

**Record Number:** 12550  
**Author, Monographic:** Cluis, D.//Laberge, C.//Gagnon, E.//Deblois, J.  
**Author Role:**  
**Title, Monographic:** Utilisation des réseaux de neurones sur des données de solubilisation des métaux lourds dans un réacteur en continu  
**Translated Title:**  
**Reprint Status:**  
**Edition:**  
**Author, Subsidiary:**  
**Author Role:**  
**Place of Publication:** Québec  
**Publisher Name:** INRS-Eau  
**Date of Publication:** 1997  
**Original Publication Date:** Avril 1997  
**Volume Identification:**  
**Extent of Work:** ix, 49  
**Packaging Method:** pages  
**Series Editor:**  
**Series Editor Role:**  
**Series Title:** INRS-Eau, rapport de recherche  
**Series Volume ID:** 497  
**Location/URL:**  
**ISBN:** 2-89146-396-X  
**Notes:** Rapport annuel 1996-1997  
**Abstract:**  
**Call Number:** R000497  
**Keywords:** rapport/ ok/ dl

**UTILISATION DES RÉSEAUX DE NEURONES  
SUR DES DONNÉES DE SOLUBILISATION  
DES MÉTAUX LOURDS DANS UN RÉACTEUR  
EN CONTINU**

**D. Cluis, C. Laberge, E. Gagnon et J. Deblois  
INRS-Eau, avril 1997**



**UTILISATION DES RÉSEAUX DE NEURONES  
SUR DES DONNÉES DE SOLUBILISATION DES MÉTAUX LOURDS  
DANS UN RÉACTEUR EN CONTINU**

Rapport préparé par

Daniel Cluis<sup>1</sup>  
Claude Laberge<sup>2</sup>  
Eric Gagnon<sup>3</sup> et Josianne Deblois<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Professeur, Institut national de la recherche scientifique, INRS-Eau

<sup>2</sup> Statex Inc.

<sup>3</sup> Stagiaires, Institut national de la recherche scientifique, INRS-Eau

Rapport scientifique n° R-497

Avril 1997

# TABLE DES MATIÈRES

Table des matières .....	iii
Liste des tableaux .....	v
Liste des figures .....	vii
Remerciements .....	ix
1 Introduction .....	1
2 Présentation des réseaux de neurones artificiels .....	3
3 Présentation de BrainMaker .....	7
4 Application sur les données des boues usées .....	13
4.1 Essai 1: Entraînement et test sur boues de provenances différentes .....	15
4.2 Essai 2. Prédiction pour un temps de séjour différent pour le test .....	19
4.3 Essai 3. Réseau de neurones sur la totalité des données disponibles .....	23
4.3.1 Effet de la concentration de $\text{FeSO}_4$ et du temps de séjour sur la solubilisation du CUIVRE .....	26
4.3.2 Effet de la concentration de $\text{FeSO}_4$ et du temps de séjour sur la solubilisation du ZINC .....	28
5. Optimisation des paramètres des réseaux de neurones .....	31
5.1 Optimisation pour les concentrations de cuivre .....	32
5.2 Optimisation pour les concentrations de zinc .....	36
5.3 Réseaux optimaux pour les données du présent rapport .....	41
6 Conclusion .....	43
Bibliographie .....	45



