

**Record Number:** 14020  
**Author, Monographic:** Abi-Zeid, I.  
**Author Role:**  
**Title, Monographic:** L'application des réseaux de neurones aux processus d'assainissement des eaux et aux résidus miniers  
**Translated Title:**  
**Reprint Status:**  
**Edition:**  
**Author, Subsidiary:**  
**Author Role:**  
**Place of Publication:** Québec  
**Publisher Name:** INRS-Eau  
**Date of Publication:** 1997  
**Original Publication Date:** Octobre 1997  
**Volume Identification:**  
**Extent of Work:** 50  
**Packaging Method:** pages  
**Series Editor:**  
**Series Editor Role:**  
**Series Title:** INRS-Eau, rapport de recherche  
**Series Volume ID:** 513  
**Location/URL:**  
**ISBN:** 2-89146-302-1  
**Notes:** Rapport annuel 1997-1998  
**Abstract:**  
**Call Number:** R000513  
**Keywords:** rapport/ ok/ dl

**L'APPLICATION DES RÉSEAUX  
DE NEURONES AUX PROCESSUS  
D'ASSAINISSEMENT DES EAUX  
ET AUX RÉSIDUS MINIERS**

**L'APPLICATION DES RÉSEAUX DE NEURONES  
AUX PROCESSUS D'ASSAINISSEMENT DES EAUX  
ET AUX RÉSIDUS MINIERS**

**Rapport préparé  
par**

**Irène Abi-Zeid**

**Institut national de la recherche scientifique, INRS-Eau  
2800, rue Einstein, Case postale 7500, SAINTE-FOY (Québec), G1V 4C7**

**Rapport de recherche No R-513**

**Octobre 1997**



## RÉSUMÉ

Ce rapport présente une description des réseaux de neurones artificiels (RNA), une technique de l'intelligence artificielle particulièrement adaptée à la modélisation des processus physiques complexes. Une revue bibliographique des travaux qui appliquent les RNA aux processus chimiques et biologiques est effectuée. Trois RNA sont construits afin de modéliser la biolixiviation des métaux des résidus miniers. Le but de ces modèles est de prédire des taux de solubilisation de métaux ainsi que le pH de la solution résultante au jour  $t+28$  à partir des concentrations solides et liquides des métaux, du pH initial et du potentiel d'oxydoréduction (POR) du jour  $t$ .

Le premier réseau sert à prédire le pourcentage de solubilisation du soufre, le deuxième réseau à prédire le pourcentage de solubilisation du fer et le pH, et le troisième réseau à prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, du zinc ainsi que le pH de la solution résultante, le tout au temps  $t+28$ . On constate que cette approche donne de bons résultats pour la prédiction des paramètres à partir de leurs valeurs au temps  $t$ .

## TABLE DES MATIÈRES

1. INTRODUCTION .....	1
2. LES RÉSEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS .....	3
3. REVUE BIBLIOGRAPHIQUE.....	11
4. APPLICATION DES RNA À LA BIOLIXIVATION.....	19
5. RÉSULTATS.....	27
6. CONCLUSION .....	35
7. BIBLIOGRAPHIE.....	37

## LISTE DES FIGURES

Figure 2.1: Une neurone biologique (adaptée de Norvig et Russell, 1995).....	4
Figure 2.2: Élément processeur d'un RNA .....	5
Figure 2.3: Une architecture simple de réseau de neurones.....	6
Figure 2.4: Structure d'un réseau <i>feed-forward</i> à L couches .....	7
Figure 2.5: Les étapes d'apprentissage par propagation arrière d'erreur.....	10
Figure 4.1: RNA pour prédire le pourcentage de solubilisation du soufre .....	21
Figure 4.2: RNA pour prédire le pourcentage de solubilisation du fer.....	23
Figure 4.3: RNA pour prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre et du zinc.....	24
Figure 5.1: Les pourcentages de solubilisation du soufre calculés et observés, réseau 1 .....	28
Figure 5.2: Les pourcentages de solubilisation du fer calculés et observés, réseau 2 .....	28
Figure 5.3: Les pH calculés et observés, réseau 2 .....	29
Figure 5.4: Les pourcentages de solubilisation du cuivre calculés et observés, réseau 3 .....	31
Figure 5.5: Les pourcentages de solubilisation du fer calculés et observés, réseau 3 .....	31
Figure 5.6: Les pourcentages de solubilisation du soufre calculés et observés, réseau 3 .....	32
Figure 5.7: Les pourcentages de solubilisation du zinc calculés et observés, réseau 3 .....	32
Figure 5.8: Les taux de pH calculés et observés, réseau 3.....	33

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1: Facteurs de normalisation des variables au jour 0 .....	20
Tableau 4.2: Facteurs de normalisation des variables au jour 28 .....	20
Tableau 5.1: Les pourcentages de solubilisation observés et prédits du soufre au jour t+28.	27
Tableau 5.2: Les pourcentages de solubilisation du fer et le pH observés et prédits au jour t+28.....	29
Tableau 5.3: Les pH, POR, et pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, et du zinc observés et prédits au jour t+28 .....	30
Tableau 5.4: Les erreurs moyennes de prédiction .....	33

# 1. INTRODUCTION

---

La modélisation des processus biologiques et chimiques est difficile à cause de la complexité de ces processus et des nombreuses interactions entre les paramètres. Les outils traditionnels d'analyse sont souvent inadéquats, et des approches telles que les réseaux de neurones artificiels (RNA) peuvent s'avérer efficaces pour modéliser les relations entre les paramètres d'entrée d'un processus et ses paramètres de sortie. Les RNA offrent l'avantage, par rapport aux méthodes traditionnelles, d'apprendre des relations complexes sans nécessiter une connaissance de la structure du modèle. C'est une technique de modélisation de type "boîte noire".

Le but de ce travail est d'effectuer une revue bibliographique de l'application des réseaux de neurones artificiels à la modélisation des processus chimiques et biologiques et d'appliquer cette technique à la modélisation du processus de biolixiviation des métaux provenant de résidus miniers.

Nous commençons par décrire au chapitre 2 les RNA, une technique appartenant au domaine de l'intelligence artificielle. Un résumé des travaux ayant utilisé cette technique pour modéliser des processus chimiques et biologiques est présenté au chapitre 3. La méthodologie développée pour l'application des RNA à la biolixiviation des métaux dans les résidus miniers est présentée au chapitre 4. Trois modèles de RNA y sont construits pour des données réelles de solubilisation de métaux. Le but de ces modèles est de prédire des taux de solubilisation de métaux ainsi que le pH de la solution résultante au jour  $t+28$  à partir des concentrations solides et liquides des métaux, du pH initial et du potentiel d'oxydoréduction (POR) du jour  $t$ . Les résultats de ces applications sont présentés au chapitre 5, suivis de la conclusion au chapitre 6.



## **2. LES RÉSEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS**

---

Nous présentons dans ce chapitre une description des RNA basée sur l'article de Lippmann (1987). Les RNA constituent une approche très efficace à plusieurs problèmes. Leur plus grand potentiel demeure dans les domaines du traitement du langage et de l'image où des quantités massives d'information doivent être traitées. Les RNA peuvent être utilisés pour traduire des images en des mots clés, des données financières en prévisions financières, ou encore traduire des images visuelles en commandes robotiques. D'autres domaines d'application incluent le contrôle de processus, l'interprétation des senseurs, la modélisation dynamique, la robotique, et l'optimisation. Cette technologie peut aussi être utilisée pour l'estimation et la prédiction. Elle est surtout appropriée pour les problèmes qui impliquent l'extraction d'information de données complexes et incertaines.

La théorie des Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) existe depuis les années 1950 et relève du domaine de l'intelligence artificielle (Minsky, 1954). Les RNA offrent une architecture de calcul unique qui peut être utilisée pour adresser les problèmes intraitables ou trop lourds pour les méthodes traditionnelles. Ce sont des systèmes massivement parallèles caractérisés par des processeurs très simples et des arrangements denses des interconnexions. Les RNA offrent l'avantage par rapport aux méthodes traditionnelles d'apprendre des relations complexes sans nécessiter une connaissance de la structure du processus sous-jacent (boîte noire). L'avantage principal des ordinateurs neuroniques par rapport aux ordinateurs traditionnels est leur faible sensibilité aux défaillances (*fault-tolerance*) et ce, grâce à la redondance. Malheureusement, l'état actuel de la technologie ne permet pas d'avoir accès à de vrais ordinateurs neuroniques. L'implantation la plus courante des RNA est en logiciels de simulation qui peuvent être exécutés sur un ordinateur de Von Neumann classique. L'outil en est ainsi un de logiciel (*software*) et non d'équipement (*hardware*).

### **2.1 Description biologique**

Les travaux en neurobiologie ont inspiré les principes de base des RNA. Ces derniers tirent leur nom des réseaux de cellules nerveuses du cerveau et en retiennent la structure de base sans toutefois en préserver toute la complexité. Le cerveau humain est constitué de dizaines

de milliards de neurones hautement interconnectées. La neurone est l'unité cellulaire fondamentale du système nerveux et plus particulièrement du cerveau. Une description simplifiée d'une neurone biologique est présentée sur la figure 2.1.

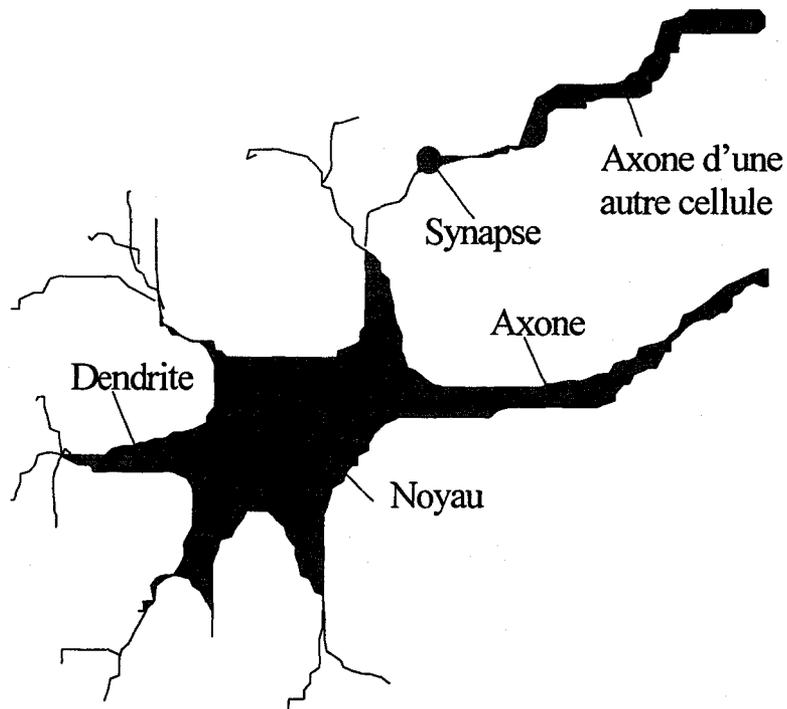


Figure 2.1: Une neurone biologique (adaptée de Norvig et Russell, 1995)

Chaque neurone est un élément processeur simple qui reçoit et combine des signaux de plusieurs autres neurones par des structures d'entrée appelées dendrites. Lorsque le signal combiné est assez fort, la neurone est stimulée afin qu'elle produise un signal de sortie le long d'une autre composante de la cellule, l'axone. L'axone (chemin de sortie) d'une neurone se divise et se connecte aux dendrites (chemins d'entrée) des autres neurones par des jonctions, les synapses. La transmission à travers la jonction est de nature chimique et la force du signal transféré dépend de la quantité des produits chimiques (neurotransmetteurs) relâchés par l'axone et reçu par les dendrites. L'efficacité synaptique (la force) est modifiée lorsque le cerveau apprend. La synapse, combinée avec le traitement d'information dans la neurone, forme le mécanisme de base de mémoire du cerveau.

