REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA



Faculté de Technologie

Mémoire de fin d'études de Master

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie Chimique

Modélisation de l'élimination du phénol à partir d'une phase aqueuse par une méthode d'intelligence artificielle

---

Présenté par

GUIR Lamria

Proposé et Dirigé par

Dr : SEDIRI Meriem

Promotion 2024



Dédicace

Je remericie en premier lieu Allah le tous puissantde m'avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir, la patience d'aller jusqu'au bout du rêve _Tous les mots dela gratitude, l'amour, le respect, à mes parents, pour tous leurs sacrifices, leurs amour, leurs tendresse, son oublier mes freres et seour, pour leurs appuis, leurs encouragements et leurs soutiens moraux. Je dédie également ce travail à tous mes estimés professeurs, depuis le primaire jusqu'à l'université. _ À ceux dont la joie est incomplète sans eux, mes amis et collègues, tous sans exception._À tous ceux qui m'ont sou avec cœur et prières, je dédie ce travail.



Remerciements

Je dois tout d'abord remercier ALLAH, pour m'avoir donné la santé et la force pour accomplir ce travail. Le grand merci à ma promotrice madame Sediri Meriem, pour m'avoir confié ce thème de recherche, pour ses précieux conseils tout au long de la réalisation de ce travail. Je tiens également à remercier les membres du jury Qu'ils m'ont accordé en acceptant de juger mon travail. Je remercie aussi l'ensemble des enseignants du département de Génie des procédés, qui ont contribué à ma formation.

ملخص: نمذجة إزالة الفينول من المحلول المائي باستخدام طريقة الذكاء الاصطناعي

يهدف هذا المشروع إلى استخدام طريقة الذكاء الاصطناعي لنمذجة عملية امتزاز الديناميكي للفينول من المحاليل المائية باستخدام راتنج NDA–100 والكربون المنشط (الفحم التجاري والفحم الطيني) كمواد ماصة تحت ظروف تجريبية مختلفة. يتضمن نموذج الشبكة العصبونية الاصطططناعية سبع (07) خلايا عصبية في طبقة الإدخال، وثمانية (08) خلايا عصبية في الطبقة الخفية الأولى، وسبعة (07) خلايا عصبية في الطبقة الخفية الثانية، وعصبون واحد فقط في طبقة الإخراج. خوارزمية التعلم المستخدمة هي الانتشار الرجعي ليفنبيرغ ماركارد.تم استخدام وظائف النقل اللوغاريتمية السينية(Logsig) والخطية (purelin) في الطبقات الخفية والطبقة الخارجية على التوالي.كشفت نتائج نمذجة الشبكة العصبية الاصطناعية عن اتفاق جيد بين البيانات التجريبية والمتوقعة، مع معامل الارتباط قدره 0.9312 وجذر التربيعي الخطأ التربيعي المتوسط قدره 0.1490. علاوة على ذلك، أظهرت المقارنة بين نموذج الشبكة العصبية الأمثل والأساليب الرياضية مثل نموذج توماس ونموذج بوهارت–آدامس أن نموذج الشبكة العصبية قدم نتائج عالية وأكثر دقة، مما يؤكد قوة نموذج الشبكة العصبية الاصطناعية في عملية الامتزاز الديناميكي للفينول من المحاليل المائية باستخدام عدة مواد ماصة وتحت شروط تجريبية مختلفة.

الكلمات المفتاحية : الامتزاز الديناميكي، الذكاء الاصطناعي، الشبكة العصبية الاصطناعية، النمذجة ، الفينول .

Résumé : Modélisation de l'élimination du phénol à partir d'une phase aqueuse par une méthode d'intelligence artificielle

Ce projet vise à utiliser une méthode d'intelligence artificielle pour modéliser le processus d'adsorption dynamique du phénol à partir d'une solution aqueuse en utilisant la résine NDA-100 et le charbon actif (charbon commercial et charbon de boue) utilisés comme des adsorbants sous différentes conditions opératoires. Le modèle de RNA comprend sept (07) neurones dans la couche d'entrée, 08 neurones dans la première couche cachée, 07 neurones dans la deuxième couche cachée et un seul dans la couche de sortie. L'algorithme d'apprentissage utilisé est de rétropropagation Levenberg-Marquardt . Les fonctions d'activations logarithmique sigmoïde (Logsig) et linéaire (purelin) ont été utilisées dans les couches cachées et la couche de sortie respectivement. Les résultats de la modélisation de réseau de neurone artificiel ont révélé un bon accord entre les données expérimentales et prédites, avec un coefficient de corrélation R de 0,9312 et une racine carrée de l'erreur quadratique moyenne REQM de 0,1490. De plus, la comparaison entre le modèle du RNA optimisé et les méthodes mathématiques telles que le modèle de Thomas et le modèle de Bohart-Adams a montré que le modèle neuronal prouvait des résultats plus élevés et plus précis, confirmant la robustesse du modèle de réseau de neurone artificiel pour prédire le processus d'adsorption dynamique du phénol à partir d'une solution aqueuse sous differents adsorbants et sous differentes conditions opératoires .

Mots clés: Adsorption dynamique, Intelligence artificielle, Réseau de neurone artificiel (RNA), Modélisation , Phénol .

Abstract : Modeling the elimination of phenol from an aqueous phase using an artificial intelligence method

This project aims to use an artificial intelligence method to model the dynamic adsorption process of phenol from aqueous solutions, using the NDA-100 resin and activated carbon (commercial and sludge carbon) as adsorbents under different opérationg conditions. The model of ANN consists of seven (07) neurons in the input layer, 08 neurons in the first hidden layer, 07 neurons in the second hidden layer, and one neuron in the output layer. The Levenberg-Marquardt backpropagation algorithm is used for learning. Logarithmic sigmoid (Logsig) and linear (purelin) activation functions are used in the hidden and output layers, respectively. The results of artificial neural network modeling revealed a good agreement between experimental and predicted data, with a correlation coefficient R of 0.9312 and a root mean square error RMSE of 0.1490. Furthermore, the comparison with mathematical methods such as the Thomas model and the Bohart-Adams model showed that the neural network model (ANN) provided high and accurate results, confirming the robustness of the artificial neural network model to predict the dynamique adsorption process of phenol from aqueou solution under various adsorbants and operationg conditions.

Keywords: Dynamic adsorption, Artificial intelligence, artificial neural network (ANN) , modeling , phenol .

TABLE DES MATIERES

Dédicaces …….. -

Remerciements…….. -

Résume ……. -

Table des matières …… -

Liste des abréviations ..... -

Nomenclatures……... -

Liste des tableaux..... -

Liste des figures..... -

INTRODUCTION GENERAL……..... **1**

CHAPITRE I : GENERALITES SUR L'ADSORPTION

I.1.Introduction ……..… **3**

I.2.Définition ……..…… **3**

I.3.Types d'adsorption……..…… **4**

I.3.1. L'adsorption physique (ou physisorption) ……..……..…….. **4**

I.3.2. L'adsorption chimique (ou chimisorption) ……...….. **4**

I.4.Mécanismes d'adsorption……..... **5**

I.5.Facteurs influençant sur le phénomène d'adsorption……..…..……. **6**

I.5.1. La surface spécifique……...……. **6**

I.5.2. La nature de l'adsorbant…… ……..……...…. **7**

I.5.3. La nature de l'adsorbat……...…….. **7**

I.5.4.PH……...……... **7**

I.5.5. La porosité……..... **7**

I.5.6. La température……..…...… **7**

I.5.7. La concentration du polluant……..….. **7**

I.5.8. Le rapport solide-liquide ……..... **8**

Table des matières

I.5.9. La vitesse d'agitation ……..……..….. **8**

I.6. Les différents types d'adsorbants……..……..... **8**

I.6.1. Les charbons actifs……..... **8**

I.6.2. Les zéolithes……..... **8**

I.6.3. Les gels de silice……..... **9**

I.6.4. Les alumines activées……..... **9**

I.6.5. Les argiles activées……..... **9**

I.7. Isotherme d'adsorption……..... **9**

I.7.1. Classification des isothermes d'adsorption……..... **10**

I.7.1.1. Classe S…….……..... **10**

I.7.1.2. Classe L…….……..... **11**

I.7.1.3. Classe H……..... **11**

I.7.1.4. Classe C……..... **11**

I.7.2. Différents modèles d'isothermes……..... **11**

I.7.2.1. Isotherme de Langmuir…….……..... **11**

I.7.2.2. Isotherme de Freundlich……..... **12**

I.7.2.3. Isotherme de Temkin……..... **13**

I.8. Modèles de la cinétique de l'adsorption……..... **13**

I.8.1. Modèle de pseudo premier ordre (modèle Lagergren)…….…..... **13**

I.8.2. Modèle de pseudo second ordre……..... **14**

I.8.3. Modèles de la diffusion intra particule……..... **14**

I.8.4. Modèles d'Elovich …… ……..……..……..… **15**

I.9. Adsorption dynamique ou adsorption en lit fixe (sur colonne) ……..... **15**

I.9.1. Généralités ……... **15**

I.9.1.1.Méthode stochastique ……... **17**

I.9.1.2. Méthode mathématique ……..... **17**

I.9.1.3. Méthode expérimentale ……..... **17**

I.9.2. Ecoulement dans un lit fixe ……. **18**

I.9.3. Capacité fractionnaire……..... **20**

I.9.4. Hauteur de la zone de transfert de matière (HZ)…….…. **20**

I.9.5. Vitesse de déplacement de la ZTM…….....… **21**

I.9.6. Volume totale traité…….....…. **21**

I.9.7. Quantité totale retenue…….…….……..... **22**

I.9.8. Les modèles mathématiques relatives à l'adsorption dynamique…….……..... **22**

I.9.8.1. Modèle de Clark…….... **22**

I.9.8.2. Modèle de Thomas……..…. **22**

I.9.8.3. Modèle BDST (Bed Depth Service Time) ..…… **23**

I.9.8.4. Modèle de Yoon-Nelson…….…….. **23**

I.9.8.5. Modèle de Bohart- Adams…… **24**

I.9.8.6. Modèle de Wang…….…….. **24**

I.9.8.7. Modèle de Hutchins ……. **24**

I.10. Conclusion……...……. **25**

CHAPITRE II : GENERALITES SUR LES METHODES D`INTELLIGENCE ARTIFICIELLES

II.1 Introduction…… **26**

II.2. Historique sur les réseaux de neurones……. **26**

II.3. Définition……... **28**

II.4. Modèle « boîte noire » …….…. **28**

II.5. Principe du neurone artificiel…….…….... **29**

II.6. Neurones biologiques ……...…..... **30**

II.7. Neurones artificiels ou formel…….…... **31**

II.8. Connexion entre les neurones …….…….. **32**

II.9. Architecture des réseaux de neurones……..……..…….... **32**

II.9.1. Réseaux non bouclés ……..……..... **32**

II.9.2. Réseaux bouclés…….…..... **33**

II.10. Réseau de neurones artificiel de perceptron multicouches (type feedforward)….. **34**

II.10.1. Couche d'entrée……... **34**

II.10.2. Couche cachées ……... **34**

II.10.3. Couche de sortie……..... **35**

II.11. Fonctions d'activations……..... **36**

II.11.1. Fonction d'activation binaire à seuil …….…….. **36**

II.11.2. Fonction d'activation linéaire (purelin)…… **36**

II.11.3 Fonction d'activation sigmoïde logarithmique (logsig) ……..…….…..... **37**

II.11.4. Fonction d'activation tangente hyperbolique (tansig)…….…….…..... **37**

II.12. Choix de la structure du réseau. ……..……...……. **37**

II.13. Apprentissage des réseaux de neurones …….……..... **38**

II.13.1. Apprentissage supervisé ……..……..……..……... **38**

II.13.2. Apprentissage non supervisé ……...…. **39**

II.13.3. Apprentissage par renforcement (semi – supervisé)……..…….……. **40**

II.14. Algorithme d'apprentissage ……..... **40**

II.14.1. Algorithme de rétropropagation ……..…….....…. **40**

II.14.1.1. Algorithme de Levenberg- Marquardt …….……..... **42**

II.15. Analyses statistiques ……..... **43**

II.16.Conclusion …….……..... **43**

CHAPITRE III : MATERIELS ET METHODES

III.1. Introduction …….…… **44**

III .2. Méthodologie de travail …….…… **44**

III.3. Modélisation neuronale d'un système simple organique d'adsorbat adsorbant…... **46**

III.3.1. Collecte de la base des données……..…..… **46**

III.3.2. Sélection des paramètres d'entrés et de sorties du RNA……..... **47**

III.3.3. Préparation et division des données……..…….…..... **48**

III.3.4. Normalisation partielle des données……...…….. **48**

III.3.5. Apprentissage du réseau de neurone……...…….. **49**

III.4. Modélisation utilisant les modèles mathématiques……..……..... **50**

III.4.1 Modèle de Thomas……..…….….. **50**

III.4.2. Modèle de Bohart- Adams…….…… **51**

III.5.Conclusion.…….…..... **52**

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1.Introduction …….……..... **53**

IV.2. Résultats de la modélisation neuronale ……..... **53**

IV.2.1. Détermination des paramètres du (RNA)……..…… **53**

IV.2.2.Interprétation de résultas ……..…….. **55**

IV.3.Comparaison avec les modèles mathématiques ……..…..… **59**

IV.4. Conclusion ……..…….……...…..... **59**

CONCLUSION GENERALE……..... **60**

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES ……. **61**

LISTE DES ABREVIATIONS

ANN : Réseau de Neurone Artificiel (Artificial Neural Network)

BDST : Temps de service de profondeur de lit

C_DMAD : Charbons de boue

EQM : Erreur Quadratique Moyenne

Logsig : Sigmoïde logarithmique

PICA F22 : Charbon commercial

PMC : Perceptron multicouche

Purelin : Fonction d'activation linéaire

REQM : Racine Carrée de l'Erreur Quadratique Moyenne

RNA : Réseau de Neurone Artificiel

Tansig : Hyperbolique tangent sigmoïde

ZTM : Zone de Transfert de Matière

NOMENCLATURES

A_{max} : Quantité maximale d'adsorbant qui peut être éliminée par le filtre (mg)

A_S : Surface spécifique (m^2/g)

A_z : Quantité réellement éliminée à l'intérieur de la zone de transfert (mg)

C/C_0 : Concentration réduite

C_0 : Concentration initiale de l'adsorbat (mol/m^3)

C_P : Concentration maximale de sortie tolérée

C_S : Concentration en sortie de lit fixe (mol /m^3)

dP : Diamètre de particule de l'adsorbant (mm)

F : Capacité fractionnaire (%)

f **:** Fonction d'activation

H : Hauteur du lit (m)

H_Z : Hauteur de la zone de transfert (cm)

m : Masse de l'adsorbant (g)

M : Masse molaire (mol/g)

N° : Numéro

R : Coefficients de corrélations

R^2 : Coefficient de détermination

t : Temps (min)

t_{BP} : Temps au point de percée (min)

t_E : Temps de saturation (min)

t_f : Temps requis pour la formation de la zone d'adsorption (min)

t_Z : Temps requis par la ZTM pour s'établir au sommet de la colonne (min).

U_Z : Vitesse de déplacement de la ZTM (cm/min)

V : Vitesse (m/min)

V_{BP} : Volume d'effluent traité dont la concentration est inférieure à 5% de la concentration initiale (ml)

V_E : Volume d'effluent traité dont la concentration est égal ou supérieure à 80% de la concentration initiale (ml)

W : Poids

Lettres Grecques

α : Pente

β : Point à l'origine

η : Taux d'apprentissage

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre I

Tableau I.1 : Différences entre adsorption chimique et adsorption physique…… **5**

Chapitre III

Tableau III.1: Propriétés de la résine NDA-100…….....…. **46**

Tableau III.2 : Propriétés de la Charbon actif (PICA F22, C_DMAD) …..…….. **46**

Tableau III.3 : Propriétés physico-chimiques du phénol ……..…... **47**

Tableau III.4 : Paramètres d'entrés et de sorties retirées à partir des références choisie **48**

Tableau III.5 : Donne la répartition en pourcentage pour trois sous base ……..…… **48**

Chapitre IV

Tableau IV.1 : Modèle de RNA et les performances de chaque sous-modèle……. **53**

Tableau IV.2 : Structure optimale du RNA…….. **54**

Tableau IV.3 : Résultats d'interpolation en terme d'erreur (REQM) et le vecteur [α, β, R]……... **58**

Tableau IV.4 : Evaluation des fonctions d'erreurs pour la comparaison entre les trois modèles (Bohart-Adams, Thomas, et RNA)……. **59**

LISTE DES FIGURES

Chapitre I

Figure I.1 : Description schématique de l'adsorption d'un gaz à la surface d'un solide … **4**

Figure I.2: Les types d'adsorption…….. **4**

Figure I.3: Etapes d'adsorption d'un soluté sur un matériau microporeux…….. **6**

Figure I.4 : Classes des isothermes d'après Gilles et Coll ……..……..…… **10**

Figure I.5: Courbe de percée pour un lit fixe …….. **16**

Figure I.6 : Evolution de la concentration dans les deux phases …….. **18**

Figure I.7: Différentes phases existant dans un lit d'adsorbant monodispersé……. **19**

Figure I.8: Différentes phases existant dans un lit d'adsorbant bidispersé……...… **19**

Chapitre II

Figure II.1 : Diagramme schématique d'une modèle neuronale « boîte noire…….. **29**

Figure II.2 : Neurone artificiel……..... **29**

Figure II.3 : Structure d'un neurone biologique …….…… **30**

Figure II.4 : Structure d'un neurone artificiel ……..……..... **31**

Figure II.5: Schéma de comparaison entre un neurone biologique et un neuroneartificiel.. **31**

Figure II.6 : Le neurone amont, j le neurone aval et Wij le poids de la connexion……... **32**

Figure II.7 : Réseau non bouclé ……..... **33**

Figure II.8 : Réseau bouclé ……..……... **34**

Figure II.9 : Exemple d'architecture d'un PMC à n variables d'entrée, une couche cachée avec quatre neurones cachés et une couche de sortie…….…… **35**

Figure II.10 : Topologie d'un réseau de neurone de type feedfoward……..... **35**

Figure II.11 : Fonction d'activation binaire à seuil ……. **36**

Figure II.12 : Fonction d'activation linéaire (purelin)…….…… **36**

Figure II.13 : Fonction d'activation sigmoïde logarithmique (logsig). **37**

Figure II.14 : Fonction d'activation tangente hyperbolique (tansig) ……..…….. **37**

Figure II.15 : Illustration d'apprentissage supervisé..... **39**

Figure II.16 : Illustration d'apprentissage non supervisé……... **40**

Chapitre III

Figure III.1 : Procédure de développement d'un RNA……..…….. **45**

Figure III.2 : Etapes d'optimisation du RNA…….. **50**

Chapitre IV

Figure IV.1 : Structure optimale du modèle de RNA ……...……..…….. **54**

Figure IV.2 : Comparaison entre les résultats expérimentaux et calculées par RNA. (a) Pour la base totale (b) Pour la phase de validation……. **55**

Figure IV.3 : Courbe de régression représente pour toute la base des données et les 3 phases (apprentissage , test et validation)…..……..…….. **57**

Figure IV.4 : Profils du l'EQM pendant la phase d'apprentissage, de validation et de test en fonction de nombre d'itérations pour la meilleure topologie de réseau…… **58**

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Avec le développement rapide de l'industrie moderne, la pollution de l'environnement devient de plus en plus grave. Les émissions de polluants restent un problème grave dans plusieurs pays du monde, et une pollution accrue peut créer des déséquilibres dans les écosystèmes et entraîner la mort d'animaux et d'humains [1]. Au début des années 1970, le traitement des eaux usées est devenu de plus en plus important. La protection de l'environnement naturel, et plus généralement de notre cadre de vie, ainsi que la pollution des eaux, préoccupent les dirigeants des pays développés qui commencent à prendre des mesures pour protéger l'environnement. [2]. Les eaux usées traversent les usines de traitement pour en éliminer les polluants. La plupart des eaux usées contiennent de nombreuses substances qui pourraient être classées en polluants organiques et inorganiques [3].

La pollution des eaux, accidentellement ou volontairement, par certains produits chimiques d'origine industrielle (hydrocarbures, phénols, colorants, ...) ou agricole (pesticides, engrais, …) constitue une source de dégradation de l'environnement et suscite à l'heure actuelle un intérêt particulier à l'échelle internationale [4].

Dans ce cadre, plusieurs procédés de dépollution des eaux usées ont été proposés, développés et actuellement utilisés, on cite à titre d'exemple la filtration membranaire, la précipitation chimique, les boues activées, la photocatalyse ou encore l'adsorption [5] ,La plus utilisée est celle de l'adsorption. L'adsorption étant un phénomène de surface a été largement étudiée par les chercheurs scientifiques comme un moyen efficace pour le traitement des déchets industriels. L'adsorption continue de systèmes adsorbant/adsorbat en modes statique et dynamique est très complexe et présente un grand intérêt dans de nombreuses industries. Ce processus continu a ses particularités. Les espèces adsorbent simultanément le avec différents degrés de compétition, en fonction de plusieurs paramètres thermo-physicochimiques et morphologiques. C'est à l'origine d'un large spectre d'applications, notamment dans l'industrie agricole et agroalimentaire, l'industrie pharmaceutique, mais aussi en chimie et pétrochimie [6]. L'adsorption dynamique ou adsorption en lit fixe est l'une des techniques à l'échelle industrielle les plus largement utilisées pour la séparation et la purification des eaux usées en raison de son faible coût, de son efficacité élevée et de sa simplicité d'utilisation [7]. La conduite dynamique d'une colonne à lit fixe est décrite en fonction de la courbe de percée résultant de l'analyse du système adsorbant-adsorbat [8].

L'apprentissage automatique est l'un des outils les plus intéressants qui s'est intégré dans la boîte à outils de la science des matériaux ces dernières années.

En tant qu'approche intelligente pour simuler et prédire les performances des systèmes, la modélisation d'adsorption dynamique à l'aide de réseaux de neurones artificiels (RNA) est devenue de plus en plus populaire au cours des dernières années. Ces réseaux se comparent favorablement aux modèles mathématiques classiques en raison de leur parallélisme élevé, de leur robustesse et de leur capacité à gérer des relations complexes entre les paramètres d'entrée et de sortie d'un processus sans connaissance approfondie du système, et sont plus fiables [9].

Notre travail est structuré en quatre (04) principaux chapitres :

- **Le premier chapitre** : aborde les concepts de base relatifs au phénomène d'adsorption statique et dynamique.
- **Le deuxième chapitre** : traite des concepts de base des réseaux de neurones artificiels (RNA).
- **Le troisième chapitre** : présenter en détail les déffirents étaps pour construire un RNA ainsi les modèles mathématiques qfin de prédire l'adsorption dynamique du phénole sur les déffirents adsorbants .
- **Le quatrième chapitre** : concerne à présenter les différentes résultats obtenus par le RNA ainsi les resultats de comparaison entre les modèles mathématiques et le modèle du RNA optimal, afin de déterminer le modèle approprié capable de décrire avec précision le phénomène d'adsorption dynamique.

