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

UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA



Faculté de **T**echnologie

Mémoire de fin d'études de Master

Filière: Génie des procédés

Spécialité: Génie chimique

Modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques

---

Présenté par :

HETTAB Sabrina

EULDJI Romaissaa

Proposé et Dirigé par:

Dr.BELGHAIT Aicha

Pr.SI-MOUSSA Cherif

Promotion 2022/2023

Remerciement

Avant tout je remercie Allah pour la santé la patience le courage et la force que il m'a donné durant toutes mes années d'études. Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à ma directrice de mémoire, Madame BELGHAIT Aicha et son Co-promoteur SI-MOUSSA Cherif. Je la remercie de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, intervenants et toutes les personnes qui par leurs paroles, leur secrets, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté de me rencontrer et de répondre à mes questions durant mes recherches.

Je remercie mes très chers parents, qui ont toujours été là pour moi. Je remercie mes sœurs, et mon frère, pour leurs encouragements.

Enfin, je remercie mes amis ont toujours été là pour moi. Leur soutien inconditionnel et leurs encouragements ont été d'une grande aide. À tous ces intervenants, je présente mes remerciements, mon respect et ma gratitude.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :
A Ma chère mère, pour ses sacrifices depuis qu'elle M'a mis au monde.

Et à mon père.
A mon cher frère Omar
A ma chère sœur Fatiha pour le soutien dont elle a fait preuve pendant toute la durée de ce travail, à mon petit ange sanad et ma petite sœur Chaimaa

A toutes les amies

A tout la famille Hettab et Rennan

Et bien sur mon binôme Romaissa

Sans oublier à mes collègues de la promotion 2022/2023

Sabrina

Dédicace

Tout d'abord, je tiens à remercier ALLAH

De m'avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste travail.

Je tiens à dédier cet humble travail à :

Mes plus grands amours après Allah et son prophète, mes chères parents et beaux-parents.

Mon cher mari, pour la patience et le soutien dont il a fait preuve pendant toute la durée de ce travail et à qui je voudrai exprimer mes affections et mes gratitudes. Merci infiniment, et ma prunelle de mes yeux : Hiba

Ma chère belle-sœur : widad

Mes chères sœurs : imen et dalel

Mon cher frère : islem

Et bien sur mon binôme sabrina

A mes chères amies

A toute la famille Euldji et Benmouloud

Sans oublier la promotion de génie des procèdes de 2022/2023

Romaíssa

ملخص

نمذجة درجة حرارة التحلل الحراري للسوائل الأيونية

تعتبر البيانات التجريبية حول درجة حرارة التحلل مهمة للتصميم المناسب للعمليات باستخدام السوائل الأيونية. ومع ذلك، فإن إجراء تجارب لقياس درجة حرارة التحلل لجميع ظروف التشغيل طويل ومكلف وشاق. لذلك، فإن نمذجة درجة حرارة التحلل الحراري للسوائل الأيونية باستخدام طرق الذكاء الاصطناعي (RNA، SVM) أمر حتمي. في هذا العمل، أجرينا دراسة مقارنة على قاعدة بيانات من 168 نقطة تجريبية، تم جمعها من البحوث العلمية المنشورة على مدار الخمسة عشرعامًا الماضية. أعطى نموذج SVM أفضل ارتباط إجمالي بمتوسط خطأ نسبي مطلق (ERAM) يبلغ 2.55٪.

الكلمات المفتاحية: النمذجة ، درجة حرارة التحلل، السوائل الأيونية ، طرق الذكاء الاصطناعي.

Résumé

Modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques

Les données expérimentales sur la température de décomposition sont importantes pour la bonne conception des procédés utilisant les liquides ioniques. Mais la réalisation d'expériences de mesure de la température de décomposition pour toutes les conditions opératoires est longue, coûteuse et laborieuse. Par conséquent, la modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques par les méthodes d'intelligence artificielle (RNA, SVM) est impérative. Nous avons effectué dans ce travail une étude comparative sur une base de données de 168 points expérimentaux, recueillis à partir de la littérature publiée au cours des 15 dernières années. Le modèle de SVM a donné la meilleure corrélation globale avec une erreur relative absolue moyenne (ERAM) de 2,55%.

Mots clés: modélisation, température de décomposition, liquides ioniques, méthodes d'intelligence artificiel.

Abstract

Modeling the thermal decomposition temperature of ionic liquids

The experimental data on decomposition temperature are important for the proper design of processes using ionic liquids. However, carrying out experiments to measure the decomposition temperature for all operating conditions is time-consuming, expensive, and laborious. Therefore, modeling the thermal decomposition temperature of ionic liquids by artificial intelligence methods (ANN, SVM) is imperative. In this work, we performed a comparative study on a database of 168 experimental points, collected from the literature published over the last 15 years. The SVM model gave the best overall correlation with a mean absolute relative error (AARD) of 2.55%.

Keywords: modeling, decomposition temperature, ionic liquids, artificial intelligence methods.

Table des matières

Table des matières ..... **i**

Liste des figures ..... **iv**

Liste des tableaux ..... **vii**

Abréviations ..... **viii**

Nomenclature et symbole ..... **ix**

Introduction générale 1

Chapitre I : Généralités sur les liquides ioniques

I-1.Introduction : 3

I-2.Définition : 4

I-3.Historique : 5

I-4. Applications des liquides ioniques : 5

I-4-1.Présentation de quelques applications connues des liquides 7

I-5.Constitution d'un liquide ionique : 7

I-6. Structure des liquides ioniques : 8

I-7. Aprotique et protique des liquides ioniques : 10

I-8.Propriétés physico - chimiques des liquides ioniques : 11

I-8-1.Température de décomposition thermique : 12

I-8-2.Points de fusion : 12

I-8-3.Viscosité : 13

I-8-4.Conductivité : 15

I-8-5.Densité : 16

I-8-6. Solubilité : 18

I-8-7.Toxicité et biodégradabilité: 19

I-9. Avantages et caractéristiques des liquides ioniques : 21

I-10.Conclusion : 22

Chapitre II : Méthodes d'Intelligence Computationnelle

II-1.Introduction :.....21
II-2.Réseaux de neurones artificiels:.....21
II-2-1.Définition :.....21
II-2-2.Principe du neurone artificiel :.....22
II-2-3.Notions fondamentales sur les réseaux de neurones artificiels :.....23
II-2-3-1.Neurone biologique et neurone artificiel :.....23
II-2-3-2.Fonction d'activation :.....26
II-2-3-3.Architecture des réseaux de neurones artificiels :.....27
II-2-3-3-1.Réseau de neurones non bouclé (en anglais feedforward) :.....28
II-2-3-3-2.Réseau de neurones bouclé (ou récurrent) :.....28
II-2-4.Type d'apprentissage de réseau de neurones:.....29
II-2-4-1.Apprentissage supervisé :.....29
II-2-4-2.Apprentissage non supervisé :.....30
II-2-5.Les composants d'un réseau de neurone :.....30
II-2-6.Les connexions entre les neurones :.....31
II-2-7.Les avantages et les inconvénients :.....31
II-3.La machine vecteur de support :.....32
II-3-1.Définition :.....32
II-3-2.Principe de fonctionnement général de SVM :.....32
II-3-2-1.Notions de base: Hyperplan, marge et support vecteur :.....32
II-3-2-2.Linéarité et non-linéarité :.....34
II -3-2-2-1. Cas linéairement séparable :.....35
II -3-2-2-2.Cas non linéaire :.....35
II-3-3.Architecture générale d'une machine à vecteur support :.....36
II-3-4.Applications :.....38
II-3-5.Avantages et inconvénients des SVM :.....39

II-4.Conclusion :.....39

Chapitre III : résultats et discussion

III-1.Introduction : 40

III-2.Elaboration de la base de données 41

III-3.Modélisation par RNA :.....42

III-3-1.Conception d'un modèle neuronal :.....42

III-3-2.Division des données en ensembles apprentissage/validation/test :.....42

III-3-3.Analyse de sensibilité :.....43

III-3-3-1.Méthode de "Poids".....43

III-3-4.Résultats de corrélation de modèle optimisé :.....46

III-4.Modélisation par SVM : 53

III.4.1.SVM pour la régression : 53

III.4.1.1.Fonction du noyau 53

III.4.2.Régression SVM dans MATLAB :.....55

III.4.3.Division des données en ensembles apprentissage/test :.....55

III.4.4.Résultats de corrélation par SVM: 55

III-5. Modèles semi-empiriques de Zhao et all.....58

III-6.Comparaison en termes d'ERAM : 58

III-7.Critères statistiques d'évaluation de la performance des modèles : 61

III-8.Conclusion :.....62

Conclusion générale 64

Références bibliographiques 66

Liste des figures

Figure	Titre de figure	Page
Chapitre I		
Figure I.1	Classification des solvants selon le type de liaisons chimiques mis en jeu	3
Figure I.2	Les LI, un sous –ensemble de sels fondus	4
Figure I.3	Structure de premier liquide ionique	5
Figure I.4	Les domaines d'applications des liquides ioniques	6
Figure I.5	Application industrielle des liquides ioniques	7
Figure I.6	Ions typiques dans les liquides ioniques	8
Figure I.7	Structure chimique des principaux cations des LI rencontrés dans la littérature	9
Figure I.8	Quelques exemples d'anions	10
Figure I.9	Voie de synthèse typique d'un liquide ionique protique (LIP) (A) de nitrate d'éthylammonium et d'un LIAP (B) de tétrafluoroborate de 1-éthyl-3-méthylimidazolium.	11
Chapitre II		
Figure II. 1	Neurone artificiel	23
Figure II. 2	Schéma d'un neurone biologique	24
Figure II. 3	Structure de Neurone artificiel	25
Figure II. 4	Figure II. 4: Schéma de comparaison entre un neurone biologique et un neurone artificiel	26
Figure II. 5	Réseaux de neurones les plus utilisés	27

Figure II. 6	Structure d'un réseau de neurones non bouclé	28
Figure II. 7	Un réseau de neurones bouclé à deux entrées	29
Figure II. 8	Un réseau de neurones bouclé à deux entrées	30
Figure II. 9	Illustration de l'apprentissage non supervisé	30
Figure II. 10	Connexion simple entre deux neurones	31
Figure II. 11	Exemple d'un hyperplan séparateur	33
Figure II. 12	Exemple de vecteurs de support.	33
Figure II. 13	Exemple de marge maximal (hyperplan valide)	34
Figure II. 14	(a) linéairement séparable et (b) cas non linéairement séparable	35
Figure II. 15	exemple de changement de l'espace de données	36
Figure II. 16	Architecture d'une machine à vecteur support	37
Figure II. 17	Applications réelles des SVM	38
Chapitre III		
Figure III. 1	Représentation des pourcentages de division de la base de données	43
Figure III. 2	Organigramme de la méthode de "poids"	44
Figure III. 3	Présentation des pourcentages de l'importance relative (Ir) (la méthode de "poids") de chaque variable d'entrée du RNA sur la température de décomposition	46
Figure III. 4	Diagramme de dispersion de la Td calculer en fonction de Td expérimental : (a) Base globale, (b) Ensemble d'apprentissage, (c)Ensemble de la validation, (d) Ensemble du test par le modèle RNA « trainlm, tansig »	48
Figure III. 5	Diagramme de dispersion de la Td calculer en fonction de Td expérimental : (a) Base globale, (b) Ensemble d'apprentissage, (c)Ensemble de la validation, (d) Ensemble du test par le modèle RNA « trainlm, logsig »	49

Figure III. 6	L'erreur relative (%) de la température de décomposition par le modèle de RNA« trainlm, tansig »	50
Figure III. 7	L'erreur relative (%) de la température de décomposition par le modèle de RNA« trainlm, logsig »	51
Figure III. 8	Diagrammes de distribution d'ER [%] du modèle RNA « trainlm, tansig ».	52
Figure III. 9	Diagrammes de distribution d'ER [%] du modèle RNA « trainlm, logsig »	53
Figure III. 10	Diagramme de dispersion de SVM pour l'ensemble :(a) global, (b) apprentissage et (c) test	56
Figure III. 11	Diagramme de dispersion de SVM pour l'ensemble :(a) global, (b) apprentissage et (c) test	57
Figure III. 12	Diagrammes de distribution d'ER (%) du modèle SVM	58
Figure III. 13	Diagramme de dispersion (base global) de:(a) RNA « trainlm, tansig », (b) RNA « trainlm, logsig », (c) svm, (d) modèle de Zhao	61

Liste des tableaux

Tableau	Titre de tableau	Page
Chapitre I		
Tableau I.1	Valeurs de température de décomposition de certains liquides ioniques	12
Tableau I.2	Valeurs de température de fusion de certains liquides ioniques	13
Tableau I.3	Viscosité de quelques liquides ioniques	14
Tableau I.4	Conductivité de divers sels de dialkilmidazolium	16
Tableau I.5	Valeurs de densités de quelques liquides ioniques	17
Tableau I.6	Miscibilité des liquides ioniques dans l'eau et dans d'autres solvants	18
Tableau I.7	Tableau I.7: Toxicité des LIs avec les microorganismes de quelques applications biotechnologiques intéressées	19
Tableau I.8	la biodégradabilité de quelques liquides ioniques	21
Chapitre II		
Tableau II. 1	Les fonctions de transfert les plus courantes (Parizeau(2004))	27
Chapitre III		
Tableau III. 1	Les données expérimentales (Td expérimentale et les descripteur moléculaire) de 1-Methylimidazolium chloride	41
Tableau III. 2	Poids du RNA	45
Tableau III. 3	Exemples des noyaux pour $\chi=\mathbb{R}p$	54
Tableau III. 4	ERAM % pour les deux méthodes de modélisation	59
Tableau III. 5	Les critères statistiques pour les déférentes méthodes d'intelligence	62

Abréviations

Abréviation	Signification
ANFIS	Système adaptatif d'inférence neuro- flou
APIL	Aprotic ionic liquid
CPG	Contrôle prédictif généralisé
DSC	differential scanning calorimetry
EQM	Erreur quadratique moyenne
ERAM	erreur relative absolue moyenne
LI	Liquide ionique
LSSVM	à vecteurs de support pour les moindres carrés
PIL	protic ionic liquid
QSAR	les relations quantitatives structure activité
QSPR	les relations quantitatives structure propriété
RBBF	Fonction de base radiale
REQM	Racine de l'erreur quadratique moyenne
RMN	Résonance Magnétique Nucléaire
RNA	réseaux de neurones artificiels
RTIL	Room temperature ionic liquids
SEM	scanning electron microscope
SVM	Machine à vecteurs de support
Td	Température de décomposition
TM	Melting point

Nomenclature et symbole

Symbole	**Désignation**	**unité**
B	Biais	[-]
D	Densité	$g.cm^{-3}$
f(s)	Fonction de sortie	[-]
K	Fonction de noyau	[-]
R	coefficient de corrélation	[-]
W	Poids	[-]

Introduction générale

Introduction générale

Les liquides ioniques (LI) sont des liquides spécieux composés généralement de cations organiques et d'anions inorganiques (Liaw et al. (2012)), les LIs sont définis comme des composés entièrement composés d'ions dans le point de fusion est inférieur à 100 °C (Lei et al. (2017)), Les liquides ioniques sont des sels organiques qui présentent des propriétés physico-chimiques exceptionnelles, comme une faible température de fusion, une bonne solvatation, une pression de vapeur négligeable, une conductivité électrique élevée et une grande stabilité thermique (Liu et al. (2011)). En raison de leurs caractéristiques physicochimiques uniques les LIs présentent perspectives de plus en plus prometteuses dans les divers domaines de la synthèse, de la catalyse/biocatalyse, de la science des matériaux, de l'électrochimie et de la technologie de séparation, tant au niveau du laboratoire qu'à l'échelle industrielle (Zhang et al. (2009)).

Cependant, dans ces processus, lorsqu'elles sont soumises à une température et une pression particulières, les LI se décomposent souvent thermiquement ou se volatilisent pour être utilisées dans l'industrie, les LI doivent donc présenter une excellente stabilité thermique (Chen et al. (2022)), La limite supérieure de la gamme des liquides est généralement délimitée par la température de décomposition thermique (Td) du liquide ionique, car la plupart des liquides ioniques sont non volatils (Juan et Lazzús. (2012)), la mesure de la température de décomposition est de la plus haute importance pour les applications industrielles des LI en tant que solvant vert alternatifs. Ces propriétés définissent l'échelle liquide des composés, et par conséquent leur grande variété d'applications. La température de décomposition thermique (Td) est la température la plus élevée à laquelle un composé est chimiquement putréfié et elle permet de prédire la durabilité thermodynamique et la température de fonctionnement maximale d'un LI. Ainsi, la Td est la propriété thermique la plus importante des LI (Shahram et al. (2021)).

La Td est difficile à déterminer expérimentalement car la transition s'effectue sur une plage de température relativement large et elle dépend de conditions telles que la méthode de mesure, la durée de l'expérience et la pression (Yu (2007)). Les caractéristiques chimiques et physiques des liquides ioniques doivent être prises en considération. En outre, comme le nombre de LI augmente rapidement, il faut développer

des techniques de prédiction (Suojiang et al. (2006)), la méthode la plus efficace pour mesurer la Td est par calorimétrie de balayage différentielle (DSC). D'autres méthodes qui ont été utilisées comprennent la microscopie polarisante à froid, RMN et la diffusion de rayons X (Holbrey et al. (2008)).L'utilisation de méthodes alternatives et complémentaires à l'expérimentation, parmi lesquelles les relations quantitatives structure propriété/activité (QSPR/QSAR)et les méthodes de l'intelligence computationnelle telles les réseaux de neurones artificiels (RNA), les machines à vecteur de support (SVM), Machine à vecteurs de support pour les moindres carrés(LSSVM) et Système adaptatif d'inférence neuro- flou (ANFIS).

L'objectif de ce travail, est la prédiction de la température de décomposition thermique des liquides ioniques on va utiliser les réseaux de neurones artificiels (RNA) et la méthode des machines à vecteurs de support (SVM), suivie par une étude comparative de nos résultats obtenus avec les résultats de la modélisation semi-empirique qui été réalisé par Zhao et al. (2017).

Ce mémoire est divisé en trois chapitres principaux :

I-Nous présenterons tout d'abord dans le premier chapitre des généralités sur les liquides ioniques.

II- Un deuxième chapitre consacré aux outils et méthodes utilisés dans la Modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques.

III- Et un dernier chapitre présentant les résultats de la modélisation et interprétation de ces résultats.

IV- Enfin, ce mémoire s'achève sur une conclusion générale.

Chapitre I :

Généralités sur les liquides ioniques

Chapitre I :

Généralités sur les liquides ioniques

I-1. Introduction :

Les solvants peuvent être classés en fonction du type de liaisons chimiques qu'ils mettent en jeu (Figure I.1):

¬ Les liquides moléculaires dans lesquels interviennent seulement des liaisons covalentes.

¬ Les liquides ioniques où prédominent les interactions ioniques.

¬ Les liquides atomiques tels que le mercure ou les alliages d'alcalins liquides, siège de liaisons métalliques. (amalgame Na-K liquide à température ambiante).

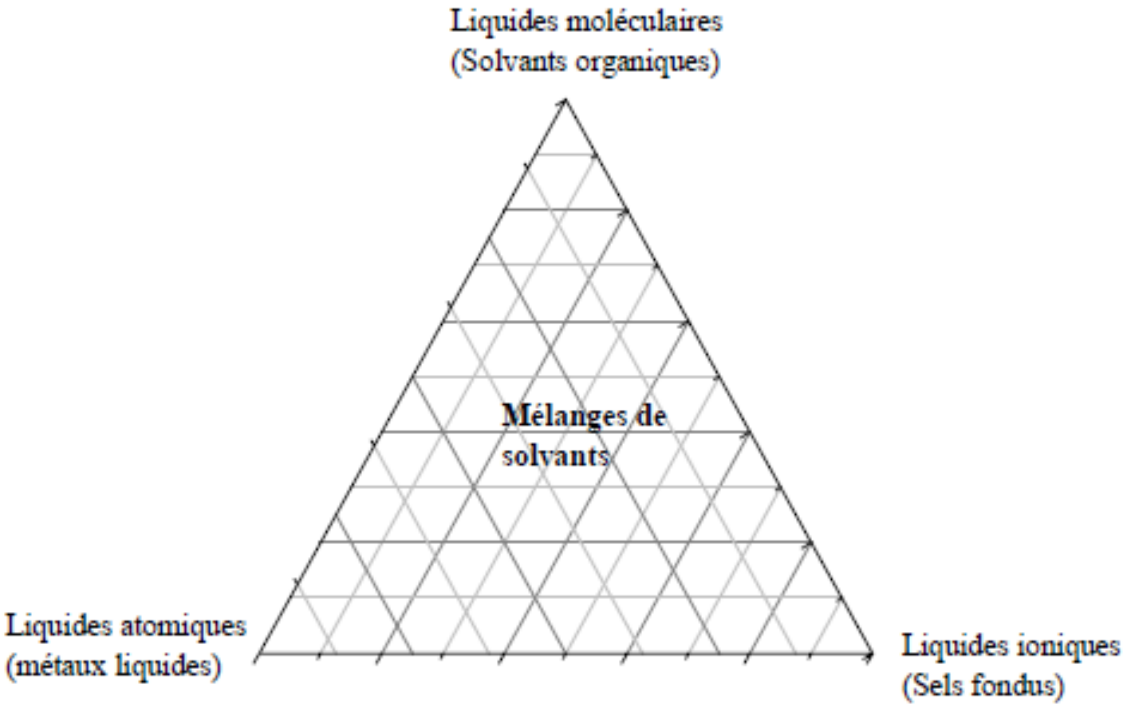


Figure I.1: Classification des solvants selon le type de liaisons chimiques mis en jeu (Catherine et Yves (2007))

Les cristaux liquides ioniques peuvent être considérés comme des matériaux qui combinent les propriétés des cristaux liquides et des liquides ioniques. Une intense activité de recherche est actuellement en cours dans le monde entier dans le domaine des liquides

ioniques. Le principal moteur de l'exploration des liquides ioniques est le fait que ces composés ont une très faible pression de vapeur, ce qui en fait des candidats pour remplacer les solvants organiques volatils dans les réactions organiques. Comme les propriétés des liquides ioniques (miscibilité avec l'eau et d'autres solvants, capacité de dissolution, polarité, viscosité, densité, ...) peuvent être modifiées par un choix approprié de l'anion et du cation, les liquides ioniques sont souvent considérés comme des solvants de conception (Binnemans (2005)).

I-2. Définition :

Les liquides ioniques sont des liquides constitués exclusivement ou presque exclusivement d'ions, ils présentent donc une conductivité ionique. Cette définition inclut les liquides traditionnellement connus sous le nom de sels fondus ou de sels fusionnés, qui ont des points de fusion élevés (Freemantle (2010)) (figure I.2).

Au cours des deux dernières décennies environ, l'utilisation du terme "liquides ioniques" a généralement été limitée aux liquides, tels que définis ci-dessus, qui ont des points de fusion ou des températures de transition vitreuse inférieurs à 100 °C. Il s'agit généralement de sels organiques ou de mélanges eutectiques d'un sel organique et d'un sel inorganique (Freemantle (2010)).

