseau de neurones non bouclé (en anglais feedforward)

Un réseau de neurones non bouclé est donc représenté graphiquement par un ensemble de neurones connectés entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans "retour en arrière" (Bishop 1995). On constate que le graphe d'un réseau non bouclé est acyclique. En effet, si on se déplace dans ce type de réseau à partir d'un neurone quelconque en suivant les connexions, on ne peut pas revenir au neurone de départ. Les neurones qui effectuent le dernier calcul de la composition de fonctions sont les neurones de sortie. Ceux qui effectuent des calculs intermédiaires sont les neurones cachés (Figure II.4).

Les réseaux non bouclés à couche sont structurés tel que les neurones qui appartiennent à une même couche ne soient pas connectés entre eux, chacune des couches recevant des signaux de la couche précédente et transmettant le résultat de ses traitements à la couche suivante. Les deux couches extrêmes correspondent à la couche d'entrée qui reçoit ses entrées du milieu extérieur d'une part et à la couche de sortie qui fournit le résultat des traitements effectués d'autre part. Les couches intermédiaires sont appelées couches cachées, leur nombre est variable (Chamekh 2007).

Chapitre III

Modélisation multiple des retentions

III.1. Introduction

Ce chapitre traite la modélisation de la rétention des MO lors l'OI/NF. Pour ce faire, on commencera par une première partie de collecte des données, de prétraitement et analyse. La seconde partie de ce chapitre se veut a la modélisation par réseaux de neurones multiples. Ensuite on présentera les résultats obtenus avec les performances des modèles RNI et RNM. On terminera par une comparaison entre les modèles RNS et RNM.

III.2. Collecte des données, prétraitement et analyse

Dans cette étude, nous avons utilisé les données disponibles dans la littérature (Chuyang et *al* 2009 ; Yangali-Quintanilla et *al*. 2008 , 2009 ; Dolar et *al*. 2011, 2012, 2013). Nous avons utilisé 23 molécules organiques et 278 rétentions.

Le choix des variables d'entrées et de sortie a été basé sur les interactions entre les propriétés des molécules organiques, les caractéristiques de la membrane et les conditions opératoires de filtration pour la rétention des molécules organiques par les membranes d'OI/NF. Les entrées considérées dans cette étude sont :

(1) les descripteurs moléculaires (le poids moléculaire, $logk_{ow}$, logD, le moment dipolaire, la longueur moléculaire, la largeur moléculaire, la profondeur moléculaire et la largeur équivalente moléculaire) ;

(2) les caractéristiques de la membrane (le poids moléculaire de coupure "MWCO", le rejet de sel de sulfate de magnésium "SR(MgSO4)" **,** Rejet du sel de chlorure de sodium SR(Na Cl), la charge de surface de la membrane "potentiel zêta" et l'hydrophobicité de la membrane "angle de contact") ;

(3) les conditions opératoires (*pH*), la pression et le taux de récupération).

Le nombre total de variables (les propriétés des molécules organiques, les caractéristiques membranaires et les conditions opératoires) a été réduit en utilisant une matrice de corrélation (tableau III.1). Elle regroupe l'intensité de la liaison qui existe entre ces paramètres. Cette intensité de liaison a été obtenue par le calcul des coefficients de corrélation de Pearson (R) (Équation III.1) (Khaounane 2013 ; Ammi 2016) :

$$R(Z,Y) = \frac{\sum_i (z_i - \bar{z})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i (z_i - \bar{z})^2}\sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}} \qquad \text{(III.1)}$$

Où Z_i est la i^{ème} valeur du vecteur *Z* (MW, *LogD*, *Length*, *EqWidth*, MWCO, SR (MgSO4), angle de contact, potentiel zêta, pH, pression, taux de récupération et rétention) ; y_i est la i^{ème} valeur du vecteur *Y* (MW, *LogD*, *Length*, *EqWidth*, MWCO, SR (MgSO4), angle de contact, potentieln zêta, pH, pression, taux de récupération et rétention) ; $\bar{z}$ et $\bar{y}$ sont respectivement les moyennes arithmétiques des vecteurs *Z* et *Y*. Le degré de coefficient de corrélation de Pearson doit être modéré (valeur absolu de $R < 0.75$) (Khaouane 2013 ; Ammi 2016), On élimine l'entrée qui possède la même valeur pour plus de 0.75 des échantillons.

L'analyse statistique des données d'entrées et de sortie, en termes du minimum "min", de la moyenne arithmétique (Équation III.2) "$\bar{x}$ ", du maximum "max" et de la déviation standard (écart type) "DS" (Équation III.3) (Khaouane 2013), sont présentées dans les tableaux III.1.

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \text{(III.2)}$$

$$DS = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \right)^{1/2} \qquad \text{(III.3)}$$

Tableau III.1. Analyse statistique des données d'entrée et de sortie.

	Min	**Moyenne**	**Max**	**DS**
MW (g/mol)	119.3800	300.4007	446.4800	87.5034
LogD	-0.8100	1.8676	4.7900	1.5039
moment dipolaire (Debye)	-2.8600	1.0845	3.3900	3.7806
Length (nm)	0.0000	4.5635	10.9100	0.3013
EqWidth (nm)	0.2153	0.3257	0.4171	0.0599
MWCO (Dalton)	0.2573	0.4424	0.5417	52.3883
SR (MgSO4) (%)	0.2397	0.3791	475.0000	0.2772
SR (NaCl) (%)	0.1210	0.7442	0.9960	0.3114
Potentiel zêta (mv)	-41.3000	-26.6203	3.1000	11.2961
Angle de contact (°)	20.1000	41.4420	65.0000	13.4837
pH	4.0000	6.66	8.0100	1.0039
Pression (Kpa)	240.0000	1138.2733	4100.0000	615.5188
Taux de récupération (%)	0.0400	25.0292	92.2600	28.9101
Rétention (%)	1.0000	87.1323	100.0000	23.5705

Les échantillons de la base de données ont été divisés au hasard en deux sous ensembles : 223 points (80%) pour la phase d'apprentissage et 55 points (20%) pour la phase de test (Figure III.1).

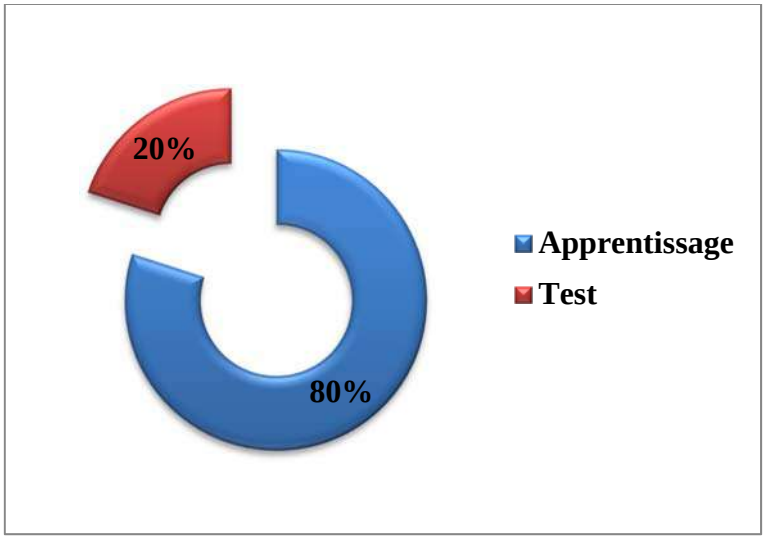


Figure III.1. Représentation des pourcentages de division de la base de données.

III.3. Modélisation par réseau de neurones multiples

Un réseau neuronal (RN) est une structure de calcul inspirée par les systèmes neurologiques biologiques. Il contient un certain nombre d'unités de traitement simples interdépendantes appelées neurones artificiels. Le Réseau neuronal de rétropropagation feed-forward (RPFF) qui a été utilisé dans cet article à des fins de prévision et à apprentissage supervisé (Si-Moussa 2008) est l'un des RN les plus populaires. Il est appliqué dans la modélisation d'une large gamme de systèmes non linéaires, en particulier les processus d'ingénierie chimique et biologique (Lee et *al* 1999, Silva et *al* 2000). Le rôle du RN est de transformer les informations d'entrée en une sortie. Pendant la phase d'entraînement, les poids sont modifiés pour produire des valeurs de sortie aussi proches que possible des valeurs cibles (Kruzlicova et *al* 2009).

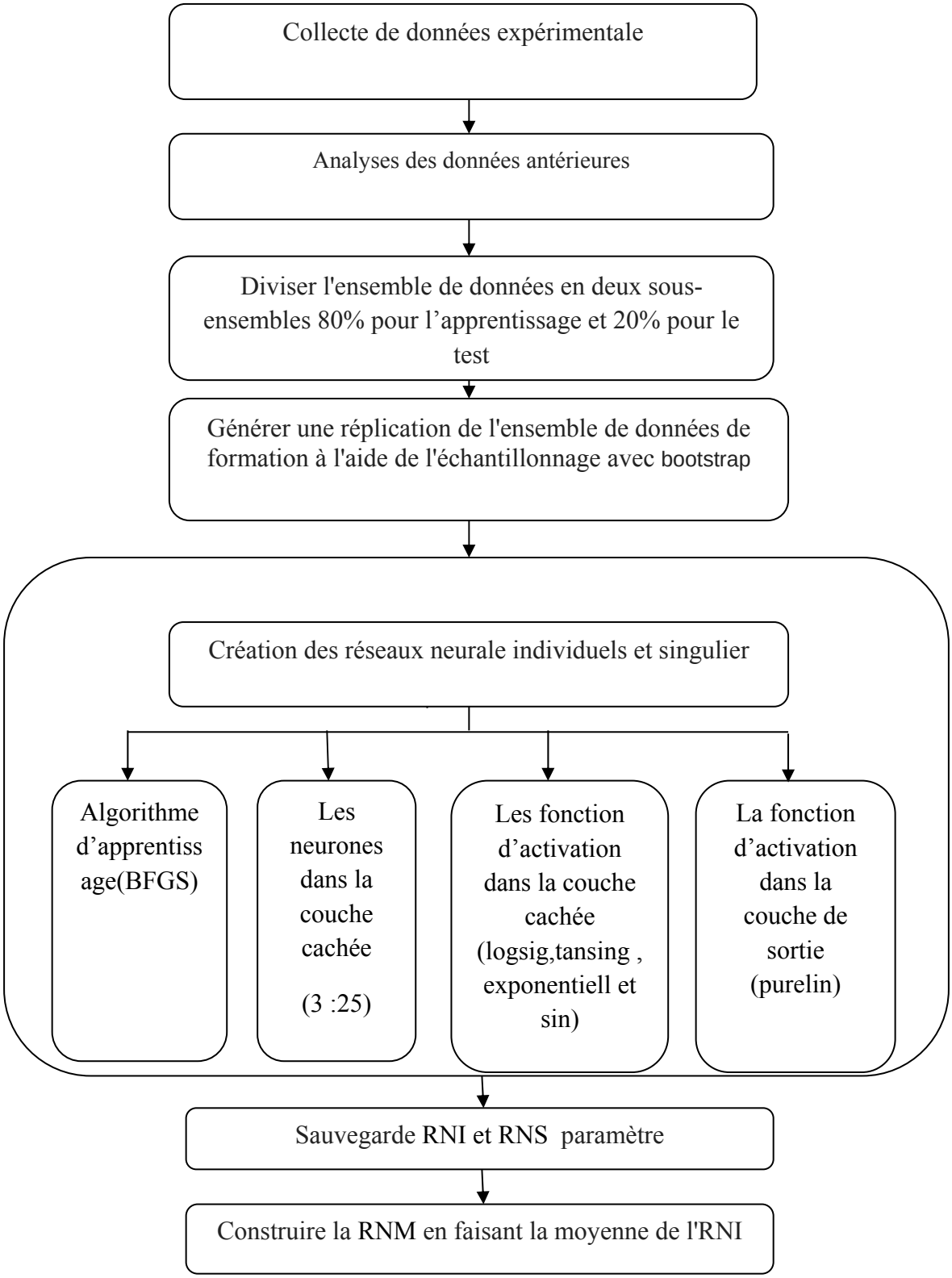


Figure III.2. Représentation schématique de la procédure utilisée dans la conception et l'optimisation de l'architecture de RNI, RNS et RNM.