Enfin, le mémoire se termine par une conclusion générale en résumant l'essentiel de notre travail avec des perspectives qui peuvent être envisagées dans le futur.

CHAPITRE I :

GENERALITES SUR L'ADSORPTION

I.1. Introduction

L'adsorption est une méthode efficace et simple pour éliminer certains polluants organiques et inorganiques, mais son efficacité varie considérablement en fonction du type de support d'adsorption utilisé, notamment en termes de coût, de disponibilité et d'options de régénération. Contrairement à la précipitation, l'adsorption est plus efficace à faibles concentrations. Il est utilisé pour une large gamme d'applications dans divers domaines industriels tels que le pétrole, la pétrochimie et la chimie, ainsi que dans les domaines pharmaceutique et environnemental [10].

Le terme « adsorption » a été utilisé pour la première fois par le physicien allemand Heinrich Kaiser en 1881. Les études d'adsorption reposent sur la mesure de la corrélation entre la concentration d'adsorbat dans la phase liquide et la quantité d'adsorbat piégé sur une surface à une température donnée. Il s'agit d'une mesure d'isotherme d'adsorption. De nombreux modèles ont été et sont créés en tenant compte de mesures expérimentales, certains très simples (isothermes de Langmuir ou Freundlich), certains calculs complexes (simulations basées sur la théorie fonctionnelle de la densité), et certains nécessitent des méthodes de Monte Carlo [11].

I.2. Définition

L'adsorption est un processus spontané de surface par lequel des molécules gazeuses ou Différents processus plus ou moins intenses permettent de fixer des liquides sur les surfaces des solides. La surface est la surface complète du solide, la surface géométrique d'un Pour un solide non poreux, la surface interne des pores est ajoutée. Les molécules du liquide sont accessibles. La densité du fluide augmente, au contact des deux phases. Il est possible qu'elle ait des molécules sur la surface, puis elle peut les atteindre. Le solide qui s'adsorbe est appelé «adsorbat» par la molécule qui s'adsorbe et «adsorbant» par le solide sur lequel il s'adsorbe. La molécule est absorbée. La détachement inverse des molécules est le phénomène de éraflure [12]. La Figure I.1 est une représentation schématique de ce phénomène. Les molécules de gaz s'adsorbent selon divers processus plus ou moins complexes et intenses[13].

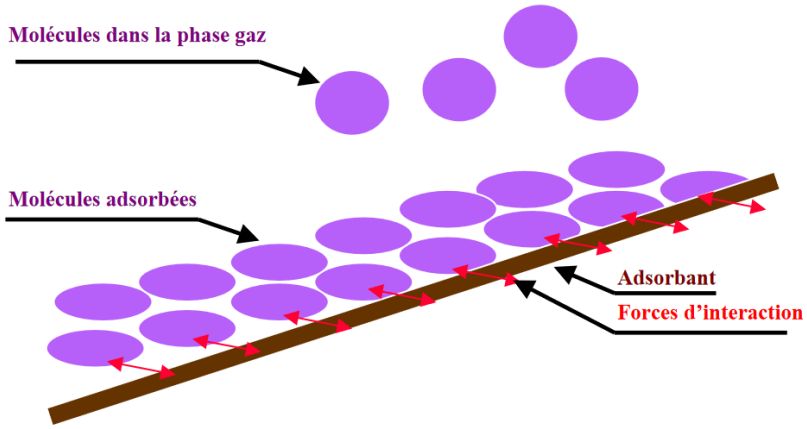


Figure I.1 : Description schématique de l'adsorption d'un gaz à la surface d'un solide [13].

I.3. Types d'adsorption

Suivant l'importance des énergies mises en jeu entre l'adsorbant et l'adsorbat, les forces responsables du phénomène d'adsorption peuvent être de nature physique ou chimique, conduisant ainsi à deux types d'adsorption: l'adsorption physique « physisorption » et l'adsorption chimique « chimisorption » [14].

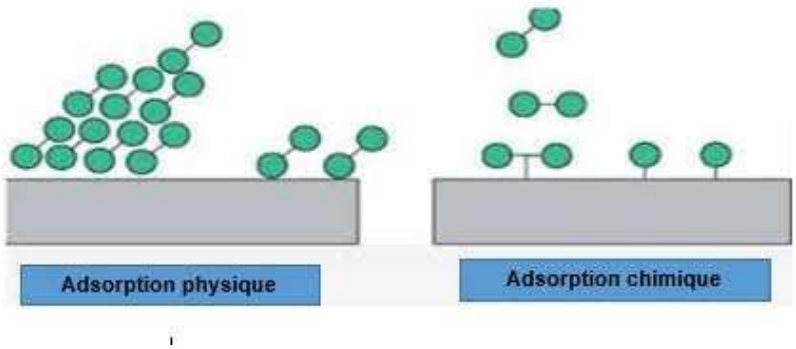


Figure I.2: Les types d'adsorption [14].

I.3.1. L'adsorption physique (ou physisorption)

L'adsorption physique ou physisorption met en jeu de très faibles interactions entre entités moléculaires comme les forces d'attraction de Van der Waals et des forces dues aux interactions électrostatiques de polarisation, elle est réversible et peu spécifique, L'adsorption physiques est rapide et généralement limitée par les phénomènes de diffusion [14].

I .3.2. L'adsorption chimique (ou chimisorption)

Dite chimisorption, est un phénomène irréversible dû à une liaison chimique forte de type covalente entre les atomes superficiels du solide et les molécules adsorbées. Ce type

d'adsorption met en jeu des énergies d'attractions élevées, qui conduisent à des chaleurs d'adsorption élevées [14].

La différenciation entre les deux types d'adsorption est possible en utilisant plusieurs critères résumés dans le tableau I.1.

Tableau I.1: Différences entre adsorption chimique et adsorption physique [15],[16].

Propriétés	Adsorption physique	Adsorption chimique
Types de liaison	Liaison de Van Der Waals	Liaison chimique
Température du Processus	Relativement faible comparé à la température d'ébullition De l'adsorbât	Plus élevée que la température d'ébullition de l'adsorbât
Individualité des molécules	Conservée	Distribuée
Désorption	Facile	Difficile
Cinétique	Rapide, car est un processus Non activé	Très lente
Chaleur d'adsorption	Inférieur à 10 kcal/mole	Supérieur à 10 kcal/mole
Énergie mise en jeu	Faible	Elevée
Type de formation	Formation en multicouches et monocouches	Formation en monocouche

I.4. Mécanismes d'adsorption

Il se trouve de nombreux mécanismes d'adsorption d'un soluté sur la surface d'un solide. Parmi ces mécanismes, on peut citer [15]:

1. L'adsorption par échange d'ions.
2.L'adsorption par polarisation des ponts d'hydrogènes.
3. L'adsorption mettant en jeu l'attraction électrostatique.
4. L'adsorption mettant en jeu une paire d'électrons.

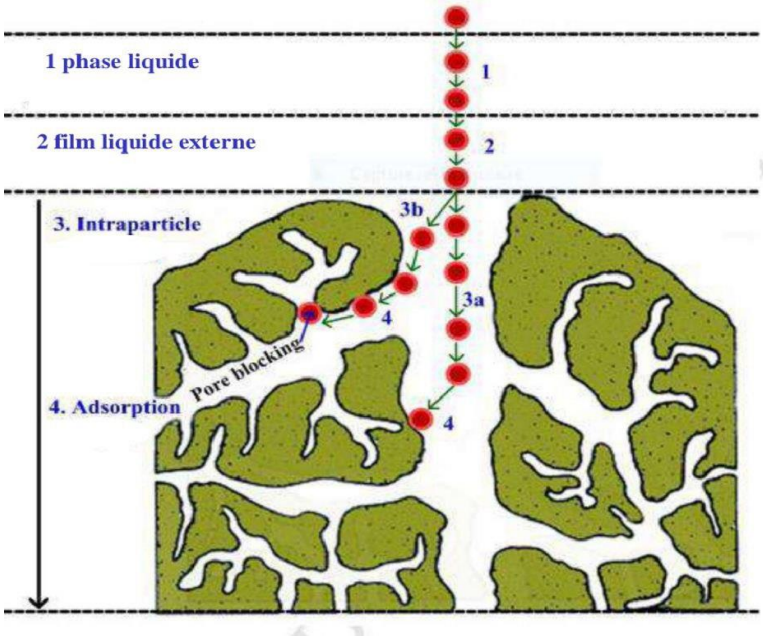


Figure I.3: Etapes d'adsorption d'un soluté sur un matériau microporeux [18].

L'adsorption est un processus exothermique qui correspond à des interactions adsorbat –surface solide. De façon générale, le phénomène d'adsorption se décompose en plusieurs étapes [17]:

1. Diffusion de la molécule d'adsorbat du fluide vers la couche limite, très rapide
2. Transfert à travers la couche limite (diffusion externe), rapide
3. Diffusion dans le volume poreux, lente;
4. Adsorption en surface, très rapide;
5. Diffusion de l'adsorbat en surface;
6 et 7. Conduction thermique dans l'adsorbant, la couche limite puis le fluide

I.5. Facteurs influençant l'équilibre d'adsorption

Les différents paramètres qui influent sur l'équilibre d'adsorption sont :

I.5.1. La surface spécifique

La surface spécifique est une donnée essentielle de la caractérisation des solides et des matériaux poreux. Il est clair que l'on cherche à conférer aux adsorbants une grande surface spécifique, cette grandeur désigne la surface accessible rapportée à l'unité de masse d'adsorbant (m^2/g) [19].

I.5.2. Nature de l'adsorbant

On peut classer les adsorbants en : Adsorbants apolaires, ayant plus d'affinité pour les substances non polaires (charbon, graphite, talc, etc.) Adsorbats polaires, qui adsorbe les électrolytes, dans ce cas l'adsorption est sélective. Parmi ces adsorbants polaires, on cite les gels de silice et les différentes argiles [20].

I.5.3. Nature de l'adsorbat

Pour qu'il y ait une bonne adsorption il faut qu'il y ait d'abord une affinité entre le solide et le soluté [20].

I.5.4. PH

Le pH est un paramètre prédominant dans le processus d'adsorption. Il affecte directement l'état de charge de l'adsorbant et de l'adsorbat. Son effet sur la rétention des contaminants est souvent étudié. Dans la plupart des cas, le pH faible favorise l'adsorption des anions alors que le milieu alcalin favorise celle des cations [21].

I.5.5. La porosité

La porosité d'une roche est exprimée par le rapport du volume des pores au volume apparent total. La détermination de ce paramètre est intéressante mais insuffisante pour caractériser un solide poreux car, elle ne prend pas en considération la forme des pores et les connexions entre les pores [22].

I.5.6. La température

L'adsorption est un processus global résultant de plusieurs processus à l'interface solide-liquide. Elle peut être exothermique, endothermique ou athermique. Elle est donc conditionnée par la température. Ainsi, l'augmentation de la température favorise les processus de chimisorption alors que son abaissement favorise l'adsorption physique [22].

I.5.7. La concentration du polluant

L'augmentation de la concentration de polluants dans la solution affecte directement l'adsorption [23].

I.5.8. Rapport solide-liquide

La vitesse d'adsorption à un rapport étroit avec la masse du solide puisque cette vitesse d'adsorption est proportionnelle à la masse du solide [24].

I.5.9. La vitesse d'agitation

La vitesse de déplacement affecte le taux d'adsorption. Lorsque ce paramètre augmente, le taux d'adsorption augmente.

I.6. Les différents types d'adsorbants

Les adsorbants les plus répandus industriellement sont Les charbons actifs, les zéolithes, l'alumine activée ou le gel de silice. D'autres solides poreux comme les MOF's (Metal Organic Framework), les polymères organiques poreux, les COF's (Covalent Organic Framework) ou les silices fonctionnalisées avec des groupes amines sont en développement et font aussi l'objet de nombreuses publications scientifiques, avec un focus spécial sur la capture du CO_2 [25].

I.6.1. Les charbons actifs

Les charbons actifs sont préparés par pyrolyse d'une matière contenant du carbone, charbon ou matériau végétal, pour conduire à un charbon de bois qui est en suit oxydé par la vapeur d'eau dans les conditions contrôlées pour créer une structure microporeuse. Il existe plusieurs centaines de qualités de charbons actifs suivant le précurseur et les conditions de traitement. On peut aussi trouver des charbons actifs dits « chimique », car activés à chaud en présence d'agents chimiques déshydratants, acide phosphorique chlorure de zinc. Ce sont des adsorbants hydrophobes dont la surface spécifique se situe entre 500 et 1500 m^2/g. Leur porosité, leur vaste domaine d'application et leur coût font des charbons actifs les adsorbants plus répandus [26].

I.6.2. Les zéolithes

Les zéolithes sont des adsorbants de squelette cristalline aluminosilicate tridimensionnel constitué de tétraèdres SiO_4 et AlO_4, de formule globale (AlO_2M, $NSiO_2$) ou M représente le plus souvent un métal alcalin ou alcalino-terreux et N.Il existe plus de 100 espèces de zéolithes, différant par la structure cristallographique. Ils ont structure microporeuse fait de cavités et de canaux qui leur confère des propriétés adsorbant. Ils sont sous forme de poudre, granulés ou extrudés. La surface spécifique ne dépasse pas 900 m^2/g. mais, ils présentent une bonne sélectivité [27].

I.6.3. Les gels de silice

Le gel de silice est un adsorbant avec une composition chimique de SiO_2/nH_2O. La surface interne du est relativement polaire, ce qui fait du un adsorbant avec une distribution assez large de tailles de pores. Le gel de silice est utilisé pour le séchage des gaz et la séparation de hydrocarbures différents [28].

I.6.4. Les alumines activées

L'oxyde d'aluminium (Al_2O_3-nH_2O) préparé à partir de bauxite par traitement thermique est un objet très poreux, amorphe et partiellement hydraté. ils sont couramment utilisés pour sécher les gaz, éliminer l'humidité des liquids et séparer les composés aromatiques [29].

I.6.5 Les argiles activées

Ayant une structure cristalline différente, Les argiles activées sont des alumino-silicates de formule toutefois proche des zéolithes. Ce sont des produits naturels utilisés surtout pour le séchage [30].

I.7.Isothermes d'adsorption

L'adsorption du soluté est en général limitée à la monocouche. En effet, les interactions soluté-solide sont assez fortes pour concurrencer avec succès les interactions solvant-solide dans la monocouche, mais ce n'est plus le cas dans les couches suivantes. Toutefois l'adsorption du soluté en multicouche a été observée dans certains cas, en se basant sur la forme des isothermes établies et sur le fait que la surface spécifique évaluée à partir de l'hypothèse d'une monocouche est trop faible. Une telle isotherme est une courbe qui représente la relation entre la quantité adsorbée par unité de masse de solide et la concentration de la phase fluide. On obtient une telle courbe à partir des résultats d'essais effectués à une température constante. Pour ce faire, on introduit des quantités connues de solide dans des volumes de solution à traiter, et après un temps de contact donné, on mesure la concentration résiduelle de la solution [31]. On peut calculer la quantité adsorbée à l'aide de l'équation suivante :

$$q_e = \frac{(C_0 - C_e).V}{m} \qquad (I.1)$$

Où :

C_0: concentration initiale du soluté adsorbat en (mg/l).

C_e: concentration d'acide à l'équilibre dans la solution en (mg/l).

m **:** masse de l'adsorbant .

q_e: quantité du métal adsorbée par unité de masse de l'adsorbant en (mg/g).

V **:** volume de la solution (l).

I.7.1. Classification des isothermes d'adsorption

Gilles et coll. (1974) ont proposé les modèles d'adsorption, dont quatre types particuliers sont maintenant considérées comme les quatre formes principales d'isothermes généralement observées. Ces classes sont représentées sur la Figure Le type d'isotherme obtenu permet de tirer des conclusions qualitatives sur les interactions, entre l'adsorbat et l'adsorbant, dont les plus importantes sont les suivantes [31]

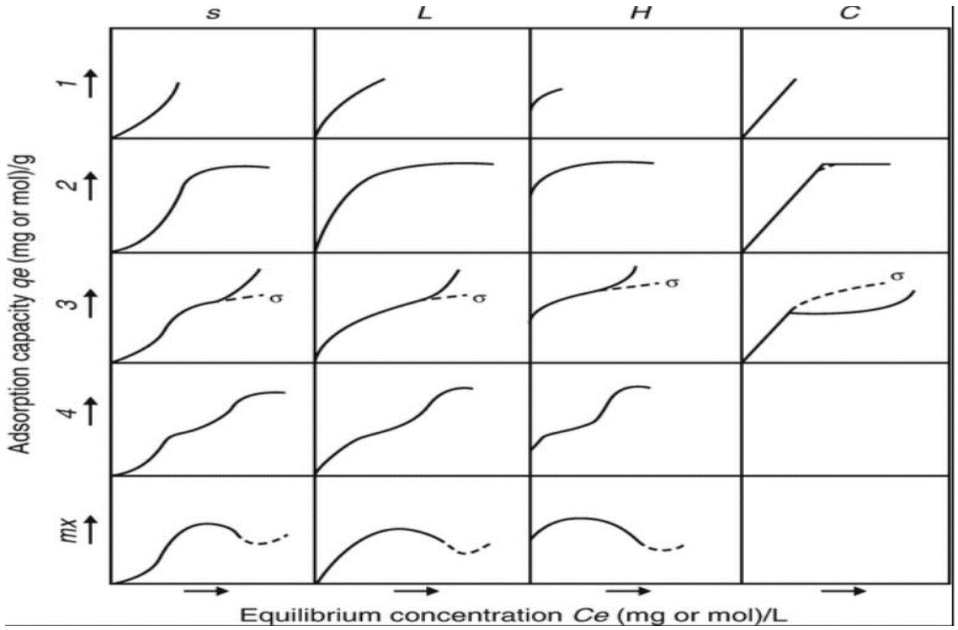


Figure I.4: Classes des isothermes d'après Gilles et Coll [32].

S : Sigmoïde ; **L :** Langmuir ; **H :** Haute affinité ; **C :** partition Constante .

- la forme de l'isotherme .
- l'existence de paliers sur les isothermes.
- le type d'adsorption (mono ou plolymoléculaire) .
- l'orientation des molécules adsorbées.

I.7.1.1. Classe S

S'obtiennent lorsque les molécules du soluté ne s'accrochent au solide que par l'intermédiaire d'un seul groupemen [33].

I.7.1.2. Classe L

Le modèle de Langmuir «standard», indique une adsorption à plat de molécules bifonctionnelles. Le rapport entre la concentration dans la solution aqueuse et adsorbée diminue lorsque la concentration du soluté augmente, décrivant ainsi une courbe concave, cette courbe suggérant une saturation progressive de l'adsorbant [34].

I.7.1.3. Classe H

C 'est un cas particulier de l'isotherme de type L. Ce cas est distingué des autres parce que le soluté montre parfois une affinité si élevée pour le solide que la pente initiale ne peut pas être distinguée de l'infini, même si cela n'a pas de sens du point de vue thermodynamique [34].

I.7.1.4. Classe C

Sont sous forme de ligne droite, ce type de courbe est obtenu lorsqu'il y a compétition entre le solvant et le soluté pour occuper les sites de l'adsorbant [33].

I 7.2. Différents modèles d'isothermes

De multiples lois ont été proposées pour l'étude de l'adsorption. Ces lois expriment la relation entre la quantité adsorbée et la concentration en soluté dans un solvant à une certaine température. Parmi ces lois les plus utilisée, on peut rappeler :

I.7.2.1. Isotherme de Langmuir

La théorie de Langmuir a permis L'étude de l'adsorption de molécules de gaz sur des surfaces métalliques. L'isotherme de Langmuir est difficilement utilisable pour des systèmes naturels où l'adsorption en couche simple sur un seul type de site est rarement rencontrée. L'isotherme est représentée par l'équation suivante [35].

$$K_L = \frac{q_e}{C_e(q_m - q_m)} \quad \text{(I.2)}$$

$$\theta = \frac{q_e}{q_m} = \frac{K_L C_e}{1+(K_L C_e)} \quad \text{(I.3)}$$

*K*L *:* Constante d'équilibre de Langmuir exprimée en (l /mg).

θ: Taux de recouvrement.

Les deux formes les plus utilisées pour ce modèle sont Langmuir I et Langmuir II [36].

$$\frac{1}{q_e} = \left(\frac{1}{q_m}\right) + \left(\frac{1}{K_L.C_e.q_m}\right) \quad \text{Langmuir I} \quad (I.4)$$

$$\frac{C_e}{q_e} = \left(\frac{1}{K_L.q_m}\right) + \left(\frac{C_e}{q_m}\right) \quad \text{Langmuir II} \quad (I.5)$$

Ce modèle est caractérisé par un paramètre d'équilibre R_L [37] :

$$R_L = \frac{1}{1+K_L C_0} \quad (I.6)$$

Si R_L >1 les conditions de l'adsorption sont défavorables.

Si R_L <1 les conditions de l'adsorption sont favorables.

Si R_L = 0 l'adsorption est irréversible.

I.7.2.2. Isotherme de Freundlich

En 1926 Freundlich a établi une isotherme très satisfaisante qui peut s'appliquer avec succès à l'adsorption des gaz, mais qui a été principalement utilisée pour l'adsorption en solution ; il a constaté que le mécanisme de ce processus est assez complexe, du fait de l'hétérogénéité de la surface, ce qui rend la chaleur d'adsorption variable. On ne peut dans ce cas affirmer que tous les sites d'adsorption sont identiques du point de vue énergétique, du fait de la présence de différents types de défauts de structure dans l'adsorbant [38].

$$q_e = K_F\, C_e^n \quad (I.7)$$

K_F : constante de Freundlich, relative à la capacité d'adsorption.

N : constante de Freundlich, relative à l'intensité de l'adsorption.

C_e : concentration du soluté dans la solution à l'équilibre (mg/l).

La forme exploitée la plus courante est le tracé en échelle logarithmique des variations de q_e en fonction de Ce [39] :

$$Log\ q_e = \log K_F + n \log C_e \quad (I.8)$$

Une autre exploitation possible des résultats par l'isotherme de Freundlich consiste à tracer en échelle logarithmique les variations du coefficient de distribution K_d en fonction de q_e :

$$Log\ K_d = \frac{1}{n}\log\ K_F + \frac{(n-1)}{n}\ \log \quad (I.9)$$

La constante «n», donne une indication sur l'intensité de l'adsorption. Il est

généralement admis que des faibles valeurs de n (0,1< n < 0,5) sont caractéristiques d'une bonne adsorption, alors que celles les plus élevées révèlent une adsorption modérée (0,5 < n < 1)ou faible (n > 1). La constante « n » est très souvent remplacé par « 1/n » qui désigne aussi le facteur d'hétérogénéité [39].

I.7.2.3. Isotherme de Temkin

Le modèle de Temkin repose sur l'hypothèse que, lors de l'adsorption en phase gazeuse, la chaleur d'adsorption due aux interactions avec l'adsorbat décroît linéairement avec le taux de recouvrement C'est une application de la relation de Gibbs pour les adsorbants dont la surface est considérée comme énergétiquement homogène [39].

$$\theta = \frac{q_e}{q_m} = \frac{R.T}{\Delta Q}\ln(K_T + C_e) \qquad (I.10)$$

$R = 8{,}314\ J.mol^{-1}.K^{-1}$

T : température absolue (en K).