## 2.2 L'élément processeur

Dans un RNA, l'unité analogue à la neurone biologique est l'élément processeur. La figure 2.2 présente un élément processeur typique de la structure de base d'un RNA.

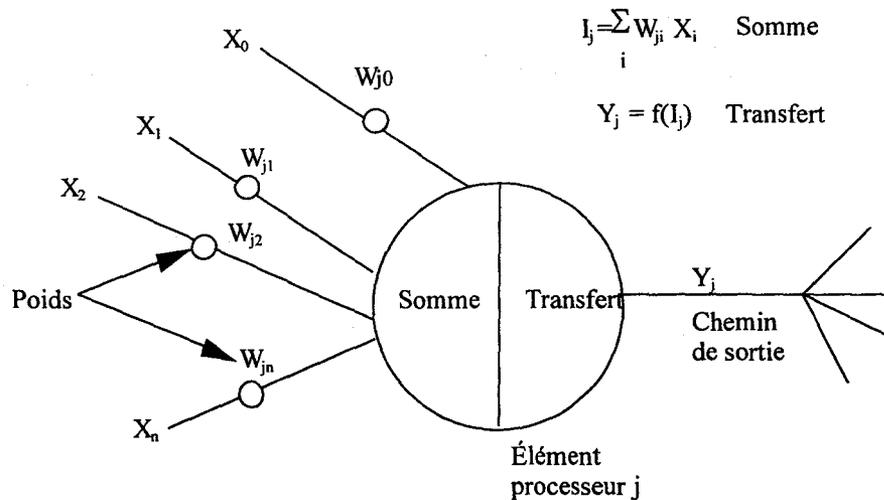


Figure 2.2: Élément processeur d'un RNA

Un élément processeur  $j$  a plusieurs chemins d'entrée (dendrites) et combine, habituellement par une sommation simple, les valeurs,  $X_i$ , de ces entrées qui proviennent d'un autre élément processeur  $i$ ,  $i=1..n$ . Une force de connection est associée à chaque interconnection, dénotée par  $W_{j1}, W_{j2}, \dots, W_{jn}$ . L'élément processeur effectue une somme pondérée sur les  $X_i$  afin d'atteindre le niveau d'activité  $I_j$ . Une fonction de transfert non linéaire  $f$ , est ensuite utilisée pour calculer la donnée de sortie  $Y_j$ . Le résultat  $Y_j = \sum_{i=1}^n W_{ij} X_i$  est envoyé le long des connections de sortie aux cellules cibles à droite. Ce modèle simplifié d'une neurone n'est pas en soi intéressant, les effets intéressants résultent de la façon dont les neurones sont connectées.

## 2.3 L'architecture d'un RNA

L'architecture des réseaux de neurones est très différente de celle des ordinateurs traditionnels de Von Neumann qui ont un CPU (Unité de Processeur Centrale) unique

effectuant tous les calculs d'une façon séquentielle. Un CPU typique est capable d'une centaine ou plus de commandes de base, incluant l'addition, la soustraction, la translation etc. Ces commandes sont exécutées une à la fois, à des pas de temps consécutifs d'une horloge. En contraste, un élément processeur des RNA peut effectuer un, ou tout au plus, quelques calculs simples. Toutefois, la combinaison en réseau de plusieurs de ces structures simples permet d'accomplir des tâches complexes. La puissance d'un RNA est mesurée par le nombre de mises à jours des interconnexions par seconde; en contraste, les performances des machines Von Neuman sont mesurées par le nombre d'instructions exécutées par seconde, séquentiellement par un processeur unique.

Les architectures des RNA diffèrent aussi des architectures parallèles typiques. Premièrement, les processeurs d'un RNA sont massivement interconnectés, ce qui fait que le nombre d'interconnexions excède de très loin le nombre de processeurs, à l'inverse des architectures parallèles typiques. De plus, ces dernières ont tendance à incorporer des processeurs dont la complexité est comparable à ceux des machines Von Neumann, tandis que les RNA incorporent des éléments processeurs beaucoup plus simples.

Un RNA typique consiste en une série de couches successives connectées composées d'éléments processeurs, tel que présenté sur la figure 2.3.

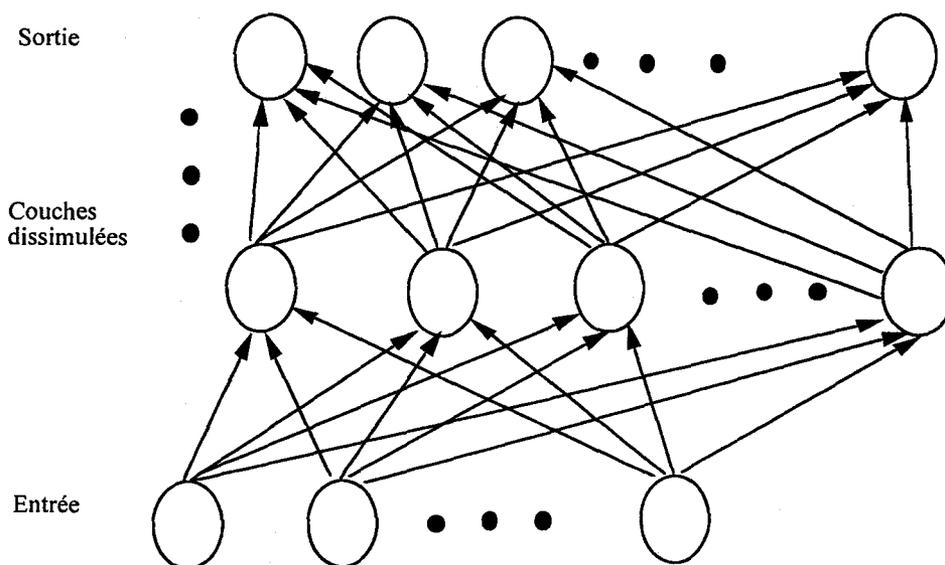


Figure 2.3: Une architecture simple de réseau de neurones

On retrouve typiquement deux couches reliées au monde extérieur: une couche d'entrée qui reçoit des données de l'extérieur et une couche de sortie qui communique de l'information à l'extérieur. Les couches intermédiaires sont les couches dissimulées. Chaque interconnection agit comme un chemin de communication. Des valeurs numériques sont passées le long des ces interconnexions d'un élément à un autre. Ces valeurs sont pondérées par les forces de connection  $W_{jn}$  qui leurs sont associées.

## 2.4 Le réseau feed-forward

La forme la plus simple du réseau, est le réseau *feed-forward* où l'information est passée vers l'avant, de la couche d'entrée à travers les couches dissimulées vers la couche de sortie en utilisant des fonctions de sommation et de transfert. Chaque couche peut contenir un élément de biais qui peut être interprété comme le poids associé à une neurone constante unitaire de la couche précédente. La figure 2.4 illustre ce type d'architecture.

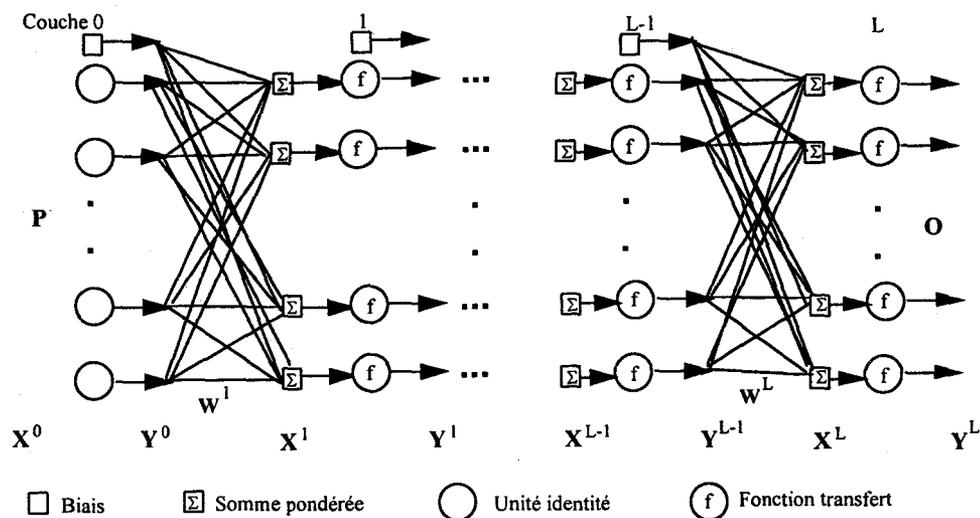


Figure 2.4: Structure d'un réseau *feed-forward* à L couches

Ce réseau peut être représenté mathématiquement par les équations suivantes:

$$X^s = W^s Y^s + w^s \quad (2.1)$$

$$Y^s = \Omega^s (X^s) \quad (2.2)$$

où  $w^s$  est le biais,  $X^s$  est le vecteur d'entrée,  $Y^s$  est le vecteur de la sortie, et  $W^s$  est la matrice des poids de la couche  $s$ . On pose  $X^0 = P$ ,  $Y^L = O$ ,  $P$  étant le vecteur d'entrée au réseau, et  $O$  le vecteur de sortie correspondant. De plus,  $\Omega^s$  et  $W^s$  sont définis par:

$$W^s = \begin{bmatrix} w_{1,1}^s & w_{1,2}^s & \cdot & \cdot & w_{1,N_{s-1}}^s \\ w_{2,1}^s & w_{2,2}^s & \cdot & \cdot & w_{2,N_{s-1}}^s \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ w_{N_s,1}^s & w_{N_s,2}^s & \cdot & \cdot & w_{N_s,N_{s-1}}^s \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$\Omega^s = \left( f(X_1), f(X_2), \dots, f(X_{N_s}) \right)^T$$

Le processus de construction d'un réseau de neurones est complexe. Afin de résoudre un problème particulier, on doit choisir une architecture de réseau bien adaptée au problème, et un processus d'apprentissage par lequel des exemples représentatifs de la connaissance à acquérir sont montrés au réseau qui s'auto-organise en conséquence.

## 2.5 L'apprentissage d'un RNA

Les RNA ne sont pas programmés, ils apprennent par l'exemple. Typiquement, on présente à un RNA un ensemble d'apprentissage qui consiste en un groupe d'exemples desquels le réseau apprendra. Ces exemples, connus comme patrons d'apprentissage sont représentés par des vecteurs. Les scénarios d'apprentissage les plus communs consistent en la présentation au réseau d'un patron d'entrée et de son patron de sortie correspondant. En réponse à cela, le réseau ajuste ses poids d'interconnection. Si l'apprentissage réussit, les paramètres internes  $W_{ji}$  sont ajustés de façon à ce que le réseau produise des réponses correctes à chacun des patrons d'entrée. Normalement, le processus d'apprentissage implique la présentation au réseau d'ensembles d'exemples plusieurs milliers de fois. Parce qu'ils apprennent à l'aide d'exemples, les RNA ont le potentiel de bâtir des systèmes de calcul qui ne nécessitent pas de programmation. Ceci reflète une approche radicalement différente des méthodes traditionnelles de développement de programmes informatiques.