Une limitation du modèle RNI est leur manque de généralisation lorsqu'ils sont appliqués à des données non utilisées dans le processus de formation. Cela signifie que le réseau neuronal formé donne de bonnes performances sur les données de formation mais donne des performances insatisfaisantes sur les données invisibles. Plusieurs techniques ont été développées pour améliorer la capacité de généralisation du réseaux neuronal comme la régularisation (Bishop1991), l'arrêt précoce (Bishop1995), l'apprentissage bayésien (MacKay 1992), formation avec des données de processus dynamiques et statiques (Zhang 2001) et combinaison de plusieurs réseaux (Sridhar et *al* 1996, Wolper1992). Parmi ces techniques, la combinaison de plusieurs réseaux est une approche très prometteuse pour améliorer les prédictions des modèles sur les données invisibles.

La figure 3 montre un schéma des réseaux de neurones multiples (RNM), où plusieurs neurones individuels (RNI) sont développés pour modéliser la même relation. La procédure basée sur la conception et l'optimisation de l'architecture de RNI et RNM est décrite sur la Fig. 2. L'ensemble de données de formation (278 points de données) est ré-échantillonné en utilisant une technique de bootstrap pour former n ensemble de données de formation différents (N = 10, 15, 20, 25 et 30). Pour chaque ensemble de formation, le modèle RNI est construit, testé avec l'ensemble de données de test (55 Points). Les modèles RNI développés sont ensuite combinés en moyennant l'équation suivante :

$$Y^{RNM} = \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i^{RNI}}{n} \qquad \text{(III.4)}$$

Ou Y_i^{RNI} est le résultat calculé par le RNI, Y^{RNM} représente la sortie prévue par le RNM, et n est le nombre de model individuels RNI.

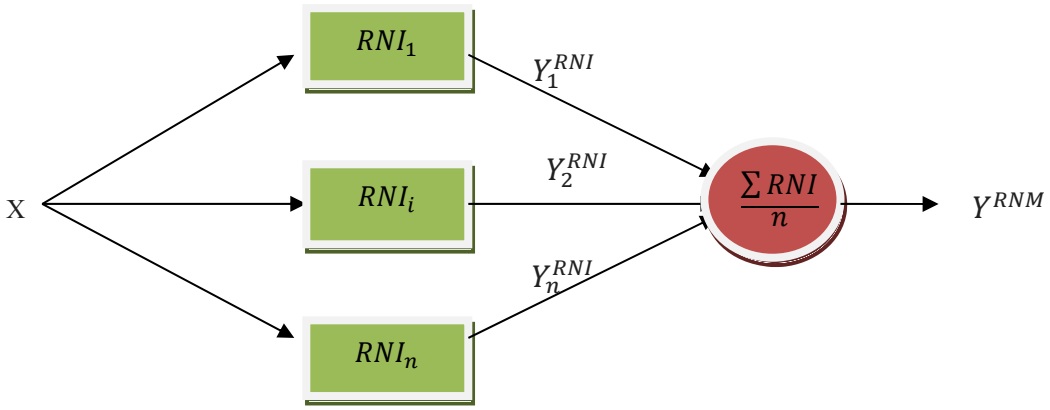


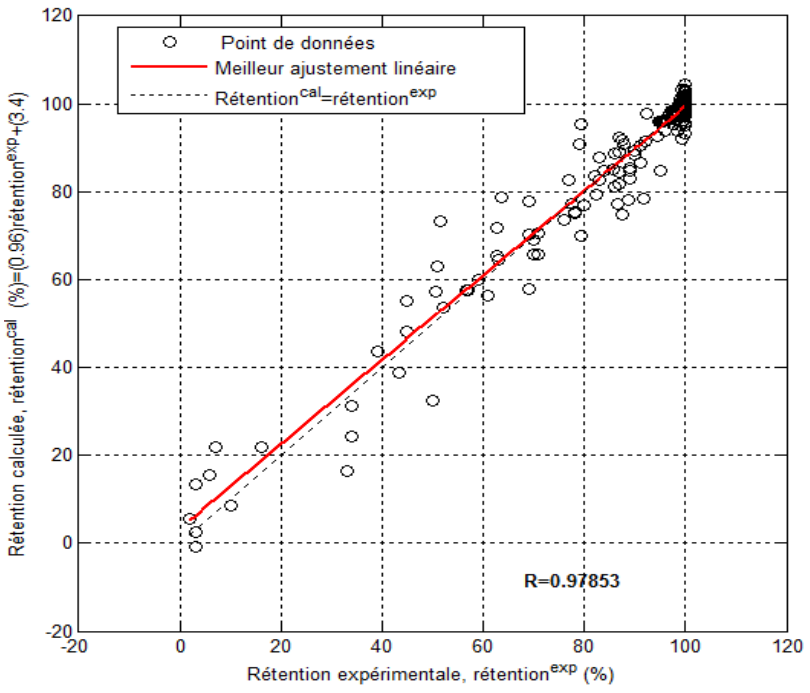
Figure III.3. Schéma du RNM.

III.4. Résultats et discussions

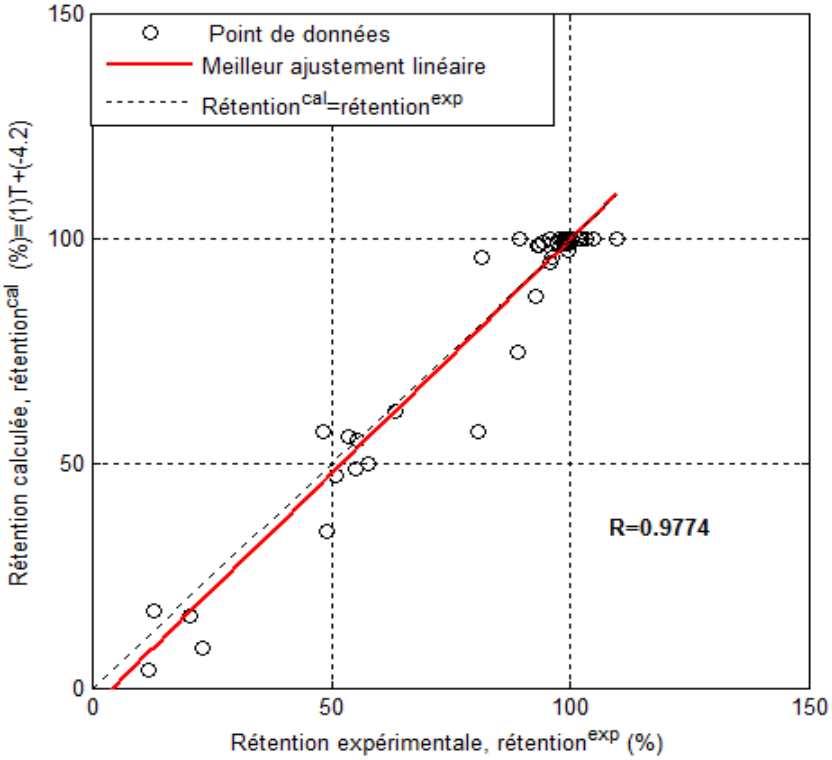
III.4.1. Performances des modèles RNI et RNM

Le pouvoir de prédiction d'un tel modèle peut être estimé par le coefficient de corrélation *R* calculé selon (Équation III.1), une valeur de *R* supérieure à 0.5 est généralement considérée comme satisfaisante, une valeur supérieure à 0.9 est excellente (Golbraikh et Tropsha 2002).

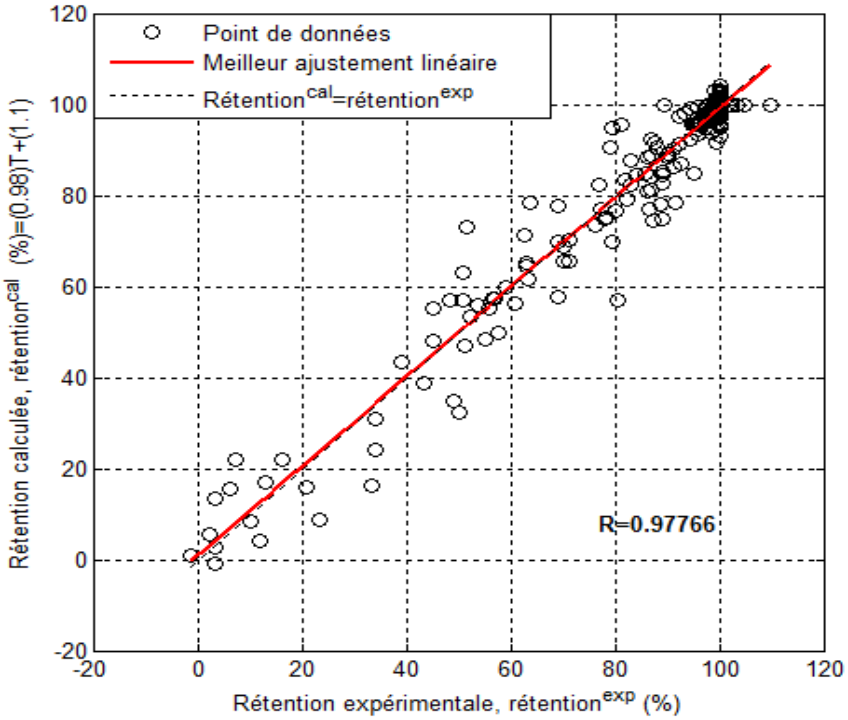
La figure III.4 montre les courbes de régression linéaire des taux de rétentions calculés par le premier modèle neuronal "RNS" optimisé. Des vecteurs de régression approchant de l'idéal ont été obtenus ([α, β, R] = [0.9602, 3.3729, 0.9785] pour la phase d'apprentissage ; [α, β, R] = [1.0419, -4.1748, 0.9774] pour la phase de test" et [α, β, R] = [0.9840, 1.1483, 0.9776] pour la base totale"). Les coefficients des corrélations sont généralement considérés comme excellents ($0.90 \leq R \leq 1.00$) pour la phase d'apprentissage, la phase de test et la phase totale. Ce qui montre une bonne robustesse du premier modèle neuronal "RNS" établi et la possibilité de la prédiction des différents paramètres qui caractérisent la rétention des molécules organiques lors d'OI/NF.



