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

UNIVERSITÉ YAHIA FARÈS DE MÉDÉA

Département de Génie des Procédés et Environnement

Laboratoire de Biomatériaux et Phénomène de Transport (LBMPT)

THÈSE DE DOCTORAT EN SCIENCES

Présentée par :
Riadh MOUMEN

En vue de l'obtention du titre de Docteur en Sciences.

Filière : Génie des procédés

Option : Génie des procédés

Thème

MODÉLISATION DE L'ADSORPTION MULTI-COMPOSANTS PAR LES TECHNIQUES D'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE.

Soutenue le : 20/ 03/ 2024 à 10H à la salle des conférences devant le jury composé de :

Dr. AMMI Yamina, Maitre de Conférences A, Université Yahia Farés de Médéa	Présidente
Pr. ABDALLAH EL HADJ Abdallah, Professeur, Université de Blida 1	Examinateur
Dr. BEZARI Salah, Maitre de Recherche A, URAER-CDER	Examinateur
Dr. KERCHICH Yacine, Professeur, Ecole National Polytechnique	Examinateur
Pr. LAIDI Maamar, Professeur, Université Yahia Farès de Médéa	Directeur de thèse
Pr. HANINI Salah, Professeur, Université Yahia Farès de Médéa	Co-Directeur de thèse

Année Universitaire 2023/2024

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail de doctorat

A la mémoire de ma ***Chère Mère*** *et à mon* ***Cher Père***

Je vous dois ce que je suis aujourd'hui grâce à votre amour, à votre patience, à vos innombrables sacrifices et pour tout l'enseignement que vous m'avez transmis.

Que ce modeste travail, soit pour vous une petit compensation et reconnaissance envers ce que vous avais fait d'incroyable pour moi.

A ma ***Chère Femme*** *ainsi qu`à mes* ***Chères Enfants*** *:*

Amel, Imad Eddine *et* ***Naila***

A mes ***Chers Frères*** *:* ***Mohamed, Samir*** *et* ***Nabil*** *et ma* ***Chère Sœur*** *:* ***Sihem***

A toute la famille ***MOUMEN*** *et* ***BEN Helal***

Une spéciale dédicace à mon ***Ami*** *Dr.* ***Mounir HAMMOUDI****.*

A tous qui ont contribué dans ma formation depuis mon enfance.

Tous qui connaissent ***Riadh*** *de près ou de loin.*

Riadh MOUMEN.

Remerciements et Gratitude

En premier lieu, je remercie **الله** *(**ALLAH**) le Tout Puissant de m`avoir donné la volonté, la force, la patience et le courage pour réaliser ce travail.*

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à mon Directeur de Thèse ***Pr. Maamar LAIDI*** *et à mon Co-Directeur de Thèse* ***Pr. Salah HANINI*** *pour le temps précieux qu'ils ont consacrés durant mes travaux et recherches, pour leurs suggestions, tant sur le plan scientifique que moral.*

Je tiens également à présenter ma profonde gratitude aux : ***Dr. AMMI Yamina*** *Maitre de Conférences A, à l`université de Médéa,* ***Pr. ABDALLAH EL HADJ Abdallah*** *Professeur, à l`université de Blida 1,* ***Dr. BEZARI Salah*** *Maitre de Recherche A, au URAER-CDER et* ***Pr. KERCHICH Yacine*** *Professeur, à l'Ecole National Polytechnique, Alger, d'avoir accepté de juger ce modeste travail.*

Je tiens également à exprimer mes plus vifs remerciements aux : ***Dr. Abdellah IBRIR, Dr. Mohamed HANTABLI*** *et* ***Dr. Mohamed ROUBEHIE FISSA*** *pour leurs aides et encouragements, et leurs éclairages techniques,* ***Pr. Mohamed Nadjib BOUAZIZ*** *directeur de laboratoire de Bio-Matériaux et Phénomènes de Transport (LBMPT) pour leur aide et soutien,* ***Mr. Abdelkader BENSDGUA*** *pour leurs aides et précieux conseils techniques.*

Merci à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin durant ces années de recherche et d'études. Je ne peux conclure sans un mot de remerciement à tous mes enseignants et à tous mes collègues.

Résumé

ملخص : نمذجة الامتزاز للمكونات المتعددة باستخدام تقنيات الذكاء الاصطناعي

الهدف الرئيسي لهذه الرسالة هو تطبيق تقنيات الذكاء الاصطناعي للتنبؤ بدقة قدرة الادمصاص لنظام الامتزاز متعدد العناصر للملوثات (المعادن الثقيلة، والأصباغ، والمركبات العضوية) في وجود العديد من المواد الامتزازية.

تمت هذه النمذجة باستخدام الشبكة العصبية الاصطناعية وآلة الدعم باليعسوب. تم تطوير ومقارنة هاتين الطريقتين. في النموذج الأول، تم استخدامها مع خوارزمية الأمثلة المدمجة بالفعل. في النموذج الثاني، تم استخدام الطريقة بواسطة خوارزمية الأمثلة الحديثة والفعالة جدًا: الدعم باليعسوب.

تم تقييم دقة النماذج باستخدام ثلاثة مقاييس إحصائية معتمدة (متوسط الخطأ المربع، معامل التحديد، ومعامل الارتباط). تم جمع البيانات المستخدمة من المقالات التجريبية المنشورة سابقًا، والتي تحتوي على بعض أنواع الملوثات، بما في ذلك أيونات المعادن الثقيلة، الأصباغ والمركبات العضوية، بالإضافة إلى الإمتزازات الطبيعية/الاصطناعية المختلفة. تتكون مجموعة البيانات من خمس متغيرات مهمة بمجموع 1023 نقطة تجريبية ؛ كما تم تقسيم المتغيرات إلى اربعة مداخل هي (الوزن الجزيئي، تراكيز الإمتزاز المتوازن، المساحة السطحية للإمتزاز، ودرجة الحرارة) ومخرج واحد هو سعة الإمتزاز في الوضع المتوازن. تم تقسيم البيانات باستخدام وظيفة "الاحتفاظ بالبيانات" إلى مجموعتين فرعيتين (80٪ لمجموعة التدريب و 20٪ لمجموعة الاختبار). تم تنفيذ البرمجة باستخدام برنامج ماطلاب.

أظهرت النتائج المتحصل عليها أن النموذج الثاني المُحسَّن بوظيفة النواة يتمتع بقدرة جيدة على البحث الشامل مجتمعة مع دقة عالية في التنبؤ، حيث بلغ معامل التحديد 0.997، ومعامل الارتباط 0.998، ومتوسط مربع الخطأ 2.539.

يمكن استخدام النموذج الحاصل لتوقع كفاءة نظام الامتزاز وتوفير أداة لتحسين العمليات استجابةً لتغيرات الظروف التشغيلية.

تم تطوير واجهتين رسوميتين سهلتين للاستخدام (GUIs) استنادًا إلى واجهة MATLAB® GUI لتقدير الاستجابات المطلوبة بدقة باستخدام نموذجي RNAO و SVM-DA.

الكلمات الرئيسية : امتزاز متعدد المكونات، واجهة المستخدم الرسومية لماطلاب، الملوثات، الشبكة العصبية الاصطناعية، الانحدار بواسطة متجهات الدعم، خوارزمية اليعسوب.

Abstract : Modeling multi-component adsorption using artificial intelligence techniques (AI).

The main objective of this thesis is the application of artificial intelligence techniques to accurately predict the adsorption capacity of the multi-component adsorption system for pollutants (heavy metals, dyes, and organic compounds) in the presence of various adsorbent materials.

This predictability was modelled through the use of the Artificial Neural Network (ANN), the Support Vector Machine (DA-SVM). Two methods ANN and SVM have been built and compared. In the first model, the ANN method was used with an already built-in optimization algorithm. However, in the second model, the DA-SVM method was used by means of a very recent and efficient optimization algorithm: the Dragonfly Optimizer (DA). The models' accuracy was evaluated by three well–established statistical metrics (root mean squared error *RMSE*, determination coefficient R^2 and correlation coefficient *R*). The used data were collected from previously experimental papers published in literature containing all kinds of pollutants namely heavy metal ions, dyes, and organic compounds, and different natural/synthetic adsorbents. The data set is structured around five important variables with 1023 points; the variables are divided into four inputs which are (molecular weight, equilibrium concentrations of adsorbate, specific area of the adsorbent, and the temperature) and one output which the adsorption capacity at equilibrium is. The data were divided using the hold-out function into two subsets (80% for training set and 20% for the test set). The programming stage was carried out using MATLAB® software. The obtained results show that the optimized DA-SVM model with RBF-Gaussian kernel function shows a good ability for global search combined with high prediction accuracy, with a determination coefficient of R^2 = 0.997, correlation coefficient *R* =0.998 and root mean square error *RMSE* = 2.539. The obtained model can be used to predict the efficiency of the adsorption system and to provide a tool for process optimization responding to changes in operational conditions. Two user-friendly graphical interfaces (GUIs) have been developed based on the MATLAB® GUI interface to accurately estimate the desired responses by leveraging the two models RNAO and SVM-DA.

Keywords : Multicomponent adsorption, MATLAB® GUI, polluants, Artificial neural Network (ANN), Machine support vector (SVM), Dragonfly algorithm (DA).

Résumé : Modélisation de l'adsorption multi-composants par les techniques d'intelligence artificielle (IAs).

L'objectif principal de cette thèse est l'application des techniques d'intelligence artificielle pour prédire avec précision la capacité d'adsorption du système d'adsorption multi-composants des polluants (métaux lourds, colorants et composés organiques) en présence des matériaux adsorbants. Cette prévisibilité a été modélisée en utilisant les réseaux de neurones artificiels "RNA" et les machines à vecteurs de support "DA-SVM". Les deux méthodes "RNA" et "DA-SVM" ont été construites et comparées. Dans le premier modèle, la méthode "RNA" a été utilisée avec un algorithme d'optimisation intégré. Cependant, dans le second modèle, la méthode "DA-SVM" a été utilisée en s'articulant sur un algorithme d'optimisation très récent et efficace "l'optimiseur de libellule (DA)". La précision des deux modèles a été évaluée à l'aide de trois critères de performances statistiques (erreur quadratique moyenne "*RMSE*", coefficient de détermination "R^2" et coefficient de corrélation "*R*"). Les données expérimentales utilisées ont été collectées à partir d'articles précédemment publiés dans la littérature après avoir menées un test de sensibilité qui a été implémentée au moyen d'un diagramme de violant. La base des données regroupe certains adsorbats (polluants), notamment des ions de métaux lourds, des colorants et des composés organiques, ainsi que différents adsorbants naturels/synthétiques. L'ensemble de données s'articule sur cinq variables importantes englobant 1023 points expérimentaux ; les variables sont divisées en quatre entrées qui sont (le poids moléculaire, les concentrations d'équilibre de l'adsorbant, la surface spécifique de l'adsorbant et la température) et une seule sortie qui est la capacité d'adsorption à l'équilibre. Les données ont été divisées en utilisant la fonction "hold-out" en deux sous-ensembles (80 % pour l'ensemble d'entraînement et 20 % pour l'ensemble de test). La programmation a été effectuée à l'aide du logiciel MATLAB®. Les résultats obtenus montrent que le modèle optimisé "SVM-DA" avec une fonction de noyau RBF-Gaussien présente une bonne capacité de reproductibilité et de prédiction, avec un coefficient de détermination $R^2 = 0.997$, un coefficient de corrélation $R = 0.998$ et une erreur quadratique moyenne $RMSE = 2.539$. Le meilleur modèle "SVM-DA" obtenu peut être utilisé pour prédire la capacité d'adsorption du système testé et fournir un outil d'optimisation des processus en réponse aux changements des conditions opératoires. Deux interfaces conviviales graphiques (GUI) ont été développées à partir de l'interface GUI MATLAB® pour estimer avec précision les réponses souhaitées en s'articulant sur les deux modèles "RNAO" et "SVMO-DA".

Mots-clés : Adsorption multi-composants, polluants, réseau de neurones artificiel (RNA), machine à vecteurs de support (SVM), algorithme de libellule (DA), interface conviviale graphique MATLAB®.

Table des Matières

Table des matières ….....I
Abréviations ….....V
Nomenclatures et symboles….....VII
Liste des tableaux….....IX
Liste des figures….....X

Introduction générale ….....1
Références Bibliographiques

Chapitre I : Etat de l'art et revue critique sur l'adsorption multi-composants

Introduction 4
1.1 Etat de l'art statistique sur les travaux antérieurs….....4
1.2 Revue critique des travaux antérieurs... 7
Conclusion.....20
Références bibliographiques

Chapitre II : Généralité sur l'adsorption statique et dynamique

Introduction 21
2.1 Adsorption mono-composant (à une seule espèce) ….....21
2.1.1 Définition.....21
2.1.2 Cinétique d'adsorption.....22
2.1.3 Mécanisme de transfert de masse.....22
2.1.4 Modèles 24
2.1.4.1 Modèle de Langmuir.....24
2.1.4.2 Modèle de Freundlich.....25
2.1.4.3 Modèle de Tempkin.....25
2.1.4.4 Modèle de Toth 26
2.1.4.5 Modèle de Redlich et Peterson.....26
2.1.4.6 Modèle de Henry.....27
2.1.4.7 Modèle d'Elovich 28
2.1.4.8 Modèle de pseudo-premier ordre 28
2.1.4.9 Modèle de pseudo-second ordre.....29
2.1.4.10 Modèle de diffusion intra-particulaire.....29
2.1.4.11 Modèle d'isotherme d'adsorption de Harkins-Jura.....29
2.1.4.12 Modèle d'isotherme de Halsey.....30
2.1.4.13 Modèle d'isotherme de Dubinin-Radushkevich (D-R) 30
2.1.4.14 Modèle d'isotherme de Brunauer, Emmet et Teller (BET) 31
2.2 Adsorption multi-composants (binaire, ternaire, quaternaire) 31
2.2.1 Définition 31
2.2.2 Mécanisme de transfert de masse…….....32
2.2.3 Modèles. 32
2.2.3.1 Modèle de Langmuir généralisé 33

2.2.3.2 Modèle de Lnagmuir non modifié ..... .33
2.2.3.3 Modèle de Lnagmuir modifié ……..... 34
2.2.3.4 Modèle de Freundlich généralisé..... 35
2.2.3.5 Modèle de Redlich-Peterson non modifié..... 35
2.2.3.6 Modèle de Redlich-Peterson modifié……..... 36
2.2.3.7 Modèle de Sheindorf–Rebuhn–Sheintuch (SRS) ……..... 36
2.2.3.8 Modèle de Sips généralisé ……..... 37
2.3 Modélisation et optimisation ……..... 37
2.3.1 Adsorption multi-composants ……..... 38
2.3.1.1 Adsorption en batch via les modèles empiriques classiques ……..... 38
2.3.1.2 Adsorption via l'intelligence artificielle (IA) ……..... 38
2.3.2 Adsorption multi-composants dynamique……..... 39
2.3.2.1 Adsorption en colonne via les modèles empiriques classiques 39
2.3.2.2 Adsorption par l'intelligence artificielle (IA) 39
2.4 Applications industrielles 39
2.4.1 Purification de gaz..... 40
2.4.2 Purification de l'eau 40
2.4.3 Déshydratation de gaz 40
2.4.4 Séparation de mélanges de gaz..... 40
2.4.5 Purification de solvants..... 40
2.4.6 Récupération des métaux 41
2.4.7 Séparation des hydrocarbures..... 41
2.4.8 Déshumidification de l'air 41
2.4.9 Séparation des mélanges liquides..... 41
2.4.10 Épuration de l'air 41
2.4.11 Réaction catalytique..... 42
2.4.12 Stockage de gaz..... 42
2.4.13 Élimination des odeurs..... 42
2.4.14 Décontamination des sols..... 42
2.4.15 Séparation des biomolécules..... 43
2.4.16 Traitement des effluents industriels..... 43
2.4.17 Détection de gaz..... 43
Conclusion..... 43
Références Bibliographiques.

Chapitre III : Méthodologie du RNA et DA-SVM

Introduction..... 44
3.1 Modélisation par les Réseaux de Neurone Artificiel (RNA) 44
3.1.1 L'architectures de RNA..... 44
3.1.2 Réseaux multi-couches (feed-forward) 45
3.1.3 Méthodologie de calcul..... 45
3.1.4 Sélection et séparation des variables d'entrées/sortie..... 46
3.1.5 Collection de ces variables de l'expérience ou tirées à partir de la littérature..... 47
3.1.6 Division de la base obtenue entre apprentissage/test et validation..... 47
3.1.7 Normalisation des données..... 47

3.1.8 Dé-normalisation des données.....48
3.1.9 Choix du type de réseau de neurones.....48
3.1.10 Choix du nombre de neurones dans la couche cachée et le nombre de couche cachée.....48
3.1.11 Choix de la fonction de transfert pour chaque couche.....49
3.1.12 Apprentissage/validation et test du modèle développé.....49
3.1.13 Mesurer la performance du model en utilisant des paramètres statistiques entre sa sortie et celle désirée..... 49
3.1.14 Représentation des résultats en termes graphiques et tableaux.....49
3.1.15 Conception de réseau de neurone artificiel.....50
3.2 Modélisation par Support Vector Machine (SVM) et le Support Vector Machine couplé avec l`Algorithme de Libellule (DA-SVM).....53
3.2.1 Modélisation par Support Vector Machine (SVM).....53
3.2.1.1 Le principe fond.....55
3.2.1.2 Architecture de SVM.....55
3.2.1.3 Modifier et évaluation des paramètres des modèles.....56
3.2.1.4 Avantages / applications des SVMs.....56
3.2.2 Modélisation par Support Vector Machine couplé avec l`Algorithme de Libellule (DA-SVM).....57
3.2.2.1 Le principe fondateur des DA.....57
3.2.2.2 Le processus de base de SVM-DA.....57
3.3 Critères de performances statistiques (Analyse et évaluation d'un modèle).....61
Conclusion.....62
Références Bibliographiques.

Chapitre IV : Partie expérimentale (Contribution 1 "RNA" et Contribution 2 "SVM")

Introduction.....63
4.1 Méthodologie de travail.....63
4.2 Sélection de la base de données.....65
4.3 Normalisation de la base de données..... ..68
4.4 Analyse statistique de la base de données..... ...68
4.4.1 Régularisation de l'apprentissage statistique.....68
4.4.2 Uniformité de la distribution de la base de données..... ...69
4.4.3 Etude de sensibilité des paramètres d'entrée.....71
4.5 Contribution 1 : Approche de la modélisation RNA.....72
Introduction.....72
4.5.1 Conception de la topologie de RNA.....73
4.5.2 Concept du réseau de neurones de type feedforward (MLP).....73
4.5.3 Optimisation et simulation du réseau de neurones.....74
4.5.4 Évaluation statistique et incertitude du modèle RNAO.....76
4.5.5 Formule de RNA optimisé.....80
4.5.6 Interface graphique d'utilisateur du modèle RNAO.....83
Conclusion.....84
4.6 Contribution 2 : Approche de la modélisation SVM 85
Introduction.....85
4.6.1 Conception de la topologie de SVM.....86

4.6.2 Concept du réseau de neurones de type DA-SVM…….……...……87
4.6.3 Optimisation et simulation du réseau de neurones……88
4.6.4 Évaluation statistique et incertitude du modèle ……..……..……88
4.6.5 Formule de DA-SVM optimisé……..……..…….....93
4.6.6 Interface graphique basée sur MATLAB® du modèle DA-SVMO……...…….....94
Conclusion……..95
4.7 Comparaison entre DA-SVM et RNA …….....96
4.7.1 Comparaison entre (RNAO / DA-SVMO) ……...96
4.7.2 Comparaison entre (RNAO / SVMO / DA-SVMO) …….....97
Conclusion……..98
Références Bibliographiques
Conclusion Générale et Perspectives.....99
Article Scientifique.....101

Abréviations

Abréviation	Signification
ABC	Colonie d'Abeilles Artificielles (**A**rtificial **B**ee **C**olony)
AC	Charbon Actif **(A**cticated **C**arbon**)**
ACO	Optimisation des Colonies de Fourmis (**A**nt **C**olony **O**ptimization)
AEC	**A**nioniques **C**arboxylate d'**E**ther
ANN	**A**rtificiel **N**eural **N**eutwork
APG	**A**nioniques **P**oly-**G**lucoside
BET	**B**runauer**– E**mmett **–T**eller
BG	Vert Brillant (**B**right **G**reen)
BP	Rétro-Propagation (**B**ack-**P**ropagation)
COA	Optimisation des Coucous (**C**uckoo Optimization **A**lgorithm)
DA	Algorithme de Libellule **(D**ragonfly **A**lgorithm)
DS	**D**iffusivité de **S**urface
EY	Eosine Jaune (**E**yosin **Y**ellow)
FFA	Algorithme de Luciole (**F**ire**F**ly **A**lgorithm)
GA	Algorithme Génétique (**G**enetic **A**lgorithm)
GAC	Charbon Actif Granulaire (**G**ranulated **A**ctivated **C**arbon)
GO	Oxyde de Graphite (**G**raphite **O**xide)
GRBF	Fonction Gaussienne de Base Radiale (**G**aussian **R**adial **B**asic **F**unction)
HSDM	Modèle de Diffusion de Surface Homogène (**H**omogeneous **S**urface **D**iffusion **M**odel)
IA	**I**ntelligence **A**rtificielle
LS-SVM	Machine à Vecteurs de Support des Moindres Carrés (**L**east **S**quares **–S**upport **V**ect **M**achine)
MAE	Erreur Moyenne Absolue (**M**ean **A**bsolute **E**rror)
MAPE	Erreur Moyenne Absolue en Pourcentage (**M**ean **A**bsolute **P**ercentage **E**rror)
MATLAB®	**MAT**rix **LAB**oratory
MB	Bleu de Méthylène (**M**ethylen **B**lue)
MG	Vert de Méthylène (**M**ethylen **G**reen)
MIK	Isobutyl de Méthyl Cétone (**M**ethyl **I**sobutyl **K**etone)
MLP	Perception Multi-Couches (**M**ulti-**L**ayer **P**erception)
MLR	Regression Multi-Linéaires (**M**ulti **L**inear **R**egression)
MWCNT	Nanotubes de Carbone à multi-Parois (**M**ulti**W**alled **C**arbon **N**ano**T**ubes)
NP	**N**ano-**P**article
NRMSE	Erreur Quadratique Moyenne Normalisée (**N**ormalized **R**oot **M**ean **S**quared **E**rror)
PA	**P**ropion **A**ldéhyde
PCA	Composante Principale Artificielle (**P**rincipal **C**omponent **A**rtificial)
PE	Phényl de l'Ethanol (**P**henyl **E**thanol)
pH	**P**otentiel d'**H**ydrogène
POME	Effluents de Moulins à Huile de Palme (**P**alm **O**il **M**ills **E**ffluents)
PP	Phényl de propanol (**P**henyl **P**ropanol)
PR	Rouge de Phénol (**P**hénol **R**ed)
PSO	Optimisation par Essaims Particulaires (**P**article **S**warm **O**ptimization)
Purelin	Fonction d'activation **L**inéaire
RAE	Erreur Relative Absolue (**R**elative **A**bsolute **E**rror)
RHA	Cendre de Balle de Riz (**R**ice **H**usk **A**sh)
RMSE	Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne (**R**oot **M**ean **S**quared **E**rror)
RNA	**R**éseau de **N**eurones **A**rtificiels
RNAO	**R**éseau de **N**eurones **A**rtificiels **O**ptimal
RSM	Méthodologie de Surface de Réponse (**R**esponse **M**ethodology of **S**urface)
SA	Recuit Simulé (**S**imulated **A**nnealing)

SRS	**S**heindorf–**R**ebuhn–**S**heintuch
STD	Ecart Type (**ST**andard **D**eviation)
SVM	**M**achine à **V**ecteurs de **S**upport (**S**upport **V**ector **M**achine)
SVMO	**M**achine à **V**ecteurs de **S**upport **O**ptimale (**O**ptimal **S**upport **V**ector **M**achine)
SY	Jaune du Soleil (**Y**ellow of the **S**un)
Tansig	Fonction d'activation **T**angente hyperbolique **S**igmoïde
WNN	Réseau de Neurones à Ondelettes (**W**avelet **N**eural **N**etwork)
WC	Charbon de Bois (**W**ood **C**arbon)
YA	Acide Jaune (**Y**ellow **A**cid)

Nomenclatures et Symboles

Lecture	Désignation	Unité
a	Coefficient de compétition de Sheindorf–Rebuhn–Sheintuch	(-)
A	Constante de l'isotherme de Tempkin	(-)
a_L	Constante de l'isotherme de Langmuir	(-)
a_R	Constante isothermes de Redlich	(-)
a_{PR}	Constante du modèle Redlich-Peterson	$L.mg^{-1}$
As	Surface Spécifique des adsorbants	$m^2.g^{-1}$
B	Constante de l'isotherme de Tempkin	(-)
b_F	Constante de Freundlich	(-)
b_i	Biais de la couche cachée	(-)
b_p	Biais de la couche de sortie	(-)
C	Concentration massique	$mg.g^{-1}$
C	Paramètre de pénalité	(-)
Ce	Concentration des adsorbats à l'équilibre	$mg.g^{-1}$
f_h	Fonction d'activation de la couche cachée "tansig"	(-)
f_s	Fonction d'activation de la couche de sortie "purelin"	(-)
i	Composé chimique	(-)
i	Nombre des entrés	(-)
j	Composé chimique	(-)
K	Fonction du noyau (**K**ernel)	(-)
K_E	Constante d'Elovich	(-)
K_F	Constante de Freundlich	(-)
K_{HE}	Constante d'adsorption de Henry	$L.g^{-1}$
K_L	Constantes de l'isotherme de Langmuir	(-)
k_{PR}	Constante de Redlich-Peterson	$L.g^{-1}$
K_R	Constantes isothermes de Redlich	(-)
k_{SP}	Constante de l'isotherme de Spis	$(L/mg)^m$
K_t	Constantes isothermes de de Toth	(-)
m	Exposant de modèle de Spis variant entre 0 et 1	(-)
Mw	Poids Moléculaire des polluants	$g.mol^{-1}$
n	Nombre des données	(-)
N	Nombre total des composés dans la solution	(-)
N	Taille des données expérimentale	(-)
n_1 et n_2	Intensités d'adsorption	(-)
p	Nombre de la sortie prédite	(-)
q_0	Capacité théorique de la monocouche	(-)
q_e	Quantité adsorbé à l'équilibre	$mg.L^{-1}$
R	Coefficient de corrélation	(-)
R	Constante universelle des gaz	$J.mole^{-1}.K^{-1}$
R^2	Coefficient de détermination	(-)
T	Température absolue	K
var 1	Poids moléculaire des polluants	$g.mol^{-1}$
var 2	Surface spécifique de l'adsorbant	$m^2.g^{-1}$
var 3	Température	K
var 4	Concentration de l'adsorbat à l'équilibre	$mg.g^{-1}$
w	poids d'inertie	(-)
$w_{j,p}$	Poids de la couche cachée	(-)

$w_{i,j}$	Poids de la couche de sortie	(-)
x	Constante	(-)
$\overline{x}$	Moyenne des données expérimentales	(-)
x_i	Valeurs expérimentales	(-)
y	Constante	(-)
$\mathbf{Y}$	Données observées	(-)
$\overline{Y}$	Moyenne arithmétique des données observées	(-)

Lettres Grecques

Lecture	Désignation	Unité
β	Ligne droite de pente (Exposant variant entre 0 et 1)	(-)
η	Facteur d'interaction	(-)
ε	Seuil d'itération	(-)
σ	Largeur de Bande Passante du noyau gaussien RBF	(-)
ε	Coefficient de non-sensibilité	(-)
α	pente	(-)
β	ordonnée à l'origine	(-)
α_n et α_n^*	Variables d'écart positives	(-)

Exposants/ Indices

Lecture	Désignation
0	Initial
Réf	Référence
$\mathbf{Y_{i\ cal}}$	Sortie Calculé
$\mathbf{Y_{i\ exp}}$	Sortie Expérimental

Liste des Tableaux

Tableau	Titre du tableau	Page
	Chapitre III	
Tableau 3.1	Plages des paramètres initiaux pour SVM	55
	Chapitre IV	
Tableau 4.1	Description statistique de la base de données	67
Tableau 4.2	Base des données des mélanges d'adsorbat en solution aqueuse adsorbés sur différents adsorbants	98
Tableau 4.3	Normalisation de la base de données	69
Tableau 4.4	Topologie du RNA optimisé pour la prédiction de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e)	77
Tableau 4.5	Vecteur de régression linéaire [α (pente), β (ordonnée à l'origine), R (coefficient de corrélation)]	81
Tableau 4.6	Paramètres statistiques du modèle RNAO	81
Tableau 4.7	Modèle de RNAO établi {[couche entrée – couche cachée]}	83
Tableau 4.8	Modèle de RNAO {[couche cachée – couche sortie]}.	84
Tableau 4.9	Paramètres statistiques du modèle DA-SVMO pour la base globale	90
Tableau 4.10	Détails des hyper-paramètres optimisés pour le modèle SVM	91
Tableau 4.11	Paramètres statistiques des deux modèles SVMO et DA-SVMO	92
Tableau 4.12	Comparaison de la modélisation par DA-SVMO et RNAO	97
Tableau 4.13	Comparaison de la modélisation par RNAO, SVMO et DA-SVMO	98

Liste des Figures

Figure	Titre de la figure	Page
	Chapitre I	
Figure 1.1	Adsorption mono-composant	4
Figure 1.2	Adsorption multi-composants	5
Figure 1.3	Modélisation classique de l'adsorption compétitive	5
Figure 1.4	Modélisation par l'intelligence artificielle (IA) de l'adsorption multi-composants	6
	Chapitre II	
Figure 2.1	Quelques termes de base utilisés dans la science et la technologie de l'adsorption	21
Figure 2.2	Processus d'adsorption typique. Adapté avec permission	22
Figure 2.3	Etapes du mécanisme d'adsorption	23
Figure 2.4	Système typique pour l'élimination de l'azote	42
	Chapitre III	
Figure 3.1	Un réseau neuronal multi-couches (feed-forward)	45
Figure 3.2	Schéma de calcul des différents paramètres du système par les réseaux de neurones artificiel (RNAO)	46
Figure 3.3	Organigramme de la méthodologie de calcul du RNAO	51
Figure 3.4	Organigramme du modèle SVMO	54
Figure 3.5	Architecture de SVM	56
Figure 3.6	Comportements d'essaimage dynamiques	57
Figure 3.7	Comportements d'essaimage statiques	57
Figure 3.8	Organigramme de l'algorithme Dragonfly	58
Figure 3.9	Représentation schématique du modèle DA-SVMr appliqué à la prédiction de la capacité d'adsorption de l'adsorbant à l'équilibre (q_e)	59
Figure 3.10	Organigramme du modèle DA-SVM	60
	Chapitre IV	
Figure 4.1	Organigramme illustrant la méthodologie de travail	64
Figure 4.2	Interactions binaires des variables pour les modèles prédictives	68
Figure 4.3	Poids moléculaires des polluants (*Mw*)	69
Figure 4.4	Surface spécifique de l'adsorbant (*As*)	70
Figure 4.5	Température (T).	70
Figure 4.6	Concentrations des adsorbats à l'équilibre (*Ce*)	71
Figure 4.7	Importance relative (%) des variables d'entrée considérées pour l'estimation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants	72
Figure 4.8	Méthodologie de calcule par réseaux de neurones (RNA)	73
Figure 4.9	Réseau de neurones artificiels de type feedforward	74
Figure 4.10	Variation d'erreur (*RMSE*) par rapport aux nombres de neurones dans la couche cachée	75
Figure 4.11	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales par RNA	76
Figure 4.12	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales	77
Figure 4.13	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,1}$	77
Figure 4.14	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,2}$	78
Figure 4.15	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,3}$	78
Figure 4.16	Paramètres de performance de RNAO pour la base globale	79
Figure 4.17	Interface graphique du modèle RNAO	83
Figure 4.18	Représentation schématique du DA-SVM	87

Figure 4.19	Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales pour DA-SVMO	89
Figure 4.20	Paramètres de performance de SVMO et DA-SVMO pour la base globale	90
Figure 4.21	Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,1}$ ($mg.g^{-1}$)	90
Figure 4.22	Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,2}$ ($mg.g^{-1}$)	91
Figure 4.23	Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,3}$ ($mg.g^{-1}$)	91
Figure 4.24	Procédure de construction de l'interface graphique	93
Figure 4.25	Implémentation du meilleur modèle dans le GUI pour estimer les valeurs cibles	94
Figure 4.26	Comparaison entre RNAO et DA-SVMO pour la base globale	95
Figure 4.27	Comparaison entre RNAO, SVMO et DA-SVMO pour la base globale	96

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction Générale

L'une des plus anciennes références au traitement des eaux de consommation est tirée d'un texte médical en sanscrit datant de 2000 ans avant Jésus-Christ. On y indique comment rendre les eaux potables en les faisant bouillir au-dessus d'un feu, en les chauffant au soleil, en y plongeant un fer chaud ou en les filtrant à travers un lit de sable et de gravier. Les armées d'Alexandre, pendant leurs nombreuses campagnes d'Asie mineure, recevaient la consigne de faire bouillir leur eau avant de la consommer. Dans la Rome antique, les aqueducs acheminaient des eaux de diverses qualités : on consommait les meilleures d'entre elles, alors qu'on réservait les médiocres aux bains et aux thermes, et les pires au cirque nautique. (Snow et al., 2000)

La tâche actuelle du spécialiste en traitement des eaux ne consiste pas uniquement à appliquer des principes connus, étant donné que la croissance démographique et l'industrialisation, ont augmenté la quantité et la diversité des déchets rejetés dans les rivières et les lacs, ce qui a donné naissance à de nouveaux problèmes (les métaux lourds, les colorants, les micropolluants et les virus, etc.), et a engendré autant de risques que le spécialiste doit résoudre techniquement et de façon économique. (Chebira 2008)

Plusieurs techniques de séparation ont été utilisées pour étudier la dépollution de l'eau de différents polluants, parmi ces méthodes se trouve l'adsorption multi-composants. La dernière technique suscite l'intérêt de nombreux secteurs industriels car elle est considérée comme le processus le plus simple, offrant une grande efficacité et une rentabilité économique. (Alam et al., 2022)

L'intelligence artificielle (IA) s'est imposée comme un outil puissant pour résoudre des problèmes du monde réel et a suscité une attention considérable en raison de ses applications dans divers domaines. Ces dernières années, les techniques d'IA ont également été utilisées dans le traitement de l'eau et la désalinisation pour optimiser le processus et offrir des solutions pratiques à la pollution de l'eau et à la pénurie d'eau. L'application de l'IA est également censée réduire les dépenses opérationnelles du processus de traitement de l'eau en diminuant les coûts et en optimisant l'utilisation des produits chimiques. (Hameed et al., 2017)

Le développement des ensembles des modèles basés sur l'apprentissage par machine (ML) pour la prédiction de processus complexes de nature non linéaire (comme l'adsorption) a considérablement progressé ces dernières années. Par conséquent, avoir une vision informative

de la progression de ces modèles apparaît essentiel pour mieux les comprendre et les utiliser dans des applications telles que la modélisation de l'adsorption. (Abbasi et al., 2022)

C'est pourquoi il est à la fois indispensable et utile d'effectuer le procédé de l'élimination des différents polluants et les conséquences résultantes afin de prédire et d'optimiser le processus de d'adsorption statique compétitive de ces polluants.

L'objectif principal de ce travail est la modélisation de l'adsorption statique multi-composants en utilisant des méthodes computationnelles basées sur l'intelligence artificielle (IA) pour prédire la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants. Ce travail est divisé en deux principales contributions :

- La première contribution comporte la modélisation et l'optimisation de l'adsorption statique multi-composants en utilisant les réseaux de neurones artificiels (RNA) pour la prédiction de phénomène d'adsorption des différents polluants (métaux lourds, colorants et d'autres composés organiques) en présence de plusieurs matériaux poreux (charbon actif, zéolite, argile, biomasse, bentonite, etc.).
- La deuxième contribution décrit la modélisation et l'évaluation des performances des principales techniques artificielles (SVM et DA-SVM) pour le même système précédent.

L'étude s'organise en quatre chapitres, une conclusion générale et des perspectives :

Le premier chapitre, regroupe quelques travaux antérieurs basés sur la modélisation et l'optimisation de l'adsorption multi-composants (ou compétitive) par des méthodes d'intelligence artificielle (IA) liés par des différentes algorithmes.

Le deuxième chapitre, présente des généralités sur l'adsorption mono-composant et multi-composants à l'état statique et dynamique et les modèles empiriques classique et par intelligence artificielle (IA) utilisés pour prédire la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants et quelques applications industrielles sont mentionnées.

Le troisième chapitre, concerne la méthodologie adoptée pour la modélisation et l'optimisation, en utilisant les réseaux de neurones artificiels (RNA) et la méthode des algorithmes génétiques à savoir la Machine à Vecteur de Support (SVM) intégré par un nouvel algorithme génétique hybride Dragonfly (DA).

- Le dernier chapitre traite l'aspect de la modélisation et l'optimisation d'une série de résultats expérimentaux extraits à partir des travaux de la littérature, après avoir effectués une analyse de sensibilité qui a été mise en œuvre en utilisant le diagramme de violant. La modélisation et

l'optimisation regroupent deux contributions, la première utilise un réseau de neurones artificiels (RNA) et la seconde utilisant, Machine à Vecteurs de Support (SVM) et Machine à Vecteur de Support par Dragonfly (DA-SVM). Ainsi qu'une description détaillée des résultats obtenus (performance des différents modèles développés, l'étude de sensibilité des paramètres d'entrée et d'une étude comparative entre les modèles proposés). Ainsi une interface graphique d'utilisateur des modèles (RNA et DA-SVM) en termes de prédiction est élaborée afin de porter plus de souplesse à l'utilisation.

Enfin, une conclusion générale qui rassemble les résultats obtenus dans cette étude et des perspectives qui peuvent être envisagées pour le futur.

Références Bibliographiques

Abbasi, E., Alavi Moghaddam, M. R., & Kowsari, E. (2022). A systematic and critical review on development of machine learning based-ensemble models for prediction of adsorption process efficiency. *Journal of Cleaner Production*, *379*(P1), 134588. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.134588

Alam, G., Ihsanullah, I., Naushad, M., & Sillanpää, M. (2022). Applications of artificial intelligence in water treatment for optimization and automation of adsorption processes: Recent advances and prospects. *Chemical Engineering Journal*, *427*(March 2021). https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130011

CHEBIRA, A. S. E. (2008). Etude Expérimentale de l ' Elimination des Polluants Organiques et Inorganiques par Adsorption sur des Sous Produits de Céréales ,Thèse De Doctorat ,Université de Constantine , 2008. *Thèse De Doctorat*.

Hameed, M., Sharqi, S. S., Yaseen, Z. M., Afan, H. A., Hussain, A., & Elshafie, A. (2017). Application of artificial intelligence (AI) techniques in water quality index prediction: a case study in tropical region, Malaysia. *Neural Computing and Applications*, *28*, 893–905. https://doi.org/10.1007/s00521-016-2404-7

Snow, J., York, J., & Street, B. (2000). *BTSA GEMEAU 1 – M 52 Chimie Historique du traitement des eaux Ch1 . Propriétés de la molécule d ' eau*. 1–10.

CHAPITRE I

ETAT DE L'ART ET REVUE CRITIQUE SUR L'ADSORPTION MULTI-COMPOSANTS

Introduction

Dans ce chapitre, nous nous appuyons sur les avancées scientifiques de la modélisation et de l'optimisation de l'adsorption multi-composants (ou compétitive) grâce à l'utilisation de l'intelligence artificielle (IA).

La modélisation et l'optimisation de l'adsorption mono-composante et multi-composants est un sujet de recherche important dans le domaine de la chimie et de la science des matériaux, et il y a eu de nombreuses études et publications sur cet axe dans les données du Web des Sciences au cours des deux dernières décennies (de 2000 jusqu'à juin 2023).

1.1 Etat de l'art statistique sur les travaux antérieurs

Les **figures 1.1** à **1.4** illustrent la progression du nombre de publications depuis l'an 2000 jusqu'à aujourd'hui pour l'adsorption mono-composante, l'adsorption multi-composants, la modélisation classique de l'adsorption compétitive et la modélisation de l'adsorption multi-composants par l'intelligence artificielle (IA), respectivement.