L'algorithme d'apprentissage le plus utilisé est celui de propagation arrière d'erreur (Bryson et Ho, 1969) dans lequel une fonction quadratique de coût est minimisée par un algorithme

de descente du gradient. Comme son nom l'indique, l'algorithme est une redistribution, par la modification des matrices de poids  $W^s$ , des erreurs sur les vecteurs de sortie calculés.

### 2.5.1 L'algorithme d'apprentissage par propagation arrière d'erreur

L'algorithme d'apprentissage par propagation arrière d'erreur (*backward error propagation*) typique a toujours une couche d'entrée, une couche de sortie et au moins une couche dissimulée. Théoriquement, il n'y a pas de limite au nombre de couches dissimulées, mais en pratique on se limite à une ou deux couches. Chaque couche est complètement connectée à la suivante. Les flèches indiquent le flux d'information pendant le rappel. Pendant l'apprentissage, l'information est aussi propagée vers l'arrière et utilisée pour mettre à jour les  $W_{ji}$ .

Étant donné un vecteur d'entrée  $P$  et un vecteur de sortie  $D$  correspondant, appartenant à l'ensemble d'apprentissage, le but du processus d'apprentissage est de minimiser l'erreur globale  $E$  du système en modifiant ses poids.

On utilise la notation suivante:  $Y_j^{[s]}$  est l'état actuel de sortie de la neurone  $j$  de la couche  $s$ ,  $W_{ji}^{[s]}$  est le poids sur la connection reliant la  $i^{\text{ème}}$  neurone dans la couche  $s-1$  à la  $j^{\text{ème}}$  neurone de la couche  $s$ , et  $X_j^{[s]}$  est la somme pondérée des entrées à la neurone  $j$  de la couche  $s$ . Un élément transfère ses entrées de la façon suivante:

$$Y_j^{[s]} = f\left(\sum_i (W_{ji}^{[s]} Y_i^{[s-1]})\right) = f(X_j^{[s]}) \quad (2.4)$$

où  $f$  est traditionnellement la fonction sigmoïde définie par:

$$f(z) = \frac{1}{1.0 + e^{-z}} \quad (2.5)$$

Étant donné un ensemble de poids  $W_{ji}^{[s]}$ , on doit déterminer comment augmenter ou diminuer ces poids afin de minimiser l'erreur globale  $E$ :

$$E = 0.5 * \sum_k (D_k - O_k)^2 \quad (2.6)$$

où  $O$  est le vecteur de sortie calculé, et  $D$  est le vecteur de sortie réel correspondant au vecteur d'entrée d'apprentissage  $P$ .  $k$  est l'indice des éléments de  $D$  et  $O$  pour une paire  $(P,D)$  en particulier. La figure 2.5 présente Les étapes d'apprentissage par propagation arrière d'erreur.

1. Présenter  $P$  à la couche d'entrée et le propager dans le réseau afin d'obtenir  $O$ . Pendant cette propagation,  $X_j$  et  $Y_j$  sont calculés pour chaque élément processeur.
2. Pour chaque élément de la couche de sortie, calculer l'erreur locale pondérée et le poids delta. L'erreur locale lorsque  $f$  est une sigmoïde est:
 
$$e_j^{[s]} = Y_j^{[s]} * (1.0 - Y_j^{[s]}) * \sum_k (e_k^{[s+1]} * W_{kj}^{[s+1]})$$
 où le poids delta est:  $\Delta W_{ji}^{[s]} = \text{lcoef} * e_j^{[s]} * Y_i^{[s-1]}$   
 et  $\text{lcoef}$  est un coefficient d'apprentissage;
3. Pour chaque couche  $s$  à partir de celle de sortie et pour chaque élément  $j$  de la couche  $s$  calculer l'erreur locale  $e_j^{[s]}$  et le poids delta  $\Delta W_{ji}^{[s]}$ .
4. Mettre à jour tous les poids du réseau en additionnant les poids delta aux poids ultérieurs correspondants.
5. Retourner à l'étape 1 et itérer jusqu'à convergence, c'est à dire jusqu'à ce que l'erreur globale soit assez faible ou que le nombre d'itérations maximum fixé soit atteint.

Figure 2.5: Les étapes d'apprentissage par propagation arrière d'erreur

### 3. REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

---

Les applications des RNA à la modélisation des processus chimiques et biologiques en général, et aux processus reliés à l'assainissement en particulier sont peu nombreuses et récentes. Nous présentons dans ce qui suit celles que nous avons trouvées lors de notre recherche bibliographique.

Hoskins et Himmelblau (1988) ont appliqué les RNA à la représentation de la connaissance reliée à des processus de génie chimique. Ils souhaitaient utiliser l'information disponible au temps  $t$  concernant l'état d'un processus afin de déterminer des décisions futures. En particulier, les auteurs ont appliqué les RNA à la détection d'erreur et formulation de diagnostics reliés aux opérations de trois réacteurs à mélange parfait (CSTR) en série. Six variables d'état sont utilisées comme indicateurs d'un problème potentiel: la température, et les concentrations de deux composés A et B à l'entrée du CSTR 1 et à la sortie du CSTR 3. Le but est d'associer un type de défaillance à un patron de données mesurées; c'est-à-dire, étant données des mesures des six variables, peut-on dire qu'il y a eu une défaillance correspondant à un des six types de défaillance possibles, et si oui, lequel? Le réseau utilisé contient trois couches: une couche d'entrée contenant six noeuds (un noeud par variable d'état), une couche dissimulée contenant trois noeuds, et une couche de sortie contenant six noeuds (un noeud par type de défaillance). La fonction de transfert est une sigmoïde. Un type de défaillance est reconnu comme ayant eu lieu lorsque la valeur de sortie au noeud correspondant est 1 (dans le cas contraire, cette valeur est 0). Douze patrons d'entrée et de sortie ont été présentés au réseau pour son apprentissage, incluant un patron de fonctionnement normal. Après entraînement, le réseau réussit à identifier correctement le type de défaillance 100% du temps même pour des patrons d'entrée qui n'étaient pas inclus dans son ensemble d'apprentissage.

Thibault *et al.* (1990) ont utilisé les RNA pour prédire des variables clés de fermentation qui sont très difficiles à obtenir et à contrôler faute d'équipements de mesure en temps réel fiables, et dû à la difficulté de modéliser l'activité microbienne de processus non linéaires et non stationnaires. Plus précisément, les RNA sont utilisés pour prédire des concentrations de biomasse et de substrat d'un fermenteur à agitation continue (CSTF). Les auteurs ont fait l'hypothèse que le volume du CSTF demeure constant et que la cinétique de croissance de la

biomasse est décrite par un modèle Haldane d'inhibition de substrat. 80 paires de vecteurs d'entrée et de sortie obtenus par simulation et par la résolution d'un système d'équations différentielles par les différences finies, sont utilisés afin d'entraîner le RNA et vérifier sa performance. Le but est d'obtenir des relations pour prédire la concentration des cellules (biomasse) et du substrat au temps  $t+1$ , étant donné le taux de dilution, les concentrations de cellules et de substrat au temps  $t$ . Un réseau à trois noeuds d'entrée, deux noeuds de sortie et trois noeuds dans la couche dissimulée, utilisant la fonction sigmoïde, et l'algorithme de propagation arrière est construit. 35 paires de vecteurs et 5000 itérations sont utilisées pour entraîner le réseau. Par la suite, des prédictions effectuées pour 80 vecteurs d'entrée sont comparées aux prédictions obtenues par le filtre de Kalman (une approche de modélisation différente). On en conclut que les RNA constituent une approche simple et efficace fournissant des résultats comparables à une approche traditionnelle plus complexe de prédiction, telle le filtre de Kalman.

Baba *et al.* (1990) ont utilisé les RNA pour déterminer le taux optimal de coagulant à injecter lors des opérations d'assainissement d'eaux usées, et ce en fonction de la qualité des eaux usées affluentes et des images de monitoring du floc. En entrée au réseau, on retrouve de l'information concernant la qualité et les propriétés du floc, et à la sortie, le taux d'injection du coagulant. 30 paramètres sont présentés à l'entrée: la turbidité, la température de l'eau, l'alcalinité, le pH, le débit, le diamètre du floc, le nombre de floc, le volume du floc, la densité du floc, l'intensité d'illumination du floc, et ce au temps présent  $t$ , au temps  $t-x$  heures, ainsi que la différence de ces dix paramètres aux deux temps ( $t$  et  $t-x$  heures). Le RNA a trois couches, la couche de sortie a une neurone, le taux d'injection de coagulant. La couche dissimulée est composée de dix neurones. Deux réseaux ont été construits: un pour des conditions normales et un pour des conditions anormales. Dix vecteurs de données correspondants à dix jours différents sont utilisés pour entraîner les réseaux. Après apprentissage, le réseau permet de prédire des taux optimaux d'injection de coagulant pour une période d'un an. Une comparaison de ces résultats avec des taux générés par une méthode de régression multivariée et des taux réels injectés basés sur le jugement de l'opérateur, révèlent que la technique des RNA fournit de bon résultats.

Su *et al.* (1992) ont appliqué les RNA à la modélisation des opérations d'une usine pilote de traitement biologique des eaux usées municipales desquelles les grosses particules, les sables

et les huiles ont été enlevées. Le débit de l'affluent était de 60 l/h. Le processus d'enlèvement biologique du phosphore, de l'azote et des matières organiques a normalement lieu dans trois unités de traitement: une colonne de prétraitement (200 l), deux bassins d'aération (800 l) et un bassin de décantation (1100 l). Les données d'entrée au RNA sont les concentrations de  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ , et  $\text{PO}_4^{3-}$  dans l'affluent et les taux de consommation d'oxygène dans les deux bassins d'aération (cinq variables). Les données de sortie sont les concentrations de  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ , et  $\text{PO}_4^{3-}$  pour les trois unités de traitements (neuf variables). Le but est de prédire les données de sortie à court et à long terme. Trois RNA sont construits, un pour chaque unité de traitement, avec une couche dissimulée et un nombre de noeuds dissimulés variant entre cinq et six. 600 vecteurs sont utilisés pour entraîner les réseaux et 300 vecteurs pour les valider. Deux architectures de réseau (*feed-forward* et *recurrent*) sont comparés et la conclusion est que les réseaux *feed-forward* sont meilleurs pour la prédiction à court terme, tandis que les réseaux *recurrent* sont meilleurs pour les prédictions à long terme.

Novotny *et al.* (1991) ont utilisé les RNA pour analyser les niveaux de microorganismes dans les boues activées de l'usine de traitement *Jones Island* à Milwaukee, Wisconsin. Les données d'entrée au RNA incluaient les paramètres typiques de l'affluent tels que la DBO, le phosphore, le TKN (Azote total Kjeldahl), ainsi que des paramètres d'opération incluant la température, le rapport nourriture/microorganismes, la concentration d'oxygène dissous dans les unités d'aération et l'âge de la boue. Les données de sortie (prédites) du RNA sont le nombre de microorganismes appartenant à trois groupes différents.