(a)



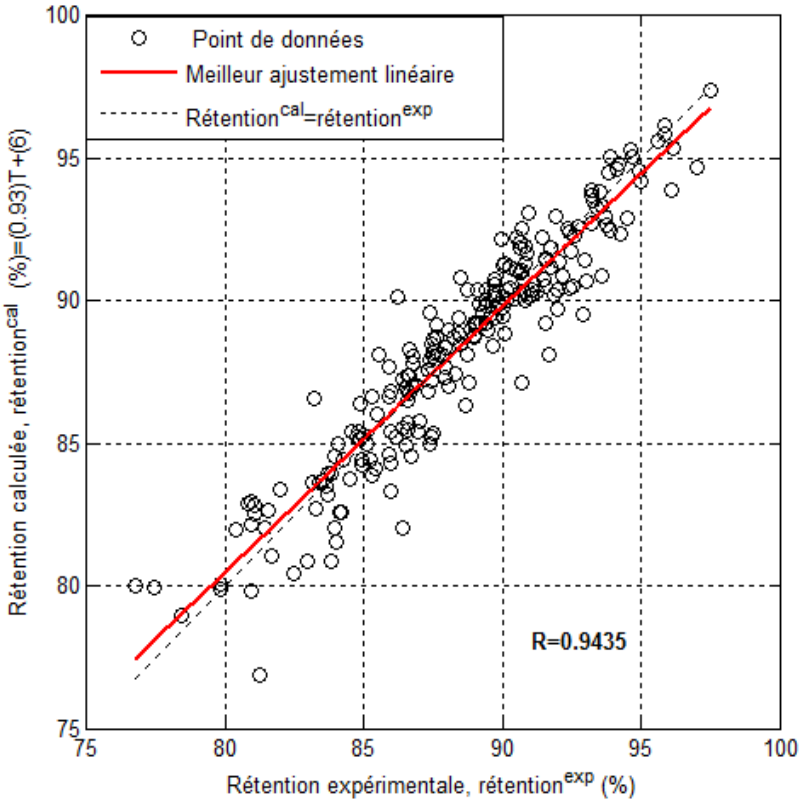
(b)



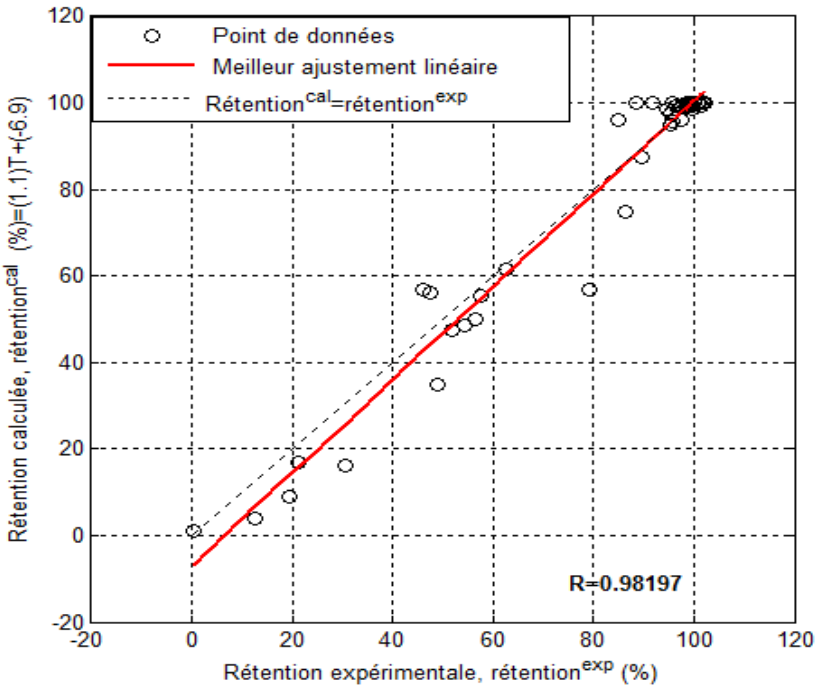
(c)

Figure III.4. Comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par le RNS : (a) la phase d'apprentissage, (b) la phase de test, (c) la phase total

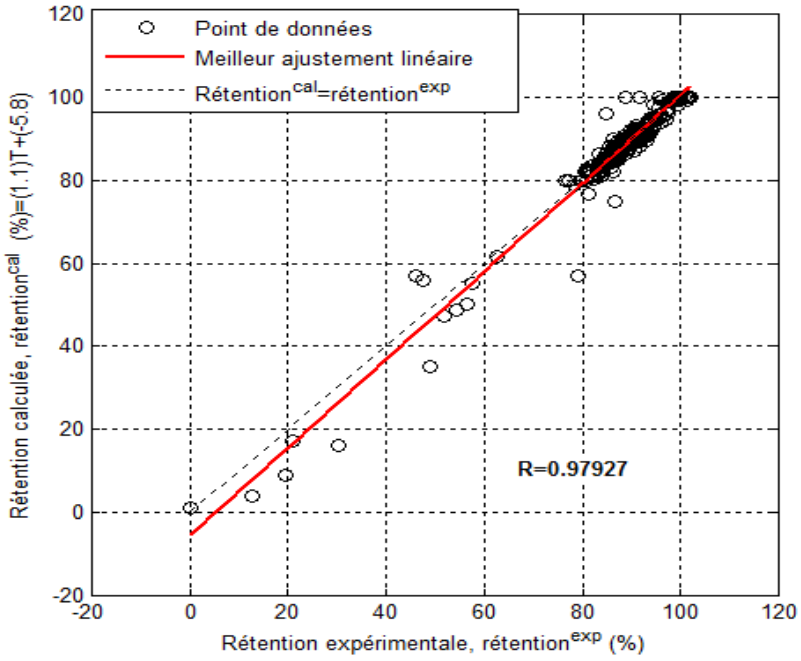
Pour évaluer la performance du deuxième modèle neuronal "RNM" obtenu, la représentation graphique des valeurs prédites de la rétention en fonction des valeurs expérimentales pour les ensembles d'apprentissage, de test et totale obtenues est donnée sur la figure III.5. Elle montre les courbes de régression linéaire de deuxième modèle neuronal avec des vecteurs de régression approchant l'idéal ([α, β, R] = [0.9308, 6.0369, 0.9435] "phase d'apprentissage" ; [[α, β, R] = [1.0739, -6.9465, 0.9820] "phase de test" et [α, β, R] = [1.0641, -5.8298, 0.9792] "phase totale"). Les coefficients des corrélations sont généralement considérés comme excellents ($0.90 \leq R \leq 1.00$) pour la phase d'apprentissage, la phase de test et la phase totale, ce qu'implique une bonne robustesse du deuxième modèle neuronal "RNM" établi et la possibilité de la prédiction des différents paramètres qui caractérisent la rétention des molécules organiques lors d'OI/NF.



(a)



(b)



(c)

Figure III.5. Comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par RNM : (a) la phase d'apprentissage, (b) la phase de test, (c) la phase totale.

La performance de chaque modèle a été évaluée en terme de coefficient de corrélation (*R*) et la racine de l'erreur quadratique moyenne (*REQM*). La *REQM* a été utilisée pour déterminer

l'erreur de modélisation entre les valeurs expérimentales et calculées. La racine de l'erreur quadratique moyenne est définie comme suit (Khaouane 2013 ; Hemmati-Sarapardeh et *al*. 2014 ; Faisal et *al*. 2015 ; Kolluri et *al*. 2015) :

$$REQM = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_{i,exp}-y_{i,cal})^2}{n}} \quad \text{(III.5)}$$

Où n est le nombre total de points de données, $y_{i,exp}$ est la valeur expérimentale et $y_{i,cal}$ représente la valeur calculée à partir du modèle RN.

Les vecteurs de régression linéaire pour les deux modèles neuronaux (RNS, RNM) sont présentés dans le tableau III.3. Ceci montre que les paramètres de la régression les moins favorables sont ceux obtenus par RNS. Il est prouvé que l'approche neuronale proposée donne des résultats satisfaisants avec des valeurs de vecteur de régression approchant à l'idéal.

Table III.2. Vecteurs de régression linéaire issue de l'équation linéaire : [équation linéaire: $y^{cal} = ay^{exp} + \beta, \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{1}$(pente),$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$ (ordonnée à l'origine),$\boldsymbol{R}$=**1**(coefficient de corrélation)] et la racine de l'erreur quadratique moyenne (***REQM***)

		A	β	R	REQM
RNS	Phase d'apprentissage	0.9602	3.3729	0.9785	4.4903
	Phase de test	1.0419	-4.1748	0.9774	6.2984
	Total	0.9840	1.1483	0.9776	4.9012
RNM	Phase d'apprentissage	0.9308	6.0369	0.9435	1.3266
	Phase de test	1.0739	-6.9465	0.9820	5.9043
	Total	1.0641	-5.8238	0.97927	2.8825

La comparaison entre les deux modèles neuronaux pour chaque phase (apprentissage, test et totale) en termes de la *REQM* est présentée sur le tableau III.2, elle montre que le modèle neuronal " RNM" a donné des erreurs plus faibles que le modèle (RNS). Cette comparaison indique que le (RNM) possède une capacité de modélisation élevée par rapport au modèle (RNS).

III.4.2. Comparaison entre les modèles RNS et RNM

Le tableau III.3 résume les valeurs prisent par les erreurs calculées : la Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne (en anglais Root Mean Squared Error *(RMSE)*, l'Erreur Absolue Moyenne (en anglais Mean Absolute Error (*MAE*)) et l'Erreur Standard de Prédiction (en anglais Standard

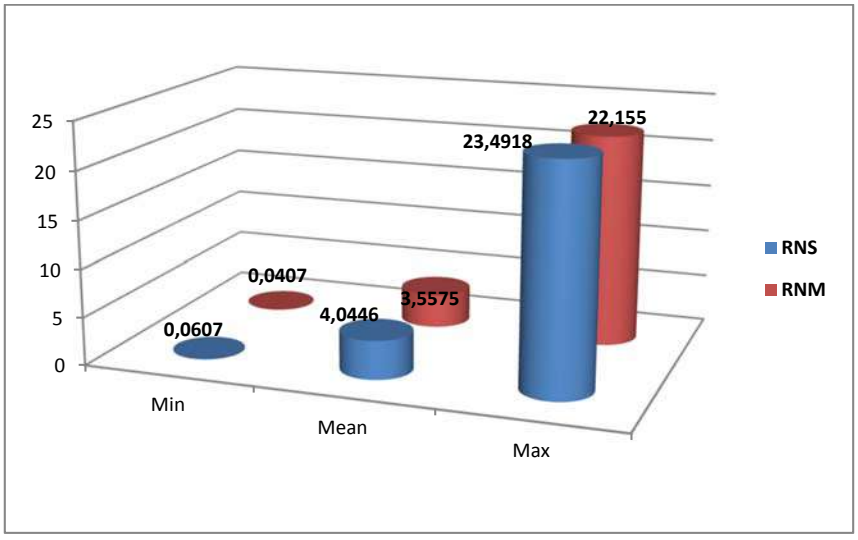
Error of Predection (*SPE*)) qu'on a calculées a partir des équations III.5, III.6 et III.7 respectivement :

$$EAM=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|(y_{i,exp}-y_{i,cal})\right| \quad \text{(III.6)}$$