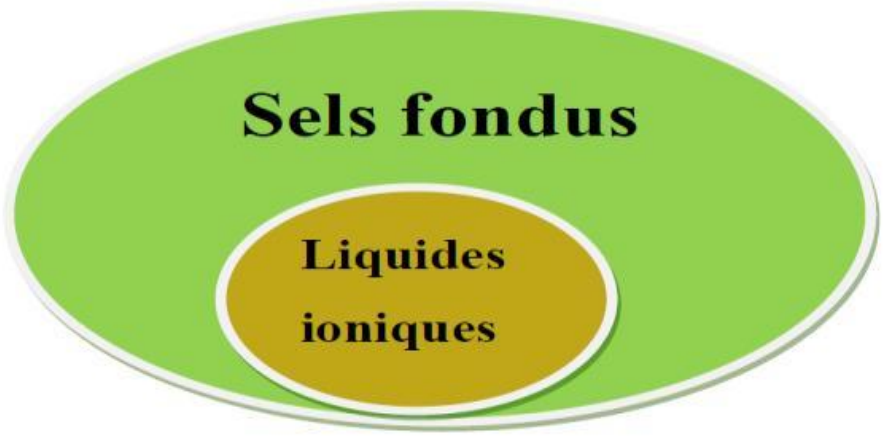


Figure I.2: Les LI, un sous –ensemble de sels fondus (Kianfar et Mafi (2021)).

I-3. Historique :

Le premier liquide ionique recensé date du milieu du 19ème siècle ; il apparaissait sous forme d'une huile rouge lors de la préparation du toluène à partir du benzène par réaction de Friedel et Crafts (réaction du benzène sur le mono chlorométhane en présence de $AlCl_3$ (Trichlorure d'aluminium)) ; sa structure : https://tice.ac-montpellier.fr

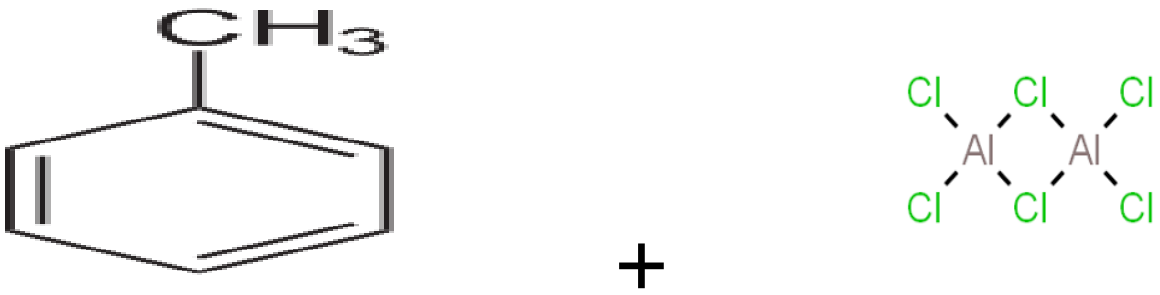


Figure I.3: structure de premier liquide ionique

I-4. Applications des liquides ioniques :

Les LI sont devenus largement utilisés dans des domaines allant de l'industrie chimique à l'alimentaire. Citons leurs rôles comme solvants dans des catalyses variées, comme électrolytes dans des batteries, et comme matériaux pour dissoudre les pulpes de banane gelées. Certains LI à anions présentant un spin magnétique prononcé, sont particulièrement utilisés en tant que liquides magnétiques, dans la synthèse des nano-objets comme les nano-fils d'argent, dans le stockage de l'hydrogène, dans la fonctionnalisation des nanotubes de carbones, et finalement en pharmaceutique pour l'extraction des composés cosmétiques et pour isoler et extraire le médicament anti-malaria des plantes. (Aoun (2010)).

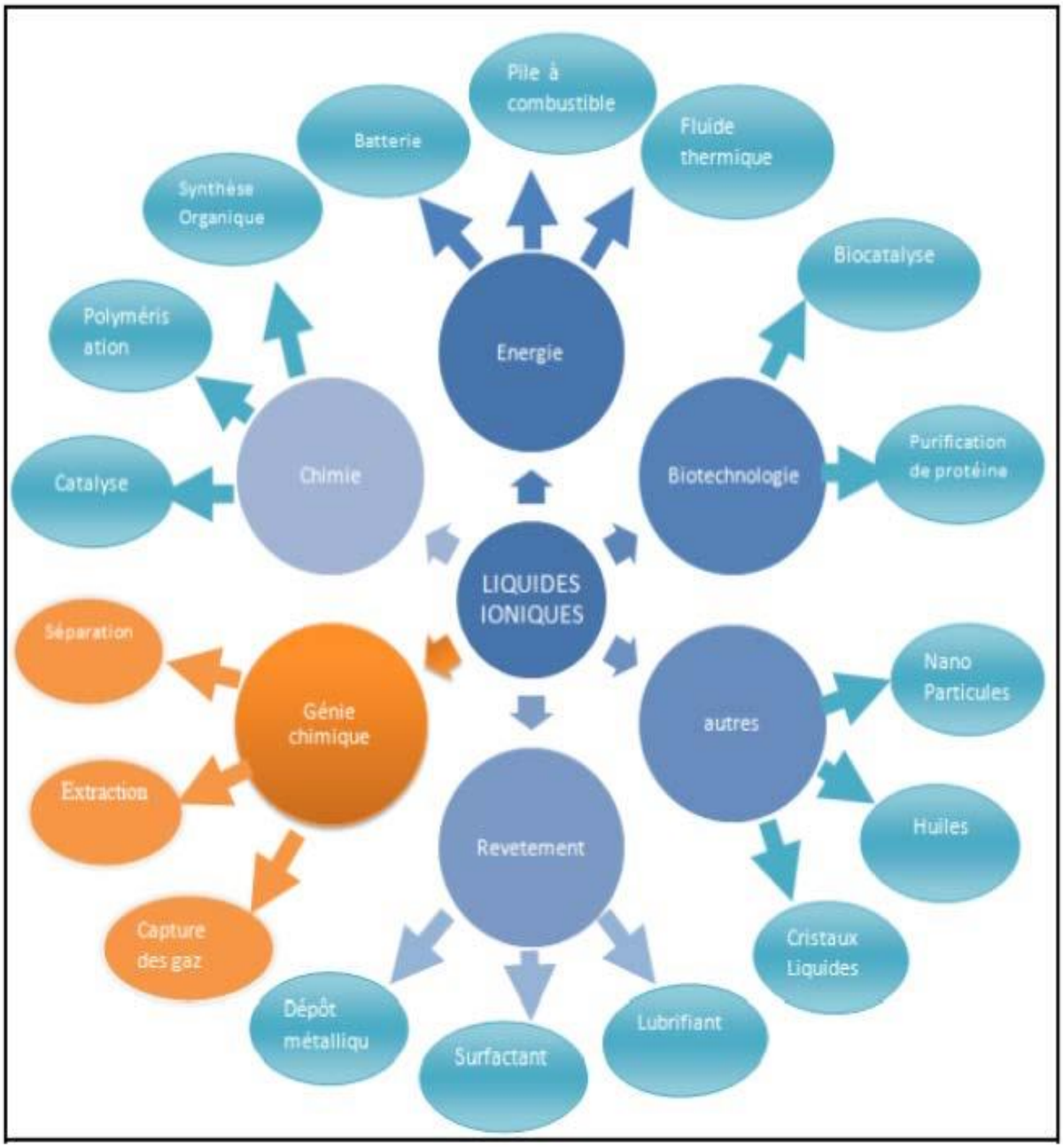


Figure I.4: Les domaines d'applications des liquides ioniques (Ayad (2017)).

I-4-1. Présentation de quelques applications connues des liquides ioniques : (Greer et al. (2020)).

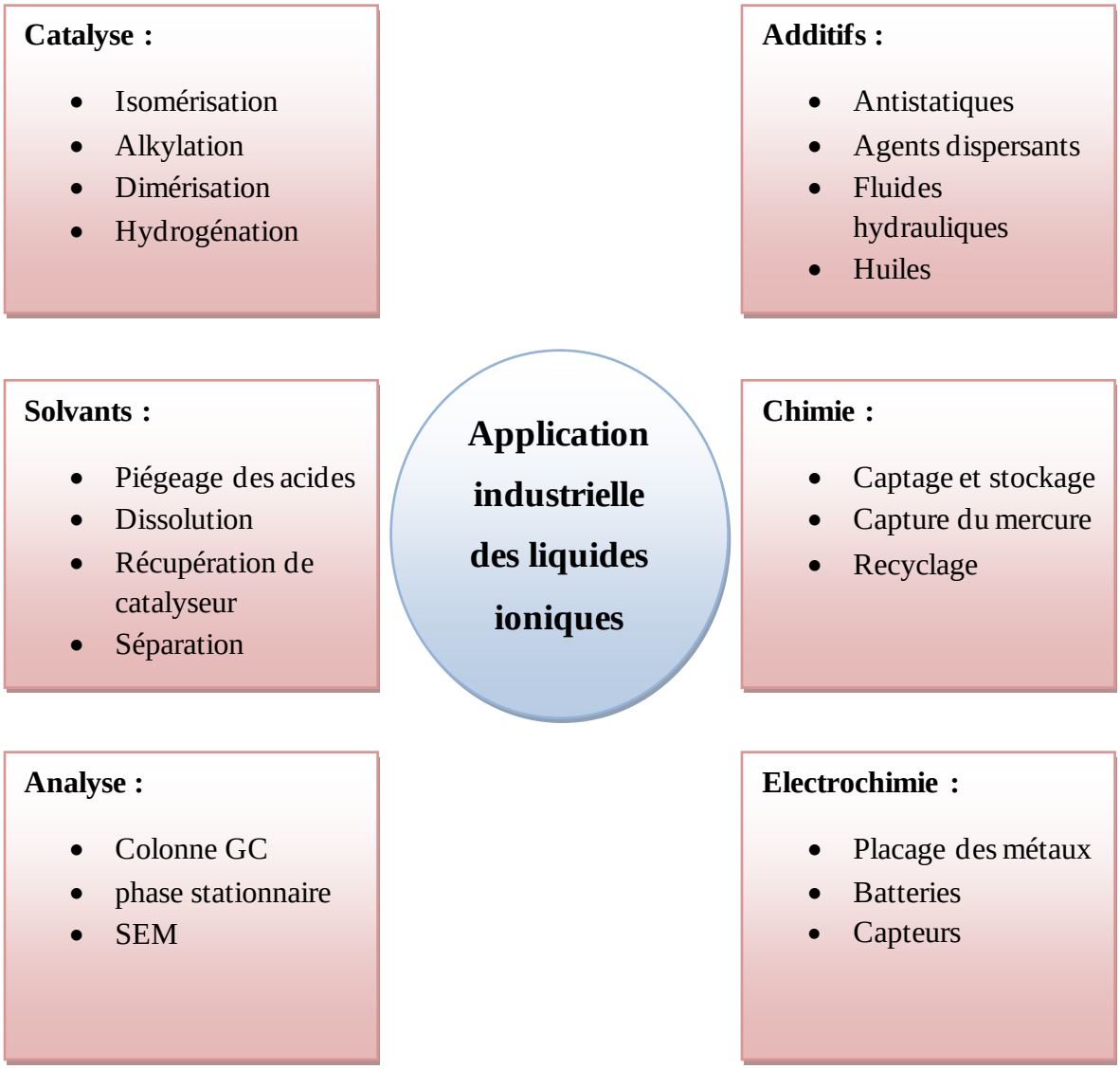


Figure I.5: Application industrielle des liquides ioniques

I-5. Constitution d'un liquide ionique :

Il existe de nombreux liquides ioniques ; ils sont formés par l'association

- D'un cation, le plus souvent organique (hétérocyclique)

Remarque :

Des cations portant des fonctions organiques telles que : amines, alcools, éthers, acides carboxyliques, nitriles …. ou encore des cations chiraux, ont été mis en œuvre.

- D'un anion :

-Soit inorganique:

F^-, Cl^-, Br^-, I^-, NO_3^-, ClO_4^-, $CuCl_2^-$, $AuCl_4^-$, $ZnCl_3^-$, $SnCl_3^-$, BF_4^-, PF_6^-, SbF_6^-, AsF_6^-, $Al_xCl_{(3x+1)}^-$

- Soit organique :

$CH_3CO_2^-$, $CF_3CO_2^-$, $CH_3C_6H_5SO_3^-$ (ion tosylateou TsO^-), $CF_3SO_3^-$ (ion triflateouTfO^-), $(CF_3\text{-}SO_2)_2N^-$ (ion bis(TriFluorométhaneSulfonyl) Imide ou TFSI), $(F\text{-}SO_2)_2N^-$ (ion bis(FluoroSulfonyl) Imide ou FSI), BR_4^-, R_3BOH^- https://tice.ac-montpellier.fr . ….. voir la figure I.4 :

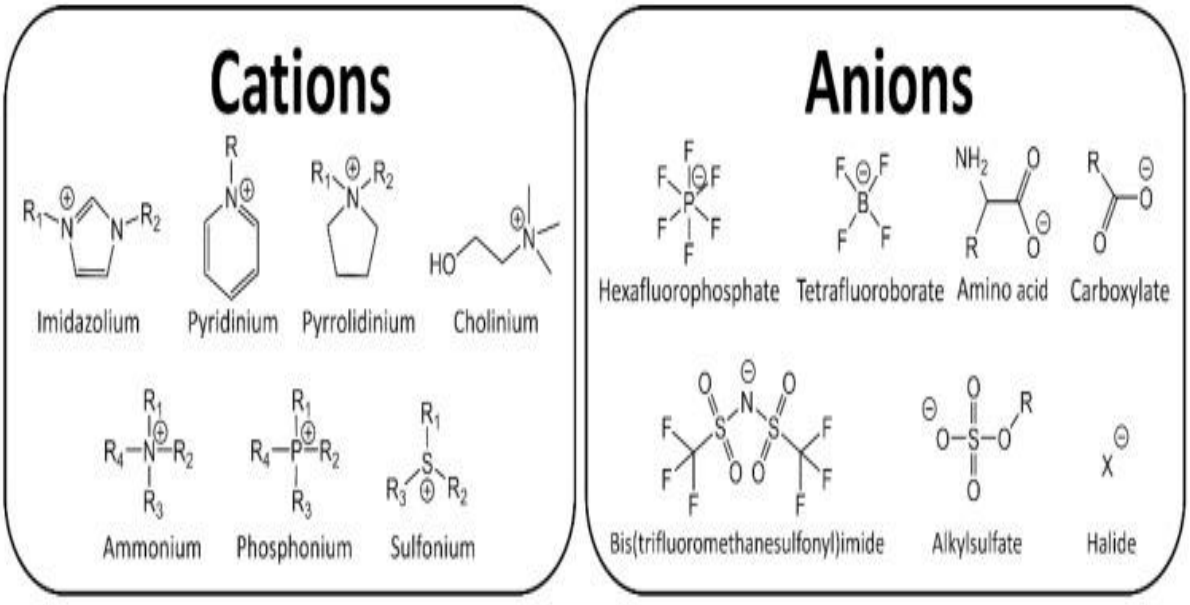


Figure I.6: Ions typiques dans les liquides ioniques (Silva et al. (2020)).

I-6. Structure des liquides ioniques :

La structure du liquide ionique est similaire à celle du sel, mais en raison de la forte liaison entre le cation et son anion (grande similitude entre l'anion et le cation en termes de taille, de charge et de nature), la structure du sel a une forte structure cristalline et fond à 800°C. Des températures de 100°C sont considérées pour les liquides ioniques. Ceux qui

sont liquides à des températures supérieures à 100°C sont appelés liquides fondus, et ceux qui sont liquides en dessous de cette température sont appelés liquides ioniques. Certains liquides ioniques liquides à température ambiante, appelés RTIL (Room temperature ionic liquids) (Kianfar et Mafi (2021)).

Un liquide ionique est le plus généralement constitué d'un cation organique de faible symétrie. Ils font partie le plus souvent de la famille des ammonium, sulfonium, phosphonium, imidazolium, pyridinium différemment substitués (Figure I. 5) .Les liquides ioniques les plus utilisés ces dernières années sont les composés à base de cations asymétriques de N, N'-dialkylimidazolium (Naceur (2013)).

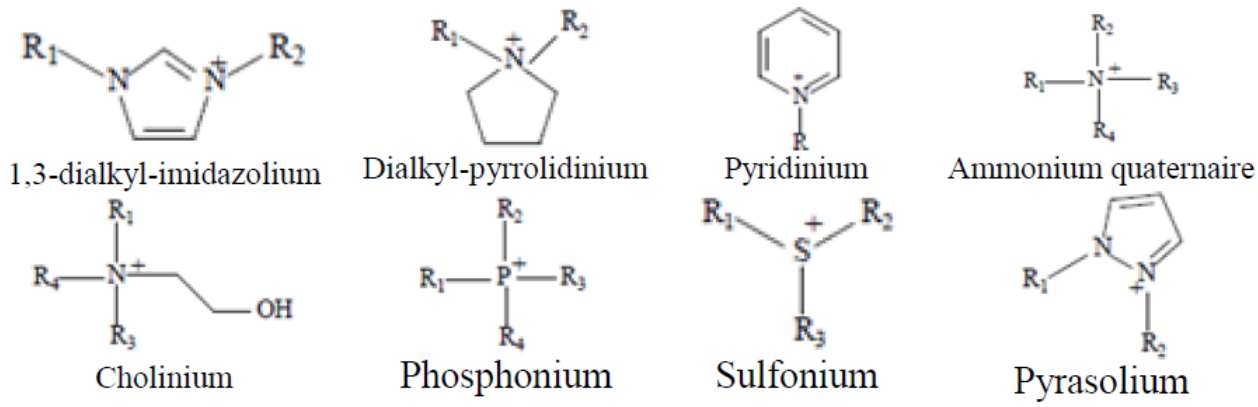


Figure I.7: Structure chimique des principaux cations des LI rencontrés dans la littérature (Toubakh (2016)).

Les contre ions les plus couramment utilisés sont soient des anions inorganiques tels que $BF4^{-}PF6^{-}$, Cl^{-}, $NO3^{-}$, $AlCl4^{-}$, $SbF6^{-}$et autres soient des anions organiques ($CF3SO3^{-}$, $(CF3SO2)2N^{-}$, $CF3CO2^{-}$et $CH3CO2^{-}$et autres)(Figure I. 6). Les anions tétrafluoroborate ($BF4^{-}$) ethexafluorophosphate ($PF6^{-}$) sont très utilisés en chimie organique ou organométallique car ils confèrent une solubilité recherchée aux espèces ioniques qui sont à la base de très nombreux sels liquides.

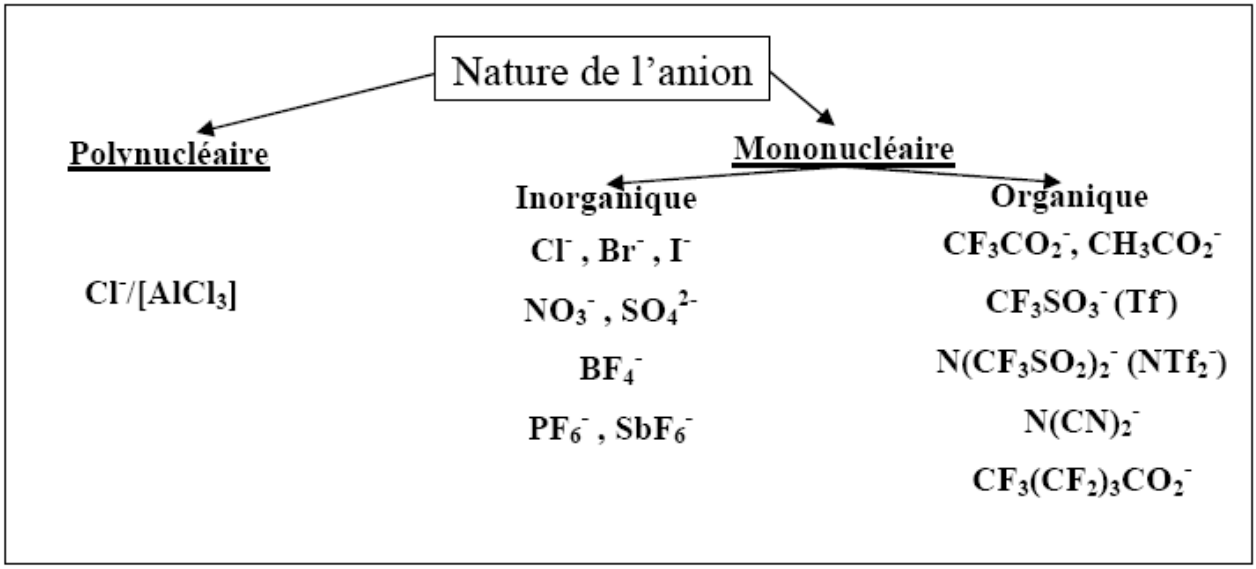


Figure I.8: Quelques exemples d'anions (Naceur (2013)).

I-7. Aprotique et protique des liquides ioniques :

La plupart des recherches sur les liquides ioniques se sont concentrées sur les liquides ioniques aprotiques. Ce sont généralement des sels constitués uniquement de cations, qui ne sont pas protonés et d'anions. Des exemples sont (C_2mim) (BF_4) et (C_4mim) (NTF_2).

Les liquides ioniques protiques sont formées par transfert de proton à partir d'un acide qui peut donner un proton, c'est-à-dire une base de Bronsted (B) :

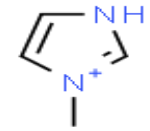
$HA+B \Longrightarrow [BH^+] + [A^-]$

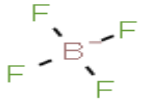
L'exemple classique d'un liquide ionique protique est le nitrate d'éthylammonium, ($C_2H_5NH_3$) (NO_3), qui est formé par la protonation de l'éthylamine :

$C_2H_5NH_2+HNO_3 \Longrightarrow [C_2H_5NH_3]^+ + [NO_3]^-$

Un autre exemple est 1-methylimidazolium tetrafluoroborate ([Hmim][BF_4]), qui est préparé par la réaction de 1-methylimidazole et tetrafluoroboric acide. ([Hmim][BF_4]) est un acide bronzé fort (Freemantle (2010)).

$[C_4H_7BF]$





Les liquides ioniques protiques ne sont pas nécessairement entièrement constituées d'ions. Ces liquides peuvent contenir un faible pourcentage d'espèces moléculaires si le transfert de protons est incomplet (Freemantle (2010)).

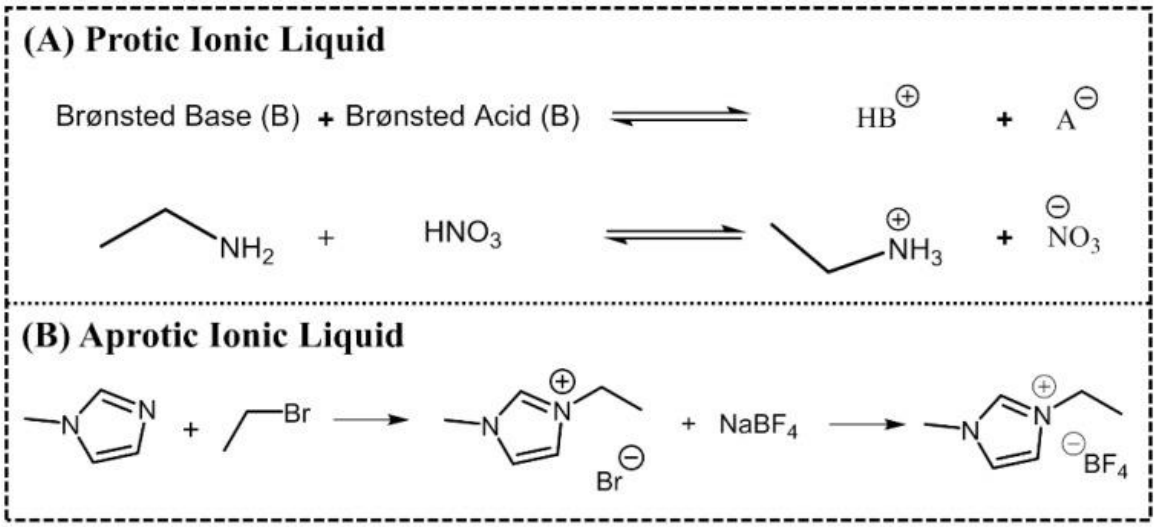


Figure I.9: Voie de synthèse typique d'un liquide ionique protique (LIP) (A) de nitrate d'éthylammonium et d'un LIAP (B) de tétrafluoroborate de 1-éthyl-3-méthylimidazolium (Silva et al. (2020)).