Capodaglio *et al.* (1991) ont utilisé les RNA pour analyser le phénomène de *bulking* qui joue un rôle très important dans l'efficacité du traitement par boues activées, car il est souvent responsable des défaillances (effluent ne rencontrant pas les normes). Le *bulking* correspond à une boue qui sédimente lentement et qui ne se compacte pas d'où un volume de surnageant très réduit (Roques, 1980). Ce phénomène est dû à la croissance excessive d'organismes filamenteux dans le bioréacteur qui peut être promue par plusieurs facteurs, paramètres et conditions tels que les niveaux élevés ou faibles d'oxygène dissous, le rapport nourriture/microorganismes, un pH bas, l'âge de la boue et la température. La configuration du réacteur peut aussi influencer la formation des organismes filamenteux. Le *bulking* peut aussi correspondre à une boue visqueuse causée par les organismes qui forment du floc.

L'état actuel des connaissances ne permet pas d'établir une relation de cause à effet déterministe qui permettrait de prédire la formation du *bulking*. Or, il est important de prédire en temps réel, et d'une façon assez précise le potentiel de sa formation. Les auteurs ont représenté les conditions de *bulking* par un indice de volume spécifique de boues SVI (ml/g) qui doit être prédit à partir de certains paramètres d'entrée. Le RNA utilisé a 25 paramètres d'entrée et une valeur de sortie. Le vecteur d'entrée comprend les rapports DBO/azote, azote/phosphore, l'oxygène dissous, la température, le rapport nourriture/microorganismes sur cinq jours consécutifs. Le paramètre de sortie est le SVI prédit pour le sixième jour. Quatre ensembles d'apprentissage contenant respectivement trois, sept, dix, et quatorze patrons d'entrées différents ont été utilisés. Il s'avère que trois patrons semblent suffisants pour entraîner adéquatement ce réseau particulier, ce qui nous semble surprenant. Les valeurs des SVI sont prédites (une journée plus tard) pour 20 jours et comparées avec les résultats obtenus par d'autres méthodes et avec des données observées. Il apparaît que l'approche des RNA permet de prédire correctement le SVI.

Boger (1992) a appliqué les RNA pour modéliser les opérations dans une usine de traitement des eaux usées.

Couillard et Zhu (1992) ont utilisé les RNA pour la modélisation cinétique de la lixiviation bactérienne des métaux lourds des boues d'égoûts provenant d'un CSTR et d'un *Air Lift Reactor* (ALR). La modélisation de ce phénomène est complexe dû à la difficulté de déterminer la population des bactéries acidophiles et la concentration du substrat. Le principe sous-jacent est que les activités des bactéries diminuent le pH et augmentent le potentiel d'oxydoréduction (POR) du système solubilisant ainsi que les composés métalliques autrement insolubles. Les auteurs ont modélisé la solubilisation du cuivre et du zinc par un RNA. Le vecteur d'entrée est constitué du pH, du POR, des concentrations du métal (cuivre ou zinc) en phase liquide et en phase solide (mg/l) (quatre variables), et la donnée de sortie est le taux de solubilisation du métal (cuivre ou zinc). 75 vecteurs de données (entrée et sortie) obtenus suite à une expérience effectuée à 30 degrés C dans un CSTR de 30 l et un ALR de 30 l utilisant une culture de *Thiobacillus ferro-oxidans*, sont utilisés pour entraîner le réseau qui a quatre couches dissimulées. Huit ensembles de données de validation montrent que le RNA fonctionne bien pour prédire les taux de

solubilisation en fonction des paramètres d'entrée dépendants, sauf dans le cas où le taux de solubilisation est élevé.

Tyagi et Du (1992a) ont appliqué les RNA pour modéliser la cinétique d'inhibition de la croissance microbienne par les métaux lourds. Le but est de prédire le taux de croissance spécifique maximal correspondant à différentes combinaisons de concentrations de métaux lourds présents dans les eaux usées. Bien que le mécanisme d'inhibition par les métaux lourds dans les boues activées ne soit pas très clair, l'expérimentation indique que la toxicité pour la croissance microbienne dépend non seulement du type de métal, mais aussi de sa concentration, de l'espèce de microorganisme, de la concentration des solides suspendus et de l'âge de la boue. Trois réseaux utilisant l'algorithme d'apprentissage de propagation arrière et la fonction sigmoïde sont construits: le premier modèle se rapporte aux effets du plomb, du chrome, du zinc et du nickel ainsi que leur mélange sur la croissance des microorganismes dans une boue non-acclimatée, les deuxième et troisième modèles correspondent aux effets du nickel, du chrome et de la demande chimique en oxygène (DCO) sur la croissance dans une boue non-acclimatée, et dans une boue acclimatée respectivement. Dans le premier cas, le RNA utilisé a deux couches dissimulées, à cinq et trois neurones respectivement, le vecteur d'entrée a cinq éléments correspondant aux rapports ( $M/X_0$ ) des concentrations  $M$  (ppm) du plomb, du chrome, du zinc, du nickel et de leur mélange, aux concentrations initiales des solides suspendus  $X_0$  (ppm), ainsi qu'un biais. L'élément de sortie  $\mu_m/\mu_{m0}$  est le rapport du taux de croissance spécifique maximum à une concentration du métal  $\mu_m$  ( $h^{-1}$ ) au taux de croissance spécifique maximum à une concentration zéro du métal  $\mu_{m0}$  ( $h^{-1}$ ). L'ensemble d'apprentissage comprend quatre vecteurs reliés au plomb, quatre vecteurs reliés au chrome, six vecteurs reliés au zinc, cinq reliés au nickel et cinq reliés au mélange. Deux vecteurs additionnels sont utilisés pour la validation du modèle. 4630 itérations sont effectuées pour entraîner le réseau. Dans les deuxième et troisième cas, la couche d'entrée contient quatre noeuds correspondant aux concentrations de nickel, de chrome et la DCO (mg/l), ainsi que le biais; la couche de sortie contient deux noeuds correspondant au taux maximum de croissance spécifique  $\mu_m$  ( $h^{-1}$ ) à une concentration  $m$  des métaux, et au coefficient de croissance  $Y$  ( $mg\ mg^{-1}$ ) (la fraction de substrat consommée pour produire la liqueur mixte des solides suspendus). Le deuxième réseau a quatre couches dont deux dissimulées de quinze neurones chacune. 2017 itérations furent exécutées pour entraîner ce réseau à l'aide de 27 vecteurs d'apprentissage. Le

troisième réseau a deux couches dissimulées de quatorze et douze noeuds respectivement, et 24 vecteurs sont utilisés pour l'entraînement. Dans tous les cas, la conclusion est que les RNA sont appropriés pour décrire des patrons de cinétique complexes, et qu'en comparaison avec les méthodes traditionnelles, les RNA semblent plus précis et plus robustes.

Tyagi *et al.* (1993) et Tyagi et Du (1992b) ont utilisé les RNA pour modéliser le processus de boues activées afin de déterminer la relation entre les concentrations de substrat dans l'aérateur  $s$  ( $\text{g.m}^{-3}$ ), de substrat dans l'affluent  $s_i$  ( $\text{g.m}^{-3}$ ), et le rapport du débit affluent  $\text{m}^3.\text{h}^{-1}$  à l'aire transversale du décanteur  $F/A$  ( $\text{m}^2$ ) d'un côté, et les valeurs souhaitables du taux de recyclage des boues  $\alpha$ , et le débit de rejet des boues  $F_w$  ( $\text{m}^3.\text{h}^{-1}$ ) d'un autre côté. Il est important de prédire ces deux paramètres surtout lorsque le débit affluent et/ou la concentration en substrat de l'affluent varient, car il faut alors contrôler les taux de recyclage et/ou le débit de rejet de boues afin d'éviter la détérioration du processus et la défaillance. Le RNA utilisé a trois couches, dont une dissimulée de deux neurones. La couche d'entrée contient trois noeuds:  $s$ ,  $F/A$  et  $s_i$  et la couche de sortie contient deux noeuds,  $\alpha$  et  $F_w$ . Les neuf vecteurs de données utilisés pour entraîner ce réseau et les douze vecteurs de validation sont obtenus par simulation basée sur l'opération en état permanent du processus de boues activées. Un deuxième RNA contenant une couche dissimulée de quatorze noeuds est construit dans le but de modéliser l'opération du décanteur secondaire et de prédire les concentrations de biomasse dans l'aérateur  $x$  ( $\text{g.m}^{-3}$ ) et dans les boues de rejet et de recyclage  $x_r$  ( $\text{g.m}^{-3}$ ) à partir des mesures de  $\alpha$  et de la vitesse de *overflow* du clarifié  $U_0$  ( $\text{m.h}^{-1}$ ). On en conclut qu'il est possible de modéliser à l'aide d'un RNA les relations complexes nonlinéaires et multivariées inhérentes aux processus de boues activées même avec un nombre limité de données. De plus, lorsque comparée avec un modèle polynomial, l'approche des RNA est plus performante en terme de précision des prédictions.

Tyagi *et al.* (1994) ont appliqué les RNA pour modéliser le comportement cinétique de croissance bactérienne dans les processus de traitement des eaux usées. Trois modèles de complexité variable sont utilisés: le premier est relié au coefficient de consommation de substrat pour les besoins de la maintenance des cellules dans une culture continue  $q$  ( $\text{h}^{-1}$ ), le deuxième est relié à la cinétique d'inhibition de croissance par le cuivre, et le troisième est relié à la prédiction de comportement cinétique transitoire. Le premier réseau consiste à prédire  $q$  à partir du taux de dilution  $D$  ( $\text{h}^{-1}$ ) et de la concentration de substrat affluent  $s_i$  ( $\text{mg}$

$l^{-1}$ ). Le deuxième réseau consiste à prédire  $\mu_m/\mu_{m0}$  à partir de  $M/X_0$  selon trois patrons d'inhibition différents, où  $\mu_m$  et  $\mu_{m0}$  ( $h^{-1}$ ) sont respectivement les taux spécifique maximal de croissance pour une concentration de métal  $m$  et une concentration  $0$ .  $M$  est la concentration du métal (ppm), et  $X_0$  ( $mg.l^{-1}$ ) est la concentration initiale des matières en suspension (MES). Le troisième réseau consiste à prédire  $\mu_\tau$  à partir de  $s_{\tau-1}$ ,  $s_\tau$ ,  $\mu_{\tau-2}$ , et  $\mu_{\tau-1}$  où  $\mu_\tau$  est le taux de croissance spécifique maximal au temps  $\tau$  ( $h^{-1}$ ) et  $s_\tau$  est la concentration du substrat au temps  $\tau$ , ( $mg.l^{-1}$ ). Dans le premier cas, quatorze vecteurs sont utilisés pour l'apprentissage et deux vecteurs additionnels pour la validation. Le réseau contient douze noeuds dans la couche dissimulée. 3200 itérations d'apprentissage furent exécutées. Dans le deuxième cas, on retrouve dix noeuds dans la couche dissimulée et 4500 itérations à l'aide de 5 à 6 vecteurs d'apprentissage sont effectuées. Dans le troisième cas, le réseau a douze noeuds dans la couche dissimulée. 33 vecteurs d'apprentissage et 4126 itérations sont effectuées. Dans les trois cas, les RNA se comparent avantageusement à d'autres méthodes de prédiction.