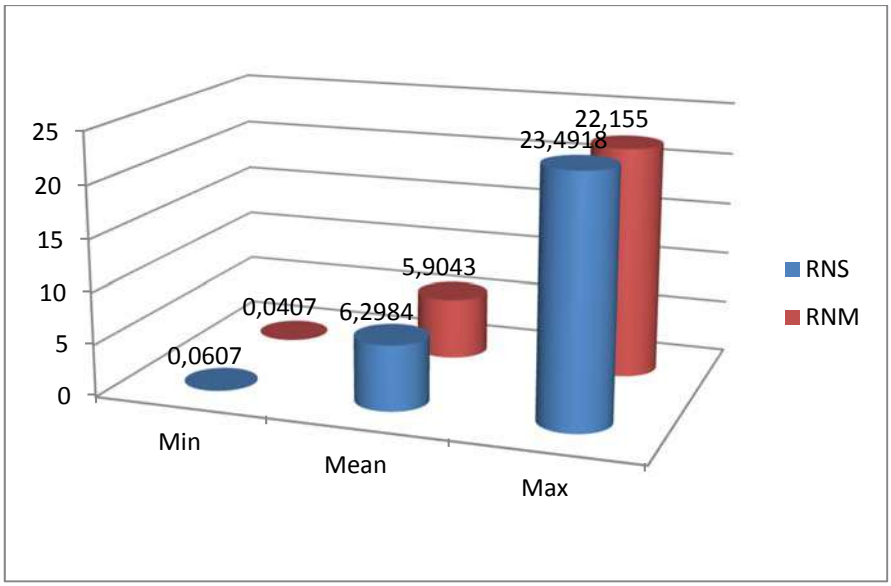
$$ESP(\%)=\frac{REQM}{Y_e}*100 \quad \text{(III.7)}$$

Tableau III.3. Les erreurs calculées pour la valeur moyenne, max, min de la base d'apprentissage, test et totale pour les deux modèles neuronaux (RNS, RNM)

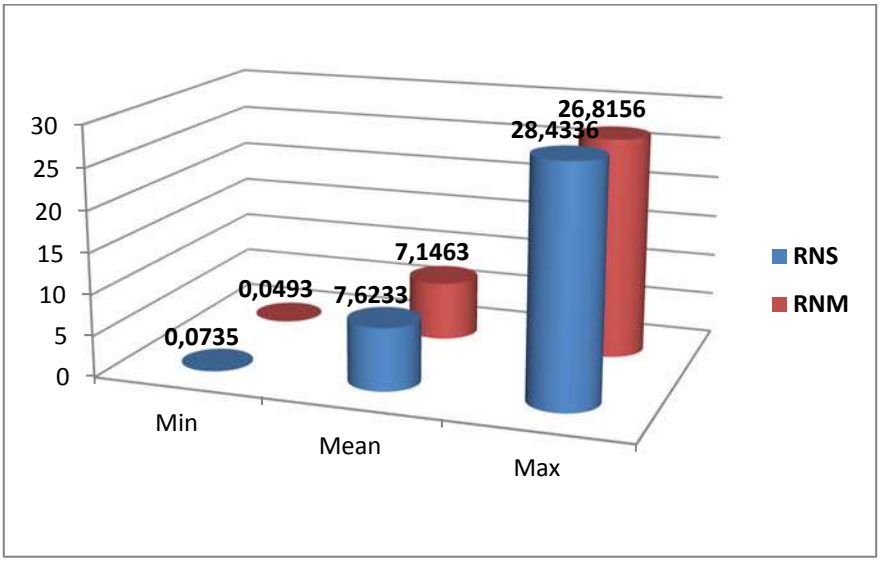
		EAM			*REQM*			*ESP*		
		Min	Mean	Max	Min	Mean	Max	Min	Mean	Max
RNS	Apprentissage	0.012	2.626	21.849	0.012	4.493	21.849	0.016	5.092	24.795
	Test	0.067	4.046	23.498	0.067	6.294	23.498	0.075	7.623	28.436
	Total	0.012	2.9095	23.4918	0.0102	4.9012	23.4918	0.0117	5.6320	26.9947
RNM	Apprentissage	0.0049	1.0067	4.3380	0.0049	1.3266	4.3380	0.0055	1.5020	4.9118
	Test	0.0407	3.5575	22.1550	0.0407	5.9043	22.1550	0.0493	7.1463	26.8156
	Total	0.0049	1.5114	22.1550	0.0049	2.8825	22.1550	0.0056	3.3059	25.4099



(a)



(b)



(c)

Figure III.6. Comparaison des résultats de la base totale entre le modèle de RNS et le modèle RNM: (a) *EAM*, (b) *REQM*, (c) *ESP*.

Pour comparer à la fois les performances et la qualité de la modélisation des deux modèles obtenus dans ce travail (RNS et RNM), une évaluation statistique est donnée dans les tableaux III.2-III.3 et la figure III.6. Il est clair que la prédiction déterminée par le modèle RNM est bien meilleure que celle fournie par le modèle RNS.

III. 5. Conclusion

Le but ce travail était d'utiliser les réseaux neuronaux multiples (*RNM*) dans la modélisation des rejets des composés organique chargés et non chargés au cours des processus de nanofiltration et d'osmose inverse. Une base de données totale de 278 rejets et 23 composés organiques ont été recueillis dans la littérature pour construire le modèle multiple (*RNM)*. La base d'apprentissage (223 points de données) est ré-échantillonné à l'aide d'une technique de bootsrap pour former différents ensembles de données de formation. Pour chaque base, un modèle individuelle (*RNI*) est construit, formé et testé. Les résultats prévus obtenus à partir des modèles (*RNI*) développés sont ensuite combinés par une moyenne simple. Un très bon accord entre les rejets prédits et expérimentaux pour le modèle *RNM* a été obtenu. On a fait la comparaison entre le RNM et le RNS en termes d'erreurs et en termes des coefficients de regressions. Le modèle *(RNM)* développé dans ce travail a donné des erreurs plus faibles que le modèle (*RNS*). Les erreurs absolues moyennes (*EAM*) de test étaient de 4.046 pour le *RNS* et de 3.5575 pour le *RNM*. Les racines des erreurs quadratiques moyennes (*REQM*) étaient de 6.294 pour le *RNS*, 5.9043 pour le *RNM*. Les Erreurs Standard de Prédiction (*ESP*) obtenues sont de 7.623 pour le *RNS* et 7.1463 pour le *RNM*. Les coefficients de corrélation (*R*) sont de 0.9820 pour le RNM et 0.9774 pour le RNS. Cette comparaison indique que le (*RNM*) possède une capacité de modélisation élevée par rapport au modèle (*RNS*).

Conclusion générale et perspectives

Le but ce travail était d'utiliser les réseaux neuronaux multiples (*RNM*) dans la modélisation des rejets des composés organique chargés et non chargés au cours des processus de nanofiltration et d'osmose inverse.

Une base de données totale de 278 rejets et 23 composés organiques ont été recueillis de la littérature pour construire le modèle multiple (*RNM).* La base d'apprentissage (223 points de données) est ré-échantillonnée à l'aide d'une technique de bootsrap pour former différents ensembles de données de formation. Pour chaque base, un modèle individuell (*RNI*) est construit, formé et testé. Les résultats obtenus à partir des modèles (*RNI*) développés ont etex ensuite combinés par une moyenne simple.

Un très bon accord entre les rejets prédits et expérimentaux pour le modèle *RNM* a été obtenu. On a fait la comparaison entre le RNM et le RNS en termes d'erreurs et en termes des coefficients de regressions. Le modèle *(RNM)* développé dans ce travail a donné des erreurs plus faibles que le modèle (*RNS*). Les erreurs absolues moyennes (*EAM*) de test étaient de 4.046 pour le *RNS* et de 3.5575 pour le *RNM*. Les racines des erreurs quadratiques moyennes (*REQM*) étaient de 6.294 pour le *RNS*, 5.9043 pour le *RNM*. Les Erreurs Standard de Prédiction (*ESP*) obtenues sont de 7.623 pour le *RNS* et 7.1463 pour le *RNM.* Les coefficients de corrélation (*R*) sont de 0.9820 pour le RNM et 0.9774 pour le RNS. Cette comparaison indique que le (*RNM*) possède une capacité de modélisation élevée par rapport au modèle (*RNS*).

À la lumière des résultats obtenus, on peut tirer les conclusions suivantes :

- Les réseaux de neurones sont des outils statistiques, qui permettent d'ajuster des fonctions non linéaires très générales à des ensembles de points comme toute méthode statistique ;
- Les réseaux de neurones fonctionnent comme une boîte noire et les paramètres du réseau (poids et biais) n'ont pas de signification physique. L'application des réseaux neuronaux ne développe pas directement de la théorie de description du système, mais rend faisable la modélisation et la simulation des procédés d'osmose inverse et de nanofiltration ;
- Les réseaux de neurones peuvent être très robustes et performants même en présence de peu de données expérimentales à condition que ces dernières soient statistiquement bien réparties dans le domaine d'entrée du modèle neuronal, ce qui est le cas avec le plan composite centré ;

- Les formules mathématiques extraites des modèles neuronaux peuvent trouver des applications intéressantes dans la prédiction, l'optimisation et même le contrôle des procédés d'osmose inverse et de nanofiltration.
- Les RNM ont des capacités de modélisation élevée par rapport au modèle singulier RNS.

De ce travail eté émergé de nombreuses pistes de recherche qui feront l'objet de futur travaux.

- ✓ Les perspectives concernent plus particulièrement la modélisation de la rétention des molécules organiques par les membranes d'OI/NF, mais en utilisant d'autres indicateurs de porosité, on propose de faire une étude avec le rejet de sel SR(NaCl) et le rejet de sel SR($CaCl_2$).
- ✓ Les perspectives concernent plus particulièrement la modélisation d'autres processus (microfiltration, ultrafiltration) pour des fins de prédiction.
- ✓ Nous pouvons aussi étendre l'idée de ce travail à d'autres techniques récentes de modélisation et d'optimisation telles que les approches de modélisation types "boîte grise" et d'autres méta-heuristiques d'optimisation (simulated annealing, bee colony optimization, ...).

Références Bibliographiques

Absar B. (2012)."Modélisation et simulation de systems de dessalement d'eau de mer par osmoses inverse et engeries renouvelables". Thése de Doctorat,université Mostaganeme, Algérie.

Agenson K. O., Oh J. I. et Urase T. (2003). "Retention of a wide variety of organic pollutants by different nanofiltration/reverse osmosis membranes : controlling parameters of process". Journal of Membrane Science. **225** (1-2): 91-103.

Aimar P. (2008)."Filtration membranaire (OI, NF, UF), Mise en oeuvre et performances". Journal 2-793.

Ammar M. Y. (2007). "Mise en œuvre de réseaux de neurones pour la modélisation de cinétiques réactionnelles en vue de la transposition batch/continu" .Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse. Toulouse, France.

Ammi Y., Khaouane L. et Hanini S. (2015)."Prediction of the rejection of organic compounds (neutral and ionic) by nanofiltration and reverse osmosis membranes using neural networks" .Korean Journal of Chemical Engineering 32 (11): 2300-2310.

Ammi.Y(2016). "modelisation des phenomenes de transport lors d' osmose inverse" .Thése de Doctorat, université de Médéa. Algérie.

Amy G.L., Heijman S.G.J., Verliefde A.R.D., Cornelissen E.R., et Dijk J.C. (2007). "Influence of natural organic matter (NOM) fouling on the removal of pharmaceuticals by nano filtration and activated carbon filtration" .Water Science Technologie 7: 17–23.

Annane K. (2015). "Extraction et transport des ions de cadium (II) par membranes d'affinité dans des dispositifs microfluidiques". Thèse de doctorat. Université de Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou. Algérie.

Aptel Ph. et Buckley C. A. (1996). "Categories of membrane operations, In : Water Treatment Membrane Process ".Chapitre 2, McGraw-Hill : 24.

Ardhaoui M., Cherichi H., Ognier S. et Ghoul M. (2003)."Caractérisation des propriétés de surface des membranes de nanofiltration: développement d'un outil d'aide à la décision". Récents Progrès en Génie des Procédés 90 (SFGP 2003, St Nazaire) : 32-39.

Audinos R., Isoard P., Glossaire des termes techniques des procédés à membrane, Société française de filtration, 1986, p 142.