I-8. Propriétés physico - chimiques des liquides ioniques :

Les liquides ioniques présentent de nombreuses propriétés physico-chimiques intéressantes qui font d'eux une classe de solvants très convoitée pour de nombreuses applications.

De plus, la possibilité d'ajuster leurs caractéristiques physico-chimiques par variation de la nature de l'anion ou de cation est un atout majeur (Revelli 2010). Les premiers travaux sur les propriétés des liquides ioniques purs se sont intéressés sur la corrélation entre la structure du liquide ionique et les propriétés physico-chimiques. Les impuretés peuvent changer considérablement les propriétés des liquides ioniques. En effet, la présence d'impureté telle que l'eau peut changer la densité, la viscosité et le point de fusion (Amadou (2014)).

I-8-1. Température de décomposition thermique :

Les LI sont thermiquement stables mais se décomposent certainement à haute température. La Td des LI dépend de la structure ionique du composant, tout comme d'autres propriétés thermiques. Des LI ayant une excellente stabilité thermique jusqu'à 400°C ont été signalés. Cependant, cela ne signifie pas que ces LI peuvent être utilisés à toute température inférieure à la Td, car la plupart des valeurs de Td sont déterminées en utilisant des mesures thermogravimétriques à balayage de température. Les LI se décomposent progressivement, même en dessous de la Td. Il est donc important d'analyser le comportement thermique à température constante (Ohno (2017)).

Tableau I.1: Valeurs de température de décomposition de certains liquides ioniques (Moutiers G.et Billard I. (2011)).

Liquides ioniques	T décomposition (c°)
[Emim][Cl]	285 (sec)
[Emim][BF4]	391
[Emim][NTf2]	417 455 (sec)
[Bmim][Cl]	254 (sec)
[Bmim][BF4]	403 (sec)
[Bmim][PF6]	349
[Bmim][NTf2]	439 (sec) 400
[Hmim][Cl]	253 (sec)
[Hmim][PF6]	417
[Omim][Cl]	243 (sec)

L'indication (sec) signifie que le liquide a été séché.

I-8-2. Points de fusion :

L'abaissement du point de fusion (Tm) est important pour toute application potentielle des liquides ioniques. Avec les températures d'ébullition et de décomposition, le Tm définit la plage de température de travail de tout LI. Le point de fusion varie considérablement en fonction de la combinaison anion/cation (Fumino et al. (2011)).

Tableau I.2: Valeurs de température de fusion de certains liquides ioniques (Moutiers et Billard(2011)).

Liquides ioniques	T fusion (c°)
[Emim][Cl]	87 89 (sec)
[Emim][BF4]	15 11(sec)
[Emim][PF6]	61(sec)
[Emim][NTf2]	-16 -15 (sec)
[Bmim][Cl]	41 (sec) 65
[Bmim][NTf2]	16
[N(n-C4)4][NTf2]	96
[N(n-C6)(C2)3] [NTf2]	20
h[N(n-C6)(n-C4)4][NTf2]	26

L'indication (sec) signifie que le liquide a été séché.

I-8-3. Viscosité :

Une des plus grandes barrières à l'application des liquides ioniques résulte de leur grande viscosité. Une grande viscosité affecte la diffusion des espèces ioniques. La viscosité des liquides ioniques est normalement plus élevée que celle de l'eau et diminue avec l'augmentation de la température. Les impuretés influentes sur la viscosité, par exemple, la présence d'eau diminue la viscosité des liquides ioniques alors que la présence de chlorures l'augmente (Angell et al. (2007)).

.

Tableau I.3: Viscosité de quelques liquides ioniques (Moutiers G.et Billard I.(2011)).

Liquide ionique	Viscosité (cP)
[Emim][NTf2]	25
[Emim][BF4]	66,5 (20 c°) 37,7 (22 c°)
[Emim][CH3CO2]	160 (20 c°)
[Emim][CF3CO2]	35 (20 c°)
[Emim][CF3SO3]	45 (20 c°)
[Bmim][I]	1110 (sec) (25 c°)
[Bmim][BF4]	219 (sec) (25 c°)
[Bmim][PF6]	207 (sec) (25 c°) 450 (sec) (25 C°) = 275 (25 c°)
[Bmim][NTf2]	52 (20 c°) 69 (sec) (25 c°) =42 (25 c°)
[Bmim][CF3CO2]	73 (20 c°)
[Bmim][CF3SO3]	90 (20 c°)
[Hmim][NTf2]	=60 (25 c°)
[Hmim][PF6]	=410 (25 c°) 585 (sec) (25 c°)

La notation (sec) indique que la viscosité a été mesurée sur un liquide ionique séché.

I-8-4. Conductivité :

Les liquides ioniques, par définition, présentent une conductivité ionique, c'est-à-dire une conductivité électrique (également appelée conductivité spécifique). La conductivité est exprimée en siemens par mètre (S/m) ou, pour les faibles conductivités, en millisiemens par centimètre (mS/cm), la conductivité d'un liquide ionique est une mesure de la capacité du liquide à conduire un courant électrique. Les ions agissent comme des porteurs de charge (Freemantle (2010)).

Tableau I.4: Conductivité de divers sels de dialkilmidazolium (Moutiers et Billard(2011)).

Liquides ioniques	Conductivité (mS/cm)
[Emim][BF4]	13
[Emim][PF6]	5,2
[Emim][CH3CO2]	2,8
[Emim][CF3CO2]	9,6
[Emim][CH3SO3]	2,7
[Emim][CF3SO3]	9,2 8,6
[Emim][NTf2]	8,4 8,8
[Bmim][PF6]	1,8
[Bmim][CF3CO2]	3,2
[Bmim][CF3SO2]	3,7
[Bmim][NTf2]	3,9
[iBmim][NTf2]	2,6
[Mmim][CF3CO2]	7,4
[Mmim][CF3SO2]	7,5
[Mmim][NTf2]	8,5
[Bmim][CF3CO2]	2,5
[Bmim][CH3SO3]	0,55
[Bmim][NTf2]	4,1

I-8-5. Densité :

La densité d'un liquide ionique reflète les interactions et la distance entre les structures chimiques qui le constituent. La pertinence de cette propriété a été rapportée dans les différentes études de corrélation entre la structure d'un composé avec sa densité. (Amadou (2014)), Certains liquides ioniques ont une densité proche de celle de l'eau. Parmi ces liquides ioniques, on peut citer [CsCâmt [BF4-] (d = 1,08 à 25°C) (Amadou (2014)). La majorité des LIs sont plus denses que l'eau avec des valeurs de densités comprises entre 1 et 1.6 $g.cm^{-3}$ (Revelli 2010).

Tableau I.5: Valeurs de densités de quelques liquides ioniques (Moutiers et Billard (2011)).

Liquides ioniques	Densité à T=25 c°
[Emim][BF4]	1,28 1,44 (22 c°) (sec)
[Emim][NTf2]	1,52
[Emim][CF3CO2]	1,285
[Emim][CF3SO3]	1,39
[Bmim][Cl]	1,08
[bmim][PF6]	1,37 1,36 (sec)
[Bmim][NTf2]	1,44
[Bmim][CF3CO2]	1,21
[Bmim][CF3SO3]	1,29
[Hmim][PF6]	1,29 1,31 (sec)
[Hmim][NTf2]	1,37
[Omim][BF4]	1,08
[Omim][PF6]	1,37 1,24 (sec)
[Omim][NTf2]	1,32
[N(n-C6)(C1)3][NTf2]	1,33 (20 c°)
[N(n-C6)(C2)3][NTf2]	1,27 (20 c°)
[N(n-C6)(n-C4)3][NTf2]	1,15 (20 c°)
[N(n-C8)(C1)3][NTf2]	1,27 (20 c°)
[N(n-C8)(C2)3][NTf2]	1,25 (20 c°)
[N(n-C8)(n-C4)3][NTf2]	1,12 (20 c°)

La notation (sec) indique que la densité a été mesurée sur un liquide ionique séché.

I-8-6. Solubilité :

Les propriétés des ILS peuvent changer de manière significative en faisant varier la longueur des groupes alkyle qui sont incorporés dans le cation et les types d'anions. Par exemple, pour le cation 1-alkyl-3-alkyl imidazolium, le remplacement de l'anion ($PF6^-$) par ($BF4^-$) augmente considérablement la solubilité de l'IL dans l'eau, alors que le remplacement de l'anion par l'ion ($Tf2N^-$) diminue (Han et al. (2010)).

Les liquides ioniques, qui sont des solvants polaires, sont inoffensifs pour l'environnement, non volatils, ininflammables ; la plupart d'entre eux ont une bonne solubilité dans l'eau et sont stables dans l'air (Xiaohua et al. (2004)).

Tableau I.6: Miscibilité des liquides ioniques dans l'eau et dans d'autres solvants (Revelli 2010)

Liquide ionique		**Solvant**				
		Eau	**Méthanol**	**Acétonitrile**	**Acétone**	**n-Héxane**
EMIM	**PF6**	M	M		M	I
	CH3SO3	M		M	M	
	CF3SO3	I				
	(CF3SO2)2N	I	M	M		
BMIM	**Cl**	M				
	I	M				
	PF6	I	M		M	I
	BF4	M	M	M	I	I
	CH3SO3	M		M	M	
	CF3SO3	I	M	M		
	(CF3SO2)2N	I	M	M		

I-8-7. Toxicité et biodégradabilité:

La toxicité des LIs est pour l'instant mal connue bien que, récemment, des études ont été entreprises afin d'en évaluer les propriétés toxicologiques ont répertorié toutes les études toxicologiques réalisées sur les liquides ioniques. Il en ressort plusieurs conclusions.

La toxicité des LIs constitués du cation alkyl imidazolium augmente avec une augmentation de la longueur de la chaîne alkyle. L'introduction d'une chaîne polaire réduit leur toxicité et augmente leur biodégradabilité. Les cations pyridinium semblent être plus respectueux de l'environnement que les cations imidazolium. L'anion a un effet moins important sur la toxicité, cependant les LIs constitués de l'anion $Tf2N^-$ ont un impact toxicologique sur l'environnement (Revelli 2010).

Tableau I.7: Toxicité des LIs avec les microorganismes de quelques applications biotechnologiques intéressées (Quijano et al. 2010).

Liquide ionique	**IC50 (% v/v)**	**Microorganisme**	**Indicateur de toxicité**	**Temps exposé (h)**
[Bmim][pf6]	5	Lactobacillus rhamnosus	Inhibition de la production d'acide lactique	48
	0.5	Escherichia coli	Inhibition augmentée	8
	13	Klebsiella Pneumoniae	Inhibition augmentée	24
[Bmim][NTf2]	20	Sacchromyces Cerevisiae	Inhibition augmentée	80
[Bmim][BF4]	7 15	Photobacterium Phosphoreum proteus vulgaris	Inhibition d'émission de lumière	0.25 24

			Inhibition augmentée	
[Hmim][PF6]	15 15	Candida albicans Echerichia coli	Inhibition augmentée Inhibition augmentée	48 24
[Hmim][BF6]	16 16	Klebsiella pneumoniae pseudomonas aeruginosa	Inhibition augmentée Inhibition augmentée	24 24
[Omim][PF6]	16 16	Saccharomyces cerevisiae	Inhibition augmentée	80
[Dmim][PF6]	20 20	Saccharomyces cerevisiae	Inhibition augmentée	80

IC50**: concentration inhibitoire à laquelle la croissance, la viabilité ou le métabolisme de cellule est inhibé à 50 % relative au un control défavorisé de LI.**

Tableau I.8: la biodégradabilité de quelques liquides ioniques (Quijanoet al. 2010)

Liquide ionique	Microorganisme utilisé	Test a	Température (c°)	Temps d'expérience (jour)	biodégradable
[Bmim][PF6]	Sédiment activé Sédiment activé Sédiment activé Fusarum sp	DBO Sturm test DBO Mesure directe de concentration des LIs	20 20 20 30	10 28 28 28	Non Non Non Oui
[Bmim][Tf2N]	Sédiment activé	DBO	20	28	Non
[Bmim][BF4]	Sédiment activé	DBO	20	28	Non
[BMPY][Br]	Sédiment activé	Mesure directe de concentration des LIs	25	28	Oui
[Bmim][BF4]	Microorganisms de sol indigène	Sturm test b	25	180	OUI
[Bmim][PF6]	Sédiment activé	DBO			NOn

a: tous les tests ont été réalisés aux conditions aerobiques.

b: non microorganismes additionnels ont été ajoutés au le système hors de sol indigène.

c: seulement deux atomes de carbone de la chaine alkyle ont été biodégradés.

Sédiment activé (activated sludge): flacon fermé inoculé avec les microorganismes des eaux polluées.

DBO: Demande Biochimique en Oxygène.

Sturm test : basé sur la production de CO_2 après l'inoculation avec le sédiment activé.

I-9. Avantages et caractéristiques des liquides ioniques :

Les avantages les plus importants des liquides ioniques sont les suivants :

- Ils sont hautement polaires.

- Ils ont une faible pression de vapeur et sont non volatils.
- Ils sont généralement stables et résistants à la chaleur jusqu'à 300°C.
- Ils sont liquides dans une large gamme de températures, jusqu'à 200°C.
- La conductivité électrique de ces composés est très élevée.

Ces composés sont incompatibles avec de nombreux solvants organiques courants (Kianfar et Mafi (2021)).

I-10. Conclusion :

La revue de la littérature scientifique consultée sur les liquides ioniques, et par la projection de la lumière sur leur définition, leur historique et leurs propriétés physico-chimiques, montre que les liquides ioniques possèdent des propriétés physico-chimiques très intéressantes. L'ensemble de ces propriétés en font des milieux de choix pour le développement de la chimie verte. En raison de leurs caractéristiques physicochimiques uniques les LIs présentent perspectives de plus en plus prometteuses dans les divers domaines de la synthèse, de la catalyse/biocatalyse, de la science des matériaux, de l'électrochimie et de la technologie de séparation à l'échelle industrielle. La mesure de ces propriétés notamment la température de décomposition est de plus haute importance pour les applications industrielles des LIs en tant que solvant vert alternatifs.

Étant donné que la mesure expérimentale de la température de décomposition de tous les liquides ioniques est difficile, les modèles de prédiction et de corrélation de la température de décomposition des LIs ont été largement utilisés au cours de dernières années.

Chapitre II : Méthodes d'Intelligence Computationnelle

Chapitre II

Méthodes d'Intelligence Computationnelle

II-1. Introduction :

L'intelligence computationnelle est un modèle informatique et des outils d'intelligence capables de saisir directement des données sensorielles numériques brutes, de les traiter en exploitant le parallélisme représentationnel et la mise en pipeline du problème, de générer des réponses fiables et opportunes et de supporter une tolérance élevée aux pannes (Konar (2006)).

Les méthodes utilisées sont proches de la manière du raisonnement de l'être humain. Elles utilisent les connaissances non exactes et non complètes. En effet, l'intelligence computationnelle utilise une combinaison de cinq principales techniques complémentaires :

- **La "logique floue"** qui permet à l'ordinateur de comprendre le langage naturel.
- **Le calcul évolutif** qui est basé sur le processus de sélection naturelle.
-**La théorie de l'apprentissage.**
- **Les méthodes probabilistes** qui aident à faire face aux incertitudes d'imprécision.
- **Les réseaux de neurones artificiels** qui permettent au système d'apprendre des données (Haddache et Ouled Ouali **(**2019)).

Dans cette partie on va laisser tomber la lumière sur les méthodes d'intelligence computationnelle telles que les réseaux de neurones artificiels (RNA), et la machine à vecteur de support (SVM).

II-2. Réseaux de neurones artificiels:

II-2-1. Définition :

Le réseau neuronal artificiel (RNA), ou simplement réseau neuronal, est une méthode d'apprentissage automatique issue de l'idée de simuler le cerveau humain (Zou et al. (2008)). Un réseau de neurones est un processus partagé de manière massivement parallèle, qui a une propension naturelle à mémoriser des connaissances de façon expérimentale et de les rendre disponibles pour l'utilisation. Il ressemble au cerveau en deux points :

- La connaissance est acquise au travers d'un processus d'apprentissage.
- Les poids des connections entre les neurones sont utilisés pour mémoriser la connaissance (Sediri (2017)).

Ces réseaux sont solidement connectés de processeurs élémentaires fonctionnant en parallèle. Chaque processeur élémentaire calcule une sortie unique sur la base des informations qu'il reçoit. Toute structure hiérarchique de réseaux est évidemment un réseau (Ammar (2007)).

II-2-2. 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 nourrir 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.1.Cette représentation est à l'origine de la première vague d'intérêt pour les neurones formels, dans les années 1940 à 1970 (Saifour et Feddak(2022)).

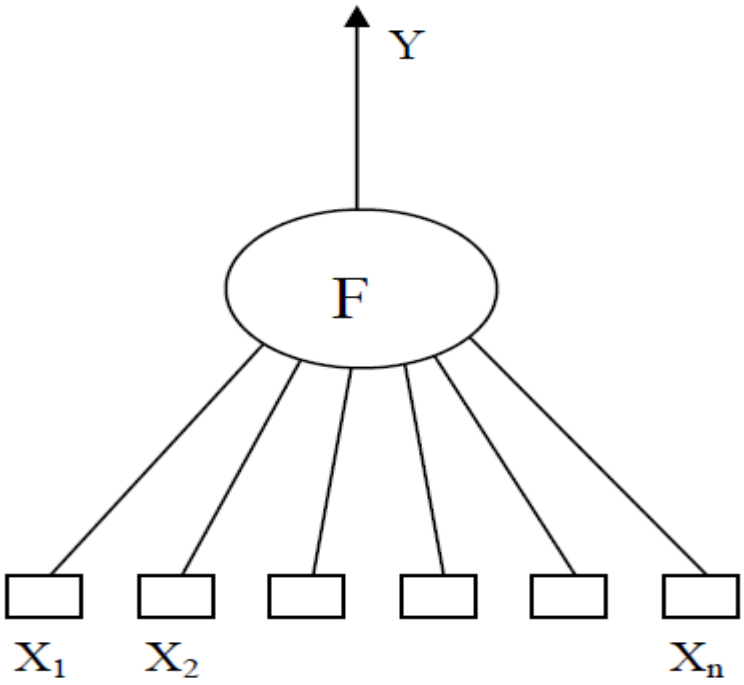


Figure II. 1: Neurone artificiel (Saifour et Feddak (2022)).

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 (Saifour et Feddak (2022)).

II-2-3. Notions fondamentales sur les réseaux de neurones artificiels :

II-2-3-1. Neurone biologique et neurone artificiel :

L'idée de réseaux neuraux artificiels a été inspirée de la manière par laquelle les neurones biologiques traitent les informations. Ce concept est utilisé pour mettre en œuvre des logiciels de simulations des processus massivement parallèles qui impliquent des éléments de traitement connectés dans une architecture de réseau. L'apprentissage dans le cerveau humain se fait à travers un réseau des neurones qui sont connectés par l'axone, les synapses et des dendrites (figure II. 2) (Si-Moussa (2010)).

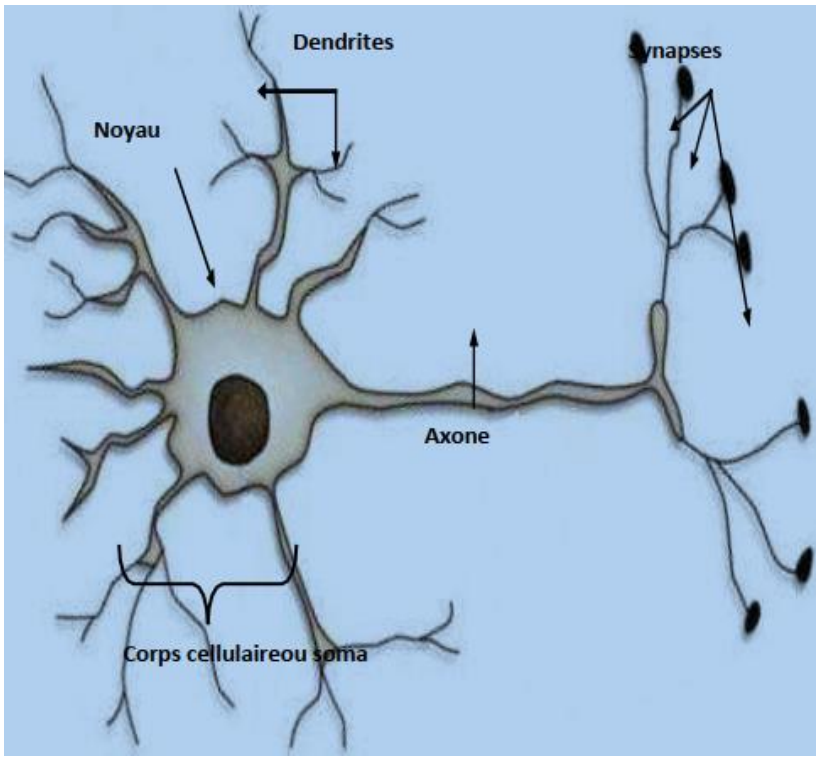


Figure II. 2: Schéma d'un neurone biologique (Si-Moussa (2010)).

Un neurone est une cellule particulièrement complexe spécialisée dans le traitement des signaux électriques. Son rôle est de recevoir, stocker et transmettre l'information (Touzet (1992)).

Le corps d'un neurone (figure II.2) est relié d'une part à un ensemble de dendrites (entrées du neurone) et d'autre part à un axone, partie étirée de la cellule, qui représentera pour nous sa sortie. Le neurone étudié est connecté aux neurones environnants : il reçoit au niveau de ses dendrites les signaux électriques des neurones "en amont", propagés par les axones de ces derniers. Les charges électriques s'accumulent dans le neurone jusqu'à dépasser un certain seuil : à ce moment la transmission du signal électrique se déclenche via son axone vers d'autres neurones "en aval" (Adel et Brida (2017)).

Les réseaux de neurones artificiels (Figure II.3) sont des réseaux fortement connectés de processeurs (neurones) élémentaires fonctionnant en parallèle (Bettache et Yahiaoui (2014)). Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones amonts. A chacune de ces entrées est associé un poids **w** abréviation de weight (en anglais) 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 avals. A chaque connexion est associé un poids. (Touzet (1992)).

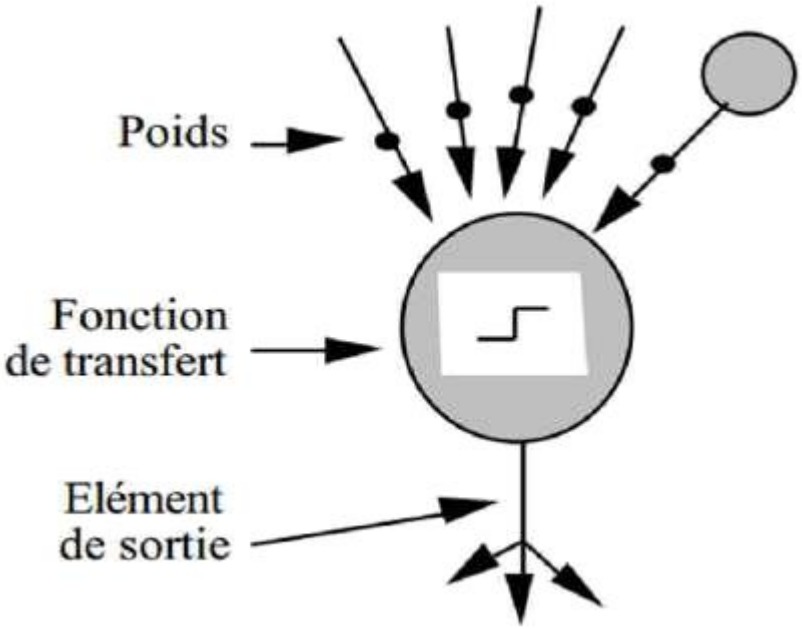


Figure II. 3: Structure de Neurone artificiel (Touzet (1992)).