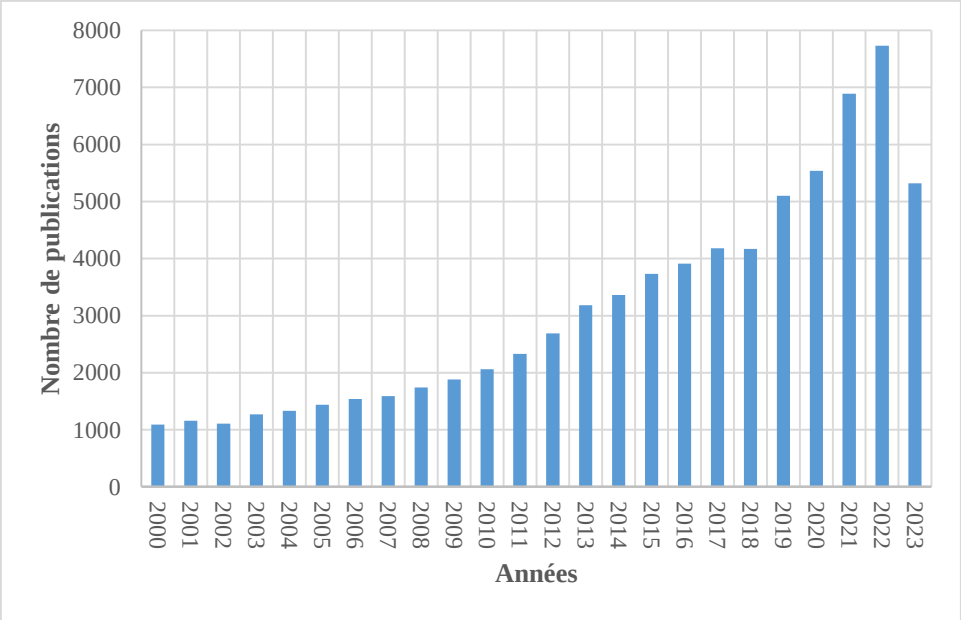


Figure 1.1 : Adsorption mono-composant, [Google scholar 2000-2023].

Il a été remarqué qu'il y a eu peu de recherches effectuées pendant cette période pour l'adsorption mono-composant vis-à-vis l'adsorption compétitive, car la première n'est pas une option intéressante pour l'application industrielle.

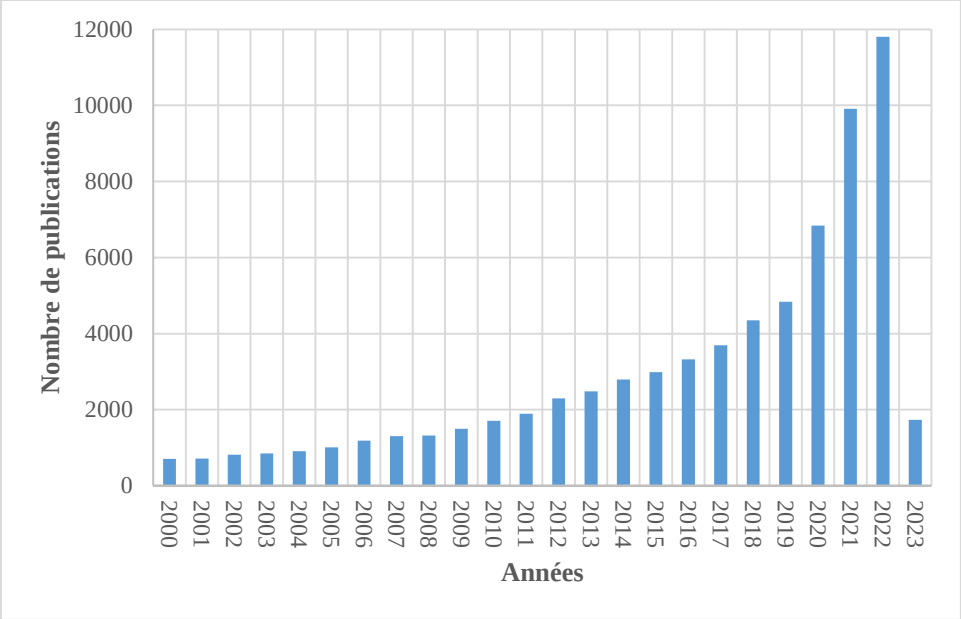


Figure 1.2 : Adsorption multi-composants, [Google scholar 2000-2023].

Il est observable que le nombre des travaux de recherches scientifiques consacrées à l'adsorption multi-composants augmente avec le temps, ce qui suggère son efficacité et son utilité dans l'industrie pour résoudre divers problèmes.

Il est noté aussi que le nombre de ces travaux augmente au cours de la période considérée, suggérant que l'adsorption utilisant des mélanges de plusieurs constituants est beaucoup plus courante que l'adsorption avec un seul constituant.

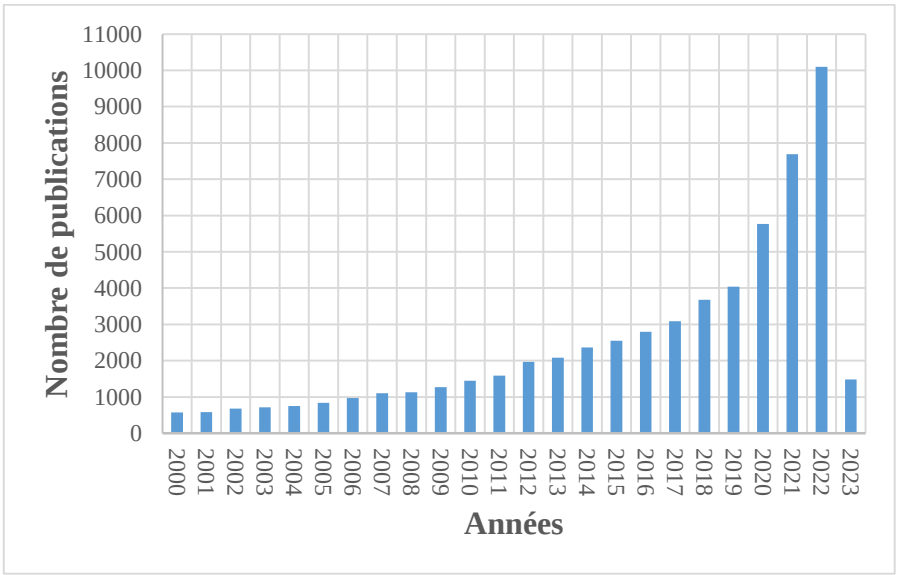


Figure 1.3 : Modélisation classique de l'adsorption compétitive, [Google scholar 2000-2023].

Au cours de la période étudiée, il est remarqué une augmentation significative du nombre de publications scientifiques, ce qui suggère une utilisation répandue de la modélisation classique pour prédire les résultats du processus d'adsorption impliquant des mélanges de plusieurs constituants.

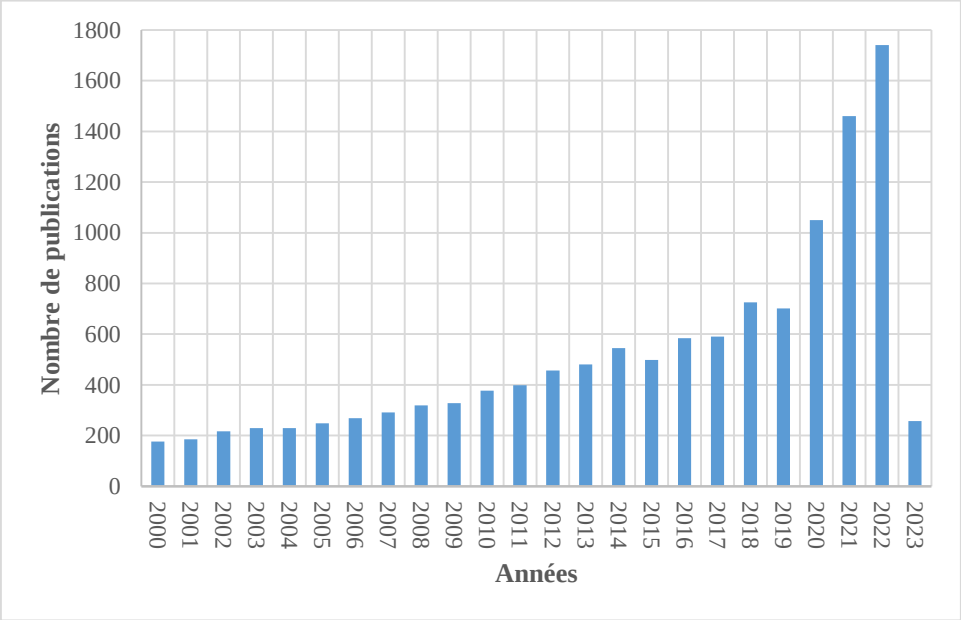


Figure 1.4 : Modélisation par l'intelligence artificielle (IA) de l'adsorption multi-composants, [Google scholar 2000-2023].

Il est noté que le nombre des travaux de recherches menés par les chercheurs augmente au cours de la période considérée, suggérant que la technique de l'intelligence artificielle (IA) joue un rôle crucial dans l'optimisation du processus d'adsorption multi-composants, bien qu'elle soit moins utilisée que les modèles d'optimisation classiques. En plus, ce qui indique que ces techniques attirent davantage l'attention dans l'étude du processus d'adsorption compétitive.

On s'intéresse uniquement pour la modélisation de l'adsorption multi-composants par l'intelligence artificielle (IA).

De façon très générale, les différents travaux relatifs à la modélisation de l'adsorption multi-composants (ou compétitive) en mélange binaire, ternaire et quaternaire de divers adsorbats (métaux lourds, colorants, composés organiques) par différents adsorbants (charbon actif, zéolite, argile, biomasse, bentonite,…) à l'aide d'un réseau de neurones artificiels (RNA) pour prédire l'évolution du processus.

1.2 Revue critique des travaux antérieurs

Voici quelques travaux antérieurs basés sur la modélisation et l'optimisation de l'adsorption multi-composants des différents polluants sur plusieurs adsorbats dans la période de 1996 jusqu'à 2023.

Zhang et al. 2023 ont effectué un résume de manière systématique via l'application de l'apprentissage automatique dans les adsorbants à base de bio-charbon, pour la première fois, en couvrant l'optimisation de la synthèse et la modélisation de l'adsorption des adsorbants à base de bio-charbon. Une présentation générale de l'apprentissage automatique est faite, y compris la prédiction du rendement en bio-charbon et des propriétés physico-chimiques, les conditions de synthèse optimales et les coûts économiques. L'application de l'apprentissage automatique dans l'adsorption des polluants par les bio-charbon est ensuite examinée, couvrant la prédiction de l'efficacité d'adsorption, l'optimisation des conditions expérimentales et la révélation du mécanisme d'adsorption. Des lignes directrices générales pour l'application de l'apprentissage automatique dans l'optimisation globale du bio-charbon, de la synthèse à l'adsorption, sont réalisées. (Zhang, Chen, et al., 2023)

Jeong et al. 2023 ont réalisé un grand nombre d'expériences dans laboratoire, qui ont été menées pour estimer la capacité d'adsorption du CO_2 et du CH_4 avec la caractérisation structurale des charbons et des schistes. Les propriétés hétérogènes des charbons et des schistes rendent difficile le développement d'un modèle de prédiction pour divers types de charbons et de schistes. Cette étude passe en revue l'état actuel de l'adsorption mono-composant du CO_2 et du CH_4 et de leur mélange (multi-composants) sur les charbons et les schistes. Des modèles thermodynamiques de l'adsorption sont analysés pour élucider la corrélation entre les paramètres thermodynamiques et les propriétés structurales des charbons et des schistes. Les applications des modèles d'apprentissage automatique (MLR), qui ont récemment suscité une attention significative, dans la prédiction de l'adsorption de CO_2/CH_4 sur les charbons et les schistes sont également passées en revue. Une combinaison du modèle thermodynamique et du modèle MLR, connue sous le nom de modèle hybride, est discutée pour développer un modèle

de prédiction universel pour l'adsorption de CO_2/CH_4 sur divers types de charbons et de schistes.(Jeong et al., 2023)

Zhang et al. 2023 ont fait une revue qui résume le flux de travail général de l'apprentissage automatique et les algorithmes couramment utilisés pour l'adsorption des polluants. Ensuite, les derniers progrès de l'apprentissage automatique pour l'adsorption des polluants ont été passés en revue du point de vue de la régulation globale du processus d'adsorption, y compris l'efficacité d'adsorption, les conditions de fonctionnement et le mécanisme d'adsorption. Des lignes directrices générales pour l'apprentissage automatique dans l'adsorption des polluants ont été présentées. Les problèmes existants et les perspectives futures de l'apprentissage automatique pour l'adsorption des polluants ont été exposés. En future, cette revue favorisera l'application de l'apprentissage automatique dans l'adsorption des polluants et améliorera l'interprétabilité de l'apprentissage automatique. (Zhang, Huang, et al., 2023)

Alam et al. 2022 ont résumé les différentes techniques d'IA et leurs applications dans le traitement de l'eau, en mettant l'accent sur l'adsorption des polluants. De nombreux modèles d'IA ont réussi à prédire les performances de différents adsorbants pour l'élimination de nombreux polluants de l'eau. Ils ont met également en évidence certains défis et lacunes de recherche concernent l'application de l'IA dans le traitement de l'eau. Malgré plusieurs avantages offerts par l'IA, certaines limitations entravent l'application généralisée de ces techniques dans les systèmes réels de traitement de l'eau. La disponibilité et la sélection des données, la faible reproductibilité, le manque de preuves d'applications dans le traitement réel de l'eau sont quelques-uns des principaux défis qui doivent être relevés. Des recommandations sont formulées pour garantir le succès des applications de l'IA dans les futures technologies liées à l'eau. (Alam et al., 2022)

Abbasi et al. 2022 ont donné en revue de manière systématique et critique trente-huit (38) articles dans le domaine d'application de modèles d'apprentissage pour la prédiction de l'efficacité du processus d'adsorption pour l'élimination des polluants en solutions aquatiques. Deux aspects, à savoir le processus d'adsorption et les caractéristiques des modèles d'ensemble,

sont discutés en détail. Le type d'adsorbat et d'adsorbant, ainsi que le mode de fonctionnement du système, sont explorés du premier point de vue. Le type de technique d'une base de données, le logiciel, les variables d'entrée et de sortie, la taille de l'ensemble de données et la méthode de partitionnement, ainsi que les mesures de performance, sont tous étudiés dans la section sur les ensembles des modèles. En se basant sur les aspects discutés et les résultats obtenus à partir des articles examinés, certaines perspectives de recherche future sont recommandées pour promouvoir les prochaines investigations, notamment le choix des variables d'entrée du modèle à partir des propriétés de l'adsorbat, des caractéristiques de l'adsorbant et des paramètres des conditions d'adsorption afin d'augmenter la fiabilité des prédictions du modèle, ainsi que l'augmentation de la taille de l'ensemble de données pour améliorer la précision des modèles d'ensemble. (Abbasi et al., 2022)

Pauletto et al. 2021 ont mené une étude visant à prédire l'adsorption binaire de la nimésulide et du paracétamol sur un charbon actif à l'aide d'un réseau neuronal artificiel (RNA). Cette étude a permis d'évaluer l'adsorption binaire des deux composés à l'aide d'un optimal, entraîné avec succès à l'aide de l'algorithme de rétro-propagation à régularisation bayésienne et structuré en trois couches cachées à cinq neurones. Ce modèle a permis de prédire de manière simultanée l'adsorption binaire du nimésulide (R = 0,9989) et du paracétamol (R = 0,9985). (P. S. Pauletto et al., 2021).

Kang et al. 2021 ont réalisé l'élimination du nitrate par un gel de silice mésoporeux quaternisé dans des solutions anioniques ternaires (nitrate, de phosphate et de sulfate), en utilisant une modélisation par réseau de neurones artificiels. Un modèle de réseau neuronal artificiel (RNA) a été développé sur la base des données expérimentales pour prédire les taux d'élimination des anions dans les expériences. Dans le développement du modèle, les concentrations de nitrate, de phosphate et de sulfate dans l'influent ont été choisies comme trois variables dans la couche d'entrée, tandis que les taux d'élimination du nitrate, du phosphate et du sulfate ont été choisis comme trois variables dans la couche de sortie. Le modèle RNA développé avec la topologie 3:8:9:3 (trois variables d'entrée, huit neurones dans la première couche cachée, neuf neurones dans la deuxième couche cachée, et trois variables de sortie) pouvait simultanément prédire les taux d'élimination des anions dans les expériences en colonne. (Kang et al., 2021).

Belhaj et al. 2021 ont modélisé et prédite l'adsorption binaire des tensioactifs individuels non ioniques et anioniques (poly-glucoside (APG) et carboxylate d'éther (AEC)) par réseau de neurones artificiels (RNA). Le modèle RNA adopté a montré un bon accord avec les données expérimentales et les valeurs d'adsorption simulées pour l'APG et l'AEC et qui ont montré une tendance décroissante avec l'augmentation de la température. La simulation de l'impact de l'adsorption binaire de tensioactifs peut fournir un avantage considérable en démontrant le comportement du système binaire avec moins de données expérimentales. L'utilisation de RNA pour une telle procédure de prédiction peut minimiser le temps expérimental, le coût d'exploitation et donner des prédictions réalisables par rapport à d'autres méthodes de calcul. (Belhaj et al., 2021).

Paola S. et al. 2020 ont fait une conception optimale d'un réseau de neurones artificiels (RNA) pour la modélisation simultanée de l'adsorption de cobalt (Co^{2+}), le bleu de méthylène (MB) et le nickel (Ni^{2+}) dans des systèmes : binaires et ternaires, à différentes températures. Un réseau de neurones artificiels optimaux a été développé pour prédire simultanément ces interactions synergiques et antagonistes. Différentes configurations RNA ont été testées en utilisant la concentration initiale de chaque adsorbat (0-650 $mg.L^{-1}$) et la température de la solution (298 à 328 K) comme des variables d'entrée. La structure optimale du réseau RNA, qui utilise 2 couches cachées avec 5 et 10 neurones, une fonction d'activation sigmoïde tangente (tansig) à la fois dans les couches cachées et de sortie, et la régulation bayésienne comme algorithme de rétro-propagation. Il a démontré une capacité appropriée à prédire simultanément la capacité d'adsorption pour chaque adsorbat (MSE < 0,0003 et R > 0,9995). (Paola S. Pauletto et al., 2020).

Ghalandari et al. 2020 ont réalisé prédiction et une modélisation de l'adsorption multi-composants de trois mélanges binaires CO_2/N_2, CH_4/N_2 et CO_2/CH_4 sur un charbon actif à travers d'un modèle RNA-GA (réseau de neurones artificiel- algorithme génétique) et un modèle de Sips. Les résultats du modèle RNA-GA indiquent que la performance du modèle pour prédire le comportement de l'adsorption de gaz est acceptable. Les données expérimentales de l'adsorption à l'équilibre ont été ajustées au modèle isotherme de Sips à différentes températures. Il a été constaté que le modèle de Sips est approprié pour prédire le

comportement de l'adsorption des gaz. Le modèle de Sips a été utilisé pour simuler l'adsorption, et les résultats de ce modèle ont été validés par des données expérimentales. (Ghalandari et al., 2020).

Gopinath et al. 2020 ont proposé un réseau de neurones artificiels (RNA) rapide, fiable et efficace pour les processus d'adsorption des systèmes binaires et ternaires impliquant des colorants et des molécules pharmaceutiques. L'intégration numérique répétée des équations différentielles partielles du modèle pendant l'estimation des paramètres à partir des données de la cinétique d'adsorption prend beaucoup de temps et n'est pas nécessaire pour l'approche proposée. Cette RNA a été entraînée par un petit nombre de simulations (HSDM) et des données expérimentales limitées de cinétique avec différentes combinaisons de valeurs de diffusivité de surface (DS). Les RNA ont été développées et testés par rapport aux données expérimentales de cinétique pour différents systèmes. Le RNA entraîné a été capable de capturer la cinétique qui a été rigoureusement prédite en utilisant HSDM. Une similarité de 98,6 % et 99,3 % a pu être obtenue entre les valeurs de DS estimées à l'aide du HSDM et des RNA pour les systèmes binaire et ternaire respectivement. De même, les données de la cinétique des lots ont été suivies de manière presque identique par Le RNA. Le temps de calcul requis pour ce nouveau réseau RNA par simulation a été réduit de façon spectaculaire et était environ 14 fois moins élevé, tandis que le temps total d'estimation des paramètres était environ 17 fois moins élevé que celui du HSDM. Le RNA développé pour estimer les paramètres peut également être utilisé en sens inverse pour simuler la cinétique d'adsorption par lots de plusieurs composants et suivre l'augmentation du pourcentage d'élimination des solutés avec le temps dans différentes conditions de traitement. Indépendamment du nombre de composants, les performances des RNA étaient cohérentes. Le rapport entre les neurones et leur nombre total dans les couches cachées a eu un impact significatif sur les performances. L'optimisation des paramètres du réseau est donc essentielle pour tirer parti des avantages des RNA. Ce travail démontre l'utilité de RNA dans des applications rigoureuses de cinétique d'adsorption multi-composants et présente un potentiel considérable dans l'optimisation et l'exploitation en temps réel des stations de traitement des eaux usées. (Gopinath et al., 2020)

Ye et al. 2019 ont optimisé la purification de l'hydrogène par adsorption dans un système teire : $H_2/CO_2/CO$ basée sur un réseau de neurones artificiels pour. Un modèle de réseau de neurones artificiels (RNA) est construit pour prédire les performances du système et optimiser les paramètres de fonctionnement. Les données de performance obtenues à partir du modèle Aspen sont utilisées pour former le modèle RNA. Le modèle RNA entraîné a une bonne capacité à prédire la performance de purification de l'hydrogène avec une précision raisonnable et une vitesse considérable. Sur la base du modèle RNA, une optimisation est réalisée pour trouver les paramètres optimums. Le travail réalisé montre qu'il est possible de trouver les paramètres de fonctionnement par l'algorithme d'optimisation basé sur le modèle RNA qui a été formé sur les données produites par le modèle Aspen. (Ye et al., 2019).

Khalil et al. 2019 ont illustré l'application du réseau neuronal artificiel pour l'adsorption dans le système binaire de l'ammonium (NH_4^+) et de l'oxygène (O_2) dans une solution aqueuse sur un charbon synthétisé à base de par la paille de riz comme bioadsorbant à faible coût. Les effets des paramètres d'entrée (temps de contact, pH, concentration initiale de NH_4^+ et d'O_2, concentation des adsorbants et température) sont étudiés afin d'optimiser les conditions pour une élimination maximale de NH_4^+ et d'O_2. Le réseau neuronal artificiel avec une seule couche cachée à dix nœuds, entraîné avec l'algorithme de Levenberg-Marquardt, a prédit avec précision l'efficacité de l'élimination de NH_4^+ et d'O_2 de la solution aqueuse. (Khalil et al., 2019).

Mendoza-Castillo et al. 2018 ont réalisé des traitement des avantages et des limites de modèle réseau de neurones artificiels (RNA) pour la modélisation et la prédiction de l'adsorption multi-composants des métaux lourds : cadmium, nickel, zinc et cuivre dans les systèmes binaires, teires et quateires sur le charbon qui a été utilisée comme étude de cas pour analyser les problèmes associés aux variables d'apprentissage, à la fonction d'activation et à l'architecture utilisées dans la modélisation des données d'adsorption multi-métalliques par RNA. Les résultats ont démontré qu'une seule variable d'apprentissage RNA appropriée était fondamentale pour un ajustement fiable et pour la prédiction du comportement d'adsorption complexe des mélanges métalliques. En particulier, l'utilisation de concentrations d'équilibre comme données de sortie pour l'entraînement du modèle RNA peut entraîner des prédictions

incorrectes de l'adsorption multi-métalliques sur le charbon. Ces inconvénients des modèles RNA pourraient prévaloir pour les systèmes multi-composants avec une adsorption antagoniste si des variables importantes, telles que les concentrations à l'équilibre ou les pourcentages d'élimination qui étaient utilisées dans la phase d'apprentissage. Ces résultats sont précieux et peuvent être utilisés comme lignes directrices pour l'application des modèles RNA dans la simulation et la prédiction des systèmes d'adsorption multi-composants impliqués dans le traitement et la purification de l'eau. (Mendoza-Castillo et al., 2018).

Moreno-Pérez et al. 2018 ont appliqué quatre modèles de réseaux neurones artificiels pour la corrélation et la prédiction de l'adsorption multi-composants ternaire et quaternaire des ions cadmium, nickel, zinc et cuivre sur un biochar. Les réseaux de neurones artificiels sont les suivants : Réseau de neurones à propagation arrière de type Feed forward, réseau de neurones à propagation arrière de type Feed forward avec délai distribué, réseau de neurones à propagation avant en cascade et réseau de neurones d'Elman qui ont été évalués et comparés où leurs limites et capacités. L'impact de l'architecture de ces modèles de modélisation, y compris les fonctions d'activation et les algorithmes d'apprentissage qui a été analysé à l'aide des analyses d'erreurs et de résidus dans différents système. Dans l'ensemble, les capacités d'adsorption pour ces métaux variaient de 0,16 à 4,46 et de 0,03 à 2,15 mmol/g dans les systèmes teires et quateires, respectivement, dans les conditions de fonctionnement testées. Les capacités d'adsorption les plus élevées ont été obtenues pour le cuivre dans les solutions multi-métalliques et elles étaient comprises entre 2,15 et 5,4 mmol/g. Les résultats ont montré que le réseau de neurones en cascade était le meilleur modèle pour la modélisation de l'adsorption multi-métalliques. Ce réseau de neurone a montré les erreurs de modélisation les plus faibles pour l'adsorption multi-composants. (Moreno-Pérez et al., 2018).

Gordillo-Ruíz et al. 2018 ont décrit une application d'un réseau neuronal pour ajuster et simuler l'adsorption d'ions nickel, cadmium et zinc dans des solutions bi-métalliques (nickel-cadmium, nickel-zinc et cadmium-zinc) en utilisant du charbon. Ce modèle de réseau a été conçu avec une architecture flexible et auto-adaptative, et a montré une vitesse d'apprentissage plus rapide que celle des approches de neurones artificiels traditionnelles. Les résultats ont indiqué que ce modèle de réseau était fiable pour représenter le comportement de forte

asymétrie des profils de concentration en mélange bimétalliques, avec une précision raisonnable. (Gordillo-Ruíz et al., 2018).

Dashamiri et al. 2017 ont optimisé l'adsorption compétitive ternaire des colorants, éosine jaune (EY), bleu de méthylène (MB) et rouge de phénol (PR) sur du charbon actif chargé de nanoparticules de $Cu(OH)_2$-NP-AC, en solution aqueuse en utilisant la méthodologie de surface de réponse (RSM). Une bonne corrélation (avec $R^2 > 0.940$) entre le modèle statistique et l'expérience a été trouvée pour l'élimination des colorants des eaux usées aqueuses en utilisant l'adsorbant. L'élimination optimale (99,20% ± 1,48) a ainsi été obtenue à pH 6,0, masse de l'adsorbant 20 mg et concentration initiale de colorant à 5 $mg.L^{-1}$ pour MB et EY et 12,5 $mg.L^{-1}$ pour PR. Les isothermes d'adsorption et les facteurs de séparation ont montré que l'adsorbant présente une grande sélectivité envers un colorant dans un système à trois composants avec un ordre d'affinité de PR > MB > EY. (Dashamiri et al., 2017).

Chetna Dhand et al. 2017 ont étudier l'adsorption compétitive du Bleu de Méthylène(MB) et du vert de méthylène (MG) dans des mélanges binaires par à l'aide d'un réseau de neurones artificiels. Les pourcentages d'élimination des colorants en tant que réponses ont été modélisés et optimisés selon la méthodologie de la surface de réponse et le PCA-RNA. Les valeurs optimales des concentrations initiales de MG et MB, de la masse de MWCNT (g) et du temps de sonication (min) ont été trouvées à 14,6 et 10 $mg.L^{-1}$, 0,025 g et 2,6 min, respectivement, pour lesquelles les pourcentages d'élimination des colorants étaient maximaum. (Chetna Dhand, a Molamma P. Prabhakaran, b Roger W. Beuerman, ac R. Lakshminarayanan n.d. 2015).

Reynel-Avila et al. 2015 ont analysé et modélisé l'adsorption ternaire des métaux lourds : cadmium (Cd^{2+}), nickel (Ni^{2+}) et plomb (Pb^{2+}) des solutions aqueuses sur les plumes de poulet à l'aide de réseau de neurones artificiels (RNA). Le modèle RNA offre une meilleure performance et plus d'avantages pour la modélisation de l'adsorption des métaux lourds dans des solutions multi-composants que ceux obtenus en utilisant les équations isothermes multi-composants de type Langmuir et Sips. Ce modèle RNA est capable de modéliser et de prédire

la performance du sorbant à différentes conditions de pH. L'application du modèles RNA est prometteuse pour l'analyse des données et la modélisation de l'élimination des polluants à plusieurs composants pour le traitement des eaux usées. (Reynel-Avila et al., 2015).

Hajati et al. 2015 ont utilisé un modèle de réseau neuronal artificiel pour optimiser l'élimination simultanée des colorants Acide Jaune 41 (AY41) et Jaune du Soleil (SY) dans leurs solutions binaires à l'aide de charbon actif chargé de nanoparticules de SnO_2 (SnO_2-NP-AC). Les effets des variables telles que le temps de contact, le dosage de l'adsorbant, le pH, la concentration en AY41 et la concentration en SY sur les réponses, comme les pourcentages d'élimination des colorants binaires, ont été examinés et optimisés à l'aide du réseau de neurones artificiels. Les valeurs optimales ont été obtenues pour un temps de contact de 17,9 minutes, un dosage de 0,024 g, un pH de 3,1, et des concentrations de 15,9 mg L^{-1} et 18,7 mg L^{-1} pour AY41 et SY, respectivement. (Hajati et al., 2015)

Zeinali et al. 2014 ont développé un modèle de réseau de neurones artificiels pour optimiser l'adsorption concurrente du bleu de méthylène (MB) et du vert brillant (BG) dans un mélange binaire sur des nanoparticules d'oxyde de graphite (GO). Le modèle RNA à trois couches a été entraîné à l'aide de l'algorithme de rétro-propagation de Levenberg-Marquardt et a permis de prédire les concentrations des deux colorants dans les mélanges. La couche cachée était équipée de 20 neurones et utilisait une fonction de transfert sigmoïde tangente (tansig), tandis que la couche de sortie utilisait une fonction de transfert linéaire (purelin). (Zeinali et al., 2014).

Wu et al. 2014 ont effectué des réseaux de neurones artificiels (RNA), qui sont connus pour leurs capacités d'ajustement non linéaire, pour prédire les isothermes d'adsorption compétitive du 2-phényléthanol (PE) et du 3-phénylpropanol (PP) dans un système binaire. Contrairement aux modèles mathématiques théoriques, les résultats de le RNA se présentent sous forme de cartographie de données. Les chercheurs ont utilisé un réseau 2-6-2 pour établir l'architecture de le RNA après un entraînement avec un ensemble de données expérimentales. Les résultats ont montré que le RNA avait un excellent potentiel pour la prédiction des isothermes d'adsorption en chromatographie non linéaire. (Wu et al., 2014).

Abdi et al. 2014 ont développé un modèle fiable et prédictif, à savoir la machine à vecteurs de support des moindres carrés (LS-SVM) pour évaluer et prédire l'efficacité de l'élimination compétitive teire des colorants rouge 31 (R31), vert 6 (G6) et Acide Bleu (AB92). Quatre modèles LS-SVM ont été développés et testés en utilisant plus de 630 séries de données expérimentales. Ces données comprennent le type d'adsorbat, le dosage de l'adsorbant, la concentration initiale de colorant, le sel, le temps d'absorption et l'efficacité d'élimination des colorant R31, G6 et AB92 ont été utilisés comme des modèles de colorants. Les résultats montrent que le modèle développé est plus précis et fiable avec un écart relatif absolu moyen de 0,877%, 0,581% et 0,978% pour le système ternaire, respectivement, et des coefficients de corrélation proches de l'unité pour tous les systèmes. De plus, il est démontré que la méthode proposée est capable de simuler la tendance physique réelle de l'efficacité d'élimination des colorants avec la variation du dosage de l'adsorbant et de la concentration initiale du colorant dans le système teire. Le modèle développé pourrait être fiable pour la prédiction de l'efficacité de l'élimination des colorants dans son domaine d'application. (Abdi et al., 2014).

Wilson et al. 2013 ont utilisé un réseau de neurones artificiels (RNA) pour surveiller de manière simultanée et automatisée les processus de biosorption multi-métalliques des mélanges binaires (Cu^{2+}/ Pb^{2+}) et (Cu^{2+}/ Zn^{2+}) ainsi que des mélanges ternaires (Cu^{2+}/ Pb^{2+}/ Zn^{2+}) et (Cu^{2+}/ Zn^{2+}/ Cd^{2+}) en mesurant la libération de Cu^{2+} dans la solution d'effluent. Le modèle RNA a montré une bonne correspondance entre l'adsorption des métaux lourds et les paramètres d'adsorption modélisés.(Wilson et al., 2013).

Bello et al. 2013 ont réalisé un réseau de neurones à ondelettes (WNN) pour éliminer la couleur des effluents de moulins à huile de palme (POME) en utilisant une résine à base d'anions. Pour modéliser ce processus dans un système multi-composants, un modèle de WNN a été développé. Les résultats ont montré que le modèle WNN était plus adapté pour décrire le phénomène d'adsorption que les modèles couramment utilisés.(Bello et al., 2013).

Aghav et al. 2011 on modélisé l'adsorption compétitive du phénol et du résorcinol dans l'eau à l'aide de quelques adsorbants carbonés à l'aide d'un réseau de neurones artificiels (RNA). Cette étude illustre l'application d'un RNA pour la prédiction des performances d'adsorption

compétitive du phénol et du résorcinol à partir d'une solution aqueuse par des adsorbants carbonés conventionnels et à faible coût, tels que le charbon actif (AC), le charbon de bois (WC) et la cendre de balle de riz (RHA). Le réseau neuronal à trois couches avec l'algorithme de propagation arrière dans l'environnement MATLAB® a été utilisé pour l'estimation des efficacités d'élimination du phénol et du résorcinol dans un environnement d'eau bi-soluté basé sur 29 bases des donnée des résultats d'études dans laboratoire. Les paramètres d'entrée utilisés pour la formation du réseau neuronal comprennent la quantité de l'adsorbant (g/L), les concentrations initiales de phénol (mg/L) et de résorcinol (mg/L), le temps de contact (h) et le pH. Les efficacités d'élimination du phénol et du résorcinol ont été considérées comme une sortie du RNA. Les performances des modèles RNA développés ont également été mesurées à l'aide de paramètres statistiques, tels que l'erreur moyenne, l'erreur quadratique moyenne, l'erreur quadratique moyenne et la régression linéaire. La comparaison des efficacités d'élimination des polluants à l'aide du modèle RNA et des résultats expérimentaux a montré que la modélisation RNA dans l'adsorption compétitive des composés phénoliques corroborait raisonnablement les résultats expérimentaux. (Aghav et al., 2011).

Faur et al. 2008 ont réalisé une approche d'une boîte noire pour modéliser l'adsorption compétitive par un charbon actif des pesticides présents dans les surface des eaux à l'aide d'un réseau de neurones statiques et récurrents en utlisant une base de référence. Ces réseaux de neurones statiques et récurrents fournissent à la fois des coefficients de détermination élevés ($R^2 > 0,990$) et de faibles erreurs de modélisation quadratiques moyennes ($RMSE < 0,035$ alors que la déviation standard des données est égale à 2,9%). pour la prédiction du processus. Pour modéliser la zone ($C/C_0 < 0,1$), le réseau neuronal récurrent, avec un nombre plus faible de paramètres, est plus précis que le réseau à action directe, car le processus à modéliser est dynamique. (Faur et al., 2008).

En utilisant un modèle de réseau de neurones artificiels (RNA), **Fagundes-Klen et al. 2007** ont étudié l'équilibre de l'adsorption du mélange binaire des ions cadmium-zinc (Cd^{2+}-Zn^{2+}) par la biomasse de l'espèce Sargassum Filipendula. Les données expérimentales ont été ajustées à l'équilibre à l'aide de la technique RNA, qui a impliqué des tests de différents types

d'architecture de réseau en variant le nombre de neurones, la couche d'entrée et la couche cachée. Les concentrations d'équilibre de la phase fluide ont été utilisées comme variables d'entrée et les concentrations d'équilibre du biosorbant ont été utilisées comme variables de sortie. Les résultats de simulation ont démontré que la technique RNA appliquée a offert un meilleur ajustement des données d'équilibre du système binaire que les modèles conventionnels d'isotherme de biosorption.(Fagundes-Klen et al., 2007).

K. H. Chu et al. 2006 ont utilisé une modélisation prédictive des données de l'adsorption compétitive à l'équilibre du cuivre et du cadmium par un biosorbant microbien. Une comparaison des approches de modélisation par la régression et par un réseau de neurones pour prédire le procssus a été effectué. L'approche par la régression est basée sur l'ajustement de modèles isothermes de type Langmuir modifié aux données expérimentales. Les réseaux de neurones sont des estimateurs statistiques non paramétriques des corrélations capables d'identifier les modèles utilisant des donnée d'entrées et de sorties. Ces résultats montrent que l'approche du réseau de neurona surpasse la modélisation traditionnelle basée sur la régression dans la corrélation et la prédiction de l'absorption simultanée. Le réseau neuronal est capable de prédire avec précision même lorsqu'il dispose de quantités limitées de données pour l'apprentissage. (Predictive modeling of competitive biosorption equilibrium data 2006).

L'utilisation d'un réseau de neurones artificiels a permis à **Ensafi et al. 2006** ont étudié l'adsorption compétitive du cuivre, du plomb et du cadmium dans des systèmes binaires (Pb^{2+}-Cd^{2+}) et ternaires (Cu^{2+}-Pb^{2+}-Cd^{2+}). Le réseau a été configuré avec trois neurones dans la couche de sortie pour permettre la détermination simultanée des trois éléments. Le modèle ainsi créé a réussi à prédire avec précision les concentrations des éléments dans les plages de 1,0 à 50,0 $ng.mL^{-1}$ pour le Cu^{2+}, de 5,0 à 200,0 $ng.mL^{-1}$ pour le Pb^{2+} et de 10,0 à 200,0 $ng.mL^{-1}$ pour le Cd^{2+}. (Ensafi et al., 2006).

K. H. Chu 2003 a prédit et corrélé les équilibres d'adsosorption dans un système métallique binaire de deux métaux de Fe(III) et de Cr(VI) par la micro-algue Chlorella vulgaris à l'aide d'un réseau neuronal à l'aide d'un réseau de neurones. Il a été démontré que l'approche du réseau

de neurones était significativement plus précise que l'approche de modélisation traditionnelle basée sur des modèles de type Langmuir. Pour évaluer la capacité de prédiction du modèle de réseau de neurones, le réseau a été entraîné en utilisant une base de données disponibles. Le réseau neuronal convenablement entraîné s'est avéré capable de prédire des données fraîches n'appartenant pas à des données d'entraînement. Les données de l'apprentissage doivent être sélectionnées avec soin pour obtenir les meilleurs résultats. (K. H. Chu 2003).

En utilisant une régression linéaire multiple (MLR), **Fondo et al. 2003** ont prédit et modélisé l'adsorption compétitive du cuivre (Cu^{2+}) et du zinc (Zn^{2+}) en solution dans les sols. Plus de 30 caractéristiques de sol différentes ont été classées par ordre de priorité à l'aide de la MLR, ce qui a permis d'établir des équations qui peuvent prédire le partage du Cu^{2+} et du Zn^{2+}. Les résultats de la prédiction sont cohérents avec les résultats des études d'absorption expérimentales. (Fondo & Maria, 2003).

Sundaram 1999 a créé un réseau de neurones pour les processus d'adsorption binaire et de séparation du monoxyde de carbone et de l'hydrogène à variation de pression. Un réseau neuronal à trois couches est utilisé pour analyser la relation entre les variables d'entrée et de sortie des procédés d'adsorption. Le réseau est entraîné en utilisant une version modifiée de l'algorithme de rétropropagation (BP). La modification consiste à minimiser l'erreur correspondant à un ensemble réordonné d'entrées. Les entrées sont organisées en fonction des erreurs (par exemple, de la plus grande à la plus petite), qu'elles génèrent à la sortie du réseau. L'algorithme d'apprentissage BP est ensuite mis en œuvre sur la mesure d'entrée-sortie qui a donné la plus grande erreur. Ce réseau démontre l'efficacité du réordonnancement après des passages uniques et multiples dans le test d'apprentissage. Dans ces deux applications, une seule époque utilisant le réordonnancement est discutée. (Sundaram, 1999).

Detrait et al. 1998 ont mené une étude sur l'adsorption compétitive de différentes protéines adhésives telles que la fibronectine ou le collagène, et des molécules anti-adhésives telles que le Pluronic F68 ou l'albumine. Ce processus est important pour la formation des réseaux de neurones et peut être facilité par des modèles de culture cellulaire capables d'orienter la

croissance cellulaire et de créer un modèle cellulaire bien défini. Les facteurs d'attachement ont été adsorbés sur des bandes de plasma d'oxygène, tandis que l'adsorption des molécules anti-adhésives sur les zones non traitées les plus hydrophobes a empêché l'adhésion et la croissance cellulaire. (Detrait et al., 1998).

Yang et al. 1996 ont employé un modèle de réseau neuronal simple pour prédire l'adsorption de l'acétone dans trois mélanges binaires (acétone/isobutyl de méthyl cétone (MIK), acétone/propionaldéhyde (PA) et acétone/saccharose) sur du charbon actif granulaire (GAC). Le réseau neuronal a été formé de manière efficace en utilisant principalement des données d'adsorption de soluté unique, et seul un petit nombre de bases de données (<10) ont été nécessaires pour obtenir une performance efficace. Une fois entraîné, le réseau a été capable de prédire les adsorptions de solutés binaires, y compris pour les systèmes non-idéaux. (Yang et al., 1996).