Axel Ettori (2011)," Vieillissement chimique de membranes d'osmose inverse". thèse de doctorat de l'université de Toulouse iii - Paul Sabatier, France.

Azizi A. (2011)."Modélisation des phénomènes de transports lors de l'osmose inverse: Application aux molécules inorganiques et organiques en amont et en aval d'une unité de production pharmaceutique". Mémoire de Magister, université de Médéa, Algérie.

.

Baker R. W. (2004). "Memebrane Technology and application". 2nd ed, John Wiley and Sons Chichester : 287-295.

Bellona C., Drewes J. E., Xu P. et Amy G. (2004). "Factors affecting the rejection of organic solutes during NF/RO treatment - a literature review". Water Research. **38** (12) : 2795-2809.

Bellona C. et Drewes J. E. (2005). "The role of membrane surface charge and solute physico-chemical properties in the rejection of organic acids by NF membranes". Journal of Membrane Science. **249** (1) : 227-234.

Berg P., Hagmeyer G. et Gimbel R. (1997). "Removal of pesticides and other micropollutants by nanofiltration" .Desalination 113: 205-208.

Bilstad T. (1995). "Nitrogen separation from domestic wastewater by reverse osmosis". Journal of Membrane Science.**102** : 93-10.

Bishop, C(1991). Improving the generalisation properties of radial basisfunction neural networks.NeuralComput.**13**,579–588**.**

Bishop C. M. (1995). "Neural networks for pattern recognition". Oxford University Press, New York, USA.

Bouamar M. et Ladjal M. (**2007)**. "Système multicapteur utilisant les réseaux de neurones artificiels pour la surveillance des eaux potables". 4th International Conference : Sciences of Electronic, Technologies of Information and Telecommunications March. Tunisia : 25-29.

Bouranene, S. (2008). "Etude de la rétention de soluté neutres et ioniques par des membranes de nanofiltration". Thèse de doctorat. Université de Franche-Comté. École Doctorale Louis Pasteur. Besançon. France.

Brun J-P (1989) . Procédés de séparation par membrane, p 88-136.

Cardew et Le. (1998). "Membrane Processes: A Technology Guide" .The Royal Society of Chemistry, Cambridge.

Chabane M. (2015)."Étude de la résistance au colmatage et de la rétention des composes toxiques par membranes". Thèse de doctorat. Université d'Aboubekr Belkaid de Tlemcen. Tlemcen. Algérie.

Chamekh A. (2007). "Optimisation des procédés de mise en forme par les réseaux de neurones artificiels" .Thèse de Doctorat, Université d'Angers. Angers, France.

Chikhi M. (2008). "Etude de la compléxation des cations métalliques en vue de leur séparation par un procédé membranaire". Thèse de doctorat. Université Mentouri. Constantine. Algérie.

Childress A. E. et Elimelech M. (1996). "Effect of solution chemistry on the surface charge of polymeric reverse osmosis and nanofiltration membranes". Journal of Membrane Science. **119** (2) : 253-268.

Childress A. E. et Desmukh S. S. (1998). "Effects of humic substances and anionic surfactants on the surface charge and performance of reverse osmosis membranes". Desalination. **118** (1-3) : 167-174.

Conell, D. W. **(1989)**. "Bioaccumulation of Xenobiotic Compounds". CRC Press : 75–110.

Connell D. W. (1990). "Bioaccumulation of Xenobiotic Compounds". CRC Press. Boca Raton, FL : 75-110.

Cornelissen E. R., Sijbers P., van den Berkmortel H., Koning J., De Wit A., De Nil F. et Van Impe J. F.,(2001), Reuse of leachate waste-water using Membior technology and reverse osmosis, Membrane Technology 2001 (136): 6-9.

Dames M. (2005). "Gestion de procèdes discontinus : Méthodologie de modélisation et d'optimisation d'opérations de dispersion liquide-liquide en cuve agitée". Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse. Toulouse, France.

Davalo É. et Naïm P. (1989). "Des réseaux de neurones". Eyrolles, Paris, France.

Dreyfus G., Martinez J. M., Samuelides M., Gordon M. B., Badran F., Thiria S. et Hérault L. (2002). "Réseaux de neurones : Méthodologie et applications". Éditions Eyrolles, Paris : 408.

Dreyfus G. (2008). "Réseaux de neurones: Méthodologie et applications" .Eyrolles, Paris, France.

Demuth H., Beale M. et Hagan M., **(2010),** Neural Network Toolbox™ 6, User's Guide, Copyright , by The MathWorks, Inc.

Desmukh S. S. et Childress A. E. (2001). "Zeta potential of commercial RO membranes : influence of source water type and chemistry". Desalination. **140** (1) : 87-95.

Dolar D., Ana V., Danijela A. et Kresimir., K. (2011). "Effect of water matrices on removal of veterinary pharmaceuticals by nanofiltration and reverse osmosis membranes". Journal of Environmental Sciences. **23** (8) : 1299–1307.

Dolar D., Ignjatic Zokic T., Kosutic K., Asperger D. et Mutavdzic Pavlovic D. (2012). "RO/NF membrane treatment of veterinary pharmaceutical wastewater: comparison of results obtained on a laboratory and a pilot scale Environmental science and pollution". Research International.**19**(4):1033-1042.

Dolar D., Zokić T. I., Košutić K., Periša M. et Babić S. (2013)."Photolysis of enrofloxacin and removal of its photodegradation products from water by reverse osmosis and nanofiltration membranes". Separation and PurificationTechnology. **115** (13) : 1-8.

Faisal A., Cho H., Kim J., Seong N. et Yeo Y. (2015). "A real-time model based on least squares support vector machines and output bias update for the prediction of NO x emission from coal-fired power plant". Korean Journal of Chemical Engineering. **32** (6) : 1029-1036.

Fell C. J. D. **(1995)**. "Reverse Osmosis in : Membrane Separations Technology. Principles and applications". (eds . R. D.Noble and S.A. Stern). New York, Elsevier : 113-142.

Ferrarini R., Versari A., Galassi S., A preliminary comparison between nanofiltration and reverse osmosis membranes for grape juice treatment, Journal of Food Engineering 50, 113-116, (2001).

Galambos I., Molina J. M., Jaray P., Vatai G. et Bekassy-Molnar E. (2004). "High organic content industrial wastewater treatment by membrane filtration" Desalination 162: 117-120.

Girard B. et Fukumoto LR. (2000). "Membrane processing of fruit juices and beverages". A review. Critical Reviews in Food Science and Nutrition 40 : 91–157.

Golbraikh A., Tropsha A. (2002). " Beware of q2! " J. Mol. Graph. Model. **2** : 269-276.

Gur-Reznik S., Koren-Menashe I., Heller-Grossman L., Rufel R. et Dosoretz.C. (2011). "Influence of seasonal and operating conditions on the rejection of pharmaceutical active compounds by RO and NF membranes" .Desalination 277: 250–256.

Guu Y.-K., Desalination of Spent Brine from Prune Pickling Using a Nanofiltration Membrane System, Journal of Agricultural and Food Chemistry 44, 2384-2387, (1996).

Gumi T., Valiente M., Khulbe K. C., Palet C. et Matsuura T. (2003). "Characterization of activated composite membranes by solute transport, contact angle measurement, AFM and ESR". Journal of Membrane Science **212** (1-2) :123-134.

Hamadache M. (2014). "Modélisation en vue de la prédiction ou de la corrélation de l'activité toxicologique à partir de la structure moléculaire". Thèse de doctorat. Université de Médéa. Médéa. Algérie.

Hamlaoui M. L., Kherrat R., Marrakchi M., Jaffrezic-Renault N. et Walcarius A. (2002). "Development of an ammonium ISFET sensor with a polymeric membrane including zeolite". Materials Science and Engineering **21** (1-2) :25-28.

Hassoun M. H. (1995). "Fundamentals of artificial neural networks". Mit Press, Massachusetts, USA.

Hebb D. O. (1949). "The organization of behavior: A neuropsychological theory". Wiley, New York, USA.

Hemmati-Sarapardeh A., Majidi S. M. J., Mahmoudi B., Ramazani S. A. A. et Hopfield J. J. (1982). "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities". Proceedings of the National Academy of Sciences **79**(8): 2554-2558.

Hu J. Y., Ong S. L., Shan J. H., Kang J. B. et Ng W. J. (2003). "Treatability of organic fractions derived from secondary effluent by reverse osmosis". Water Research. **37.**

(https://www.google.dz/search) consulter le (15/04/2017).

Kaba.A .(2014) Elaboration de membrane de nanofiltration sur un support composite carbone/zéolite memoirede magister houari boumediene.Algérie.

Khaouane L. (2013). "Etude et Modélisation de la Biosynthèse des Antibiotiques à partir de Différentes Souches Productrices – Cas de Pleuromutiline". Thèse de doctorat. Université de Médéa. Médéa. Algérie

Khaldi A, souihel T. (2016) "Modélisation de la rétention des rejets pharmaceutiques lors d'osmose inverse et nanofiltration". Mémoire de Master , université de Médéa, Algérie.

Khaouane L , Ammi.Y ,Hanini.(2016). " Modeling the Retention of Organic Compounds by Nanofiltration and Reverse Osmosis Membranes Using Bootstrap Aggregated Neural Networks".Arabian Journal for Science and Engineering.

Kimura K., Toshima S., Amy G. et Watanabe Y. (2004). "Rejection of neutral endocrine disrupting compounds (EDCs) and pharmaceutical active compounds (PhACs) by RO membranes". Journal of Membrane Science 245 (1–2): 71–78.

Kiso Y., Kltao T., Jinnob K. et Miyae M. (1992)."The effects of molecular width on permeation of organic solute through cellulose acetate reverse osmosis membranes". Journal of Membrane Science. **74** : 95-103.

Kiso Y., Nishimura Y., Kitao T. et Nishimura K. (2000). "Rejection properties of non-phenylic presticides with nanofiltration membranes". Journal of Membrane Science 171: 229-237.

Kiso Y., Kon T., Kitao T. et Nishimura K. (2001a). "Rejection properties of alkyl phthalates with nanofiltration membranes". Journal of Membrane Science. **182** (1-2) : 205-214.

Kiso Y., Sugiura Y., Kitao T. et Nishimura K. (2001b). "Effects of hydrophobicity and molecular size on rejection of aromatic pesticides with nanofiltration membranes". Journal of Membrane Science. **192** : 1–10.

Kiso Y., Muroshige K., Oguchi T., Yamada T., Hhirose M., Ohara T. et Shintani T. (2010). "Effect of molecular shape on rejection of uncharged organic compounds by nanofiltration membranes and on calculated pore radii". Journal of Membrane Science. **358** (1-2) : 101–113.

Kolluri S., Esfahani I., Garikiparthy P. et Yoo C. (2015). "Evaluation of multivariate statistical analyses for monitoring and prediction of processes in an seawater reverse osmosis desalination plant". Korean Journal of Chemical Engineering. **32** (8) : 1486-1497.

Kosutic K., Kastelan-Kunst L., Kunst B. (2000). "Porosity of some commercial reverse osmosis and nanofiltration polyamide thin-film composite membranes". Journal of Membrane Science 168 (1-2): 101-108.

Kruzlicova, D.; Mocak, J.; Balla, B.; Petka, J.; Farkova, M.; Havel,J(2009).Classification of Slovak white wines using artificial neural networks and discriminant techniques. Food Chem. **112**(4), 1046– 1052 (2009).