La (figure II.4) 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.

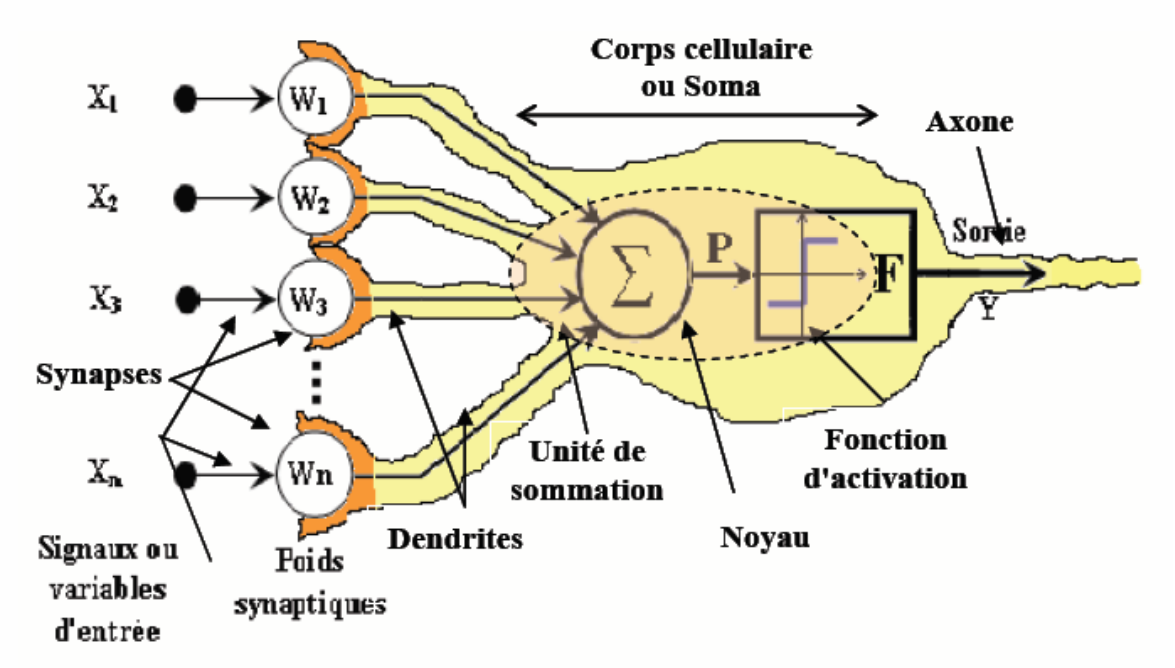


Figure II. 4: Schéma de comparaison entre un neurone biologique et un neurone artificiel (Si-Moussa(2010)).

II-2-3-2. Fonction d'activation :

La fonction d'activation calcule la valeur de l'état du neurone qui est transmise aux neurones avals. La fonction d'activation sert aussi à introduire une non-linéarité dans le fonctionnement du neurone. A la différence des neurones biologiques dont l'état est binaire, la plupart des fonctions de transfert sont continués, offrant une infinité de valeurs possibles comprises dans l'intervalle [0, +1] ou [-1, +1]. Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert. Le tableau II.1 résume quelques fonctions de transfert utilisées dans le programme de calcul techniques MATLAB® (Si-Moussa (2010)). Les trois les plus utilisées sont les fonctions «seuil» (en anglais «hard limit»), «linéaire» et «sigmoïde» (Parizeau(2004)).

Tableau II. 1: Les fonctions de transfert les plus courantes (Parizeau(2004)).

Nom de la fonction	Relation d'entrée/sortie	Icône	Nom Matlab
seuil	$a = 0$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlim
seuil symétrique	$a = -1$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlims
linéaire	$a = n$		purelin
linéaire saturée	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $0 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlin
linéaire saturée symétrique	$a = -1$ si $n < -1$ $a = n$ si $-1 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlins
linéaire positive	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $n \geq 0$		poslin
sigmoïde	$a = \frac{1}{1+\exp^{-n}}$		logsig
tangente hyperbolique	$a = \frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}$		tansig
compétitive	$a = 1$ si n maximum $a = 0$ autrement		compet

II-2-3-3. Architecture des réseaux de neurones artificiels :

On distingue deux grandes familles de réseaux de neurones : les réseaux bouclés et les réseaux non bouclés (Figure II.5):

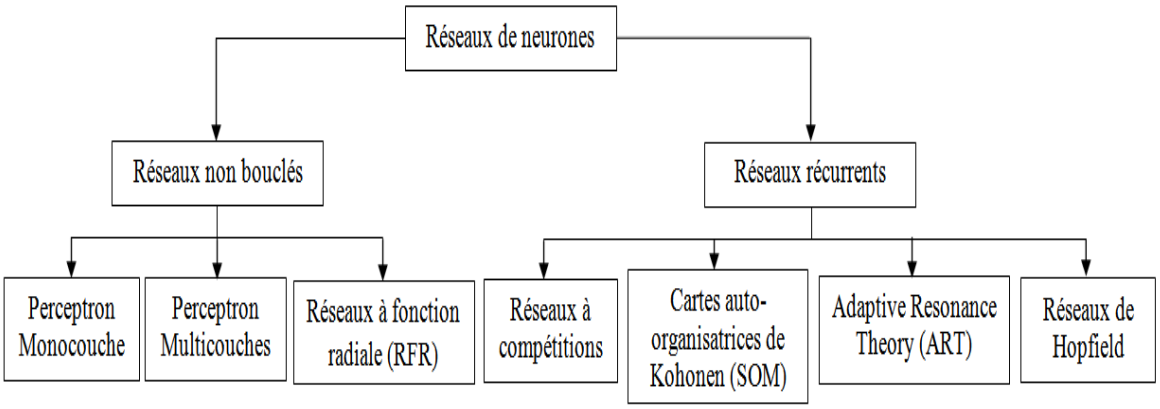


Figure II. 5: Réseaux de neurones les plus utilisés (Talbi (2011)).

II-2-3-3-1. Réseau de neurones non bouclé (en anglais feedforward) :

Un réseau de neurones non bouclé est donc représenté graphiquement par un ensemble de neurones connectés entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans "retour en arrière". On constate que le graphe d'un réseau non bouclé est acyclique. En effet, si Non se déplace dans ce type de réseau à partir d'un neurone quelconque en suivant les connexions, on ne peut pas revenir au neurone de départ. Les neurones qui effectuent le dernier calcul de la composition de fonctions sont les neurones de sortie. Ceux qui effectuent des calculs intermédiaires sont les neurones cachés (Khaouane (2013)) (Figure II.6).

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

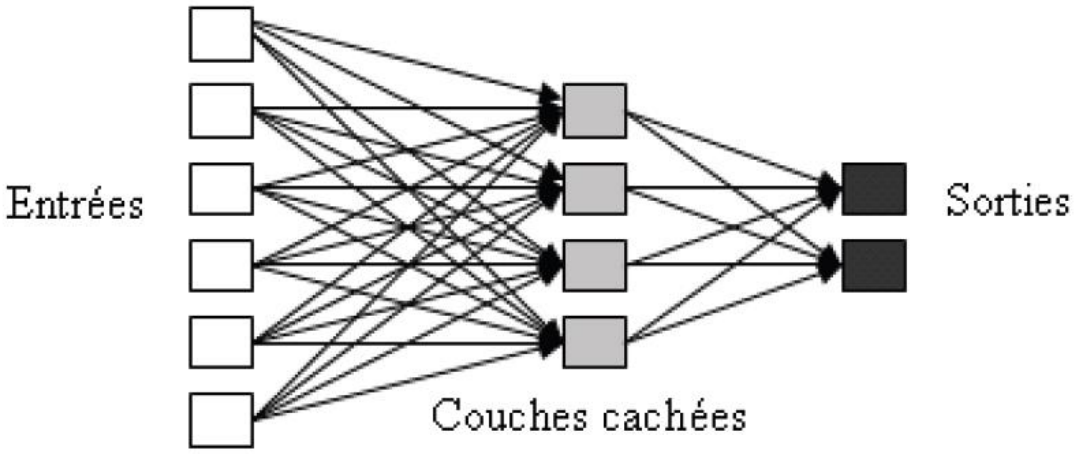


Figure II. 6: Structure d'un réseau de neurones non bouclé (Chamekh (2007)).

II-2-3-3-2. Réseau de neurones bouclé (ou récurrent) :

Un réseau de neurones bouclé est schématisé par un graphe de connexions qui 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").Ainsi, un retard entier multiple de l'unité de temps

choisie est attaché à chaque connexion d'un réseau de neurones bouclé (ou à chaque arrête de son graphe). Une grandeur à un instant donné ne peut pas être fonction de sa propre valeur au même instant. Tout cycle du graphe du réseau doit avoir un retard non nul (Chamekh (2007)).

La figure II.7 représente un exemple de réseau de neurones bouclé. Les chiffres dans les carrés indiquent le retard attaché à chaque connexion, exprimé en multiple de l'unité de temps. Ce réseau contient un cycle, qui part du neurone 3 et revient à celui-ci en passant par le neurone 4. La connexion de 4 vers 3 ayant un retard d'une unité de temps.

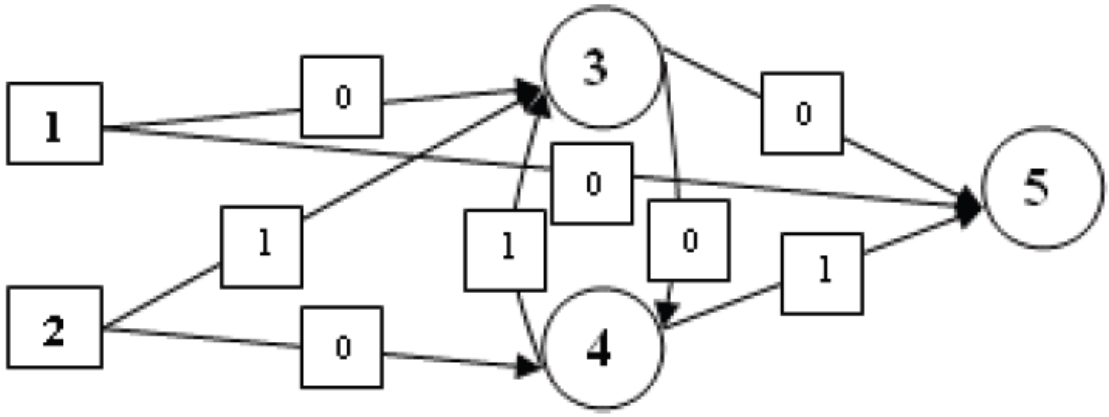


Figure II. 7: Un réseau de neurones bouclé à deux entrées (Chamekh (2007)).

II-2-4. Type d'apprentissage de réseau de neurones:

II-2-4-1. Apprentissage supervisé :

- Il existe un lien entre l'apprentissage supervisé et la disponibilité d'instances ou de modèles de réponse. Les exemples utilisés pour l'apprentissage sont présentés sous forme de paires (X, Y*), où y* représente la réponse souhaitée du réseau à l'entrée X. À l'aide des exemples d'entrée/sortie, le réseau s'entraîne à simuler une fonction multi variable. Ses poids sont modifiés par un signal d'erreur qui indique l'écart entre la sortie prévue par le modèle et la sortie évaluée par le réseau. L'algorithme neuronal peut alors se généraliser et répondre à n'importe quelle entrée, même si elle ne provient pas de l'ensemble d'apprentissage, grâce à ses propriétés uniques. Le réseau réalise une approximation proche de la fonction qui lui a servi d'enseignant (Bettache et Yahiaoui (2014)). **(**Figure II.8)

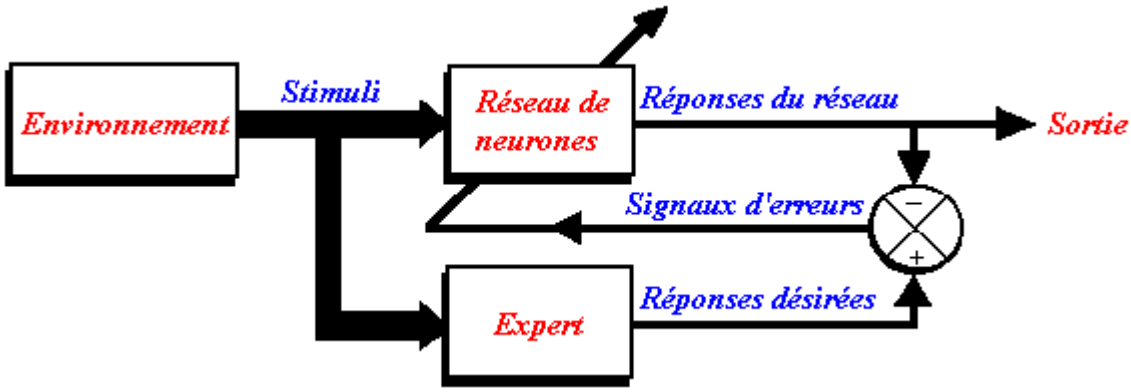


Figure II. 8: Illustration de l'apprentissage supervise (Aissat et Nouar (2018)).

II-2-4-2. Apprentissage non supervisé :

L'apprentissage non supervisé est autodidacte, contrairement à l'apprentissage supervisé, qui s'effectue sous la supervision d'un expert. L'ensemble des exemples d'apprentissage ne comprend que des stimuli ; il n'y a pas de réponse souhaitée liée.

Cet apprentissage implique l'identification automatique des modèles qui apparaissent dans les exemples donnés et la modification des poids de connexion de sorte que les exemples présentant les mêmes modèles produisent le même résultat. Ce type d'enseignement est schématisé dans la figure II.9 (Aissat et Nouar (2018)).

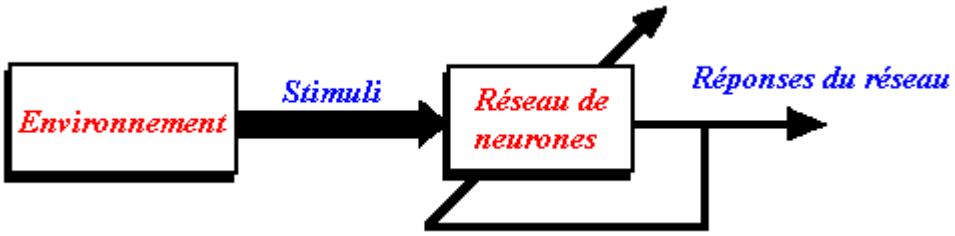


Figure II. 9: Illustration de l'apprentissage non supervisé (Aissat et Nouar (2018)).

II-2-5. Les composants d'un réseau de neurone :

Le réseau de neurone se compose en huit éléments sont :

- Un ensemble de neurone.
- Un état d'activation pour chaque neurone (actif, inactif).
- Une fonction de sortie pour chaque neurone [f(s)].
- Un modèle de connectivité entre les neurones (chaque neurone est connecté à tous les autres).

- Une règle de propagation pour propager les valeurs d'entrée à travers le réseau vers les sorties.
- Une règle d'activation pour combiner les entrées d'un neurone.
- Une règle d'apprentissage.
- Un environnement d'opération (le système d'exploitation, par exemple) (Touzet (1992)).

II-2-6. Les connexions entre les neurones :

Les connexions permettent de construire le réseau de neurones en liant les différentes entités ensemble. La plus simple et la plus classique des connexions est la connexion unidirectionnelle pondérée. Il s'agit d'un arc unidirectionnel pondéré par un poids wij qui relie le neurone j au neurone i et qui correspond au poids utilisé dans la fonction de sommation. Ces connexions simples sont représentées dans la (Figure II.10) (Cherif (2013)).

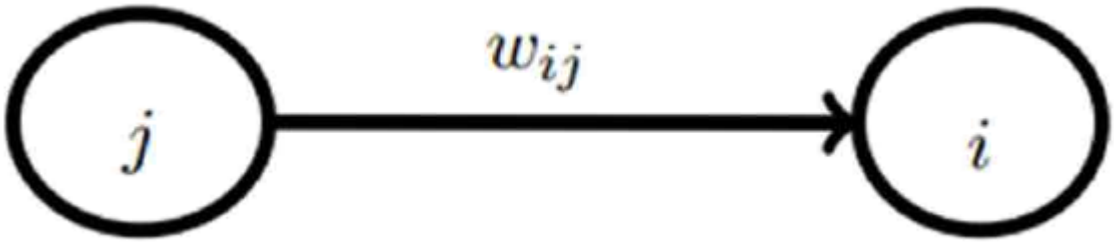


Figure II. 10: Connexion simple entre deux neurones (Cherif (2013)).

II-2-7. Les avantages et les inconvénients :

Avantages :

- Aucune connaissance basée sur les règles.
- Le modèle mathématique non requis.
- Plusieurs algorithmes d'apprentissages sont disponibles (Bettache et Yahiaoui (2014))

Inconvénients :

- Boite noir (manque de traçabilité).
- L'adaptation aux environnements différents est difficile el le réapprentissage est souvent obligatoire (Bettache et Yahiaoui (2014))

II-3. La machine vecteur de support :

Les SVM introduites au début des années 90, constituent la mise en pratique du principe de minimisation du risque structurel ERM. Elles réalisent ainsi un grand succès de la théorie de l'apprentissage statistique. Aujourd'hui, nous pouvons dire sans exagérer que ces machines ont supplanté les réseaux de neurones et les autres techniques d'apprentissage. En effet, elles sont largement répandues en apprentissage statistique et ont eu beaucoup de succès dans quasiment tous les domaines où elles ont été appliquées (Meghoufel (2012)).

II-3-1. Définition :

Les machines à vecteurs de support ou séparateurs à vaste marge (en anglais Support Vector Machine, SVM) sont un ensemble de techniques D'apprentissage supervisé destinées à résoudre des problèmes de discrimination. Les SVM sont une généralisation des classifiées linéaires (Vapnic (1995)).

Les SVM ont été appliqués à de très nombreux domaines (bioinformatique, recherche d'information, vision par ordinateur, finance....). Selon les données, la performance des machines à vecteurs de support est de même ordre, ou même supérieure, à celle d'un réseau de neurones ou d'un modèle de mixture gaussienne. **https://fr.wikipedia.org**

II-3-2. Principe de fonctionnement général de SVM :

II-3-2-1. Notions de base: Hyperplan, marge et support vecteur :

Pour deux classes d'exemples donnés, le but de SVM est de trouver un classificateur, qui va séparer les données et maximiser la distance entre ces deux classes. Avec SVM, ce classificateur est un classificateur linéaire appelé hyperplan **(**Figure II.11). Dans le schéma qui suit, on détermine un hyperplan qui sépare les deux ensembles de Points (Zaiz (2010)).

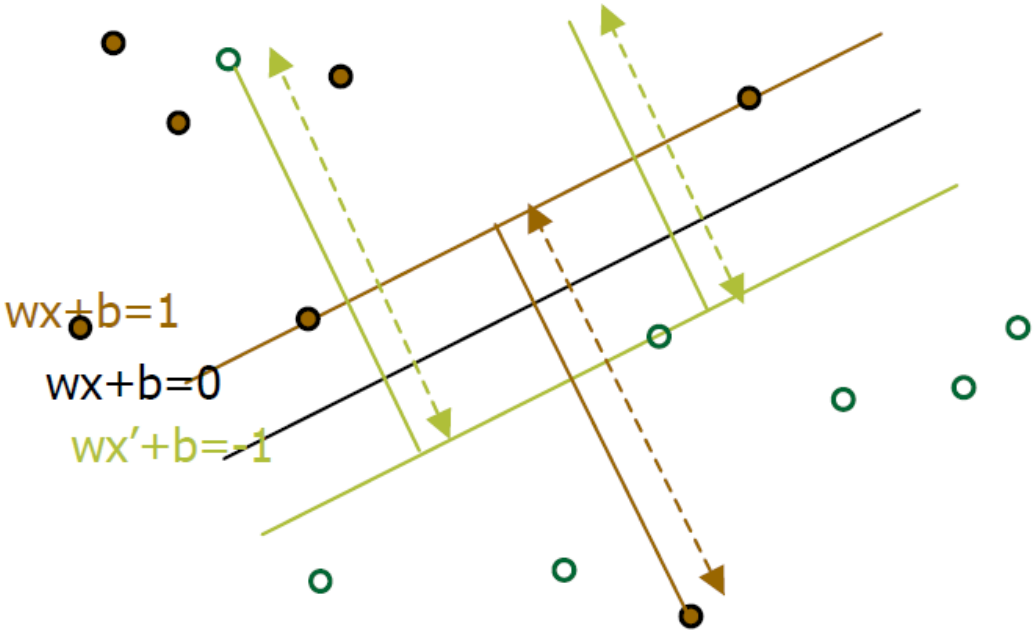


Figure II. 11: Exemple d'un hyperplan séparateur (Jakkula (2006)).

Les points les plus proches, qui seuls sont utilisés pour la détermination de l'hyperplan, sont appelés vecteurs de support **(**Figure II-12) (Zaiz (2010)).

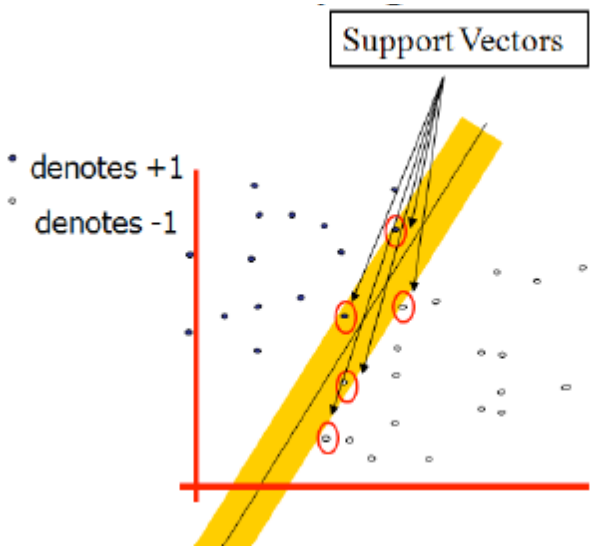


Figure II. 12: Exemple de vecteurs de support (Jakkula (2006)).

Il est évident qu'il existe une multitude d'hyperplan valide mais la propriété remarquable des SVM est que cet hyperplan doit être optimal. Nous allons donc en plus chercher parmi les hyperplans valides, celui qui passe « au milieu » des points des deux classes d'exemples. Intuitivement, cela revient à chercher l'hyperplan le « plus sûr ». En effet, supposons qu'un exemple n'ait pas été décrit parfaitement, une petite variation ne

modifiera pas sa classification si sa distance à l'hyperplan est grande. Formellement, cela revient à chercher un hyperplan dont la distance minimale aux exemples d'apprentissage est maximale (Zaiz (2010)).

On appelle cette distance « marge » **(**Figure II-13) entre l'hyperplan et les exemples. L'hyperplan séparateur optimal est celui qui maximise la marge. Comme on cherche à maximiser cette marge, on parlera de séparateurs à vaste marge.