## 4. APPLICATION DES RNA À LA BIOLIXIVATION

---

Dans ce chapitre, nous appliquons les RNA à la modélisation du processus de biolixiviation de métaux provenant de résidus miniers.

Certaines bactéries sont capables d'extraire des éléments métalliques en les faisant passer en solution; ce phénomène d'extraction dans l'eau est la lixiviation bactérienne. Un rôle fondamental est joué par des bactéries chimiolithotrophes du genre *Thiobacillus*. Dans le processus de lixiviation, les thiobacilles attaquent à l'aide de leurs enzymes les composés minéraux du soufre (sulfures, soufre élémentaire, thiosulfate) qu'elles oxydent en acide sulfurique; il y a alors transfert des électrons du soufre sur l'oxygène. Les bactéries les plus utilisées pour la lixiviation sont les *Thiobacillus thiooxidans* et les *Thiobacillus ferrooxidans* qui vivent en milieu acide. L'acidité rend les processus de lixiviation plus efficaces car les métaux y restent plus facilement en solution. Ainsi les *Thiobacillus ferrooxidans* oxydent les composés inorganiques du soufre en acide sulfurique et le fer ferreux en fer ferrique, produisant ainsi un acide fort (acide sulfurique) et un oxydant puissant (sulfate ferrique) (Berthelin, 1987).

Le substrat utilisé dans ce travail est composé principalement de cuivre, de fer, de soufre et de zinc. Le volume total de l'essai est de 100 ml, le milieu nutritif est 9k sans fer (40 ml), l'inoculum est constitué de souches (60 ml) et la quantité de substrat est de 20 g. Le but de la modélisation par les RNA est de prédire des pourcentages de solubilisation de métaux et le pH de la solution résultante après 28 jours. Les données d'entrée sont le POR, le pH et la concentration initiale du métal (mg/l) et les données de sortie sont le pH et le pourcentage de solubilisation après 28 jours. Les données disponibles sont le pH, le POR, les concentrations solides et liquides du cuivre, du fer, du soufre et du zinc au jour 0 (dix variables), ainsi que les pourcentages de solubilisation des métaux et le pH aux jours 7, 14, 21 et 28. Les données aux jours 7, 14, 21 ne peuvent pas être utilisées car les pourcentages de solubilisation mesurés sont souvent négatifs. Nous utiliserons donc les données au jour 28. Le logiciel utilisé est DARTNET pour MACINTOSH, un logiciel du domaine public.

Les pourcentages de solubilisation calculés d'après les données en laboratoire sont corrigés en les ramenant à 100 lorsqu'ils sont supérieurs à 100, et à 0 lorsqu'ils sont inférieurs à 0.

Toutes les données utilisées sont normalisées linéairement afin d'amener leurs valeurs entre 0 et 1. Les facteurs de normalisation sont présentés dans les tableaux 4.1 et 4.2. 24 vecteurs d'entrée et de sortie sont disponibles. Trois réseaux différents sont construits: le premier sert à prédire le pourcentage de solubilisation du soufre, le deuxième à prédire le pourcentage de solubilisation du fer et le pH de la solution résultante, et le troisième à prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, du zinc et le pH de la solution résultante, le tout au jour 28.

Facteurs de normalisation au jour 0									
pH	POR	Cu liq.	Cu sol.	Fe liq.	Fe sol.	S liq.	S sol.	Zn liq.	Zn sol.
2.57	496	9745	43342	14360	60801	37785	70946	61550	15170

Tableau 4.1: Facteurs de normalisation des variables au jour 0

Facteurs de normalisation au jour 28				
pH	% solubilisation Cu	% solubilisation Fe	% solubilisation S	% solubilisation Zn
3.2	100	70.8	100	100

Tableau 4.2: Facteurs de normalisation des variables au jour 28

Plusieurs choix sont à faire lors de la conception d'un réseau de neurones pour une application particulière. Premièrement, les variables d'entrée et de sortie du réseau doivent être déterminées. Ensuite, la topologie interne et la dimension du réseau doivent être choisies. Le nombre d'éléments processeurs et d'interconnexions doit être spécifié. Le choix du paradigme de l'activité dynamique du réseau doit aussi être effectué. Ensuite, des paramètres internes tels que le taux d'apprentissage doivent être fixés. Finalement, l'ensemble d'apprentissage doit être sélectionné. Dans le cas de la prévision, une couche dissimulée suffit généralement, car l'addition de couches supplémentaires complique l'apprentissage.

Les réseaux de neurones construits dans ce travail pour les trois problèmes de modélisation sont de type *feed-forward*, utilisent la fonction sigmoïde, ont trois couches d'éléments processeurs, une organisation typique pour le paradigme d'apprentissage de propagation arrière d'erreur. L'ensemble d'apprentissage des premier et deuxième réseaux comprend 20

vecteurs, et l'ensemble de validation quatre vecteurs. Pour ce qui est du troisième réseau, l'ensemble d'apprentissage contient 19 vecteurs et celui de validation 5 vecteurs.

*Premier réseau: solubilisation du soufre*

Le premier réseau est construit pour prédire les pourcentages de solubilisation du soufre au jour 28, les données d'entrée étant le pH, le POR, les concentrations de soufre solide et liquide au jour 0 (mg/l), tel que présenté sur la figure 4.1. Ce réseau contient trois couches, une couche d'entrée à quatre noeuds et un biais, une couche dissimulée à cinq noeuds et un biais et une couche de sortie à un noeud. 14579 itérations ont été effectuées pour entraîner le réseau.

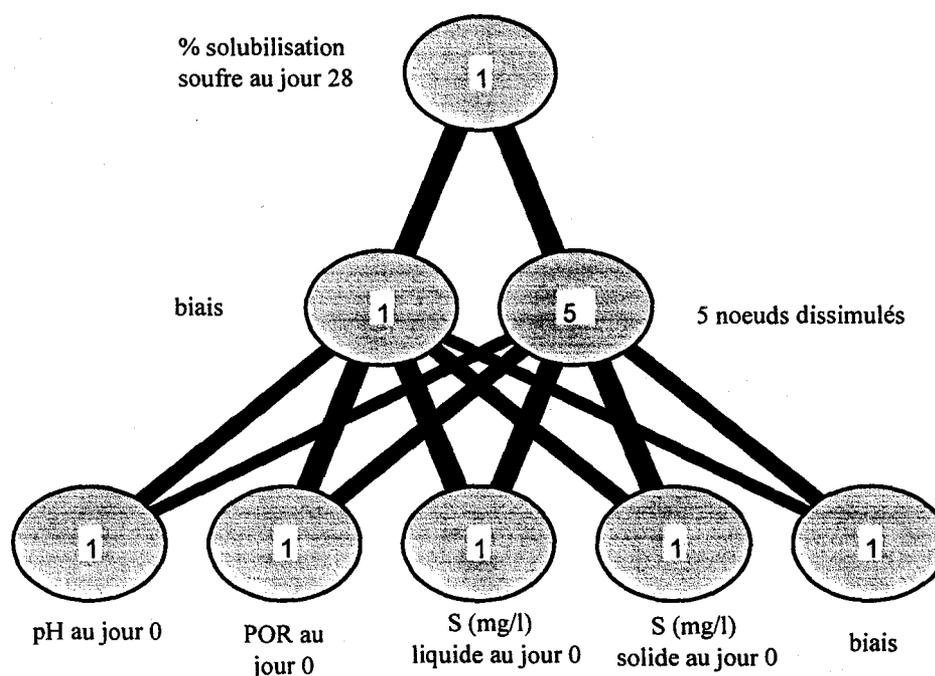


Figure 4.1: RNA pour prédire le pourcentage de solubilisation du soufre

Les équations mathématiques décrivant le réseau résultant sont les suivantes:

$$\begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -9.7 & 3.7 & -1.2 & 8.5 \\ -2.4 & -1.7 & -1.6 & 2.2 \\ 1.5 & -3.7 & 8.2 & 19.9 \\ -8.6 & 3.1 & 3.6 & 3.6 \\ 10.4 & -5.0 & -11.5 & -5.3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_0^0 \\ X_1^0 \\ X_2^0 \\ X_3^0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -3.5 \\ -2.5 \\ -11.7 \\ -1.1 \\ 3.1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} = f \begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$X_0^2 = \begin{bmatrix} 8.4 & 3.1 & -8.5 & 8.0 & 6.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} - 0.34$$

$$Y_0^2 = f(X_0^2)$$

Pourcentage de solubilisation du soufre au jour 28 =  $Y_0^2 \times \text{facteursoufre}$

où  $f(z)$  est la fonction sigmoïde et le vecteur d'entrée  $X^0$  correspond au pH, POR, et concentrations de soufre au jour 0, divisés par les facteurs de normalisation correspondants au jour 0.

#### Deuxième réseau: solubilisation du fer

Le deuxième réseau est construit pour la prédiction du pourcentage de solubilisation du fer au jour 28 et le pH de la solution résultante, les données d'entrée étant le pH, le POR, les concentrations de fer solide et liquide au jour 0 (mg/L), tel que présenté sur la figure 4.2. Ce réseau contient trois couches, une couche d'entrée à quatre noeuds et un biais, une couche dissimulée à cinq noeuds et un biais, et une couche de sortie à deux noeuds. 9477 itérations ont été effectuées pour entraîner le réseau.

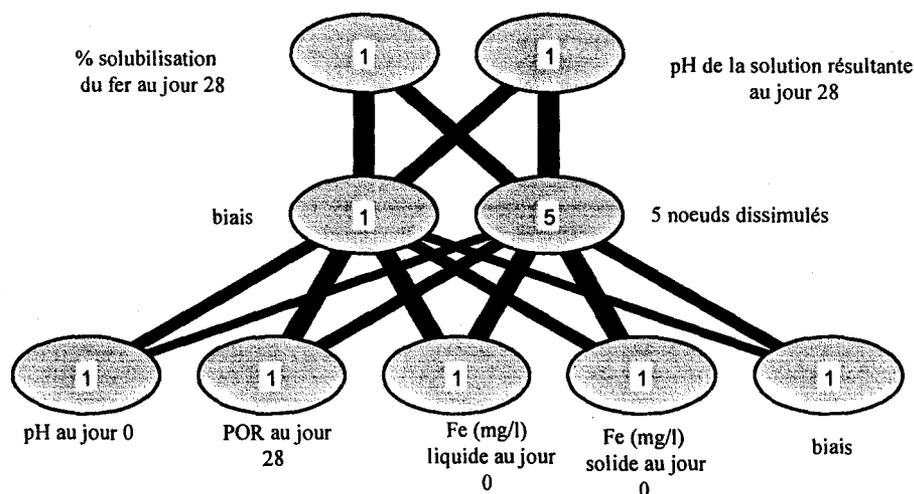


Figure 4.2: RNA pour prédire le pourcentage de solubilisation du fer

Les équations mathématiques décrivant le réseau résultant sont les suivantes:

$$\begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.9 & 1.1 & 3.7 & -3.9 \\ -10.5 & 6.0 & -0.3 & 3.2 \\ -15.6 & .04 & -10.5 & 9.0 \\ 5.2 & -1.1 & .2 & 9.0 \\ 1.7 & -7.9 & 4.8 & -16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_0^0 \\ X_1^0 \\ X_2^0 \\ X_3^0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.1 \\ 2.4 \\ 7.1 \\ -6.5 \\ 3.9 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} = f \begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} X_0^2 \\ X_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11.0 & 6.1 & -11.9 & -5.7 & -7.0 \\ 5.1 & -5.4 & 8.4 & 4.2 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4.1 \\ -2.4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_0^2 \\ Y_1^2 \end{bmatrix} = f \begin{bmatrix} X_0^2 \\ X_1^2 \end{bmatrix}$$

(4.2)

Pourcentage de solubilisation du fer au jour 28 =  $Y_0^2 \times \text{facteurfer}$

pH de la solution au jour 28 =  $Y_0^2 \times \text{facteurpH}$

où  $f(z)$  est la fonction sigmoïde et le vecteur d'entrée  $x^0$  correspond aux pH, POR, et concentrations liquide et solide de fer au jour 0, divisés par les facteurs de normalisation correspondants au jour 0.