## LISTE DES TABLEAUX

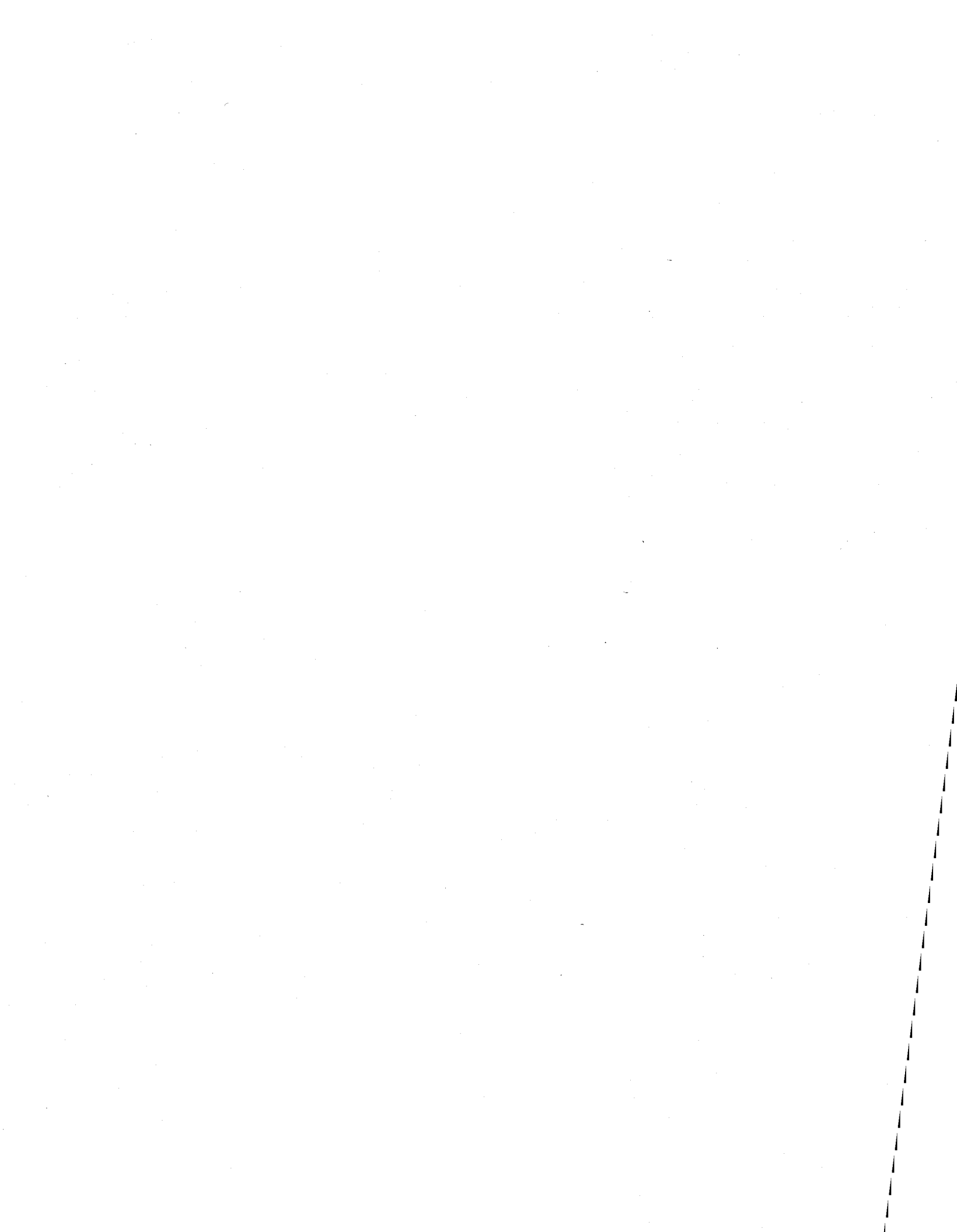
Tableau 4.1	Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit . . . . .	17
Tableau 4.2	Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit . . . . .	18
Tableau 4.3	Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit; Estimation du temps de séjour de 2 jours . . . . .	20
Tableau 4.4	Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit; Estimation du temps de séjour de 2 jours . . . . .	22
Tableau 4.5	Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit; Utilisation de toutes les données disponibles . . . . .	25
Tableau 4.6	Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit; Utilisation de toutes les données disponibles . . . . .	25





## LISTE DES FIGURES

Figure 4.1	Solubilisation du cuivre : Entraînement sur les boues de Deux-Montagnes et test sur boues de Deux-Montagnes et Valcartier .....	16
Figure 4.2	Solubilisation du zinc : Entraînement sur les boues de Deux-Montagnes et test sur boues de Deux-Montagnes et Valcartier .....	16
Figure 4.3	Solubilisation du cuivre : Entraînement sur les temps de séjour 1, 2.5, 3, 4 et 5 jours et test sur temps de séjour 2 jours .....	21
Figure 4.4	Solubilisation du zinc : Entraînement sur les temps de séjour 1, 2.5, 3, 4 et 5 jours et test sur temps de séjour 2 jours .....	21
Figure 4.5	Solubilisation du cuivre : Entraînement et test sur l'ensemble des données de Deux-Montagnes et Valcartier .....	24
Figure 4.6	Solubilisation du zinc : Entraînement et test sur l'ensemble des données de Deux-Montagnes et Valcartier .....	24
Figure 4.7	Effet du temps de séjour et de la concentration de $\text{FeSO}_4$ sur la solubilisation du cuivre : données Deux-Montagnes et Valcartier .....	27
Figure 4.8	Effet du temps de séjour et de la concentration de $\text{FeSO}_4$ sur la solubilisation du zinc : données Deux-Montagnes et Valcartier .....	27
Figure 5.1A	Variation des écarts moyens selon le nombre de couches cachées et le nombre de neurones : solubilisation du cuivre .....	33
Figure 5.1B	Variation des écarts moyens selon le taux d'apprentissage pour l'estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre .....	33
Figure 5.1C	Variation des écarts moyens selon le momentum : estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre .....	35
Figure 5.1D	Variation des écarts moyens selon la tolérance : estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre .....	35
Figure 5.2A	Variation des écarts moyens selon le nombre de couches cachées et le nombre de neurones : solubilisation du zinc .....	38
Figure 5.2B	Variation des écarts moyens selon le taux d'apprentissage : estimation du pourcentage de solubilisation du zinc .....	38
Figure 5.2C	Variation des écarts moyens selon le momentum : estimation du pourcentage de solubilisation du zinc .....	40
Figure 5.2D	Variation des écarts moyens selon la tolérance; estimation du pourcentage de solubilisation du zinc .....	40