Conclusion

Il est clair que le nombre d'enquêtes signalées dans ce domaine a progressivement augmenté au cours des dernières années (2000-2023). La modélisation de l'adsorption mono-composant et compétitive (deux, trois et quatre constituants) des plusieurs adsorbats tels que : métaux lourds, composés organiques et colorants par différents adsorbants (charbon actif, zéolite, bentonite, argiles, biomasses, etc.) à l'aide de plusieurs modèles d'optimisation et de simulation tels que : RNA et SVM, par l'utilisation des algorithmes d'apprentissage adéquats à travers un logiciel MATLAB®, devient de plus en plus populaire auprès des chercheurs travaillant dans ce domaine. Donc, il est préférable d'établir un modèle qui fait la prévention des résultats avec des erreurs minimales.

Références Bibliographiques

Abbasi, E., Alavi Moghaddam, M. R., & Kowsari, E. (2022). A systematic and critical review on development of machine learning based-ensemble models for prediction of adsorption process efficiency. *Journal of Cleaner Production*, *379*(P1), 134588. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.134588

Abdi, J., Bastani, D., Abdi, J., Mahmoodi, N. M., Shokrollahi, A., & Mohammadi, A. H. (2014). Assessment of competitive dye removal using a reliable method. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, *2*(3), 1672–1683. https://doi.org/10.1016/j.jece.2014.06.002

Aghav, R. M., Kumar, S., & Mukherjee, S. N. (2011). Artificial neural network modeling in competitive adsorption of phenol and resorcinol from water environment using some carbonaceous adsorbents. *Journal of Hazardous Materials*, *188*(1–3), 67–77. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2011.01.067

Alam, G., Ihsanullah, I., Naushad, M., & Sillanpää, M. (2022). Applications of artificial intelligence in water treatment for optimization and automation of adsorption processes: Recent advances and prospects. *Chemical Engineering Journal*, *427*(March 2021). https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130011

Belhaj, A. F., Elraies, K. A., Alnarabiji, M. S., Abdul Kareem, F. A., Shuhli, J. A., Mahmood, S. M., & Belhaj, H. (2021). Experimental investigation, binary modelling and artificial neural network prediction of surfactant adsorption for enhanced oil recovery application. *Chemical Engineering Journal*, *406*, 127081. https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127081

Bello, M. M., Nourouzi, M. M., Abdullah, L. C., Choong, T. S. Y., Koay, Y. S., & Keshani, S. (2013). POME is treated for removal of color from biologically treated POME in fixed bed column: Applying wavelet neural network (WNN). *Journal of Hazardous Materials*, *262*, 106–113. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2013.06.053

Chetna Dhand, a Molamma P. Prabhakaran, b Roger W. Beuerman, ac R. Lakshminarayanan, ac N. D. and S. R. (n.d.). RSC Advances. *RSC Advances*.

Chu, K. H. (2003). *Prediction of two-metal biosorption equilibria using a neural network*. *3*(1), 119–127.

Dashamiri, S., Ghaedi, M., Asfaram, A., Zare, F., & Wang, S. (2017). Multi-response optimization of ultrasound assisted competitive adsorption of dyes onto Cu (OH)2-nanoparticle loaded activated carbon: Central composite design. *Ultrasonics Sonochemistry*, *34*, 343–353. https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2016.06.007

Detrait, E., Lhoest, J. B., Knoops, B., Bertrand, P., & Van Den Bosch De Aguilar, P. (1998). Orientation of cell adhesion and growth on patterned heterogeneous polystyrene surface. *Journal of Neuroscience Methods*, *84*(1–2), 193–204. https://doi.org/10.1016/S0165-0270(98)00114-9

Ensafi, A. A., Khayamian, T., Benvidi, A., & Mirmomtaz, E. (2006). Simultaneous determination of copper, lead and cadmium by cathodic adsorptive stripping voltammetry using artificial neural network. *Analytica Chimica Acta*, *561*(1–2), 225–232. https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.01.015

Fagundes-Klen, M. R., Ferri, P., Martins, T. D., Tavares, C. R. G., & Silva, E. A. (2007). Equilibrium study of the binary mixture of cadmium-zinc ions biosorption by the Sargassum filipendula species using adsorption isotherms models and neural network. *Biochemical Engineering Journal*, *34*(2), 136–146. https://doi.org/10.1016/j.bej.2006.11.023

Faur, C., Cougnaud, A., Dreyfus, G., & Le Cloirec, P. (2008). Modelling the breakthrough of activated carbon filters by pesticides in surface waters with static and recurrent neural networks. *Chemical Engineering Journal*, *145*(1), 7–15. https://doi.org/10.1016/j.cej.2008.02.015

Fondo, G. D. E. L., & Maria, C. D. E. J. P. the bioavailability of copper and zinc in soils: M. the partitioning of potentially bioavailable copper and zinc from soil solid to soil solution. (2003). *Guía del fondo convento de jesus maria Predicting the bioavailability of copper and zinc in soils: Modeling the partitioning of potentially bioavailable copper and zinc from soil solid to soil solution*. *22*(6), 1380–1386.

Ghalandari, V., Hashemipour, H., & Bagheri, H. (2020). Experimental and modeling investigation of adsorption equilibrium of CH4, CO2, and N2 on activated carbon and prediction of multi-component adsorption equilibrium. *Fluid Phase Equilibria*, *508*, 112433. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.112433

Gopinath, A., Retnam, B. G., Muthukkumaran, A., & Aravamudan, K. (2020). Swift, versatile and a rigorous kinetic model based artificial neural network surrogate for single and multicomponent batch adsorption processes. *Journal of Molecular Liquids*, *297*, 111888. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111888

Gordillo-Ruíz, F. A., Sánchez-Ruíz, F. J., Mendoza-Castillo, D. I., Reynel-Ávila, H. E., & Bonilla-Petriciolet, A. (2018). Dynamic fuzzy neural network for simulating the fixed-bed adsorption of cadmium, nickel, and zinc on bone char. *International Journal of Environmental Science and Technology*, *15*(5), 915–926. https://doi.org/10.1007/s13762-017-1456-2

Hajati, S., Ghaedi, M., Mahmoudi, Z., & Sahraei, R. (2015). SnO2 nanoparticle-loaded activated carbon for simultaneous removal of Acid Yellow 41 and Sunset Yellow; Derivative spectrophotometric, artificial neural network and optimization approach. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, *150*, 1002–1012. https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.06.008

Jeong, S. R., Park, J. H., Lee, J. H., Jeon, P. R., & Lee, C. H. (2023). Review of the adsorption equilibria of CO2, CH4, and their mixture on coals and shales at high pressures for enhanced CH4 recovery and CO2 sequestration. *Fluid Phase Equilibria*, *564*(August 2022), 113591. https://doi.org/10.1016/j.fluid.2022.113591

Kang, J. K., Lee, S. C., Jang, H. Y., Lee, C. G., & Kim, S. B. (2021). Nitrate removal by quaternized mesoporous silica gel in ternary anion solutions: Flow-through column experiments and artificial neural network modeling. *Journal of Water Process Engineering*, *41*(March), 102067. https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102067

Khalil, A. S., Smolyanichenko, A. S., Vilson, E. V., Shchutskaya, E. E., Tsurikova, E. G., & Khalil, A. S. (2019). *Modeling of Ammonium and COD Adsorption in Aqueous Solutions Using an Artificial Neural Network*. *1*(Isees), 212–218. https://doi.org/10.2991/isees-19.2019.42

Mendoza-Castillo, D. I., Reynel-Ávila, H. E., Sánchez-Ruiz, F. J., Trejo-Valencia, R., Jaime-Leal, J. E., & Bonilla-Petriciolet, A. (2018). Insights and pitfalls of artificial neural network modeling of competitive multi-metallic adsorption data. *Journal of Molecular Liquids*, *251*, 15–27. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.12.030

Moreno-Pérez, J., Bonilla-Petriciolet, A., Mendoza-Castillo, D. I., Reynel-Ávila, H. E., Verde-Gómez, Y., & Trejo-Valencia, R. (2018). Artificial neural network-based surrogate modeling of multi-component dynamic adsorption of heavy metals with a biochar. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, *6*(4), 5389–5400. https://doi.org/10.1016/j.jece.2018.08.038

Pauletto, P. S., Lütke, S. F., Dotto, G. L., & Salau, N. P. G. (2021). Forecasting the multicomponent adsorption of nimesulide and paracetamol through artificial neural network. *Chemical Engineering Journal*, *412*, 127527. https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127527

Pauletto, Paola S., Dotto, G. L., & Salau, N. P. G. (2020). Optimal artificial neural network design for simultaneous modeling of multicomponent adsorption. *Journal of Molecular Liquids*, *320*, 114418. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114418

Predictive modeling of competitive biosorption equilibrium data. (n.d.).

Reynel-Avila, H. E., Bonilla-Petriciolet, A., & de la Rosa, G. (2015). Analysis and modeling of multicomponent sorption of heavy metals on chicken feathers using Taguchi's experimental designs and artificial neural networks. *Desalination and Water Treatment*, *55*(7), 1885–1899. https://doi.org/10.1080/19443994.2014.937762

Sundaram, N. (1999). Training neural networks for pressure swing adsorption processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *38*(11), 4449–4457. https://doi.org/10.1021/ie9901731

Wilson, D., Del Valle, M., Alegret, S., Valderrama, C., & Florido, A. (2013). Simultaneous and automated monitoring of the multimetal biosorption processes by potentiometric sensor array and artificial neural network. *Talanta*, *114*, 17–24. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2013.03.066

Wu, X., Wang, S., Zhang, R., & Gao, Z. (2014). Prediction of the competitive adsorption isotherms of 2-phenylethanol and 3-phenylpropanol by artificial neural networks. *Journal of Chromatography A*, *1332*, 14–20. https://doi.org/10.1016/j.chroma.2014.01.049

Yang, M., Hubble, J., Lockett, A. D., & Rathbone, R. R. (1996). A neural network model for prediction of binary adsorption using single solute and limited binary solute adsorption data. *Separation Science and Technology*, *31*(9), 1259–1265. https://doi.org/10.1080/01496399608006949

Ye, F., Ma, S., Tong, L., Xiao, J., Bénard, P., & Chahine, R. (2019). Artificial neural network based optimization for hydrogen purification performance of pressure swing adsorption. *International Journal of Hydrogen Energy*, 5334–5344. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.104

Zeinali, N., Ghaedi, M., & Shafie, G. (2014). Competitive adsorption of methylene blue and brilliant green onto graphite oxide nano particle following: Derivative spectrophotometric and principal component-artificial neural network model methods for their simultaneous determination. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, *20*(5), 3550–3558. https://doi.org/10.1016/j.jiec.2013.12.048

Zhang, W., Chen, R., Li, J., Huang, T., Wu, B., Ma, J., Wen, Q., Tan, J., & Huang, W. (2023). Synthesis optimization and adsorption modeling of biochar for pollutant removal via machine learning. *Biochar*, *5*(1). https://doi.org/10.1007/s42773-023-00225-x

Zhang, W., Huang, W., Tan, J., Huang, D., Ma, J., & Wu, B. (2023). Modeling, optimization and understanding of adsorption process for pollutant removal via machine learning: Recent progress and future perspectives. *Chemosphere*, *311*(September 2022). https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.137044

CHAPITRE II

GÉNÉRALITÉ SUR L'ADSORPTION STATIQUE ET DYNAMIQUE

Introduction

Le processus d'adsorption peut être classé en deux catégories principales en fonction de ses applications industrielles, à savoir l'adsorption mono-constituant (pour une seule espèce) et l'adsorption multi-composants (pour des mélanges binaires, ternaires ou quaternaires) via statique et dynamique en utilisant des modèles classiques (non modifiés, modifiés et généralisés) et dynamique par l'intelligence artificielle (IA).

2.1 Adsorption mono-composant (à une seule espèce)

2.1.1 Définition

L'adsorption mono-composant est un processus dans lequel un seul composé est adsorbé sur une surface d'adsorption, en l'absence d'autres composés en solution qui pourraient concurrencer pour les sites d'adsorption.

Une adsorption mono-composant se produit lorsqu'un seul composé est adsorbé à la surface d'un matériau d'adsorption. Ce processus est généralement utilisé pour évaluer les propriétés d'adsorption des matériaux, telles que la capacité d'adsorption, la sélectivité et la cinétique d'adsorption. (Amrhar et al., 2021)**.**

Les processus d'adsorption ont leur propre langue vernaculaire. Par conséquent, une bonne compréhension des termes techniques utilisés dans la technologie d'adsorption peut empêcher l'introduction de plusieurs ambiguïtés et divergences inattendues. Certains termes d'adsorption de base sont résumés dans figure 2.1 (Nguyen et al., 2017).

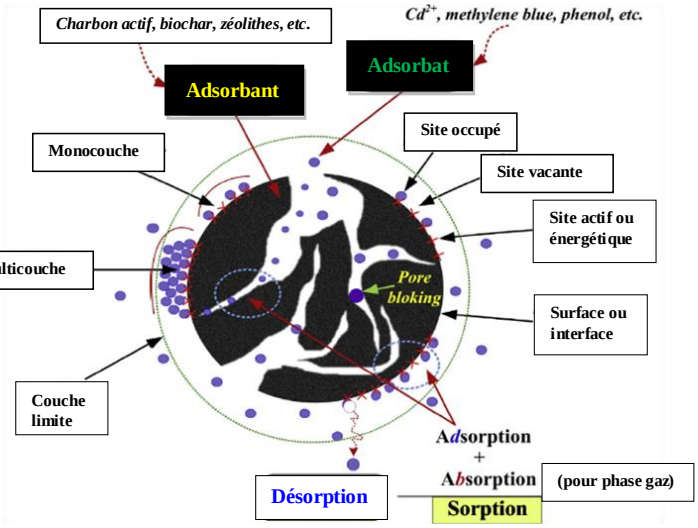


Figure 2.1 : Quelques termes de base utilisés dans la science et la technologie de l'adsorption (Nguyen et al., 2017).

2.1.2 Cinétique d'adsorption

La connaissance de la cinétique d'adsorption permet l'étude de la vitesse de l'adsorption, de déterminer si elle est rapide ou bien lente. La cinétique d'adsorption est une courbe reliant le temps à la quantité d'adsorbat (Masson, 2017). L'adsorption se produit essentiellement en étapes suivantes (de FLORA, 1989) :

- Diffusion de l'adsorbât de la phase liquide externe vers la phase localisée au voisinage de la surface de l'adsorbant ;
- Migration extragranulaire de la matière (transport du soluté à travers le film liquide vers la surface des grains) ;
- Transfert intragranulaire de la matière (transfert de la matière dans la structure poreuse de la surface extérieure des graines vers les sites actifs) ;
- Réaction d'adsorption au contact des sites actifs, une fois adsorbée, la molécule est considérée fixée.

Un matériau (adsorbant) est représenté sur la figure 2.2 avec les différents domaines dans lesquels les molécules organiques ou inorganiques peuvent être trouvées et qui sont capables de rentrer en interaction avec le solide.

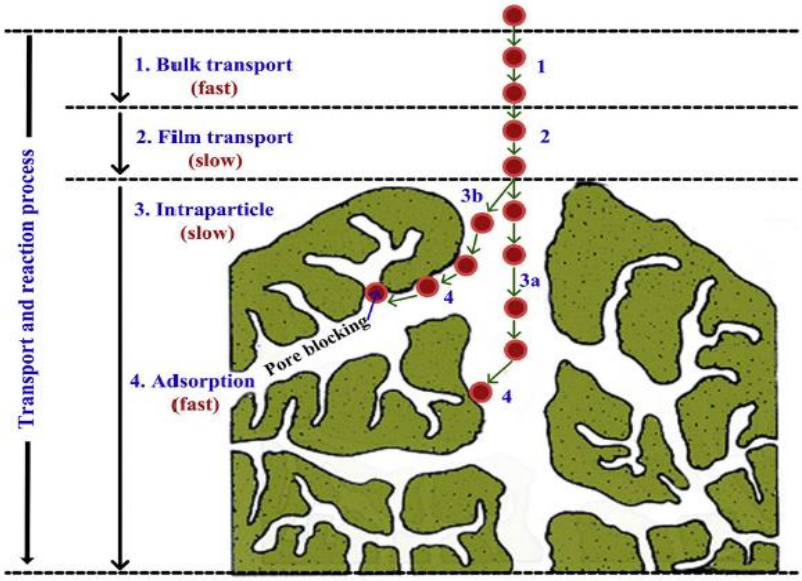


Figure 2.2 : Processus d'adsorption typique. Adapté avec permission (Nguyen et al., 2017).

2.1.3 Mécanisme de transfert de masse

Le mécanisme de transfert de masse pour l'adsorption mono-constituant dépend des interactions entre l'adsorbant et l'adsorbât, ainsi que des conditions de l'environnement, telles que la

température et la pression. En général, il existe deux types de mécanismes de transfert de masse qui sont souvent observés dans les processus d'adsorption mono-composant : le transfert de masse en phase liquide et le transfert de masse en phase gazeuse.

Dans le cas du transfert de masse en phase liquide, le mécanisme de transfert de masse est contrôlé par la diffusion de l'adsorbât à travers une couche limite de liquide qui entoure la surface de l'adsorbant. Le taux de transfert de masse est alors régulé par la vitesse de diffusion de l'adsorbât à travers cette couche limite, ainsi que par la surface disponible pour l'adsorption.

Dans le cas du transfert de masse en phase gazeuse, le mécanisme de transfert de masse est contrôlé par la diffusion de l'adsorbât à travers une couche limite de gaz qui entoure la surface de l'adsorbant. Le taux de transfert de masse est alors régulé par la vitesse de diffusion de l'adsorbat à travers cette couche limite, ainsi que par la surface disponible pour l'adsorption.

Une fois adsorbé, le soluté est sujet à des processus de désorption, qui peuvent être influencés par des facteurs tels que la force d'interaction entre le soluté et l'adsorbant, la concentration en soluté, la température et le pH de la solution. Le processus de désorption est également contrôlé par la diffusion, qui transporte les molécules adsorbées à travers la couche limite pour qu'elles puissent être libérées dans la phase liquide.

Il convient de noter que le mécanisme de transfert de masse pour l'adsorption mono-composant peut varier en fonction de nombreux facteurs, tels que la géométrie et la taille des particules d'adsorbant, la concentration et la nature des espèces adsorbées, ainsi que les conditions environnementales. (Al Duri & Mckay, 1988)

Le mécanisme d'adsorption se déroule en cinque (5) étapes (**Figure 2.3**) :

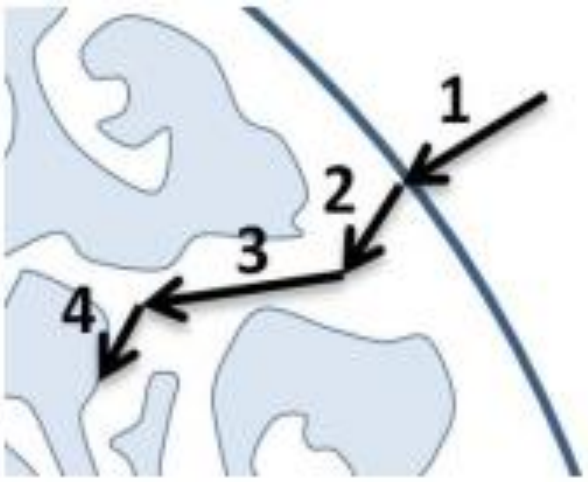


Figure 2.3 : Etapes du mécanisme d'adsorption. (Bourneuf, 2015)

1. Transfert du soluté de la phase liquide vers le film liquide lié à la particule par diffusion ou convection.
2. Transfert du soluté au travers du film liquide vers la surface externe de l'adsorbant : c'est l'étape de transfert externe.
3. Transfert interne : diffusion du soluté sous l'effet d'un gradient de concentration :
- Soit à l'état libre, dans le liquide et à l'intérieur des pores : diffusion poreuse
- Soit à l'état lié, d'un site d'adsorption à un site adjacent : diffusion superficielle

4. Adsorption proprement dite, c'est la fixation du soluté sur les sites adsorbants.

2.1.4 Modèles

Les modèles mathématiques de l'adsorption mono-constituant sont des équations qui décrivent la cinétique de l'adsorption d'un seul type de soluté par un adsorbant. Ces modèles sont utilisés pour comprendre et prédire la cinétique de l'adsorption, pour concevoir des systèmes d'adsorption et pour optimiser les conditions de fonctionnement. Voici quelques modèles mathématiques couramment utilisés pour l'adsorption mono-composant.

2.1.4.1 Modèle de Langmuir

Le modèle de Langmuir est l'un des modèles les plus couramment utilisés pour l'adsorption mono-composant. Il suppose que les sites d'adsorption sont uniformes et indépendants les uns des autres, et que la couche d'adsorbant est saturée lorsque tous les sites sont occupés (Langmuir, 1918). L'équation **(2.1)** de Langmuir décrit la relation entre la quantité d'adsorbant adsorbé et la concentration de soluté en solution :

$$q_e = \frac{K_L C_e}{1 + a_L C_e} \qquad \textbf{(2.1)}$$

D'où : K_L et a_L sont les constantes de l'isotherme de Langmuir ;

C_e et q_e sont la concentration de la phase liquide et la concentration de la phase solide de l'adsorbat à l'équilibre.

Les constantes de Langmuir, K_L et a_L, sont évaluées par la linéarisation de l'équation **(2.1)** :

$$\frac{C_e}{qe} = \frac{1}{K_L} + \frac{a_L}{K_L} C_e \qquad \textbf{(2.2)}$$

En traçant C_e/q_e en fonction de C_e, il est possible d'obtenir la valeur de K_L à partir de l'interception qui est ($1/K_L$) et la valeur de a_L à partir de la pente, qui est (a_L/K_L). La capacité théorique de la monocouche est q_0 et est numériquement égale à (K_L/a_L). L'équation de

Langmuir s'applique à l'adsorption homogène où l'adsorption de chaque molécule a une énergie d'activation d'adsorption égale. L'équation est thermodynamiquement cohérente et suit la loi de Henry à faible concentration. À mesure que *Ce* devient plus faible, $a_L C_e$ est beaucoup plus petit que l'unité et $q_e = K_L C_e$, c'est-à-dire analogue à la loi de Henry. (Baig et al., 2009)**.**

2.1.4.2 Modèle de Freundlich

Le modèle de Freundlich est un autre modèle couramment utilisé pour l'adsorption mono-composant. Il suppose que la couche d'adsorbant n'est pas uniforme et que les sites d'adsorption ne sont pas tous équivalents (Freundlich, 1906). L'équation **(2.3)** de Freundlich est expression une exponentielle qui décrit la relation entre la quantité d'adsorbant adsorbé et la concentration de soluté en solution, mais elle est plus adaptée aux systèmes où la concentration de soluté est faible :

$$q_e = K_F C_e^{b_F} \qquad \textbf{(2.3)}$$

Dans cette équation, K_F et b_F sont des constantes de Freundlich. Cette expression est caractérisée par le facteur d'hétérogénéité (b_F), et l'isotherme de Freundlich peut donc être utilisée pour décrire des systèmes hétérogènes.

L'équation de Freundlich s'accorde bien avec celle de Langmuir sur des plages de concentration modérées mais, contrairement à l'expression de Langmuir, elle ne se réduit pas à l'isotherme linéaire (loi de Henry) à faible couverture de surface. Ces deux théories présentent l'inconvénient de ne pas pouvoir ajuster les données à l'équilibre sur une large gamme de concentrations avec une seule constante de données. (Al-Ghouti & Da'ana, 2020)

Pour déterminer les constantes K_F et b_F, la forme linéaire de l'équation **(2.4)** ci-dessous, peut être utilisée pour produire un graphique de $\ln(q_e)$ contre $\ln(C_e)$.

$$\ln (q_e) = \ln K_F + b_F \ln(C_e) \qquad \textbf{(2.4)}$$

2.1.4.3 Modèle de Tempkin

Tempkin et Pyzhev (1940) suppose que l'enthalpie de l'adsorption diminue linéairement avec la couverture de surface, ce qui implique une diminution de l'adsorption à mesure que la couverture de surface augmente. L'équation **(2.5)** de Tempkin décrit la relation entre la quantité

d'adsorbant adsorbé et la concentration de soluté en solution, mais elle est plus adaptée aux systèmes où la couverture de surface est importante :

$$q_e = \frac{\mathrm{RT}}{b}(\ln AC_e) \quad \textbf{(2.5)}$$

L'équation (2.5) peut être exprimée sous sa la forme linéaire suivante :

$$q_e = B \ln (A) + B \ln (C_e) \quad \textbf{(2.6)}$$

Où : $B = \frac{\mathrm{RT}}{b}$

Les données d'adsorption peuvent être analysées selon l'équation **(2.6)**. Le tracé de q_e en fonction de ln (C_e) permet de déterminer les constantes isothermes *A* et *B*. La constante *B* est lié à la chaleur d'adsorption. (Allen et al., 2003)

2.1.4.4 Modèle de Toth

L'équation de Toth **(2.7)**, est un dérivé de la théorie du potentiel et elle est applicable à l'adsorption hétérogène (Toth, 1971). Elle suppose une distribution d'énergie quasi-gaussienne. La plupart des sites ont une énergie d'adsorption inférieure au pic ou à l'énergie d'adsorption maximale. (Foo & Hameed, 2010)

$$q_e = \frac{K_t\, C_e}{[a_t + C_e^t]^{1/t}} \quad \textbf{(2.7)}$$

2.1.4.5 Modèle de Redlich et Peterson

Redlich et Peterson (1959) ont proposé une équation empirique, appelée équation à trois paramètres (2.8), qui peut être utilisée pour représenter les équilibres d'adsorption sur une large gamme de concentrations.

$$q_e = \frac{K_{\mathrm{R}} C_e}{1 + a_{\mathrm{R}} C_e^{\beta}} \quad \textbf{(2.8)}$$

Cette équation se réduit à une isotherme linéaire à faible couverture de surface, à l'isotherme de Freundlich avec une forte concentration de l'adsorbat et à l'isotherme de Langmuir lorsque

β=1. Cependant, l'équation ne peut pas être linéarisée pour une estimation facile des paramètres de l'isotherme K_R, a_R et β. La linéarisation de l'expression donne :

$$\text{Ln}\left[\frac{K_R C_e}{q_e} - 1\right] = \text{Ln}\, a_R + \beta \text{Ln} C_e \qquad \textbf{(2.9)}$$

Le tracé du ln[($K_R C_e/q_e$)- 1] en fonction de lnC_e donne une ligne droite de pente = β et d'interception = a_R. Cependant, le tracé de l'équation (2.9) n'est pas applicable en raison des trois paramètres inconnus contenus dans cette équation. Par conséquent, une procédure de minimisation est adoptée pour maximiser le coefficient de corrélation R^2 entre les données théoriques de q_e prédites par l'équation **(2.9)** et les données expérimentales.

Souvent, la méthode utilisée pour déterminer les paramètres isothermes consiste à effectuer une régression linéaire avec des variables transformées. La qualité de l'ajustement des données expérimentales avec l'équation d'isotherme est évaluée sur la magnitude du coefficient de corrélation de la régression**.** (Kumar et al., 2011)

2.1.4.6 Modèle de Henry

C'est un modèle à un paramètre et l'isotherme d'adsorption le plus basique. Il propose une relation linéaire entre la quantité adsorbée et la concentration globale de l'adsorbat, comme présenté par l'équation **(2.10)**.

$$q_e = K_{HE} C_e \qquad \textbf{(2.10)}$$

où q_e est la quantité adsorbée à l'équilibre en mg/g, K_{HE} est la constante d'adsorption de Henry en L/g, et C_e est la concentration d'équilibre de l'adsorbat en mg/L.

Un graphique de q_e en fonction de C_e produit une ligne droite, avec une pente égale à K_{HE}.

Le modèle de Henry peut être utilisé lorsque le rapport de couverture des sites d'adsorption est minimal. Il approxime la tendance des données uniquement à des faibles concentrations de soluté. Par conséquent, il montre une adsorption en monocouche à des concentrations d'adsorbats initialement faibles.(Kalam et al., 2021)

2.1.4.7 Modèle d'Elovich

L'isotherme d'adsorption d'Elovich est basée sur des principes cinétiques et prend en compte l'adsorption multicouche. Elle postule que les sites d'adsorption augmentent de manière exponentielle avec l'adsorption. Mathématiquement, elle s'exprime comme suit :

$$\frac{q_e}{q_0} = K_e C_e e^{-(\frac{q_e}{q_0})} \quad \textbf{(2.11)}$$

Où : K_E est la constante d'Elovich.

La forme linéarisée peut être écrite comme suit :

$$\mathrm{Ln}\frac{q_e}{C_e} = \mathrm{Ln}K_e q_0 - \frac{q_e}{q_0} \quad \textbf{(2.12)}$$

Un graphique de $\mathrm{Ln}\frac{q_e}{C_e}$ en fonction de q_e donne une ligne droite avec une pente égale à $(-\frac{1}{q_0})$ et une ordonnée à l'origine égale à $\mathrm{Ln}K_e q_0$. (Kalam et al., 2021)

2.1.4.8 Modèle de pseudo-premier ordre

Le modèle cinétique établi par Lagergreen (Lagergren, 1898) du pseudo-premier-ordre est exprimé comme suit :

$$\frac{dq}{dt} = K_1(q_e - q) \quad \textbf{(2.13)}$$

L'intégration de l'équation (**2.14**) pour les conditions aux limites $q = 0$ à $t = 0$ et $q = q$ à $t = t$ donne :

$$\ln\frac{q_e - q}{q_e} = K_1 t \quad \textbf{(2.14)}$$

Où : K_1 : Constante de vitesse d'adsorption (1/min) ;

q : Quantité adsorbée à l'instant t (mg/g) ;
q_e : Quantité adsorbée à l'équilibre (mg/g) ;
t : Temps (min).

En traçant $\ln(\frac{q_e - q}{q_e})$ en fonction du temps t, on peut déterminer la constante de vitesse d'adsorption K_1.

2.1.4.9 Modèle de pseudo-second ordre

La cinétique de sorption peut être exprimée linéairement par l'expression de pseudo-second ordre de Blanchard (Blanchard, 1993), comme suit :

$$\frac{t}{q} = \frac{1}{K_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t \qquad \textbf{(2.15)}$$

Où : K_2 : Constante de vitesse de pseudo second ordre (g /mg min).

La constante de vitesse de pseudo-second ordre est utilisée pour calculer la vitesse initiale de sorption h (mg/g min) en utilisant l'équation suivante :

$$h = K_2 q_e^2 \qquad \textbf{(2.16)}$$

2.1.4.10 Modèle de diffusion intra-particulaire

Conformément de L'équation de Weber et Morris (Weber, 1983) permet la détermination le modèle cinétique de diffusion intra-particulaire est souvent présenté simplement par l'équation suivante :

$$q = K_d t^{1/2} + C_d \qquad \textbf{(2.17)}$$

Où : K_d : Constante de vitesse de diffusion dans les pores (mg/g $min^{1/2}$) ;

C_d : Cordonné à l'origine (mg/g) ;

Si $q = f(t^{1/2})$ est une droite, la pente de cette droite sera égale àK_d.

2.1.4.11 Modèle d'isotherme d'adsorption de Harkins-Jura

L'isotherme d'adsorption du Harkin-Jura, peut être exprimée comme suit (Harkins & Jura, 1944) :

$$q_e = \left(\frac{A}{B + Log C_e}\right)^{1/2} \qquad \textbf{(2.18)}$$

Où A et B représentent les paramètres d'isotherme. La linéarisation de ce modèle est donnée par la relation suivante :

$$\frac{1}{q_e^2} = \frac{B}{A} - \frac{1}{A} \mathrm{Log} C_e \qquad \textbf{(2.19)}$$

2.1.4.12 Modèle d'isotherme de Halsey

L'isotherme d'adsorption du Halsey est donnée par la relation suivante (Halsey, 1948) :

$$q_e = exp\left(\frac{\mathrm{Ln}K_H - \mathrm{Ln}C_e}{n}\right) \quad \textbf{(2.20)}$$

Où : K_H : Constante du Halsey ;
n : Exposant.

L'équation de linéarisation de ce modèle est donnée comme suit :

$$\mathrm{Ln}q_e = \frac{1}{n}\mathrm{Ln}K - \frac{1}{n}\mathrm{Ln}C_e \quad \textbf{(2.21)}$$

2.1.4.13 Modèle d'isotherme de Dubinin-Radushkevich (D-R)

La théorie de Dubinin est utilisée dans le cas de l'adsorption sur certaines surfaces non poreuses (Dubinin, 1947). En 1947, Dubinin et Radushkevich ont proposé la relation suivante permettant de décrire l'équilibre d'adsorption par les solides microporeux :

$$\frac{q_e}{q_{mDR}} = exp(-\beta\varepsilon^2) \quad \textbf{(2.22)}$$

Où : q_{mDR} : Capacité maximale d'adsorption dans les micropores ;
β : Constante liée à l'énergie d'adsorption par :

$$E = \frac{1}{(\beta)^{0,5}} \quad \textbf{(2.23)}$$

ε : Potentiel de polanyi donné par la relation suivante:

$$\varepsilon = RT\left(\frac{\mathrm{C_s}}{\mathrm{C_e}}\right) \quad \textbf{(2.24)}$$

$\mathrm{C_s}$: Solubilité du soluté.

L'équation de Dubinin-Radushkevich devient :

$$\mathrm{Ln}q_e = \mathrm{Ln}q_{mDR} - \left(\frac{RT}{E}\right)^2\left[\mathrm{Ln}\left(\frac{\mathrm{C_s}}{\mathrm{C_e}}\right)\right]^2 \quad \textbf{(2.25)}$$

Si on trace le $\mathrm{Ln}q_e$ en fonction de $\left(\frac{\mathrm{C_s}}{\mathrm{C_e}}\right)^2$, ce la permet d'obtenir q_{mDR} et E.

Les constantes d'isotherme de Langmuir n'expriment pas les propriétés du processus d'adsorption physique ou chimique. Mais, l'énergie moyenne d'adsorption (E) calculée en utilisant l'isotherme de D-R donne les informations nécessaires au sujet de ces propriétés (Hamdaoui & Naffrechoux, 2007).

$E < 8$ KJ mol^{-1} : La physisorption domine le mécanisme de sorption ;
$8 < E < 16$ KJ mol^{-1} : L'échange ionique est le facteur dominant ;
$E > 16$ KJ mol^{-1}: La sorption est dominée par diffusion intra particule (Srivastava et al., 2006).

2.1.4.14 Modèle d'isotherme de Brunauer, Emmet et Teller (BET)

En 1938, Brunauer, Emmet et Teller (BET) développèrent la théorie de Langmuir pour permettre son application dans le cas d'adsorption poly-moléculaire à la surface du solide. Ce modèle tient compte de la formation de plusieurs couches de molécules adsorbées : les interactions molécule-molécule et molécule-solide sont prises en considération et chaque molécule adsorbée dans une couche est un site d'adsorption pour une molécule de la couche suivante. L'équation peut-être écrite sous cette forme (Brunauer, 1938; Charrière, 2009).

$$\frac{q_e}{q_m} = \frac{K_B\left(\frac{C_e}{C_0}\right)}{\left[\left(1-\frac{C_e}{C_0}\right)\left(1-\frac{C_e}{C_0}+K_B\frac{C_e}{C_0}\right)\right]} \quad \textbf{(2.26)}$$

Où : q_e : Capacité de rétention à l'équilibre (mg/mg d'adsorbant) ;
q_m : Capacité de rétention mono-moléculaire (mg/mg d'adsorbant) ;
C_0 : Concentration initiale (mg/l) ;
K_B : Constante d'adsorption.

La forme linéaire de cette équation est donnée par l'équation ci-dessous :

$$\frac{C_e}{q_e(C_0-C_e)} = \frac{1}{q_m K_B} + \frac{K-1}{q_m K_B}\left(\frac{C_e}{C_0}\right) \quad \textbf{(2.27)}$$

L'isotherme B.E.T est sert à déterminer les surfaces d'adsorption des charbons par adsorption d'azote.

2.2 Adsorption multi-composants (binaire, ternaire, quaternaire)

2.2.1 Définition

Il s'agit d'un phénomène dans lequel plusieurs composés se concours pour se fixer aux sites d'adsorption disponibles sur une surface. (Namasivayam & Senthilkumar, 1998)

Dans un système d'adsorption compétitive, les composés ayant une affinité plus élevée pour les sites d'adsorption ont tendance à se lier en premier, laissant moins de sites disponibles pour les composés ayant une affinité plus faible. Par conséquent, la capacité d'adsorption pour chaque composé dépend de la concentration à l'équilibre des autres composés présents dans la solution. (Swenson & Stadie, 2019)

La présence de plusieurs d'espèces favorisent ou gêner l'adsorption par la force ionique à titre d'exemple. Ils constituent la matrice de la solution, qui retient ou piéger l'adsorbat. La présence de la compétition aussi diminue la capacité de chaque espèce sur l'adsorbant. (Amrhar et al., 2021)

2.2.2 Mécanisme de transfert de masse

Le mécanisme de transfert de masse pour l'adsorption compétitive dépend du système d'adsorption et des propriétés du matériau adsorbant, ainsi que des espèces en compétition pour les sites d'adsorption. Les étapes de base du processus d'adsorption compétitive sont similaires à celles de l'adsorption mono-composant, à savoir la diffusion de l'espèce adsorbée depuis la solution vers la surface de l'adsorbant, suivie de sa diffusion à travers la couche limite pour atteindre le site actif. Cependant, dans un système d'adsorption compétitive, plusieurs espèces sont en compétition pour les mêmes sites d'adsorption, ce qui peut affecter la vitesse et l'efficacité de l'adsorption.

Dans un système d'adsorption compétitive, les différentes espèces présentes peuvent avoir des affinités différentes pour les sites d'adsorption. Cela peut conduire à des mécanismes de sélectivité, où une espèce est préférentiellement adsorbée par rapport à une autre. La sélectivité peut dépendre des propriétés de l'adsorbant, de la concentration des différentes espèces et des conditions environnementales.

Cependant, dans la réalité, les interactions entre les différentes espèces peuvent avoir un effet important sur l'adsorption compétitive. Par exemple, une espèce peut affecter la disponibilité des sites d'adsorption pour une autre espèce, ou des interactions électrostatiques ou de coordination peuvent se produire entre les espèces en compétition. (Swenson & Stadie, 2019)

2.2.3 Modèles

Les systèmes à plusieurs composants nécessitent des modèles plus complexes en raison de la nature complexe de l'adsorption à plusieurs composants. Par conséquent, les modèles utilisés pour les systèmes à un seul composant ne sont pas applicables et doivent être modifiés pour prendre en compte la nature de l'adsorption à plusieurs composants. Il existe de nombreuses théories relatives à l'équilibre d'adsorption compétitives.

2.2.3.1 Modèle de Langmuir généralisé

Le modèle d'isotherme de Langmuir étendue pour l'adsorption multi-composants repose sur plusieurs hypothèses. Tout d'abord, tous les sites actifs de l'adsorbant sont uniformes et disponibles pour tous les adsorbats. De plus, les adsorbats n'interagissent pas entre eux dans le système multi-composant et toutes les molécules polluantes dans les eaux usées se lient à des sites actifs identiques. Le modèle suppose également que les sites actifs ont une énergie d'adsorption uniforme. Ce modèle peut être représenté sous forme de :

$$q_{e,i} = \frac{q_{m,i} b_{\mathrm{L},i} C_{e,i}}{1+\sum_{j=1}^{N}(b_{\mathrm{L},j} C_{e,j})} \quad \textbf{(2.18)}$$

D'où : $q_{e,i}$: capacité d'adsorption du composé i à l'équilibre (mg/g) ;

$C_{e,i}$: Concentration du composé i à l'équilibre (mg/l) ;

$b_{\mathrm{L},i}$: Constante de Langmuir du composé i (l/mg) ;

$q_{m,i}$: Capacité d'adsorption mono-couche du composé i (mg/g) ;

N : Nombre total des composés dans la solution.