Q : Variation d'énergie d'adsorption en ($J.mol^{-1}$).

K_T : constante de Temkin en ($l.mg^{-1}$).

q_e : Quantité du produit adsorbé par unité de masse d'adsorbant ($mg.g^{-1}$).

q_m : Capacité maximale théorique exprimée en ($mg.g^{-1}$).

$$B_T = \frac{q_m .R .T}{\Delta Q} \qquad (I.11)$$

En traçant $q_e = (\ln Ce)$, on obtient une droite dont la pente et l'ordonné à l'origine permettent de déterminer La chaleur d'adsorption ΔQ et la constante d'équilibre K_0 [39].

I.8. Modèles cinétiques de l'adsorption

L'étude de l'adsorption d'un soluté en fonction du temps de contact est souvent décrite comme comportant deux phases. La première phase d'adsorption, non linéaire et rapide, correspond à l'adsorption au sens strict, les phénomènes de diffusion étant alors négligeables. La deuxième phase, linéaire, est interprétée comme étant la phase d'adsorption lente, où les processus de diffusion sont limitants [40].

I.8.1. Modèle de pseudo premier ordre (modèle Lagergren)

Il a été supposé dans ce modèle que la vitesse d'adsorption à l'instant t est proportionnelle à la différence entre la quantité adsorbée à l'équilibre Q_e et la quantité Q_t

adsorbée à cet instant et que l'adsorption est réversible La constante de vitesse d'adsorption du premier ordre est déduit à partir du modèle établi par Lagergren La loi de vitesse s'écrit[41].

$$\frac{dq_t}{dt} = K_1 (q_e - q_t) \quad (I.12)$$

K_1: La constante de vitesse pour une cinétique du pseudo 1 ordre (1/min).

t: Temps de contact (min).

q_e : Quantité d'adsorbat à l'équilibre.

q_t : Quantité d'adsorbat à l'instant t.

$$\text{Log}\,(q_e - q_t) = \text{Log}\, q_e - \frac{K_1}{2.303}\, t \quad (I.13)$$

I.8.2. Modèle de pseudo second ordre

La vitesse de réaction de pseudo second ordre dépend de la quantité adsorbée sur la surface de l'adsorbant et la quantité adsorbée à l'équilibre. L'équation da la cinétique de pseudo-second ordre obéit à la relation suivante [42].

$$\frac{dq_t}{dt} = K_2 (q_e - q_t)^2 \quad (I.14)$$

K_2 : Constante de vitesse d'adsorption pour le pseudo 2 ordre (g/mg.min).

q_e : Quantité d'adsorbat à l'équilibre.

q_t : Quantité d'adsorbat à l'instant t.

La formule linéaire donnée par :

$$\frac{t}{q_e} = \frac{1}{K_e\, q_e^2} + \frac{1}{q_e} t \quad (I.15)$$

I.8.3. Modèle de la diffusion intra particule

La diffusion inter particulaire contrôle la plupart des processus d'adsorption. Dans ce cas, l'élimination varie presque proportionnellement avec la racine carrée du temps et peut être représentée comme suit [43] :

$$q_t = K_d \,.\, t^{1/2} + C \quad (I.16)$$

Avec :

K_d : la constante de vitesse de diffusion intraparticulaire en (mg/g.min$^{1/2}$).

C : l'ordonné à l'origine pour chaque étape *i* en (mg/g).

La courbe de ce modèle présente une multi linéarité indiquant l'existence de plusieurs étapes.

I.8.4. Modèle d'Elovich

Ce modèle qui a été envisagé pour décrire une cinétique de second-ordre en assumant que les sites d'adsorption sont énergétiquement hétérogènes est donné par [43] :

$$\frac{dq_t}{dt} = \alpha \exp(-\beta q_t) \quad \text{(I.17)}$$

En simplifiant l'équation d'Elovich dans les conditions initiales :

$\alpha\ \beta >> t$, $q_t = 0$ à $t = 0$, l'équation s'écrit comme suit :

$$q_t \ \frac{1}{\beta}\ln(\alpha\beta) + \frac{1}{\beta}\ln t \quad \text{(I.18)}$$

Où α : la vitesse initiale d'adsorption (mg/g min).

β : la constante de désorption (g/mg).

Les coefficients du modèle d'Elovich (α et β) peuvent être obtenus à partir du tracé linéaire de q_t en fonction de ln(t).

I.9. Adsorption dynamique ou adsorption en lit fixe (sur colonne)

I.9.1. Généralités

Dans le contexte de l'adsorbeur en lit fixe, l'adsorbant est un remplissage granulaire à travers lequel l'eau à traiter circule. Le flux peut être ascendant grâce à une pompe ou descendant par gravité. La surveillance de la concentration en sortie du lit fixe permet de tracer la courbe de percée également appelée courbe de fuite (Figure I.5). L'analyse d'une courbe de percée met en évidence deux caractéristiques particulièrement import antes: le temps de percée (tp), qui correspond au moment où le lit commence à se saturer, et la pente de la courbe de percée, qui doit être pratiquement verticale [44].

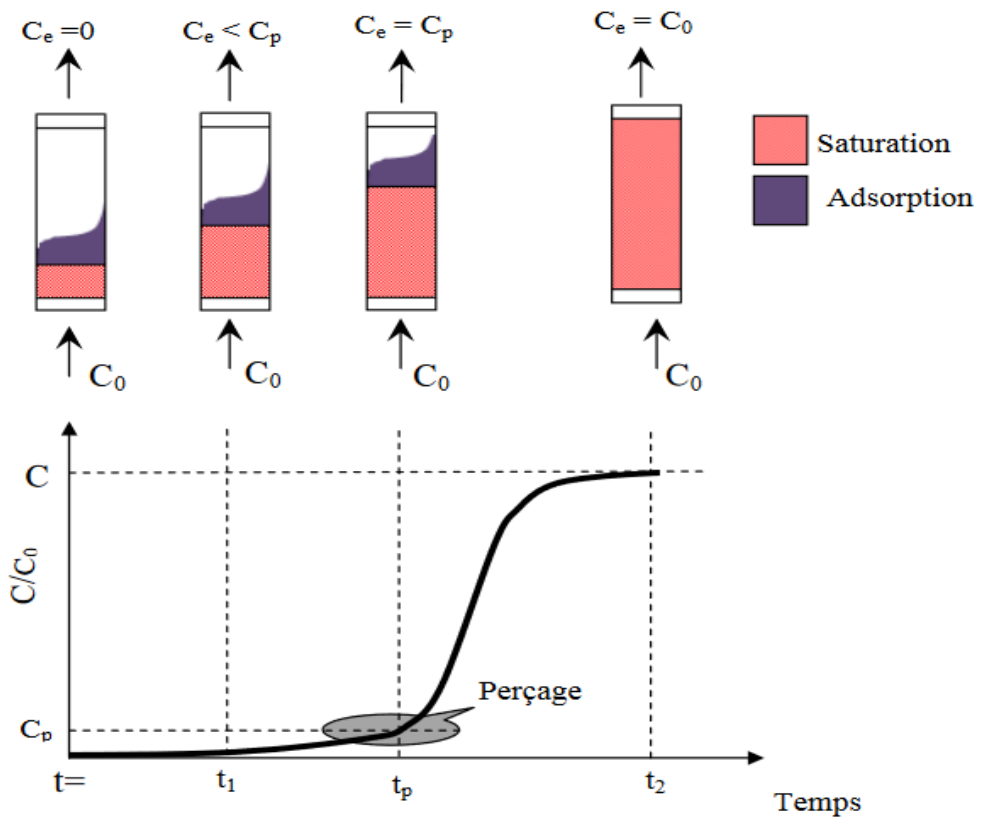


Figure I.5 : Courbe de percée pour un lit fixe[44].

C_0 : concentration initiale.

C_P : concentration maximale de sortie tolérée.

C_S : concentration en sortie du lit fixe .

L'attrait de la courbe de percée dépend de plusieurs facteurs, à savoir [44]:

- L'équilibre d'adsorption;
- La cinétique d'adsorption;
- Les paramètres hydrodynamiques du réacteur.

Il convient de souligner que les paramètres qui influencent l'équilibre de l'adsorption dynamique en lit fixe sont les mêmes que ceux précédemment développés pour les réacteurs discontinus .

I.9.1.1. Méthode stochastique

Le phénomène observé dans la colonne d'adsorption est réputé être aléatoire. La variation de la concentration dans les deux phases ne suit aucune règle prédéfinie, et par conséquent, son étude doit être soumise à une analyse statistique [45]**.**

I.9.1.2. Méthode mathématique

Comparativement, la modélisation mathématique est simple et peut être réalisée aisément sans nécessiter aucun appareil expérimental, ce qui a stimulé un intérêt croissant au cours des dernières décennies. A ce jour, différents modèles mathématiques ont été employés pour décrire et prédire les courbes de percée d'un système d'adsorption sur colonne, que ce soit en phase liquide ou gazeuse [45]**.**

I.9.1.3. Méthode expérimentale

Une alternative à la méthode mathématique de dimensionnement des unités d'adsorption est la Zone de Transfert de Matière (ZTM). Ce concept, développé par Michael pour l'échange d'ions et plus tard adapté par Lukchis pour l'adsorption, a montré que dans une colonne garnie d'adsorbant, seule une partie, dont la profondeur est variable, participe réellement au phénomène d'adsorption, où environ 80% de l'échange de soluté entre les phases mobile et fixe se déroule. Cette portion de lit, appelée "Zone de Transfert de Matière", se déplace à travers le lit à une vitesse constante jusqu'à saturation. Le dimensionnement d'une colonne d'adsorption basé sur ce concept de ZTM peut être réalisé en calculant trois paramètres intrinsèques caractérisant cette portion du lit, chacun pouvant être calculé indépendamment en se basant sur les phases solide ou liquide [45].

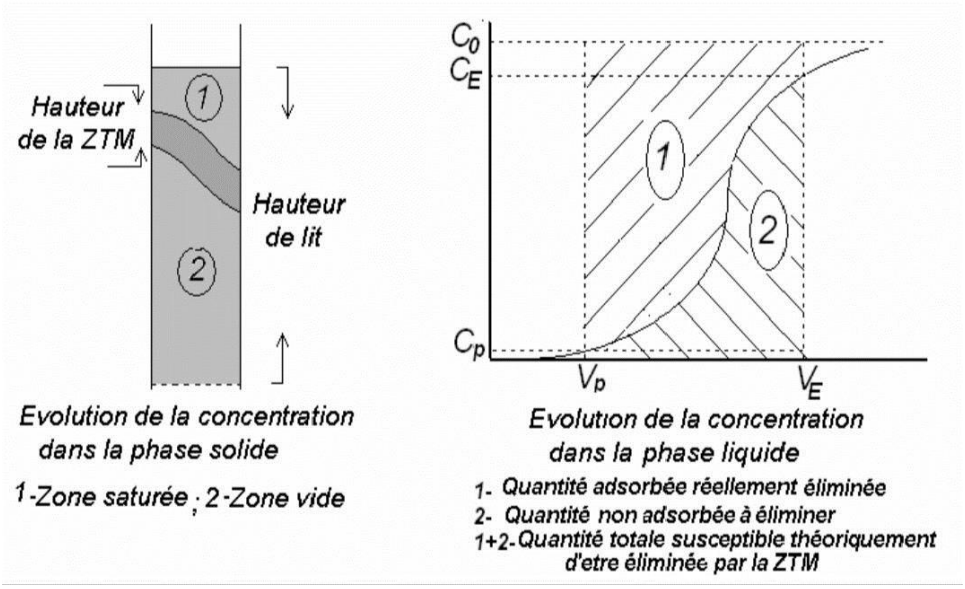


Figure I.6 : Evolution de la concentration dans les deux phases [45].

I.9.2. Ecoulement dans un lit fixe

Avant de voir comment modéliser un écoulement piston dispersif dans un lit fixe, nous devons nous assurer que ce lit est bien fixe et non fluidisé: le fluide ne doit pas d´epasser une certaine vitesse appelée vitesse limite de fluide. Le choix de l'adsorbant dépend principalement de la porosité. Il existe deux types de colonnes d'adsorbant: les particules monodisperses, qui ne présentent qu'un seul niveau de porosité, et les particules agglomérées, qui présentent deux niveaux de porosité. Les particules agglomérées, telles que les zéolithes, présentent trois niveaux de porosité: la porosité extra-granulaire, la porosité des particules due à l'espace libre entre les cristaux (macro-porosité) et la porosité des cristaux (micro-porosité)[46].

- Particules d'adsorbant ne présentent qu'un seul niveau de porosité, elles sont ditesmonodisperses (voir figure I.7) :

- La porosité du lit due à l'espace libre entre les particules ;
- La porosité des particules

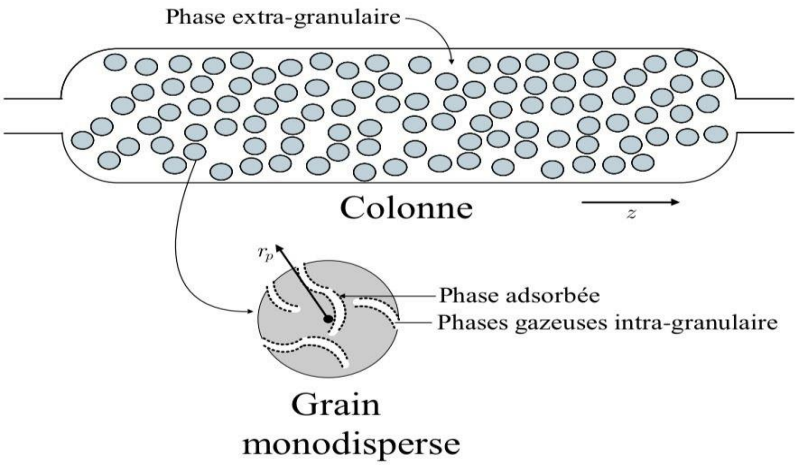


Figure I.7 : Différentes phases existant dans un lit d'adsorbant monodispersé [46].

- Particules d'adsorbant aggloméré présentent deux niveaux de porosité, elles sont dites bidisperses. C'est le cas des zéolithes. Le lit présente alors trois niveaux de porosité (voir figure I.8) :

- La porositéextra-granulaire ;
- La porosité des particules due à l'espace libre entre les cristaux (macro-porosité)
- La porositédes cristaux (micro-porosité)

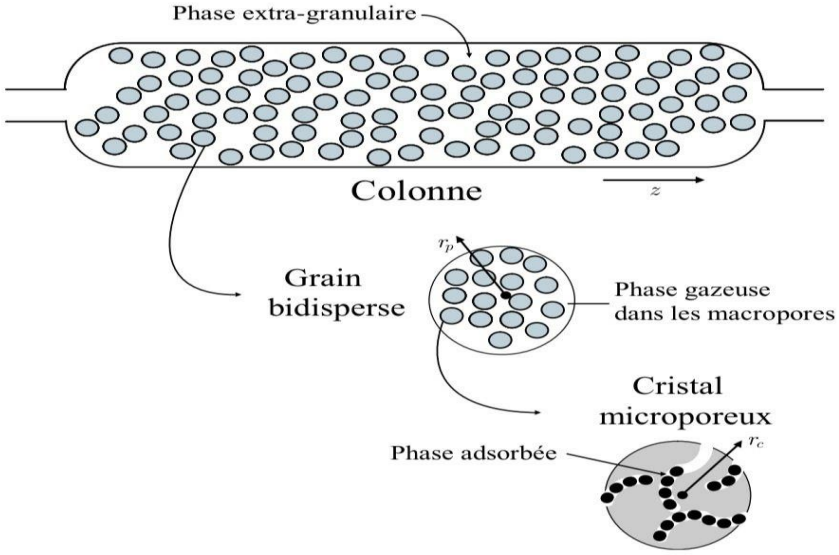


Figure I.8 : Différentes phases existant dans un lit d'adsorbant bidispersé [46].

I.9.3. Capacité fractionnaire (F)

Il permet de déterminer l'efficacité d'élimination de l'adsorbant, notée [F]. Elle est définie comme la quantité qui intervient réellement dans le phénomène d'adsorption par rapport à la quantité totale d'adsorbant. Elle est calculée graphiquement par le rapport [47].

$$F = \frac{A_Z}{A_{max}} = \frac{\int_{VBP}^{VE} (C_0 - C_t)dv}{C_0 (V_E - V_{BP})} \quad (I.19)$$

Où

A_{max} : représente la quantité maximale d'adsorbat qui peut être éliminée par le filtre à l'intérieur de la zone de transfert de la matière.

A_z : est la quantité réellement éliminée à l'intérieur de la zone de transfert de matière.

V_E : correspond au volume d'effluent traité dont la concentration est égale ou supérieure à 80% de la concentration initiale.

V_{BP}: correspond au volume d'effluent traité dont la concentration est inférieure à 5 delà concentration initiale.

I.9.4. Hauteur de la Zone de Transfert de Matière (Hz)

C'est dans cette portion du lit que pratiquement se déroule la majeure partie du phénomène. Elle détermine la vitesse d'élimination de l'adsorbat par l'adsorbant. C'est un paramètre effectif de quantification des vitesses globales d'échange [47]. Elle se calcule comme suit :

$$H_Z = U_Z . t_Z \quad (I.20)$$

U_Z : est la vitesse de déplacement de la ZTM

$$t_Z = t_E - t_{BP} \quad (I.21)$$

Le temps requis par la ZTM, pour s'établir au sommet de la colonne, t_Z peut être déterminé expérimentalement, la seule inconnue est Uz. A part sa période de formation, la ZTM, se déplace le long de la colonne avec une vitesse. D'autre part, le temps nécessaire à la ZTM pour se déplacer le long du lit d'adsorbant est calculé comme suit :

$$t_E - t_f = U \quad (I.22)$$

L'adsorption n'étant pas un phénomène instantané, t_f est le temps requis pour la formation de la zone d'adsorption. Comme la vitesse du mouvement de la zone du transfert de masse est constante, par conséquent

$$U_Z = \frac{H_Z}{t_z} = U\,\frac{H_b}{t_E - t_f} \quad (I.23)$$

La seule inconnue est le temps de formation de la ZTM, cependant il peut être estimé de la manière suivante [47] :

- Si F=0, veut dire que l'adsorbant est entièrement saturé, le temps de formation (t_f) de la ZTM au-dessus du lit devrait être sensiblement égal au temps (t_z), le temps que met cette dernière à parcourir une distance égale à sa propre profondeur.
- Si F=1, alors l'adsorbant est exempt d'adsorbat, le temps de formation de ZTM devrait être très court, à la limite égale à zéro. Ces deux conditions limites sont décrites par une relation :

$$t_f = (1 - F)\,t_Z = (t_E - t_{BP}) \quad (I.24)$$

Et :

$$H_Z = \frac{H_b\,t_z}{t_E - t_f} = \frac{H_b\,(t_E - t_{BP})}{t_{BP} + F\,(t_E - t_{BF})} \quad (I.25)$$

Finalement en sachant que t = V/Q :

$$H_Z = \frac{H_b\,(V_E - V_{BP})}{V_{BP} + F(V_E - V_{BP})} \quad (I.26)$$

I.9.5. Vitesse de déplacement de la ZTM

C'est une mesure de la nature d'équilibre du processus d'adsorption dans des conditions continues d'écoulement. Elle mesure la vitesse de saturation du lit. Elle est directement liée à la hauteur de la ZTM. Elle est calculée par la relation suivante [47] :

$$U_Z = \frac{H_b}{t_z} = \frac{H_b\,Q}{V_{BP} + F\,(V_E - V_{BP})} \quad (I.27)$$

Le dimensionnement d'une colonne d'adsorption, peut se faire en calculant ces trois paramètres caractérisant la Zone de Transfert de Matière.

I.9.6. Volume totale traité

Le volume totale (d'effluent) traité, Veff (mL), qui est calculé en utilisant l'équation suivante [48] :

$$V_{eff} = Q\,t_{total} \quad (I.28)$$

Où les paramètres suivants représentent :

T_{total}: Temps total en min.

Q : Débit volumétrique en mL /min.

I.9.7. Quantité totale retenue

La valeur de la quantité adsorbée totale, Q_{totale} , pour une concentration d'alimentation et un débit donné elle est égale à l'aire de la zone sous la courbe de rupture, entre les limites du temps initial et du temps total de la concentration du colorant adsorbé ($C_0 - C$) et peut être calculé à partir de l'équation suivante [48] :

$$Qt_{total} = \frac{Q}{1000} \int_{t=0}^{t=total} (C_0 - C)\,dt \qquad (I.29)$$

I.9.8. Modèles mathématiques relatives à l'adsorption dynamique

Nombreux modèles disponibles pour décrire les courbes de percée [49]. Des modèles mathématiques simples ont été créés dans le but de prédire le comportement dynamique d'une colonne d'adsorption en lit fixe Ces modèles mathématiques sont :

I.9.8.1. Modèle de Clark

Le modèle de Clark est également un modèle très populaire dans le domaine de l'adsorption. Il est basé en partie sur les isothermes de Freundlich pour simuler les courbes de rupture, est défini C'est le modèle non linéarisé [50].

$$\frac{C_e}{C_0} = \left(\frac{1}{1+ A \exp^{(-rt)}}\right)^{1/n-1} \qquad (I.30)$$

Où : $1/n$: Paramètre de Freundlich.

A et r : Paramètres d'équation du modèle de Clark.

I.9.8.2. Modèle de Thomas

Le modèle de Thomas est le modèle le plus fréquemment cité dans la littérature et est souvent utilisé pour décrire le comportement des processus d'adsorption dans les colonnes à lit fixe [52]. Il est développé en 1944, s'inspire de l'isotherme de Langmuir et du modèle dynamique quadratique réversible. Le modèle de Thomas Décrit l'adsorption de composés organiques, inorganiques et de métaux lourds [51],[52]. D'après l'équation de continuité :

$$\text{Ln}\left[\frac{C_0}{C} - 1\right] = \frac{K_{Th} q_0 m}{Q} - K_{Th} C_0\, t \qquad (I.31)$$

Avec :

C_0: Concentration initiale du polluant (mg /l).

C : Concentration d'effluent au temps (t) en sortie de la colonne (mg /l).

m : Masse du biosorbant ou la biomasse (g).

k_{th}: Constante de Thomas (l /mg. h).

q_0: Capacité d'adsorption maximale du soluté sur la biomasse (mg /g).

Q : Débit d'alimentation en solution de la colonne (l /h).

t : Temps de percée relative à la concentration C en sortie de la colonne (h).

I.9.8.3. Modèle BDST (Bed Depth Service Time)

Le modèle BDST est un modèle simple qui relie le temps de passage à la hauteur de la colonne en relation avec les paramètres de concentration et d'adsorption opérationnels. L'équation est donnée par la relation suivante [53]:

$$t = \frac{N_0 H}{C_0 V} - \frac{1}{K_a C_0} \text{Ln} \left[\frac{C_0}{C} - 1\right] \quad \text{(I.32)}$$

Avec :

C : Concentration en ion métallique en sortie de la colonne (mg /l).