## **Remerciements**

---

Ce projet a été réalisé grâce au support financier du Fonds FCAR dans le cadre du programme de soutien aux équipes de recherche (subvention #ER-2428): Développements technologiques pour le traitement et/ou le recyclage de résidus contaminés en métaux.



# 1 Introduction

---

L'utilisation des réseaux de neurones pour prévoir la solubilisation des métaux lourds provenant des boues d'épuration a déjà été présentée par Du et al. (1994) dans le cas **d'expériences de traitements en lots** (batch). Les auteurs avaient alors démontré que les réseaux de neurones pouvaient permettre d'obtenir des prévisions satisfaisantes de la solubilisation des métaux.

Le présent rapport discute également de l'utilisation des réseaux de neurones pour prévoir la solubilisation des métaux lourds provenant des boues d'épuration, mais dans le contexte **d'expériences de traitements en continu**. De plus, on s'intéressera aux possibilités des réseaux de neurones à déterminer le pourcentage de solubilisation pour un nouveau temps de séjour ainsi que le temps de séjour qui permet le plus grand pourcentage de solubilisation. Finalement, on cherchera à optimiser les paramètres intrinsèques aux réseaux de neurones dans le cadre d'expériences de solubilisation des métaux lourds dans un traitement en continu.



## **2 Présentation des réseaux de neurones artificiels**

---

Les réseaux de neurones artificiels (RNA) sont apparus lorsque les chercheurs se sont intéressés à l'intelligence artificielle. Leur but était de construire un système qui pourrait effectuer les opérations du cerveau humain. La première publication sur les RNA est apparue il y a un demi-siècle, suite aux travaux de McCulloch & Pitts (1943).

Les RNA sont aujourd'hui utilisés comme modèle de prédiction ainsi que dans plusieurs applications en classification et en reconnaissance. Parmi celles-ci, on peut mentionner la génération et la reconnaissance de la parole, la localisation de sources de radar, l'optimisation de procédés chimiques, l'identification de cellules cancéreuses, la reconnaissance d'anomalies de chromosomes et la reconnaissance automatique de l'écriture.

Il existe plusieurs types de réseaux de neurones. Chacun de ces réseaux est constitué de neurones artificiels organisés en couches et reliés entre eux par un système de connexions. Pour tous les réseaux, la première couche constitue la couche d'entrée et la dernière représente la couche de sortie. Entre ces deux couches, il peut y avoir une ou plusieurs couches de neurones appelées *couches cachées*. Le nombre de neurones dans les couches d'entrée et de sortie représente respectivement le nombre de variables qui servent dans la prédiction et le nombre de variables à prédire. Pour ce qui est du nombre de neurones dans les couches cachées, celui-ci est arbitraire.

Tous les types de RNA requièrent un algorithme d'apprentissage. Le problème de l'apprentissage ou de l'entraînement d'un RNA se ramène à celui de l'estimation des paramètres optimisant son efficacité. Chaque algorithme d'entraînement se base sur une règle d'apprentissage particulière pour estimer les paramètres.