Les équations ci-dessous (**2.19** et **2.20**) permettent de calculer la capacité d'adsorption pour une solution à deux composants, en modifiant l'équation précédente **(2.18)** en fonction du nombre de composants.

$$q_{e,1} = \frac{q_{m,1} b_{\mathrm{L},1} C_{e,1}}{1+b_{\mathrm{L},1} C_{e,1}+b_{\mathrm{L},2} C_{e,2}} \quad \textbf{(2.19)}$$

$$q_{e,2} = \frac{q_{m,2} b_{\mathrm{L},2} C_{e,2}}{1+b_{\mathrm{L},1} C_{e,1}+b_{\mathrm{L},2} C_{e,2}} \quad \textbf{(2.20)}$$

Dans le but de minimiser les erreurs dans l'analyse de régression non linéaire, on utilise la fonction de résolution de la régression non linéaire dans Microsoft Excel, les paramètres $q_{m,1}$, $b_{\mathrm{L},1}$ et $b_{\mathrm{L},2}$ ont été évalués à partir des valeurs expérimentales de $q_{e,1}$ et $C_{e,1}$. (Baig et al., 2009)

2.2.3.2 Modèle de Langmuir non modifié

Le modèle est conçu pour étudier l'adsorption compétitive d'un composé unique dans une solution contenant plusieurs composés. Il permet de calculer la capacité d'adsorption du composé en présence d'autres composés. La formule mathématique **(2.21)** qui décrit ce modèle est la suivante :

$$q_{e,i} = \frac{q_{m,i} b_{\mathrm{L},i} C_{e,i}}{1+\sum_{j=1}^{N}(b_{\mathrm{L},j} C_{e,j})} \quad \textbf{(2.21)}$$

D'où : Les valeurs de $q_{m,i}$ et $b_{\mathrm{L},i}$ représentent respectivement la capacité d'adsorption monocouche (en mg/g) et la constante de Langmuir (en L/mg) pour le composant i. Ces paramètres sont déterminés à partir des données expérimentales des isothermes de Langmuir individuelles. Une fois que ces paramètres sont connus pour une gamme de concentrations initiales, les valeurs correspondantes de $C_{e,i}$ pour $q_{e,i}$ peuvent être évaluées. (Kumar et al., 2011)

2.2.3.3 Modèle de Langmuir modifié

Les paramètres obtenus à partir du modèle d'isotherme d'adsorption pour un seul composant ne permettent pas de comprendre comment les différents composants interagissent dans une solution. Pour pallier cette limitation, un terme d'interaction est ajouté au modèle pour décrire la nature de ces interactions. Ce terme d'interaction est représenté par le facteur d'interaction, qui reflète l'effet compétitif des différents adsorbats présents dans la solution. Ce facteur est un paramètre caractéristique d'un composant qui dépend des concentrations des autres composants dans la solution. Sa forme est la suivante :

$$q_{e,i} = \frac{q_{m,i} b_{L,i} (C_{e,i}/\eta_{L,i}}{1+\sum_{j=1}^{N} b_{L,j}/\eta_{L,i}} \quad \textbf{(2.22)}$$

$q_{e,i}$ la capacité d'adsorption du composé i à l'équilibre (mg/g), $C_{e,i}$ la Concentration du composé i à l'équilibre (mg/l). $b_{\mathrm{L},i}$ la Constante de Langmuir du composé *i* (L/mg) et $q_{m,i}$ Capacité d'adsorption mono-couche du composé i (mg/g) sont évaluées à partir des données expérimentales des isothermes de Langmuir individuelles.

Le facteur d'interaction $\eta_{\mathrm{L},j}$ représente l'effet compétitif des autres composants présents dans la solution sur la capacité d'adsorption d'un composant donné. Pour calculer $\eta_{\mathrm{L},i}$ de chaque composant, une gamme de valeurs expérimentales de $q_{e,i}$ et $C_{e,i}$, qui a été utilisée pour minimiser les erreurs dans l'analyse de la régression non linéaire à l'aide de Microsoft Excel. L'introduction de ces facteurs de correction dans le modèle isotherme a permis d'améliorer la précision des résultats obtenus à partir des données expérimentales. (Baig et al., 2009)

2.2.3.4 Modèle de Freundlich généralisé

Le modèle de Freundlich à un seul composant peut être appliqué à des systèmes binaires pour développer un modèle de Freundlich étendu. Ce modèle est utilisé pour les systèmes hétérogènes lorsque des interactions se produisent entre les molécules adsorbées. Les équations **(2.23)** et **(2.24)** pour le système binaire multi-composants peut être représentée comme suit :

$$q_{e,1} = \frac{k_{\mathrm{F},1} C_{e,1}^{\left(\frac{1}{n_1}\right)+x_1}}{C_{e,1}^{x_1} + C_{e,1}^{z_1}} \qquad \textbf{(2.23)}$$

$$q_{e,2} = \frac{k_{\mathrm{F},2} C_{e,2}^{\left(\frac{1}{n_2}\right)+x_2}}{C_{e,2}^{x_2} + C_{e,2}^{z_2}} \qquad \textbf{(2.24)}$$

$q_{e,1}$ et $q_{e,2}$: capacités d'adsorption à l'équilibre pour les composés 1 and 2 (mg/g), $C_{e,1}$ et $C_{e,2}$: concentrations à l'équilibre des composés 1 and 2 (mg/L). Les valeurs des constantes de Freundlich $k_{\mathrm{F},1}$ et $k_{\mathrm{F},2}$ et les intensités d'adsorption n_1 et n_2 sont obtenus à partir des données expérimentales des isothermes de Freundlich individuelles. Les constantes x_1, y_1, z_1 et x_2, y_2, z_2 ont été obtenus à partir des valeurs expérimentales de $q_{e,1}$ vs $C_{e,1}$ et $q_{e,2}$ vs $C_{e,2}$ respectivement, en minimisant l'erreur dans l'analyse de régression non linéaire. (Foo & Hameed, 2010)
Le modèle de Freundlich peut être appliqué à des systèmes multi-composants **(2.25)** :

$$q_{e,n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} k_{\mathrm{F},i} C_{e,i}^{\left(\frac{1}{n_i}\right)+x_i}}{\sum_{i=1}^{n} C_{e,i}^{x_i} + \sum_{i=1}^{n} C_{e,i}^{z_i}} \qquad \textbf{(2.25)}$$

2.2.3.5 Modèle de Redlich-Peterson non modifié

Le modèle de Redlich-Peterson est le résultat de la combinaison des modèles d'isotherme de Langmuir et de Freundlich. En incluant toutes les constantes du modèle, l'équation du modèle est développée pour décrire au mieux les données expérimentales. L'équation (**2.26**) met en évidence que la relation du modèle de Redlich-Peterson varie linéairement en fonction de la concentration dans le terme du numérateur, tandis qu'elle varie de manière exponentielle dans le terme du dénominateur. Cette propriété offre l'avantage d'une utilisation aisée du modèle pour valider les données d'équilibre sur une large gamme de concentrations. L'équation se rapproche du modèle de Freundlich à une concentration plus élevée pour la valeur de β égale à

zéro. Elle se transforme en équation de Langmuir à faible concentration lorsque la valeur de β tend vers un. Cette équation peut être donnée comme suit :

$$q_e = \frac{k_{\mathrm{PR}} C_e}{1 + a_{\mathrm{PR}} C_e^{\beta}} \qquad \textbf{(2.26)}$$

k_{PR} : Constante de Redlich-Peterson (L/g) ;

a_{PR} : Constante du modèle (L/mg) ;

β : Exposant variant entre 0 et 1.

Le modèle de Redlich-Peterson peut être appliqué à des systèmes multi-composants pour obtenir des différentes formes telles que les modèles isothermes compétitifs non modifiés **(2.27)** et compétitifs modifiés **(2.28)** de Redlich-Peterson.

$$q_{e,i} = \frac{k_{\mathrm{PR},i} C_{e,i}}{1 + \sum_{j=1}^{N} (a_{PR,j} C_{e,j}^{\beta,j}} \qquad \textbf{(2.27)}$$

k_{PR} (L/g), a_{PR} (L/mg) et β : les constantes du modèle obtenues à partir des données expérimentales des isothermes individuelles de Redlich-Peterson. (Foo & Hameed, 2010)

2.2.3.6 Modèle de Redlich-Peterson modifié

Le terme d'interaction est ajouté dans ce modèle afin de montrer la nature de l'interaction entre les composants dans une solution multi-composants. Le modèle **(2.28)** compétitif modifié de Redlich-Peterson peut être représenté comme suit :

$$q_{e,i} = \frac{k_{\mathrm{PR},i} (C_{e,i} / \eta_{\mathrm{PR},i})}{1 + \sum_{j=1}^{N} (a_{\mathrm{PR},j} (C_{e,j} / \eta_{\mathrm{PR},j})^{\beta,j}} \qquad \textbf{(2.28)}$$

Le paramètre de l'interaction $\eta_{\mathrm{PR},j}$ pour les différents composants peut être calculée pour les valeurs expérimentales de $q_{e,i}$ et $C_{e,i}$ en minimisant l'erreur dans l'analyse de la régression non linéaire dans le Microsoft Excel. En ajoutant les facteurs de correction, le modèle isotherme peut être mieux validé que le modèle non modifié. (Kumar et al., 2011)

2.2.3.7 Modèle de Sheindorf–Rebuhn–Sheintuch (SRS)

La formulation de l'équation pour les systèmes multi-composants est basée sur le concept de l'isotherme de Freundlich. Les hypothèses qui sous-tendent cette isotherme sont que chaque

composant dans une solution suit l'isotherme de Freundlich et que la distribution de l'énergie d'adsorption se produit de manière exponentielle pour chaque soluté. Le coefficient de compétition $a_{i,j}$ est introduit afin de montrer comment le composant (*j*) inhibe l'adsorption du composant (*i*) . L'équation **(2.29)** SRS peut être donnée comme suit :

$$q_{e,i} = k_{\mathrm{F},i} C_{e,i} \left(\sum_{i=1}^{N} (a_{i,j} C_{e,i})\right)^{\left(\frac{1}{n_i}\right)-1} \qquad \textbf{(2.29)}$$

$q_{e,i}$ la capacité d'adsorption du composé i à l'équilibre (mg/g), $C_{e,i}$ la Concentration du composé (*i*) à l'équilibre (mg/l). Les valeurs de constante de Freundlich et de l'intensité d'adsorption sont calculées à partir des données expérimentales des isothermes de Freundlich individuels. Les paramètres $a_{i,j}$ sont évalués à partir des valeurs de la base expérimentale de $q_{e,\mathrm{i}}$ vs $C_{e,i}$ par des analyses de la régression non-linéaire. (Girish, 2017)

2.2.3.8 Modèle de Sips généralisé

Le modèle de Sips est utilisé pour les systèmes hétérogènes. L'équation **(2.30)** de Sips modifiée pour les systèmes multi-composants est la suivante :

$$q_{e,i} = \frac{q_{m,i} k_{\mathrm{SP},i} C_{e,i}^{m}}{1+\sum_{j=1}^{n} k_{\mathrm{SP},i} C_{e,i}^{m}} \qquad \textbf{(2.30)}$$

$q_{e,i}$ la capacité d'adsorption du composé i à l'équilibre (mg/g), $C_{e,i}$ la Concentration du composé (*i*) à l'équilibre (mg/l). $q_{m,i}$ la capacité de l'adsorption mono-couche du composé *i*. k_{SP},*i* la constante de l'isotherme de Spis $(L/mg)^{m}$. m : l'exposant du modèle de Sips. Les constantes de Sips sont tirées à partir des données d'isothermes pour les composants individuels. À faible concentration de polluant et pour une valeur de $m = 0$, le modèle se rapproche de l'isotherme de Freundlich. À une concentration d'adsorbat plus élevée et pour une valeur de m proche de 1, le modèle peut être modifié en une isotherme de Langmuir. (Girish, 2017)

2.3 Modélisation et optimisation

La modélisation et l'optimisation de l'adsorption multi-composants statique et dynamique sont des outils importants pour la conception du processus industriel d'adsorption. Ces outils permettent de prédire les performances du système et d'optimiser les conditions opératoires pour maximiser l'efficacité de l'adsorption.

2.3.1 Adsorption multi-composants statique

L'adsorption multi-composants statique est un processus dans lequel plusieurs composants d'un mélange sont adsorbés sur une surface solide en même temps. On peut également dire que dans l'adsorption multi-composants classique, les concentrations des différents composants sont considérées comme des paramètres d'entrée constants et uniformes, indépendamment du temps et de l'espace, ce qui simplifie la modélisation du phénomène. Cependant, cette hypothèse est souvent trop simplificatrice pour décrire les processus d'adsorption réels, qui peuvent être influencés par des changements de concentration, de pression et de température. Par conséquent, dans certains cas, il peut être nécessaire d'utiliser des modèles plus sophistiqués, tels que l'adsorption multi-composants dynamique, qui prennent en compte la compétition temporelle et spatiale des concentrations des différents adsorbats/adsorbant. (Husien et al., 2022)

2.3.1.1 Adsorption en batch via les modèles empiriques classiques

Cette modélisation implique la construction d'un modèle mathématique qui décrit la cinétique de l'adsorption pour chaque composant du mélange. Les modèles les plus couramment utilisés sont basés sur les équations de Langmuir, Freundlich et BET. Ces équations permettent de décrire la quantité d'adsorbant nécessaire pour atteindre une certaine concentration d'adsorbat à l'équilibre. Les modèles peuvent être résolus analytiquement ou numériquement. (Kumar et al., 2011)

2.3.1.2 Adsorption via l'intelligence artificielle (IA)

L'optimisation de l'adsorption multi-composants statique consiste à déterminer les conditions opératoires optimales pour maximiser l'efficacité de l'adsorption. Les variables opératoires telles que la température, la pression, la concentration et le débit d'adsorbant peuvent être modifiées pour améliorer les performances du système. L'optimisation peut être effectuée en utilisant des approches telles que la méthode de Monte Carlo, la méthode de recherche directe et les algorithmes génétiques (GA). Les objectifs d'optimisation peuvent inclure la maximisation de la capacité d'adsorption et la minimisation de la consommation d'adsorbant (Husien et al., 2022)

2.3.2 Adsorption multi-composants dynamique

L'adsorption multi-composants dynamique est un processus dans lequel plusieurs composants d'un mélange sont sélectivement adsorbés sur une surface solide dans un flux continu. La modélisation et l'optimisation de ce processus sont importantes pour la conception et le fonctionnement des systèmes d'adsorption multi-composants.

L'adsorption multi-composants dynamique prend en compte la dynamique temporelle du processus d'adsorption. En d'autres termes, dans l'adsorption multi-composants dynamique, la composition de la phase gazeuse ou liquide en contact avec le matériau poreux change avec le temps, et les concentrations des différents composants peuvent varier.

2.3.2.1 Adsorption en colonne via les modèles empiriques classiques

Les modèles mathématiques les plus couramment utilisés pour la modélisation de l'adsorption multi-composants dynamique sont basés sur les équations de transport de masse et d'équilibre de Langmuir, Freundlich ou d'autres isothermes d'adsorption. Les équations de conservation de la quantité de mouvement et d'énergie peuvent également être impliqués dans le modèle pour tenir compte de la dispersion de la phase liquide et de la réaction exothermique ou endothermique pendant l'adsorption. Les modèles numériques peuvent être résolus par des méthodes analytiques ou numériques. (Kumar et al., 2011)

2.3.2.2 Adsorption par l'intelligence artificielle (IA)

L'optimisation de l'adsorption multi-composants dynamique peut être réalisée en utilisant des algorithmes d'optimisation tels que l'optimisation par essaims particulaires (PSO), l'optimisation par algorithme génétique (GA), l'optimisation par méthode de réponse de surface (RSM) ou des méthodes hybrides de ces techniques. L'optimisation peut être effectuée pour maximiser la capacité d'adsorption, minimiser le temps de résidence, minimiser le coût du système d'adsorption, ou pour optimiser plusieurs objectifs simultanément. (Husien et al., 2022)

2.4 Applications industrielles

L'adsorption couvrent une variété d'applications industrielles, notamment la purification de gaz, la purification de l'eau, la déshydratation de gaz, la séparation de mélanges de gaz, la

purification de solvants, etc. Voici quelques exemples d'applications industrielles de l'adsorption mono-constituant et multi-composants :

2.4.1 Purification de gaz

L'adsorption compétitive est couramment utilisée dans la purification de gaz. Par exemple, la séparation de l'oxygène et de l'azote de l'air peut être réalisée à l'aide d'adsorbants tels que le charbon actif et la zéolithe. Ces adsorbants sont capables de séparer les molécules d'oxygène et d'azote en fonction de leur taille et de leur polarité, ce qui permet d'obtenir des gaz de haute pureté pour diverses applications industrielles telles que la soudure, la découpe laser, etc. (Sorbents, 1996)

2.4.2 Purification de l'eau

L'adsorption multi-composants est utilisée dans la purification de l'eau. Les adsorbants tels que le charbon actif, les résines échangeuses d'ions et les membranes sont capables de séparer les différentes impuretés présentes dans l'eau, telles que les ions, les produits chimiques et les bactéries. Cela est important dans de nombreuses applications, notamment la production d'eau potable, le traitement des eaux usées, etc. (Dąbrowski, 2001)

2.4.3 Déshydratation de gaz

L'adsorption multi-composants est utilisée dans la déshydratation de gaz. Les adsorbants tels que le gel de silice, le charbon actif et la zéolithe peuvent éliminer l'eau des gaz, ce qui est important dans de nombreuses applications industrielles, notamment la production de gaz naturel, la production de gaz pour la production d'énergie, etc. (Sorbents, 1996)

2.4.4 Séparation de mélanges de gaz

L'adsorption compétitive est utilisée dans la séparation de mélanges de gaz. Les adsorbants tels que la zéolithe, le charbon actif et les membranes peuvent séparer les différents gaz d'un mélange en fonction de leur taille, de leur polarité et de leur solubilité. Cette technique est utilisée dans l'industrie pétrochimique pour séparer les gaz de pétrole, dans la production d'hydrogène, etc. (Sorbents, 1996)

2.4.5 Purification de solvants

L'adsorption multi-composants est utilisée pour la purification des solvants. Les adsorbants tels que le charbon actif et la zéolithe peuvent éliminer les impuretés des solvants, ce qui est important dans de nombreuses industries, notamment la production de produits pharmaceutiques, la production de polymères, etc. (Dąbrowski, 2001)

2.4.6 Récupération des métaux

L'adsorption multi-composants est utilisée dans l'industrie minière et de la métallurgie, qui permet de récupérer des métaux précieux tels que l'or, l'argent par le charbon actif, le cuivre, le zinc, le nickel, le cobalt et le plomb par les résines échangeuses d'ions (polymères insolubles) à partir de solutions diluées. (Los, n.d.)

2.4.7 Séparation des hydrocarbures

L'adsorption compétitive est utilisée pour séparer les hydrocarbures dans les raffineries de pétrole et les usines de traitement du gaz naturel. Cette technique permet de séparer les composants du mélange de gaz ou de liquide, tels que le méthane, l'éthane, le propane, le butane, etc. (Los, n.d.)

2.4.8 Déshumidification de l'air

L'adsorption multi-composants est utilisée pour éliminer l'humidité de l'air. Cette technique est utilisée dans les industries telles que les aliments et les boissons, les produits pharmaceutiques, les cosmétiques, etc. pour maintenir une atmosphère sèche et prévenir la formation de moisissures et de bactéries. (Dąbrowski, 2001)

2.4.9 Séparation des mélanges liquides

L'adsorption multi-composants est utilisée pour la séparation des mélanges liquides tels que les huiles, les solvants, les colorants, etc. Cette technique permet de séparer les composants du mélange en fonction de leur affinité pour un matériau adsorbant spécifique. (Dąbrowski, 2001)

2.4.10 Épuration de l'air

L'adsorption compétitive est utilisée pour éliminer les polluants de l'air tels que les composés organiques volatils, les oxydes d'azote (**Figure 2.4**), les odeurs, etc. Cette technique est utilisée dans les industries telles que la production de peintures, de solvants, de plastiques, etc. (Dąbrowski, 2001)

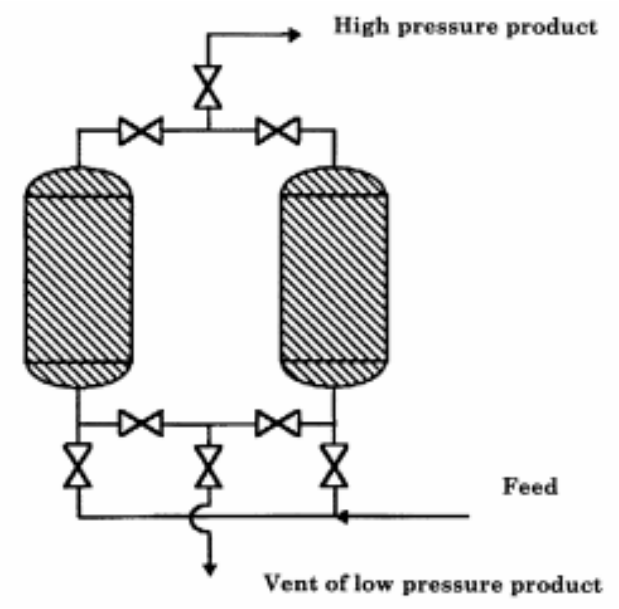


Figure 2.4 : Système typique pour l'élimination de l'azote. (Dąbrowski, 2001)

2.4.11 Réaction catalytique

L'adsorption multi-composants est utilisée comme catalyseur dans certaines réactions chimiques. Cette technique est utilisée dans l'industrie chimique pour la production de produits chimiques organiques, tels que les plastiques, les médicaments, les pesticides, etc.(Los, n.d.)

2.4.12 Stockage de gaz

L'adsorption multi-composants est utilisée pour stocker des gaz dans des matériaux adsorbants. Cette technique est utilisée dans l'industrie automobile pour stocker de l'hydrogène et d'autres gaz alternatifs. (Sorbents, 1996)

2.4.13 Élimination des odeurs

L'adsorption compétitive est utilisée pour éliminer les odeurs dans diverses industries telles que l'industrie alimentaire, l'industrie de la santé, etc. (Editor et al., 1998)

2.4.14 Décontamination des sols

L'adsorption multi-composants est utilisée pour décontaminer les sols. Cette technique est utilisée dans le domaine d'agronomie pour éliminer les contaminants tels que les métaux lourds, les pesticides, etc. (Editor et al., 1998)

2.4.15 Séparation des biomolécules

L'adsorption multi-composants est utilisée pour séparer les biomolécules telles que les protéines, les acides nucléiques, les peptides, etc. Cette technique est utilisée dans l'industrie pharmaceutique pour la production de médicaments, dans l'industrie alimentaire pour la production de produits alimentaires fonctionnels, etc. (Editor et al., 1998)

2.4.16 Traitement des effluents industriels

L'adsorption compétitive est utilisée pour traiter les effluents industriels contenant des contaminants tels que les métaux lourds, les produits chimiques, les solvants, etc. Cette technique est utilisée dans de nombreuses industries telles que l'industrie chimique, l'industrie pharmaceutique, l'industrie alimentaire, etc. (Editor et al., 1998)

2.4.17 Détection de gaz

L'adsorption multi-composants est utilisée pour détecter les gaz en utilisant des capteurs à base de matériaux adsorbants. Cette technique est utilisée dans les industries de la surveillance de l'environnement, de la sécurité, de l'industrie pétrolière et gazière, etc. (Sorbents, 1996)

Conclusion

Ce chapitre nous a permis d'avoir un aperçu général sur les différents modèles empiriques classique et via intelligence artificielle, les plus utilisés pour modéliser, optimiser et illustrer les isothermes d'adsorption mono-composant (en seul constituant) et multi-composant (généralisés et même modifié et non modifiés), statique et dynamique. Enfin, nous avons cité quelques applications industrielles de l'adsorption mono-constituante et compétitive.

Après la lecture et l'analyse des différents travaux de la littérature effectuée sur la modélisation de l'adsorption statique multi-composants, il est important de recourir à la modélisation par l'IA, qui est très recommandée par plusieurs auteurs.

Références Bibliographiques

Al-Duri, Bushra, and Gordon Mckay. 1988. "Basic Dye Adsorption on Carbon Using a Solid-Phase Diffusion Model." The Chemical Engineering Journal 38(1): 23–31.

Al-Ghouti, M. A., & Da'ana, D. A. (2020). Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review. *Journal of Hazardous Materials*, *393*, 122383. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122383

Al Duri, B., & Mckay, G. (1988). Basic dye adsorption on carbon using a solid-phase diffusion model. *The Chemical Engineering Journal*, *38*(1), 23–31. https://doi.org/10.1016/0300-9467(88)80050-9

Allen, S. J., Gan, Q., Matthews, R., & Johnson, P. A. (2003). Comparison of optimised isotherm models for basic dye adsorption by kudzu. *Bioresource Technology*, *88*(2), 143–152. https://doi.org/10.1016/S0960-8524(02)00281-X

Amrhar, O., El Gana, L., & Mobarak, M. (2021). Calculation of adsorption isotherms by statistical physics models: a review. *Environmental Chemistry Letters*, *19*(6), 4519–4547. https://doi.org/10.1007/s10311-021-01279-8

Baig, K. S., Doan, H. D., & Wu, J. (2009). Multicomponent isotherms for biosorption of Ni2+ and Zn2+. *Desalination*, *249*(1), 429–439. https://doi.org/10.1016/j.desal.2009.06.052

Blanchard, O. (1993). *Reform in Eastern Europe*. mit Press.

Bourneuf, S. (2015). *Développement d'un procédé de lissage de charge par adsorption/désorption en amont d'une épuration biologique pour le traitement d'eaux résiduaires industrielles.*

Brunauer, E. (1938). *Teller described in "The Journal of the American Chemical Society", vol. 60*. Feb.

Charrière, D. (2009). *Caractérisation de la sorption de gaz sur les charbons. Application au stockage géologique du dioxyde de carbone dans les veines de charbon*.

Dąbrowski, A. (2001). Adsorption - From theory to practice. *Advances in Colloid and Interface Science*, *93*(1–3), 135–224. https://doi.org/10.1016/S0001-8686(00)00082-8

de Flora, S. (1989). Mechanism of chromium (VI) metabolism and genotoxicity. *Life Chem. Rep.*, *7*, 169–244.

Dubinin, M. M. (1947). The equation of the characteristic curve of activated charcoal. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR.*, *55*, 327–329.

Editor, A. D., Science, E., All, B. V, & Ray, M. S. (1998). *Studies in Surface Science and Catalysis , Vol . 120 PSA and Cyclic @ stems , and Applications Liquid-Phase Adsorption Ion Exchange , Chromatography , and Related Separations The following topics , concerned with industrial applications , are included in . 120*(1990), 1989–1997.

Foo, K. Y., & Hameed, B. H. (2010). Insights into the modeling of adsorption isotherm systems. *Chemical Engineering Journal*, *156*(1), 2–10. https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.09.013

Girish, C. R. (2017). Various isotherm models for multicomponent adsorption: A review. *International Journal of Civil Engineering and Technology*, *8*(10), 80–86.

Halsey, G. (1948). Physical adsorption on non-uniform surfaces. *The Journal of Chemical Physics*, *16*(10), 931–937.

Hamdaoui, O., & Naffrechoux, E. (2007). Modeling of adsorption isotherms of phenol and chlorophenols onto granular activated carbon: Part II. Models with more than two parameters. *Journal of Hazardous Materials*, *147*(1–2), 401–411.

Harkins, W. D., & Jura, G. (1944). The decrease (π) of free surface energy (γ) as a basis for the

development of equations for adsorption isotherms; and the existence of two condensed phases in films on solids. *The Journal of Chemical Physics*, *12*(3), 112–113.

Husien, S., El-taweel, R. M., Salim, A. I., Fahim, I. S., Said, L. A., & Radwan, A. G. (2022). Review of activated carbon adsorbent material for textile dyes removal: Preparation, and modelling. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, *5*(February), 100325. https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2022.100325

Kalam, S., Abu-Khamsin, S. A., Kamal, M. S., & Patil, S. (2021). Surfactant Adsorption Isotherms: A Review. *ACS Omega*, *6*(48), 32342–32348. https://doi.org/10.1021/acsomega.1c04661

Kumar, S., Zafar, M., Prajapati, J. K., Kumar, S., & Kannepalli, S. (2011). Modeling studies on simultaneous adsorption of phenol and resorcinol onto granular activated carbon from simulated aqueous solution. *Journal of Hazardous Materials*, *185*(1), 287–294. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.09.032

Lagergren, S. (1898). *About the theory of so-called adsorption of solution substances*.

Los, U.M.D.E.C.D.E. (n.d.). *Adsorption ans its applications in industry and environmental protection*.

Masson, S. (2017). *Étude de l ' adsorption de micropolluants émergents sur des tissus de carbone activé To cite this version : HAL Id : tel-01424846 Étude de l ' adsorption de micropolluants émergents sur des tissus de carbone activé*.

Namasivayam, C., & Senthilkumar, S. (1998). Removal of arsenic (V) from aqueous solution using industrial solid waste: adsorption rates and equilibrium studies. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *37*(12), 4816–4822. https://doi.org/10.1021/ie970774x

Nguyen, H., You, S., & Hosseini-bandegharaei, A. (2017). Mistakes and inconsistencies regarding adsorption of contaminants from aqueous solutions : A critical review. *Water Research*, *120*, 88–116. https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.04.014

Sorbents, M. I. (1996). *A. D~browski and V.A. Tertykh (Editors)*. *99*, 629–646.

Srivastava, V. C., Swamy, M. M., Mall, I. D., Prasad, B., & Mishra, I. M. (2006). Adsorptive removal of phenol by bagasse fly ash and activated carbon: equilibrium, kinetics and thermodynamics. *Colloids and Surfaces a: Physicochemical and Engineering Aspects*, *272*(1–2), 89–104.

Swenson, H., & Stadie, N. P. (2019). Langmuir's Theory of Adsorption: A Centennial Review. *Langmuir*. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b00154

Weber, G. (1983). Enzymes of purine metabolism in cancer. *Clinical Biochemistry*, *16*(1), 57–63.

CHAPITRE III

MÉTHODOLOGIE du RNA et DA-SVM

Introduction

Ce chapitre présente les différentes méthodes adoptées pour calculer et prédire la capacité d'adsorption à l'équilibre des différents polluants, en utilisant plusieurs adsorbants. Ensuite, la modélisation et l'optimisation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e) en fonction de la concentration des adsorbats à l'équilibre (*Ce*), a été effectuée par les méthodes d'intelligence artificielle (IA), en utilisant les modèles suivants : RNA, SVM et DA-SVM. Dans cette contribution on cherche à travers une étude comparative entre les méthodes de prédiction proposées ci-dessous, un meilleur modèle qui peut prédire (q_e) comme variable de sortie en fonction de toutes les variable d'entrées (*Mw*, *T*, *As* et *Ce*) avec une erreur tend vers 0 et un coefficient de détermination R^2 tend vers l`unité.

3.1 Modélisation par les Réseaux de Neurone Artificiel (RNA)

Bien que les RNA font partie des modèles de boites noires qui représentent une relation empirique entre des ensembles d'entrées et de sorties (Kanungo et al., 2006), le choix des variables d'entrées et de sorties est décisif pour que le modèle neuronal se rapproche des modèles déterministes.

La sélection et la collecte des données sur lesquelles les méthodes d`intelligence artificielle font l`apprentissage, constituent la première étape de la modélisation neuronale. Le choix des variables d'entrées et de sorties et le prétraitement des données constituent la deuxième étape. Ensuite la normalisation et la division de la base de données en trois phases (apprentissage, test et validation). L'étape suivante concerne le choix des paramètres du réseau de neurones (type de réseau de neurones, le nombre de couches cachées et le nombre de neurones dans chaque couche cachée, la fonction de transfert, l'algorithme d'apprentissage et le nombre d'itérations) qui vont permettre au réseau d'apprendre la relation entre les entrées et la sortie choisie à partir des données sélectionnées. La troisième étape est consacrée à l'apprentissage, test et la validation du réseau choisi. Enfin la performance du réseau peut être, éventuellement, comparée avec celles des autres types de modélisation.

3.1.1 L'architectures de RNA

Sur le plan architectural, un réseau de neurones peut être vu comme un ensemble d'unités élémentaires (les neurones) interconnectées de manière à former un système avec une ou

plusieurs entrées et une ou plusieurs sorties, qui ont une topologie définie sous forme de couches.

3.1.2 Réseaux multi-couches (feed-forward)

Cette classe de réseaux feed-forward diffère de la précédente car elle a une ou plusieurs couches de neurones cachés (couches cachées) entre les couches d'entrée et de sortie (**figure 3.1**). Chaque couche est constituée d'un nombre variable de neurones, les neurones de la dernière couche (dite "de sortie") étant les sorties du système global (Nakamoto, 2017; Parizeau, 2004).

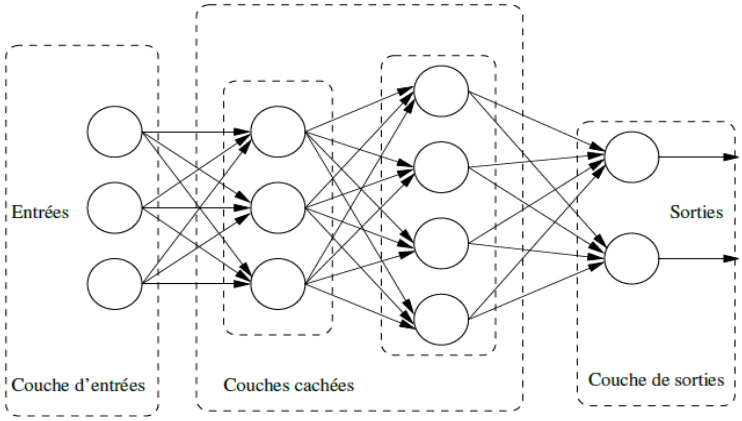


Figure 3.1 : Un réseau neuronal multi-couches (feed-forward) (Sauget, 2007).

3.1.3 Méthodologie de calcul

Le schéma de la **figure 3.2** illustre le principe de calcul des différents paramètres en utilisant les RNA.

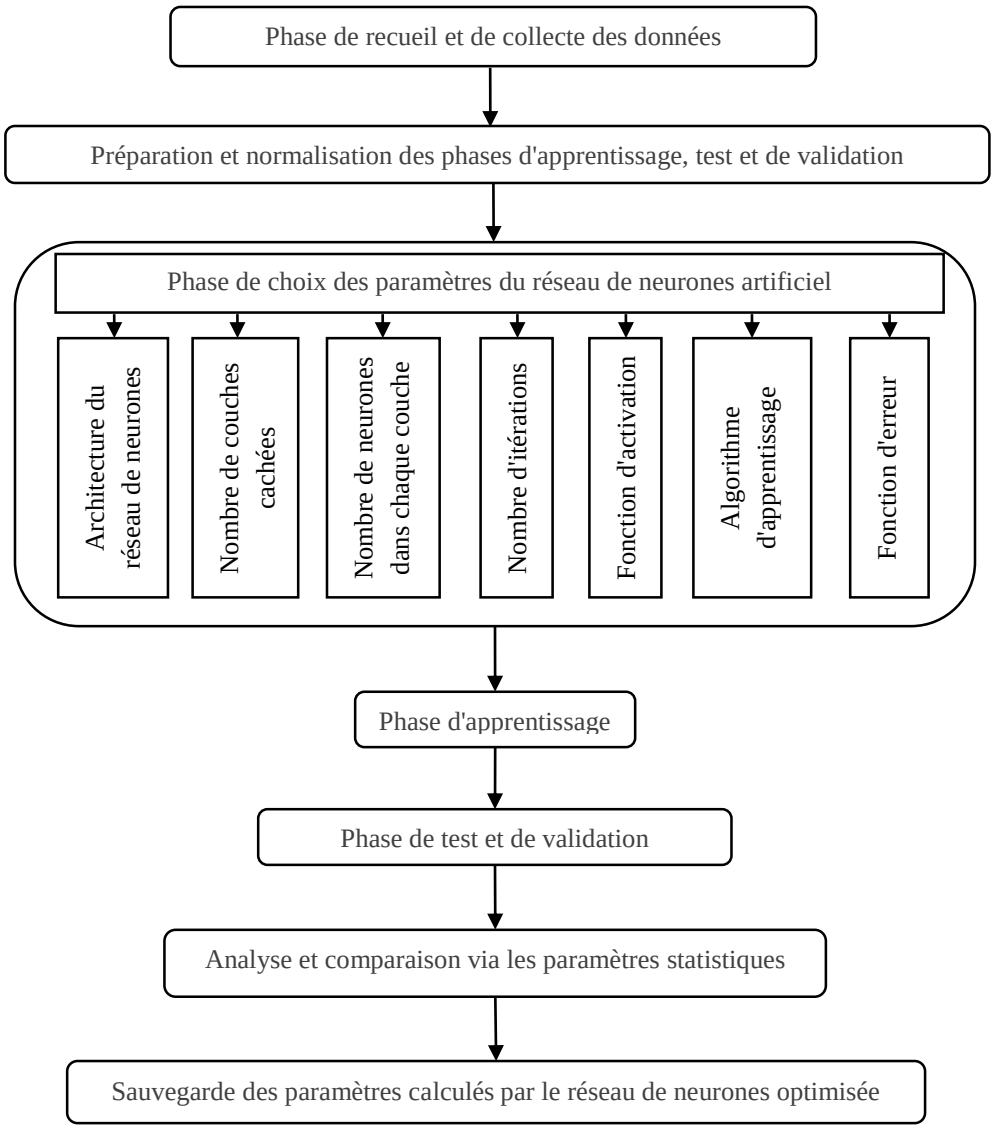


Figure 3.2 : Schéma de calcul des différents paramètres du système par les réseaux de neurones artificiel (RNAO).

3.1.4 Sélection et séparation des variables d'entrées/sortie

Il est indispensable que l'ensemble des variables d'entrée soit aussi réduit que possible ; en effet, à chaque entrée du modèle correspond un nombre de paramètres égal au nombre de neurones cachés. Il est donc nécessaire que la présentation :

- Des entrées soit aussi signifiant que possible ;
- Des entrées contiennent tous les facteurs pertinents par rapport à la grandeur à modéliser.

3.1.5 Collection de ces variables de l'expérience ou tirées à partir de la littérature

Les donnes peuvent être tirées de l'expérience comme elles peuvent être tirées à partir de la littérature scientifique en exploitant les données publiées sous forme de courbes ou tableaux.

3.1.6 Division de la base obtenue entre apprentissage, test et validation

Le processus de base de développer un modèle neuronal, il est nécessaire de disposer deux ou trois de bases de données : une sous base pour effectuer l'apprentissage, une sous base pour le test et une autre pour la validation du réseau obtenu et déterminer ses performances. Il n'y a pas de règle précise pour déterminer le partage de manière quantitative des données. Il résulte souvent d'un compromis tenant compte du nombre de données dont on dispose, l'essentiel, est que la base de données consacrée à l'apprentissage doit être la plus importante (Elie, 1997).

3.1.7 Normalisation des données

La moyenne est un terme statistique introduit pour expliquer la tendance moyenne des données. Le maximum et minimum montrent l'amplitude de la série temporelle. La variance est la moyenne des différences au carré par rapport à la moyenne (Eq. **3.1**). Pour déterminer la variance, on calcule d'abord la différence entre chaque point et la moyenne ; ensuite, on met au carré et on divise la somme par N-1. L'écart type ou bien Standard Deviation (STD) est une mesure pour quantifier la quantité de variation ou de dispersion des valeurs de données (Eq. **3.2**), c`est aussi, une statistique qui examine à quelle distance de la moyenne se trouve un groupe de nombres, en utilisant la racine carrée de la variance. Un STD élevé montre que les points de données sont répartis sur une plage de valeurs plus large, Un STD faible indique que les points de données ont tendance à être proches de la moyenne de l'ensemble de données (Ibrir et al., 2021).

$$Variance = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{N-1} \quad \textbf{(3.1)}$$

$$STD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{N-1}} \quad \textbf{(3.2)}$$

Ou x_i est les valeurs expérimentales, $\bar{x}$ est la moyenne des données expérimentales et N représente la taille des données expérimentale.

Les données sont réparties en cinq colonnes, correspondant respectivement aux :{Poids moléculaire des polluants (*Mw*), Température (*T*), Surface spécifique des adsorbats (*As*), Concentrations des adsorbants à l'équilibre (*Ce*), Capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e)}.

Les valeurs numériques ont été normalisées afin d'améliorer l'optimisation. La normalisation se fait par ligne, chaque paramètre des entrées et de sorties (x_i) est normalisé (x_i normalisée) par l`équation (**3.3**) (Premnmx de MATLAB®) suivante :

$$x_{i\ normalisée} = 2\ \frac{x_i - \min(x_i)}{\max(x_i) - \min(x_i)} - 1 \qquad \textbf{(3.3)}$$

3.1.8 Dé-normalisation des données

Les valeurs numériques seront tous dé-normalisées afin de représente ces valeurs a son état réelle, chaque paramètre des entrées et de sorties (xi normalisée) est transformé en (x_i) par l'équation (**3.4**) (Postmnmx sur MATLAB®) :

$$x_i = \frac{1}{2}(x_{i\ normalisée} + 1)(max(x_i) - min(x_i)) + min(x_i) \qquad \textbf{(3.4)}$$

3.1.9 Choix du type de réseau de neurones

Comme il s'agit d'une modélisation statique type boite noire pour approcher une fonction bornée et continue, la meilleure approche neuronale envisageable est celle des MLP à une seule couche cachée.

3.1.10 Choix du nombre de neurones dans la couche cachée et le nombre de couche cachée

Il n'existe pas de règle permettant de choix du nombre de couches, des nombres de neurones et de la fonction de transition. D'autre part, Curry et al., suggère qu'il n'y a pas une méthode qui permette de déterminer le nombre adéquat de neurones cachés afin de réaliser les performances (Curry & Morgan, 2006), Plumb et al., annoncent que la méthode la plus, connue pour optimiser les performances d'un RNA est de faire un balayage en varions le nombre de neurones dans la couche cachée et l'architecture ayant une meilleure capacité de généralisation est choisie (Plumb et al., 2005).

3.1.11 Choix de la fonction de transfert pour chaque couche

La plupart du temps la fonction d'activation dans la couche cachée est non linéaire tandis que dans la couche de sortie est linaire pour une régression non linéaire. En conséquence, il n'existe pas de méthodes spécifiques qui permettant de prévoir à priori quelle sera la fonction qui donnera les meilleurs résultats.