N_0: Capacité d'adsorption en (mg /l).

V : Vitesse linéaire (cm /h).

K_a: Constante de vitesse du modèle BDST (l /mg .h).

t : Temps de percée (h).

H : Hauteur du lit (cm).

C_0 : Concentration initiale de l'ion métallique en solution (mg /l).

I.9.8.4. Modèle de Yoon-Nelson

Les chercheurs Yoon et Nelson ont développé un modèle relativement simple pour décrire la courbe d'adsorption de vapeur ou de gaz dans une colonne remplie de charbon. Ceci est appliqué pour determiner la Valeur du temps (τ) correspond ant à 50% d'adsorption du polluant. Le modèle est écrit sous le format Suivant [53],[54]:

$$\text{Ln} \left[\frac{C}{C_0 - C}\right] = K_{YN}\, t - \tau K_{YN} \quad \text{(I.33)}$$

Avec :

C_0: Concentration initiale en polluant (mg /l).

C : Concentration en polluant en sortie de la colonne et au temps t (mg /l).

K_{YN} : Constante de Yoon-Nelson (min^{-1}).

τ : Temps correspondant à la biosorption de 50% d'adsorbant (min).

I.9.8.5. Modèle de Bohart-Adams

En 1920, Bohart et Adams ont proposé ce modèle pour expliquer l'adsorption du chlore gazeux sur le charbon actif. Ce modèle est largement utilisé pour représenter la percée des colonnes à lit garni dans les conditions initiales de fonctionnement. Le modèle est basé sur l'estimation de paramètres tels que la capacité d'adsorption maximale et le coefficient de transfert de masse [55], [56]. La forme linéaire de ce modèle est:

$$\mathrm{Ln}\left[\frac{C}{C_0}\right] = \mathrm{K_{BA}}.\mathrm{C_0}.\mathrm{t} - \mathrm{K_{BA}}.\mathrm{N_0}\frac{\mathrm{H}}{\mathrm{U_0}} \quad \text{(I.34)}$$

No et K_{BA} déterminées à partir de la partie linéaire du tracée de ln (C/C_0) en fonction du temps.

Où :

C_0, C : Concentration de l'adsorbat initiale et à la sortie respectivement (mg/l).

H : Hauteur du lit (cm).

U_0: Vitesse superficielle en (cm/ min).

N_0: La concentration de saturation (mg/ l).

K_{BA} : Coefficient de transfert de masse (l/mg. min).

I.9.8.6. Modèle de Wang

Un modèle de transfert de masse a été développé par Wang pour décrire la courbe de disintegration d'une solution contenant des ions Co ou Zn dans un lit fixe [57].

La formule pour le modèle est:

$$\mathrm{t} = \mathrm{t_{1/2}} - \frac{1}{\mathrm{K_W}}\mathrm{Ln}\left[\frac{1}{1-\mathrm{X}}\right] \quad \text{(I.35)}$$

$$\mathrm{X} = \frac{\mathrm{C}}{\mathrm{C_0}} \quad \text{(I.36)}$$

Avec :

K_W : constant de vitesse (min^{-1}).

t ½ : temps correspondant à la biosorption de 50% d'adsorbant (min).

t : temps de perçage (min).

I.9.8.7. Modèle de Hutchins

En 1973, Hutchins propose un modèle basé sur les travaux de Bohart-Adams. Le modèle peut être utilisé pour déterminer la capacité maximale d'adsorption et estimer la hauteur critique

(Hc) représentant le front [58]d'adsorption. L'équation de ce modèle est et s'écrit:

$$t_p = aH + b \quad (I.37)$$

$$a = \frac{N_0}{C_0 U_0} \quad (I.38)$$

$$b = \frac{1}{K_H . C_0} \text{ Ln } \left[\frac{C_0}{C_P} - 1\right] \quad (I.39)$$

En posant t=0 ; nous obtenons

$$H_C = \frac{b}{a} \quad (I.40)$$

Avec :

t_p: Temps de percée (min).

H : Hauteur du lit (cm).

N_0: Capacité d'adsorption du lit (mg/l).

U_0: Vitesse linéaire (cm/min).

K_H: Constante de vitesse de Hutchins (l/mg min).

C_P: Concentration de percée (mg/l).

La capacité maximale d'adsorption (N_0) et la constante K_H ont déterminé en varions la hauteur du lit H, la pente et l'ordonnée a l'origine de la droite $t_p = f(H)$.

I.10. Conclusion

Ce chapitre nous a permis de comprendre le phénomène d'adsorption en régime statique et dynamique. Nous avons présenté les notions de base sur ce phénomene , les caractéristiques mesurables de l'adsorption, et les différents modèles mathématiques décrivant les courbes de percées. De plus, l'utilisation d'une méthode d'intelligence artificielle, notamment les réseaux de neurones artificiels (RNA), pour modéliser et prédire les performances des systèmes d'adsorption, ont été adapté en raison de leur robustesse et de leur capacité à traiter des relations complexes non linéaires. Cette méthode est explorée dans le prochain chapitre.

CHAPITRE II :

RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS

II.1. Introduction

L'industrie moderne doit toujours contrôler systèmes fonctionnant dans des limites pour obtenir les meilleurs résultats. Les scientifiques ont proposé plusieurs méthodes de contrôle comme solutions possibles. L'une de ces méthodes consiste à utiliser les techniques de réseau neuronal dans le processus de contrôle, soit dans la conception du modèle, soit dans la conception du contrôleur. Ce chapitre présente les principes de base des réseaux de neurones artificiels, leur formation et leur utilisation pour modéliser et prédire différents procédés physico-chimiques.

II.2. Historique sur les réseaux de neurones

La nature est depuis longtemps une source d'inspiration pour les humains, qui ont toujours cherché à tirer le meilleur parti de leur environnement. Sa plus grande entreprise en fut sans aucun doute de copier le cerveau humain et de créer une intelligence artificielle similaire à celle trouvée dans la nature. Compte tenu des évolutions récentes de la biologie et des neurosciences modernes, les scientifiques en général et les ingénieurs en particulier ne peuvent se permettre de rester indifférents aux diverses implications de ces évolutions. En fait, son intérêt pour les sciences naturelles a rapidement conduit à ces réalisations.

1890 : W. James, célèbre psychologue américain introduit le concept de mémoire associative, et propose ce qui deviendra une loi de fonctionnement pour l'apprentissage sur les réseaux de neurones connue plus tard sous le nom de loi de Hebb [59].

En 1943 J. Mc Culloch et W. Pitts laissent leurs noms à une modélisation du neurone biologique (un neurone au comportement binaire). Ceux sont les premiers à montrer que des réseaux de neurones formels simples peuvent réaliser des fonctions logiques, arithmétiques et symboliques complexes (tout au moins au niveau théorique [60].

En 1949, D. Hebb initie, dans son ouvrage "The Organization of Behavior", la notion d'apprentissage. Deux neurones entrant en activité simultanément vont être associés (c'est-à dire que leurs contacts synaptiques vont être renforcés). On dit de loi de Hebb et d'associationnisme [61].

En 1958, F. Rosenblatt développe le modèle du Perceptron. C'est un réseau de neurones inspiré du système visuel. Il possède deux couches de neurones : une couche de perception (sert à recueillir les entrées) et une couche de décision. C'est le premier modèle pour lequel un processus d'apprentissage a pu être défini.

S’inspirant du perceptron, Widrow et Hoff, développent, dans la même période, le modèle de l'Adaline (Adaptive Linear Element). Ce dernier sera, par la suite, le modèle de base des réseaux de neurones multi-couches [62].

En 1969, Papert et Minsky montrèrent les limitations du perceptron qui a donné de bons résultats en classification mais il était inapte devant les problèmes non linéaires [63].

En 1982, J. Hopfield a développé un modèle de boucle entièrement basé sur la loi de Hebb, qui définit les termes attracteur et mémoire associative, et a analysé sa dynamique.es découvertes ont contribué à raviver l'intérêt pour les réseaux de neurones, qui avaient perdu de leur élan dans les années 1970 après les articles de Minsky et papert [64].

En 1984, était la découverte des cartes de Kohonen avec un algorithme d’apprentissage de type non supervisé basé sur l'auto-organisation [65].

En 1985, Ackley et coll. Ils ont développé un modèle de la machine d'appel Boltzmann. Cela suffit pour supprimer les limitations de la perception sensorielle. Cependant, le processus de travail était difficile et l'algorithme mettait beaucoup de temps à converger (ce qui fait perdre beaucoup de temps en calcul) [66].

L'apprentissage par renforcement est devenu partie intégrante de la robotique en 1990 avec l'introduction du renforcement pour l'évaluation qualitative des performances [67].

En 1996, la mise en œuvre de diverses améliorations, notamment dans les cartes à assembler soi-même de Q-Kohon, voit le jour [68].

En 2006, deux cartes auto-assemblables ont travaillé en synergie pour intégrer instantanément les mouvements du robot [10]. (2010), Neural Theory of Cognition (NTC) explique comment les hiérarchies de cartes auto organisées accomplissent différentes fonctions cognitives [69].

En 2013, les réseaux de neurones profonds ont montré des performances supérieures en matière de classification d'images et d'audio, surpassant les réseaux multicouches [70].

En 2014, l'apprentissage par palimpseste a été proposé, qui élimine le besoin de fonctions de renforcement et s'appuie sur la loi de Hebb pour trouver l'état d'équilibre [71].

II.3. Définition

Un réseau neuronal est un système informatique qui tente de reproduire le fonctionnement du cerveau humain en traitant des signaux électriques. Grâce à leur capacité à traiter l'information en parallèle et à des mécanismes inspirés des neurones, ils sont capables de déduire des propriétés émergentes pour résoudre des problèmes complexes. Les réseaux de neurones artificiels ont été utilisés avec succès dans diverses applications, notamment la biologie, la médecine, l'industrie et la génération contrôlée. Développement de logiciels, prévisions météorologiques, reconnaissance faciale, pilote automatique, robotique, applications environnementales, financières, économiques et sociales [72]. La grande polyvalence des réseaux de neurones artificiels repose sur leur capacité d'apprentissage supérieure. Il a été théoriquement prouvé que les réseaux neuronaux artificiels peuvent se rapprocher de cartes continues arbitraires avec une précision arbitraire. La cartographie continue souhaitée ou la tâche souhaitée est enregistrée dans le réseau neuronal artificiel grâce à l'entraînement. La recherche dans le domaine des réseaux neuronaux a été motivée par l'intérêt de l'humanité pour la complexité du cerveau humain [73].

II.4. Modèle boîte noire

Le terme de « boîte noire » s'oppose aux termes de « modèle de connaissance » ou « modèle de comportement interne » qui désignent un modèle mathématique établi à partir d'une analyse physique (ou chimique, physico-chimique, économique, etc.) du processus que 'on étudie. Ce modèle peut contenir un nombre limité de paramètres ajustables, qui possèdent une signification physique. Nous verrons par la suite que les réseaux de neurones peuvent être utilisés pour l'élaboration de modèle « boîte grise », intermédiaire entre les modèles « boîtes noires » et les modèles de connaissance. Le modèle « boîte noire » (figure I.1) constitue la forme la plus primitive de modèle mathématique : il est réalisé uniquement à partir de données expérimentales ou d'observations ; il peut avoir une valeur prédictive, dans un certain domaine de validité, mais il n'a aucune valeur explicative. Ainsi, le modèle de l'univers selon Ptolémée était un modèle « boîte noire » : il ne donnait aucune explication de la marche des astres, mais il permettait de la prédire avec toute la précision souhaitable au regard des instruments de mesure disponibles à l'époque [74].

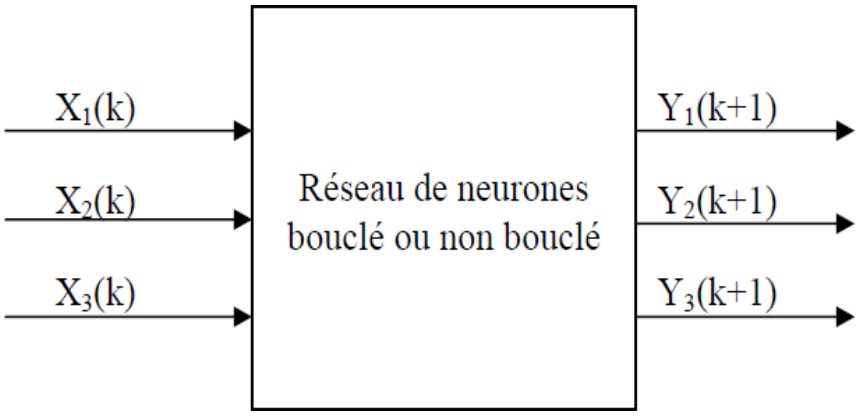


Figure II.1 : Diagramme schématique d'un modèle neuronal boîte noire [74].

Entre la boîte noire et le modèle de connaissance se situe le modèle semi-physique, ou modèle «boîte grise» (appelé aussi modèle hybride), qui contient à la fois des équations résultant d'une théorie, et des équations purement empiriques, résultant d'une modélisation de type « boîte noire ».

II.5. Principe du neurone artificiel

Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones en amont ou des capteurs composant la machine dont il fait partie. A chacune de ses entrées est associé un poids représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones en aval. A chaque connexion est associé un poids. Il est commode de représenter graphiquement un neurone comme indiqué sur la figure II.2 Cette représentation est à l'origine de la première vague d'intérêt pour les neurones formels, dans les années 1940 à 1970 [74].

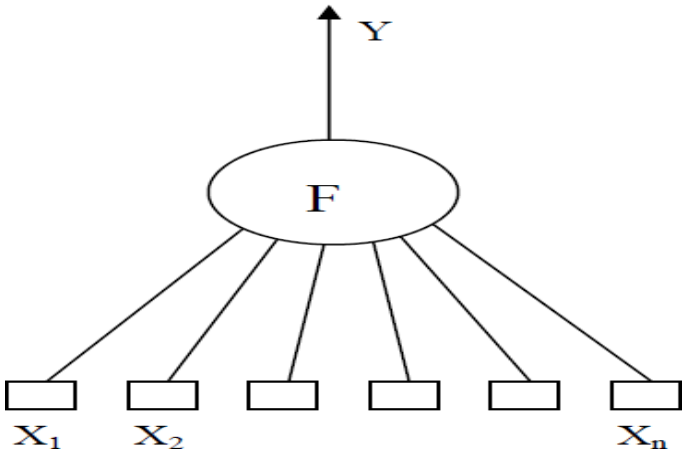


Figure II.2 : Neurone artificiel [74].

Le neurone réalise alors trois opérations sur ses entrées :

- **Pondération** : multiplication de chaque entrée par un paramètre appelé poids de Connexion,
- **Sommation** : une sommation des entrées pondérées est effectuée
- **Activation**: passage de cette somme dans une fonction, appelée fonction d'activation. La valeur calculée est la sortie du neurone qui est transmise aux neurones suivants.

II.6. Neurones biologiques

Dans le cerveau humain l'apprentissage se fait à travers des neurones qui sont connectés par l'axone, les synapses et les dendrites [75].

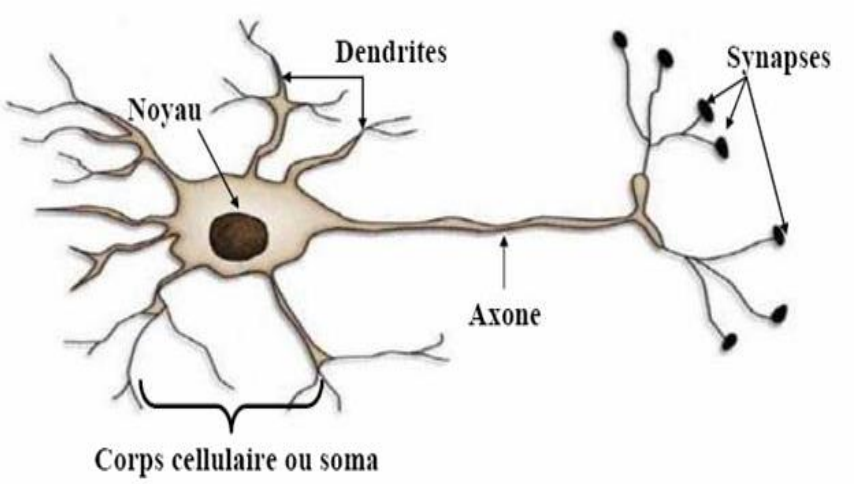


Figure II.3 : Structure d'un neurone biologique [76].

Le neurone est constitué de [77].

- **Les dendrites** : ce sont les récepteurs principaux du neurone pour capter les signaux qui lui parviennent.
- **Le corps cellulaire** : Il contient le noyau. C'est un sommateur à seuil. Il effectue une sommation des influx nerveux transmis par ses dendrites. Si la somme est supérieure au seuil, le neurone répond par un influx nerveux ou potentiel d'action qui se propage le long de son axone. Si la somme est inférieure au seuil, il reste inactif.
- **L'axone** : Il sert de moyen de transport pour les signaux émis par le neurone. Il se ramifie à son extrémité, là où il communique avec d'autres neurones.
- **Les synapses** : Ils permettent aux cellules nerveuses de communiquer entre elles. Les synapses se rencontrent surtout entre les axones et les dendrites.

II.7. Neurones artificiels ou formel

Un neurone formel ou artificiel, communément appelé neurone de McCulloch et Pitts, représente de manière simplifiée un neurone biologique (figure II.4). Il s'agit essentiellement d'une fonction algébrique non linéaire, paramétrée et bornée. Ce neurone possède des entrées qui peuvent être les sorties d'autres neurones ou des signaux externes, ainsi qu'une sortie. La valeur de sortie est calculée en faisant la somme des entrées pondérées par des coefficients (appelés poids synaptiques), puis en appliquant une fonction non linéaire bornée à cette somme pondérée. Cette fonction, généralement une fonction sigmoïde, peut aussi être une fonction gaussienne. [78]

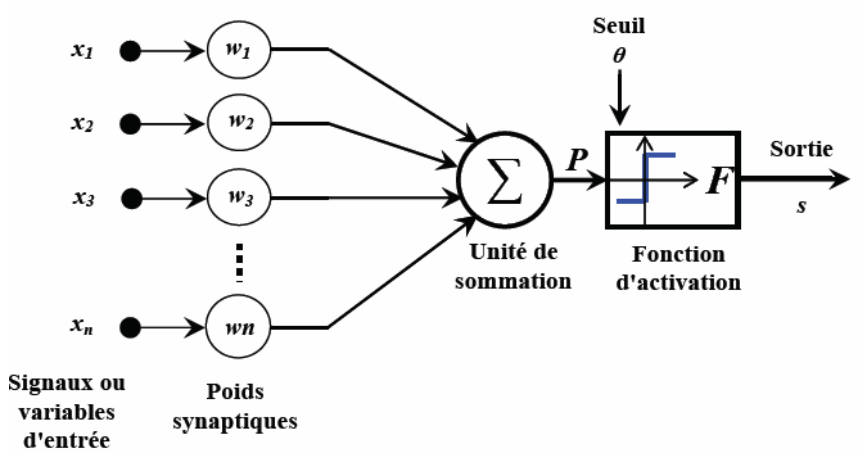


Figure II.4 : Structure d'un neurone artificiel [79].

La figure II.5 résume la correspondance entre le neurone artificiel et le neurone biologique. On remarque dans cette description schématique, que chaque composant ou constituant du neurone artificiel trouve son inspiration biologique [79].

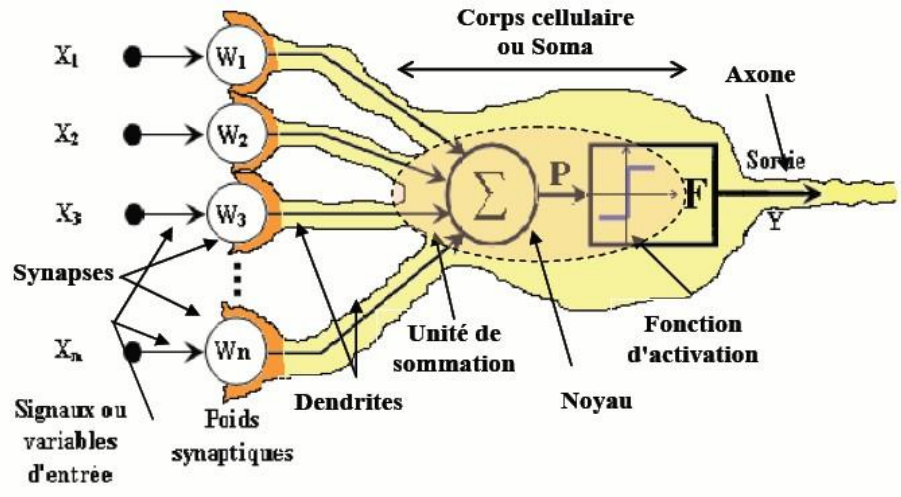


Figure II.5 : Schéma de comparaison entre un neurone biologique et un neurone artificiel[79].

II.8. Connexion entre les neurones

La formation des réseaux de neurones artificiels se fait en et repose sur des connexions qui connectent plusieurs unités entre elles. Une connexion unidirectionnelle pondérée est considérée comme la connexion la plus simple. Il se présente sous la forme d'un arc reliant le neurone i et le neurone j grâce à des masselottes Wij [80]. Le schéma d'une connexion simple est indiqué sur la (figure II.6).

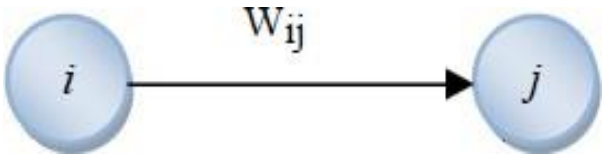


Figure II.6 : Le neurone amont, j le neurone aval et W_{ij} le poids de la connexion.

II.9. Architecture des réseaux de neurone

On distingue deux structures de réseau, en fonction du graphe de leurs connexions, c'est-à-dire du graphe dont les nœuds sont les neurones et les arêtes sont les connexions entre ceux-ci[81] :

- Les réseaux de neurones statiques (ou acycliques, ou non bouclés).
- Les réseaux de neurones dynamiques (ou récurrents, ou bouclés).

II.9.1. Réseaux non bouclés

Un réseau de neurones non bouclé est un ensemble de neurones « connectés » entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans « retour en arrière ». On peut alors représenter le réseau par un graphe acyclique dont les nœuds sont les neurones et les arêtes sont les connexions entre ceux-ci. Si l'on se déplace dans le réseau, à partir d'un neurone quelconque, en suivant les connexions et en respectant leurs sens, on ne peut pas revenir au neurone de départ. La représentation de la topologie d'un réseau par un graphe est très utile, notamment pour les réseaux bouclés, 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.7) [81].