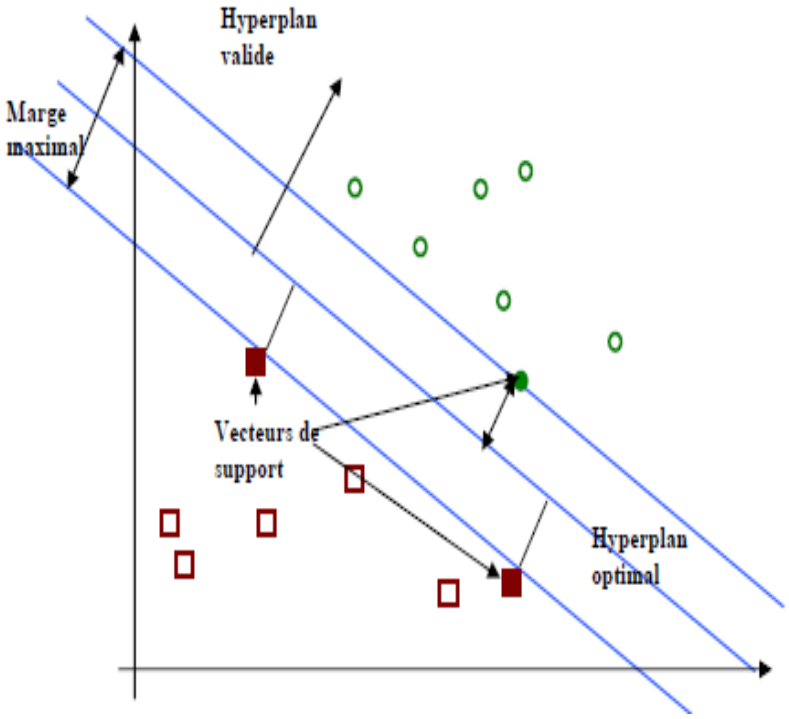
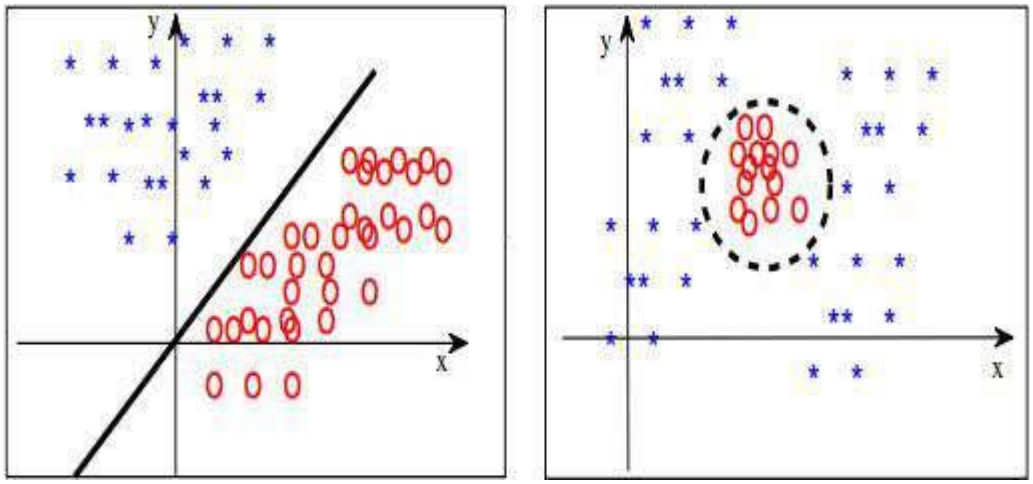


Figure II. 13: Exemple de marge maximal (hyperplan valide) (Zaiz (2010)).

II-3-2-2. Linéarité et non-linéarité :

Parmi les modèles des SVM, on constate les cas linéairement séparables et les cas non linéairement séparable **(**Figure II.14) (Alouane et Saidoun **(**2021)).



(a) **(b)**

Figure II. 14: (a) linéairement séparable et (b) cas non linéairement séparable (Alouane et Saidoun (2021)).

II -3-2-2-1. Cas linéairement séparable :

Les cas linéairement séparables **(**Figure II.14. (a)) sont les plus simples de SVM car ils permettent de trouver facilement le classificateur linéaire (Alouane et Saidoun **(**2021)).

II -3-2-2-2. Cas non linéaire :

Pour surmonter les inconvénients des cas non linéairement séparable **(**Figure II.14.(b)), l'idée des SVM est de changer l'espace des données. La transformation non linéaire des données peut permettre une séparation linéaire des exemples dans un nouvel espace. On va donc avoir un changement de dimension. Cette nouvelle dimension est appelé « espace de re-description ». En effet, intuitivement, plus la dimension de l'espace de re-description est grande, plus la probabilité de pouvoir trouver un hyperplan séparateur entre les exemples est élevée. Ceci est illustré par les schéma suivant (Mohamadally et Fomani (2006)) :

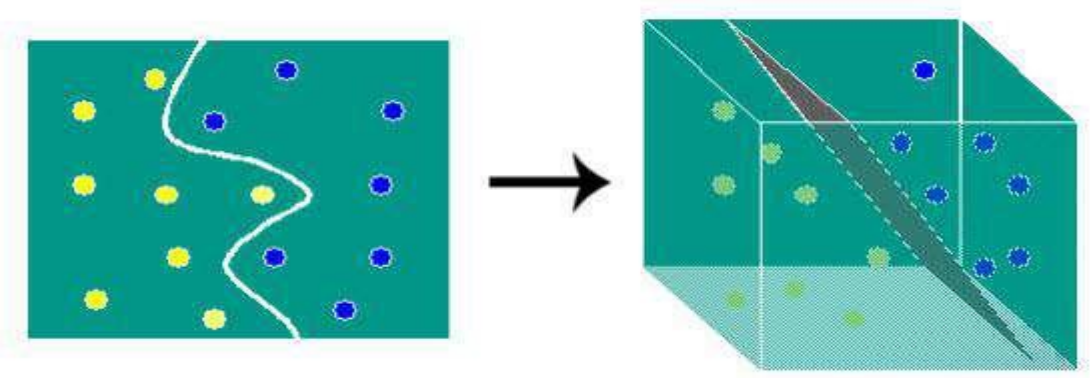


Figure II. 15: exemple de changement de l'espace de données (Mohamadally et Fomani (2006)).

On a donc une transformation d'un problème de séparation non linéaire dans l'espace de représentation en un problème de séparation linéaire dans un espace de re-description de plus grande dimension. Cette transformation non linéaire est réalisée via une fonction noyau. (Alouane et Saidoun **(**2021)).

II-3-3. Architecture générale d'une machine à vecteur support :

Une machine à vecteur support, recherche à l'aide d'une méthode d'optimisation, dans un ensemble d'exemples d'entrainement, des exemples, appelés vecteurs support, qui caractérisent la fonction de séparation. La machine calcule également des multiplicateurs associés à ces vecteurs. Les vecteurs supports et leurs multiplicateurs sont utilisés pour calculer la fonction de décision pour un nouvel exemple. Le schéma de la figure résume l'architecture générale d'une SVM dans le cas de la reconnaissance des chiffres manuscrits (Djeffal (2012)).

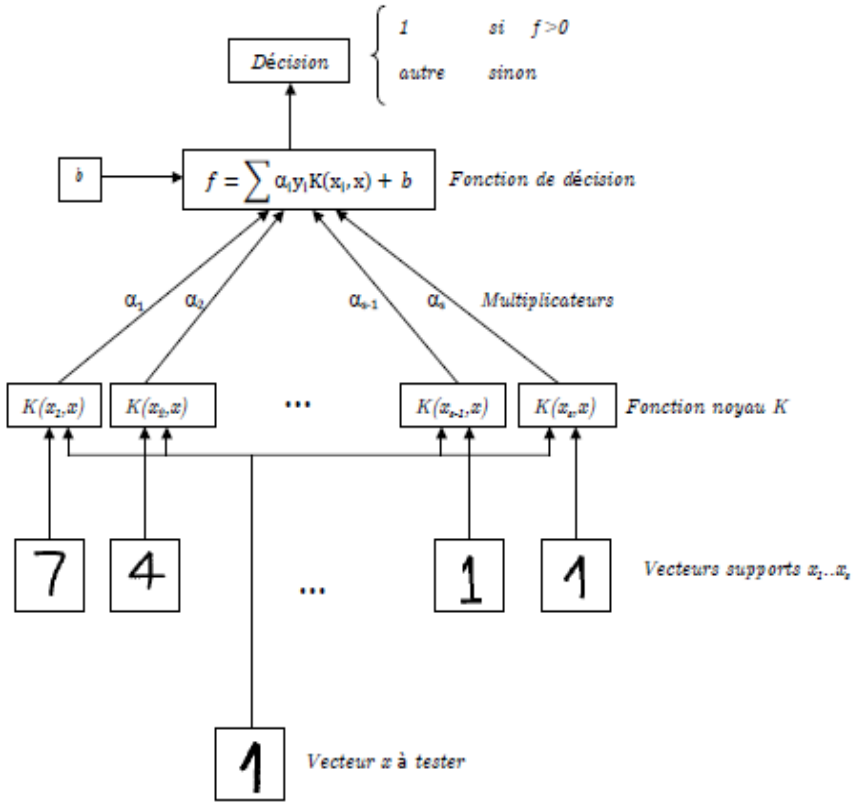


Figure II. 16: Architecture d'une machine à vecteur support (Djeffal (2012)).

La fonction noyau K est utilisée pour calculer la distance entre le vecteur à tester x et chaque vecteur support dans l'espace de caractéristique. Les résultats sont ensuite linéairement combinés en utilisant les multiplicateurs de Lagrange _i et ajoutés au biais b. Le résultat final f permet de décider à propos du nouveau vecteur : si f(x) est positive, il s'agit du chiffre "1", sinon, il s'agit d'un autre chiffre (DJEFFAL (2012)).

II-3-4. Applications :

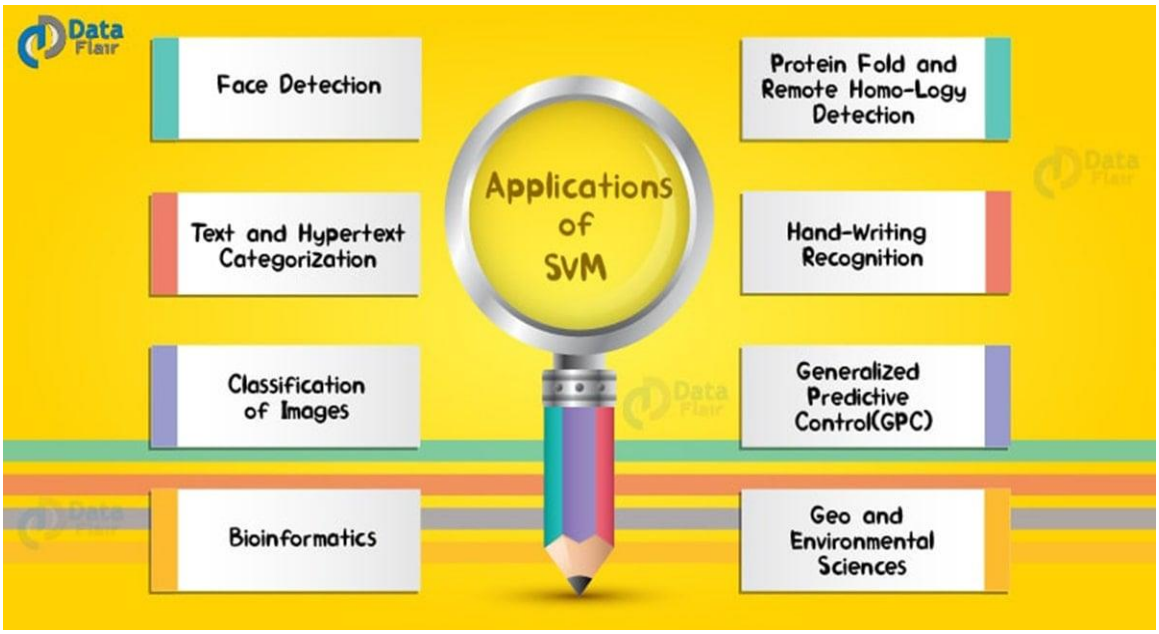


Figure II. 17: Applications réelles des SVM. https://data-flair.training/blogs/applications-of-svm/

Détection de visage : SVM classe les parties de l'image en tant que visage et non-visage et crée une limite carrée autour du visage.

Catégorisation de texte et d'hypertexte : Les SVM permettent la catégorisation de texte et d'hypertexte pour les modèles inductifs et traductifs. Ils utilisent des données de formation pour classer les documents en différentes catégories. Il catégorise sur la base du score généré puis compare avec la valeur seuil.

Classification des images : L'utilisation de SVM offre une meilleure précision de recherche pour la classification des images. Il offre une meilleure précision par rapport aux techniques de recherche traditionnelles basées sur des requêtes.

Bioinformatique : Elle comprend la classification des protéines et la classification du cancer. Nous utilisons SVM pour identifier la classification des gènes, des patients sur la base des gènes et d'autres problèmes biologiques.

Détection des plis protéiques et des homologies à distance : Application des algorithmes SVM pour la détection des homologies à distance des protéines.

Reconnaissance de l'écriture manuscrite : Nous utilisons des SVM pour reconnaître les caractères manuscrits couramment utilisés.

Contrôle prédictif généralisé (CPG) : Utiliser le CPG basé sur le SVM pour contrôler la dynamique chaotique avec des paramètres utiles.https://data-flair.training/blogs/applications-of-svm/.

II-3-5. Avantages et inconvénients des SVM :

Avantages :

Les SVM possèdent des fondements mathématiques solides.

- Les exemples de test sont comparés juste avec les supports vecteurs et non pas avec tous les exemples d'apprentissage.
- Décision rapide. La classification d'un nouvel exemple consiste à voir le signe de la fonction de décision **f(x)** (Haddache et Ouled Ouali (2019)).

Inconvénients :

- Classification binaire d'où la nécessité d'utiliser l'approche un-contre-un.
- Grande quantité d'exemples en entrées implique un calcul matriciel important.
- Temps de calcul élevé lors d'une régularisation des paramètres de la fonction noyau (Haddache et Ouled Ouali(2019)).

II-4. Conclusion :

A la lumière de la littérature scientifique consultée, il ressort que la modélisation est un sujet de préoccupation majeure pour tous les domaines surtout le domaine pharmaceutique. Indépendamment de leur utilisation, la modélisation dans le but de prédiction et/ou de corrélation a été continue d'être le sujet d'intérêt de nombreux travaux de recherche récentes, la mesure expérimentale de la température de décomposition des liquides ioniques est laborieuse et coûteux. La modélisation est donc un passage obligé pour éviter des expériences coûteuses et fastidieuses.

Ce chapitre est consacré à la présentation de manière simple et résumé les méthodes d'apprentissage de l'intelligence artificielle. Nous avons donné une vision générale sur deux méthodes (RNA, SVM) que nous allons utiliser dans notre étude. Ces systèmes d'Intelligence Computationnelle sont très performants et largement utilisés pour corréler et prédire plusieurs propriétés des liquides ioniques tels que la température de décomposition thermique.

Chapitre III :

Résultats et Discussion

Chapitre III

Résultats et Discussion

III-1. Introduction :

Dans ce chapitre nous présentant les résultats de la modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques. C'est une étude basé sur deux méthodes d'intelligences computationnelles (RNA et SVM) utilisant les descripteurs moléculaires et la méthode de réduction de base de données. Ce travail est basé sur les données expérimentales de température de décomposition pour 168 liquides ioniques. Nous allons décrire la base des données élaborée dans le cadre de ce travail, l'algorithme utilisé pour l'élaboration des programmes de calcul MATLAB, Nous présentons ensuite les résultats de calcul, leur interprétation et la comparaison de nos résultats avec les résultats de la modélisation semi-empirique qu'été réalisé par Zhao et al. (2017).

III-2. Elaboration de la base de données :

Ce travail est basé sur les données de mesures expérimentales de la température de décomposition. Les liquides ioniques (168 composés) et leur Td expérimentale sont recueillis du livre « ionic liquids (physicochemical properties) » (Zhang et al. (2009)), et les données des descripteurs moléculaires sélectionnés sont rapportés de l'étude de Zhao et al. (2017).

Étant donné que les LI d'imidazolium sont composés de différents anions et cations d'imidazolium, les descripteurs des anions et des cations doivent être calculés séparément pour décrire les caractéristiques de structure ionique des ions uniques. Afin de développer des modèles simples et pratiques, nous avons utilisé une série de descripteurs conventionnels et peu coûteux en termes de calcul (descripteurs topologiques, descripteurs constitutionnels, fragments centrés sur l'atome) pour construire un modèle QSPR pour prédire la Td thermique des LIs d'imidazolium, sans tenir compte des descripteurs moléculaires plus sophistiqués et complexes. Tous les descripteurs sélectionnés ont été calculés en utilisant le programme Dragon (version 6) qui est un programme efficace pour le calcul des divers descripteurs moléculaires (zhao et all. (2017)). Les données expérimentales des 168 liquides ioniques sélectionnés ont été saisies dans un fichier Excel, ces données concernant la température de décomposition expérimentale et les sept

descripteurs SM6_B(m), NaasN,Psi_i_0d , C-005 , F-085 , B03[O-F] et TI5, Le tableau III.1 montre un échantillon de la structure de la base de données pour le composé 1-Methylimidazolium chloride.

Tableau III. 1: Les données expérimentales (Td expérimentale et les descripteur moléculaire) de 1-Methylimidazolium chloride

		Les descripteurs						
Liquide ionique	**Td_{exp}**	**SM6_B (m) "ca"**	**NaasN "ca"**	**Psi_i_0d "an"**	**C-005 "an"**	**F-085 "an"**	**B03[O-F] "an"**	**TI5**
1-Methylimidazolium chloride	563,117	7,59	0	-0,503	0	0	0	27,096

Les indices "ca" et "an" désignent les descripteurs de cations et d'anions respectivement.

Ces descripteurs sont définis comme suite :

SM6_B(m) : Moment spécial d'ordre 6 de la matrice de charge pondérée par masse.

NaasN : Nombre d'atomes de type aasN.

Psi_i_0d : Indice de pseudo-connectivité à état intrinsèque de type 0d.

C-005 :CH3X.

F-085 : F attaché à C2(sp2)-C4(sp2)/ C1(sp)/ C4(sp3)/X.

B03[O-F] : Présence/absence de O-F à distance topologique 3.

TI5 : Degré de vertex de la molécule.

III-3. Modélisation par RNA :

III-3-1. Conception d'un modèle neuronal :

Les réseaux de neurones réalisent des fonctions non linéaires paramétrées. Leurs mises en œuvre nécessitent :

- La détermination des entrées et des sorties pertinentes, c'est-à-dire les grandeurs qui ont une influence significative sur le phénomène que l'on cherche à modéliser ;
- La construction de la base de données et le choix des échantillons ;
- La détermination du nombre de neurones cachés nécessaires pour obtenir une approximation satisfaisante ;
- La réalisation de l'apprentissage ;
- L'évaluation des performances du réseau de neurones à l'issue de l'apprentissage.

- La procédure d'élaboration du RNA a été réalisée par l'élaboration d'un programme MATLAB sous MATLAB Neural Network Tool box ver. R2018a. Ce programme permet de prédire la température de décomposition thermique des liquides ioniques en utilisant la fonction *net.*

Syntaxe :

X = net(p,n)

III-3-2. Division des données en ensembles apprentissage/validation/test :

Dans ce travail, on a utilisé la base de données qui est représenté dans un fichier Excel en huit colonnes, correspondant respectivement aux Température de décomposition expérimentale et les sept descripteurs. Les 118 premières lignes ont été choisies aléatoirement comme un ensemble d'apprentissage représentant 70% de la base de données totale, les 25 lignes suivantes (15% de la base de données totale) comme un ensemble de validation et les 25 dernières lignes sont utilisés comme test pour valider le modèle optimisé. (La figure III.1).

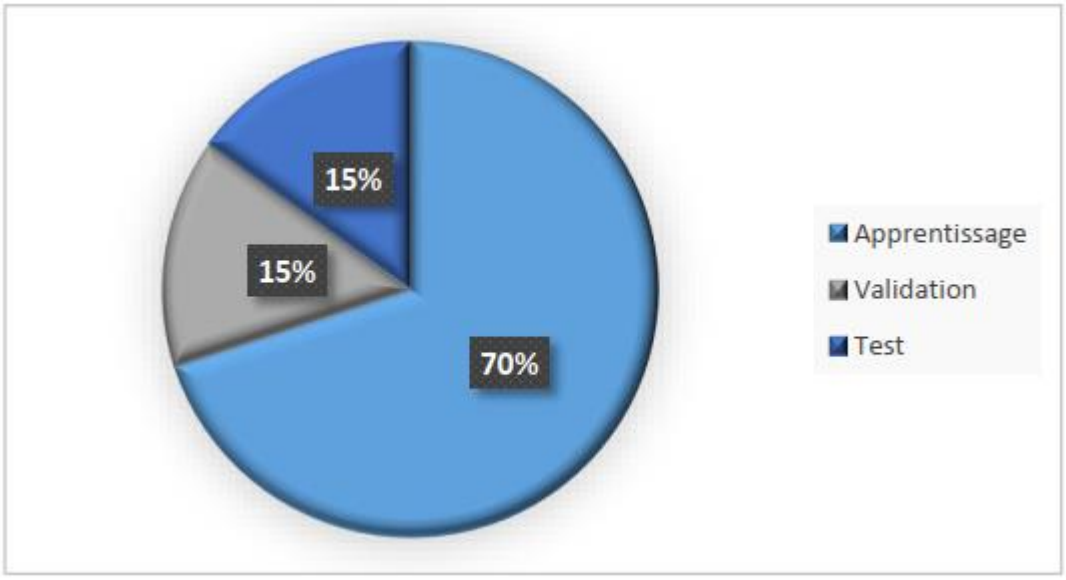


Figure III. 1: Représentation des pourcentages de division de la base de données.

III-3-3. Analyse de sensibilité :

Pour voir la contribution ainsi que le profil de variation de chaque variable d'entrée (SM6_Bmca, NaasNca, Psi_i_0dan, C005an, F085an, B03Ofan, TI5) sur la sortie (*Td*), Il y a plusieurs méthodes d'analyses de sensibilité, La méthode de "Poids" (En anglais 'Weights' method) a été adoptée.

III-3-3-1. Méthode de "Poids"

Cette méthode, proposée d'abord par (Garson 1991) et reprise par (Goh 1995), donne une quantification de l'importance relative (*Ir*) des différentes entrées sur la sortie du RN (Gevrey *et al.* 2003). Elle se base sur le partitionnement des poids des connexions en :

- Poids de connexion entrée - cachée (w^I_{ji});
- Poids de connexion cachée - sortie (w^H_{1j}).

Le processus de calcul, qui se compose de quatre étapes, est schématisé sur l'organigramme de la figure III.2.