Lamouri H. (2015) "prediction de la retention des molecules organiques par les membranes d'osmose inverse et de nanofiltration en utilisant les reseaux de neurones artificiels" .Mémoire de Master , université de Médéa, Algérie.

Lanteri Y. (2009). "Transport a travers des membranes de nanofiltration : caractérisation des propriétés électronique".Thèse de doctorat. Université de Franche-COMTE. Besançon. France.

Lee, D.S.; Park, J.M (1999). Neural network modeling for on-line estimation of nutrient dynamics in a sequentially-operated batch reactor. J. Biotechnol. **75**(2–3), 229–239

Libotean D., Giralt J., Rallo R., Cohen Y., Giralta F., Ridgway H. F., Rodriguez G. et Phipps D., (2008). "Organic compounds passage through RO". Journal of Membrane Science 313 (1-2): 23–43.

Lin S.H. et Yang C.R. (2004). "Chemical and physical pretreatment of chemical mechanical polishing wastewater from semiconductor fabrication". Journal of Hazardous Materials B108:103-109.

Linares R.V., Yangali-Quintanilla V., Li Z. et Amy G. (2011). "Rejection of micropollutants by clean and fouled forward osmosis membrane". Water Research. 45 (20) : 6737 -6744.

MacKay, D.J.C(1992).: Bayesian interpolation. Neural Comput.4, 415– 447 (1992).

Malleviale J., Odendaal P.E. et Wiesner M.R. (1996). "Water treatment membrane

processes".McGraw-Hill, New York, USA.

Maurel A., (1993), Techniques séparatives à membranes: osmose inverse, nanofiltration, ultrafiltration,microfiltration tangentielle – Considérations théoriques, Techniques de l'Ingénieur, 1-24.

Minsky M. L. et Papert S. (1969). "Perceptrons: An introduction to computational geometry". MIT Press, Massachusetts, USA.

Mohammadi A (2014). "Experimental measurement and modeling of saturated reservoir oil viscosity". Korean Journal of Chemical Engineering.**31** (7) : 1253-1264.

Moody J. et Darken C. J. (1989). "Fast learning in networks of locally-tuned processing units" .Neural computation **1**(2): 281 – 294.

Mulder M. (1996). "Basic principles of membrane technology". Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

Nachad .A(2009). élaboration d'une membrane de filtration d'eau a base de polyéthylène basse densité et de gypse de bouzggaia Mémoire de Magister , université De Hassiba Benbouali de chlef. Algérie.

Norberg D., Hong S., Taylor J. et Zhao Y. (2007). "Surface characterization and performance evaluation of commercial fouling resistant low-pressure RO membranes". Desalination. **202** (1-3) : 45-52.

Ozaki H. et Li H. (2002). "Rejection of organic compounds by ultra-low pressure reverse osmosis membrane". Water Research. **36** (1) : 123-130.

Padilla A.P., et Tavani E.L. (1999). "Treatment of an industrial effluent by reverse osmosis".Desalination129(1–3),219–226.

Pontié M. et coll. (2001). "Les techniques séparatives à membranes, Théorie, applications et perspectives". Paris : Union Internationale pour les applications de l'électricité : 212.

Rumelhart D. E. et McClelland J. L. (1986). "Parallel distributed processing: Explorations in the microstructure of cognition. Foundations". Mit Press, Massachusetts, USA.

Sadmani A. H. M. A., Andrews R. C. et Bagley M. D. (2014a). "Impact of natural water colloids and cations on the rejection of pharmaceutically active and endocrine disrupting compounds by nanofiltaration". Journal of Membrane Science. **450** : 272-281.

Sadmani A. H. M. A., Andrews R.C. et Bagley M. D. (2014b)."Nanofiltration of pharmaceutically active and endocrine disrupting compounds as a function of compound interactions with DOM fractions and cations in natural water". Separation and Purification Technology. **122** : 462–471.

Sagne C. (2008). "Etude des mécanismes de transfert de molécules organiques en osmose inverse". Thèse de doctorat.École nationale supérieure de chimie de Montpellier. Montpellier. France.

Santos J. L. C., de Beukelaar P., Vankelecom I. F. J., Velizarov S. et Crespo J. G. (2006). "Effect of solute geometry and orientation on the rejection of uncharged compounds by nanofiltration". Separation and Purification Technology. **50**(1) : 122–131.

Schäfer A. I., Nghiem L. D. et Waite T. D. (2003). "Removal of the natural hormone estrone from aqueous solutions using nanofiltration and reverse osmosis". Environmental Science & Technology. **37** (1) : 182-188.

Sedra .T, Kausar .A, Siddiq.M.(2016). " Advances in Polymeric Nanofiltration Membrane: A Review".Polymer-Plastics Technology and Engineering.

Shahmansouri A. et Christopher B. (2013). "Application of quantitative structure property relationships (QSPRs) to predict the rejection of organic solutes by nanofiltration". Separation and Purification Technology **118**: 27–638.

Shim Y., Lee H. J., Lee S., Moon S. H. et Cho J. (2002). "Effects of natural organic matter and ion species on membrane surface charge". Environnemental Science and Technology. **36** (17) : 3864- 3871.

Silva, R.G.; Cruz, A.J.G.; Hokka, C.O(2000). Giordano, R.L.C.; Giordano, R.C.: A hybrid feedforward neural network model for the cephalosporin production process. Braz. J. Chem. Eng. **17**(4–7) ,587–598 .

Si-Moussa (2008), C.H.S.D.R.B.M.B.A.: Prediciton of high-pressure vapor liquid equilibrium of six binary systems, carbon dioxide with six esters, using an artificial neural network model. Braz. J. Chem. Eng. **25**(1), 183–199 .

Si-Moussa C. (2009). "Modélisation des équilibres de phases a pressions élevées par les réseaux de neurones artificiels".Ecole Nationale Supérieure Polytechnique. Alger, Algérie.

Sridhar, D.V. Seagrave, R.C.; Bartlett, E.B.(1996). Process modelling using stacked neural networks. AIChE J. **42**(9), 2529–2539.

Sridhar et Parasad T.G. (2002). "A combination of mechanistic and empirical models to predict growth and yield of sunflower as influenced by irrigation and moisture stress". Helia. 25:39-50.

Stone M. (1977). "An asymptotic equivalence of choice of model by cross-validation and Akaike's criterion". Journal of the Royal Statistical Society B **39**(1): 44-47.

Taheran M., Brar S. K., Verma M., SurampalliR. Y., Zhang T. C. et Valero J. R (2016). "Membrane processes for removal of pharmaceutically active compounds (PhACs) from water and wastewaters". Science of The Total Environment. **547** : 60-77.

Talbi M. L. (2011). "Analyse et traitement du signal électrocardiographique (ECG)." *Thèse de Doctorat,* Université Mentouri de Constantine. Constantine, Algérie.

Tzanakou E. M. (2000). "Supervised and unsupervised pattern recognition : Feature extraction and computational intelligence". Taylor & Francis Group, London, UK.

Urbani D., Roussel-Ragot P., Personnaz L. et Dreyfus G. (1994). "The selection of neural models of nonlinear dynamical systems by statistical tests." Neural Networks for Signal Processing [1994] IV. Proceedings of the 1994 IEEE Workshop. 6-8 septembre 1994.

Van der Bruggen B., Schaep J., Wilms D. et Vandecasteele C. (1999). "Influence of molecular size, polarity and charge on the retention of organic molecules by nanofiltration". Journal of Membrane Science. **156** (1) : 29-41.

Van der Bruggen B., Schaep J., Maes W., Wilms D. et Vandecasteele C. (1998). "Nanofiltration as a treatment method for the removal of pesticides from ground waters". Desalination. **117**: 139-147.

Van der Bruggen B., Braeken L. et Vandecasteele C. (2002b). "Evaluation of parameters describing flux decline in nanofiltration of aqueous solutions containing organic compounds". Desalination 147 (1-3): 281-288.

Verliefde A. R. D., Cornelissen E. R., Heijman S. G. J., Verberk J .Q. J. C., Amy G. L., Van der Bruggen B. et van Dijk J. C.(2008). "The role of electrostatic interactions on the rejection of organic solutes in aqueous solutions withnanofiltration". Journal of Membrane Science. **322** (1) : 52–66.

Wolpert,D.H(1992).Stacked generalization.Neural Netw.5,241–259.

Yangali-Quintanilla V., Kim T. U., Kennedy M. et Amy G. (2008). "Modeling of RO/NF membrane rejection of PhACs and organic compounds : a statistical analysis". Drinking Water Engineering and Science. **1** (1) : 7–15.

Yangali-Quintanilla V., Verliefde A., Kime T.-U., Sadmani A., Kennedy M. et Amy G. (2009a) "Artificial neural network models based on QSAR for predicting rejection of neutral organic compounds by polyamide nanofiltration and reverse osmosis membranes". Journal of Membrane Science 313: 23–43.

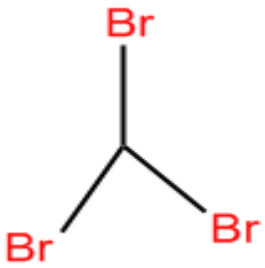
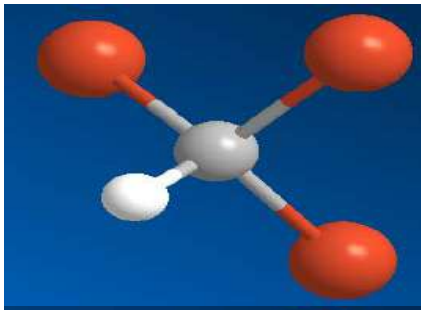
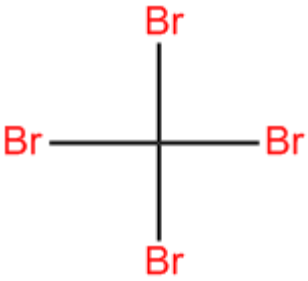
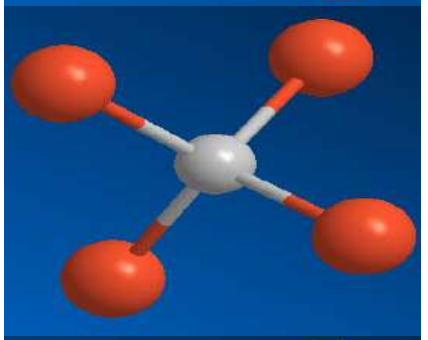
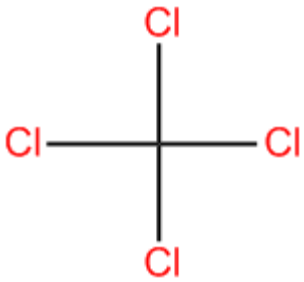
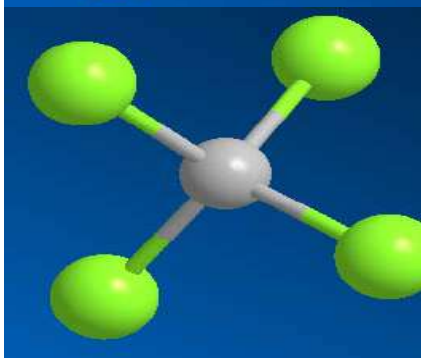
Yangali-Quintanilla V., Verliefde A., Kime T. U., Sadmani A., Kennedy M. et Amy G. (2009b). "Artificial neural network models based on QSAR for predicting rejection of neutral organic compounds by polyamide nanofiltration and reverse osmosis membranes". Journal of Memebrane Science. **342** (1-2) : 251-262.