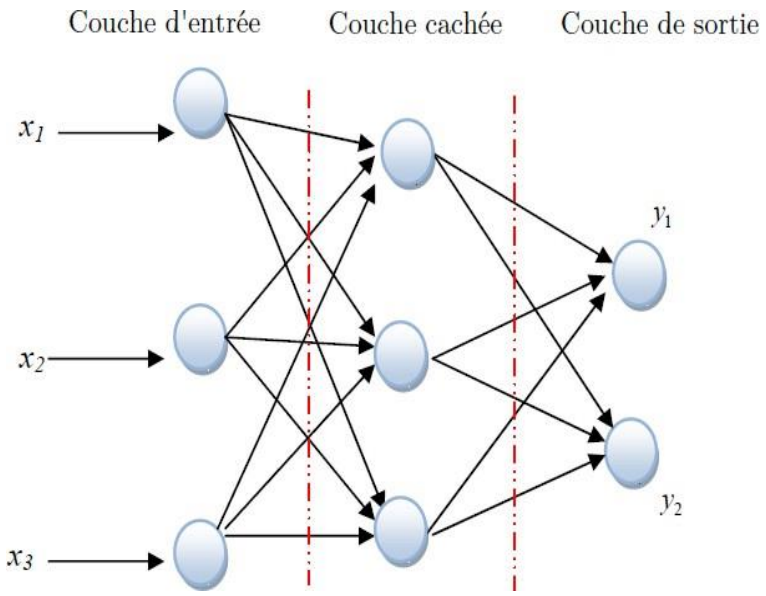


Figure II.7 : Réseau non bouclé [82].

II.9.2. Réseaux bouclés

L'architecture la plus générale pour un réseau de neurones est le « réseau bouclé », dont le graphe des connexions est cyclique, lorsqu'on se déplace dans le réseau en suivant le sens des connexions, il est possible de trouver au moins un chemin qui revient à son point de départ (un tel chemin est désigné sous le terme de « cycle »). La sortie d'un neurone du réseau peut donc être fonction d'elle-même, cela n'est évidemment concevable que si la notion de temps est explicitement prise en considération. Ainsi, à chaque connexion d'un réseau de neurones bouclé (ou à chaque arête de son graphe) est attaché, outre un poids comme pour les réseaux non bouclés, un retard, multiple entier (éventuellement nul) de l'unité de temps choisie. Une grandeur, à un instant donné, ne pouvant pas être fonction de sa propre valeur au même instant, tout cycle du graphe du réseau doit avoir un retard non nul. Les connexions récurrentes ramènent l'information en arrière par rapport au sens de propagation défini dans un réseau multicouches. Ces connexions sont le plus souvent locales. Pour éliminer le problème de la détermination de l'état du réseau par bouclage, on introduit sur chaque connexion « en retour » un retard qui permet de conserver le mode de fonctionnement séquentiel du réseau (Figure II.8) [82].

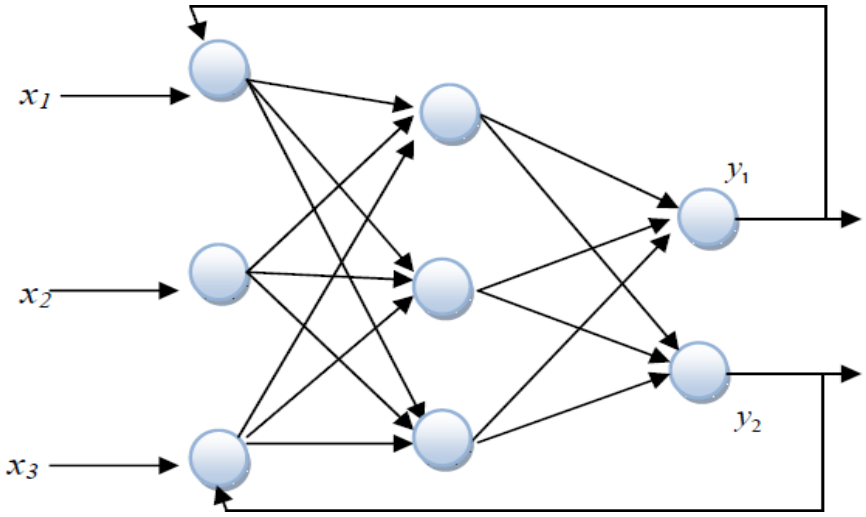


Figure II.8 : Réseau bouclé [82].

II.10. Réseau de neurones artificiel de perceptron multicouches (type feedforward)

Le Perceptron Multicouches (PMC) est un réseau de neurones non bouclé caractérisé par une structure bien particulière: ses neurones sont organisés en couches successives où les informations circulent dans un seul sens, de la couche d'entrée vers la couche de sortie. Les neurones d'une même couche ne sont pas interconnectés. Un neurone ne peut envoyer son résultat qu'à un neurone situé dans une couche postérieure à la sienne. Le PMC est composé de plusieurs couches, qui s'appellent, par convention : la couche d'entrée, la couche cachée et la couche de sortie [83] :

II.10.1. Couche d'entrée

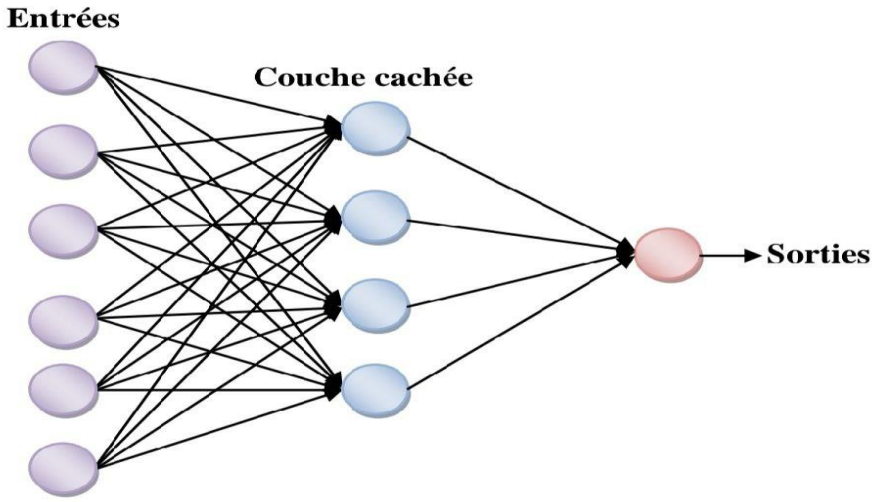
cette couche représente toujours une couche associée aux entrées du système, composée des cellules d'entrée qui correspondent aux k variables d'entrée [84].

II.10.2. Couches cachées

Chaque couche est composée d'un ou plusieurs neurones, dont la fonction d'activation est de la famille des sigmoïdes. Ces neurones n'ont aucun lien avec l'extérieur et sont appelés neurones cachés [83].

II.10.3. Couche de sortie

Elle constitue l'interface du réseau avec l'extérieur. Les neurones de cette couche ont une fonction d'activation linéaire ou non, suivant la nature du problème à résoudre. Ses sorties correspondent aux sorties du système [83]. Les neurones sont reliés entre eux par des connexions pondérées ; ce sont les poids de ces connexions qui gouvernent le fonctionnement du réseau et programment une application de l'espace des entrées vers l'espace des sorties, à l'aide d'une transformation non linéaire.



Figuier II.9 : Exemple d'architecture d'un PMC à n variables d'entrée, une couche cachée avec quatre neurones cachés et une couche de sortie [84].

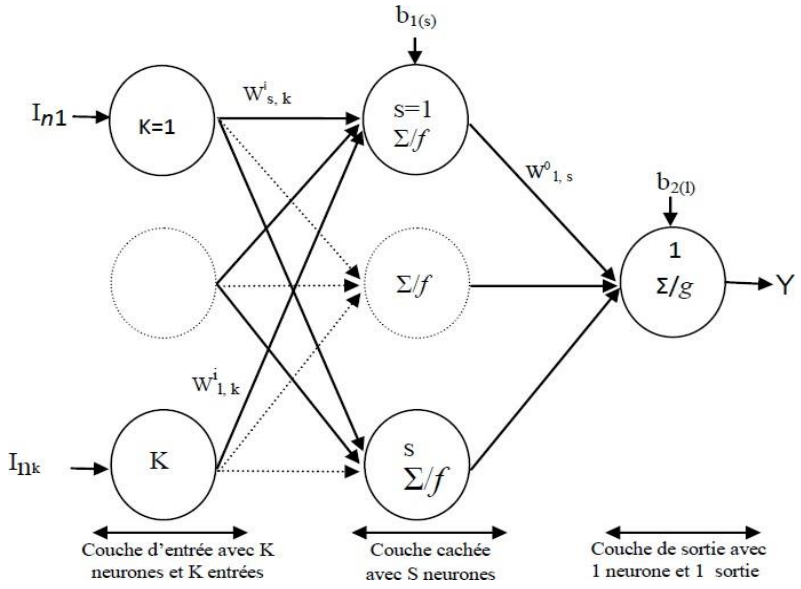


Figure II.10 : Topologie d'un réseau de neurone de type feedforward [85].

II.11. Fonctions d'activations

Généralement, les neurones peuvent adopter des états binaires, mais ils peuvent également prendre des valeurs discrètes ou continues. La fonction d'activation vise également à introduire de la non-linéarité dans le fonctionnement du neurone. Contrairement aux neurones biologiques dont les états sont binaires, la plupart des fonctions de transfert sont continués, donc un nombre infini de dans la plage [0, +1] ou [-1, +1] Les valeurs possibles sont fournies. Nous pouvons identifier quelques-uns des types de fonctions de transfert les plus couramment utilisés [86].

II.11.1. Fonction d'activation binaire à seuil

La figure II.11 présente la fonction d'activation, le seuil introduit une non-linéarité dans le Comportement du neurone, c'est le modèle tout ou rien

$$a = 0 \text{ si } n < 0 \quad \text{(II.1)}$$

$$a = 1 \text{ si } n \geq 0 \quad \text{(II.2)}$$

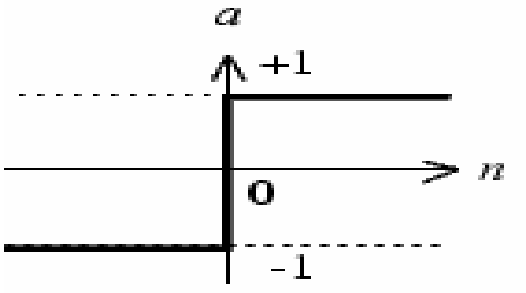


Figure II.11 : Fonction d'activation binaire à seuil [87].

II.11.2. Fonction d'activation linéaire (purelin)

Figure II.12 représenté la fonction linéaire. L'équation qui définit l'état du neurone est [88] :

$$f(x) = x \quad \text{(II.3)}$$

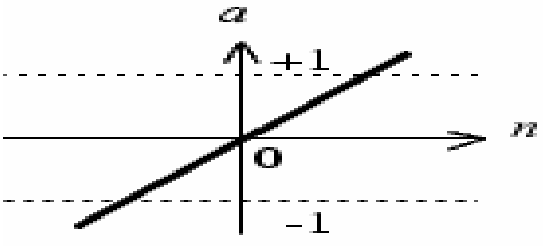


Figure II.12 : Fonction d'activation linéaire (purelin) [87].

II.11.3. Fonction d'activation sigmoïde logarithmique (logsig)

La fonction sigmoïde est la version continue de la fonction linéaire bornée, utilisée généralement dans les réseaux de neurones multicouches (voir figure II.13). L'équation définissant l'état du neurone est la suivante [88] :

$$f(x) = \frac{1}{1+ e^{-x}} \qquad \text{(II .4)}$$

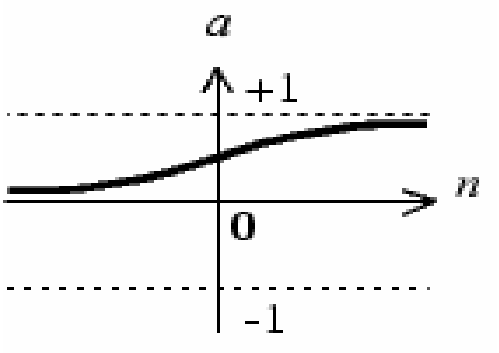


Figure II.13: Fonction d'activation sigmoïde logarithmique (logsig)[87].

II.11.4. Fonction d'activation tangente hyperbolique (tansig)

C'est une autre fonction sigmoïde très répandue (figure II.14). L'équation qui définit l'état du neurone est [89] :

$$f(x) = \frac{e^{+x} - e^{-x}}{e^{+x} + e^{-x}} \qquad \text{(II.5)}$$

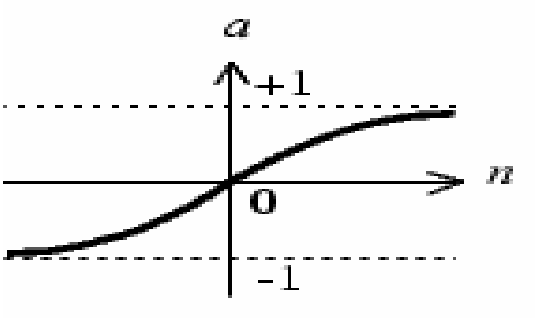


Figure II.14 : Fonction d'activation tangente hyperbolique (tansig) [87].

II.12. Choix de la structure du réseau

La structure de réseaux de neurone artificiel est générée par plusieurs paramètres [75] :

– Nombre de neurone de la couche d'entrée et de sortie.

– La taille ou la dimension de l'échantillon d'apprentissage.

– La quantité de bruit dans les sorties du réseau.

– La complexité de la fonction ou de la classification à faire apprendre au réseau.

– L'architecture du réseau.

– Type de fonction d'activation des neurones cachés.

– L'algorithme d'apprentissage.

– La régularisation.

II.13. Apprentissage des réseaux de neurones

L'apprentissage est peut-être la propriété la plus intéressante du réseau de neurones. L'entraînement est une phase du développement d'un réseau neuronal dans laquelle les poids des neurones sont calculés afin que la sortie du réseau soit aussi proche que possible de la sortie souhaitée [90]. Il existe de nombreux types de règles d'apprentissage qui peuvent être regroupées en trois catégories: les règles d'apprentissage supervisé, renforcé et non supervisé.

II.13.1. Apprentissage supervisé

L'apprentissage supervisé implique l'existence d'un professeur qui a pour rôle d'évaluer le succès (ou l'échec) du réseau quand il lui est présenté un stimulus connu (on dit que ce stimulus est un exemple appartenant à la base d'apprentissage). Cette supervision consiste à renvoyer au réseau une information lui permettant de faire évoluer ses connexions (parfois aussi son propre architecture) afin de faire diminuer son taux d'échec. L'information peut être explicite, sous la forme d'une mesure de l'erreur commise, par exemple, ou globalement sur l'ensemble des exemples de la base. C'est ce qui se passe dans le cas du perceptron. Mais elle peut être plus implicite (apprentissage par renforcement), sous forme d'une simple appréciation (bon ou mauvais, punition ou récompense), sans mesure d'erreur et même être globale, sur l'ensemble des tâches que le réseau doit exécuter. Dans ce dernier cas, il est facile de comprendre que l'apprentissage est le plus difficile, la difficulté majeure consistant pour le réseau à identifier les étapes du processus qui sont responsables de l'échec ou du succès [91]

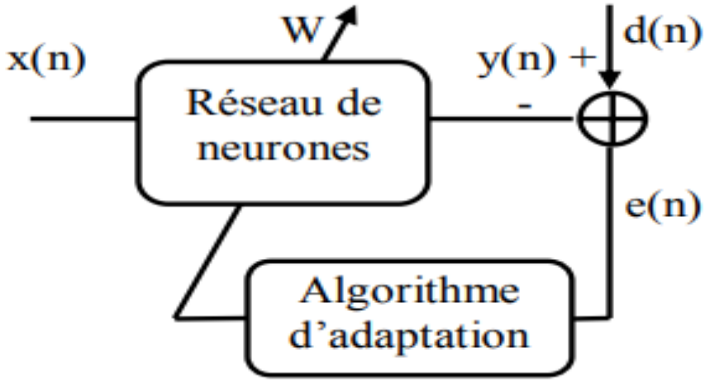


Figure II.15 : Illustration d'apprentissage supervisé[92] .

II.13.2. Apprentissage non supervisé

L'apprentissage non supervisé implique la fourniture à un réseau autonome d'une quantité suffisante d'exemples contenant des répétitions (autrement dit de la redondance), telles que celui-en dégage les régularités automatiquement. Ces réseaux sont souvent appelés auto-organisateurs, ou encore à apprentissage compétitif. Dans l'apprentissage non supervisé, les données ne contiennent pas d'informations sur une sortie désirée, il n'y a pas de superviseur ou expert humain. Il s'agit de déterminer les paramètres du réseau de neurones suivant un critère à définir. Dans ce cas, les exemples présentés à l'entrée provoquent une auto adaptation du réseau afin de produire des valeurs de sortie qui soient proches en réponse pour des valeurs d'entrées similaires. Ce type d'apprentissage possède souvent moins de complexité dans le calcul par rapport à l'apprentissage supervisé. Bien entendu, l'architecture du réseau, préalablement définie par son utilisateur, est une forme de supervision [91]. On distingue deux étapes dans la phase d'apprentissage :

- Une phase de propagation, qui consiste à présenter une configuration d'entrée au Réseau, puis à la propager à celle de sortie en passant par les couches cachées.
- Une phase de rétro propagation, qui consiste, après le processus de propagation, à Minimiser l'erreur commise sur l'ensemble des exemples présentés, erreur considérée Comme une fonction des poids synaptiques [93].

Cette erreur représente La somme des différences au carré entre les réponses calculées et celles désirées pour Tous les exemples contenus dans l'ensemble de l'apprentissage.

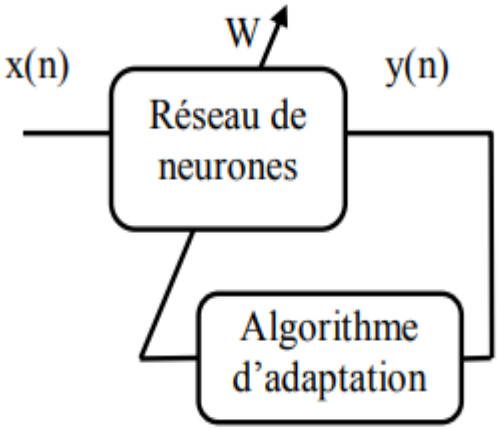


Figure II.16: Illustration d'apprentissage non supervisé [92].

II.13.3. Apprentissage par renforcement (semi – supervisé)

Ce type d'apprentissage est moins classique que les deux derniers (ils sont les principaux). Il a d'une part en commun avec l'apprentissage supervisé la présence d'un critère qui juge l'évolution de l'apprentissage et d'autre part il ne nécessite que des entrées sans définir les sorties désirées. Comme dans l'activation non supervisé, le réseau ajuste les poidssynaptiques suivant un critère de performance. Celui ci renforce les poids du réseau si le critère y est favorable et les punit dans le cas contraire [94].

II.14. Algorithme d'apprentissage

L'algorithme d'apprentissage est la méthode mathématique qui va modifier les poids de connexions afin de converger vers une solution qui permettra au réseau d'accomplir la tâche désirée. L'apprentissage est une méthode d'identification paramétrique qui permet d'optimiser les valeurs des poids du réseau. Plusieurs algorithmes itératifs peuvent être mis en œuvre, parmi lesquels on note : l'algorithme de rétropropagation .

II.14.1. Algorithme de rétropropagation

La formation des réseaux multicouches est généralement supervisée. Pour modifier les poids, utilisez l'algorithme de rétropropagation du gradient. Les algorithmes de rétropropagation sont utilisés efficacement dans de nombreuses applications qui nécessitent des mappages d'entrée/sortie non linéaires. La capacité d'approcher des fonctions non linéaires continues confère aux réseaux de rétropropagation d'excellentes capacités de cartographie (prédiction) [95]. L'algorithme est basé sur la descente de gradient maximale autorisée pour chaque couche du réseau par des règles de chaînage [96].

$$\nabla E(k) = \frac{\partial E(k)}{\partial W(k-1)} \quad \text{(II.6)}$$

Avec :

W : Vecteur des poids.

E(k) : Fonction de Kème erreurLa fonction d'erreur est définie comme :

$$\mathrm{E(k)} = \frac{1}{2}[\mathrm{Y_P(k)} - \mathrm{Y_m(k)}]^2 \quad \text{(II.7)}$$

Où

Y_P est la sortie du réseau.

Y_m est la sortie mesurée.

La constante $\frac{1}{2}$ est choisie pour faciliter le calcul d'une dérivée de la fonction de coût qui est essentiel dans l'estimation des paramètres. L'objectif est de minimiser la fonction d'erreur E(k) en prenant le gradient d'erreur par rapport au vecteur des poids, W doit être adapté Les pondérations sont mises à jour à l'aide [97] :

$$\mathrm{W(k)} = \mathrm{W(k-1)} + \eta \frac{\partial \mathrm{E(k)}}{\partial \mathrm{W(k-1)}} \quad \text{(II.8)}$$

Avec :

W est le poids

η est le taux d'apprentissage et :

$$\frac{\partial \mathrm{E(k)}}{\partial \mathrm{W(k-1)}} = -\mathrm{e(k)} \frac{\partial \mathrm{EY_m(k)}}{\partial \mathrm{W(k-1)}} = -\mathrm{e(k)} \frac{\partial \mathrm{O_0(k)}}{\partial \mathrm{W(k-1)}} \quad \text{(II.9)}$$

Il devient évident que le succès de la technique de rétro-propagation dépend de trois facteurs : le taux d'apprentissage η, la distance entre la production réelle et la production Prévue, et la fonction d'activation. Le taux d'apprentissage détermine la vitesse du réseau se règle en réponse à des erreurs. Si le taux d'apprentissage est trop élevé, les poids ajustés oscillent entre des points avec des hauteurs similaires sur la surface d'erreur (Park, 1996) et le réseau ne converge pas vers un minimum. Si le taux d'apprentissage est trop faible, l'entrainement est lent et le réseau est piégé dans un minimum local [97]. Le taux d'apprentissage devrait se situer dans la gamme $0 \leq \eta \leq 1$.

L'algorithme de rétro-propagation pourrait se résumer comme suit [98] :

- Un ensemble d'entrées et de sorties d'entraînement cible correspondant sont fournis sur le réseau ;

- Le réseau calcule les signaux d'erreur, et il est utilisé pour ajuster les poids ;
- Après avoir beaucoup en amont et en passes, l'erreur de réseau atteint un minimum sur les données d'apprentissage ;
- Le réseau est testé sur des données expérimentales, il n'a pas vu avant de mesurer la capacité de généralisation du réseau.

Les algorithmes de rétro-propagation implantés actuellement dans les logiciels de RNA appartiennent à une des cinq classes suivantes [99] :

- Descente du gradient ;
- Descente des gradients conjugués ;
- Quasi-Newton ;
- Levenberg-Marquardt ;
- Régularisation.