*Troisième réseau: solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, et du zinc*

Le troisième réseau est construit pour prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, du zinc et le pH de la solution au jour 28, les données d'entrée étant le pH, le POR, les concentrations du cuivre, du fer, du soufre, et du zinc solides et liquides au jour 0 (mg/l), tel que présenté sur la figure 4.3. Ce réseau contient trois couches, une couche d'entrée à dix noeuds et un biais, une couche dissimulée à cinq noeuds et un biais, et une couche de sortie à cinq noeuds. 6119 itérations ont été exécutées pour entraîner le réseau.

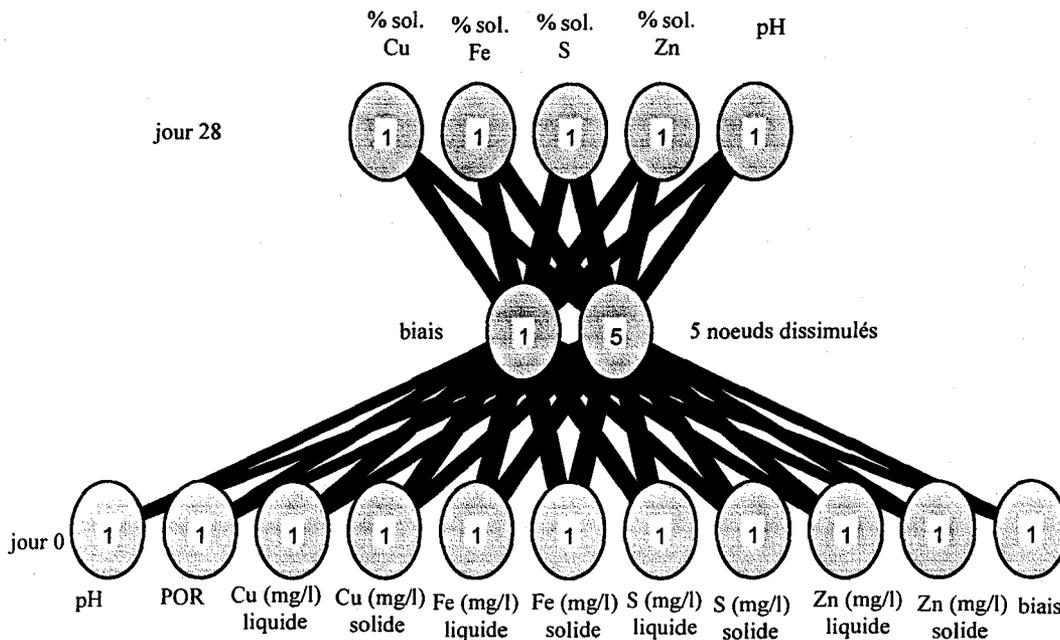


Figure 4.3: RNA pour prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre et du zinc

Les équations mathématiques du réseau résultant sont les suivantes:

$$\begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.2 & -0.5 & 0.1 & -4.8 & .9 & -6.6 & -54 & 2.9 & .1 & -2 \\ -1.9 & -2.5 & 2.6 & 8.0 & 4.0 & 7.8 & -32 & -7 & 7.0 & -1.0 \\ -2.6 & 4.2 & -5.1 & 4.8 & -3.0 & -5.9 & 2.3 & 1.6 & 2.3 & -8 \\ 4.8 & 5.0 & 4.4 & -7.7 & -9 & -1.8 & 2.8 & -3.4 & -1.6 & -2.2 \\ -2.8 & -5.6 & -4.8 & -2.4 & 4.2 & -2.5 & -8.0 & 4.0 & 8.7 & -9.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_0^0 \\ X_1^0 \\ X_2^0 \\ X_3^0 \\ X_4^0 \\ X_5^0 \\ X_6^0 \\ X_7^0 \\ X_8^0 \\ X_9^0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ -4.6 \\ .7 \\ -3.4 \\ .9 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} = f \begin{bmatrix} X_0^1 \\ X_1^1 \\ X_2^1 \\ X_3^1 \\ X_4^1 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

$$\begin{bmatrix} X_0^2 \\ X_1^2 \\ X_2^2 \\ X_3^2 \\ X_4^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.4 & -11.2 & 7.7 & -7.8 & -8.3 \\ -8.6 & 3.8 & 5.1 & -1.3 & -2.1 \\ -7.8 & 7.6 & 2.7 & -1.1 & -7.1 \\ -6.2 & 2.0 & 2.1 & 6.1 & -4.6 \\ 1.6 & -2.5 & -5.5 & 1.3 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_0^1 \\ Y_1^1 \\ Y_2^1 \\ Y_3^1 \\ Y_4^1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 9.5 \\ 4 \\ -4 \\ 2.6 \\ 4.5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_0^2 \\ Y_1^2 \\ Y_2^2 \\ Y_3^2 \\ Y_4^2 \end{bmatrix} = f \begin{bmatrix} X_0^2 \\ X_1^2 \\ X_2^2 \\ X_3^2 \\ X_4^2 \end{bmatrix}$$

Pourcentage de solubilisation du cuivre au jour 28 =  $Y_0^2 \times \text{facteurcuivre}$

Pourcentage de solubilisation du fer au jour 28 =  $Y_1^2 \times \text{facteurfer}$

Pourcentage de solubilisation du soufre au jour 28 =  $Y_2^2 \times \text{facteursoufre}$

Pourcentage de solubilisation du zinc au jour 28 =  $Y_3^2 \times \text{facteurzinc}$

pH de la solution au jour 28 =  $Y_4^2 \times \text{facteurpH}$

où  $f(z)$  est la fonction sigmoïde et le vecteur d'entrée  $x^0$  correspond aux pH, POR, et concentrations solides et liquides du cuivre, du fer, du soufre, et du zinc au jour 0, divisés par les facteurs de normalisation correspondants au jour 0.

## 5. RÉSULTATS

---

Nous présentons dans ce chapitre les résultats de l'application des trois RNA construits au chapitre 4. Les données accompagnées de deux astérisques sont les vecteurs de validation qui n'ont pas été utilisés pour entraîner les réseaux. Les données d'entrée ne sont pas incluses pour des raisons de confidentialité.

Le tableau 5.1 et la figure 5.1 présentent les valeurs observées et les valeurs calculées des pourcentages de solubilisation du soufre pour le premier réseau. On constate que les valeurs calculées par le réseau sont assez proches des valeurs observées.

% solubilisation S observé	% solubilisation S prédit
18.500	14.700
7.900	11.800
10.500	8.000**
10.300	6.600
5.500	6.300
3.200	3.000
0.000	3.600
3.800	6.300**
30.800	30.000
0.000	1.600
10.700	13.600
14.400	18.800
12.000	11.300
19.800	53.100**
24.600	25.200
17.000	15.700
72.500	74.200
55.600	57.600
43.000	45.000
42.500	33.100
0.000	9.600
6.600	14.700**
8.100	12.000
100.000	98.800

Tableau 5.1: Les pourcentages de solubilisation observés et prédits du soufre au jour t+28

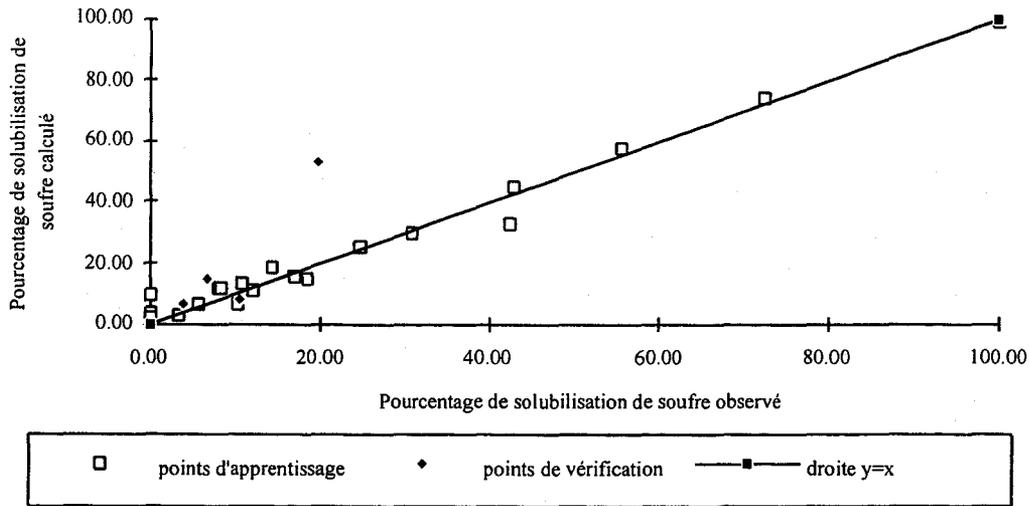


Figure 5.1: Les pourcentages de solubilisation du soufre calculés et observés, réseau 1

Le tableau 5.2 et les figures 5.2 et 5.3 présentent les valeurs de pH calculées et observées ainsi que les pourcentages de solubilisation du fer calculés et observés pour le réseau 2. On note que le réseau 2 prédit bien le pH de la solution au jour  $t+28$ . Ceci peut être expliqué par le fait que les valeurs de pH ne varient pas énormément. Par contre, le réseau 2 ne donne pas de bon résultats de prédiction des pourcentages de solubilisation du fer, probablement à cause du fait que plusieurs des valeurs observées des pourcentages de solubilisation du fer sont autour de 0.