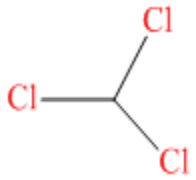
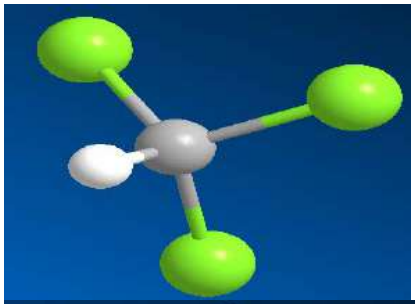
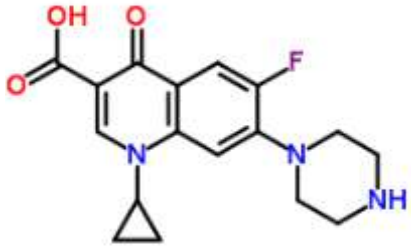
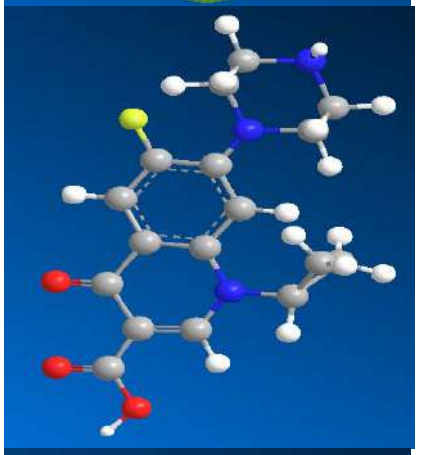
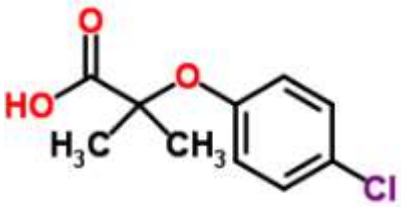
Yangali-Quintanilla V., Sadmani A., McConville M., Kennedy M. et Amy G. (2010a). "A QSAR model for predicting rejection of emerging contaminants (pharmaceuticals, endocrine disruptors) by nanofiltration membranes". Water research 44: 373 – 384.

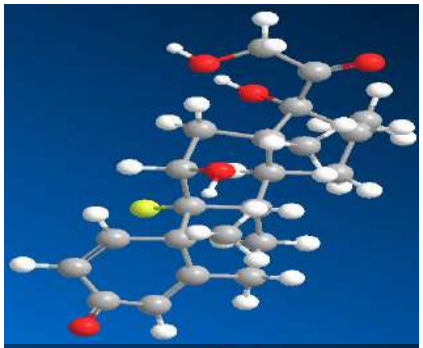
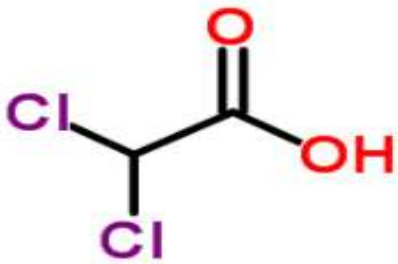
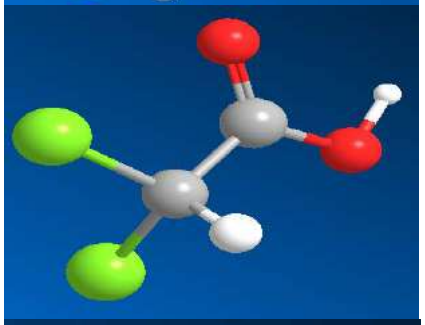
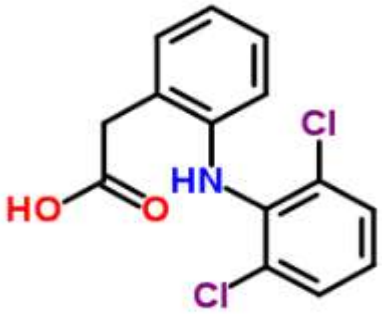
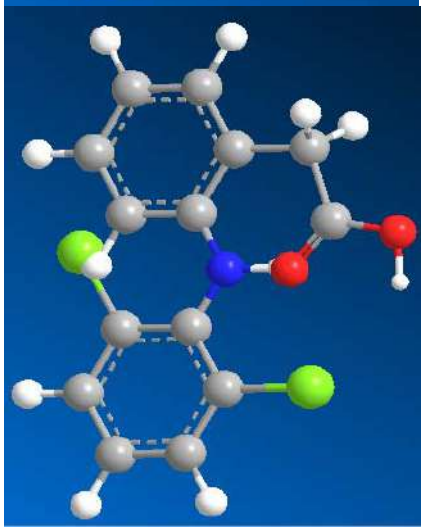
Yangali-Quintanilla V., Sadmani A., McConville M., Kennedy M. et Amy G. (2010b). "A QSAR model for predicting rejection of emerging contaminants (pharmaceuticals, endocrine disruptors) by nanofiltration membranes".Water Research. **44** (2) : 373 – 384.

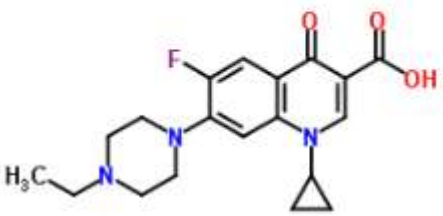
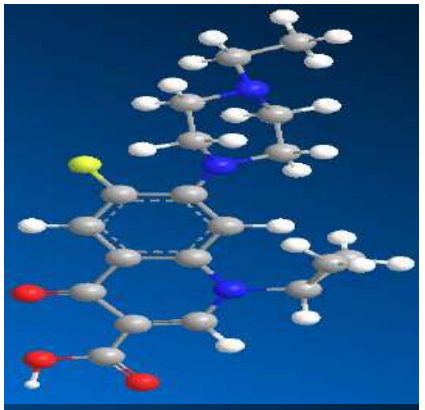
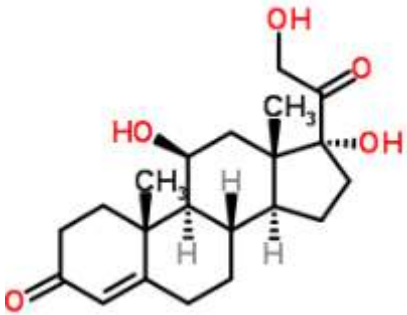
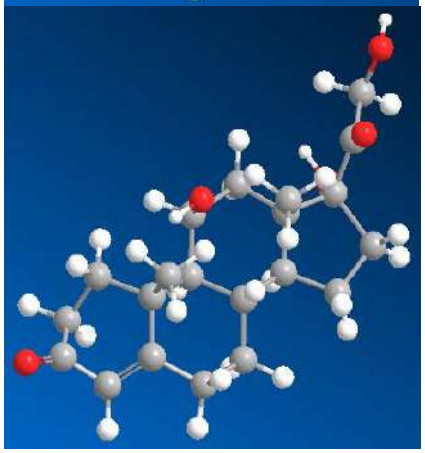
Zhang, J(2001). Developing robust neural network models by using both dynamic and static process operating data. Ind. Eng. Chem. Res. **40**, 234–241 .

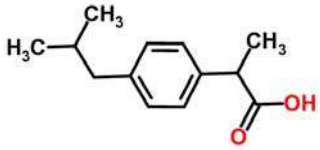
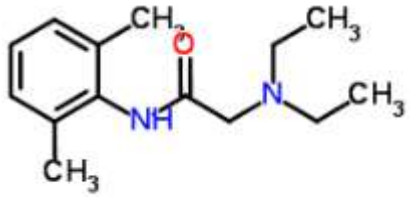
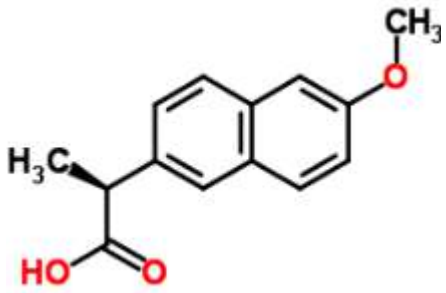
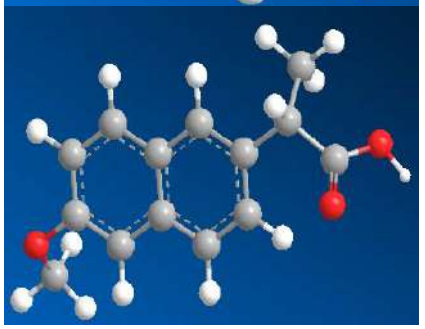
Annexe A

N^0	Nom	Formule brute	MW (g/mol)	structure chimique 2D	structure chimique 3D
01	**Bromoform**	$CHBr_3$	252.730		
02	**Carbontetrabromide**	CBr_4	331.627		
03	**Carbontetrachloride**	CCl_4	153.823		

04	**Chloroform**	$CHCl_3$	119.378		
05	**Ciprofloxacin**	$C_{17}H_{18}$	331.341		
06	**Clofibric acide**	$C_{10}H_{11}$	214.645		

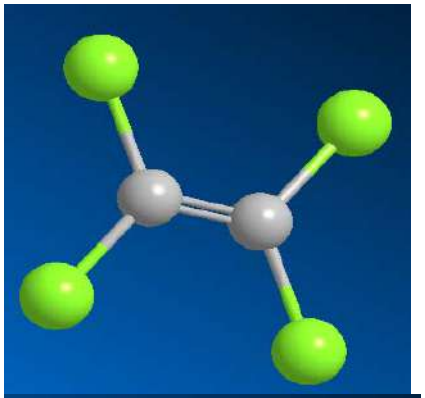
07	**Dexamethasone**	$C_{22}H_{29}$	292.461		
08	**Dichloroacetic acid**	$C_2H_2Cl_2$	128.942		
09	**Diclofenac**	$C_{14}H_{11}$	296.149		

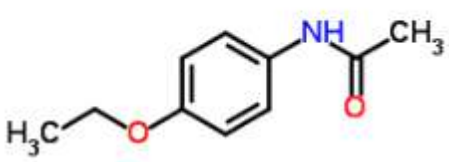
10	**Enrofloxacin**	$C_{19}H_{22}$	359.395		
11	**Febantel**	$C_{20}H_{22}$	446.477		
12	**Hydrocortisone**	$C_{21}H_{30}$	362.460		

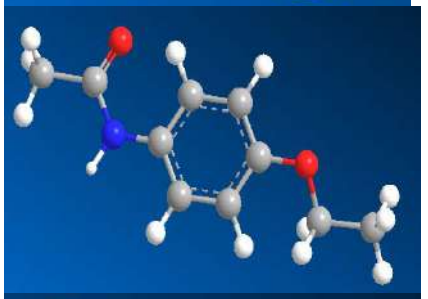
13	**Ibuprofen**	$C_{13}H_{18}$	206.281		
14	**Lidocaine**	$C_{14}H_{22}$	234.337		
15	**Naproxen**	$C_{14}H_{14}$	230.259		

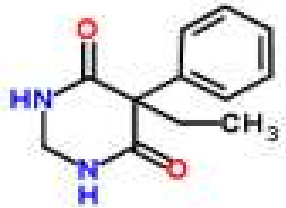
16	**Perchloroethene**	C_2Cl_4	165.833
17	**Phenacetin**	$C_{10}H_{13}$	179.216
18	**Primidone**	$C_{12}H_{14}N_2$	218.251