3.1.12 Apprentissage/validation et test du modèle développé

- **Apprentissage :** le critère d'arrêt de l'apprentissage est souvent calculé à partir d'une fonction de coût, caractérisant l'écart entre les valeurs de sortie obtenues et les valeurs désirées. Ce qui permet un arrêt adéquat de l'apprentissage pour obtenir de bonnes performances de généralisation. L'obtention des paramètres architecturaux optimaux se fera par comparaison des performances obtenues pour différentes architectures de réseaux de neurones (Elie, 1997) ;
- **Validation :** elle est utilisée lors de l'apprentissage, une fois le réseau de neurones développé, des tests s'imposent afin de vérifier la qualité des prévisions du modèle neuronal. Une validation rigoureuse du modèle développé se traduit par une proportion importante de prédictions exactes sur l'ensemble de la validation. Si les performances du réseau ne sont pas satisfaisantes, il faudra, soit modifier l'architecture du réseau, soit modifier la base d'apprentissage ;
- **Test :** concerne la vérification des performances d'un réseau de neurones hors échantillon et sa capacité de généralisation ;
- **Généralisation (interpolation/extrapolation) :** elle s'effectue avec des données hors intervalle est tout à fait nouvelles et différentes de la base de données de départ.

3.1.13 Mesurer la performance du model en utilisant des paramètres statistiques entre sa sortie et celle désirée

Les performances du réseau neuronal ont été mesurées par le coefficient de corrélation, le coefficient de détermination (R^2) et les différentes erreurs.

3.1.14 Représentation des résultats en termes graphiques et tableaux

Après l'obtention du modèle optimisé, la comparaison des résultats peut être réalisée soit en termes de courbes talques les courbes de régression, ou en termes de tableaux d'erreurs.

3.1.15 Conception de réseau de neurone artificiel

L'apprentissage supervisé est retenue dans cette étude, il consiste à fournir au réseau des jeux de données d'entrées (*Mw*, *T*, *As* et *Ce*) pour lesquels on connaît les réponses souhaitées (q_e).

On construit alors un critère d'erreur en comparant la réponse de {[q_e] prédite} par le modèle de RNA à celle attendue {[q_e] expérimentale}.

Un algorithme de correction des poids synaptiques va permettre de diminuer cette erreur et d'améliorer ainsi la réponse du RNA. La mise en œuvre de cette technique impose la constitution d'une base d'apprentissage formée de l'ensemble de jeux de données et des sorties associées.

Il n'existe pas de règle pour la fixation du nombre de couches cachées, ainsi que du nombre de neurones dans chaque couche cachée dans un réseau de neurones de type MLP pour un problème donné, sauf des limitations par quelques lois statistiques basées sur la règle heuristique qui dicte que le nombre de connexions entre neurones, qui est directement proportionnel au nombre de poids et de biais ne doit jamais dépasser la taille de la matrice données. Par conséquent, la stratégie d'essai et d'erreur est la plus raisonnable. Pour obtenir la meilleure structure neuronale, le nombre de neurones dans chaque couche cachée est varié par le modélisateur à partir d'un programme MATLAB® pour optimiser la structure à travers des tests basée sur des formules d'erreur statistique. Dans cette étude, le nombre de neurone dans chaque couche cachée a été testé pour une et pour deux couches cachées avec différentes fonctions de transfert. Tandis que le nombre de neurones a été optimisé d'une manière systématique dans les deux choix précédents dans l'algorithme du RNA. Le nombre de neurones dans le cas d`une seule couche cachée a été varié entre 1 et 20, et pour les deux couches cachées : entre 1 et 20 neurones pour la première couche cachée et entre 1 et 20 neurones pour la deuxième couche cachée. Cependant, chaque architecture a été répété 200 fois afin d'éviter la convergence vers un minimum local. Le nombre optimal de neurones cachés est défini comme le nombre pour lequel la racine de l'erreur quadratique moyenne (*RMSE*) et le coût de généralisation sont minimaux.

La **figure 3.3** représente l`organigramme de la méthodologie de calcul par les RNA.

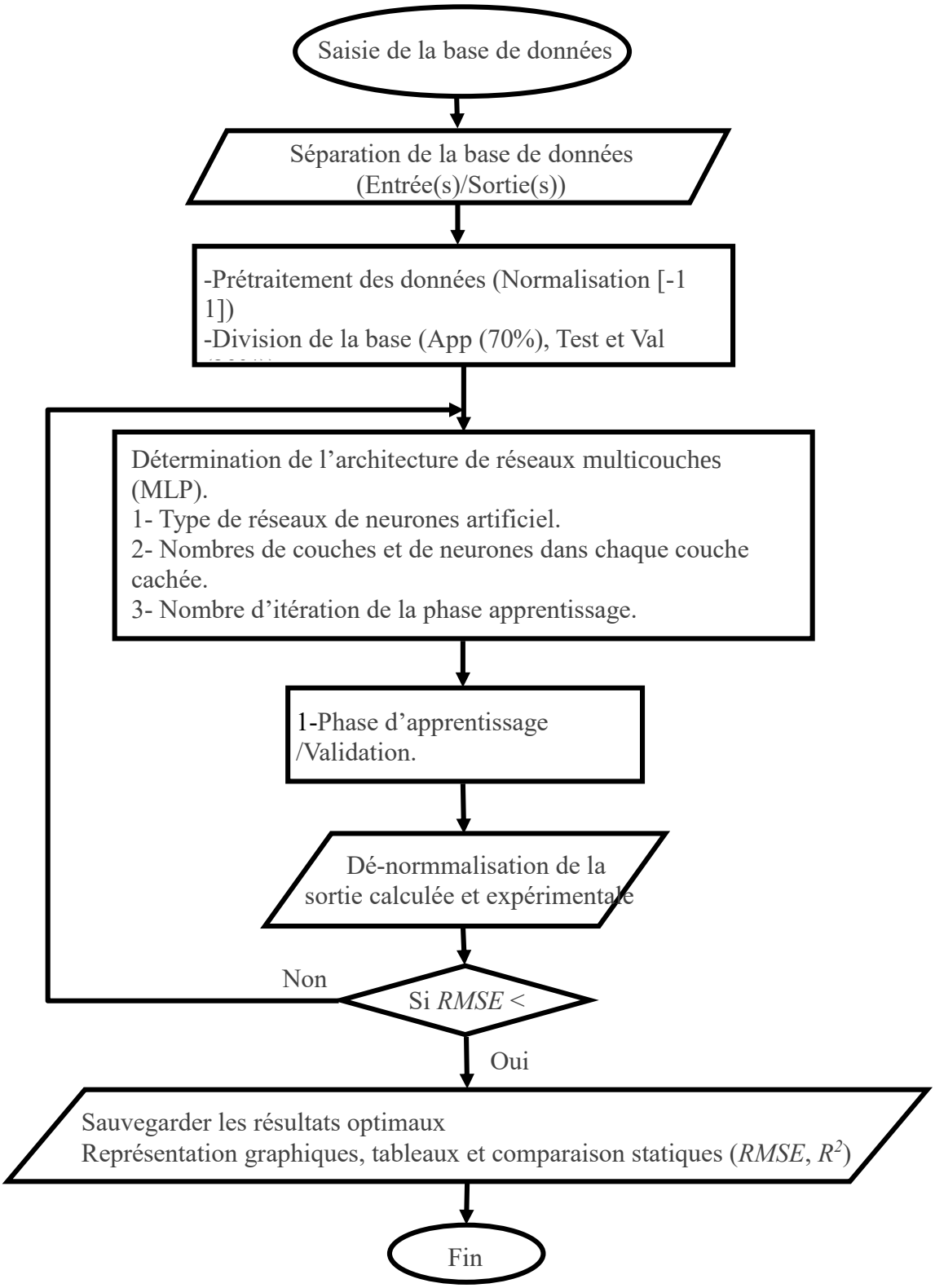


Figure 3.3 : Organigramme de la méthodologie de calcul du RNAO.

Les neurones artificiels sont arrangés en couches, où la couche d'entrée reçoit des signaux d'entrée (u_i) du monde expérimental et chaque couche successive reçoit les sorties pondérées ($w_{j,i}$) de la couche précédente comme son entrée résultante ainsi en un RNA de type feedforward (cas de Multi-Layer Perceptron MLP), dans lequel chaque sortie d'une couche est alimentée en avant à la couche qui la succède où elle est traitée. Les sorties de la dernière couche constituent les sorties prédite par le modèle de RNA.

Dans un tel RNA de type feedforward un neurone, dans une couche cachée ou une couche de sortie, a deux taches : Il additionne le biais aux entrées pondérées de plusieurs connexions et applique ensuite une fonction d'activation (dite aussi fonction de transfert ou encore fonction de seuillage) à cette somme comme donnée par l'équation (**3.5**) (pour le neurone "j" de la première couche cachée.

$$z_j = f\left[\sum_{i=1}^{n} w_{j,i}.u_i + b_j\right], j = 1,2,\dots,m \quad \textbf{(3.5)}$$

Ensuite, il propage la valeur résultante par les connexions partantes aux neurones de la couche suivante où elle subit le même processus de calcul donné par l'équation (**3.6**) :

$$v_k = f\left[\sum_{j=1}^{m} w_{j,k}\,.z_j + b_k\right], k = 1,2,\dots,l \quad \textbf{(3.6)}$$

En combinant des équations (**3.5**) et (**3.6**) on obtient la relation (Eq. **3.7**) entre la sortie vk et les entrées du RNA :

$$v_k = f\left[\sum_{j=1}^{m} w_{j,k}.f\left[\sum_{i=1}^{n} w_{i,j}.u_i + b_j\right] + b_k\right] \quad \textbf{(3.7)}$$

Enfin, il propage la valeur résultante par les connexions partantes aux neurones de la couche suivante où elle subit le même processus de calcul donné par l'équation (**3.8**) :

$$u_p = f\left[\sum_{k=1}^{l} w_{k,p}.v_k + b_p\right], p = 1,2,\dots,h \quad \textbf{(3.8)}$$

En combinant des équations (**3.7**) et (**3.8**), on obtient la relation entre la sortie "u_p" et les entrées du RNA (Eq. **3.9**) :

$$u_p = f\left[\sum_{k=1}^{l} w_{k,p}.f\left[\sum_{j=1}^{m} w_{j,k}.f\left[\sum_{i=1}^{n} w_{i,j}.u_i + b_j\right] + b_k\right] + b_p\right] \quad \textbf{(3.9)}$$

À la fin les meilleurs résultats en termes d'erreur sont sauvegardés.

3.2 Modélisation par Support Vector Machine (SVM) et le Support Vector Machine couplé avec l`Algorithme de Libellule (DA-SVM)

3.2.1 Modélisation par Support Vector Machine (SVM)

Dans cette partie, l`algorithme de SVM est utilisé pour la modélisation non linéaire de la capacité d'adsorbée à l'équilibre des adsorbants (q_e) en fonction des variables d'entrées, en utilisant les mêmes données expérimentales utilisées pour développer le modèle de RNA, et la répartition des données est divisée en 2 phases : 80% pour la phase d'apprentissage et 20% pour la phase de test. Le modèle SVM génère une relation non linéaire entre les entrées, qui sont : *Mw*, *T*, *As* et *Ce* et la sortie qui est la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants. Pour cette raison, une fonction du noyau est requise pour le mappage implicite des motifs d'apprentissage dans l'espace des fonctionnalités. Une fonction de noyau peut être n'importe quelle fonction mathématique répondant au théorème de Mercer. Plusieurs fonctions du noyau sont rapportées dans la littérature. L`obtention d`une meilleure structure du modèle prédictif est basée sur le test de ses paramètres de régularisation d'une manière systématique durant le processus d'optimisation par le modélisateur à partir d'un programme MATLAB®, à travers des formulées d`erreur statistique. Cependant, cela peut être une tâche délicate et peut conduire à un ajustement excessif du critère de sélection du modèle (généralement basé sur une validation croisée) lorsque plus de quelques hyper-paramètres doivent être ajustés. Dans la présente modélisation par SVM, la fonction du noyau utilisée est la fonction gaussienne de base radiale (GRBF). L`expression mathématique de la fonction du noyau testée est la suivante (Eq. **3.10**) (Scholkopf and Smola 2001; Min and Lee 2005; Keskes et al. 2020) :

Gaussian Radial Basic Function (GRBF):

$$k(x_i.x_j) = exp\left(-1/2\,\sigma^2\ \left|x_i\ -\ x_j\right|^2\right) \qquad \textbf{(3.10)}$$

Où σ est la largeur de la fonction RBF définis par l'utilisateur. L'organigramme de la méthode de SVM est présenté dans la **figure 3.4**.

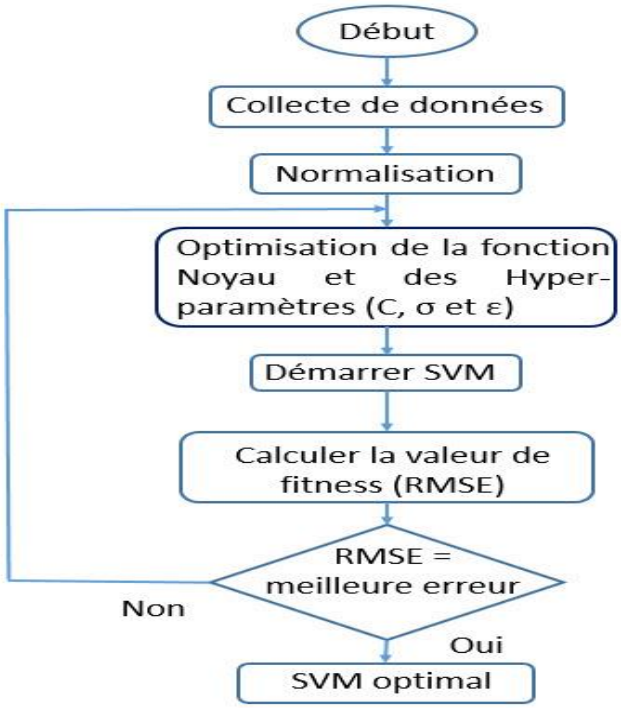


Figure 3.4 : Organigramme du modèle SVMO, [Mesellem, Hadj, et al., 2021].

Pour obtenir un modèle SVM performant avec une bonne capacité prédictive, il y a trois paramètres qui nécessitent d'être choisis avec concentration (Amroune et al., 2018; Li et al., 2013). Ces paramètres dit les hyper-paramètres du modelé SVM incluent le paramètre de pénalité *C*, le coefficient de non-sensibilité ε et les paramètres du noyau (bande passante du noyau gaussien RBF σ dans cette étude). Ces hyper-paramètres ont une grande importance dans la précision de régression et les performances de généralisation du modèle SVM (Amroune et al., 2018; Li et al., 2013). Par conséquent, les valeurs optimales de σ, C et ε sont obtenus par un test d'essais et d'erreur, le **tableau 3.1** représente les plages de variation des hyper-paramètres utilisés dans cette modélisation.

Tableau 3.1 : Plages des paramètres initiaux pour SVM.

SVM	Les hyper- parameters de SVM	C	σ	ε
	Limite inférieur	90	0.3	0
	Limite supérieur	100	0.6	10^{-2}
	Nombre d'agents	10		
	nombre maximum d'itération	200		
	Phase d`apprentissage (%)	80		
	Phase de test (%)	20		

Le coefficient de détermination R^2 et la racine de l`erreur quadratique moyenne *RMSE* sont les paramètres statistiques qui sont utilisés pour l'évaluation de la performance de ces modèles.

3.2.1.1 Le principe fondateur des SVM

Le principe de base des SVM consiste de ramener le problème de la discrimination à celui, linéaire, de la recherche d'un hyperplan optimal. Deux idées ou astuces permettent d'atteindre cet objectif (*Machines à Vecteurs Supports*, 1995) :

- La première consiste à définir l'hyperplan comme solution d'un problème d'optimisation sous contraintes dont la fonction objective ne s'exprime qu'à l'aide de produits scalaires entre vecteurs et dans lequel le nombre de contraintes "actives" ou vecteurs supports contrôle la complexité du modèle.
- Le passage à la recherche de surfaces séparatrices non linéaires est obtenu par l'introduction d'une fonction noyau (Kernel) dans le produit scalaire induisant implicitement une transformation non linéaire des données vers un espace intermédiaire (espace caractéristique) de plus grande dimension. D'où l'appellation couramment rencontrée de machine à noyau ou Kernel machine. Sur le plan théorique, la fonction noyau définit un espace hilbertien, dit auto-reproduisant et isométrique par la transformation non linéaire de l'espace initial et dans lequel est résolu le problème linéaire.

3.2.1.2 Architecture de SVM

L'architecture du modèle SVM n'est pas déterminée a priori. Les vecteurs d'entrée supportant la structure du modèle sont sélectionnés via un processus d'apprentissage du modèle illustré à la **figure 3.5**.

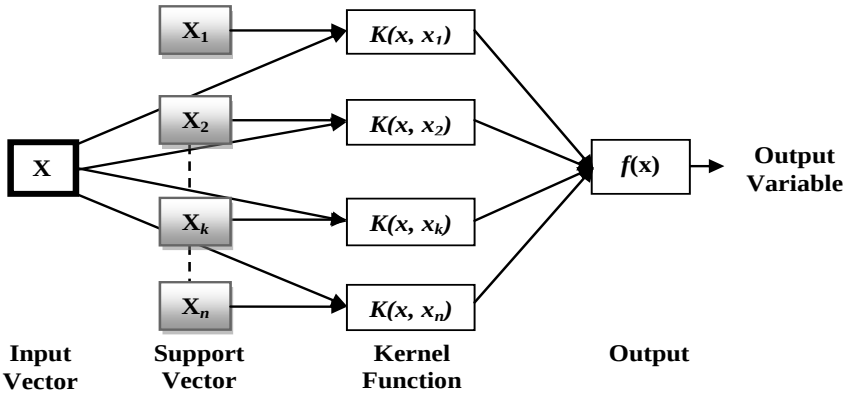


Figure 3.5 : Architecture de SVM.

3.2.1.3 Modifier et évaluation des paramètres des modèles

L'apprentissage supervisé effectué par la méthode SVM utilise une partie de l'ensemble d'exemples d'un espace, pour calculer un modèle de décision qui sera généralisé sur l'ensemble de tous les exemples de l'espace. Il est très important d'avoir des mesures permettant de qualifier le comportement du modèle appris sur les exemples qui ne sont pas utilisées lors de l'entrainement. Ces métriques sont calculées soit sur les exemples d'entrainement eux-mêmes ou sur des exemples réservés à l'avance pour les tests.

3.2.1.4 Avantages / applications des SVMs

Les SVMs ont un nombre d'avantages sur les autres méthodes statistiques ou les réseaux de neurones :

- Les SVMs permettent de traiter plusieurs problèmes de datamining : classification, régression, clustering, détection des outliers, etc.
- Les SVMs permettent de traiter les données numériques et symboliques, ce qui les a favorisées dans plusieurs applications complexes tel que le textmining, la reconnaissance des images, la reconnaissance vocale, les séquences biologiques, etc.
- Les capacités de généralisation et la simplicité d'entrainement des SVMs sont bien au-delà des autres méthodes.
- Les SVMs sont très efficaces sur les données à nombre élevé d'attributs, même avec peu d'exemples. Elles n'imposent aucune limite sur le nombre d'attributs sauf les limites imposées par le hardware.

3.2.2 Modélisation par Support Vector Machine couplé avec l`Algorithme de Libellule (DA-SVM)

3.2.2.1 Le principe fondateur des DA

Le comportement de tout essaim suit les principes donnés par Reynolds (Reynolds, 1987) :

- Séparation, dont le but est d'éviter la collision entre les individus et leurs voisins dans l'essaim statique ;
- Alignement, dont le but est de faire correspondre la vitesse individuelle avec d'autres dans le même groupe ;
- Cohésion, qui est utilisée pour indiquer la tendance des individus à se déplacer vers le centre du groupe.

Les groupes dynamiques et statiques sont représentés sur les (**figures 3.6** et **3.7**) (Mafarja et al., n.d.) :

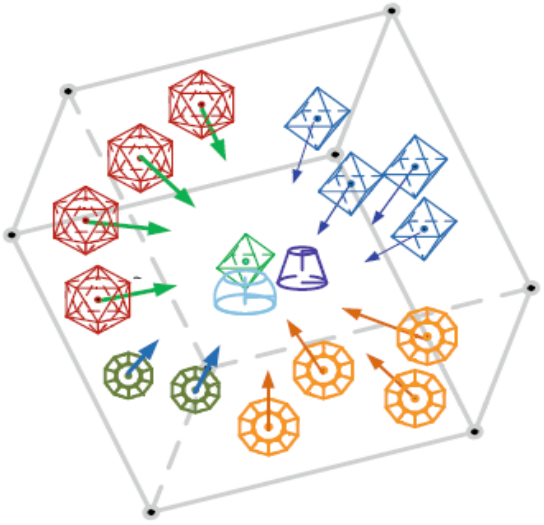


Figure 3.6 : Comportements d'essaimage dynamiques.

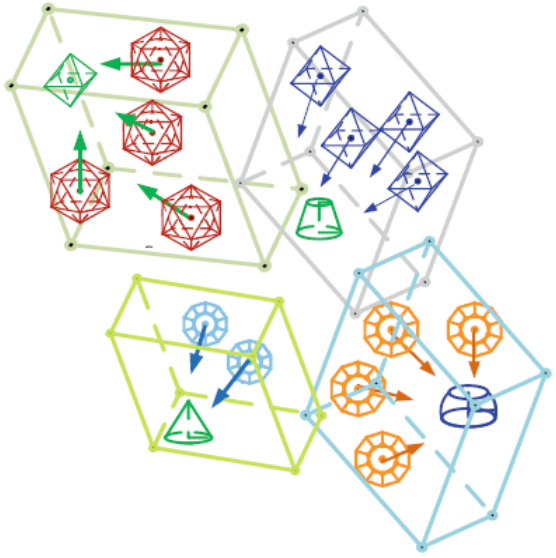


Figure 3.7 : Comportements d'essaimage statiques.

3.2.2.2 Le processus de base de SVM-DA

Dans cette partie, la même base de données ajustée pour élaborer le modèle de RNA et SVM est utilisée pour l`élaboration du modèle hybride de DA-SVM, tandis que le modèle proposé est basé sur l'algorithme d'apprentissage SVM couplée à l'algorithme de Libellule (DA) pour l'optimisation de ses hyper-paramètres. Les dimensions de partage des données pour l`apprentissage du modèle et pour le test, ainsi que les plages des hyper-paramètres sont

identiques à celles décrites pour le modèle de SVM. L'organigramme de l`algorithme métaheureustique de Libellule (DA) est présenté dans la **figure 3.8**.

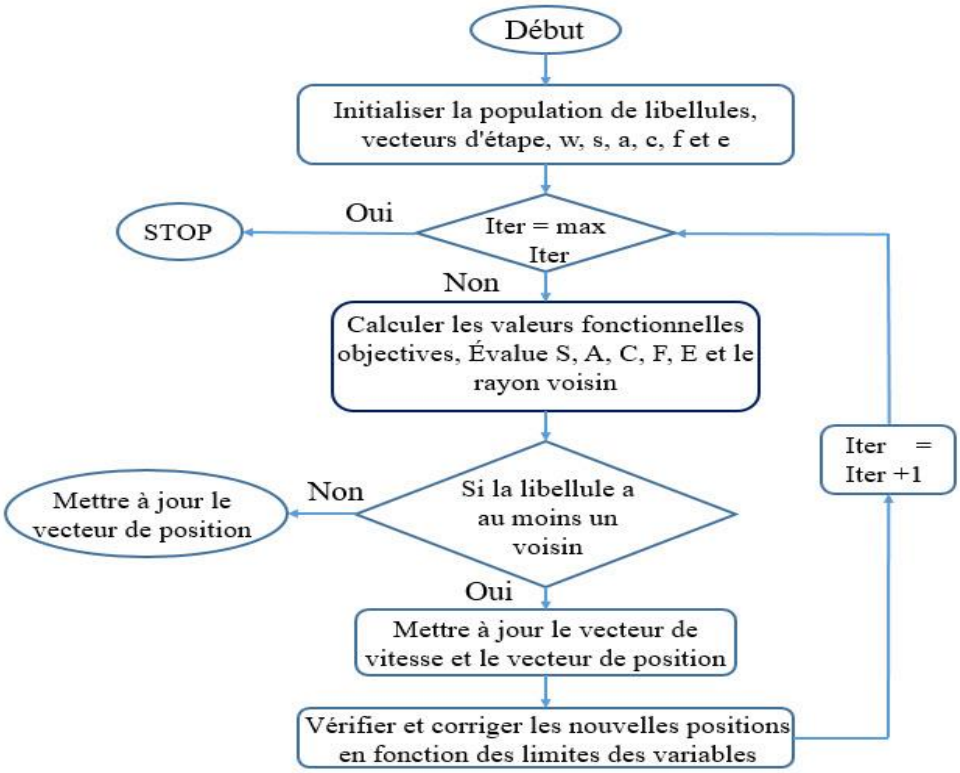


Figure 3.8 : Organigramme de l'algorithme Dragonfly, [Mesellem, Hadj, et al., 2021].

Le principe de l'algorithme d'apprentissage de la machine à vecteur de support reste le même, sauf que, l'algorithme DA alimente le SVM avec des valeurs aléatoire d'hyper-paramètres dans leurs plages définies au départ.

Le flux de l'algorithme de Libellule couplée avec le SVM

Etape 01 : Définissez les valeurs des paramètres du DA tels que :

- Dimension des paramètres à optimiser
- Le nombre de Libellule *s* ;
- Le nombre maximum d'itérations ;
- Les limites supérieure et inférieure de C, σ et ε.

Etape 02 : Initialiser les vecteurs pas ΔX_i (i = 1, 2, ..., n), les valeurs de s, a, c, f, e puis initialiser le poids d'inertie (w) et les valeurs des hyper-paramètres SVM (C, σ et ε).

Etape 03 : Entraînez le modèle SVM à l'aide d'un ensemble d'entraînement et calculez la valeur physique de chaque Libellule. L'erreur quadratique moyenne (*RMSE*) a été utilisée comme fonction de fitness.

Etape 04 : Mettez à jour les valeurs de s, a, c, f, e et w.

Etape 05 : Pour tous les individus, calculez les valeurs de S, A, C, F et E.

Etape 06 : Mettre à jour le rayon voisin (r).

Etape 07 : Corrigez les nouvelles positions en tenant compte des valeurs supérieures et inférieures des variables *C*, σ et ε.

Etape 08 : Vérifiez le critère d'arrêt : si son critère est atteint, la meilleure position pour tous les individus comprenant les paramètres SVMr optimisés est sélectionnée, puis le modèle SVMr a été testé et évalué. Sinon, reviens à l'étape 3.

La **figure 3.9** représente le schéma du modèle DA-SVMr appliqué pour la prédiction de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e).

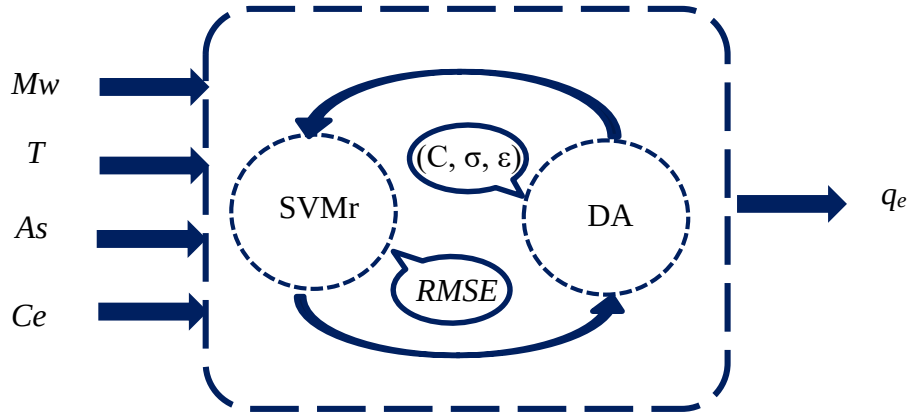


Figure 3.9 : Représentation schématique du modèle DA-SVMr appliqué à la prédiction de la capacité d'adsorption de l'adsorbant à l'équilibre (q_e).

L'organigramme des étapes menant au développement du modèle hybride DA-SVM sont illustrées à la **figure 3.10**.

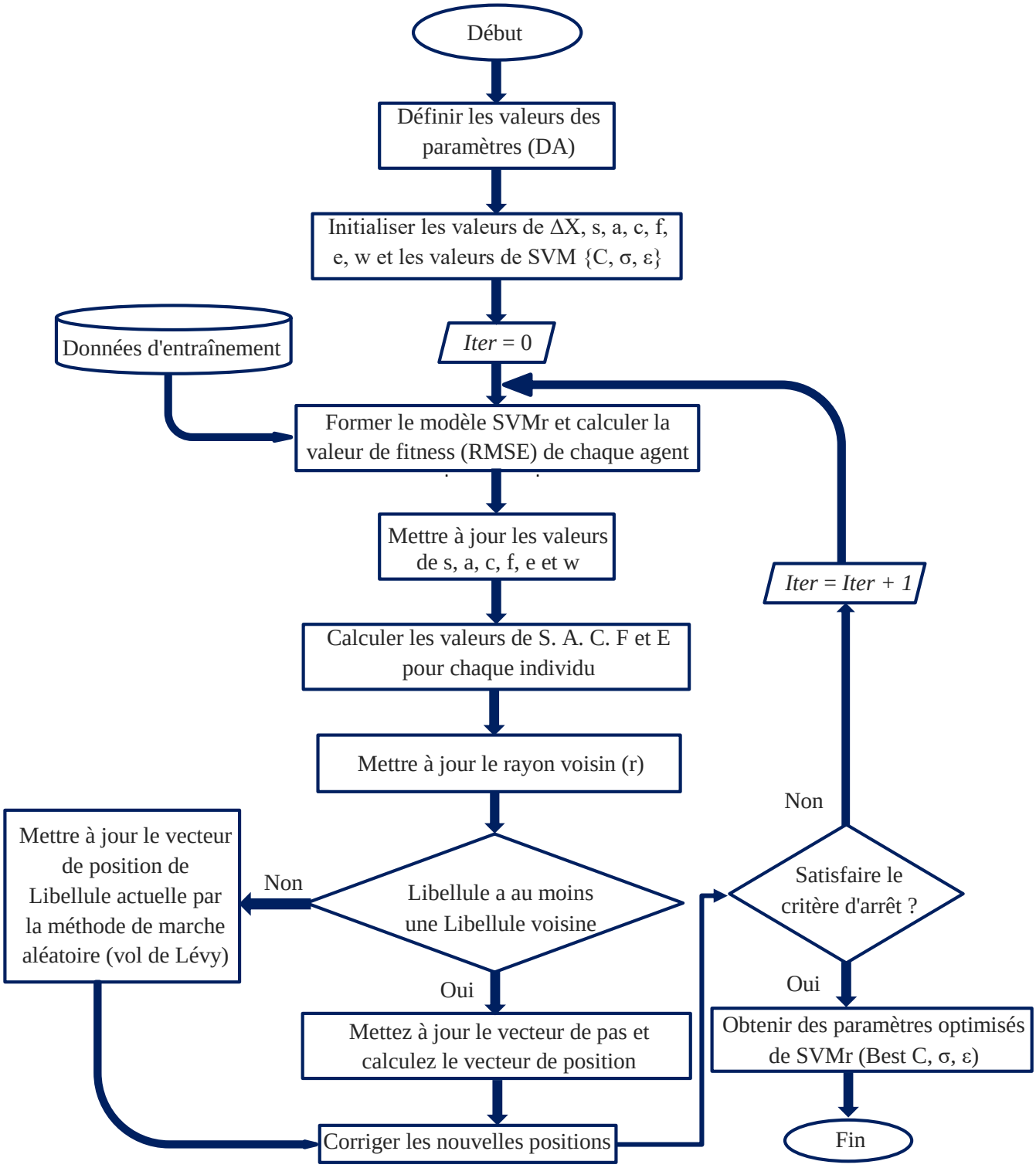


Figure 3.10 : Organigramme du modèle DA-SVMO, [Mesellem, Hadj, et al., 2021].

3.3 Critères de performances statistiques (Analyse et évaluation d'un modèle)

La fiabilité et la précision des modèles, développés à partir des méthodes d'intelligence artificielle, reposent sur divers indices statistiques. L'évaluation des modèles proposés dans cette étude a été organisée à l'aide de huit critères de performances statistiques afin de tester le pouvoir prédictif. Les indices d'évaluation couramment utilisés comprennent l'erreur quadratique moyenne (*MSE*), la racine de l'erreur quadratique moyenne (*RMSE*), l'erreur quadratique moyenne normalisée (*NRMSE*), l'erreur moyenne absolue (*MAE*), l'erreur moyenne absolue en pourcentage (*MAPE* (%)), l'erreur relative absolue (*RAE*), le coefficient de corrélation (*R*) et le coefficient de détermination (R^2), sont donnés par les équations (**3.11**) à (**3.18**) :

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y - Y_{cal})^2 \quad \textbf{(3.11)}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_{cal} - Y)^2} \quad \textbf{(3.12)}$$

$$NRMSE = \sqrt{\frac{n\sum_{i=1}^{n}(Y-Y_{cal})^2}{\left(\sum_{i=1}^{n}Y\right)^2}} \quad \textbf{(3.13)}$$

$$MAE = \frac{1}{n} * \sum_{i=1}^{n}|Y_{cal} - Y| \quad \textbf{(3.14)}$$

$$MAPE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{|Y-Y_{cal}|}{Y}\right) * 100 \quad \textbf{(3.15)}$$

$$RAE = \left|\sum_{i=1}^{n}\frac{Y-Y_{cal}}{|Y|}\right| \quad \textbf{(3.16)}$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^{n}((Y-\bar{Y})*(Y_{cal}-\bar{Y}_{cal}))}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(Y-\bar{Y})^2 * \sum_{i=1}^{n}(Y_{cal}-\bar{Y}_{cal})^2}} \quad \textbf{(3.17)}$$

$$R^2 = 1 - \left(\frac{\sum_{i=1}^{n}((Y-Y_{cal})^2)}{\sum_{i=1}^{n}((Y-\bar{Y})^2)}\right) \quad \textbf{(3.18)}$$

Où Y sont les données observées, $\bar{Y}$ est la moyenne arithmétique des données observées donnés par l'équation (17), Y_{cal} sont les valeurs calculées, $\bar{Y}_{cal}$ est la moyenne arithmétique des données prédites donnés par l'équation (18) et "n" est le nombre des données.

$$\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y \quad \textbf{(3.19)}$$

$$\bar{Y}_{cal} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y_{cal} \quad \textbf{(3.20)}$$

Conclusion

Il existe de nombreuses utilisations et fonctions possibles avec un ordinateur; développement de jeux, création de pages Web, analyse de données, recherche, calculs, etc. La programmation offre de nombreuses opportunités, le plus important étant, l'apprentissage par machine. Étant donné qu'avec suffisamment de données et un modèle d'apprentissage automatique précis, il est possible de prédire d'autres outputs expérimentaux. Ainsi, l'aspect le plus intéressant est l'apprentissage automatique, c'est ses applications possibles et déjà réelles.

Les algorithmes et systèmes d'apprentissage automatique ont connu d'importantes avancées ces dernières années grâce à la disponibilité de grands volumes de données et du calcul intensif, sans oublier les avancées intéressantes en optimisation, et c'est la raison pour laquelle, une modélisation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants basée sur des techniques d'apprentissage de la machine semblait prometteuse.

Tout au long de ce chapitre, des techniques d'apprentissage de la machine et algorithmes qui ferons objet d'outils pour la modélisation dans ce travail sont décrites de manière explicite.

Références Bibliographiques

Amroune, M., Bouktir, T., & Musirin, I. (2018). Power System Voltage Stability Assessment Using a Hybrid Approach Combining Dragonfly Optimization Algorithm and Support Vector Regression. Arabian Journal for Science and Engineering, 43(6), 3023–3036. https://doi.org/10.1007/s13369-017-3046-5

Curry, B., & Morgan, P. H. (2006). Model selection in neural networks: some difficulties. European Journal of Operational Research, 170(2), 567–577.

Elie, F. (1997). Conception et realisation d'un systeme utilisant des reseaux de neurones pour l'identification et la caracterisation a bord de satellites de signaux transitoires de type sifflement. Orléans.

Ibrir, A., Kerchich, Y., Hadidi, N., Merabet, H., & Hentabli, M. (2021). Prediction of the concentrations of PM1, PM2.5, PM4, and PM10 by using the hybrid dragonfly-SVM algorithm. Air Quality, Atmosphere and Health, 14(3), 313–323. https://doi.org/10.1007/s11869-020-00936-1

Kanungo, D. P., Arora, M. K., Sarkar, S., & Gupta, R. P. (2006). A comparative study of conventional, ANN black box, fuzzy and combined neural and fuzzy weighting procedures for landslide susceptibility zonation in Darjeeling Himalayas. Engineering Geology, 85(3–4), 347–366.

Keskes, S., Hanini, S., Hentabli, M., & Laidi, M. (2020). Artificial Intelligence and Mathematical Modelling of the Drying Kinetics of Pharmaceutical Powders. Kemija u Industriji, 69(3–4), 137–152. https://doi.org/10.15255/KUI.2019.038

Li, X., Li, L., Zhang, B., & Guo, Q. (2013). Hybrid self-adaptive learning based particle swarm optimization and support vector regression model for grade estimation. Neurocomputing, 118, 179–190. https://doi.org/10.1016/j.neucom.2013.03.002

Machines à vecteurs supports. (1995). 1–16.

Mafarja, M., Heidari, A. A., Faris, H., Mirjalili, S., & Aljarah, I. (n.d.). Dragonfly Algorithm : Theory , Literature Review , and Application in Feature Selection. Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-12127-3

Min, J., & Lee, Y. (2005). Bankruptcy prediction using support vector machine with optimal choice of kernel function parameters. Expert Systems with Applications, 28(4), 603–614. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2004.12.008

Mesellem, Y., Hadj, A. A. El, Laidi, M., Hanini, S., & Hentabli, M. (2021). Computational intelligence techniques for modeling of dynamic adsorption of organic pollutants on activated carbon. Neural Computing and Applications, 2. https://doi.org/10.1007/s00521-021-05890-2

Nakamoto, P. (2017). Neural Networks and Deep Learning: Deep Learning explained to your granny A visual introduction for beginners who want to make their own Deep Learning Neural Network. CreateSpace Independent Publishing Platform.

Parizeau, M. (2004). Réseaux de neurones. GIF-21140 et GIF-64326, 124.

Plumb, A. P., Rowe, R. C., York, P., & Brown, M. (2005). Optimisation of the predictive ability of artificial neural network (ANN) models: a comparison of three ANN programs and four classes of training algorithm. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 25(4–5), 395–405.

Reynolds, C. W. (1987). Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. Proceedings of the 14th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, 25–34.

Sauget, M. (2007). Parallélisation de problèmes d'apprentissage par des réseaux neuronaux artificiels. Application en radiothérapie externe.

Scholkopf, B., & Smola, A. J. (2001). Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond. The MIT Press, Cambridge.

CHAPITRE IV

PARTIE EXPÉRIMENTALE (CONTRIBITION 1 "RNA" et CONTRIBUTION 2 "SVM")

CONTRIBUTION 1 :

Approche de la modélisation RNA

CONTRIBUTION 2 :

Approche de la modélisation SVM

Introduction

Plusieurs techniques de séparation ont été utilisées pour étudier la dépollution de l'eau de différents polluants, parmi ces méthodes, l'adsorption multi-composants (Srivastava et al., 2006). Le procédé l'adsorption multi-composants suscite l'intérêt de nombreux secteurs industriels car elle est considérée comme le processus le plus simple, avec une grande efficacité et rentabilité (Gutierrez et al.,1993 ; Pauletto et al., 2021; Liu et al., 2010; Vrsalović et al., 2020; Ostojčić et al., 2020).

L'équilibre d'adsorption multi-composants est complexe en raison des relations non linéaires entre les variables dépendantes et la nature des interactions entre l'adsorbant et l'adsorbat (synergie, antagonisme ou non-interaction) (Pauletto et al., 2020).

Les espèces chimiques sont adsorbées en même temps avec un degré de compétition différent, en fonction de plusieurs paramètres thermo-physicochimiques et morphologiques (Maleki et al., 2016). Dans ce sens, Différents modèles théoriques et empiriques (cinétiques telles que pseudo-premier ordre, pseudo-second ordre, diffusion d'un film liquide et isothermes compétitif tels que Langmuir, Freundlich, Temkin, Dubinin–Radushkevich et Elovich) (Manjunath et al., 2020) ont été proposés dans la littérature pour modéliser ce phénomène. Cependant, l'application de ces modèles est limitée car ils sont établis sur la base de certaines hypothèses restrictives sur la nature physico-chimique qui affecte le système d'adsorption (Zhang et al., 2023). En raison de cette complexité, les algorithmes d'apprentissage de machine apparaissent comme un outil puissant par rapport aux autres méthodes classiques pour aborder directement les relations non linéaires à partir des échantillons sans aucune connaissance préalable de la nature chimique ou physique qui affecte le système (El bey et al., 2021; Gadekar & Ahammed, 2019; Yettou et al., 2021; Zhang et al., 2023). Différents algorithmes d'apprentissage de machine ont été utilisés dans la littérature comme outil mathématique avancé pour modéliser la capacité d'adsorption d'un système d'adsorption à un ou multi-composants, tels que : réseau de neurones artificiels (RNA) (El bey et al., 2021; Gadekar & Ahammed, 2019; Mesellem, Abdallah el Hadj, et al., 2021; Mesellem, Hadj, et al., 2021; Pauletto et al., 2020, 2021; Yettou et al., 2021), machine à vecteur de support (SVM) (Ghaedi et al., 2014; Mesellem, Hadj, et al., 2021; Syah et al., 2022; Yettou et al., 2021).