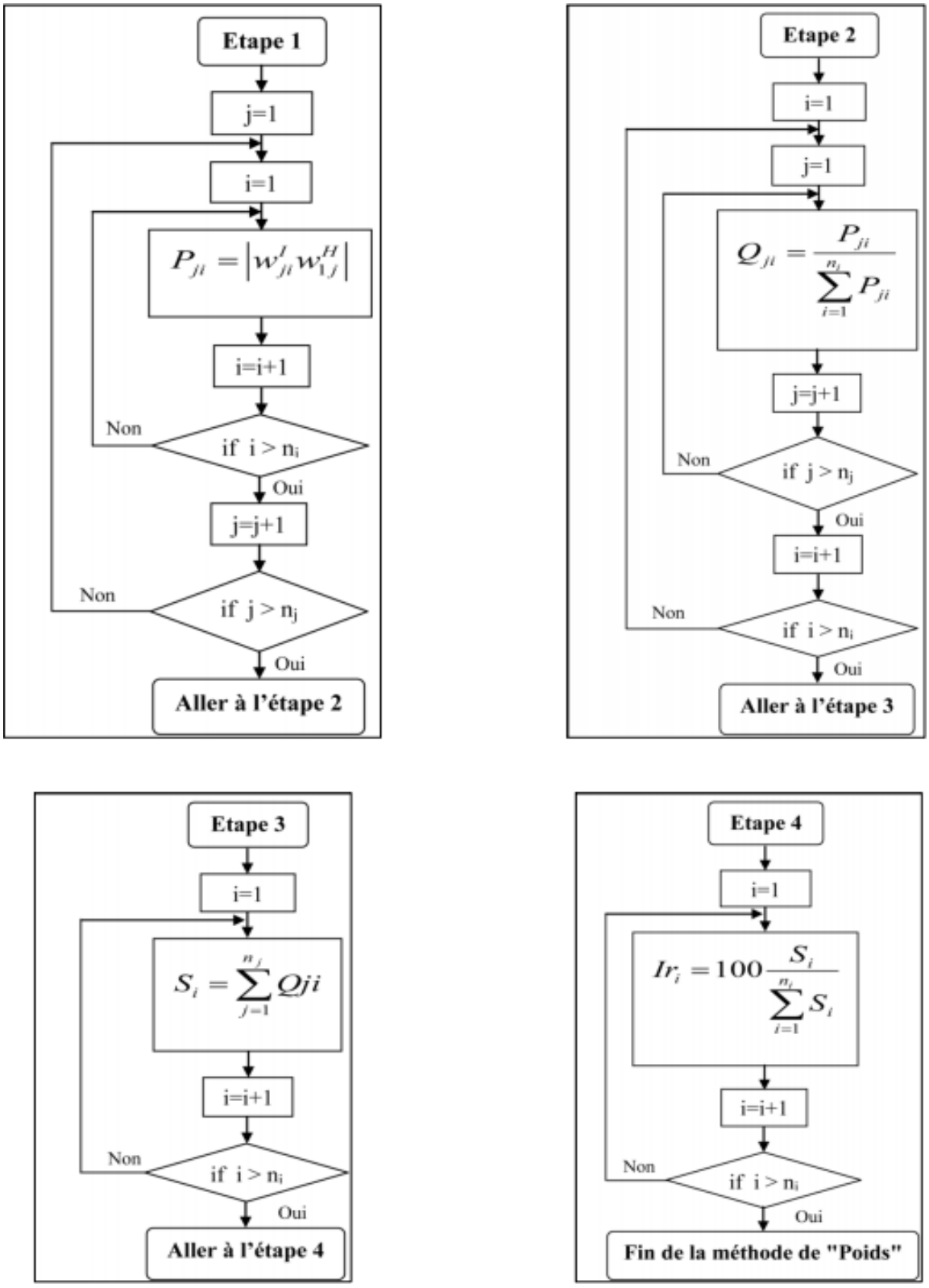


Figure III. 2: Organigramme de la méthode de "poids" (Khouane (2013)).

Tableau III. 2: Poids du RNA

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée							Connexions Couche cachée Couche de sortie
Poids							Poids
w^{I}_{j1}	w^{I}_{j2}	w^{I}_{j3}	w^{I}_{j4}	w^{I}_{j5}	w^{I}_{j6}	w^{I}_{j7}	w^{H}_{1j}
0,47011	-0,20178	0,36764	-0,88985	0,94672	0,61791	-1,07461	0,62564
0,49537	-0,17198	-0,23832	-1,57617	1,04233	0,202037	-0,89666	0,24591
1,00141	-0,29335	0,95514	0,39938	-0,78906	-0,76568	-0,88127	0,42803
-0,03674	1,00561	0,37488	0,76881	-0,44917	1,08473	-1,06669	-0,37603
-0,53458	0,79632	-0,58024	-0,31319	1,13171	0,85160	-0,99218	0,98499
1,31703	1,02408	0,16599	-0,51072	0,09905	0,94481	-0,81714	-0,30297
-1,15964	0,09558	-0,86770	-0,68517	-0,14185	0,588830	-1,35120	0,09907
-0,83178	-1,40704	-0,70513	0,62528	-0,61243	-0,60164	-0,67151	-0,07940
-0,90426	0,84104	0,55307	-0,87831	0,38066	0,60592	-1,31115	-0,45203
1,10587	-0,60463	-0,41080	0,37035	-1,02702	-0,66584	1,05865	0,08345
-0,94085	0,76879	-0,05403	-0,27310	1,13615	0,25362	1,28132	-0,17353
-0,21680	1,13334	0,49043	1,02528	0,65525	-0,75198	-0,95868	0,35862
0,61698	0,28071	-0,73265	0,45416	1,78428	0,15480	0,63115	-0,13819
-0,58131	-0,15935	-0,24461	1,76857	-0,03989	1,03937	-0,24427	-0,09760
0,40340	0,83546	-0,96901	1,05029	1,05844	0,53863	-0,69081	0,18842
1,07402	-0,34920	0,91920	1,23116	0,85772	-0,13025	-0,93719	-0,71483
1,04129	-0,66560	0,53779	0,19600	-1,05229	-0,82094	-0,65683	-0,51508
0,76779	-0,83762	-0,90555	-0,68123	0,75275	-0,96911	0,92584	0,43882
1,07348	-0,86070	-0,68317	-1,04490	0,50061	-1,02734	0,05016	-0,41030
-1,50286	0,15869	-0,47363	-0,35856	-0,55340	1,17339	0,79127	0,48579
-1,08516	0,91654	-1,27638	0,06342	0,82690	0,36395	-0,84437	-0,41018
0,94641	0,74040	-0,64230	1,04744	1,14444	0,38453	-0,62435	0,12810

La figure III.3 donne une présentation des pourcentages de l'importance relative (*Ir*), obtenue par la méthode de "Pois", de chaque variable d'entrée du RNA sur le rendement. D'après cette figure le **TI5** est la plus importante variable représentant le dernier descripteur avec *Ir* = 16.8111% suivie du descripteur **SM6_B(m) ca** avec *Ir* = 16.1647%, le descripteur **F-085 an** avec *Ir* = 15.1825%,**C-005 an** avec *Ir* = 14.7837%, **B03[O-F] an** avec Ir= 13.1229%, **NaasNca** avec IR=12.4077 et le dernier c'est **Psi_i_0d an** possède le % de l'*Ir* le plus faible (IR=11.5274) par rapport aux six autres variables, mais sa contribution est aussi importante que les autres variable (% de l'Ir> 5%).

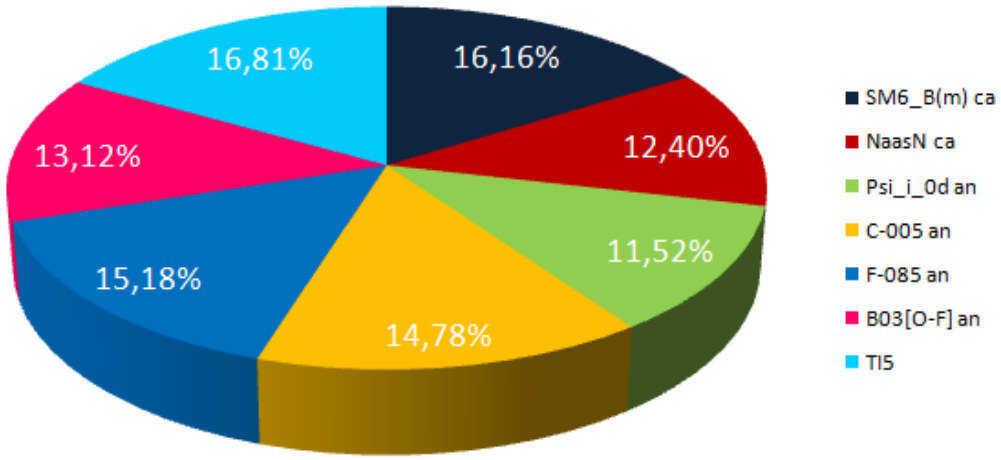


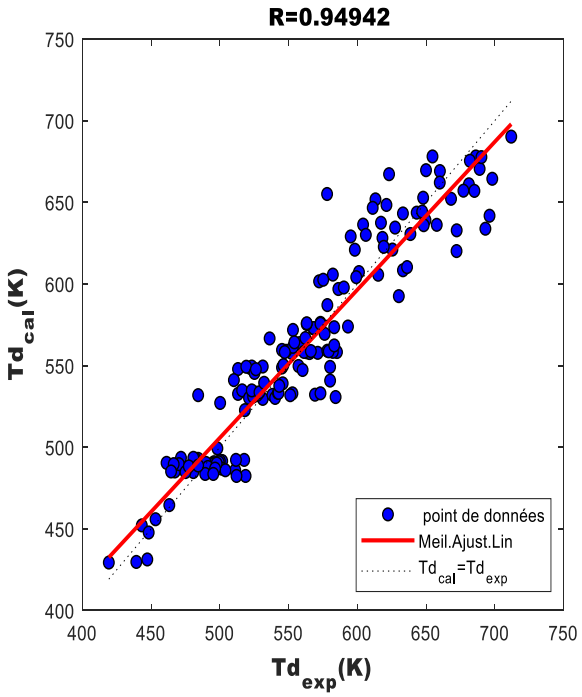
Figure III. 3: Présentation des pourcentages de l'importance relative (Ir) (la méthode de "poids") de chaque variable d'entrée du RNA sur la température de décomposition.

III-3-4. Résultats de corrélation de modèle optimisé :

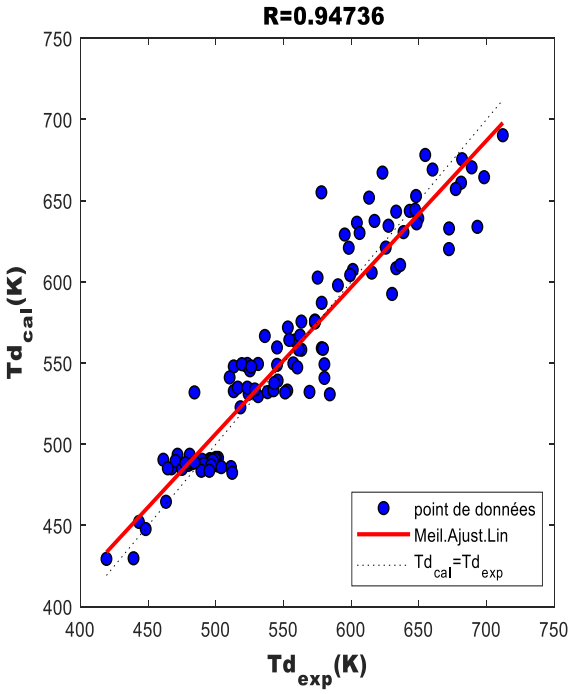
Les résultats de la modélisation par RNA de la température de décomposition sont présentés sous forme de diagrammes de dispersion (pour les ensembles d'apprentissage, de test, de validation et global), le diagramme de ER% et le diagramme de distribution de ER%. Les figures III.4 et III.5 montrent respectivement le diagramme de dispersion de la température de décomposition calculée en fonction de la température de décomposition expérimentale pour les fonctions (trainlm,tansig) et (trainlm,logsig).

Le premier diagramme (figures III.4) montre la concordance entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales à travers l'alignement des majorités des points sur la première bissectrice pour l'ensemble des données. La meilleure concordance correspond à la droite du meilleur ajustement linéaire de pente égale ou proche à 1 et de l'ordonnée à

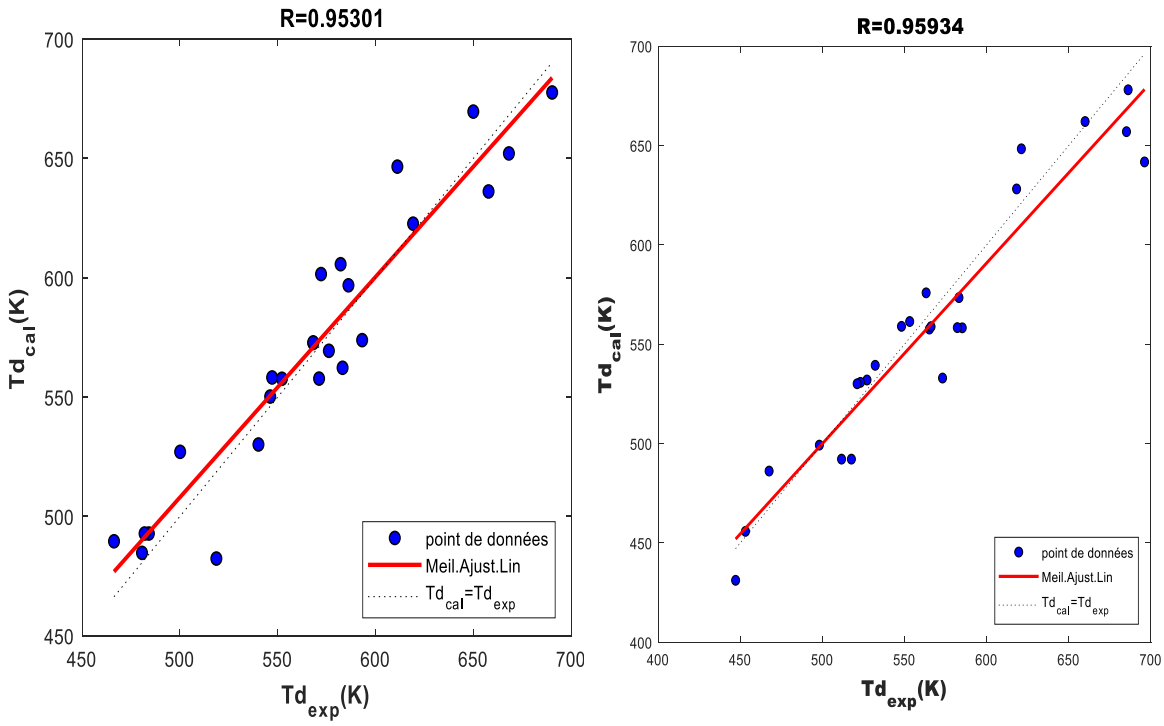
l'origine égale ou proche de 0 et un coefficient de corrélation (R) proche de 1.On remarque aussi l'existence d'un quelque points éloignés.



(a)



(b)



(c) (d)

Figure III. 4: Diagramme de dispersion de la Td calculer en fonction de Td expérimental : (a) Base globale, (b) Ensemble d'apprentissage, (c)Ensemble de la validation, (d) Ensemble du test par le modèle RNA « trainlm, tansig ».

Le deuxième diagramme (figures III.5) montre que la qualité de corrélation est légèrement inférieure à celle de premier (figures III.4). Ceci se traduit par une légère déviation de la droite du meilleur ajustement linéaire des points par rapport à la première bissectrice et coefficient de corrélation légèrement inférieur.

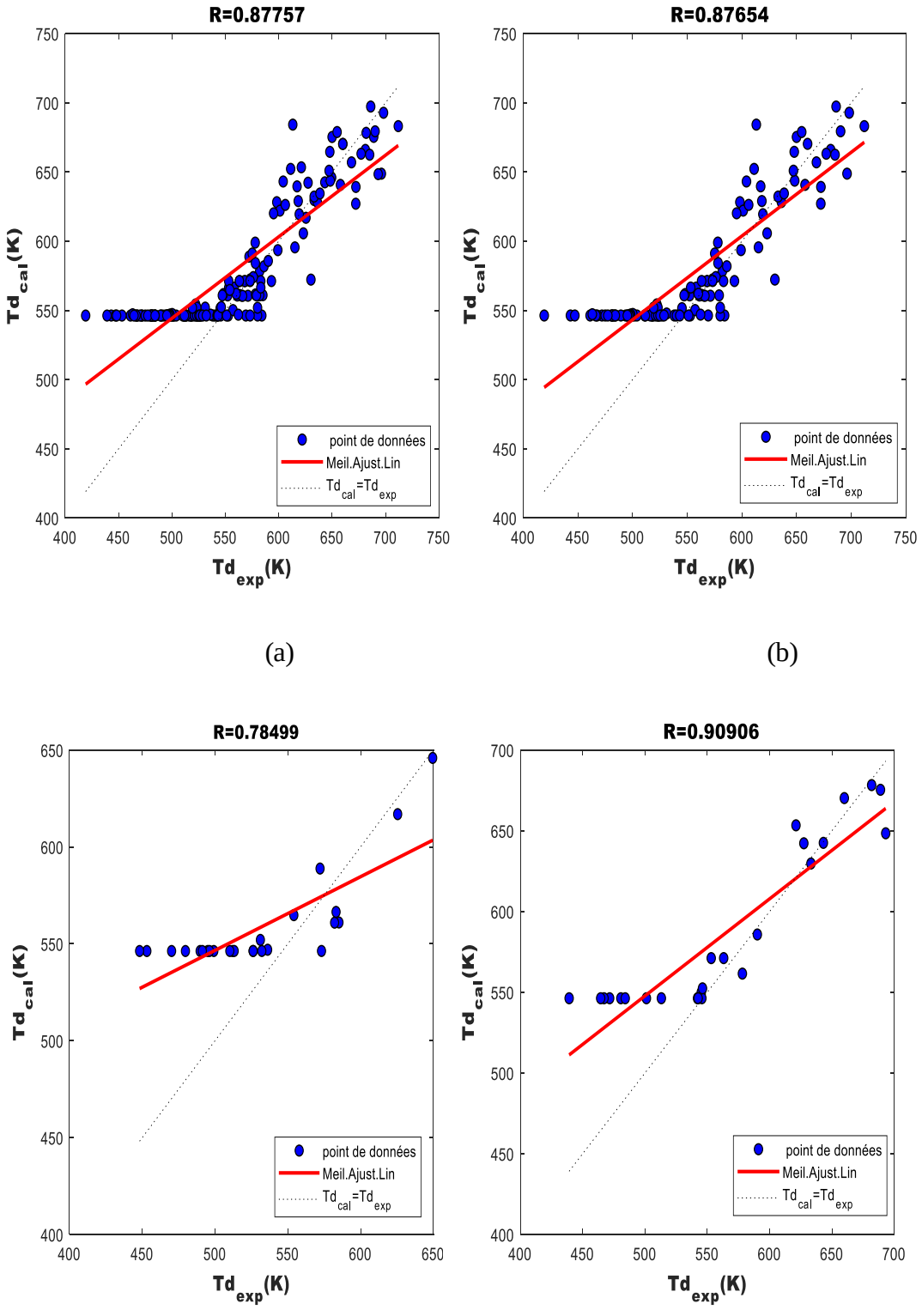


Figure III. 5: Diagramme de dispersion de la Td calculer en fonction de Td expérimental : (a) Base globale, (b) Ensemble d'apprentissage, (c)Ensemble de la validation, (d) Ensemble du test par le modèle RNA « trainlm, logsig ».

Les performances des technique d'intelligence computationnelles sont évaluées en termes du pourcentage de l'erreur relative (*ER%*) calculée, en utilisant l'équation suivante :

$$\boldsymbol{ER\% = 100 * \frac{Td^{exp} - Td^{cal}}{Td^{exp}}}$$

Afin de visualiser la distribution des erreurs relatives nous avons adoptés deux types de diagrammes. Le premier diagramme montre l'erreur relative en fonction de la température de décomposition et le deuxième montre la distribution d'ER%, Les figures III.6 et III.7 représentent la variation des ER% pour 168 points expérimentaux pour les deux fonctions (trainlm,tansig) et (trainlm,logsig). On observe que la majorité des points sont situés autour de la ligne zéro Pour les deux modèles, on peut remarquer aussi qu'il y a quelques points éloignés sont confinés respectivement entre l'ER [-14,10] et [-25,10] pour les deux fonctions (trainlm,tansig) et (trainlm,logsig).

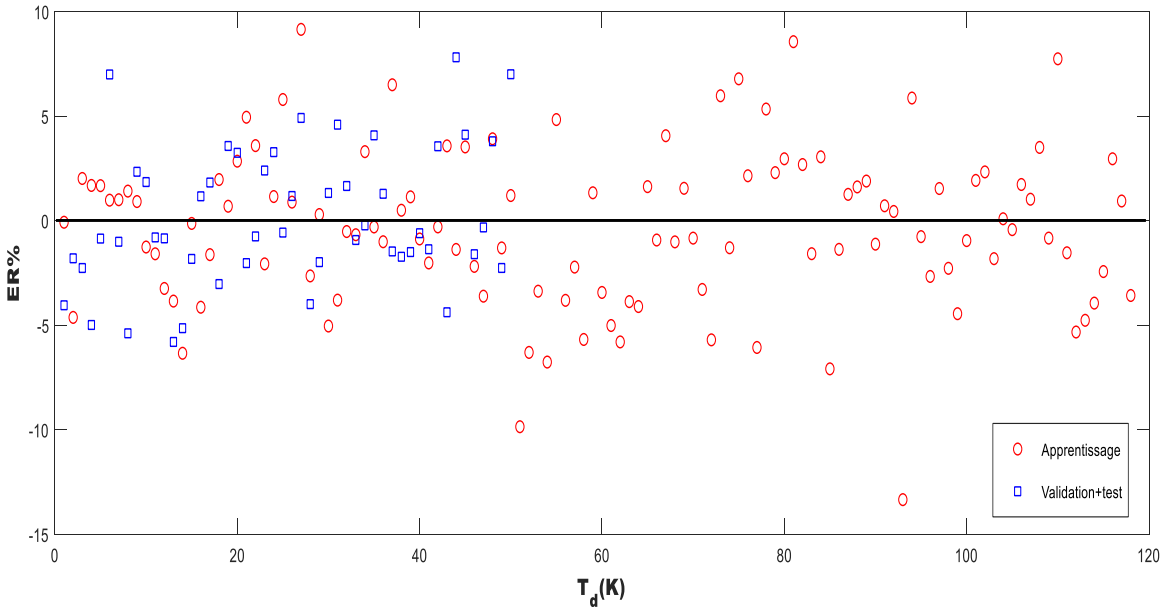


Figure III. 6: L'erreur relative (%) de la température de décomposition par le modèle de RNA« trainlm, tansig ».

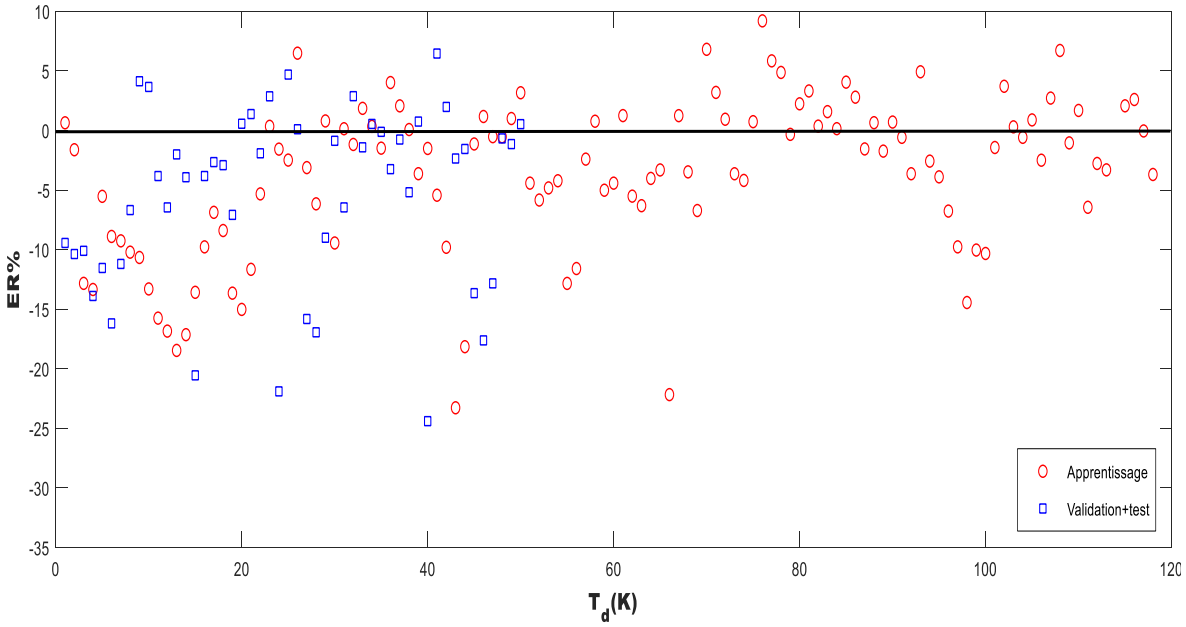


Figure III. 7: L'erreur relative (%) de la température de décomposition par le modèle de RNA« trainlm, logsig ».