Dans la phase d'apprentissage plusieurs algorithmes peuvent être utilisés, l'un des plus notoires est celui de l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

II.14.1. 1. Algorithme de Levenberg- Marquardt

L`algorithme de Levenberg-Marquardt (trainlm) est le plus rapide pour les réseaux de taille modérée et réduit la mémoire lorsqu'un grand échantillon d'apprentissage est utilisé pour modifier les valeurs de Wij et bi au moyen d'un processus adaptatif qui minimise les erreurs des neurones des sorties (apprentissage supervisé) sur la base des relations données par les équations (II.6) et (II.7) [100] :

$$w_{ij}(k) = w_{ij}(k-1) - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T \varepsilon_i(k-1) \quad \text{(II.10)}$$

$$b_i(k) = b_i(k-1) - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T \varepsilon_i(k-1) \quad \text{(II.11)}$$

J: La matrice Jacobéenne.

k : L'itération en cours de l'algorithme d'apprentissage.

εi : L'erreur de la sortie du $i^{éme}$ neurone et μ est le coefficient d'apprentissage .

Par conséquent, l'objectif de la modélisation neuronale est de réduire au minimum les erreurs de prédiction de l'ensemble des données de validation présentées au réseau à la fin de l'étape d'apprentissage [101].

II.15.Analyses statistiques

Les performances du réseau neuronal ont été mesurées en termes de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM) et du coefficient de détermination (R^2) ou coefficient de corrélation (R) dont les expressions sont données par les relations suivantes [102]

$$\mathrm{REQM} = \sqrt{\frac{1}{P}\sum_{q=1}^{p}\left[(Y)_q^{exp} - (Y)_q^{predit}\right]^2} \tag{II.12}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_q^p\left[(Y)_q^{exp} - (Y)_q^{predit}\right]^2}{\sum_q^p\left[(Y)_q^{exp} - (Y)_n\right]^2} \tag{II.13}$$

$$R = \frac{\sum_{q=1}^{p}\left((Y)_q^{exp} - \overline{(Y)_q^{exp}}\right) - \left((Y)_q^{predit} - \overline{(Y)_q^{predit}}\right)}{\sqrt{\sum_{q=1}^{p}\left((Y)_q^{exp} - \overline{(Y)_q^{exp}}\right)^2 \sum_{q=1}^{p}\left((Y)_q^{predit} - \overline{(Y)_q^{predit}}\right)^2}} \tag{II.14}$$

Ou :

q est le nombre des points des données,

Y_q^{exp}est la sortie expérimentale .

Y_q^{predit}est la sortie prédite par le RNA .

$\overline{Y_q^{exp}}$ et $\overline{Y_q^{predit}}$ sont les valeurs moyenns de Y_q^{exp} , Y_q^{predit}respectivement .

II.16. Conclusion

Ce chapitre décrit la théorie des réseaux de neurones, les différentes formes de fonctions d'appartenance, la structure des neurones biologiques et artificiels et quelques concepts de base sur les types de réseaux de neurones artificiels. Dans le chapitre qui suit, on va présenter en détail les déffirentes étapes pour construire un RNA afin de prédire l'adsorption dynamique du phénole sur les déffirents adsorbants .

CHAPITRE III :

MATERIELS ET METHODES

III.1. Introduction

L'utilisation des réseaux de neurones artificiels (RNA) pour la modélisation, la prédiction et la simulation des systèmes complexes devient de plus en plus populaire ces dernières années, ils ont une option attrayante en raison de leur haut parallélisme, leur robustesse, et en plus leur capacité inhérente à extraire des relations hautement non linéaires et complexes entre les variables du problème sans aucune connaissance exhaustive du système, Ce travail a pour objectifs de :

1. développemer un réseau de neurone artificiel (RNA) pour modéliser l'adsorption dynamique de système phénolique complexe utilisant la résine NDA-100 et du charbon actif (charbon commercial PICA F22, charbons de boue C_DMAD) comme des adsorbants .
2. Faire une comparaison avec des modèles mathématiques pour déterminer le meilleur modèle capable de prédire le phénomène d'adsorption.

Les performances du modèle neuronal optimisé seront évalués par rapport aux données expérimentales en utilisant des mesures statistiques telles que le coefficient de corrélation (R), la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM) .

III.2. Méthodologie de travail

La méthodologie adoptée et les étapes suivies pour le développement du modèle neuronal sont données sous forme d’un organigramme et représentés dans la figure III.1.

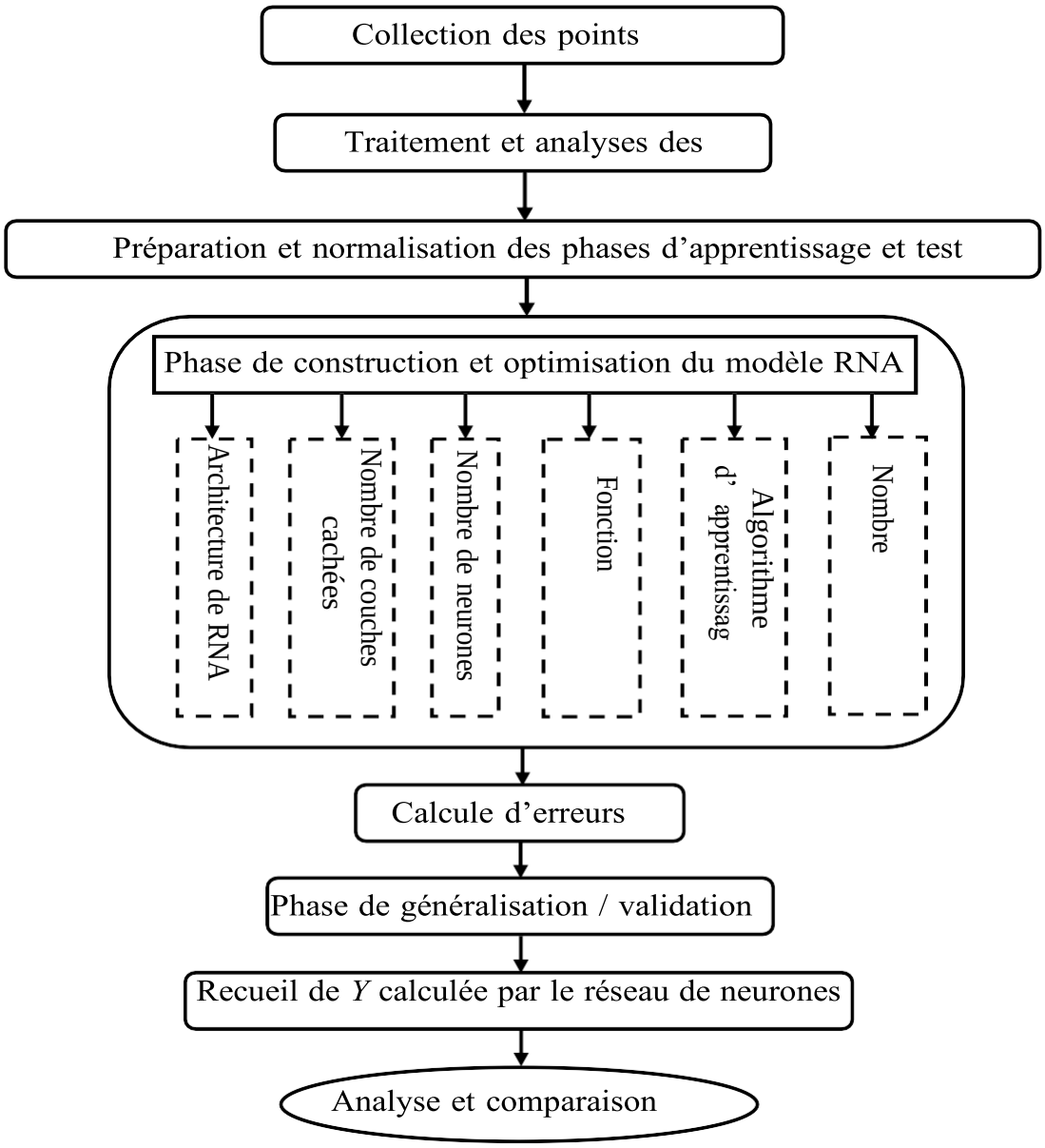


Figure III.1 : Procédure de développement d'un RNA.

Les réseaux de neurones artificiels sont développés pour prédire les valeurs de la concentration réduite du phénol utilisant 03 types adsorbants par le phénomène d'adsorption dynamique et sous des conditions opératoires différentes. La procédure de développement de RNA s'articule sur un développement d'un programme utilisant logiciel de MATLAB comme un outil de conception (MATLAB Neural Network Toolbox).

III.3. Modélisation neuronale d'un système organique d'adsorbat - adsorbant

Troix sous systemes ont été adaptés pour construire un reseau de neurone artificiel . Le premier sous système adsorbant- adsorbat est le phénol- charbon commercial PICA F22 , le deusieme sous système est le phénol -charbon de boue C_DMAD , et le troisieme sagit de phénol- résine NDA-100 . Les données expérimentales ont été obtenues à partir de la littérature. En premier lieu on s'intéresse à obtenir la structure optimal du RNA qui donne une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites par le RNA, les calculs de coefficients de corrélations (R) et racines carrées les erreurs quadratiques moyennes (REQM) ont été fait.

III.3.1. Collecte de la base des données

Les données expérimentales de notre système ont été retirées à partir de l'article de Pan B.C et al . [103] et Krou, N. J. [104] et arrangées sous forme une matrice de dimension (522,8). Les caractéristiques de la résine NDA- 100 et du Charbon actif (charbon commercial PICA F22, charbons de boue C_DMAD) sont présentées dans les tableaux (III.1, III .2).

Tableau III.1 : Propriétés de la résine NDA-100 [103].

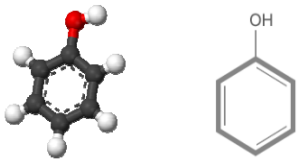
Surface spécifique (m^2/g)	721.50
Diamètre de particule (mm)	0.7-0.8
Densité apparente (kg/m^3)	321.90

Tableau III.2 : Propriétés de la Charbon actif (PICA F22, C_DMAD)[104].

Charbon Actif	**Surface spécifique (m^2/g)**	**Diamètre de particule (mm)**	**Densité apparente (kg/m^3)**
PICA F22	985	0.8-1	933
C_DMAD	125	0.8-1.6	1873

L'adsorbat étudié est le phénol dont ces propriétés sont présentées dans le tableau III.3.

Tableau III.3 : Propriétés physico-chimiques du phénol .

Formule brute	C_6H_5OH
Masse molaire g/mol	94.11
Pka	9,99 à 20°C
Point de fusion (°C)	40,9
Température d'ébullition (°C)	181,8
Densité ($g.cm^{-3}$)	1,07
Densité de vapeur (air = 1)	3,24
Diamètre cinétique (Å) (*)	5,23
Structure chimique	

III.3.2. Sélection des paramètres d'entrés et de sorties du RNA

Les variables d'entrées et de sorties de cette partie ont toujours été sélectionnées en fonction des interactions et les propriétés des composés organiques, les caractéristiques des adsorbants et conditions opératoires de l'adsorption dynamique. Les paramètres d'entrés influençant sur la capacité d'adsorption dynamique sont : (le temps (t), la surface spécifique (A), le diamètre des particules (dp),le masse (m), hauteur du lit(H), la concentration initiale (C_0) et le vitesse (V). La sortie désirée est la concentration réduite (C/C0) de notre adsorbat et qui varie entre [0, +1]. Les paramètres d'entrés et de sortie avec ses valeurs minimales et maximale sont données dans le tableau III.4.

Tableau III.4 : Paramètres d'entrés et de sorties retirées à partir des références choisies.

Analyses Statistiques	Paramètres	Unité	Minimum	Maximum	Moyenne
Entrées	Temps	min	0	7158	964.634
	Surface spécifique	m^2/g	122.5	740	598.437
	Diamètre de particule	mm	0.75	1.2	0.8908
	Masse	g	3	10.05	5.7606
	Hauteur du lit	m	0.0571	0.18	0.102155
	Concentration initiale	mol/m^3	0.532	5.32	4.742568
	Vitesse	m/min	0.0029	0.0487	0.02773
Sortie	Concentration réduite	(-)	0.00004	0.997	0.523

III.3.3. Préparation et division des données

La base de données globale est divisée en trois sous bases :

- Une sous base pour la phase d'apprentissage ;
- Une sous base pour la phase de test ;
- Une sous base pour la validation.
-

Tableau III.5 : Donne la répartition en pourcentage pour trois sous base .

Partition	Nombre de points	Pourcentage
Phase d'apprentissage	348	66.66 %
Phase de validation	87	16.66 %
Phase de test	87	16.66 %
Totale	522	100 %

III.3.4. Normalisation partielle des données

Les données expérimentales sont normalisées dans un intervalle [-1, +1] afin d'éviter la saturation, en utilisant la fonction mapminmax dont l'expression est donnée par la relation suivante :

$$X_{norm} = 2\left(\frac{X_i - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}\right) - 1 \qquad \text{(III.1)}$$

Ou :

X_i est la variable d'entrée ou de sortie .

X_{min} et X_{max} : Les valeurs maximales et minimales de la variable X.

III.3.5. Apprentissage du réseau de neurone

La base de données est constituée de 522 points est exploitée au RNA et répartie comme suit : deux tiers pour la phase d'apprentissage et un tiers pour la phase de validation, ce qui résulte une partition de 348 points de données pour l'apprentissage et 174 points de données pour la phase de validation, respectivement. La phase de validation initiale (174 points de données) a été divisée par la suite en deux formant une phase de test comprend 87 points de données et une phase de validation de 87 points de données. La structure de RNA se compose de trois (03) couches : une ccouche d'entrée, une couche de cachée et une de sortie. Le nombre de neurones utilisé dans la couche d'entrée est 07 correspond aux sept (07) paramètres d'entrés, et pour la couche de sortie le nombre de neurone est 01 correspond à la concentration réduite du phénol. L'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg- Marquardt (apprentissage supervisé). Pour obtenir un réseau de neurone optimal donnant des résultats précis aux données expérimentales, une méthodologie d'optimisation est adoptée par laquelle les paramètres de réseau de neurones sont optimisés en faisant varier :

- Les fonctions de transferts (sigmoïde logarithmique (logsig) ,tangente hyperbolique (tansig) et linéaire (purelin)…) ;
- Le nombre de couches cachées a été changé de 1 à 2 avec un changement de nombre de neurones dans chaque couche de 7 à 50 neurones.

Chaque topologie a été repetée 03 fois afin de choisir la structure optimale donnant les meilleures performances requises .

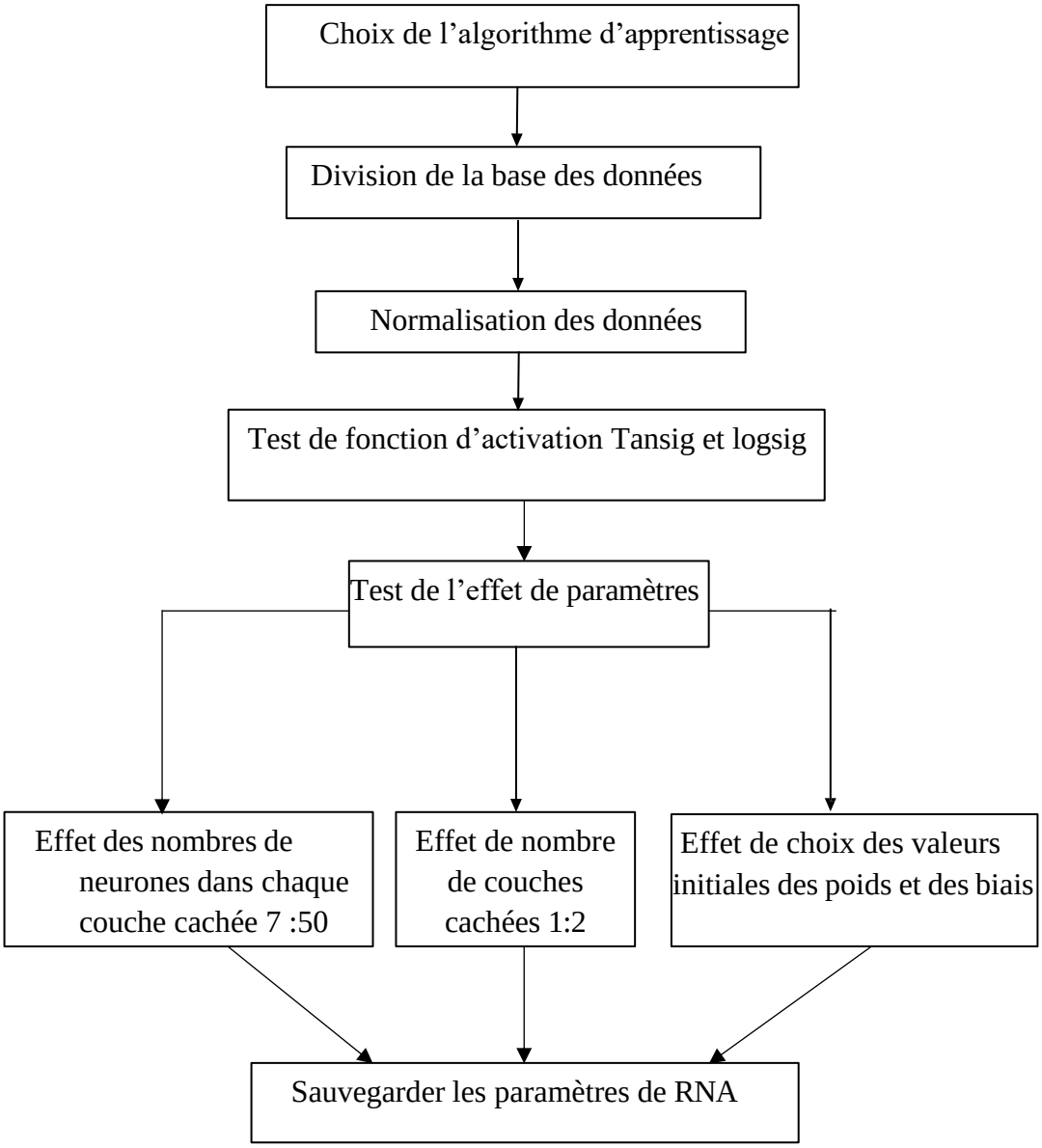


Figure III.2 : Etapes d'optimisation du RNA.

III.4. Modélisation utilisant les modèles mathématiques

Deux modèles mathématiques ont été utilisés pour la modélisation d'adsorption dynamique qui sont : le modèle de Thomas et le modèle de Bohart-Adams.

III.4.1. Modèle de Thomas

Le modèle le plus cité dans la littérature est celui de Thomas. (voir chapitre I). L'équation de ce modèle est écrite comme suit :

$$\ln\left[\frac{C_0}{C}-1\right]=\frac{K_{Th}q_0 m}{Q}-K_{Th}C_0\,t \qquad \text{(III.2)}$$

Avec :

C_0: Concentration initiale du polluant (mg /l).

C : Concentration d'effluent au temps (t) en sortie de la colonne (mg /l).

m : Masse du biosorbant ou la biomasse (g).

K_{Th} : Constante de Thomas (l /mg. h).

q_0 : Capacité d'adsorption maximale du soluté sur la biomasse (mg /g).

Q : Débit d'alimentation en solution de la colonne (l /h).

t : Temps de percée relative à la concentration C en sortie de la colonne (h).

III.4.2. Modèle de Bohart- Adams

Le modèle a été proposé par Bohart et Adams en 1920, (voir chapitre I). L'équation du modèle est donnée par la relation suivante

$$\ln\left[\frac{C}{C_0}\right]=K_{BA}.C_0.t-K_{BA}.N_0\frac{H}{U_0} \qquad \text{(III.3)}$$

N_0 et K_{BA} déterminées à partir de la partie linéaire du tracée de ln (C/C_0) en fonction du temps.

Où :

C_0, C : Concentration de l'adsorbat initiale et à la sortie respectivement (mg/l).

H : Hauteur du lit (cm).

U_0: Vitesse superficielle en (cm/ min).

N_0: La concentration de saturation (mg/ l).

K_{BA}: Coefficient de transfert de masse (l/mg. min).

Les performances de RNA ont été déterminées en terme de coefficient (R) et de racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM) données par les relations suivantes :

$$R=\frac{\sum_{q=1}^{p}\left(\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}-\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}}\right)-\left(\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}-\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}}\right)}{\sqrt{\sum_{q=1}^{p}\left(\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}-\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}}\right)^2\sum_{q=1}^{p}\left(\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}-\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}}\right)^2}} \qquad \text{(III.4)}$$

$$REQM=\sqrt{\frac{1}{P}\sum_{q=1}^{p}\left[\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}-\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}\right]^2} \qquad \text{(III.5)}$$

Où, q est le nombre de points expérimentaux, $\left(\frac{c}{c_O}\right)_q^{exp}$ est la concentration réduite expérimentale et $\left(\frac{c}{c_O}\right)_q^{predit}$ est la concentration réduite predit (calculées) par le RNA. $\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}}$ et $\overline{\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}}$ sont les valeurs moyenns de $\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{exp}$, $\left(\frac{C}{C_0}\right)_q^{predit}$ respectivement .

III.5.Conclusion

Dans ce chapitre, un réseau de neurone artificiel (RNA) a été développé comme une méthode d'intelligence pour décrire l'adsorption dynamique d'un système complexe adsorbant – adsorbat . Une comparaison avec les modèles mathématiques classiques (modèle de Thomas et modèle de Bohart-Adams) nous permet de déduire le modèle approprié qui est capable de décrire avec une grande précision les concentrations réduites du phénol par l'adsorption en lit fixe. Les résultats vont être présentés dans le chapitre qui ce suit.

CHAPITRE IV :

RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1.Introduction

Les résultats de la modélisation du système adsorbant-adsorbat par le réseau neuronal sont exposés, avec une évaluation de la précision du réseau par prédiction. De plus, les résultats de la modélisation mathématique utilisant les modèles classiques seront présentés. Une comparaison des erreurs REQM et des coefficients de corrélation R entre les deux modèles (neuronal et mathématique) a été également montrée.

IV.2. Résultats de la modélisation neuronale

IV.2.1. Détermination des paramètres du (RNA)

La structure et les performances de chaque sous-modèle en terme des racines carréess des erreurs quadratiques moyennes (REQM) et ($REQM_v$) avec les coefficients des corrélations (R) et (R_v) pour la base de données complète et pour la validation ont présentés dans le tableau IV.1. La structure du modèle RNA optimisée correspond aux valeurs de R et R_v proches de 1 avec (REQM) et ($REQM_v$) proches de 0.

Tableau IV.1: Modèle de RNA et les performances de chaque sous-modèle.

RNA							
Sous modèles	**Nº de neurones dans la 1ère couche cachée**	**Nº de neurones dans la 2ème couche cachée**	**Fonction d'activation**	**REQM**	**REQM V**	**R**	**R V**
Sm1	20	00	Tansig	0.1606	0.1619	0.9157	0.9139
Sm2	18	00	Logsig	0.1584	0.1606	0.9180	0.9154
Sm3	09	08	Tansig	0.1495	0.1498	0.9273	0.9267
Sm4	**08**	**07**	**Logsig**	**0.1490**	**0.1470**	**0.9312**	**0.9301**

Nous observons que le quatrième (4ème) sous- modèle a donné des meilleurs coefficients de corrélations (R = 0.9312 et Rv =0.9301) avec une erreur minimale (REQM =0.1490 et REQMV

= 0.1470) ce qui montre un bon accord entre les données expérimentales et prédites par le RNA. Ce 4^{éme} sous modèle est considéré le réseau neuronal optimale choisi. La structure résultante du RNA optimisé est représentée dans le tableau IV.2.