4.1 Méthodologie de travail

La présente étude est effectuée selon la procédure de travail illustrée dans la **figure 4.1**.

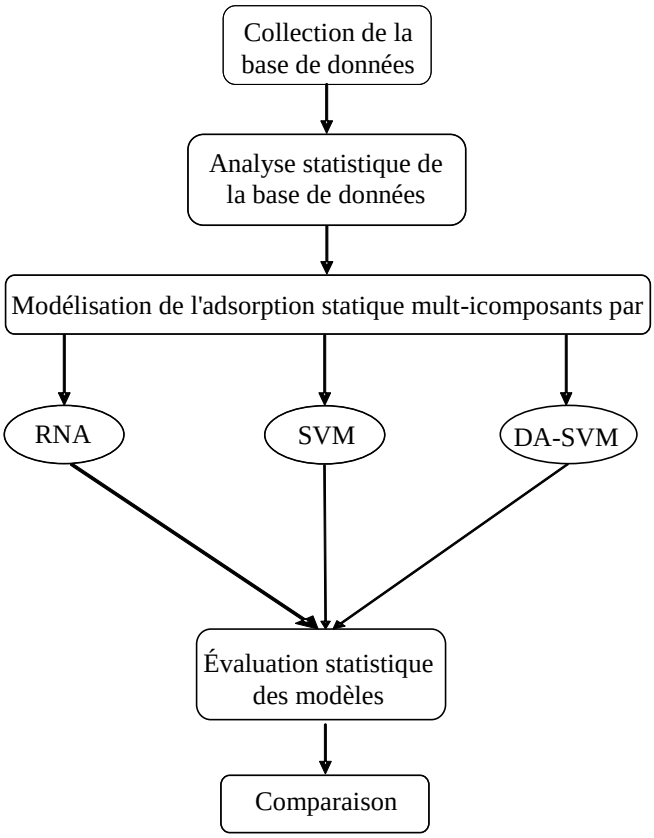


Figure 4.1 : Organigramme illustrant la méthodologie de travail.

Des travaux de recherche antérieurs ont rapporté des données expérimentales sur l'adsorption statique des systèmes multi-composants des différents polluants sur plusieurs matériaux poreux comme adsorbant dans des conditions opératoires différentes. Les modèles sont proposées comme suit : un modèle basé sur les réseaux de neurones artificiels (RNA) et deux modèles basée sur un autre type d'apprentissage de la machine fondée sur les vecteurs de support (SVM) et l'algorithme libellule-SVM (Dragonfly-SVM) qui est une machine hybride associant un algorithme de l'intelligence d'essaims à la machine SVM classique. Une évaluation des modèles développés en utilisant différents critères statistiques qui détermine la précision et la robustesse de chaque modèle. Enfin, l'étude comparative des différents modèles a pour fin la classification des modèles selon leur performance principalement jugée par la capacité de prédiction.

4.2 Sélection de la base de données

Les données utilisées ont été collectées à partir d'articles expérimentaux précédemment publiés dans la littérature et contiennent toutes sortes de polluants, notamment des ions de métaux lourds, des colorants et des composés organiques, ainsi que différents adsorbants naturels/synthétiques. L'ensemble de données contient cinq variables importantes avec 1023 points ; les variables sont divisées en quatre (04) entrées qui sont (poids moléculaire, concentrations des adsorbants à l'équilibre, surface spécifique de l'adsorbant et température) et une sortie qui est la capacité d'adsorption à l'équilibre. Le **tableau 4.1** représente les paramètres affectant.

Tableau 4.1 : Description statistique de la base de données.

Catégories des variables	Variables			Unités
Entrées	Poids moléculaire de chaque polluant	Mw	Mw_1	$g.mol^{-1}$
			Mw_2	
			Mw_3	
	Surface spécifique de l'adsorbant	As		$m^2.g^{-1}$
	Température	T		°C
	Concentrations des adsorbats à l'équilibre	Ce	Ce_1	$mg.l^{-1}$
			Ce_2	
			Ce_3	
Sorties	Capacité d'adsorption à l'équilibre pour chaque adsorbant	q_e	$q_{e,1}$	$mg.g^{-1}$
			$q_{e,2}$	
			$q_{e,3}$	

La littérature et le nombre de données utilisées pour chaque système sont cités dans le **tableau 4.2** .La base des données est recueillie à partir de divers articles publiés ; chaque papier contient différents systèmes d'adsorption compétitifs ternaires sur différents adsorbants. Ces articles publient des adsorptions singulières ou compétitives comme dans les systèmes binaires ou ternaires. Dans ce travail, nous avons collecté uniquement les données expérimentales de l'adsorption compétitive ternaire à l'aide du logiciel graphique Digitizer 4.1. Les trois métaux ou antibiotiques indiqués dans le **tableau 4.2** représentent les trois polluants à éliminer en solution aqueuse.

Tableau 4.2 : Base des données des mélanges d'adsorbat en solution aqueuse adsorbés sur différents adsorbants.

Ref.	Adsorbats	Adsorbants	Taille de la base de données	Ref.	Adsorbats	Adsorbants	Taille de la base de données
20	Cd^{2+}+Cu^{2+}+Pb^{2+}	Charbon actif	24	21	Cd^{2+}+Cu^{2+}+Zn^{2+}	Biocharbon	15
		Coque d'arachide					
		Sciure					
22	Cd^{+2}+Ni^{+2}+Co^{2+}	Nanotubes	33	23	Zn^{2+}+Cu^{2+}+Pb^{2+}	Biocharbon	18
24	Cu^{+2}+Pb^{+2}+Hg^{+2}	Charbon actif	39			Biocharbon Magnétique	18
25	Pb^{2+}+Cu^{2}++Zn^{2+}	Zéolite NaX	18	26	Cd^{2+}+Cu^{2+}+Zn^{2+}	Sédiment naturel	45
	Pb^{2+}+Cd^{2+}+Cu^{2+}		18	27	Cu^{+2}+Zn^{+2}+Hg^{+2}	Biocharbon magnétique calciné	12
	Cd^{2+}+Cu^{2+}+Zn^{2+}		18			Biocharbon calciné	12
28	Pb^{2+}+Hg^{2+}+Cr^{3+}	Boue activée	51	29	Cu^{2+}+Zn^{2+}+Cd^{2+}	Déchet de choux	11
					Cu^{2+}+Zn^{2+}+Pb^{2+}		19
					Cu^{2+}+Pb^{2+}+Cd^{2+}		22
30	Cr^{3+}+Pb^{2+}+Cd^{2+}	Biomasse anaerobique morte (DAB)	30	31	Pb^{2+}+Cu^{2+}+Cd^{2+}	Porcelanite locale	39
32	Ni^{2+}+Cu^{2+}+Pb^{2+}	Charbon actif par l'acide Phosphorique	18	33	Ni^{2+}+Cu^{2+}+Cd^{2+}	Roche phosphatée (PR)	36
34	Cu^{+2}+Zn^{+2}+Pb^{+2}	fibre de Polypropylène	30	35	Ni^{2+}+Cd^{2+}+Pb^{2+}	Silica mésoporeu et nano-mésoporeu (Nano MCM-41)	15
36	Pb^{2+}+Zn^{2+}+Cd^{2+}	Al-SM	27	37	Pb^{2+}+Hg^{2+}+Cd^{2+}	Biosorption	6
	Pb^{2+}+Zn^{2+}+Cd^{2+}	ASM	27		Pb^{2+}+As^{5+}+Hg^{2+}		6
					Pb^{2+}+As^{5+}+Cr^{3+}		6
					As^{5+}+Hg^{2+}+Cr^{3+}		6
38	Pb^{2+}+Zn^{2+}+Cd^{2+}	Tourbe	24	39	Remazol reactive jaune + Remazol reactive noir + Remazol réactif rouge	Charbon actif	15
40	Phenanthrène + Naphthalène + Naphthol	Charbon nanotube	15	41	Methylène bleu+ Malachite vert+ Congo rouge	Charbon actif	12
42	Congo rouge+ Crystal violet+ Brilliant vert	Composite de biopolymère alginique	30	43	Safranine O+ Brilliant green+ Methylène blue	Pomme de pin modifiée	45
44	Acetaminophene+ Diclofénaque+ Tétracycline	Argile	54	45	Methylene bleu+ Crystal violet+ Congo rouge	Argile	18
46	Tétracycline+ Amoxicilline+ Ciprofloxacine	Poudre de pistache en poudre	30	47	Congo rouge+ Brilliant vert+ Methylène bleu	Composite de biopolymère Alginique	30

Suite **tableau 4.2**							
48	Carbamazepine+ Paroxetine+ Oxazepame	Charbon actif commercial	18	49	Ecarlalate rouge +Eosin Jaune + violet Réactif K-3R	EPIDMA/bentonite	24
50	Ethanol+ Acetone + Acide Acétique	Résine	24	51	Acide trimellitique + Acide hemimellitique + Acide pyromellitique	Déchet agricole céllulosique	15
52	Acetone+ Toluene + *n*-hexane	Charbon actif	51				

4.3 Normalisation de la base de données

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devienne dans la plupart des cas, une exigence pour les matrices des inputs, du fait qu'on utilise souvent des fonctions de transfert bornées de type sigmoïdes dans les modélisations statiques.

Les statistiques descriptives sont utilisées pour décrire quantitativement ou résumer les caractéristiques des données afin d'expliquer davantage leur implication. Les variables d'entrées et la sortie, les teneurs extrêmes (maximum et minimum) et les variations statistiques descriptives des données sur les variables du système sont résumés dans le **tableau 4.3**. Dans ce travail, on a utilisé la base de données qui est représentée dans le **tableau 4.3**. Les valeurs numériques ont été normalisées afin d'améliorer l'optimisation.

Tableau 4.3 : Normalisation de la base de données.

Catégories des variables	Variables		min	max	moy	écart type
Entrées	***Mw***		28.01	991.82	235.263	211.785
	As		0.32544	1476	276.897	417.188
	T		5	50	26.0152	6.61615
	Ce	Ce_1 Ce_2 Ce_3	0	1490.13	84.2837	155.376
Sorties	q_e	$q_{e,1}$ $q_{e,2}$ $q_{e,3}$	0.02517	353.077	28.345	43.9766

Dans l'étape de la mise en forme, les données sont subdivisées en trois ensembles :

- Un ensemble pour l'apprentissage (70% de la base).
- Un ensemble pour le test (20% de la base).
- Un ensemble pour la validation (10% de la base).

4.4 Analyse statistique de la base de données

4.4.1 Régularisation de l'apprentissage statistique

Les données d'entrée du modèle doivent être déterminées au départ. La régularisation de l'apprentissage statistique s'effectue par traçage des variables prédictives les unes par rapport aux autres permettent de voir s'il y a une relation linéaire entre les deux variables, et cela se fait généralement à l'aide d'outil de confirmation visuel pour affirmer l'indépendance des variables prédictives (régularisation Ridge). Dans cette modélisation, la méthode d'analyse de corrélation, terme désignant les significations d'une relation entre deux ou plusieurs variables, est appliquée pour définir la structure d'entrée (IBRIR, 2022). Les résultats de l'analyse de corrélation des variables d'entrée sont présentés dans la **figure 4.2**. Il montre que toutes les variables ont une faible corrélation mutuelle. Par conséquent, les paramètres, à savoir le poids moléculaire des polluants (*Mw*), la température (T), la surface spécifique de l'adsorbant (*As*) et Concentrations des adsorbats à l'équilibre (*Ce*) sont choisies comme des variables d'entrée.

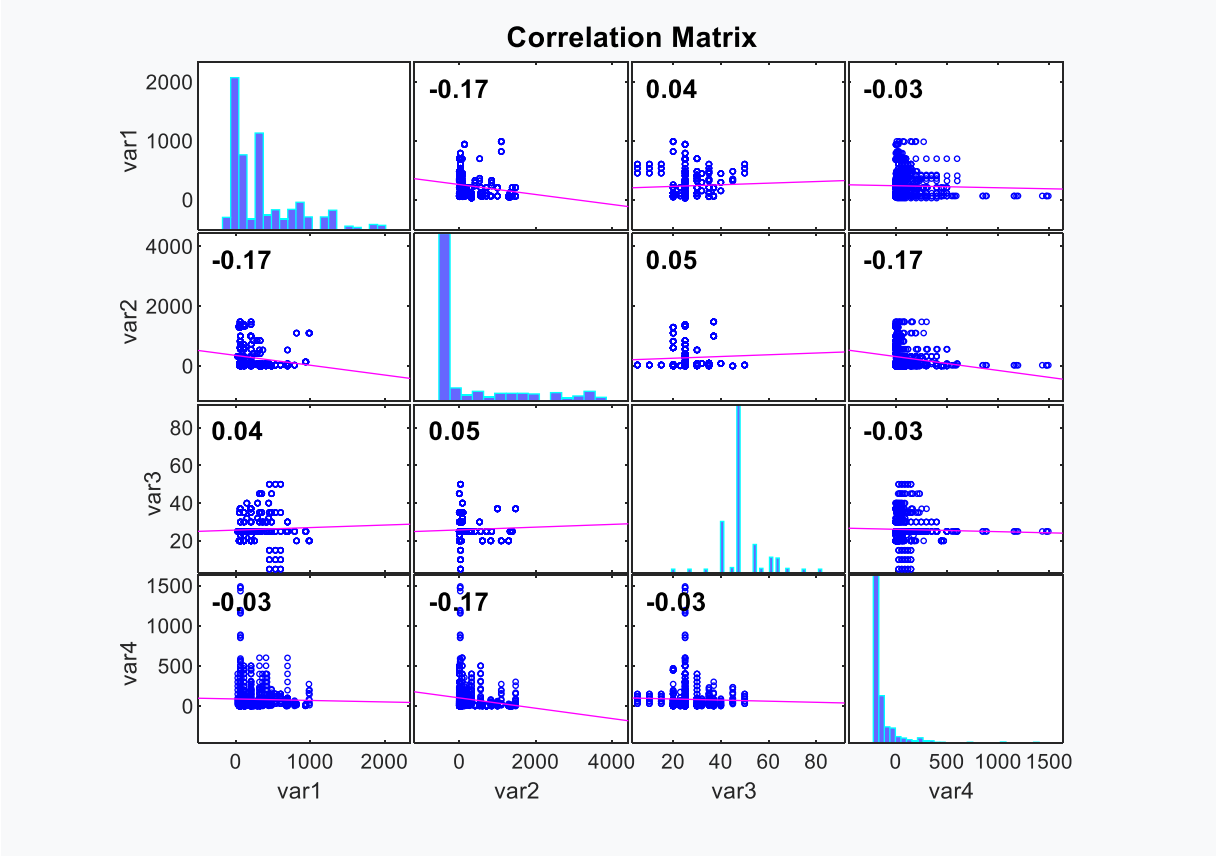


Figure 4.2 : Interactions binaires des variables pour les modèles prédictives.
var 1 : Poids moléculaire des polluants ; **var 2 :** Surface spécifique de l'adsorbant ;
var 3 : Température ; **var 4 :** Concentrations des adsorbats à l'équilibre.

4.4.2 Uniformité de la distribution de la base de données

Un diagramme en violon est un type de visualisation de données qui combine les aspects d'un diagramme en boîte et d'un diagramme de densité de noyau. Il est utilisé pour afficher la distribution et les statistiques récapitulatives des données numériques dans différentes catégories ou groupes. L'intrigue tire son nom de sa ressemblance avec un violon ou une forme de violon musical. Dans un tracé de violon, chaque catégorie ou groupe est représenté par une forme de "violon". La largeur du violon à un point donné représente la densité ou la fréquence des valeurs de données à ce point. Les parties plus larges du violon indiquent une densité de données plus élevée, tandis que les parties plus étroites indiquent une densité plus faible. Le graphique comprend également une ligne centrale, qui représente la médiane des données, et comprend souvent des statistiques récapitulatives supplémentaires telles que des quartiles ou des intervalles de confiance.

Selon le diagramme de violent, on trouve les résultats suivants (**Figure** de **4.3** à **4.6**):

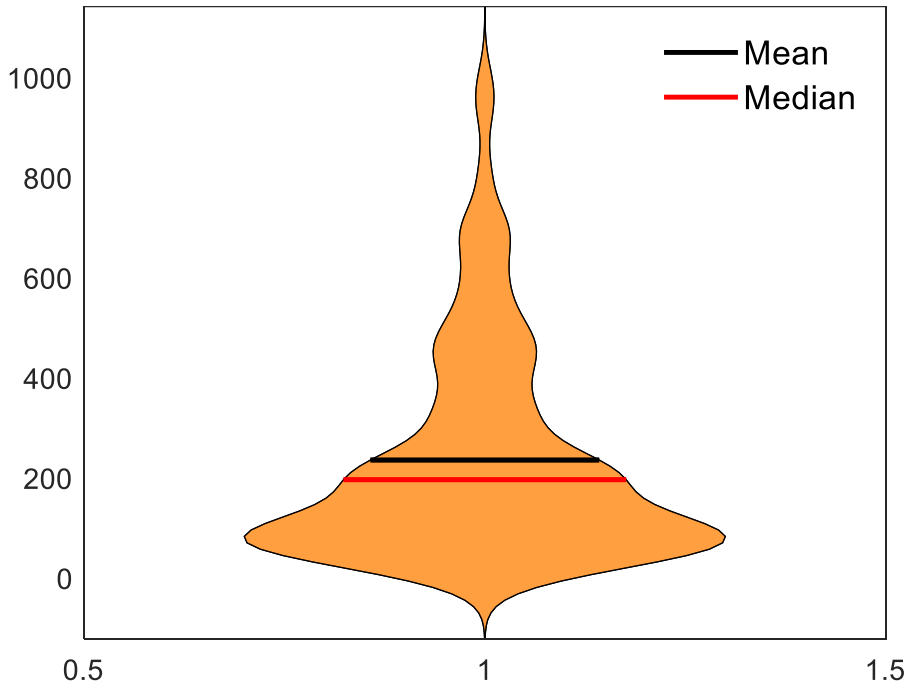


Figure 4.3 : Pour le poids moléculaires des polluants (*Mw*).

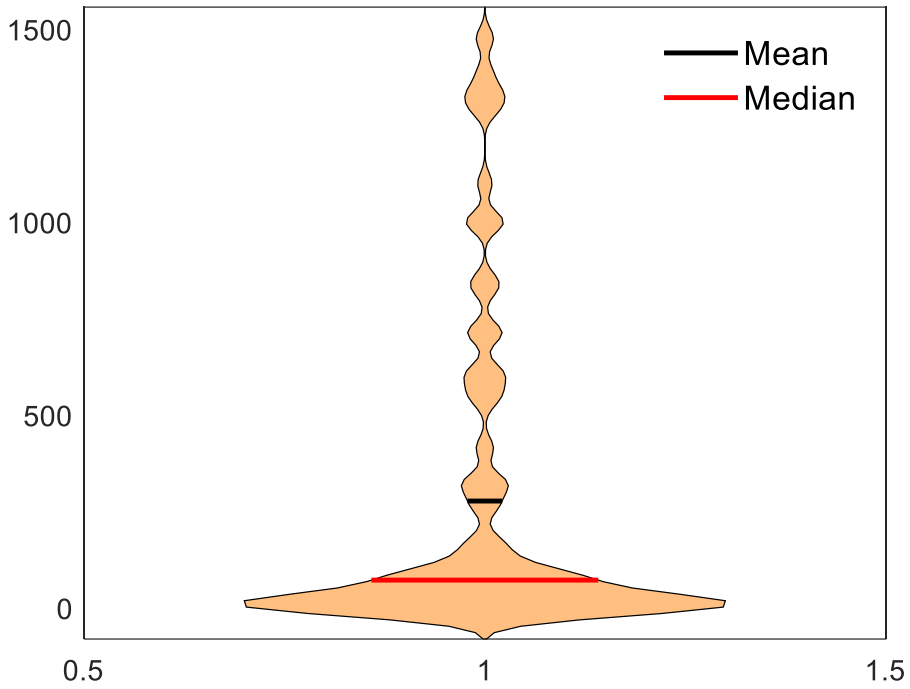


Figure 4.4 : Pour la surface spécifique de l'adsorbant (*As*).

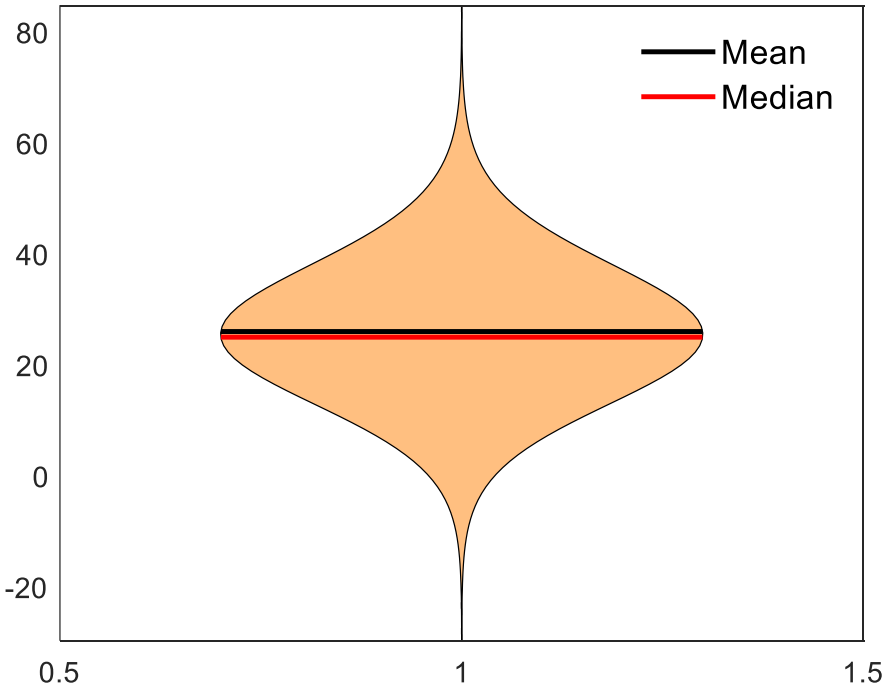


Figure 4.5 : Pour la température (*T*).

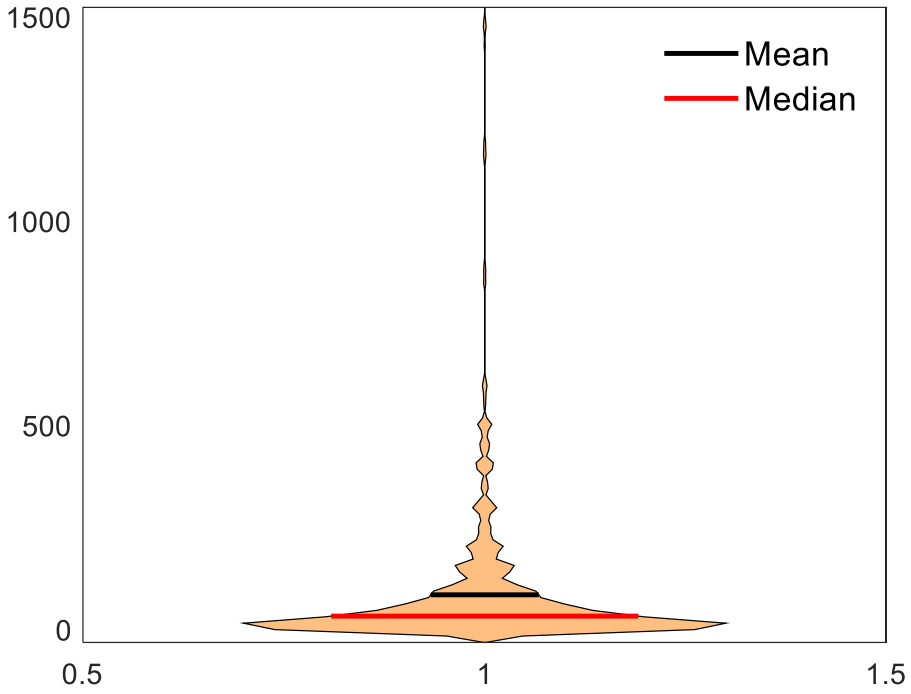


Figure 4.6 : Concentrations des adsorbats à l'équilibre (*Ce*).

D'après les diagrammes de violon de tous les paramètres d'entrée, on trouve que la surface spécifique de l'adsorbant (*As*) a une distribution homogène, tandis que les autres entrés ont une distribution quasi-homogène.

4.4.3 Etude de sensibilité des paramètres d'entrée

L'un des principaux objectifs de l'analyse de sensibilité est de révéler les paramètres d'entrée avec le plus grand effet sur la variable de sortie. Néanmoins, cette étude permet d'identifier les entrées qui ont une faible influence sur la sortie et permet de supprimer ces paramètres qui alourdissent inutilement la modélisation et de se concentrer sur les paramètres les plus significatifs. Dans ce contexte, les techniques de régression sont les plus largement utilisées et dans ce travail, on utilise la méthode des coefficients de régression normalisés pour effectuer l'analyse de sensibilité. Au cours de ce processus, les données expérimentales des entrées et des sorties sont introduites dans l'algorithme de régression qui construit un modèle linéaire entre chaque entrée et la sortie, le coefficient de régression résultant pour chaque facteur décrit la mesure de sensibilité de ce facteur sur la sortie (Saltelli et al., 2004).

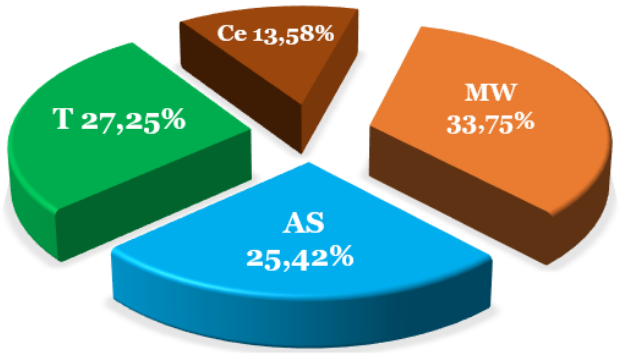


Figure 4.7 : Importance relative (%) des variables d'entrée considérées pour l'estimation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants.

Le diagramme à secteurs de la **figure 4.7** est une représentation de l'importance relative (%) des quatre variables d'entrée sur la variable de sortie calculée à l'aide de la méthode des coefficients de régression normalisés. Les résultats démontrent que la majorité des variables d'entrée ont un effet variable sur la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e). Le poids moléculaire (*Mw*), la température (*T*) et la surface spécifique (*As*) détiennent les contributions les plus élevées avec une importance relative de 33.75%, 27.25% et 25.42% respectivement, tandis que la concentration de l'adsorbat à l'équilibre (*Ce*) a une contribution moindre significative (13.58%). En général, toutes les variables d'entrées ont un effet variable sur la sortie (importance relative des entrées dépasse le seuil 5%).

4.5 Contribution 1 : Approche de la modélisation RNA

Introduction

En 1943, à Chicago, les deux Américains, le neurophysiologiste Warren McCullers et le logicien Walter Pitt, ont proposé l'algorithme RNA. Ils ont donné à cet algorithme le nom de (neurone de McCullers-Pitt) et (McCulloch and Pitts) (IBRIR, 2022).

L'algorithme RNA présente quelques avantages tels que :

- Modèle mathématique non requis.
- Il n'y a aucune dépendance sur des connaissances basées sur des règles préétablies.
- Il représente plusieurs choix d'algorithmes d'apprentissage disponibles.
- Il augmente la capacité du réseau à approximer les fonctions complexes,
- Il est capable d'approximer avec une précision arbitraire n'importe quelle correspondance continue.

4.5.1 Conception de la topologie de RNA

La méthodologie choisie peut être schématisée conformément à l'organigramme de la **figure 4.8** et qui comporte les étapes suivantes :

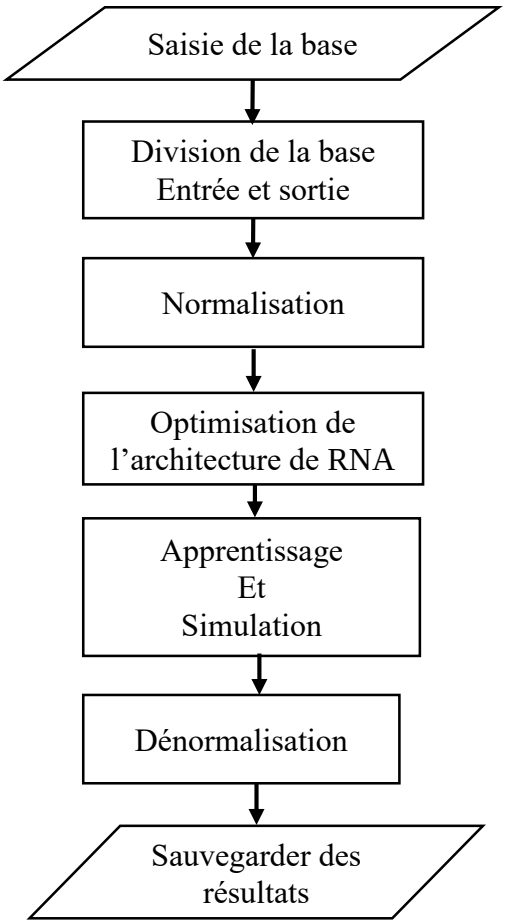


Figure 4.8 : Méthodologie de calcul par réseaux de neurones (RNAO).

4.5.2 Concept du réseau de neurones de type feedforward (MLP)

Les neurones artificiels sont arrangés en couches, où la couche d'entrée reçoit des signaux d'entrée (u_i) du monde réel et chaque couche successive reçoit les sorties pondérées ($w_{i,j}$) de la couche précédente. Les sorties de la dernière couche constituent les sorties au monde réel. Le schéma du RNA de type "MLP" à rétro-propagation est utilisé pour modéliser la capacité d'adsorption des adsorbants à l'équilibre (q_e) est représentée sur la **figure 4.9**.

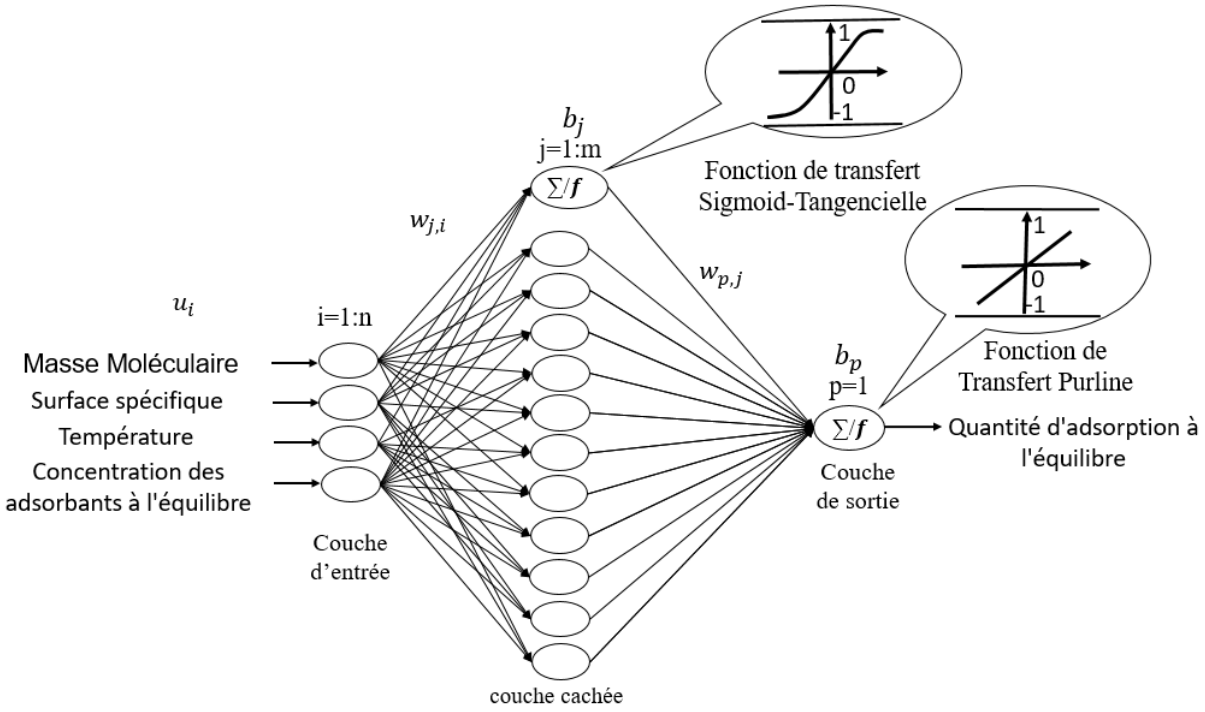


Figure 4.9 : Réseau de neurones artificiels de type feedforward.

4.5.3 Optimisation et simulation du réseau de neurones

Il n'existe pas de règle pour le choix du nombre de neurones dans la couche cachée (Laïdi & Hanini, 2012), pour obtenir la meilleure structure neuronale (le nombre de neurones sur les couches cachées a été optimisé).

Dans cette étude on a utilisé une couche cachée en variant le nombre de neurones de 35 à 50, chaque architecture a été répété 50 fois afin d'éviter la convergence vers le minimum local, les résultats montrent qu'un RNA avec 43 neurones dans la couche cachée donne la meilleure performance traduite par une erreur *RMSE* = 7.3523 et R^2 = 0.9722. La **figure 4.10** représente la variation d'erreur (*RMSE*) par rapport aux nombres de neurones dans la couche cachée.

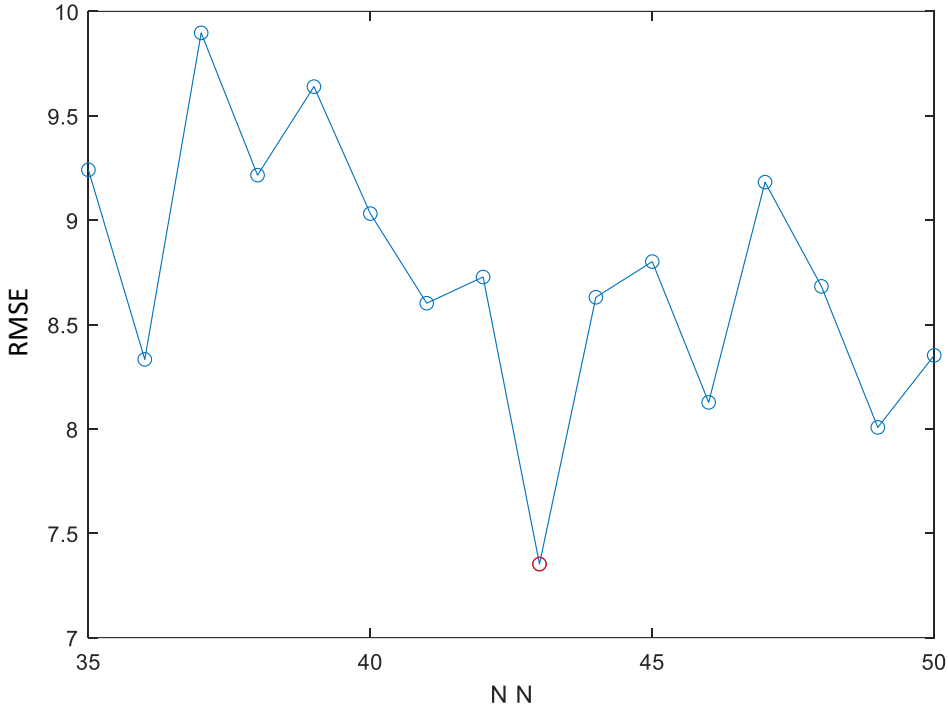


Figure 4.10 : Variation d'erreur (*RMSE*) par rapport aux nombres de neurones dans la couche cachée.

Après détermination de la meilleure structure neuronale pour chaque couche cachée, l'architecture du modèle neuronale optimale a été trouvé [4- (43) -1].

Le **tableau 4.4** donne la topologie du RNAO optimisé pour la prédiction de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants.

Tableau 4.4 : Topologie du RNAO optimisé pour la prédiction de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e).

Type du réseau	**FFNN-BP (Fonction *newff de* MATLAB®)**	
Couches	Nombre de neurones	Fonction d'activation
Couches d'entrée	4	---
Couches cachée	43	Sigmoïde Logarithmique (Fonction ***tansig***)
Couche de sortie	1	Linéaire **(**Fonction ***purelin***)
Algorithme d'apprentissage	BRBP utilisant l'optimisation de Levenberg-Marquardt.	

4.5.4 Évaluation statistique et incertitude du modèle RNAO

Pour évaluer la capacité calculée de modèle neuronal, celui-ci doit être testé pour des données qui ont été exclues de la base d'apprentissage. Par conséquent le vecteur de régression linéaire des sorties calculées par le RNA optimisé et les sorties cibles (expérimentales) avec le tracé de cette régression ont été utilisés comme critère d'évaluation de la capacité prédictive du RNA optimisé. Ceux-ci sont obtenus facilement à l'aide de la fonction ***postreg*** de MATLAB®.

Les diagrammes de dispersion montrent la comparaison entre les valeurs de capacité d'adsorption mesurées et prédites obtenues à l'aide du modèle RNA pour la base d'entrainement, tandis que la base de données de test sont illustrés à la **figure 4.11**. Le coefficient de corrélation et de détermination, sont respectivement de 0.9721 et 0.9861 pour le modèle RNAO.

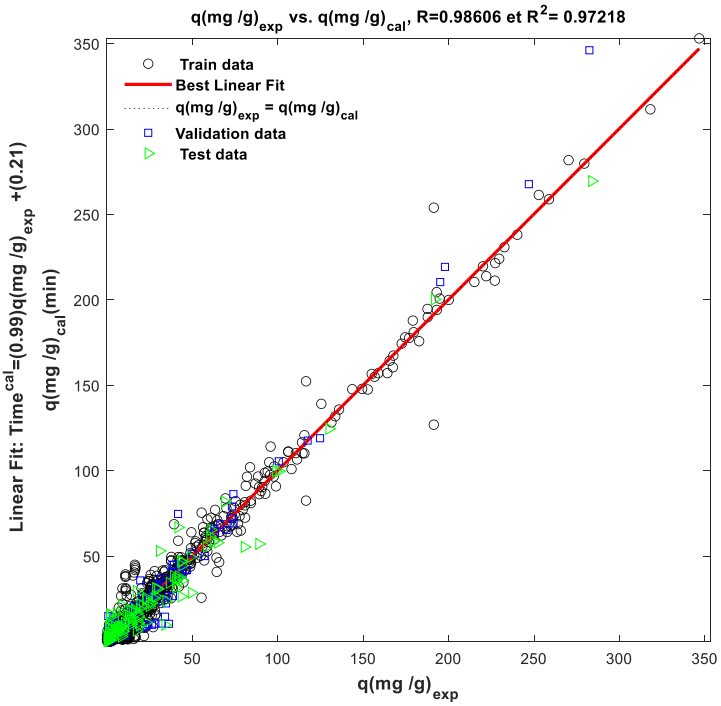


Figure 4.11 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales par RNA.

La **figure 4.12** montre que la courbe de régression linéaire de la capacité d'adsorption à l'équilibre (q_e) calculée par le RNA optimisé avec la capacité d'adsorption à l'équilibre (q_e) expérimentale pour toute les phases apprentissage, test et validation avec un vecteur de

régression approchant l'idéal [α (pente), β (ordonnée à l'origine), R^2 (coefficient de corrélation)] = [0.9887 ; 0.213 ; 0.9723].

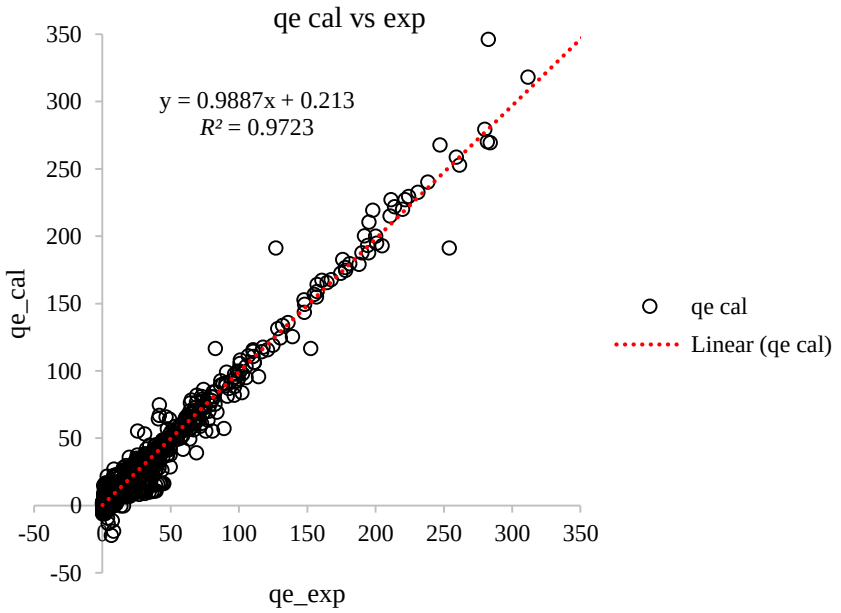


Figure 4.12 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales.