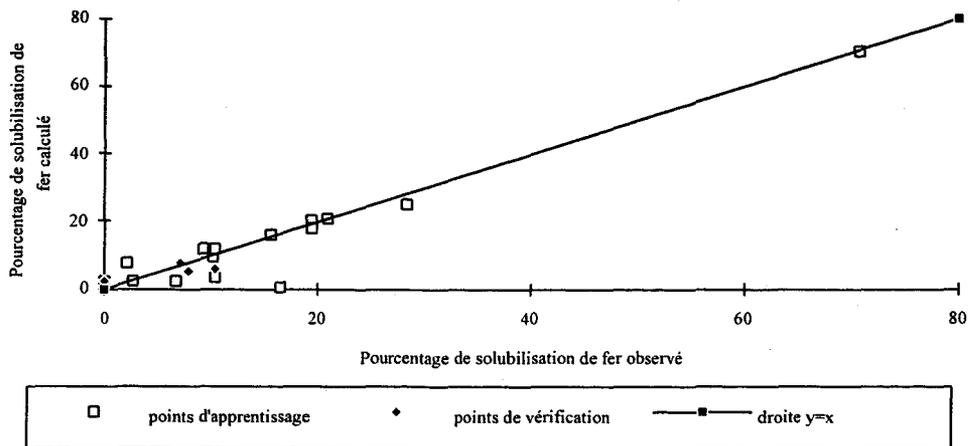


Figure 5.2: Les pourcentages de solubilisation du fer calculés et observés, réseau 2

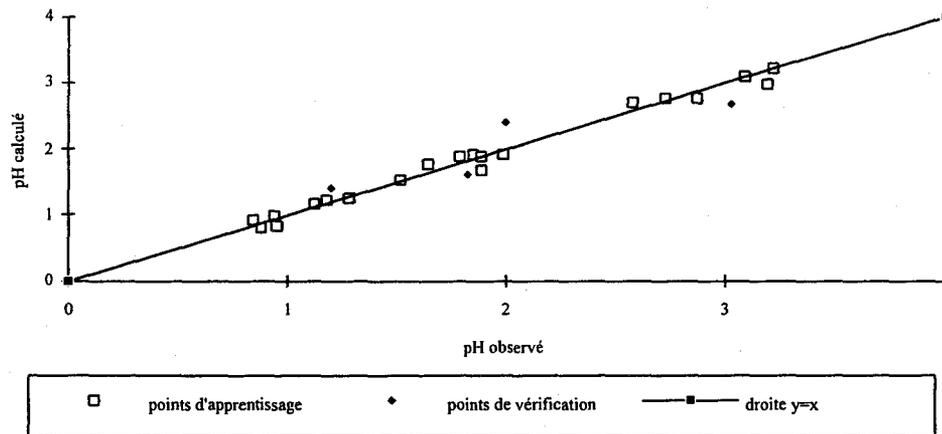


Figure 5.3: Les pH calculés et observés, réseau 2

pH observé	pH prédit	% solubilisation Fe observé	% solubilisation Fe prédit
1.640	1.758	10.200	9.558
1.890	1.674	2.100	7.859
1.790	1.877	10.300	3.611
1.850	1.922	6.600	2.407
1.820	1.610**	7.900	5.168**
1.990	1.926	0.000	1.416
2.870	2.772	0.000	0.779
3.220	3.214	0.000	0.000
0.880	0.795	28.500	25.134
1.890	1.893	0.000	2.336
1.200	1.397**	7.000	7.646**
1.130	1.159	10.400	11.753
1.180	1.211	9.200	11.894
0.840	0.927	15.500	16.284
0.950	0.844	19.300	20.461
0.940	0.995	19.300	18.054
2.000	2.383**	10.300	5.522**
2.580	2.705	2.600	2.053
3.030	2.676**	0.000	2.336**
3.190	2.956	0.000	0.425
3.090	3.101	16.500	0.071
1.280	1.262	20.900	20.815
2.720	2.753	0.000	1.274
1.510	1.520	70.800	70.021

Tableau 5.2: Les pourcentages de solubilisation du fer et le pH observés et prédits au jour

t+28

Le tableau 5.3 et les figures 5.4 à 5.8 présentent les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, du zinc calculés et observés ainsi que les valeurs de pH calculées et observées par le réseau 3.

%Cu observé	%Cu prédit	%Fe observé	%Fe prédit	%S observé	%S prédit	%Zn observé	%Zn prédit	pH observé	pH prédit
10.60	7.50	10.20	12.00	18.50	16.80	100.00	99.70	1.64	1.76
4.00	6.30	2.10	9.20	7.90	10.60	100.00	99.50	1.89	1.90
2.80	0.10	10.30	7.70	10.50	6.70	86.30	98.30	1.79	1.82
3.80	5.60	6.60	9.20	10.30	7.90	100.00	98.20	1.85	1.76
4.70	0.50**	7.90	11.7**	5.50	13.9**	0.00	98.9**	1.82	1.62**
7.70	0.00	0.00	1.80	3.20	0.20	6.00	7.80	1.99	2.09
11.70	0.00	0.00	0.40	0.00	0.10	77.10	74.30	2.87	2.93
24.00	0.00	0.00	0.10	3.80	0.00	58.30	56.90	3.22	3.14
100.00	91.90	28.50	23.90	30.80	29.40	34.60	39.50	0.88	1.06
100.00	100.00	0.00	5.80	0.00	0.90	22.00	21.50	1.89	1.88
29.90	20.8**	7.00	16.4**	10.70	11.6**	21.60	16.7**	1.20	1.08**
27.20	16.00	10.40	16.10	14.40	12.90	25.20	17.40	1.13	1.13
0.00	7.60	9.20	13.60	12.00	11.30	27.80	16.00	1.18	1.26
37.90	31.30	15.50	25.10	19.80	15.60	14.10	16.20	0.84	0.72
25.20	99.8**	19.30	25.1**	24.60	14.5**	37.50	32.8**	0.95	1.00**
89.50	15.40	19.30	27.40	17.00	14.70	38.20	34.10	0.94	0.99
17.40	3.90	10.30	15.10	72.50	68.00	65.70	64.10	2.00	2.09
6.90	0.70	2.60	6.90	55.60	54.00	68.30	67.00	2.58	2.64
1.70	0.10	0.00	3.10	43.00	43.10	59.80	59.70	3.03	2.96
7.90	0.00**	0.00	1.30**	42.50	18.4**	66.30	38.0**	3.19	3.09**
8.50	0.10	16.50	0.30	0.00	0.30	0.00	2.60	3.09	3.12
3.90	35.30	20.90	26.10	6.60	4.00	0.00	6.80	1.28	1.38
6.20	8.60**	0.00	28.0**	8.10	82.3**	64.40	53.7**	2.72	2.01**
12.40	0.00	70.80	99.30	100.00	99.40	100.00	96.70	1.51	1.56

Tableau 5.3: Les pH, POR, et pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, et du zinc observés et prédits au jour t+28

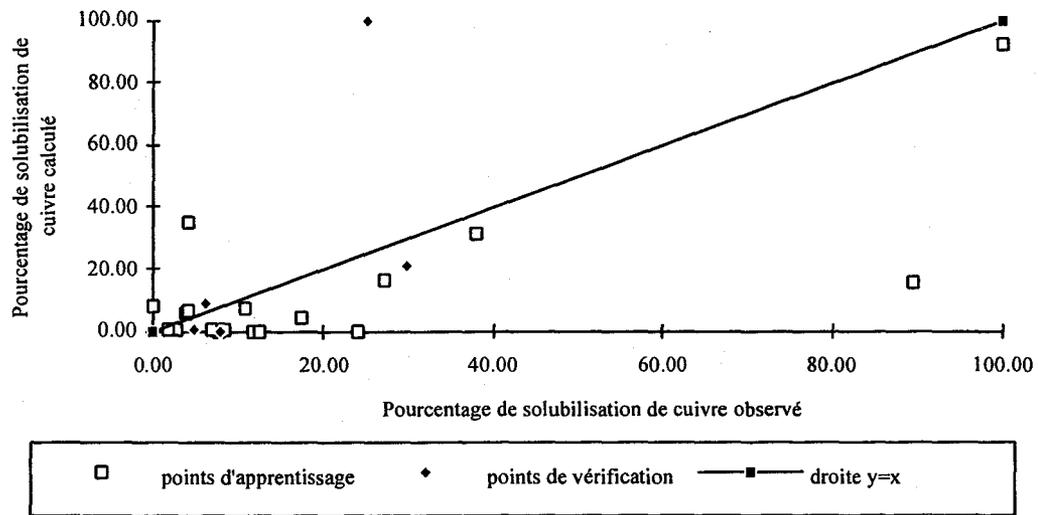


Figure 5.4: Les pourcentages de solubilisation du cuivre calculés et observés, réseau 3

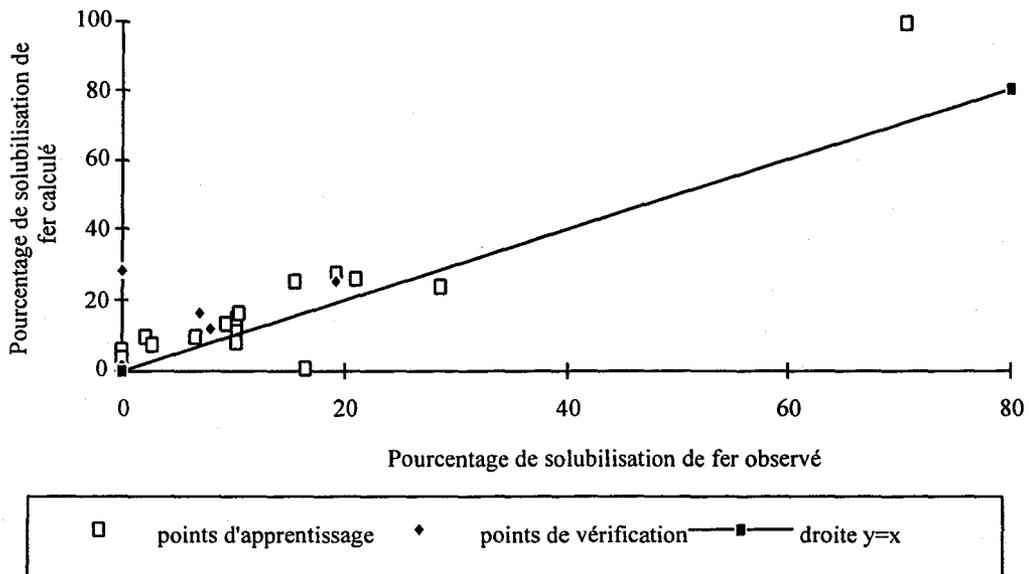


Figure 5.5: Les pourcentages de solubilisation du fer calculés et observés, réseau 3

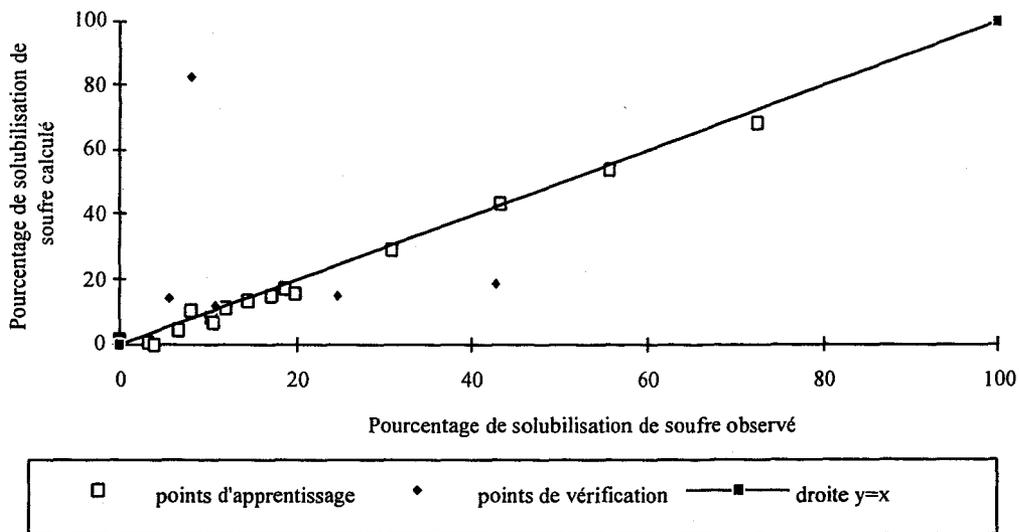


Figure 5.6: Les pourcentages de solubilisation du soufre calculés et observés, réseau 3