Tableau IV.2: Structure optimale du RNA.

Algorithme d'apprentissage	**Couche d'entrée**	**Couche cachée**			**Couche de sortie**	
	Nombre de neuron	N^{o} de neurone dans la 1èmecouche	N^{o} de neurones dans la 2èmecouche	Fonction d'activation	Nombre de Neurone	Fonction d'activation
Levenberg-Marquardt (rétro-propagation	7	8	7	Sigmoïde logarithmiqe	1	purelin

La structure optimale du réseau a été obtenue en utilisant 07 neurones dans la couche d'entrée, 08 neurones dans la première couche cachée, 07 neurones dans la deuxième couche cachée et 01 neurone dans la couche de sortie. Les fonctions d'activations logarithmique sigmoïde (logsig) et linéaire (purelin) ont été utilisées dans les couches cachées et de sortie respectivement. L'algorithme d'apprentissage utilisé est la rétropropagation de Levenberg-Marquardt. L'architecture optimale de notre modèle est présentée sur la figure IV.1.

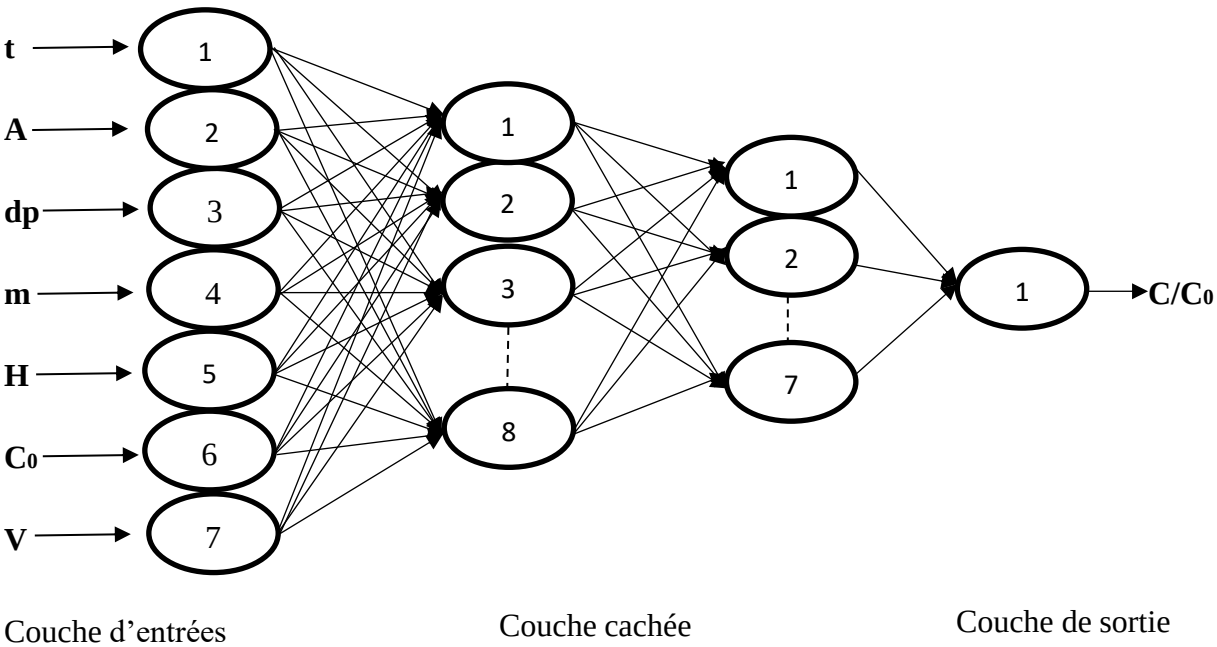
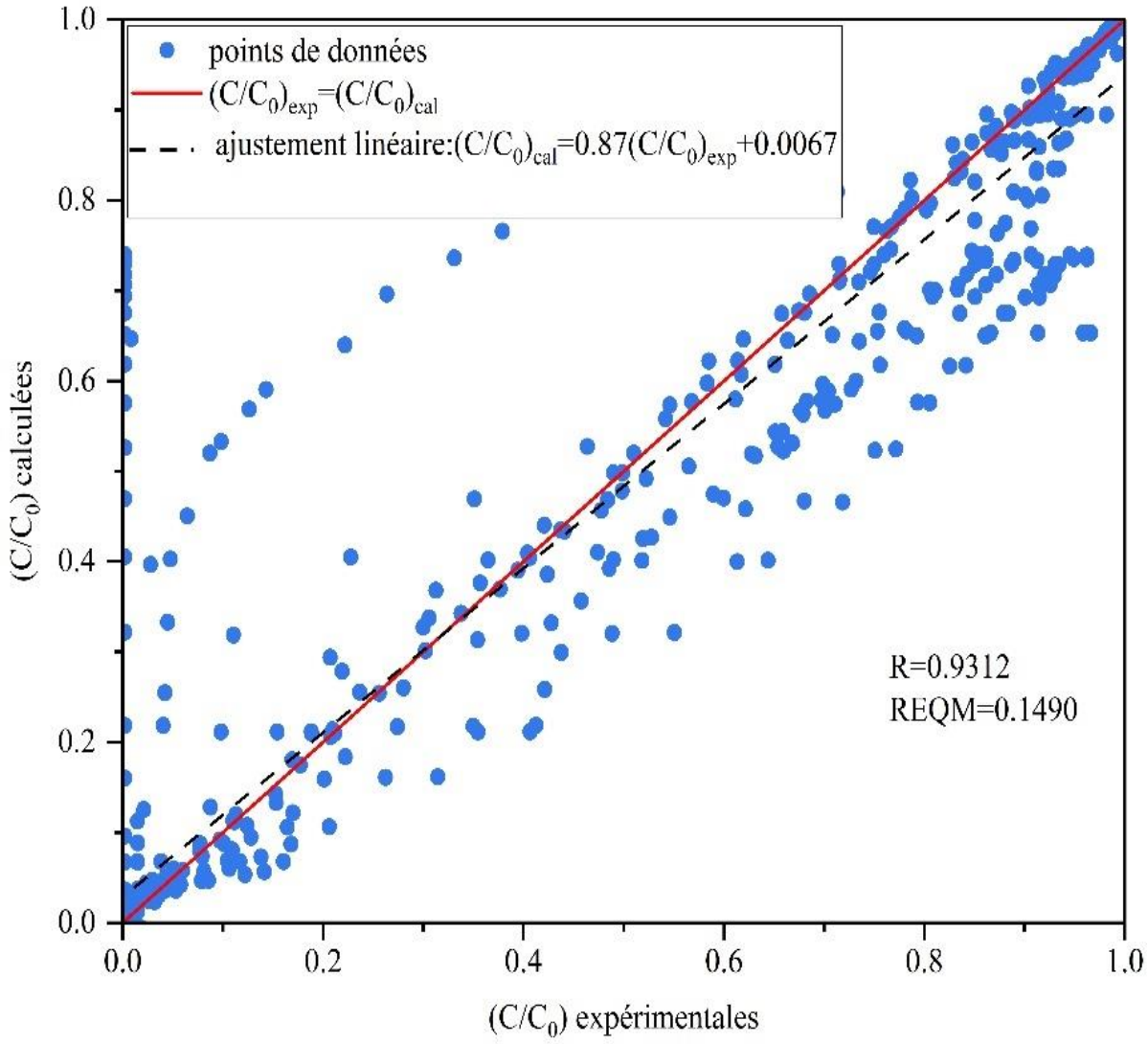


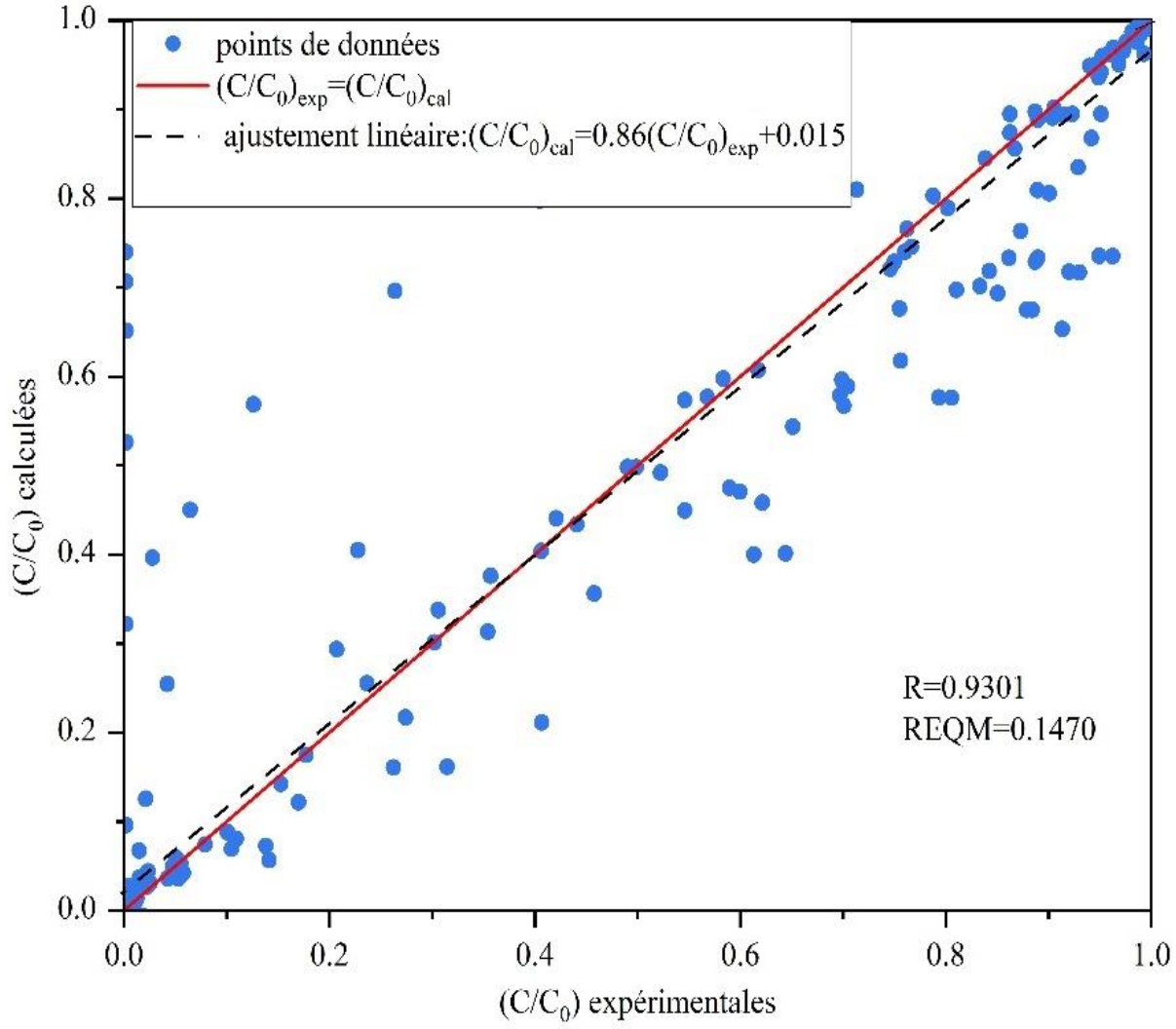
Figure IV.1: Structure optimale du modèle de RNA .

IV.2.2.Interprétation de résultas

La figure IV.2 montre la comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées obtenues par le modèle RNA optimisé pour la base de données totale et la phase de validation. Les paramètres de la régression linéaire ont été calculés directement, obtenus à l'aide de la fonction MATLAB "postreg" et les courbes ont été représentées à l'aide du logiciel OriginPro.



(a)



(b)

Figure IV.2: Comparaison entre les résultats expérimentaux et calculées par RNA. (a)Pour la base totale (b) Pour la phase de validation.

La figure IV.2 montre la comparaison entre les valeurs expérimentales et celles prédites par le modèle RNA. Les resultats present un bon accord entre eux avec R=0.9312et 0.9301 pour la base des données totale et la phase de validation et des erreurs quadratiques tend vers 00.

La figure IV.3 montre la comparaison entre les valeurs expérimentales et celles prédites par le modèle RNA pour l'ensemble des données ainsi que pour les trois phases d'apprentissage, de validation et de test. Dans chaque phase, la plupart des points sont proches de la première bissectrice, et le vecteur [α, β, R] se rapproche de l'idéal, ce qui confirme la robustesse du modèle neuronal établi .

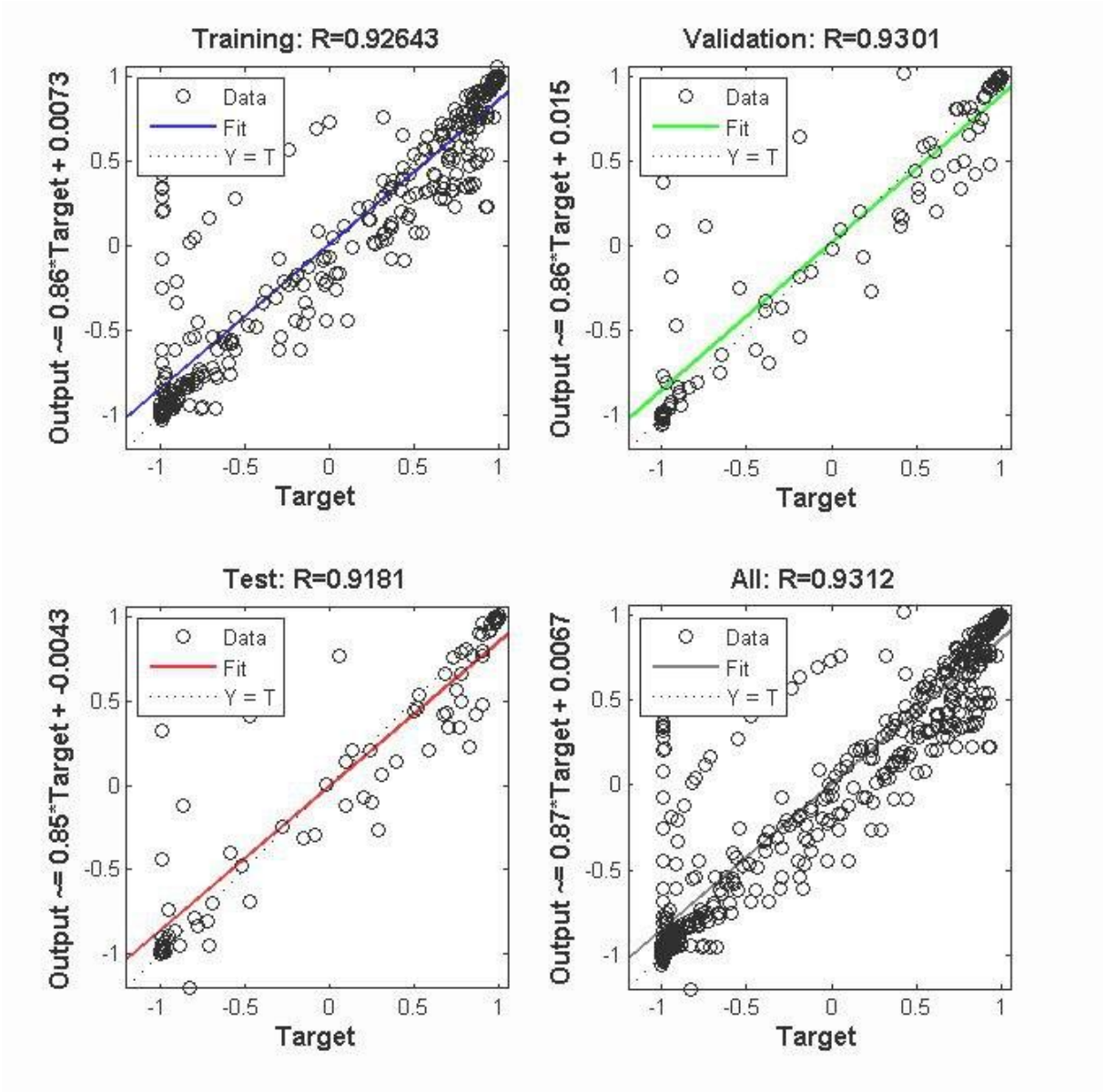


Figure IV.3 : Courbe de régression pour toute la base des données et les 3 phases (apprentissage , test et validation).

Les résultats en terme de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM. REQMv) et en terme des valeurs du vecteur [α, β, R] et [αv, βv, Rv] pour la phase de validation, respectivement proches de l'idéalité [c'est-à-dire α = αv = 1 (pente), β = βv = 0 (coordonnée à l'origine), R = Rv = 1 (coefficient de corrélation) et REQM= REQMv = 0 (racines carrées des erreurs quadratiques moyennes)]. Le modèle RNA optimisé a démontré que l'approche suggérée produit des résultats satisfaisants. On peut également observer que le RNA est capable de capter très bien les données expérimentales de l'adsorption dynamique.

Tableau IV.3: Résultats en terme d'erreur (REQM) et le vecteur [α, β, R].

la base des données totale				La phase de validation			
REQM	**R**	**α**	**β**	**REQM**	**R**	**α**	**β**
0.1490	0.9312	0.87	0.0067	0.1470	0.9301	0.86	0.015

L'évolution de l'EQM pour la phase d'apprentissage, validation et le test en fonction de nombre d'itérations est représentée dans la figure IV.4 . Le meilleure RNA a été trouvé appliquant 260 itérations indiquant la précision des données prédites .

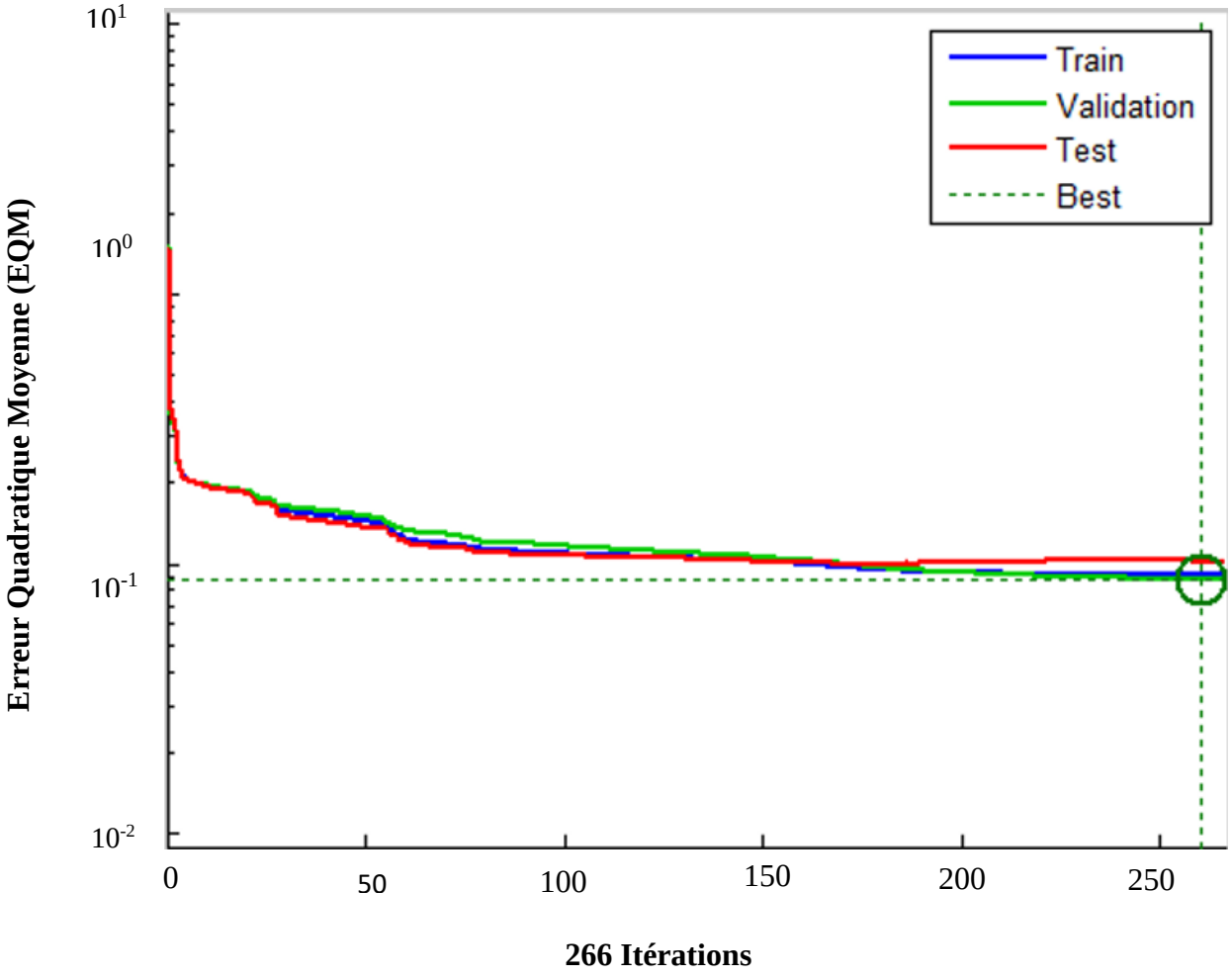


Figure IV.4 : Profils du l'EQM pendant la phase d'apprentissage, de validation et de test en fonction de nombre d'itérations pour la meilleure topologie de réseau.

IV.3. Comparaison avec les modèles mathématiques

Afin d'évaluer le modèle le plus approprié, les modèles Thomas et Bohart-Adams ont été mis en place. A partir de l'équation (III.2) et (III.3), le rapport (C / C0) a été déterminé en fonction du temps (t). La fonction lsqcurvefit qui fait la résolution des problèmes non linéaires de moindres carrés utilisant l'algorithme génétique a été utilisée pour prédire les résultats expérimentaux. Les coefficients de corrélations (R) et les erreurs REQM. Les résultats, montrés dans le tableau IV.4, indiquent que chaque modèle - Bohart-Adams, Thomas et RNA est bien ajusté aux données expérimentales. Notamment, le modèle neuronal (RNA) a présenté des valeurs de R élevées et des erreurs plus petites par apport aux modèles mathématiques ; donc le modèle de RNA est le modèle le plus approprié choisi.

Tableau IV.4: Evaluation des fonctions d'erreurs pour la comparaison entre les trois modèles (Bohart-Adams, Thomas, et RNA).