Les **figures 4.13** à **4.15** représentent la capacité d'adsorption calculées *vs* expérimentale pour $q_{e,1}$, $q_{e,2}$ et $q_{e,3}$.

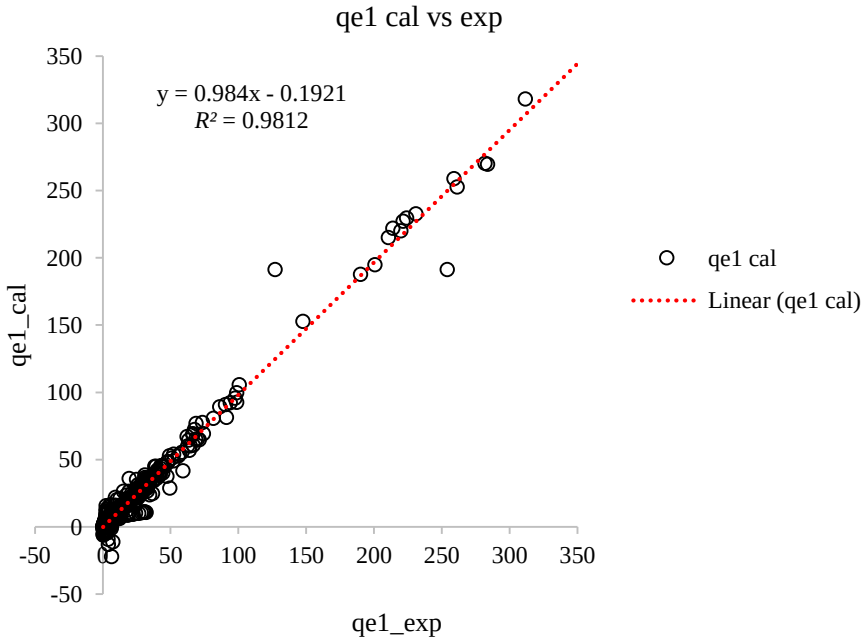


Figure 4.13 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,1}$.

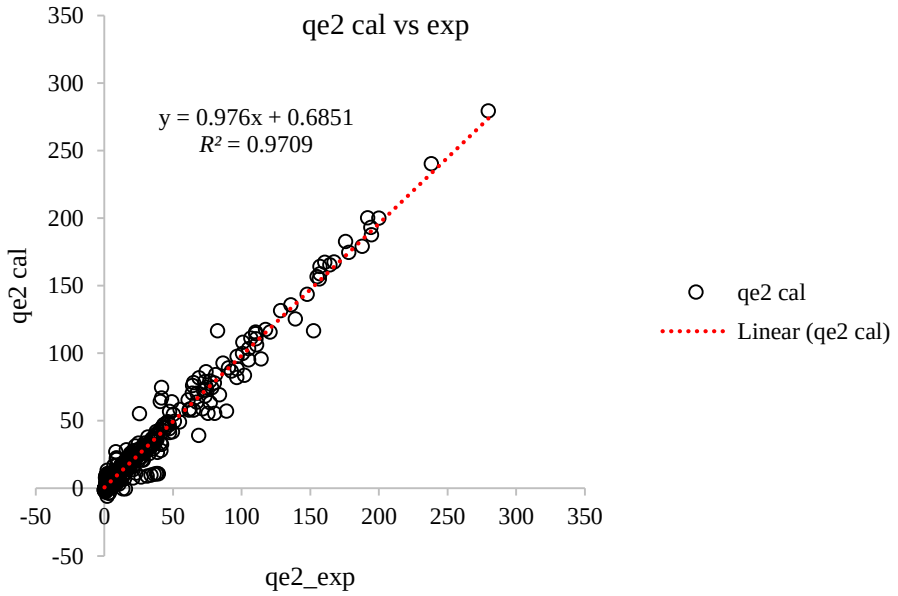


Figure 4.14 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,2}$.

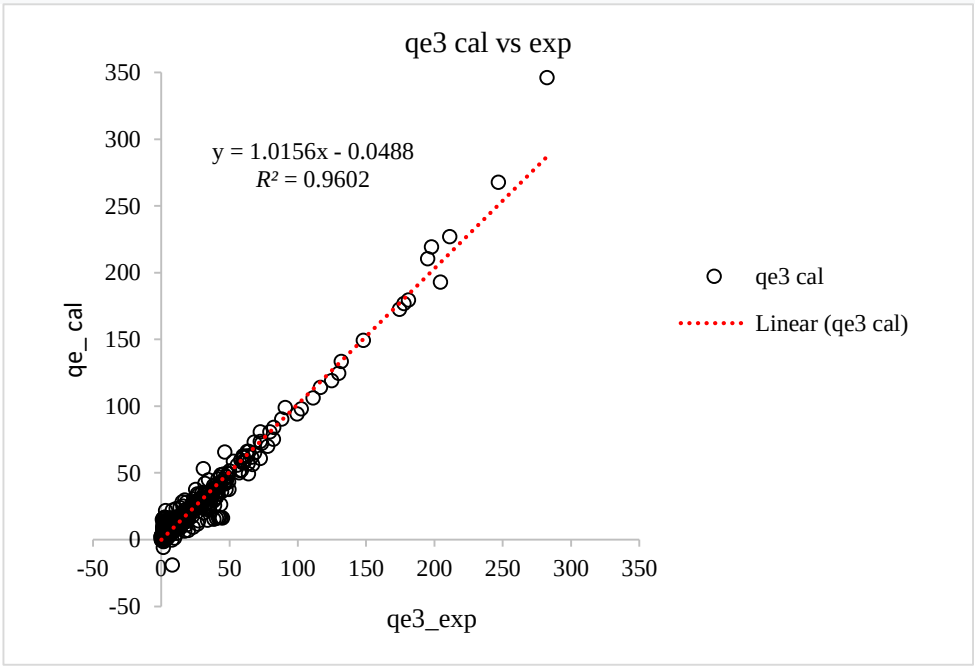


Figure 4.15 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour $q_{e,3}$.

Pour évaluer la performance du modèle neuronal (RNA), les vecteurs de régression linéaire ont été calculés pour la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e) est rassemblés dans le **tableau 4.5**.

Tableau 4.5 : Vecteur de régression linéaire [α (pente), β (ordonnée à l'origine), R (coefficient de corrélation)].

Phase	q_e	$q_{e,1}$	$q_{e,2}$	$q_{e,3}$
R^2	0.9723	0.9812	0.9709	0.9602
β	0.2130	- 0.1921	0.6851	- 0.0488
α	0.9887	0.9840	0.976	1.0156

Toutes les valeurs de R^2 sont proches de 1, ce qui signifie que les résultats de modélisation (ou de prédiction) par RNA, soit pour la partie globale ou fractionnée (ou subdivisée) sont en accords avec les valeurs de la base de données (expérimentation).

Le **tableau 4.6** représente les valeurs de performance du modèle RNA (apprentissage, test, validation et globale), lors de la modélisation des phénomènes d'adsorption en termes de *RMSE*, *R* et R^2.

Tableau 4.6 : Paramètres statistiques du modèle RNAO.

	Apprentissage	**Test**	**Validation**	**Globale**
RMSE	6.7208	10.4366	8.3618	7.3523
$\boldsymbol{R^2}$	0.9767	0.9580	0.9480	0.9722
R	0.9883	0.9788	0.9737	0.9860

La **figure 4.16** représente les histogrammes de la modélisation RNAO selon les paramètres de performance pour la base de données globale.

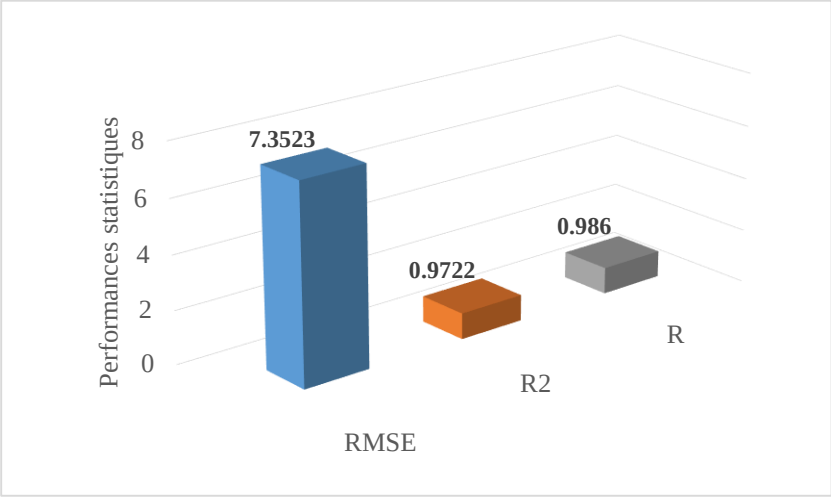


Figure 4.16 : Paramètres de performance de RNAO pour la base globale.

En général, toutes les valeurs de critères de performance du modèle RNAO sont en adéquation avec la robustesse. Dans cette contribution, le modèle RNAO donne des résultats acceptables en termes de *RMSE*, R^2 et *R* pour la base de données globale.

4.5.5 Formule de RNA optimisé

Après l'élaboration du modèle neuronale, l'équation du modèle peut être écrite sous la forme suivante :

$$V_p = \sum_{j=1}^{43}\left(w_{j,p}\left(\frac{2}{1+ e^{-2\left(\sum_{i=1}^{4} w_{j,i}\, x_i + b_i\right)}} - 1\right)\right) + b_p \qquad \textbf{(4.1)}$$

i : Nombre des entrés ; *j* : Nombre des neurones de la couche cachée ; *p* : Nombre de la sortie prédite (*p* = 1).

La fonction entre la couche d'entré et la couche cachée s'écrit :

$$z_j = \frac{2}{1+ e^{-2\left(\sum_{i=1}^{4} w_{j,i}\, x_i + b_i\right)}} - 1 \qquad \textbf{(4.2)}$$

j = 1 : 43

La fonction entre la couche cachée et la couche de sortie s'écrit :

$$V_k = \sum_{j=1}^{43} w_{j,p}\, z_j + b_p \qquad \textbf{(4.3)}$$

Avec :

43 est le nombre de neurones dans la couche cachée,

4 est le nombre de neurones dans la couche d'entrée,

1 est le nombre de neurones dans la couche de sortie,

$w_{j,p}$, $w_{i,j}$ et b_i, b_p sont les poids et les biais de la couche cachée et la couche de sortie respectivement.

La fonction Tangente Sigmoïde s'écrit :

$$f_h(\mathrm{x}) = \frac{2}{1+ e^{-2x}} - 1 \qquad \textbf{(4.4)}$$

f_h est la fonction d'activation de la couche cachée "tansig",

La fonction Pureline s'écrit :

$$\mathrm{f_s(x) = x} \qquad \textbf{(4.5)}$$

f_s est la fonction d'activation de la couche de sortie "purelin".

Le **tableau 4.7** et **4.8** récapitulent les poids et les biais de la [couche entrée – couche cachée] et de la [couche cachée – couche de sortie] du réseau de neurones optimisée (RNAO).

Tableau 4.7 : Modèle de RNAO établi {[couche entrée **–** couche cachée]}.

Connexion [couche entrée – couche cachée]				
Matrice des poids				**Vecteur des biais**
$w_{i,1}$	$w_{i,2}$	$w_{i,3}$	$w_{i,4}$	b_j
5.7059	-0.5167	1.4480	0.1840	-2.9929
-2.7107	1.2832	2.2734	1.0327	4.2634
8.9842	2.7271	4.7639	-10.2302	-16.5444
2.2633	-3.0027	-1.0259	0.4055	-1.4106
-20.3702	-8.8807	8.1358	1.8777	-5.8962
0.9448	-6.2413	-0.8783	0.1672	-4.9333
18.1551	2.8898	6.9223	1.6691	6.4847
5.9694	-11.4469	-15.1165	0.2114	-5.7880
15.7622	-3.2839	8.8881	0.1278	-9.6960
16.5715	-4.9129	-4.0815	-6.2946	14.4826
-0.3759	3.1221	2.4262	-5.6455	-6.3103
24.3369	-12.8724	9.5641	2.4008	6.6798
-10.2242	10.2027	7.4270	-0.1473	5.0579
3.5848	-1.1175	-5.1187	0.2119	-0.0122
-9.3627	2.2307	20.2690	0.1648	3.6739
-2.2523	3.0765	-5.7149	-1.7942	-5.7877
-0.8535	2.2124	8.5387	2.6750	-1.5427
-6.2527	-2.1720	4.8044	0.5698	-4.5668
1.3652	9.2745	-7.5006	9.1250	0.1299
-4.8277	-4.0690	2.5311	1.7141	-0.2472
-14.6945	-4.0170	0.2415	-2.7845	-4.1798
-4.0107	1.1099	-0.1903	-3.5145	-0.4858
-1.1373	0.4586	5.8913	2.7210	-1.5376
7.5964	-14.6587	-20.1036	0.3552	-7.1742

Suite **tableau 4.7**				
0.7957	-5.1352	4.8085	-3.7304	0.5070
-8.1556	2.8833	12.5113	-0.2718	-0.0102
-0.5733	5.6600	-1.5077	-2.5543	4.1095
10.7746	2.6323	0.5391	0.8436	-0.5530
-9.9924	-18.5755	-4.4987	11.0189	-9.7290
12.5994	5.8610	-6.3453	-0.9338	4.1622
2.1221	-1.3950	5.3969	-1.7863	0.4463
20.5730	1.3901	-24.2276	-0.9094	15.6362
-2.6925	-3.5924	-3.2728	0.2451	-4.8666
-1.2355	6.5997	0.1571	-4.2873	1.8387
-4.3654	-1.7857	2.1187	-0.0489	-5.1055
-8.6212	-3.7034	3.9054	0.3353	-7.2847
8.8135	4.7339	4.4790	-0.0528	1.4434
9.5059	3.2389	17.4873	-0.6255	14.8071
-26.1471	-13.1876	20.0954	0.6331	-30.8366
5.3349	4.5538	-1.0479	3.6035	5.3570
9.7858	0.2680	-1.3840	-1.5514	10.2119
-0.8685	4.6824	2.4760	-5.8246	-6.3205
-5.0524	-1.0099	4.0371	0.2770	-5.6597

Connexion [couche cachée – couche de sortie]												
Poids	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$w_{m,1}$	-19.0618	4.4987	2.4952	25.8093	-9.9378	-18.6040	-2.0231	9.3014	13.1313	-14.0478	-16.2497	0.8303

Tableau 4.8 : Modèle de RNAO {[couche cachée – couche sortie]}.

Poids	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
$w_{m,1}$	5.5354	-15.2819	-6.6257	-6.8643	16.4042	-12.1742	-4.4388	-3.5287	-1.8333	-2.6205	-13.4104	-7.7933	-11.8392
Poids	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38
$w_{m,1}$	-7.7618	3.6390	11.9743	0.1220	-13.7491	-2.0738	1.4224	-6.6866	0.9863	18.6007	7.7875	-10.9246	1.2701

Poids	39	40	41	42	43	**Vecteur des biais (b_p)**
$w_{m,1}$	-1.9343	-2.7847	-8.6421	10.2409	-12.3790	4.3328

4.5.6 Interface graphique d'utilisateur du modèle RNAO

Afin de simplifier la complexité du modèle mathématique élaboré par la meilleure modélisation obtenue dans le présent travail, une interface graphique (également appelée interface d'utilisateur) est développée pour améliorer la convivialité du modèle RNA. Cette interface graphique d'utilisateur est un outil qui permet l`utilisation directe et sans effort du modèle de RNA pour calculer la capacité d'adsorption des adsorbants à l'équilibre (q_e). Cette interface a été créée pour le calcul de la capacité d'adsorption des adsorbants à l'équilibre (q_e) dans l'intervalle des variables d'entrées. Pour cela un programme MATLAB® a été conçu avec une capture d'écran de l'interface résultante (**figure 4.17**).

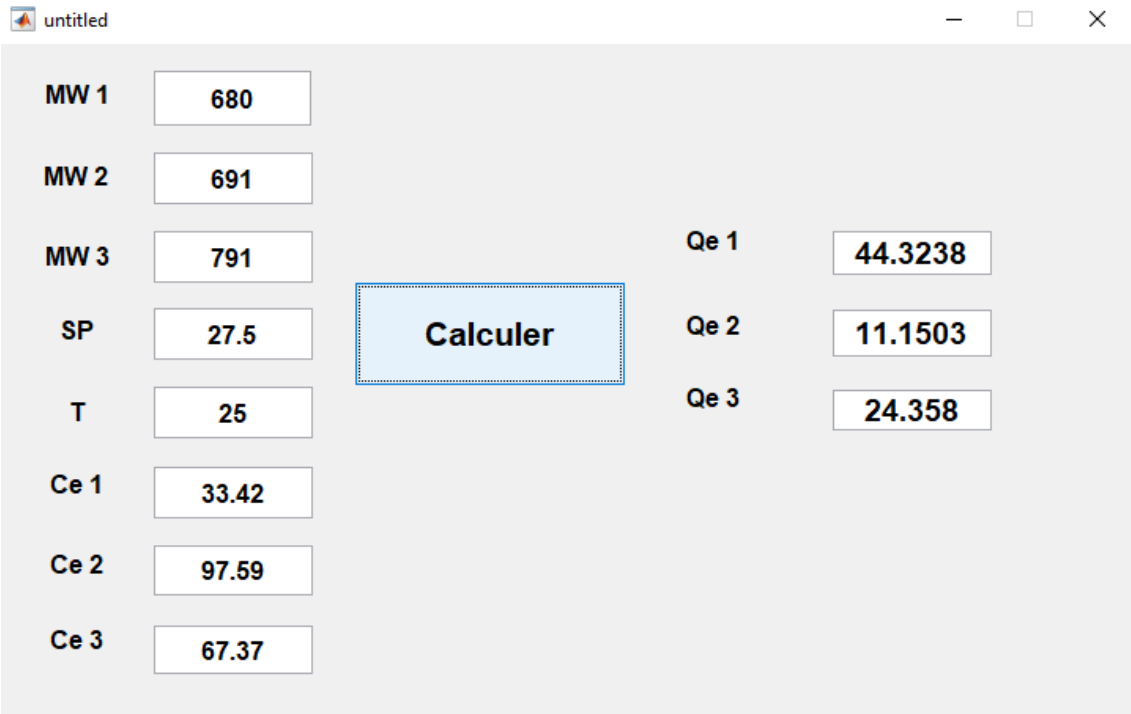


Figure 4.17 : Interface graphique du modèle RNAO.

Conclusion

Dans la première contribution, nous avons décrit les étapes de la modélisation et d'optimisation neuronale par le RNAO pour estimer la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants.

Vu la précision du RNA, est acceptable (R = 0.9860 ; R^2 = 0.9722 et $RMSE$ = 7.3523), on suggère une deuxième méthode d'intelligence artificielle (SVM), pour la comparaison.

4.6 Contribution 2 : Approche de la modélisation SVM

Introduction

La méthode SVM peut surmonter certains inconvénients du modèle RNA tels qu'une bonne robustesse et éviter que le résultat ne tombe dans l'optimum local (Feng et al., 2019). En outre, les paramètres de SVM sont réglés à l'aide d'un optimiseur déjà intégré qui est généralement sélectionné par la méthode d'essai et d'erreur (Feng et al., 2019). Cette méthode entraîne des prédictions difficiles et des erreurs larges dans le cas où elle n'est pas combinées avec d'autres algorithmes (Feng et al., 2019). Par conséquent, de nombreuses méthodes sont proposées pour améliorer l'optimisation des paramètres. Une nouvelle méthode simple et efficace d'optimisation a été publiée dans la littérature qui est Dragonfly (Meng et al., 2021), elle combine les paramètres du SVM en tant que la position de la solution de DA et elle conserve les performances de calcul de l'algorithme comme la valeur de la capacité courante de DA, puis l'itération de ces paramètres pour obtenir la situation optimale de Dragonfly qui correspond aux meilleurs paramètres du SVM (Feng et al., 2019).

La littérature ne comporte aucune recherche publiée sur le développement d'un seul modèle universel capable de prédire la capacité d'adsorption en fonction de n'importe quel ensemble de polluants (métaux lourds, colorants, produits pharmaceutiques, hydrocarbures, matières organiques et inorganiques).

Par conséquent, cette étude vise à utiliser un nouvel algorithme hybride DA-SVM pour l'optimisation des hyper-paramètres afin d'obtenir le meilleur modèle de prédiction en termes de métrique statistique pour modéliser la capacité d'adsorption multi-composante à l'équilibre ; ce modèle peut prédire la capacité d'adsorption des systèmes d'adsorption ternaires de différents types de polluants.

L'algorithme SVM a été proposé pour la première fois par Cortes et Vapnik en 1995 (Cortes & Vapnik, 1995). L'algorithme SVM présente quelques avantages tels que :

- Il peut modéliser les comportements non linéaires complexes,
- Potentiel d'implémentation en régression,
- Il peut traiter les données manquantes, et ainsi de suite.

4.6.1 Conception de la topologie de SVM

L'algorithme de SVM utilise la méthode d'optimisation des pistes et des erreurs pour régler ses paramètres. Pour cette raison, certains inconvénients peuvent être surmontées, induisant une faible efficacité, de précision et de vitesse de calcul. Pour surmonter ces problèmes, des méthodes d'optimisation récentes ont été utilisées pour ajuster les paramètres de SVM, à savoir l'algorithme génétique (AG), Optimisation des essaims en particules (PSO) (Teimouri, 2019), algorithme d'optimisation des coucous (COA), Colonie d'abeilles artificielles (ABC), Recuit simulé (SA) (Khanghah et al., 2015), Optimisation des colonies de fourmis (ACO) (Teimouri & Baseri, 2014), Recherche de grille, algorithme de Luciole (FFA), Algorithme de la libellule (DA) (Zendehboudi et al., 2018). Une théorie détaillée de SVM est expliquée par de nombreux chercheurs (Alade et al., 2020).L'expression de sortie pour le modèle de SVM peut être écrite par :

$$f(x) = w^{\mathrm{T}}.\emptyset(x) + b \qquad \textbf{(4.6)}$$

Où *w* et *b* sont respectivement le poids et le vecteur de biais, ∅(x) représente la fonction de transfert de mappage non linéaire, qui mappe *x* dans un espace de caractéristiques de dimension supérieure.

Pour obtenir *ω*, il est obligatoire d'ajuster la fonction régularisée suivante, qui peut être exprimée dans l'équation **(4.7)**, avec la contrainte des équations (**4.8**-**4.10**) :

$$\min(\frac{1}{2}w^2 + C\sum_{n=1}^{N}(\xi_i - \xi_i^*)) \qquad \textbf{(4.7)}$$

$$f(x_i) - (w^{\mathrm{T}}.\emptyset(x_i) + b) \leq \psi + \xi_i,\ i=1,2,3,\ldots,N \qquad \textbf{(4.8)}$$

$$\xi_i, \xi_i^* \geq 0,\ ,\ i=1,2,3,\ldots,N \qquad \textbf{(4.9)}$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N}(\delta_i - \delta_i^*).k(x, x_i) + b \qquad \textbf{(4.10)}$$

ψ est l'exactitude approximative de la fonction équivalente placée sur les échantillons de données d'apprentissage (Mesellem, Hadj, et al., 2021). *C* : est le paramètre de capacité, ξ_i et ξ_i^* représentent les variables d'écart positives (Mesellem, Hadj, et al., 2021). *k* est la fonction noyau définie par un produit scalaire de la fonction de transfert non linéaire ; la fonction noyau

la plus utilisée est la fonction de base radiale gaussienne (RBF), qui est donnée par l'équation (**4.11**) :

$$k(x_i.x_j) = \exp\left(-\frac{|x_i - x_j|^2}{2\sigma^2}\right), \sigma \in \mathbb{R} \qquad (\mathbf{4.11})$$

d'où σ est la largeur de la fonction RBF.

4.6.2 Conception du réseau de neurones de type DA-SVM

L'algorithme de libellule (DA) est un algorithme inspiré de la nature qui peut surmonter toutes les lacunes présentées par d'autres algorithmes d'optimisation à la lumière d'une efficacité élevée, une convergence rapide, une moindre complexité de calcul et une meilleure capacité à déterminer les optimums globaux. il existe un lien entre la précision du modèle SVM et *C*, ε et σ. Le GWO a été utilisé dans cette étude pour régler les trois paramètres SVM ci-dessus. La **figure 4.18** illustre l'organigramme du modèle méthodologique hybridé DA-SVM à implémenter dans le logiciel MATLAB®.

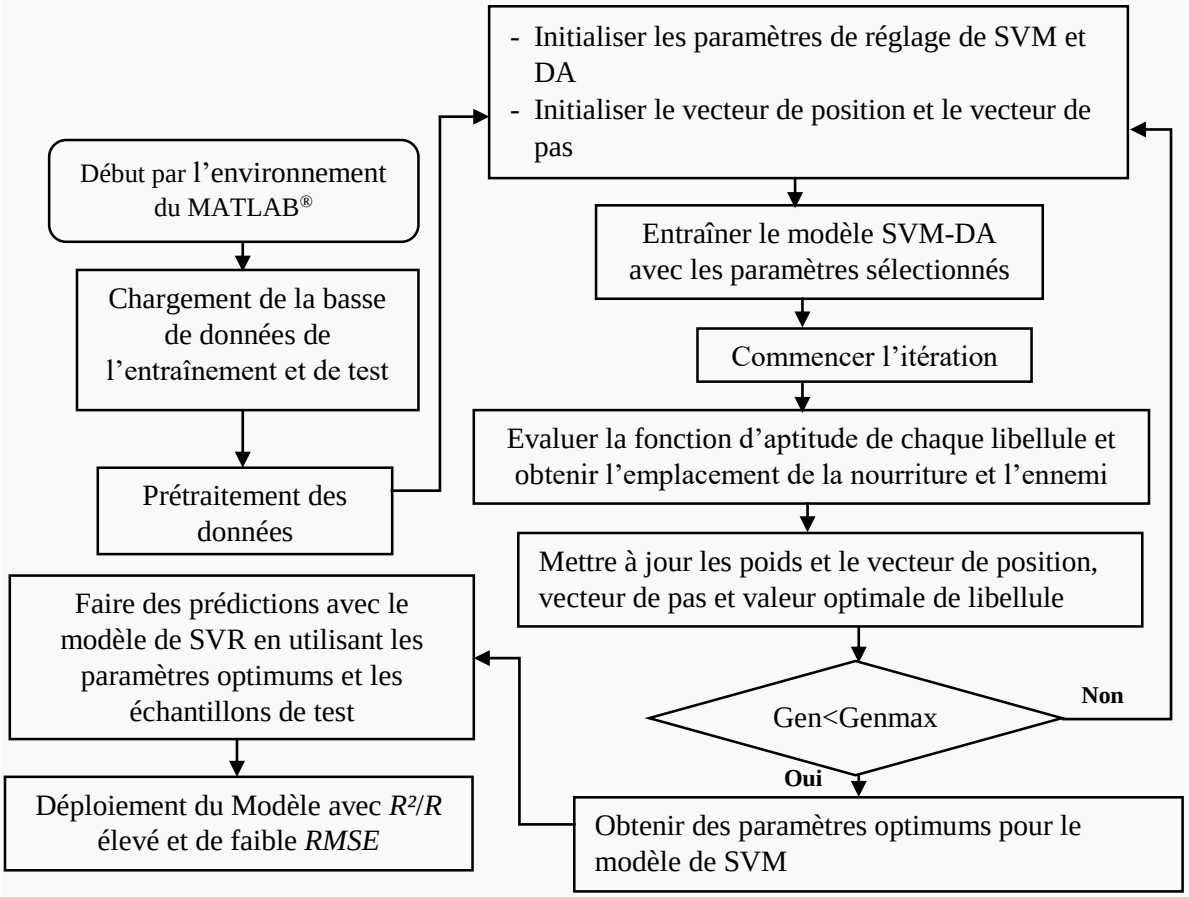


Figure 4.18 : Représentation schématique du DA-SVMO.

4.6.3 Optimisation du réseau de neurones

L'algorithme DA est utilisé pour régler les hyper-paramètres SVM (C, ε, σ) dans l'espace de recherche suivant respectivement ([10^{-3}-10^{3}], [10^{-3}-10^{3}], proche de zéro). L'itération maximale et les agents de recherche ont été fixés à 20 et 7 respectivement avec *RMSE* comme fonction d'aptitude. Dans cette étude, trois fonctions de Kernel ont été testées ('gaussienne', 'linéaire' et 'polynomiale').

4.6.4 Évaluation statistique et incertitude dans les modèles

La performance du meilleur modèle a été mesurée à l'aide de trois métriques statistiques : *R*, R^2 et *RMSE*. Les expressions de ces métriques peuvent être exprimées comme suit :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}\left(q_{e,i}^{\exp} - q_{e,i}^{cal}\right)^2} \quad (\mathbf{4.12})$$

où $q_{e,i}^{\exp}$ et $q_{e,i}^{cal}$ sont les capacités d'adsorption expérimentale et calculée.

Les coefficients *R* et R^2 sont également utilisés pour confirmer la précision des meilleurs modèles développés, le R^2 peut être exprimé par l'équation suivante : (Iqbal et al., 2020; Laidi et al., 2018; Wei et al., 2018)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(q_{e,i}^{\exp} - q_{e,i}^{cal}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(q_{e,i}^{\exp} - \overline{q_e{}^{\exp}}\right)^2} \quad (\mathbf{4.13})$$

où $\overline{q_e{}^{\exp}}$ est la moyenne des valeurs expérimentales. N est le nombre d'échantillons de données.

Le **tableau 4.9** représente les performances de chaque modèle (SVM et DA-SVM) lors de la modélisation des phénomènes d'adsorption en termes de *RMSE*, *R* et R^2.

Tableau 4.9 : Paramètres statistiques du modèle DA-SVM pour la base globale.

Méthode	Fonction de Kernel	*R*	R^2	*RMSE* (mg g^{-1})
DA-SVM	Linéaire	0.405	0.164	42.550
	polynomiale	0.564	0.318	39.000
	RBF-Gaussienne	**0.998**	**0.997**	**2.540**
SVM	RBF-Gaussienne	0.985	0.9693	7.525

Dans cette étude, la même base de données précédemment établie (**tableau 4.1**) pour le modèle RNA est utilisée pour le modèle SVM, tandis que le modèle proposé est basé sur l'algorithme

d'apprentissage SVM associé à l'algorithme de libellule DA pour l'optimisation de ses hyper-paramètres. Les données de l'apprentissage constituent (80 %) de la base de données globale (818 points de donnée), l'ensemble de test est formé de (20 %) de la base de données globale (205 points de donnée). Les proportions de division des données pour l'entraînement du modèle et pour le test, ainsi que les plages des hyper-paramètres sont identiques à celles décrites dans la section précédente de modélisation par SVM.

Diverses fonctions de Kernel ont été testées : linéaire, polynomiale, RBF et gaussienne. Les résultats des hyper-paramètres optimisés par le modèle SVM sont résumés dans le **tableau 4.10**. La fonction de Kernel RBF-gaussienne a donné les meilleurs résultats, produisant l'erreur la plus faible et le coefficient de corrélation le plus élevé parmi toutes les fonctions de Kernel.

Tableau 4.10 : Détails des hyper-paramètres optimisés pour le modèle SVM.

Méthode	fonction de Kernel	*C*	Echelle de Kernel sigma (σ)	Epsilon (ε)	Quantité de vecteurs à support
DA-SVM	linéaire	640	-	1950	921
	polynomiale	327,100	-	1050	921
	RBF-Gaussienne	**500**	**0,0182**	**22,500**	**921**
SVM	RBF-Gaussienne	640	0,100	518,700	921

Les diagrammes de dispersion montrent la comparaison entre les valeurs de capacité d'adsorption mesurées et prédites obtenues à l'aide du meilleur modèle pour la base d'entrainement, tandis que la base de données de test sont illustrés à la **Figure 4.19**. Le coefficient de corrélation et de détermination, sont respectivement de 0.998 et 0.997 pour le modèle DA-SVR utilisant RBF-Gaussienne comme fonction de Kernel. Par conséquent, le DA-SVM obtenu avec la fonction de Kernel RBF-gaussienne est statistiquement significatif. La *RMSE* a été utilisée comme fonction d'aptitude pour évaluer la solution optimale.

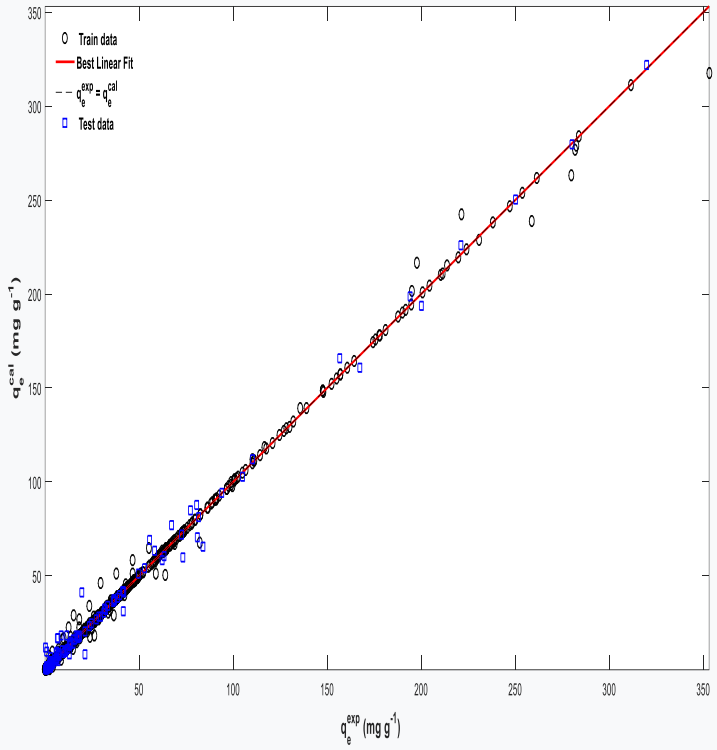


Figure 4.19 : Valeurs de la capacité d'adsorption calculées vs expérimentales pour les données globales pour DA-SVM.

Le **tableau 4.11** représente les valeurs de performance statistiques de deux modèles SVMO et DA-SVMO pour la base de données globale, lors de la modélisation des phénomènes d'adsorption statique compétitive en termes de *RMSE*, *R* et R^2.

Tableau 4.11 : Paramètres statistiques des deux modèles SVMO et DA-SVMO.

	SVMO	**DA-SVMO**
RMSE	7.525	2.540
$\boldsymbol{R^2}$	0.9693	0.997
R	0.985	0.998

La **figure 4.20** représente les histogrammes de la modélisation SVMO et DA-SVMO selon les paramètres de performance pour la base de données globale.

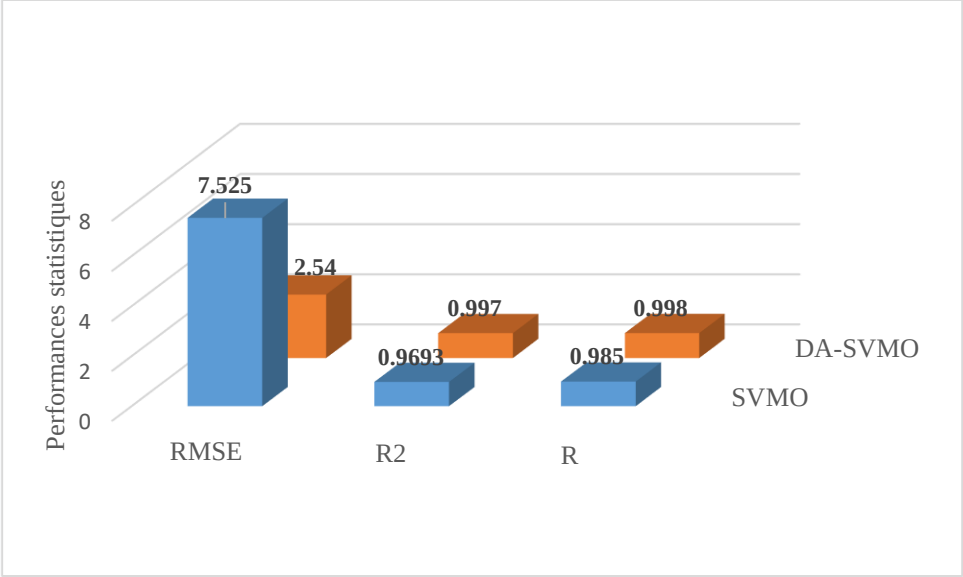


Figure 4.20 : Paramètres de performance de SVMO et DA-SVMO pour la base globale.

En général, toutes les valeurs de performance des deux modèles SVMO et DA-SVMO respectent les critères des performances statistiques. Dans cette contribution, le modèle DA-SVMO a donné les meilleurs résultats en termes de *RMSE*, R^2 et *R*, pour la base globale.

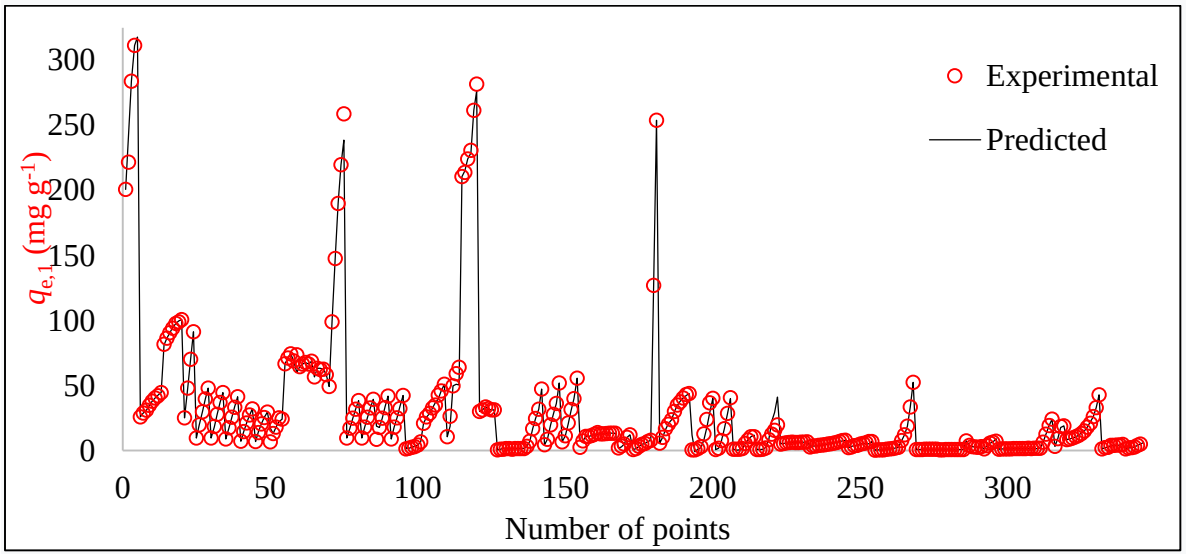


Figure 4.21 : Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,1}$ (mg.g^{-1}).

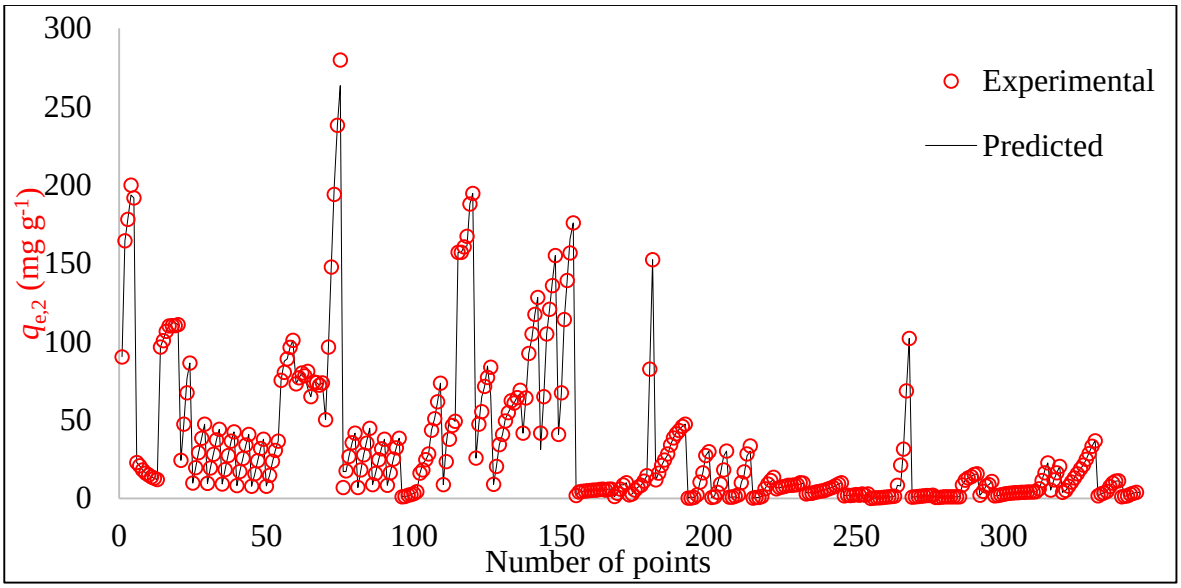


Figure 4.22 : Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,2}$ (mg.g^{-1}).