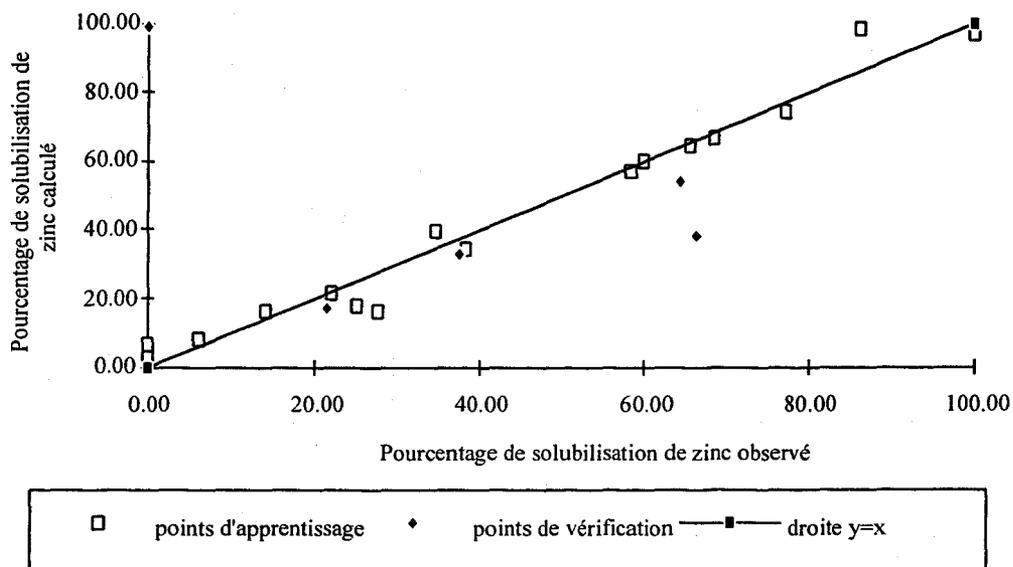


Figure 5.7: Les pourcentages de solubilisation du zinc calculés et observés, réseau 3

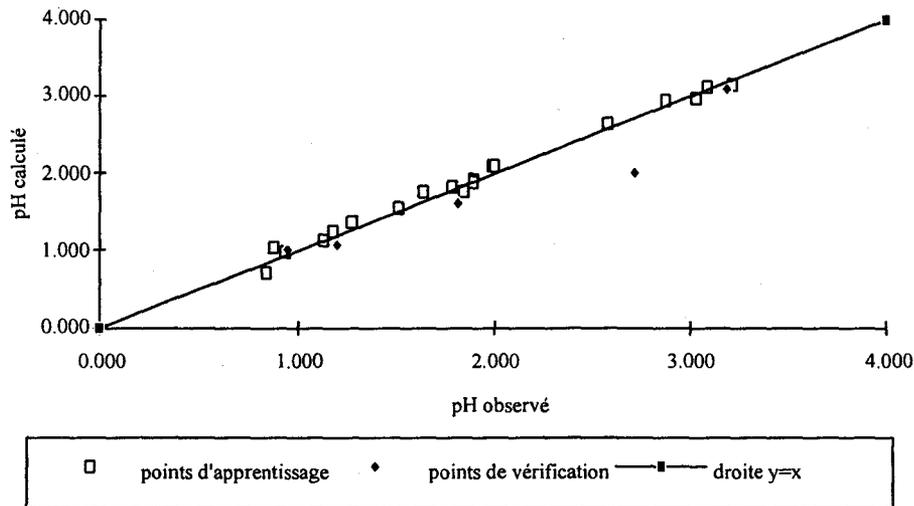


Figure 5.8: Les taux de pH calculés et observés, réseau 3

On note que le réseau 3 donne de bons résultats pour prédire le pH de la solution après 28 jours, ceci peut être expliqué par le fait que les valeurs de pH ne varient pas énormément. De plus, il prédit bien les pourcentages de solubilisation du soufre et du zinc. Toutefois, la performance du réseau 3 n'est pas très bonne pour la prédiction des pourcentages de solubilisation du fer et du cuivre, probablement dû au fait que plusieurs des valeurs observées des pourcentages de solubilisation du fer et du cuivre sont autour de 0.

Le tableau 5.4 présente les erreurs de prédictions moyennes pour les paramètres prédits par les trois réseaux. L'erreur de prédiction moyenne est la moyenne des valeurs absolues des différences entre les valeurs observées et les valeurs prédites des variables.

Variable	valeur observée - valeur prédite
%S réseau 1	4.3%
% Fe réseau 2	2.6%
pH réseau 2	.11
% Cu réseau 3	13.8%
%Fe réseau 3	6.8%
% S réseau 3	6.5%
%Zn réseau 3	8.9%
pH réseau 3	.1

Tableau 5.4: Les erreurs moyennes de prédiction

Ainsi, le réseau 1 prédit des pourcentages de solubilisation de soufre qui sont en moyenne de 4.3% supérieurs ou inférieurs aux pourcentages observés. Le réseau 2 a une erreur moyenne de 2.6% lors de la prédiction des taux de solubilisation du fer, tandis que le pH de la solution est sous-estimé ou surestimé de .11, ce qui est quand même considérable puisque le pH est mesuré sur une échelle logarithmique. Les erreurs moyennes du réseau 3 sont encore plus grandes, la plus grande étant de 13.8 pour le pourcentage de solubilisation du cuivre. Le réseau 3 donne de moins bons résultats parce qu'il doit prédire plusieurs variables (cinq variables au lieu d'une variable (réseau 1) ou de deux variables (réseau 2)). Toutefois, on peut quand même conclure que les erreurs moyennes de prédiction des trois RNA sont acceptables pour la plupart des variables.

Les résultats obtenus sont généralement bons, et l'approche des RNA pour modéliser le processus de biolixiviation des métaux des résidus miniers est adéquate. Toutefois, il est absolument nécessaire d'avoir plus de données expérimentales afin de bâtir des modèles robustes car 19 ou 20 vecteurs ne sont pas suffisants pour l'apprentissage d'un RNA. De plus, il est préférable de construire un réseau séparé pour chacune des valeurs à prédire, c'est-à-dire un noeud de sortie par réseau qui est ainsi entraîné spécifiquement pour prédire cette variable. De plus, afin de mieux interpréter les résultats, on devrait tenir compte de l'impact des erreurs de prédictions, par exemple une erreur de 6.5% est acceptable pour les taux de solubilisation de soufre, mais elle le serait moins pour les taux de solubilisation de fer qui sont généralement assez faibles. Notons que les résultats ne peuvent pas être interprétés avec beaucoup de détails pour des raisons de confidentialité.

## 6. CONCLUSION

---

Nous avons présenté dans ce rapport une description des réseaux de neurones artificiels (RNA), une technique de l'intelligence artificielle. Les RNA sont appliqués dans plusieurs domaines pour modéliser des processus complexes autrement difficiles à modéliser. Ils sont de type "boîte noire" et permettent de prédire des variables dépendantes à partir de variables indépendantes sans nécessairement comprendre les liens entre les données d'entrée et celles de sortie. De plus, nous avons effectué une revue bibliographique (non exhaustive) des travaux appliquant les RNA aux processus chimiques et biologiques. Ensuite, nous avons construit trois RNA afin de prédire au jour  $t+28$ , les taux de solubilisation de métaux provenant de résidus miniers à partir de paramètres mesurés au jour  $t$ . Le premier réseau a permis de prédire le pourcentage de solubilisation du soufre, le deuxième réseau de prédire le pourcentage de solubilisation du fer et le pH de la solution résultante, et le troisième réseau de prédire les pourcentages de solubilisation du cuivre, du fer, du soufre, du zinc et le pH de la solution résultante.

Les résultats obtenus sont généralement bons, et nous concluons que l'approche des RNA est adéquate pour modéliser le processus de biolixiviation des métaux des résidus miniers. Toutefois, il est absolument nécessaire d'avoir plus de données expérimentales afin de bâtir des modèles robustes.



## 7. BIBLIOGRAPHIE

---

Baba, K., Enbutu, I., Matusaki, H., et S. Nogita (1990), Intelligent support system for water and sewage treatment plants which includes a past history learning function - coagulant injection guidance system using neuralnet algorithm, Proceedings of the 5th IAWPRC Workshop, Kyoto Japan, pp. 227-234.

Berthelin, J. (1987), Des bactéries pour extraire des métaux, La Recherche, no 188, mai, pp. 720-725.

Capodaglio, A.G., Jones, H.V., Novotny, V. et Xin Feng (1991), Sludge bulking analysis and forecasting: Application of system identification and artificial neural computing technologies, Water Resources, vol. 25, no 10, pp. 1217-1224.

Boger, Z. (1992), Application of neural networks to water and wastewater treatment plant operation, ISA Transactions, vol. 31, no 1, pp. 25-33.

Bryson, A. E., et Y.-V. Ho (1969), Applied Optimal Control, Blaisdell, New York.

Couillard, D., et S. Zhu (1992), Kinetic modelling of bacterial leaching of heavy metals from sewage sludge using neural networks, non publié.

Du, Y. G., Sreekrishnan, T. R. Tyagi, R. D. Campbell, P. G. C. (1994), Effect of pH on metal solubilization from sewage sludge: a neural-net-based approach, Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 21, no 5, pp. 728-735.

Hoskins, J.C., et D.M. Himmelblau (1988), Artificial Neural Network models of knowledge representation in chemical engineering, Computational Chemical Engineering, vol. 12, no 9, pp. 881-890.

Lippmann, R.P. (1987), An introduction to computing with neural nets, IEEE ASSP magazine, April, pp. 4-22.

Minsky, M. L. (1954), Neural Nets and the Brain Model Problem, thèse de doctorat, Université de Princeton.

Norvig, P., et S. Russell (1995), Artificial Intelligence: A Modern Approach, Prentice Hall.

Novotny, N., Jones, H., Feng, X., et A. Capodaglio (1991), Time series analysis models of activated sludge plants, Water Science and Technology, vol. 23, pp. 1107-1116.

Roques, H. (1980), Fondements Théoriques du Traitement Biologique des Eaux, vol. I et II, Technique et Documentation.

Su, H.T., McAvoy, T.J., et P. Werbos (1992), Long-term predictions of chemical processes using recurrent neural networks: A parallel training approach, Ind. Eng. Chem. Res., vol. 31, pp. 1338-1352.

Thibault, J., Breusegem, V.V., et A. Chéry (1990), On-Line prediction of fermentation variables using neural networks, Biotechnology and Bioengineering, vol. 36, pp. 1041-1048.

Tyagi, R.D., et Y.G. Du (1992a), Kinetic model for the effects of heavy metals on activated sludge process using neural networks, Environmental technology, vol. 13, pp. 883-890.

Tyagi, R.D., et Y.G. Du (1992b), Operational determination of the activated sludge process using neural networks, Wat. Sci. Tech., vol. 26, no 9-11, pp. 2461-2464.

Tyagi, R.D., Du, Y.G., Sreekrishnan, T.R., et J.P. Villeneuve (1993), Neural model for the operational control of activated sludge processes, Process Biochemistry, vol. 28, pp. 259-267.