Nº Du système	**Adsorbant**	**Adsorbat**	**RNA**		**Modèle de Thomas**		**Modèle de Bohart –Adams**	
			R	**REQM**	**R**	**REQM**	**R**	**REQM**
Système 1	PICA F22	Phénol	0.9260	0.1460	0.90	0.151	0.894	0.178
Système 2	C-DMAD	Phénol	0.930	0.1350	0.897	0.172	0.890	0.181
Système 3	Résine NDA-100	Phénol	0.9380	0.1260	0.912	0.133	0.90	0.14

IV.4.Conclusion

Le but de ce travail etait de génèrer un excellent vecteur [R , REQM] à l'aide du RNA . les résultat était satisfaisantes et proche de l'idéalité, illustrant ainsi la capacité du réseau de neurones artificiels à prédire avec précision la concentration réduite du phénomène d'adsorption dynamique de phénol avec la résine NDA-100 et le charbon actif. Nous avons réalisé une comparaison entre le modèle neuronal que nous avons développé et les modèles mathématiques. Les résultats obtenus, en terme d'erreur et de coefficient de corrélation, démontrent que le modèle neuronal est le plus puissant pour prédire l'adsorption en mode continu.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

L'objectif de notre travail est de modéliser le phénomène de l'adsorption dynamique d'un système adsorbant/adsorbat par une méthode d'intelligence artificiel (RNA)Un réseau de neurones artificiel de perceptron multicouches (type Feedforward) a été utilisé avec l'application du l'algorithme d'apprentissage de retro-propagation Levenberg–Marquardt (trainlm). La structure optimale du réseau a été obtenue en utilisant 07 neurones dans la couche d'entrée, 8 neurones dans la première couche cachée, 7 neurones dans la deuxième couche cachée et 01 neurone dans la couche de sortie. Les fonctions d'activations logarithmique sigmoïde et linéaire (purelin) ont été utilisées dans les couches cachées et de sortie respectivement. Le modèle neuronal développé a donné des valeurs de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (REQM) de l'ordre de 0.1490 et 0.1470 pour toute la base des données et pour la phase de validation respectivement, ce qui signifie une meilleure estimation entre les points de données expérimentales et prédite par le RNA. Ces résultats ont été confirmés par les valeurs des coefficients de corrélations (R) obtenus de l'ordre de 0,9312 et 0,9301 respectivement pour toute la base des données et pour la phase de validation. Ces coefficients sont proches de 1.La comparaison entre le modèle neuronal optimal obtenu et les modèles mathématiques en terme de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne REQM et le coefficient de corrélation R montrent la supériorité du réseau de neurones artificiel RNA pour la prédiction de l'élimination du phénol par le phénomène de l'adsorption continue.

Les résultats montrent aussi la capacité de RNA de prédire plusieurs courbes de persées et établir les relations complexes non linéaires comparativement avec les modèles classiques. Il existe d'autre modèles prédictifs intelligents tel que les neuro-flous (Système d'Inférence Flou Neural Network adaptif 'ANFIS') ou PSO, qui peuvent être utilisés pour prédire l'adsorption dynamique pour d'autres systèmes complexes comme les métaux lourds, les colorants, les composés inorganiques à différentes phases et sous différents conditions. D'autres paramètres aussi peuvent être pris en considération comme les forces ioniques et le pH. Ces perspectives peuvent être envisagées dans le futur.

REFERENCES BIBILIOGRAPHIQUES

Références bibliographiques

[1] : El Asir .S., Nouveaux matériaux de structure apatite préparés à partir du phosphate naturel marocain à applications environnementales, Thèse de Doctorat, Université d'Agdal, Maroc (2009).

[2] : Boukerroucha. A A . "Modélisation des stations d'épuration a boues activée cas de la station de Baraki (Alger) ". Thèse de Magister, ENA, Algerie, 173 pages. (2011).

[3] : Mohamed, R., Farag, A. « Regression using support vector machines : basic Foundations ». Sci Total Environ,22(2), 87-94. (2004).

[4] : Bouras O, Propriétés adsorbantes d'argiles pontées organophiles: Synthèse et caractérisation. Thèse d'Etat, Université de Limoges, France, P 15 ,(2003).

[5] : Tamtam . F, Sources et devenir des antibiotiques dans le bassin versant de la Seine, Thèse de Doctorat, Université de marie Curie, France, (2008).

[6] : Feddak f. Saïfour K. «Utilisation d'une méthode d'intelligence artificielle pour la modélisation d'un procédé de traitement des eaux » ,Mémoire de master ,Université Yahia Fares de Médéa(2022).

[7] : Xu, Z., Cai, J. G., Pan, B. C. "Mathematically modeling fixed-bed adsorption inaqueous systems '', J Zhejiang Univ-Sci A (Appl. Phys&Eng), 14(3), 155-176 ,(2013).

[8] : Sa . D.I, Lo . J , Sa . R.G , and Correa-murrieta . M.A , "Study of a fixed-bed column in the adsorption of an azo dye from an aqueous medium using a chitosan – glutaraldehyde biosorbent," (2018).

[9] : Sediri, M. "Contribution à la modélisation de l'adsorption dynamique: Etude comparative'', Thèse de doctorat, université de Médéa, Algérie, (2017).

[10] : Etude de l'adsorption du bleu de méthylène sur la poudre des feuilles d'olivier N Lefki - ummto.dz (2017).

[11] : Hachemi, F., Mortad W. Elimination des deux colorants par adsorption sur un matériau issu de la coquille d'escargot. Mémoire de Master en chimie. Université Abou-Beke Belkaid – Tlemcen (2019).

[12]: Boulkrah, H. «Etude comparative de l'adsorption des ions plomb sur différents adsorbants». Mémoiere de Magister. Université de Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (2008).

[13] : Ettlili, N. Procédé d'adsorption avec régénration électrothermique pour la capture du dioxyde de carbone en post-combustion (Thèse de Doctorat). Ecole nationale superieure des industries chimiques, France (2008).

[14] : Amen, adsorption-définitions et explications, Thechno-Science.net.

[15] : Flora De, Wetterhahn, S. K. E."Mechanisms of chromium metabolism and genotoxicity", Life. Chemi. Reports. 7, 169- 244, (1989).

[16] : Nouacer S, Application des tiges de dattes dans l'adsorption de métaux toxiques de l'eau (Thèse de Doctorat). Université Badi Mokhtar, Anaba, Algerie (2015).

[17] : Baraka . N, élimination des colorants de synthases par adsorption sur un phosphate naturel et par dégradation photocatalytique sur TiO2 supporté, thèse de doctorat ,(2008).

[18] : Tran, H. N., You, S. J., Hosseini-Bandegharaei, A., Chao, H. P. « Mistakes and inconsistencies regarding adsorption of contaminants from aqueous solutions: acritical review». Water Research, 120, 88-116 (2017).

[19] : La franque, Pollet, JP., Garforth, N., Phytoma, B.Phys.Chem, 9, 5-49, (1993).

[20] : Khelifi, O. «Etude de l'adsorption du nickel et du cuivre sur un charbon actif préparé à partir des boues de station d'épuration ». Thèse de Doctorat. Université 8 Mai 1945 Guelma (2018).

[21] : Bentahar Y. «Caractérisation physico-chimique des argiles marocaines: application à l'adsorption de l'arsenic et des colorants cationiques en solution aqueuse ». Thèse dirigée par Nicolas Marmier, Khalid Draoui, 42. Nice-Sophia Antipolis, Universite de Nice-Sophia Antipolis, france (2016).

[22] : Charrière, D. "Caractérisation de la sorption de gaz sur les charbons Application au stockage géologique du dioxyde de carbone dans les veines de charbon'', Thèse de doctorat, université de, Toulouse, France, (2009).

[23] : Hannachi. A, Habaili.D, Chtara.C, and Ratel.A, "Purification of wet process phosphoric acid by solvent extraction with Tbp and Mibk mixtures," Separation and Purification Technology, vol. 55, pp. 212–216, (2007).

[24] : Zarrouki, M. "Etude de l'adsorption dans un système liquide-solide solutuion d'ion dicyanoaurate - charbon actif'', Thèse de doctorat, Ecole Nationale Superieure des Mines De Saint Etienne, France, (2013).

[25] : Orsikowsky Sanchez, A.« Propriétés d'adsorption de différents substrats microporeux appliques a la séparation de gaz caractérisation, modélisation et méthodologie de sélection ». 13. Ecole doctorale: Sciences Exactes et leurs applications (ED211) (2019).

[26] : Belaid . K ,Guenana . R «Adsorption du Cuivre (II) par les billes composites (Alginate /Coquille d'œuf». Mémoire de master, Université A. Mira – Bejaia (2021).

[27] : Khoualdi, A, Medjani, A. «Adsorption du bleu de méthylène par le charbon actif et l'argile». Memoire de Master. Université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi (2016).

[28] : Ruthven. D, « Principles of adsorption and adsorption processes » John Wiley and Sons Inc, (1984).

[29] : Hemati .M « L'adsorption Industrielle » Inp Enciacet A7.

[30] : Reynolds. C. W, "Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model," in Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques, pp. 25–34, (1987).

[31] : Souheila, B. « Eliminations des polluants spécifiques par adsorption sur charbon actif et argile traitée et non traitée ». Memoire de Magister, Université Mohamed Chérif Messaadia – Souk-Ahras (2012).

[32] : Van Der Stap, J., & Klaasse, S. «Labwaarden: acute nierinsuffi ciëntie ». Nursing 22(6), 36-38 (2016).

[33] : Hammad K. Salhi A. Etude de traitement et de caractérisation des adsorbants naturels et essais de rétention des polluants organique et inorganique, diplôme d'Ingénieur d'Etat, Ecole Nationale Polytechnique,(2016).

[34] : Errais . E : Réactivité de surface d'argiles naturelles: Etude de l'adsorption de colorants anioniques, Strasbourg, (2011).

[35] : Dipa . A. E .C et Coll, (2001);(2002).

[36] : Fiset . J.F, Balais . J. F, Ben cheikh . R , Dayal Tyagi . R «Review on metal removal from effluents by adsorption on sawdusts and wood barks», Revue des sciences de l'eau 13/3 ,pp 325-349 (2000).

[37] : Zacar M. O¨, engil I˙. A.S. Equilibrium data and process design for adsorption of disperse dyes onto alunite, Environmental Geology, 45 762–768 (2004).

[38] : Immyl . J, Umppry. H, George. E, Kelleur. H, Procédés de séparation technique, sélection, dimensionnement. EAN13: 9782100052189 p. 147-148. (2001).

[39] : Al Mardini . F, etude de l'adsorption du pesticide bromacil sur charbon actif en poudre en milieu aqueux effet compétiteur des matières organiques naturelles,thése de doctorat, (2008).

[40] : El bey A. «Etude et modélisation de l'adsorption compétitive» .thèse de doctorat ,Université Yahia Farés de Médéa(2021).

[41] : Arfane, A., Salhi, A., Krati, M., Tahiri, S., Monkade, M. «Etude cinétique et thermodynamique de l' adsorption des colorants red195 et bleu de méthylène en milieu aqueux sur les cendres volantes et les mâchefers ». Journal of Materials and Environnemental Science, 5(6), 1927-1939. (2014).

[42] : Zen S. Etude des propriétés physico-chimiques des argiles de l'Est-Algérien. Application à l'adsorption des colorants de tannerie. Thèse de Doctorat. Université 8 mai 1945 de Guelma, (2016).

[43] : Kezrane I. Contribution a l'etude du traitement des sols contamines par des polluants organiques au moyen des biosurfactants . Thèse de Doctorat. Université Yahia Fares de Médéa,(2020).

[44] : Chaknane, B. Etude de la granulation de supports hydrophobes à base d'argiles pontées et de matériaux inerte: application à la mobilité et à l'adsorption dynamique''. Thèse de doctorat, université Saad Dahleb de Blida, Algérie. (2010).

[45] : Namane. A. Adsorption biodegradation du phenol par Pseudomonas Aeruginosa immobilisé sur du charbon actif en grain. Thèse de doctorat, école nationale polytechnique, Algérie. (2006).

[46] : Leinekugel Le Cocq, D. Contribution à la modélisation dynamique simplifiée d'un procédé d'adsorption modulée en pression (P. S. A.). Thèse de doctorat. université Claude Bernard – Lyon 1, France.(2004).

[47] : Hamouche, A. Etude Cinétique et thermodynamique de l'adsorption des métaux lourdspar l'utilisation des adsorbants naturels. Thèse de doctorat, Université de Boumerdes, Algérie (2012).

[48] : Chabane L. «Etude physico-mécanique des billes gélifiées composites a base de montmorillonites pontées, D'alginate et de polyvinyl alcool: application a l'adsorption dynamique de polluants organiques sur lit fixe », thèse de doctorat ,Université Saad Dahleb de Blida 1 (2017).

[49] : Pierre le Cloirec. Adsorption en traitement de l'air. Techniques de l'Ingénieur, traité Environnement, G1 770-7 (2000).

[50] : Ghribi, A., Chlrndi, M. Modeling of fixed bed adsorption: Application of the adsorption of orange dye. Asian Journal of Textile. 4,161-171 (2011).

[51] : Aksu . Z and Gönen . F, "Biosorption of phenol by immobilized activated sludge in a continuous packed bed: prediction of breakthrough curves," Process biochemistry, vol. 39, pp. 599–613, (2004).

[52] : Tufenkji, N.; Elimelech, M. Deviation from the classical colloid filtration theory in the presence of repulsive DLVO Interactions. Langmuir.20,10818 – 10828 (2004).

[53] : Shiue . A et al., "Validation and application of adsorption breakthrough models for the chemical filters used in the make-up air unit (MAU) of a cleanroom," Building and Environment, vol. 46, pp. 468–477, (2011).

[54] : Gupta . S and Babu . B . V , "Removal of toxic metal Cr (VI) from aqueous solutions using sawdust as adsorbent: Equilibrium, kinetics and regeneration studies," Chemical Engineering Journal, vol. 150, pp. 352–365, (2009).

[55] : Sahel .M and Ferrandon-Dusart. O, “Adsorption dynamique en phase liquide sur charbon actif: comparaison et simplification de différents modèles,” Revue des sciences de l’eau/Journal of Water Science, vol. 6, pp. 63–80, (1993).

[56] : Foo. K. Y and Hameed . B.H , “Dynamic adsorption behavior of methylene blue onto oil palm shell granular activated carbon prepared by microwave heating,” Chemical Engineering Journal, vol. 203, pp. 81–87, (2012).

[57] : Wang . Y.-H, Lin . S.-H, and Juang . R.-S, “Removal of heavy metal ions from aqueous solutions using various low-cost adsorbents,” Journal of Hazardous Materials, vol. 102, pp. 291–302, (2003).

[58] : Kumar. R, Bhatia . D, Singh. R, Rani. S, and Bishnoi. N . R, “Sorption of heavy metals from electroplating effluent using immobilized biomass Trichoderma viride in a continuous packed-bed column,” International Biodeterioration & Biodegradation, vol. 65, pp. 1133–1139, (2011).

[59] : James. W, “Psychology (Briefer Course), Chapter XVI," Association,” New York Holt, pp. 253–279, (1890).

[60] : McCulloch .W. S and Pitts . W, “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity”, Bulletin of Mathematical Biophysics, vol. 5, no. 4, pp. 115–133, Dec. (1943).

[61] : Hebb. D. O, The Organization of behavior : à neuropsychological theory. J. Wiley ; Chapman & Hall, (1949).

[62] : Rosenblatt . F The Perceptron: a probabilistic model for information storage and Organization in the brain. Psychological Review. Vol. 65(6), pp. 386-408 (1958).

[63] : Minsky. M, Papert. S, "Perceptrons". Massachusetts Institute of Tech. Press, Cambridge, USA, (1969).

[64] : Hopfield J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities.Proceeding of the National Academy of Sciences. Vol. 79 (8), pp. 2554-2558 (1982).

[65] : Kohonen . T Self-Organization and Associative Memory. Springer – Verlag (1984).

[66] : Ackley. D. H, Hinton. G. E, Sejnowski .T. J A learning algorithm for Boltzmann machines. Cognitive science. Vol. 09, pp. 147-169 (1985).

[67] : Sarzeaud. O, Stephan. Y, and Touzet .C, "Finite element meshing using kohonen's self-organizing maps," in Artificial Neural Networks, Elsevier, pp. 1313–1317, (1991).

[68] : E. Morsli and N. Aboura, "Apport de l'approche global et neuronal à l'amélioration de l'analyse non linéaire des structures." Master en Génie civil (2019).

[69] : Touzet . C, "Théorie neuronale de la Cognition et entraînement cognitif," Congrès Européen de Stimulation Cognitive, (2012).

[70] : Pasquet . J, "Modélisation, détection et classification d'objets urbains à partir d'images photographiques aériennes." (2016).

[71] : Mayaffre. D, Bouzereau .C, Guaresi. M, Precioso. F, and Vanni. L, "Du texte à l'intertexte. Le palimpseste Macron au révélateur de l'Intelligence artificielle," in Congrès mondiale de linguistique française, (2020).

[72] : Ibrir, A. "Contribution à l'étude en trois dimensions (3d) de la dispersion d'un polluant gazeux dans un milieu urbain' 'Thèse de doctorat, Université de Médéa, Algérie, (2022).

[73] : Bendaoud Y. Prédiction Des Résistances Mécaniques des Bétons à Base des Ciments Composés En Utilisant Les Réseaux Neurones Artificiels. Mémoire de magister en Génie civil Université Constantine 1 (2014).

[74] : Ammar, MY. "Mise en oeuvre de réseaux de neurones pour la modélisation de cinétiques réactionnelles envue de la transposition Batch/Continu' 'Thèse de Doctorat de l'I.N.P. Toulouse, Fance, (2007).

[75] : Laidi, M. Etude et modélisation d'un réfrigérateur solaire. Thèse de doctorat, université de Médéa, Algérie (2013).

[76] : Bouzidi. A, "Methode des réseaux de neurones pour le calcul des coefficients pertinents des phénomenes de transport: viscosité, conductivité et diffusion moléculaire des gaz." Université Médéa-Yahia Farès, (2006).

[77] : Fenineche. H. Application des réseaux de neurones artificiels au diagnostic des défauts des machines tournantes. mémoire de magister en Optique et mécanique de précision Université Ferhat Abbas – setif (2018).

[78] : Dreyfus. G, Neural networks: methodology and applications. Springer Science & Business Media, (2005).

[79] : Si-Moussa C. Modélisation des équilibres de phases à pression élevées par les réseaux de neurones artificiels. Thèse de doctorat en génie chimique. Ecole Nationale Polytechnique, El-Harrach, Alger (2010).

[80] : Cherif, A. Réseaux de neurones, SVM et approches locales pour la prévision des séries temporelles. Thèse de doctorat, Université François Rabelais de Tours, France (2013).

[81] : Dreyfus. G, Martinez. J.-M, Samuelides .M , Gordon. M .B, Badran .F, Thiria. S, Apprentissage statistique », Eyrolles, Paris, (2004).

[82] : Chekroune. S «commande neuro-floue sans capteur de vitesse d'une machine asynchrone triphasée», thèse magister Ecole Normale supérieure d'enseignement (2009).

[83] : Messikh. N, «Application des réseaux de neurones pour prédire le rendement de l'extraction liquide-liquide du phénol». Thèse de Doctorat, Université BADJI Mokhtar Annaba ,(2008).

[84] : Ammi Y. «Modélisation des phénomènes de transport lors d'osmose inverse ».Thèse de doctorat .Université Yahia Farès de Médéa (2016).

[85] : Si-Moussa, C., Hanini, S., Derriche, R., Bouhedda, M., Bouzidi, A., "Prediction of high-pressure vapor liquid equilibrium of six binary systems, carbon dioxide with six esters, using an artificial neural network model", Brazilian Journal of Chemical Engineering, V. 25, 183 - 199 , (2008).

[86] : Ghayoula .R, Contribution à l'optimisation de la Synthèse des Antennes Intelligentes par les Réseaux de Neurones,(2008).

[87] : Demuth, H., Baele, M. Neural network Toolbox, for use for Matlab®, user's guide version 4. The math Works Inc (2000).

[88] : Hagan, T., Demuth, H. B., Beale, M. H., "Neural network design", USA, Boston, (1996).

[89] : Djamel . H. Methode des reseaux de neurones pour le calcul des parametres pertinents des phenomenes de transports. Thèse de doctorat, Université Houari Boumédiéne de Bab Ezzouar (2009).

[90] : Hamadache. M. "Modélisation en vue de la prédiction ou la corrélation de l'active toxicologique à partir de la structure moléculaire." Thèse de Doctorat, université de Médéa, Algérie (2014).

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

[92] : Zerdoumi . Z. «Applications de Réseaux de Neurones Artificiels à la Poursuite des non Linéarités fluctuantes des systèmes satellitaire », Mémoire de Magister, Université Mohamed Boudiaf, M'sila,(2006).

[93] : Parizeau M - GIF-21140 et GIF-64326, frostiebek.free.fr (2004) .

[94] : Rahmoune M. Diagnostic des défaillances d'une turbine à gaz à base des réseau de neurones artificiels pour l'amélioration de leur système de détection des vibrations. Thése de doctorat, Université Ziane Achour de Djelfa (2017).

[95] : Rui .Y. and El-Keib .A. A, "A review of ANN-based short-term load forecasting models," in Proceedings of the Twenty-Seventh Southeastern Symposium on System Theory, pp. 78–82 (1995).

[96] : Teng .F. C , "Application of neural networks to adaptive control of nonlinear systems, by GW Ng, Research Studies Press Ltd, Taunton, UK, 1997. 198 pages, Isbn 471-97263" International Journal of Robust and Nonlinear Control : Ifac, Affiliated Journal, vol. 11, pp. 879–880, (2001).

[97] : Bekkari N «Etude et suivi de procédé d'épuration des eaux usées sous climat aride (simulation par l'application des méthodes d'intelligence artificielle) cas de la station d'épuration de Touggourt » Thèse de Doctorat, Université Kasdi Merbah Ouargla.(2020).

[98] : Mesellem Y « Modelisation des phenomenes d'adsorption dynamique » Thèse de Doctorat, Université Yahia Fares de Médéa. (2020).

[99] : Khaouane L. «Etude et modélisation de la biosynthèse des antibiotiques a partir de différentes souches productrices - cas de pleuromutiline». Thèse de doctorat. Université Yahia Farés de Médéa (2013).

[100] : Rebouh S. Utilisation des différentes techniques d'intelligence artificielle pour la modélisation du procédé de séparation par adsorption solide-liquide: étude comparative. Thèse de doctorat, Université de Médéa, Algérie. (2015).

[101] : Ghalem. N «Etude comparative et modélisation des propriétés thermo physico-chimiques de quelques gaz a pollution atmosphérique et leurs substituants non polluants ». Thèse de doctorat, Université de Blida 1 (2020).

[102] : Laidi, M , Hanin, S. Optimal Solar COP prédiction of a solar-assisted adsorption refrigeration system working with activated carbon/methanol as working pairs using direct and inverse artificial neural network. Int. J. Refrig. 36, 247-257 (2013).

[103] : Pan, B. C., Meng, F. W., Chen, X. Q., Pan, B. J., Li, X. T., Zhang, W. M., Zhang, X., Chen, J. L., Zhang, Q. X., Sun, Y. Application of an effective method in predicting breakthrough curves of fixed-bed adsorption onto resin adsorbent. J. Hazard. Mater. B124, 74–80 (2005).

[104] : Krou, N. J. Etude expérimentale et modélisation d'un procédé séquentiel AD-OX d'élimination de polluants organiques. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, France (2010).