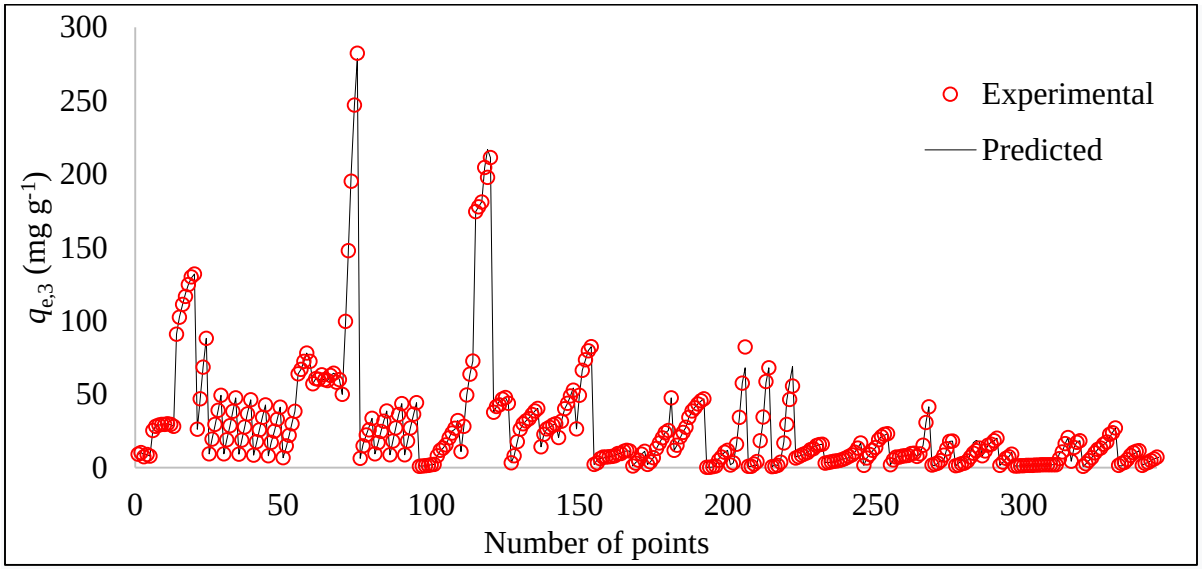


Figure 4.23 : Capacité d'adsorption calculée vs expérimentale pour $q_{e,3}$ (mg.g^{-1}).

Une autre confirmation de la précision du modèle DA-SVM a été démontrée de la **figure 4.21** à la **figure 4.23** entre la capacité d'adsorption ternaire expérimentale et prédite ($q_{e,i}$, i=1, 2, 3). Ces figures montrent que les valeurs prédites suivent la tendance des valeurs expérimentales non linéaires. Le modèle développé présentait des valeurs très faibles de *RMSE* (2.540) pour l'étage global et des valeurs R^2 élevées de 0.997 pour les trois sorties. Les résultats obtenus

confirment une grande capacité de prédiction du modèle développé et la possibilité d'être intégré dans une unité de traitement et de purification de l'eau.

4.6.5 Formule de DA-SVM optimisé

Après l'élaboration du modèle neuronale, l'équation du modèle peut être écrite sous la forme suivante :

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N}(\alpha_n - \alpha_n^*)\, k(x_i,\, x_j) + b \qquad \textbf{(4.14)}$$

α_n et α_n* : variables d'écart positives ; *k* : fonction noyau définie par un produit scalaire de la fonction de transfert non linéaire (base radiale gaussienne "RBF") ; *i* : le nombre des entrés ; *j* : le nombre des neurones de la couche cachée ; *b* : le vecteur de biais ;

La fonction noyau (*k)* est donnée par l'équation suivante :

$$k(x_i,\, x_j) = exp\left\{ -\|x_i - x_j\|^2 \right\} \qquad \textbf{(4.15)}$$

4.6.6 Interface graphique basée sur MATLAB® du modèle DA-SVMO

L'offre d'une utilisation simple et conviviale du modèle DA-SVM optimal pour estimer les valeurs cibles et éviter de traiter l'architecture complexe du modèle avec de nombreux poids et biais, une interface graphique pratique est conçue en utilisant MATLAB® R2018a GUI Toolbox. La procédure de construction de l'interface graphique est présentée dans la **figure 4.24**.

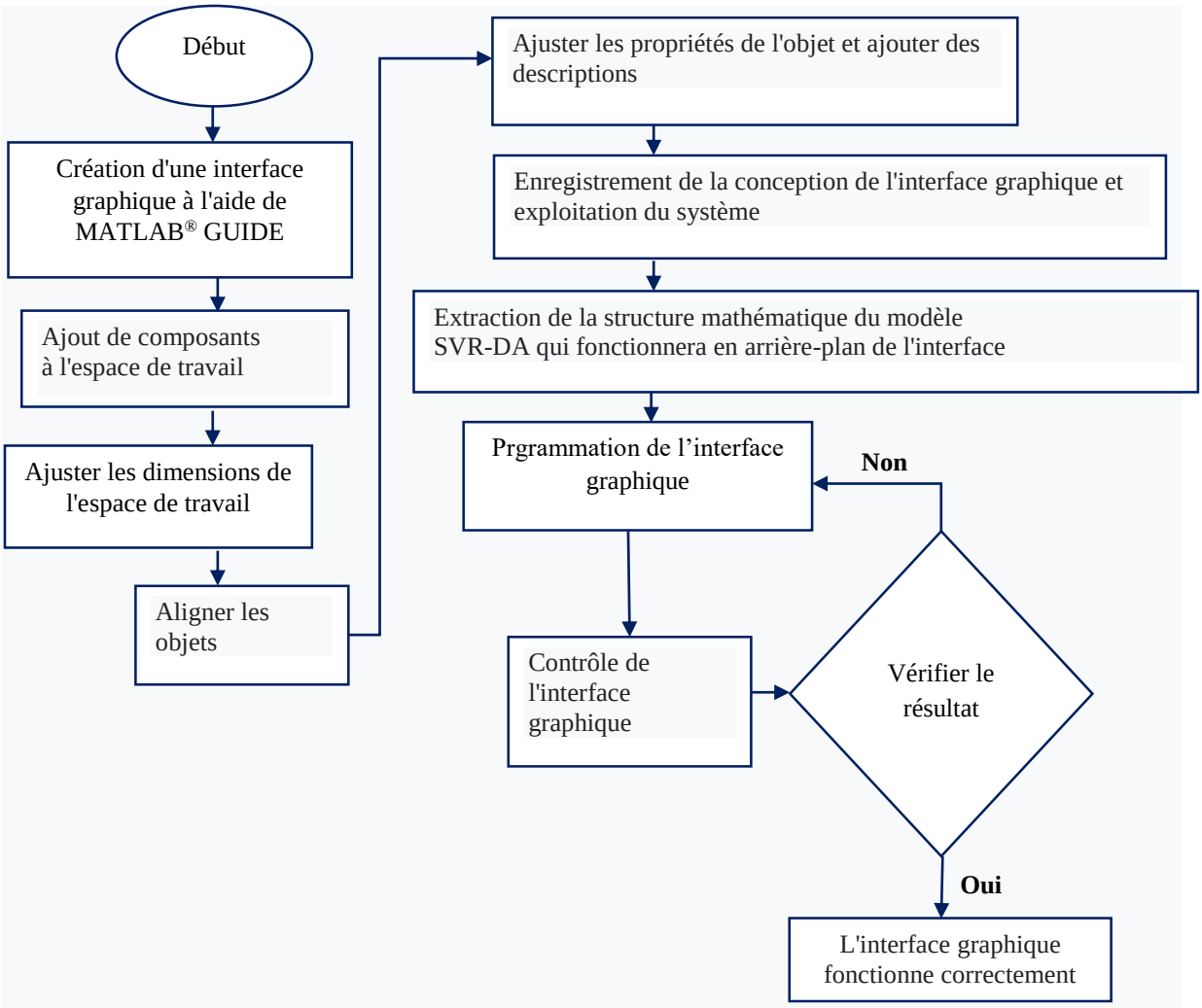


Figure 4.24 : Procédure de construction de l'interface graphique.

L'interface graphique présentée à la **figure 4.25** a été construite à l'aide du modèle optimisé avec une grande précision, les paramètres d'entrée sont écrits directement dans les zones de texte associées dont les descriptions sont indiquées au-dessus des zones. Ensuite, les entrées sont utilisées avec les poids et les biais du modèle optimisé pour estimer la capacité d'adsorption des systèmes ternaires avec les sorties dans la gamme des entrées utilisées.

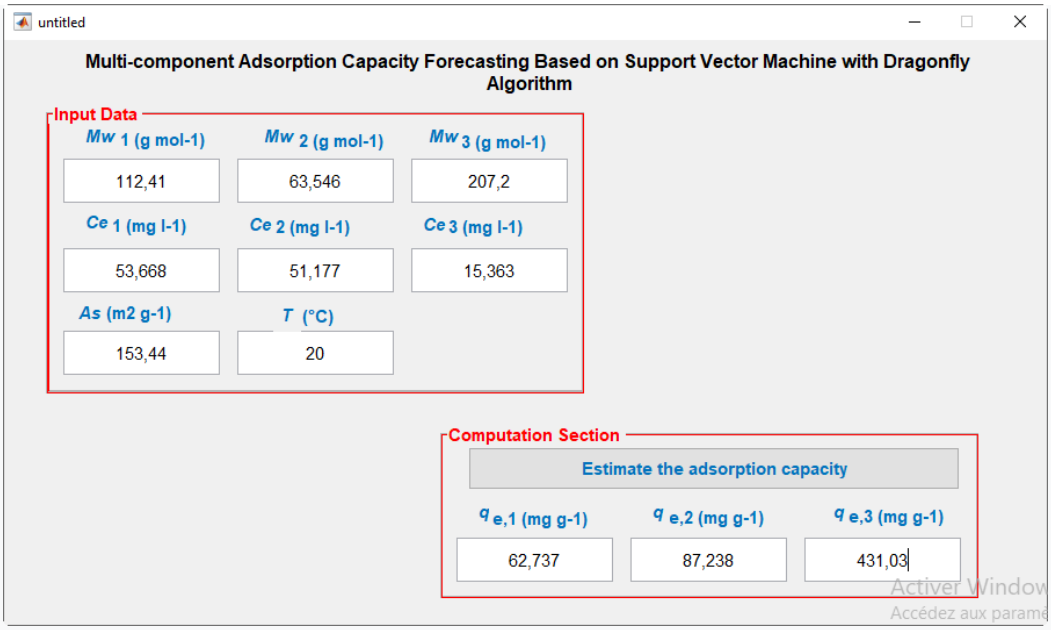


Figure 4.25 : Implémentation du meilleur modèle dans le GUI pour estimer les valeurs cibles.

Conclusion

L'efficacité des modèles SVMO et DA-SVMO dans la prédiction de la capacité d'adsorption a été évaluée dans ce travail. Basé sur les métriques statistiques évaluées, l'exactitude des modèles en termes de précision et d'exactitude était dans cet ordre : DA-SVM avec RBF-fonction de Gaussienne Kernel (model 1), SVM avec la fonction de Gaussienne Kernel (model 2), DA-SVM avec la fonction polynomiale de Kernel (model 3) et DA-SVM avec la fonction linéaire de Kernel (model 4). Le modèle 4 présente une valeur de *RMSE* significativement élevée (42,550 $mg.g^{-1}$) par rapport au modèle 3 (39 $mg.g^{-1}$), au modèle 2 (7,525 $mg.g^{-1}$) et au modèle 1 (2,540 $mg.g^{-1}$).

Le modèle DA-SVM développé peut être utilisé pour prédire la capacité d'adsorption des systèmes polluants ternaires (métaux lourds, colorants, produits pharmaceutiques, hydrocarbures, matières organiques et inorganiques) impliqué dans le traitement et la purification de l'eau. Pour faciliter l'utilisation du modèle obtenu, une interface graphique unique basée sur MATLAB® a été développée sur la base des meilleurs paramètres du modèle, qui pourrait être utilisé pour la prédiction de la réponse avec une grande précision.

Ces résultats montrent que notre modèle est capable d'estimer correctement les données expérimentales.

4.7 Comparaison entre (RNAO / DA-SVMO) et (RNAO / SVMO / DA-SVMO)

Les modèles RNAO, SVMO, DA-SVMO ont été comparés sur la base de leurs performances dans la modélisation pour décrire l'adsorption statique multi-composants.

4.7.1 Comparaison entre (RNAO / DA-SVMO)

La comparaison des modèles DA-SVMO et RNAO est basée sur les paramètres statistiques. Le **tableau 4.12** représente la comparaison de la modélisation par DA-SVMO et RNAO, selon *RMSE*, *R* et R^2.

Tableau 4.12 : Comparaison de la modélisation par DA-SVMO et RNAO.

Phases	**RNAO**			**DA-SVMO**		
	Apprentissage	**Test**	**Globale**	**Apprentissage**	**Test**	**Globale**
RMSE	6.7208	10.4366	7.3523	2.1617	4.7433	2.5393
R^2	0.9767	0.9580	0.9722	0.9976	0.9846	0.9966
R	0.9883	0.9788	0.9860	0.9988	0.9923	0.9983

La **figure 4.26** représente la comparaison de la modélisation par RNAO et DA-SVMO selon les paramètres statistiques *RMSE* R^2 et *R* pour base de données globale.

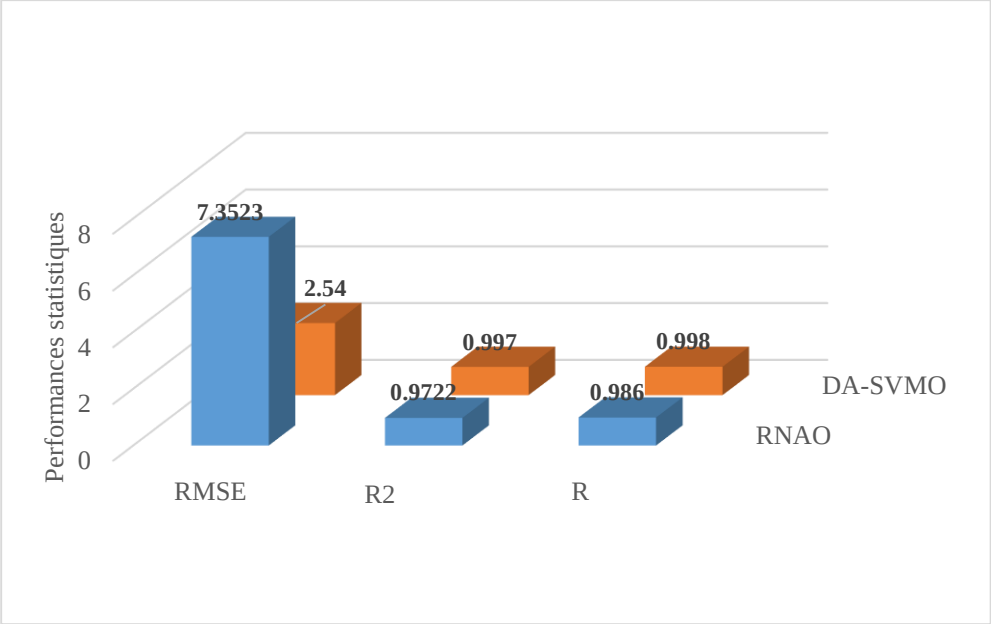


Figure 4.26 : Comparaison entre RNAO et DA-SVMO pour la base globale.

D'après les résultats obtenus, on trouve que le modèle DA-SVMO est le meilleur pour modéliser et optimiser la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants, vu ces performances statistiques : *RMSE* = 2.54, R^2 = 0.997 et *R* = 0.998.

4.7.2 Comparaison entre (RNAO / SVMO / DA-SVMO)

La comparaison des modèles RNAO, SVMO et DA-SVMO est basée sur les paramètres statistiques. Le **tableau 4.13** représente la comparaison de la modélisation par RNAO, SVM et DA-SVMO, selon *RMSE*, *R* et R^2.

Tableau 4.13 : Comparaison de la modélisation par RNAO, SVMO et DA-SVMO.

	RNAO	**SVMO**	**DA-SVMO**
RMSE	7.3523	7.525	2.540
R^2	0.9722	0.9693	0.997
R	0.9860	0.985	0.998

La **figure 4.27** représente la comparaison de la modélisation RNAO, SVMO et DA-SVMO selon les paramètres de performance pour la base de données globale.

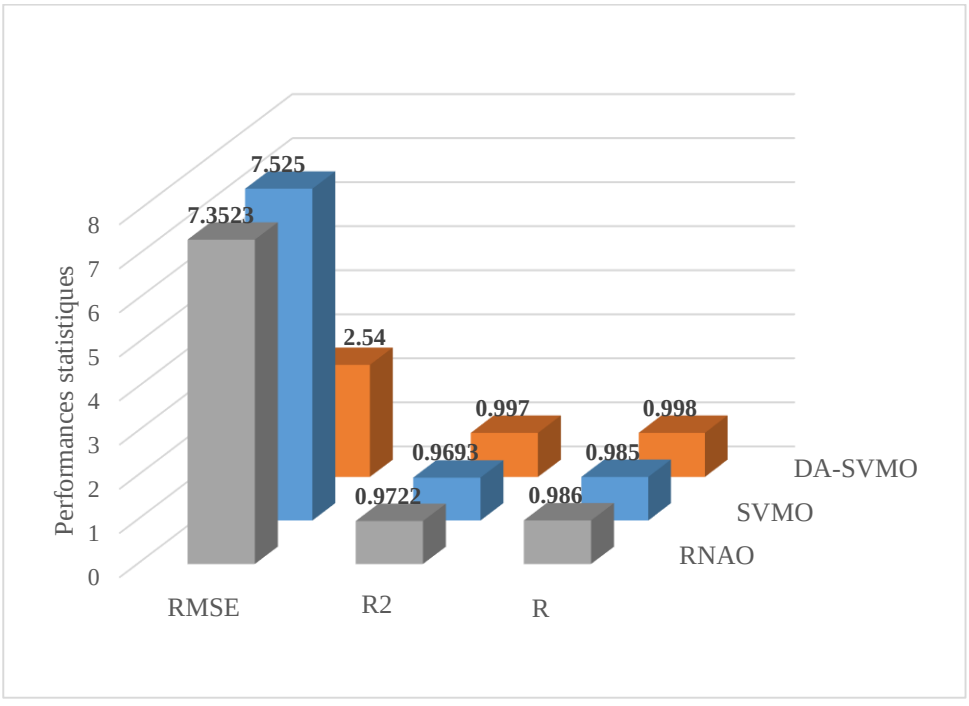


Figure 4.27 : Comparaison entre RNAO, SVMO et DA-SVMO pour la base globale.

D'après les résultats obtenus, on trouve que le modèle DA-SVMO est le meilleur via la modélisation et l'optimisation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants, avec les performances statistiques : $RMSE$ = 2.54, R^2 = 0.997 et R = 0.998.

Conclusion

Cette étude montre que tous les paramètres d'entrée ont une importance relative via l'output, et par conséquent ne peuvent pas être négligés.

Une étude comparative a été réalisée pour la prédiction de l'adsorption statique multi-composants en tant que métaux lourds, composés organiques et colorants, en présence de différents matériaux poreux adsorbants, en utilisant les deux techniques d'intelligence artificielle les plus prédictives : la première contribution (RNA) et la deuxième contribution (SVM). Cette comparaison a été améliorée à l'aide de trois modèles: RNA, SVM et SVM hybride avec algorithme d'optimisation Dragonfly (DA-SVM).

Un ensemble de données important et représentatif (3 systèmes multi-composants comptant avec 1023 points comme plusieurs polluants : métaux lourds, composés organiques et colorants) a été utilisé pour évaluer les modèle cités auparavant dans la modélisation statique des multi-composants. Les résultats montrent qu'un modèle hybride SVM-DA est toujours robuste quelle que soit la variété des conditions opératoires par rapport aux autres modèles.

Tous les modèles ont montré des valeurs de précision raisonnables liées aux résultats calculés pendant le processus d'apprentissage, de test et de validation, cependant, dans la deuxième contribution, le modèle SVM-DAO montre un avantage où il a donné des valeurs plus précises, sont très convaincantes (R = 0.9985 ; R^2 = 0.997 et $RMSE$ = 2.540), Nous nous retenons le modèle DA-SVMO.

Enfin, et afin de garder une trace des résultats prédits, un programme informatique a été conçu pour exécuter le programme optimisé pour ce modèle. À l'avenir, nous entendons utiliser d'autres modèles combinés appartenant à l'intelligence artificielle pour des systèmes multiples.

Références Bibliographiques

Al-Degs, Y., Khraisheh, M. A. M., Allen, S. J., Ahmad, M. N., & Walker, G. M. (2007). Competitive adsorption of reactive dyes from solution: Equilibrium isotherm studies in single and multisolute systems. Chemical Engineering Journal, 128(2–3), 163–167. https://doi.org/10.1016/j.cej.2006.10.009

Alade, I. O., Abd Rahman, M. A., Abbas, Z., Yaakob, Y., & Saleh, T. A. (2020). Application of support vector regression and artificial neural network for prediction of specific heat capacity of aqueous nanofluids of copper oxide. Solar Energy, 197, 485–490.

Ali, A. H. (2019). Treatment of wastewater contaminated with dyes using modified low-cost adsorbents. Desalination and Water Treatment, 140, 326–336. https://doi.org/10.5004/dwt.2019.23513

Balasubramanian, R., Perumal, S. V., & Vijayaraghavan, K. (2009). Equilibrium isotherm studies for the multicomponent adsorption of lead, zinc and cadmium onto Indonesian peat. Industrial and Engineering Chemistry Research, 48(4), 2093–2099. https://doi.org/10.1021/ie801022p

Bentahar, S., Dbik, A., Khomri, M. El, El Messaoudi, N., & Lacherai, A. (2017). Adsorption of methylene blue, crystal violet and congo red from binary and ternary systems with natural clay: Kinetic, isotherm, and thermodynamic. Journal of Environmental Chemical Engineering, 5(6), 5921–5932. https://doi.org/10.1016/j.jece.2017.11.003

Calisto, V., Jaria, G., Silva, C. P., Ferreira, C. I. A., Otero, M., & Esteves, V. I. (2017). Single and multi-component adsorption of psychiatric pharmaceuticals onto alternative and commercial carbons. Journal of Environmental Management, 192, 15–24. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2017.01.029

Cortes, C., & Vapnik, V. (1995). Support-vector networks. Machine Learning, 20(3), 273–297. https://doi.org/10.1007/BF00994018

Debnath, S., Ballav, N., Maity, A., & Pillay, K. (2017). Competitive adsorption of ternary dye mixture using pine cone powder modified with β-cyclodextrin. Journal of Molecular Liquids, 225, 679–688. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.10.109

El bey, M., Laidi, M., Yettou, A., Hanini, S., Ibrir, A., Hentabli, M., & Ouldkhaouaa, H. (2021). Practical artificial neural network tool for predicting the competitive adsorption of dyes on Gemini Polymeric Nanoarchitecture. Journal of Chemists and Chemical Engineers, 70(9–10), 481−488. https://doi.org/https://doi.org/10.15255/KUI.2020.069

Fan, X., Liu, H., Anang, E., & Ren, D. (2021). Effects of electronegativity and hydration energy on the selective adsorption of heavy metal ions by synthetic nax zeolite. Materials, 14(15). https://doi.org/10.3390/ma14154066

Feng, Y., Zhang, P., Yang, M., Li, Q., & Zhang, A. (2019). Short term load forecasting of offshore oil field microgrids based on DA-SVM. Energy Procedia, 158, 2448–2455. https://doi.org/10.1016/j.egypro.2019.01.318

Gadekar, M. R., & Ahammed, M. M. (2019). Modelling dye removal by adsorption onto water treatment residuals using combined response surface methodology-artificial neural network approach. Journal of Environmental Management, 231(October 2018), 241–248. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.10.017

Garba, Z. N., Zango, Z. U., Babando, A. A., & Galadima, A. (2015). Competitive adsorption of dyes onto granular activated carbon. Available Online Www.Jocpr.Com Journal of Chemical and Pharmaceutical Research, 7(4), 710–717. www.jocpr.com

Ghaedi, M., Ghaedi, A. M., Hossainpour, M., Ansari, A., Habibi, M. H., & Asghari, A. R. (2014). Least square-support vector (LS-SVM) method for modeling of methylene blue dye adsorption using copper oxide loaded on activated carbon: Kinetic and isotherm study. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 20(4), 1641–1649. https://doi.org/10.1016/j.jiec.2013.08.011

Goel, J., Kadirvelu, K., & Rajagopal, C. (2004). Competitive sorption of Cu(II), Pb(II) and Hg(II) ions from aqueous solution using coconut shell-based activated carbon. Adsorption Science and Technology, 22(3), 257–273. https://doi.org/10.1260/0263617041503453

Gómez-Avilés, A., Sellaoui, L., Badawi, M., Bonilla-Petriciolet, A., Bedia, J., & Belver, C. (2021). Simultaneous adsorption of acetaminophen, diclofenac and tetracycline by organo-sepiolite: Experiments and statistical physics modelling. Chemical Engineering Journal, 404(June 2020). https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.126601

Hamadi, N. J., Mohammed, A. A., & Ali, A. H. (2014). Impact Factor: 1.852 (C). International Journal of Engineering Sciences & Research Technology, 3(7), 245–257. http://www.ijesrt.com

Heidari, A., Younesi, H., & Mehraban, Z. (2009). Removal of Ni(II), Cd(II), and Pb(II) from a ternary aqueous solution by amino functionalized mesoporous and nano mesoporous silica. Chemical Engineering Journal, 153(1–3), 70–79. https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.06.016

Hossain, M. A., Ngo, H. H., Guo, W. S., Nghiem, L. D., Hai, F. I., Vigneswaran, S., & Nguyen, T. V. (2014). Competitive adsorption of metals on cabbage waste from multi-metal solutions. Bioresource Technology, 160, 79–88. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2013.12.107

Huang, L., Jin, Q., Tandon, P., Li, A., Shan, A., & Du, J. (2018). High-resolution insight into the competitive adsorption of heavy metals on natural sediment by site energy distribution. Chemosphere, 197, 411–419. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.01.056

IBRIR, A. (2022). Contribution à l'étude en trois dimensions (3d) de la dispersion d'un polluant gazeux dans un milieu urbain.

Iqbal, M., Ali, U., Ahmad, A., Rehman, H.-, Ghani, U., & Farid, T. (2020). Relating groundwater levels with meteorological parameters using ANN technique. Measurement, 166, 108163. https://doi.org/10.1016/j.measurement.2020.108163

Kang, Q., Zhou, W., Li, Q., Gao, B., Fan, J., & Shen, D. (2009). Adsorption of anionic dyes on poly(epicholorohydrin dimethylamine) modified bentonite in single and mixed dye solutions. Applied Clay Science, 45(4), 280–287. https://doi.org/10.1016/j.clay.2009.06.010

Khanghah, S. P., Boozarpoor, M., Lotfi, M., & Teimouri, R. (2015). Optimization of micro-milling parameters regarding burr size minimization via RSM and simulated annealing algorithm. Transactions of the Indian Institute of Metals, 68(5), 897–910.

Kumar, M., Dosanjh, H. S., & Singh, H. (2018). Magnetic Zinc Ferrite–Alginic Biopolymer Composite: As an Alternative Adsorbent for the Removal of Dyes in Single and Ternary Dye System. Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, 28(5), 1688–1705. https://doi.org/10.1007/s10904-018-0839-2

Kumar, M., Dosanjh, H. S., & Singh, H. (2019). Surface Modification of Spinel Ferrite with Biopolymer for Adsorption of Cationic and Anionic Dyes in Single and Ternary Dye System. Fibers and Polymers, 20(4), 739–751. https://doi.org/10.1007/s12221-019-8462-6

Laabd, M., El Jaouhari, A., Ait Haki, M., Eljazouli, H., Bazzaoui, M., Kabli, H., & Albourine, A. (2016). Simultaneous removal of benzene polycarboxylic acids from water by polypyrrole composite filled with a cellulosic agricultural waste. Journal of Environmental Chemical Engineering, 4(2), 1869–1879. https://doi.org/10.1016/j.jece.2016.03.015

Laïdi, M., & Hanini, S. (2012). Approche neuronale pour l'estimation des transferts thermiques dans un fluide frigoporteur diphasique. Revue Des Energies Renouvelables, 15(3), 513–520.

Laidi, M., Hanini, S., El, A., & Abdallah, H. (2018). Novel Approach for Estimating Monthly Sunshine Duration Using Artificial Neural Networks : A Case Study. Journal of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, 405–414.

Liu, X., Xu, X., Dong, X., & Park, J. (2020). Competitive adsorption of heavy metal ions from aqueous solutions onto activated carbon and agricultural waste materials. Polish Journal of Environmental Studies, 29(1), 749–761. https://doi.org/10.15244/pjoes/104455

Maleki, A., Hayati, B., Najafi, F., Gharibi, F., & Joo, S. W. (2016). Heavy metal adsorption from industrial wastewater by PAMAM/TiO2 nanohybrid: Preparation, characterization and adsorption studies. Journal of Molecular Liquids, 224, 95–104. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.09.060

Manjunath, S. V., Singh Baghel, R., & Kumar, M. (2020). Antagonistic and synergistic analysis of antibiotic adsorption on Prosopis juliflora activated carbon in multicomponent systems. Chemical Engineering Journal, 381(August 2019). https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122713

Meng, F., Zou, Q., Zhang, Z., Wang, B., Ma, H., Abdullah, H. M., Almalaq, A., & Mohamed, M. A. (2021). An intelligent hybrid wavelet-adversarial deep model for accurate prediction of solar power generation. Energy Reports, 7, 2155–2164. https://doi.org/10.1016/j.egyr.2021.04.019

Mesellem, Y., Abdallah el Hadj, A., Laidi, M., Hanini, S., & Hentabli, M. (2021). Artificial neural network modelling of multi-system dynamic adsorption of organic pollutants on activated carbon. Journal of Chemists and Chemical Engineers, 70(1–2), 1–12. https://doi.org/https://doi.org/10.15255/KUI.2020.011

Mesellem, Y., Hadj, A. A. El, Laidi, M., Hanini, S., & Hentabli, M. (2021). Computational intelligence techniques for modeling of dynamic adsorption of organic pollutants on activated carbon. Neural Computing and Applications, 2. https://doi.org/10.1007/s00521-021-05890-2

Mohammed, A. A., Al-Musawi, T. J., Kareem, S. L., Zarrabi, M., & Al-Ma'abreh, A. M. (2019). Simultaneous adsorption of tetracycline, amoxicillin, and ciprofloxacin by pistachio shell powder coated with zinc oxide nanoparticles. Arabian Journal of Chemistry. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2019.10.010

Oladipo, A. A., Ahaka, E. O., & Gazi, M. (2019). High adsorptive potential of calcined magnetic biochar derived from banana peels for Cu2+, Hg2+, and Zn2+ ions removal in single and ternary systems. Environmental Science and Pollution Research, 26(31), 31887–31899. https://doi.org/10.1007/s11356-019-06321-5

Park, J. H., Cho, J. S., Ok, Y. S., Kim, S. H., Kang, S. W., Choi, I. W., Heo, J. S., Delaune, R. D., & Seo, D. C. (2015). Competitive adsorption and selectivity sequence of heavy metals by chicken bone-derived biochar: Batch and column experiment. Journal of Environmental Science and Health - Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering, 50(11), 1194–1204. https://doi.org/10.1080/10934529.2015.1047680

Parthasarathy, P., & Narayanan, S. K. (2014). Effect of Hydrothermal Carbonization Reaction Parameters on. Environmental Progress & Sustainable Energy, 33(3), 676–680. https://doi.org/10.1002/ep

Pauletto, P. S., Gonçalves, J. O., Pinto, L. A. A., Dotto, G. L., & Salau, N. P. G. (2020). Single and competitive dye adsorption onto chitosan–based hybrid hydrogels using artificial neural network modeling. Journal of Colloid and Interface Science, 560, 722–729. https://doi.org/10.1016/j.jcis.2019.10.106

Pauletto, P. S., Lütke, S. F., Dotto, G. L., & Salau, N. P. G. (2021). Forecasting the multicomponent adsorption of nimesulide and paracetamol through artificial neural network. Chemical Engineering Journal, 412, 127527. https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127527

Rahman, M. M., Samsuddin, S. H., Miskon, M. F., Yunus, K., & Yusof, A. M. (2015). Phosphoric acid activated carbon as borderline and soft metal ions scavenger. Green Chemistry Letters and Reviews, 8(2), 9–20. https://doi.org/10.1080/17518253.2015.1058974

Roy, A., & Bhattacharya, J. (2013). A binary and ternary adsorption study of wastewater Cd(II), Ni(II) and Co(II) by γ-Fe2O3 nanotubes. Separation and Purification Technology, 115, 172–179. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2013.05.010

Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., & Ratto, M. (2004). Sensitivity analysis in practice: a guide to assessing scientific models. Chichester, England.

Sciences, I. (2009). Sorption and Competition of Aromatic Compounds and Humic Acid on Multiwalled Carbon Nanotubes. 43(16), 6214–6219.

Srivastava, V. C., Mall, I. D., & Mishra, I. M. (2006). Modelling Individual and Competitive Adsorption of Cadmium(II) and Zinc(II) Metal Ions from Aqueous Solution onto Bagasse Fly Ash. Separation Science and Technology, 41(12), 2685–2710. https://doi.org/10.1080/01496390600725687

Sulaymon, A. H., Ebrahim, S. E., Abdullah, S. M., & Al-Musawi, T. J. (2010). Removal of lead, cadmium, and mercury ions using biosorption. Desalination and Water Treatment, 24(1–3), 344–352. https://doi.org/10.5004/dwt.2010.1963

Sulaymon, A. H., Ebrahim, S. E., & M-Ridha, M. J. (2014). Competitive biosorption of Pb(II), Cr(III), and Cd (II) from synthetic wastewater onto heterogeneous anaerobic biomass in single, binary, and ternary batch systems. Desalination and Water Treatment, 52(28–30), 5629–5638. https://doi.org/10.1080/19443994.2013.813008

Sulaymon, A. H., Yousif, S. A., & Al-Faize, M. M. (2015). Single-multicomponent biosorption of lead mercury chromium and arsenic onto activated sludge in batch and fixed-bed adsorber. Desalination and Water Treatment, 53(13), 3499–3512. https://doi.org/10.1080/19443994.2013.872054

Syah, R., Towfighi Naeem, M. H., Daneshfar, R., Dehdar, H., & Soulgani, B. S. (2022). On the prediction of methane adsorption in shale using grey wolf optimizer support vector machine approach. Petroleum, 8(2), 264–269. https://doi.org/10.1016/j.petlm.2021.12.002

Teimouri, R. (2019). Optimization of residual stress field in ultrasonic assisted burnishing process. International Journal of Lightweight Materials and Manufacture, 2(4), 346–354.

Teimouri, R., & Baseri, H. (2014). Optimization of magnetic field assisted EDM using the continuous ACO algorithm. Applied Soft Computing, 14, 381–389.

Ushiki, I., Sato, Y., Ota, M., & Inomata, H. (2016). Multicomponent (Binary and Ternary) Adsorption Equilibria of Volatile Organic Compounds (Acetone, Toluene, and n-Hexane) on Activated Carbon in Supercritical Carbon Dioxide. Industrial and Engineering Chemistry Research, 55(7), 2163–2173. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b04383

Wei, M., Yang, X., Watson, P., Yang, F., & Liu, H. (2018). Development of QSAR model for predicting the inclusion constants of organic chemicals with α-cyclodextrin. Environmental Science and Pollution Research, 25(18), 17565–17574. https://doi.org/10.1007/s11356-018-1917-2

Wu, J., Ke, X., Wang, L., Li, R., Zhang, X., Jiao, P., Zhuang, W., Chen, Y., & Ying, H. (2014). Recovery of acetoin from the ethanol-acetoin-acetic acid ternary mixture based on adsorption methodology using a hyper-cross-linked resin. Industrial and Engineering Chemistry Research, 53(31), 12411–12419. https://doi.org/10.1021/ie502105q

Wu, Q., Dong, S., Wang, L., & Li, X. (2021). Single and competitive adsorption behaviors of cu2+, pb^{2+} and zn^{2+} on the biochar and magnetic biochar of pomelo peel in aqueous solution. Water (Switzerland), 13(6). https://doi.org/10.3390/w13060868

Yettou, A., Bey, M. El, Laidi, M., Hanini, S., Hentabli, M., Khaldi, O., & Mihoub, A. (2021). Multicomponent adsorption modelling using ANN, LS-SVR, and SVR approach. Journal of Chemists and Chemical Engineers, 70(9–10), 509–518. https://doi.org/https://doi.org/10.15255/KUI.2020.071

Zendehboudi, A., Baseer, M. A., & Saidur, R. (2018). Application of support vector machine models for forecasting solar and wind energy resources: A review. Journal of Cleaner Production, 199, 272–285. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.07.164

Zhang, W., Huang, W., Tan, J., Huang, D., Ma, J., & Wu, B. (2023). Modeling, optimization and understanding of adsorption process for pollutant removal via machine learning: Recent progress and future perspectives. Chemosphere, 311(September 2022). https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.137044

Zhao, D., Wang, Z., Lu, S., & Shi, X. (2020). An amidoxime-functionalized polypropylene fiber: Competitive removal of Cu(II), Pb(II) and Zn(II) from wastewater and subsequent sequestration in cement mortar. Journal of Cleaner Production, 274, 123049. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123049

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion Générale et Perspectives

Notre thèse a pour objectif l'étude de la modélisation et l'optimisation de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants en tant que plusieurs polluants (métaux lourds, colorants et d'autre composés organiques) en présence de différents matériaux poreux adsorbats : charbon actif, zéolite, argile, biomasse, bentonite, etc. La partie théorique (ou l'extraction d'une base des données à partir des travaux expérimentaux réalisés par les chercheurs et analysées de manière statistique à l'aide du logiciel Digitizer 4.1), la modélisation et l'optimisation sont réalisées dans le Laboratoire de Biomatériaux et Phénomènes de transport à l'Université de Médéa (LBPT).

Pour déterminer l'importance de chaque variable d'entrée, une analyse de sensibilité a été utilisée s'articulant sur le diagramme de violant. Les résultats montrent que tous les paramètres d'entrée ont une importance relative significative sur la sortie et ne peuvent être négligés.

La partie expérimentale est divisée en deux contributions de modélisations neuronales statiques (RNA) et (SVM / DA-SVM) ont été étudiés pour l'adsorption des systèmes multi-composants en présence des matériaux poreux adsorbants dans différentes conditions opératoires.

Dans la première contribution, on a étudié la modélisation et l'optimisation par un réseau de neurones artificiel (RNA) de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbants (q_e). Les entrées choisies pour le modèle neuronal, sont les paramètres opératoires accessibles par différents logiciels dans la littérature qui sont les plus compétitives. Par contre la recherche du réseau de neurones optimal nécessite la confection d'un programme en langage MATLAB® comportant plusieurs boucles afin de tenir compte des paramètres constituant la topologie et l'architecture du réseau. Les résultats trouvés montrent que le modèle neuronal optimal (RNAO) représente des aptitudes raisonnable pour la prédiction de la capacité d'adsorption à l'équilibre des adsorbats, avec une précision acceptable (raisonnable), avec $RMSE$ = 7.3523 et R^2 = 0.9722. Enfin, une interface utilisateur graphique conviviale a été conçue sur la base des paramètres du RNAO.

Dans la deuxième contribution, les données des isothermes, obtenues à partir de la littérature de l'adsorption compétitive en batch, ont été ajustées à l'aide d'un modèle d'une Machine à

Vecteurs de Support (SVM) et d'une Machine à Vecteur de Support par Dragonfly (DA-SVM). Le modèle DA-SVM utilisé a été choisi comme le modèle le plus approprié pour décrire le phénomène d'adsorption multi-composants. Pour les trois ensembles de la base de données (apprentissage, test et validation), le modèle optimal (DA-SVMO) présente un R^2 qui varie entre 0.9846 à 0.9976 et un *RMSE* qui varie entre 2.1617 à 4.7433.

Les valeurs calculées des trois modèles (RNAO, SVMO et DA-SVMO) ont montré des bonnes précisions via les valeurs expérimentales et cela pour les trois phases (apprentissage, validation et test). Cependant, le modèle "DA-SVMO" montre un avantage via les deux autres modèles, où il a donné des valeurs des paramètres de performance statistiques ($R = 0.9983$, $R^2 = 0.9966$ et $RMSE = 2.5393$) plus précises ; donc c'est le meilleur modèle en termes de précision, de fluidité et de flexibilité, pour la base de données globale.

En perspective, tout en estimant avoir atteint notre objectif tracé pour cette étude, nous envisageons d'appliquer la modélisation et l'optimisation pour d'autres bases des données (big data base) des systèmes d'adsorption multi-composants en batch (mono, bi, tri, tétra, …) et d'adsorbants. L'application d'autres méthodes et algorithmes d'intelligence artificielle.