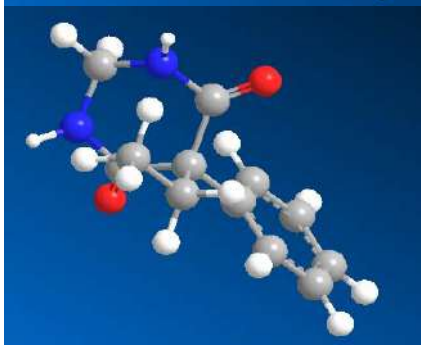


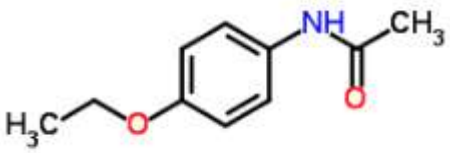
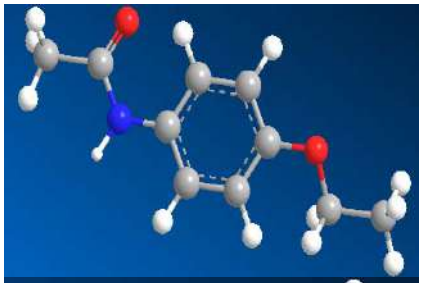
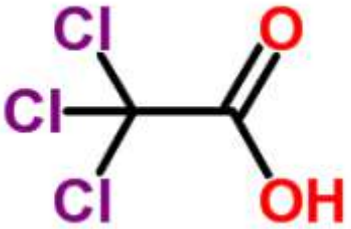
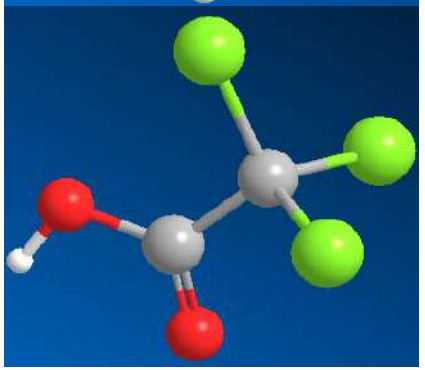


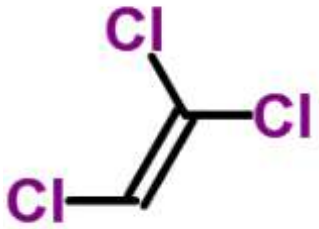
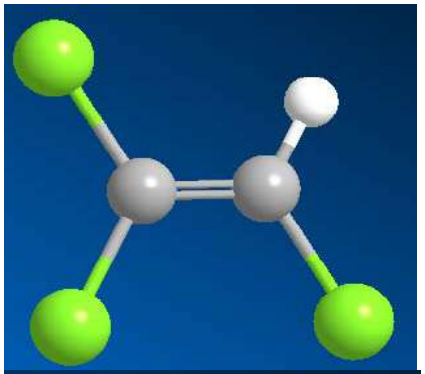
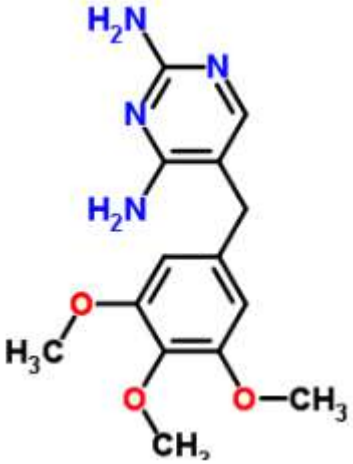
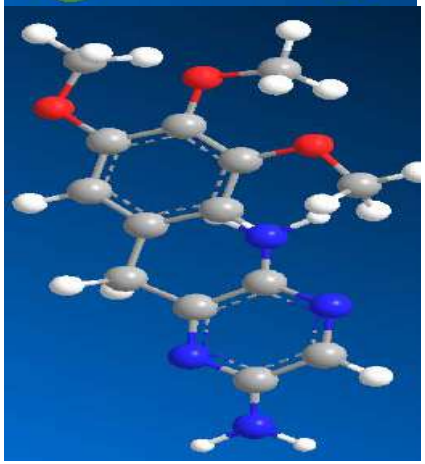








19	**Procaine**	$C_{10}H_{13}$	179.216		
20	**Sulfamethoxazole**	$C_{10}H_{11}$	253.278		
21	**Trichloroacetic acid**	C_2HCl_3	163.387		

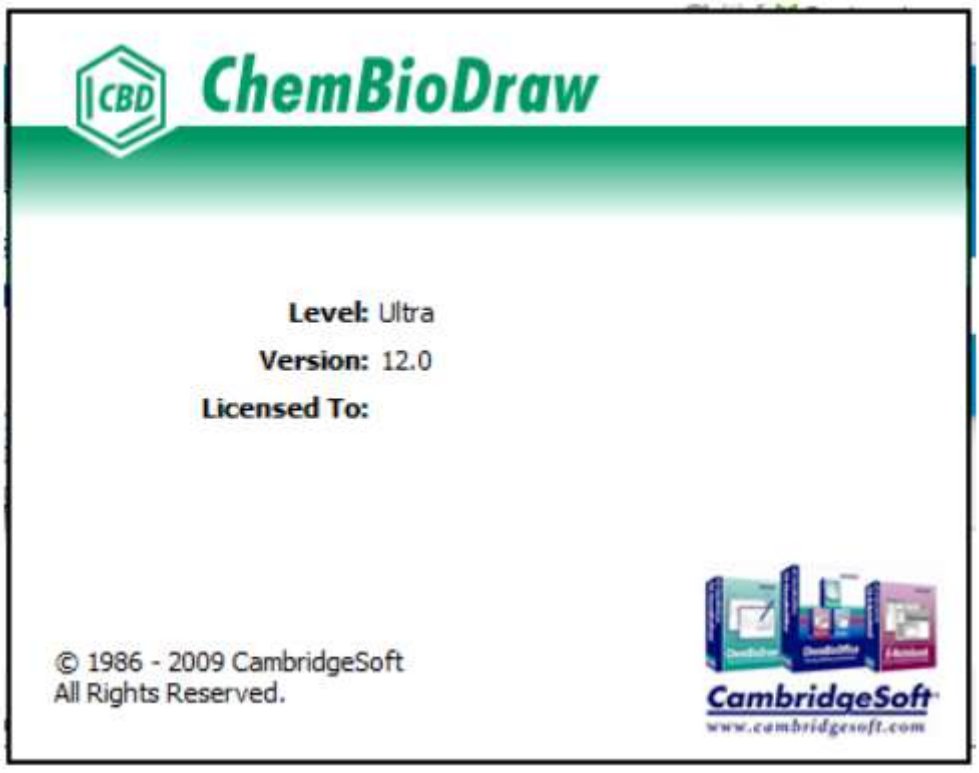
22	**Trichloroethene**	C_2HCl_3	131.388		
23	**Trimethoprim**	$C_{14}H_{18}$	290.318		

Annexe B



.

Figure 1. Capture d'écran du site intitulé Chemspider



(a)



(b)

Figure 2. Capture d'écran des logiciels : (a) ChemBioDraw et (b) ChemBio3D.

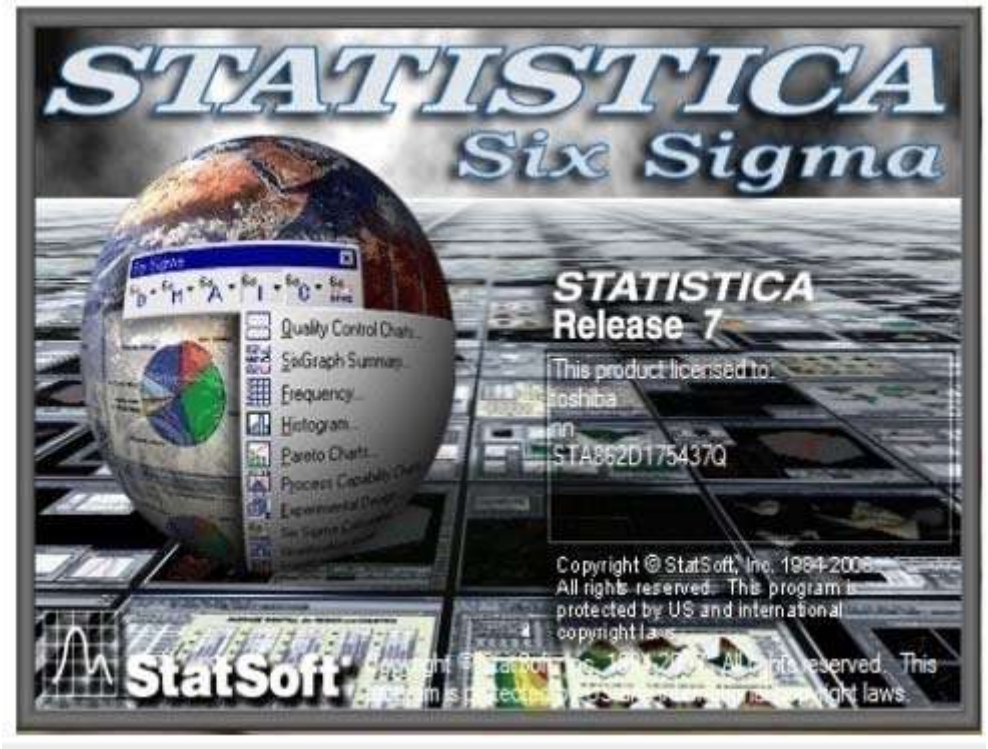


Figure 3. Capture d'écran de logiciel STATISTICA.

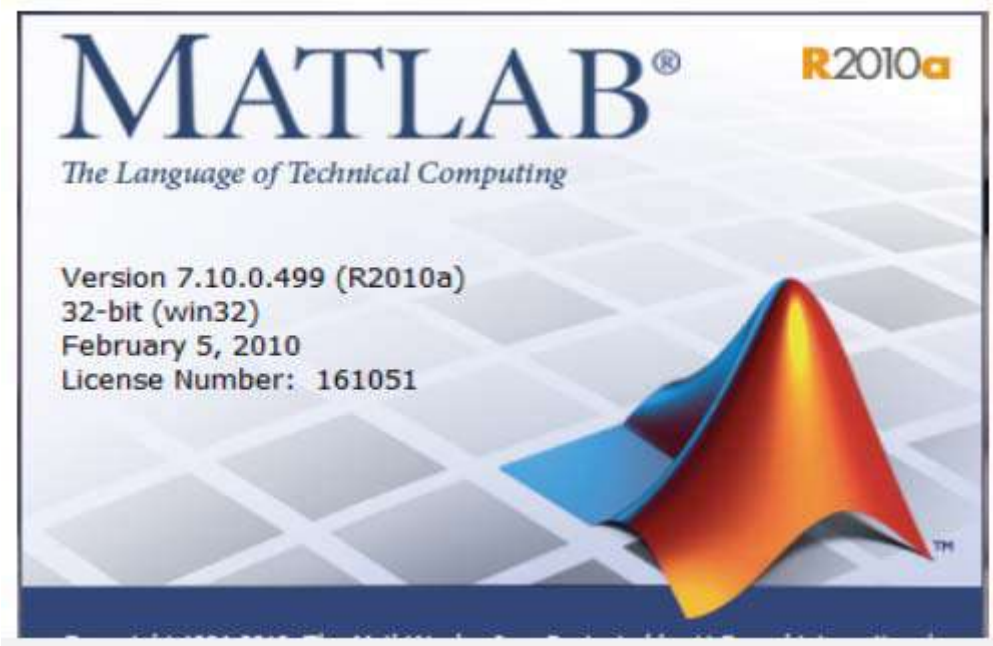


Figure 4. Capture d'écran de logiciel MATLAB 2010.