Les Figure III.8 et III.9 illustrent les diagrammes de distribution d'ER [%] de RNA de deux modèles « trainlm, tansig » et« trainlm, logsig ».

Pour le modèle RNA « trainlm, tansig » on observe que l'ER de presque la moitié (32+47 composés) des points expérimentaux est entre 0 et 2% et un seul point donne une erreur relative supérieure à 10%. Par contre les résultats de corrélation par les fonctions « trainlm, logsig », 78% des points donnent une ER inferieur de 10% et supérieur à 10% pour 21% (36 composés) des points.

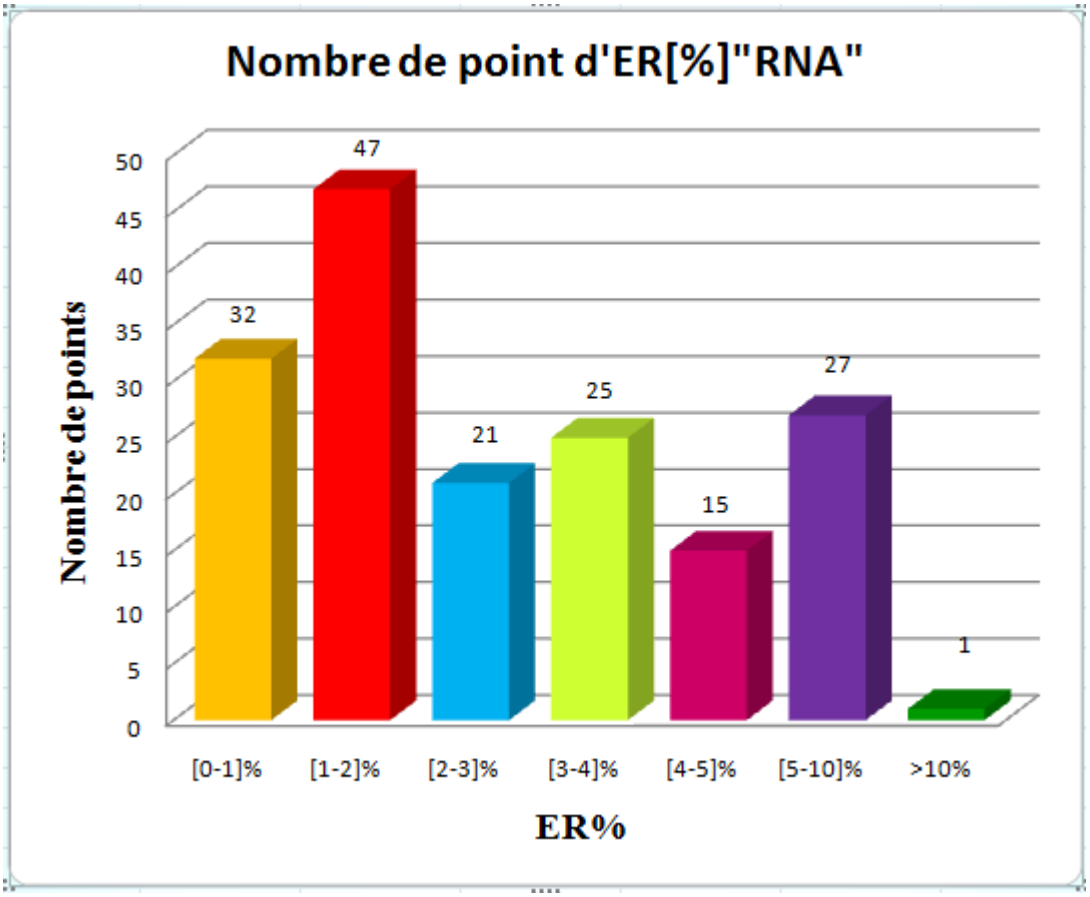


Figure III. 8: Diagrammes de distribution d'ER [%] du modèle RNA « trainlm, tansig ».

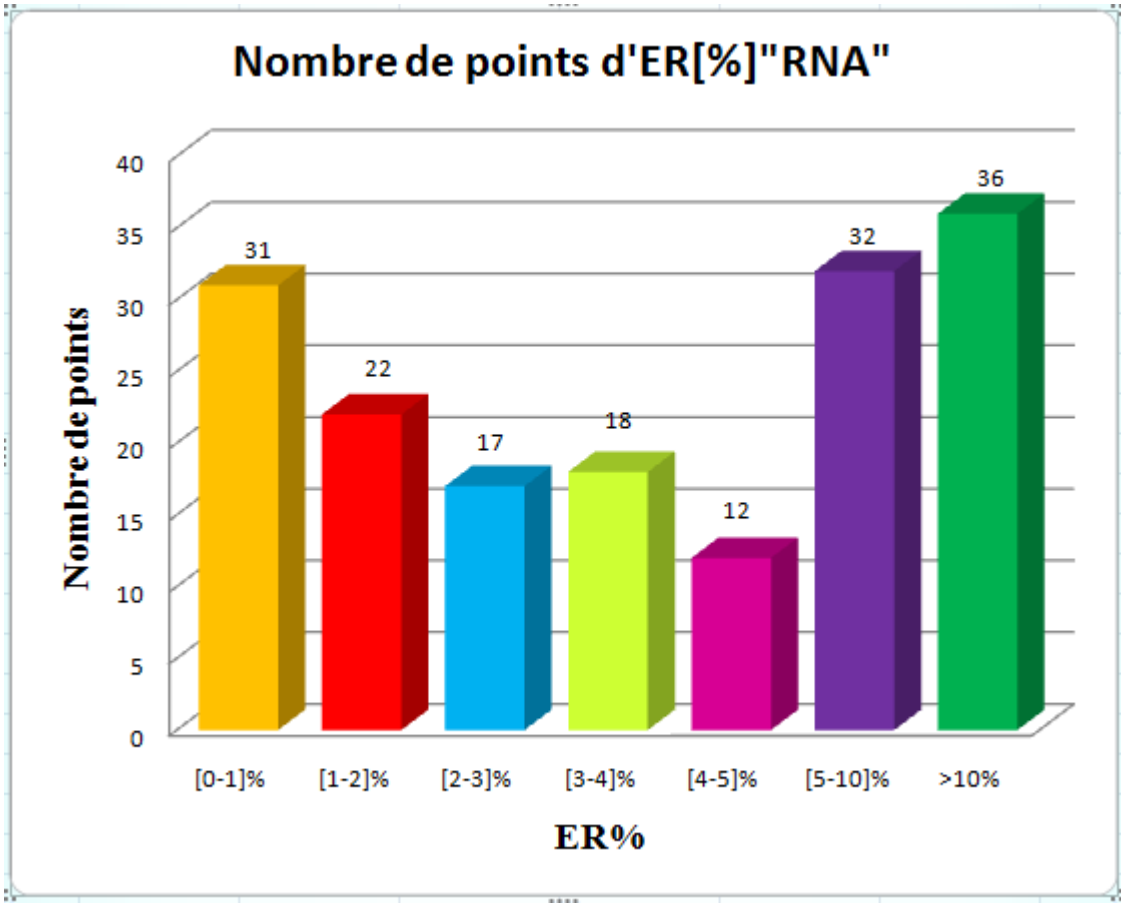


Figure III. 9: Diagrammes de distribution d'ER [%] du modèle RNA « trainlm, logsig ».

Le modèle neuronale« trainlm, tansig » a donné un erreur relative absolue moyen (ERAM) plus faibles et coefficient de corrélation(R) plus élevé que le modèle neuronale« trainlm, logsig ».

III-4. Modélisation par SVM :

III.4.1. SVM pour la régression :

III.4.1.1. Fonction du noyau (Kernel Function) :

Dans le cas général, la frontière optimale est non linéaire. Dans le cadre des SVM, la prise en compte de non linéarités dans le modèle s'effectue par l'introduction de noyaux non linéaires. De manière inattendue, l'utilisation de noyaux ne modifie pas fondamentalement la nature des SVM. Ce noyau est une fonction k qui associe à tout couple d'observations (x, x') une mesure de leur « influence réciproque » calculée à travers leur corrélation ou leur distance. Des exemples typiques de noyaux sont :

- **Le noyau polynômial** k(x,x')=(c+(x,x'))^p

- **Le noyau gaussien** k(x,x')= $e\frac{||x-x'||^2}{2\sigma^2}$

Étant donné le noyau k, la fonction de décision s'écrit : D(x) = signe ($f(x)$ +b) et :
Cas linéaire :$F(x) = \sum i \in A\alpha iyixix$

Cas non linéaire :$F(x) = \sum i \in A\alpha iyik(xi, x)$

La fonction de discrimination est une combinaison linéaire des noyaux dont le signe de l'influence dépend de la classe. L'ensemble actif **A**, les coefficients **αi** associés et le biais **b** sont donné par la résolution du même problème dual que dans le cas des SVM linéaires.

Exemples de noyaux :

Plusieurs types de fonctions du noyau sont couramment utilisés dans la modélisation SVM. Ces noyaux se divisent en deux grandes familles principales : les noyaux radiaux qui dépendent d'une distance et les noyaux projectifs qui sont définis à partir d'un produit scalaire.

Tableau III. 3: Exemples des noyaux pour $\chi=\mathbb{R}p$

Type	**Nom**	**K (s,t)**
Radial	Gaussien	**exp(-$\frac{r2}{\sigma}$) , r=‖s-t‖**
Radial	Laplacien	**exp($\frac{-r}{\sigma}$)**
Non stationnaire	X^2	**exp $\left(\frac{-r}{\sigma}\right)$, r** $= \sum_k \frac{(sk-tk)^2}{sk+tk}$
Projectif	Polynomial	**$(s^Tt)^p$**
Projectif	Affine	**$(s^Tt+\sigma)^p$**

La plus part de ces noyaux dépendent d'un paramètre σ appelé « largeur de bande » dont le réglage est souvent critique pour le bon fonctionnement de la méthode.
La fonction de noyau ou bien Kernel utilisé dans ce travail pour la modélisation par SVM c'est la fonction ***Gaussien*** fonction de noyau de base radiale (RBF)**.**

III.4.2. Régression SVM dans MATLAB :

L'implémentation MATLAB de la régression en utilisant SVM est la fonction *fitrsvm*(version R2018a).

Syntaxe :

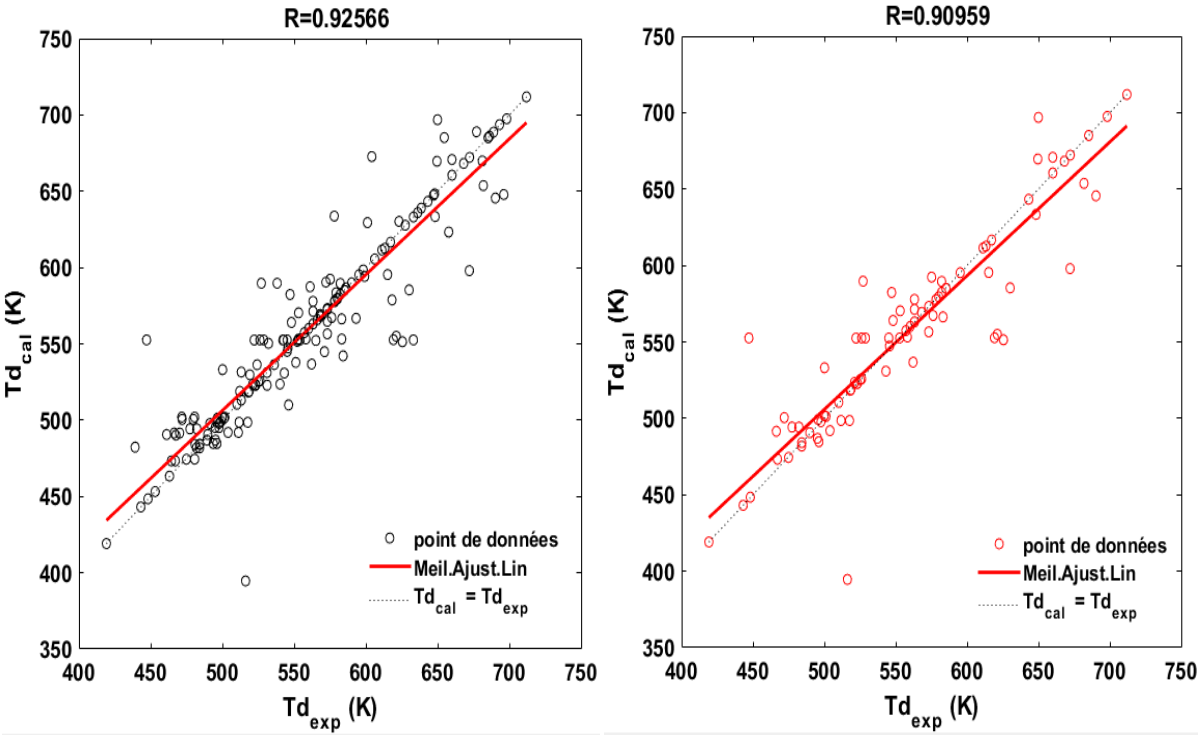
```
Mdl = fitrsvm(Tbl,ResponseVarName)
Mdl = fitrsvm(Tbl,formula)
Mdl = fitrsvm(Tbl,Y)
Mdl = fitrsvm(X,Y)
Mdl = fitrsvm(___,Name,Value)
```

III.4.3. Division des données en ensembles apprentissage/test :

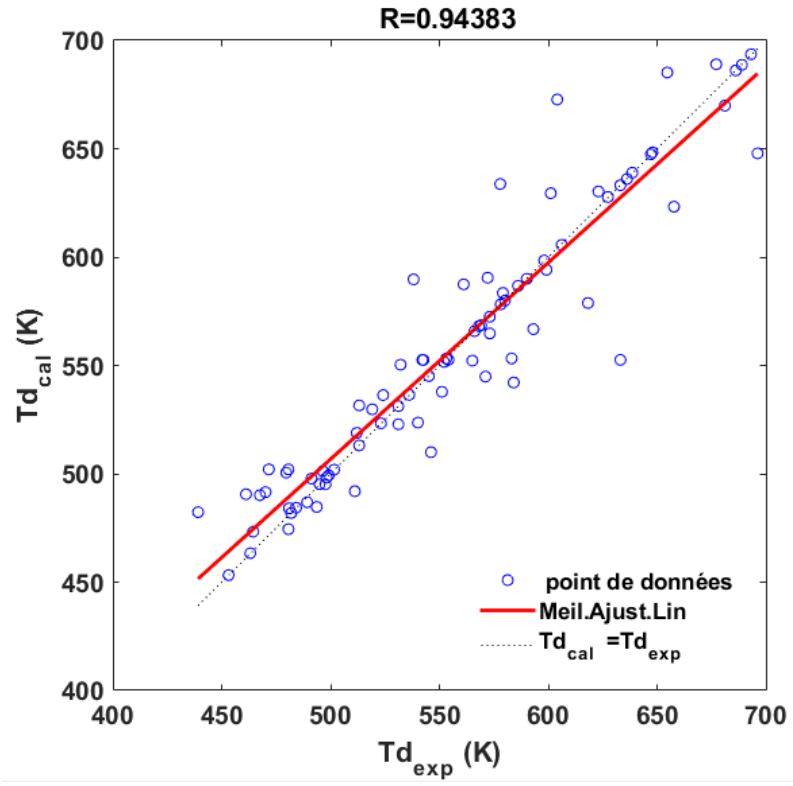
Dans ce travail, on a utilisé la base de données qui est représenté dans un fichier Excel en huit colonnes, correspondant respectivement aux Température de décomposition expérimentale et les sept descripteurs. Les 84 premières lignes ont été choisies comme un ensemble d'apprentissage représentant 50% de la base de données totale, et les 84dernières lignes (50% de la base de données totale) comme un ensemble de test pour valider le modèle optimisé.

III.4.4. Résultats de corrélation par SVM:

Les résultats de la modélisation par SVM de la température de décomposition pour les comp osés considéré sont présentés sous forme de trois graphes, Un digrammes de dispersion ou d'un nuage de points qui montrent la qualité de la concordance entre le les températures calculées par SVM et les températures expérimentales, (figure III.10) ci-dessous. Cette qualité est visualisée à travers l'alignement des points sur la première bissectrice pour l'ensemble des données d'apprentissage et du test, le coefficient de corrélation R et la droite du meilleur ajustement linaire des points. La deuxième présentation c'est un graphe qui représente la variation des ER% pour 168 points expérimentaux, (figure III.11) et la troisième présentation c'est un Diagramme de distribution d'ER (%) (figure III.12).



(a) (b)



(c)

Figure III. 10: Diagramme de dispersion de SVM pour l'ensemble :(a) global, (b) apprentissage et (c) test.

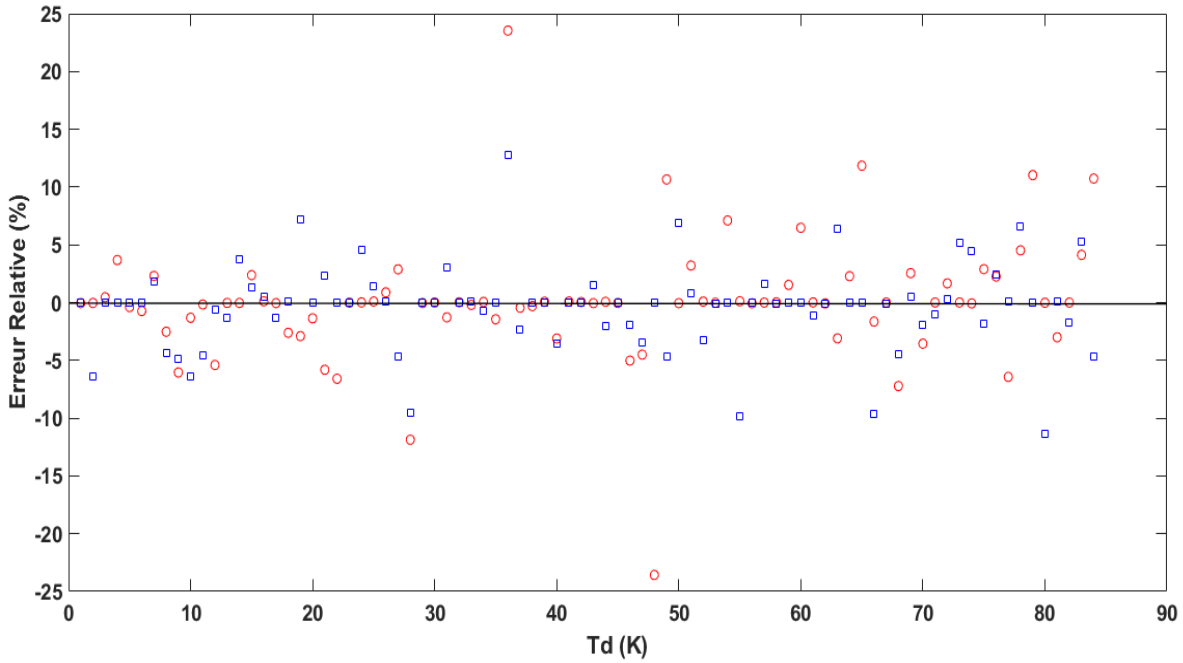


Figure III. 11: Diagramme de dispersion de SVM pour l'ensemble :(a) global, (b) apprentissage et (c) test.

La Figure III.12 montre le diagramme de distribution d'ER [%] par SVM, Ces résultats présentent une erreur relative entre 0 et 1% pour 83 composés (≈ 50% des points) et 9 composés donne une ER supérieur à 10%.

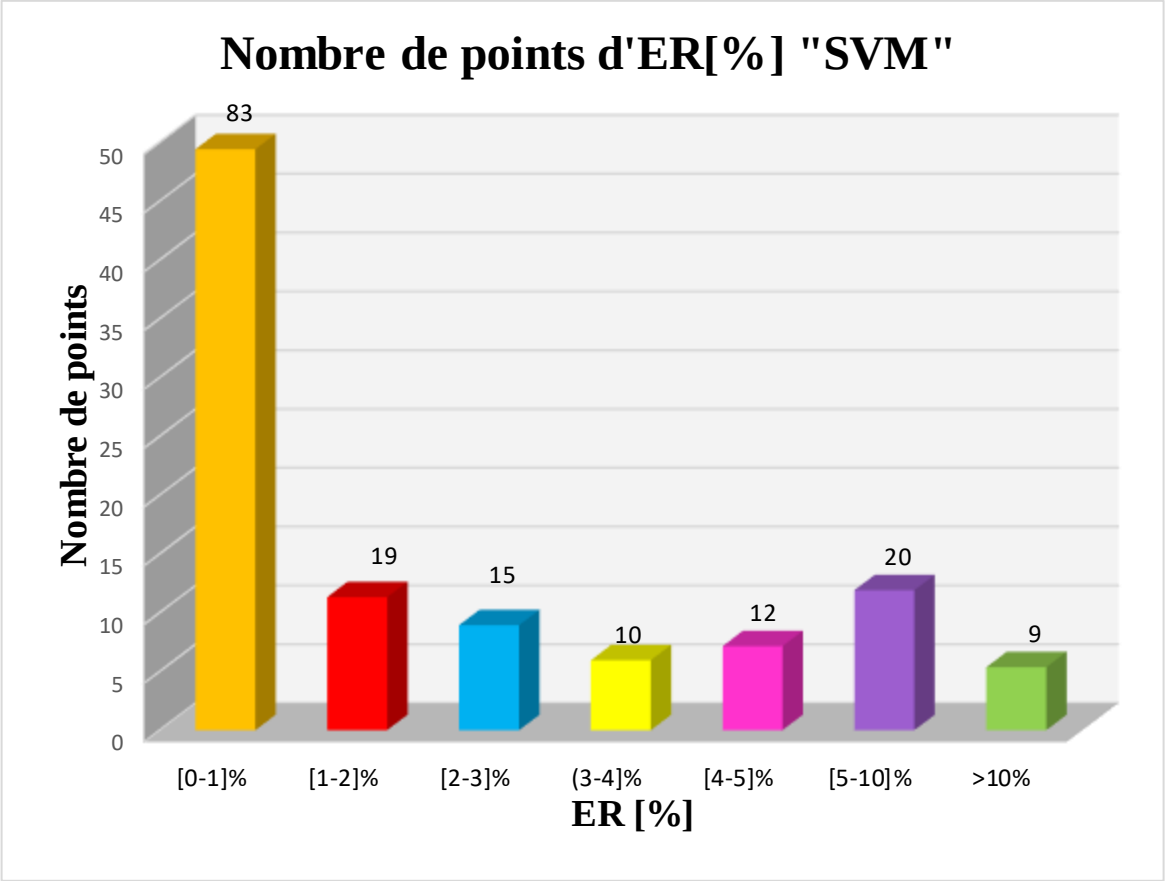


Figure III. 12: Diagrammes de distribution d'ER (%) du modèle SVM.

III-5. Modèles semi-empiriques de Zhao et all :

Le travail de Zhao est intitulé la Modélisation des températures de décomposition thermiques des liquides ioniques imidazolium par la méthode QSPR .

Le risque thermique, qui est étroitement lié au risque potentiel d'incendie à haute température, est devenu l'une des caractéristiques les plus importantes des différents liquides ioniques, est devenu l'une des caractéristiques les plus importantes des différents liquides ioniques. Cette étude un modèle de relation quantitative structure-propriété (QSPR) pour prédire la température de décomposition de décomposition thermique (Td) des ILs imidazolium à partir de leurs structures moléculaires. Non seulement les descripteurs du cation et de l'anion cation et de l'anion, mais aussi ceux décrivant leurs interactions ont été pris en compte pour calculer numériquement les caractéristiques de la structure des ILs.

les caractéristiques de la structure des ILs. Une régression linéaire multiple basée sur un algorithme génétique a été utilisée pour sélectionner les descripteurs les plus

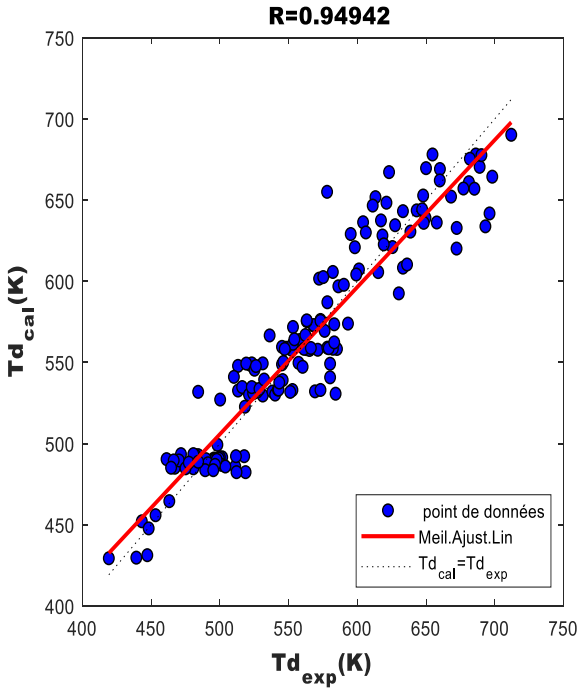
efficaces d'un point de vue statistique sur le Td des ILs imidazolium. Le modèle obtenu est une équation multilinéaire comportant sept variables, dont deux descripteurs pour les cations, quatre descripteurs pour les anions et un descripteur d'interaction. Le modèle développé a été rigoureusement validé à l'aide de multiples stratégies. Le modèle développé a été rigoureusement validé à l'aide de multiples stratégies et a été comparé à d'autres modèles publiés antérieurement. Les résultats ont démontré la robustesse, la validité et la prédictivité satisfaisante du modèle proposé. Les caractéristiques prédominantes de la structure responsables du Td ont également été identifiées grâce au modèle. des ILs d'imidazolium, et fournir des conseils pour prioriser la conception et la fabrication d'ILs plus sûrs avec les propriétés souhaitées (Zhao et al. (2017)).

III-6. Comparaison en termes d'ERAM :

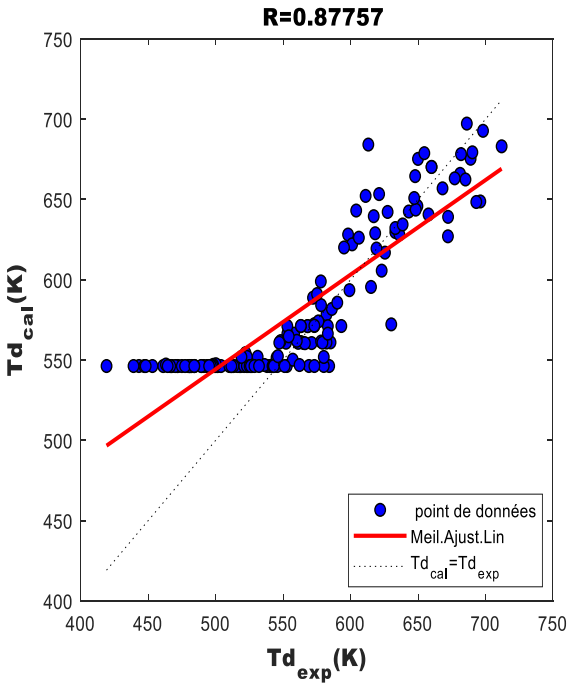
L'évaluation de la performance des corrélations qui a été réalisée par les deux méthodes en termes ERAM% (Tableau III.4), la modélisation par SVM a donné la meilleure corrélation avec une faible valeur d'ERAM=2.55% suivie par la modélisation par le RNA avec la fonction (trainlm,tansig), ERAM = 2.87% puis le RNA avec la fonction (trainlm,logsig), ERAM = 5.89% et le modèle de Zhao donne la valeur maximale, ERAM=19%.

Tableau III. 4: ERAM % pour les deux méthodes de modélisation.

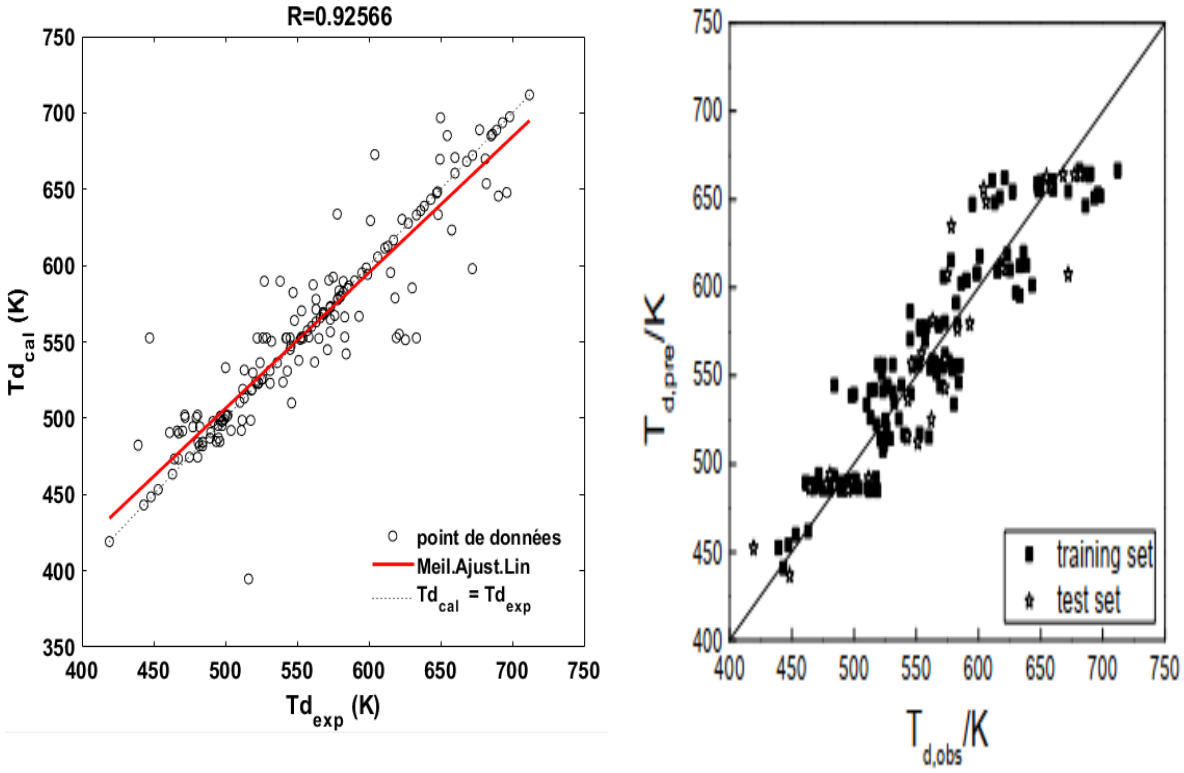
Méthode	RNA		SVM	Modèle de Zhao
	(trainlm,tansig)	(trainlm,logsig)		
ERAM%	2,87	5,89	**2,55**	19


R=0.94942
Td cal (K)
Td exp (K)
point de données
Meil.Ajust.Lin
Td cal=Td exp

(a)


R=0.87757
Td cal (K)
Td exp (K)
point de données
Meil.Ajust.Lin
Td cal=Td exp

(b)



(c) (d)

Figure III. 13: Diagramme de dispersion (base global) de:(a) RNA « trainlm, tansig », (b) RNA « trainlm, logsig », (c) svm, (d) modèle de Zhao.

III-7. Critères statistiques d'évaluation de la performance des modèles :

La fiabilité et la précision du modèles des méthodes d'intelligence computationnelle reposent sur diverses quantités statistiques : Erreur relative absolue moyenne (ERAM); racine de l'erreur quadratique moyenne (REQM) ; erreur quadratique moyenne (EQM) qui sont données par les formules suivantes :

$$\text{ERAM}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{yi^{exp}_y_i^{cal}}{y_i^{exp}}\right|$$

$$\text{REQM}=\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i^{exp}-y_i^{cal})^2}$$

$$\text{EQM}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i^{exp}-y_i^{cal})^2$$

Tableau III. 5: Les critères statistiques pour les déférentes méthodes d'intelligence.

Méthodes	RNA		SVM	Modèle de Zhao
	trainlm, tansig	trainlm, logsig		
ERAM train	2.9460	5.5815	2.7744	19
ERAM test	2.7070	5.8908	2.3293	20
ERAM global	2.8755	6.1617	2.5518	///////
REQM train	21.4906	38.6853	28.4019	23.1
REQM test	19.9712	42.7316	21.4455	25.7
REQM global	20.7989	41.4096	25.1652	///////
EQM train	461.8440	1.4965e+03	806.6690	///////
EQM test	398.8481	1.8260e+03	459.9089	///////
EQM global	432.5947	1.7148e+03	633.2890	///////

III-8. Conclusion :

Ce chapitre décrit en détail la modélisation de la température de décomposition thermique des liquides ioniques par les méthodes d'intelligence artificielles. Cette partie est également présente la méthode d'évaluation de la performance du RNA et SVM sous forme decalcul de vecteur du meilleur ajustement linéaire entre les données expérimentales du température de décomposition et celles calculées par ces deux modèles, et sous forme de calcul d'erreur ou de déviation des valeur calculées par rapport aux valeurs expérimentales et une comparaison de ces résultats avec celles obtenues par la méthode de modélisation du (Zhao et all. (2017)).

L'étude comparative des techniques d'intelligence computationnelles sur une base de données élaborée dans le cadre de ce travail (168 points expérimentaux) avec l'utilisation de sept descripteurs pour décrire les liquides ioniques, montre que les données

de la température de décomposition sont mieux corrélées par de SVM. La deuxième technique de calculs (RNA) établisse une corrélation assez satisfaisante des données comprises dans l'intervalle ERAM de 2.87 – 5.89 %. Toutefois, lorsqu'on compare la performance de corrélation globale de chaque méthode avec le modèle semi-empirique de Zhao et al. La méthode SVM présente de loin la meilleure performance de corrélation avec un ERAM égale à 2.55 %. La deuxième meilleure corrélation est la technique RNA avec les fonctions « trainlm, tansig », où l'ERAM = 2.87 %.

Conclusion générale

Conclusion générale

Récemment, les liquides ioniques (LI), qui sont composés d'ions complètement à température ambiante, ont gagné de nombreuses applications dans différents domaines en raison de leurs propriétés physicochimiques uniques et bénéfiques, telles que les faibles pressions de vapeur, la stabilité à l'eau et à l'air, une excellente solubilité, faible toxicité (pour la plupart des LI) et facilité de conception. La température de décomposition thermique (Td) démontre la température maximale à laquelle les LI peuvent exister avant de subir une décomposition chimique, Mais la réalisation des expériences de mesure de la température de décomposition pour toutes les conditions opératoires est longue, coûteuse et laborieuse. Par conséquent, la modélisation de la température de décomposition des liquides ionique est impérative.

Le développement d'utilisation des méthodes d'intelligence artificielle est en augmentation au cours des dernières années nous a motivé à réaliser cette étude qui présente une corrélation des données de température de décomposition dont l'application de deux méthodes d'apprentissage automatique (réseaux de neurones artificiels et les machines à vecteurs de support).

Ce travail a traité la corrélation de la température de décomposition utilisant les deux méthodes RNA et SVM sur une base de données de 168 liquides ioniques recueillis à partir de la littérature publiée au cours des 15 dernières années. Aussi nous avons effectué dans ce travail une étude comparative de tous les résultats de corrélation obtenus avec celles de travail antérieur de Zhao et al. Les résultats de corrélation obtenues sont assez satisfaisante comprises dans l'intervalle ERAM de 2.55% – 5.89 %, Toutefois, lorsqu'on compare la performance de corrélation par les méthodes d'intelligence artificielle avec la méthode semi-empirique de Zhao (Zhao et al. (2017)). On distingue que la méthode SVM a donné la meilleure corrélation prédictive de Td des LI avec une erreur relative absolue moyenne de 2.55%.

Ces résultats nous ont permis de mieux comprendre quelques aspects de la modélisation de la température de décomposition :

1- Cette contribution a montré que l'utilisation de ces sept descripteurs a donné une performance de corrélation acceptable pour les deux techniques

d'intelligence computationnelle considérées. La méthode de SVM a donné la meilleure performance suivie par les méthodes des RNA.

2- Le choix de la base de données est primordial lorsqu'il s'agit de comparer les méthodes d'intelligence artificielle. Plus la base de données est large et complète plus les résultats de comparaison sont significatifs, Donc nous propose d'élargir la base de données le plus exhaustive possible dans des future recherches.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

Adel Bachir, Brida Mohamed, 2017, RESEAUX DE NEURONES POUR L'AMELIORATION DE LA STABILITE DES RESEAUX ELECTRIQUES, mémoire de master, UNIVERSITE DR. YAHIA FARES DE MEDEA, Algérie.

Aissat Rachida, Nouar Messaouda, 2018, Mise en œuvre de réseaux de neurones pour la modélisation de l'adsorption multi-composants de quelques colorants sur différents adsorbants, mémoire de master, Université Yahia Farès De Médéa, Algérie.

Alouane Khadidja, Saidoun Meryem, 2021, Modélisation de l'adsorption multi-composants par la méthode machine à vecteurs de support, mémoire de master, Université Yahia Farès De Médéa, Algérie.

Amadou Diop, 2014, Extraction, Depolymerisation et valorisation de la lignine kraft de la liqueur noire, Thèse de doctorat, L'université du Québec À Trois-Rivières, Canada.

Amit Konar, 2006, Computational intelligence: principles, techniques and applications .

Ammar Mohamed Yessin, 2007, "Mise en oeuvre de réseaux de neurones pour la modélisation de cinétiques réactionnelles en vue de la transposition Batch/Continu'', Thèse de Doctorat de l'I.N.P. Toulouse, France.

Angell C.A, Byrne N, Belieres J-P, 2007, Belieres, Accounts of Chemical Research, 40, 1228-1236.

AOUN Bachir, 2010, Liquides ioniques : structure et dynamique, THÈSE de doctorat, UNIVERSITÉ D'ORLÉANS.

Ayad Amel, 2017, Contribution à l'étude de la réduction des émissions de cov par les liquides ioniques, Thèse de doctorat, Universite Abou-Bekr Belkaid – Tlemcen, Algerie.

Bettache Ahmed, Yahiaoui Achour, 2014, application de la technique du mode glissant pour la poursuite du point maximale MPPT d'un générateur photovoltaïque, mémoire de master, université Médéa. Algérie.

Binnemans Koen, 2005, Ionic Liquid Crystals, Chemical Reviews, 105(11), 4148–4204.

Catherine Santini, Yves Chauvin, 2007, Les Liquides Ioniques, leur Utilisation et leur role comme solvants de reaction Catalytique, Thèse de doctorat, L'université Claude Bernard - Lyon 1.

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

Cherif Aymen, 2013, SVM et approches locales pour la prévision des séries temporelles, thèse de doctorat, université françoisrabelais de tours, École Doctorale miptis.

Dandan Han, Kyung Ho Row, 2010, Recent applications of ionic liquids in separation technology, Molecules, 15(4), 2405-2426.

De Michael Freemantle., 2010, An introduction to ionic liquids , Royal society of chemistry, 281pages.

Djeffal Abdelhamid, 2012, Utilisation des méthodes Support Vector Machine (SVM) dans l'analyse des bases de données, thèse de doctorat, Université Mohamed Khider – Biskra, Algérié.

Ehsan Kianfar1, Sajjad Mafi, 2021, Ionic liquids: properties, application, and synthesis, Fine Chemical Engineering , 1-40.

Greer Adam J, Johan Jacquemin, Christopher Hardacre, 2020, Industrial Applications of Ionic Liquids, molecules, 25(21), 5207.

Haddache Amel, Ouled Oualli Khadidja, 2019, modélisation de la solubilité des produits pharmaceutiques dans les liquides ioniques, mémoire de master, UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA, Algérie.

Holbrey, JD, Rogers RD, Mantz RA, Trulove PC, Cocalia VA, Visser AE, Mantz RA, 2008, Physicochemical Properties, Ionic Liquids in Synthesis, 57–174.

Khaouane Latifa, 2013, ETUDE ET MODELISATION DE LA BIOSYNTHESE DES ANTIBIOTIQUES A PARTIR DE DIFFERENTES SOUCHES PRODUCTRICES - CAS DE PLEUROMUTILINE, Thèse de doctorat, Université de Médéa, Algérie.

Koichi Fumino, Tim Peppel, Monika Geppert-Rybczyńska, Dzmitry H. Zaitsau, Jochen K. Lehmann, Sergey P. Verevkin, Martin Köckerling , Ralf Ludwig, 2011,

The influence of hydrogen bonding on the physical properties of ionic liquids, Physical Chemistry Chemical Physics, 13(31), 14064.

Lazzús Juan A, 2012, A group contribution method to predict the thermal decomposition temperature of ionic liquids, Journal of Molecular Liquids, 168. 87–93.

Liaw H-J, Chen C-C, Chen Y-C, Chen J-R, Huang S-K, Liu S-N , 2012, Relationship between flash point of ionic liquids and their thermal decomposition, Green Chemistry, 14(7), 2001.

Liquides ioniques, [en ligne], https://tice.ac-montpellier.fr. (consulté le 2/03/2023).

Machine à vecteurs de support, [en ligne], https://fr.wikipedia.org/,(consulté le 27/03/2023).

M Zaiz Faouzi, 2010, Les Supports Vecteurs Machines (SVM) pour la reconnaissance des caractères manuscrits arabes, mémoire de magister, Université Mohamed Khider – BISKRA, Algérie.

Meghoufel Mâamar, 2012, Une approche multi-agents à base de SVM pour la modélisation cognitive du processus de prise de décision Application au dépistage automatique de la maladie de la Scoliose, Mémoire de Magister, École Nationale Polytechnique, Algérie.

Mohamadally Hasan, Fomani Boris, 2006, SVM : Machines à Vecteurs de Support ou Separateurs a Vastes Marges**,** BD Web, ISTY3**,** Versailles St Quentin, France.

Moutiers Gilles, Billard Isabelle, 2011, ' Les liquides ioniques : des solvants pour l'industrie'. Technique de L'ingénieur, AF 6712.

Naceur Rabie., 2023, Etude des propriétés physico-chimiques des liquides ioniques dans le but de leur utilisation dans un concentrateur solaire, Mémoire de MAGISTER, Université Aboubekr Belkaid-Tlemcen, Algerie.

Ohno Hiroyuki, (2017), Physical Properties of Ionic Liquids for Electrochemical Applications, Electrode position from Ionic Liquids, 55–94.

Parizeau Marc, 2004, Réseaux de neurones , Thèse de doctorat, Université LAVAL.

Qing-Shan Liu, Miao Yang, Pei-Pei Li, Si-Si Sun, **Urs Welz-Biermann**, **Zhi-Cheng Tan**, **Qing-Guo Zhang**, 2011, Physicochemical Properties of Ionic Liquids [C3py][NTf2] and [C6py][NTf2], Journal of Chemical & Engineering Data, 56(11), 4094–4101.

Quijano Guillermo, Couvert Annabelle, Amrane Abdeltif, 2010, 'Ionic liquids: Applications and future trends in bioreactor technology', Bio resource technology, 101, 8923-8930.

Real-Life Applications of SVM (Support Vector Machines), [en ligne], https://data-flair.training/blogs/applications-of-svm/, consulté le (28/03/2023).

Revelli Anne-Laure, 2010, 'Etude thermodynamique des liquides ioniques: Applications à la protection de l'Environnement', Thèse de doctorat : Génie des Procédés et des Produits, Inst. Nat. Polytech, Lorraine.

Saifour Khadidja, Feddak Ferial, 2022,Utilisation d'une méthode d'intelligence artificielle pour la modélisation d'un procédé de traitement des eaux, mémoire de master, UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA, Alger.

Sediri Meriem, 2017, "Contribution a la modélisation de l'adsorption dynamique : Etude comparative'', Thèse de doctorat, université de Médéa, Algérie.

Shahram Lotfi, Shahin Ahmadi, Parvin Kumar, 2021, A hybrid descriptor based QSPR model to predict the thermal decomposition temperature of imidazolium ionic liquids using Monte Carlo approach , Journal of Molecular Liquids, (page 2).

Si-Moussa Cherif, 2010, Modélisation des Équilibres de Phases à Pressions Élevées par les Réseaux de Neurones Artificiels, Thèse de Doctorat, École Nationale Polytechnique, Alger.

Suojiang Zhang, Xingmei Lu, Qing Zhou, Xiaohua Li, Xiangping Zhang, Shucai Li., 2009, Ionic Liquids: Physicochemical Properties, Elsevier, 478page.

Talbi Mohammed Lamine, (2011). "Analyse et traitement du signal électro cardiographique (ECG)." Thèse de Doctorat, Université Mentouri de Constantine. Constantine, Algérie.

Références bibliographiques

Toubakh Meriem, 2016, Etude de l'utilisation des liquides ioniques comme eco-solvants pour la récupération des composés organiques a l 'échelle industrielle, Mémoire de master, Universite Kasdi Merbah Ouargla, Algerie.

Touzet Claude, 1992, les réseaux de neurones artificiels introduction au connexionnisme. Livre PDF.

Vapnik Vladimir N, 1995, "the nature of statistical learning", theory.spring-Verlag, New York, USA.

Vikramaditya Jakkula, 2006, Tutorial on Support Vector Machine (SVM), School of EECS, Washington State University.

Wagner Silva, Marcileia Zanatta, Ana Sofia Ferreira, Marta C. Corvo, and Eurico J. Cabrita, 2020, Revisiting Ionic Liquid Structure-Property Relationship: A Critical Analysis, international journal of molecular sciences, 21(20): 7745.

Xiaohua Xiao, Liang Zhao, Xia Liu, Shengxiang Jiang, 2004, Ionic liquids as additives in high performance liquid chromatography: Analysis of amines and the interaction mechanism of ionic liquids, Analytica chimica acta, 519(2), 207-211.

Xinyue Zhao, Yong Pan, Juncheng Jiang, Shuangyan Xu, Jiajia Jiang, and Li Ding, 2017, Thermal Hazard of Ionic Liquids: Modeling Thermal Decomposition Temperatures of Imidazolium Ionic Liquids via QSPR Method, indutrial and enineering chemistry research.

Yu Chen , Xiaoxue Han , Zhenghui Liu , Yuting Li , Haiyang Sun , Han Wang Jianqi ang Wang., 2022, Thermal decomposition and volatility of ionic liquids:Factors, evaluation and strategies, **Journal of Molecular Liquids**.

Yu, Xinliag, Yi Bing, Wang, Xueye, Xie Zhiming, 2007, Correlation between the glass transition temperatures and multipole moments for polymers, Chemical Physics, 332(1), 115–118.

Zhang, Suojiang Sun, Ning He, Xuezhong Lu, Xingmei Zhang, Xiangping , 2006, Physical Properties of Ionic Liquids: Database and Evaluation. , 35(4), 1475–0.

Références bibliographiques

Zhigang Lei , Biaohua Chen, **Yoon-Mo Koo**, **Douglas R. MacFarlane**, 2017, Introduction: Ionic Liquids, Chemical Reviews, 117(10), 6633–6635.

Zou Jinming, Han, Yi, Sung-Sau So, (2008), Overview of Artificial Neural Networks, Artificial Neural Networks, 14–22.