Un des réseaux les plus utilisés est le perceptron. Dans celui-ci, chaque neurone artificiel reçoit une certaine quantité d'information, sous forme de vecteurs, provenant des autres neurones auxquels il est connecté. La somme pondérée de ces vecteurs, notée  $v$ , est utilisée pour générer la valeur globale d'entrée du neurone. Un seuil  $\theta$  est souvent soustrait de cette somme. Ce paramètre peut augmenter la performance du réseau. Cette nouvelle entrée est alors transformée en utilisant une fonction d'activation  $f$ . La plus fréquemment utilisée est la fonction sigmoïde de pente égale à 1 défini par  $f(x) = 1 / (1 + \exp(-x))$ . Le résultat de cette transformation constitue la sortie  $y$  du neurone :

$$y = f(v - \theta)$$

À l'exception de la couche d'entrée, chaque neurone dans une couche prend donc la sortie des neurones de la couche précédente auxquels il est connecté comme vecteur d'entrées et génère une sortie qui est envoyée aux neurones de la couche suivante via les interconnexions.

Le perceptron est entraîné avec supervision, c'est-à-dire que chaque observation présentée au réseau est formée de deux parties. La première contient les variables explicatives, appelées les entrées de l'observation, et la deuxième correspond aux sorties désirées de l'observation définies par les variables à prédire.

L'apprentissage du perceptron peut s'effectuer par différents algorithmes, dont l'algorithme de rétropropagation qui est le plus fréquemment utilisé. Cet algorithme d'apprentissage, introduit par Rumelhart et McClelland (1986), est un algorithme itératif qui rétropropage les erreurs obtenues au niveau de la couche de sortie à travers le réseau. Il est conçu pour minimiser une certaine fonction de coût évaluant l'écart entre les sorties désirées et celles calculées par le réseau. L'erreur quadratique moyenne est une des fonctions de coût les plus utilisées.



La première étape de l'algorithme consiste à initialiser les poids de connexions et les seuils à de petites valeurs aléatoires. Une observation est ensuite présentée au réseau. Les sorties obtenues à la couche de sortie du réseau sont alors comparées à celles désirées. Pour chacun des neurones de sortie, une erreur est calculée en effectuant la différence entre la sortie calculée par le réseau et celle désirée. Une valeur maximale acceptable de l'erreur peut être fixée arbitrairement à l'aide du paramètre de tolérance afin de déterminer si l'observation présentée est bien prédite. Si au moins un des neurones de sortie possède une valeur d'erreur supérieure à la tolérance, alors on considère qu'il y a une mauvaise prédiction pour cette observation. Dans ce cas, il faut ajuster les poids de la façon suivante :

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \eta \beta_j x_i + \alpha [w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1)]$$

où

$$\beta_j = \begin{cases} y_j(1-y_j)(d_j-y_j) & \text{si } j \text{ est la couche de sortie} \\ x_j(1-x_j) \sum_l y_l(1-y_l)(d_l-y_l)w_{jl} & \text{si } j \text{ est une couche cachée} \end{cases}$$

$$0 < \eta \leq 1, \quad 0 \leq \alpha < 1$$

et

$w_{ij}(t)$  : poids entre le neurone  $i$  d'une couche inférieure et le neurone  $j$  d'une couche supérieure au temps  $t$

$\beta_j$  : terme d'erreur pour le neurone  $j$

$x_j$  : sortie ou donnée d'entrée du neurone  $j$

$y_j$  : sortie du neurone  $j$  donnée par le réseau

$d_j$  : sortie désirée du neurone  $j$

La sommation sur  $l$  dans l'équation ci-dessus se fait sur tous les neurones connectés au neurone  $j$  qui sont contenus dans toutes les couches inférieures à la couche de ce neurone.

Le paramètre  $\eta$  représente le taux d'apprentissage du réseau assurant la stabilité du processus. La valeur de ce paramètre doit être fixée par l'utilisateur. Le paramètre de momentum  $\alpha$  a pour rôle de diriger la variation des poids dans la même direction que celle utilisée à l'itération précédente.

Les observations sont présentées séquentiellement jusqu'à ce qu'elles soient bien prédites ou jusqu'à ce que le nombre maximal d'itérations soit atteint.

Finalement, il est important de noter que le meilleur réseau n'est pas nécessairement celui qui minimise la fonction de coût sur les données d'entraînement, mais plutôt celui qui offre une bonne généralisation à des fins de prédiction. En effet, lorsqu'un réseau est entraîné, il devrait normalement atteindre une performance adéquate en présence de nouvelles observations à tester possédant sensiblement les mêmes caractéristiques que les observations d'entraînement. La qualité du réseau neuronique pour les données d'entraînement peut toujours être améliorée en augmentant le nombre de neurones et de connexions. En contrepartie, on diminue le pouvoir de généralisation du réseau en augmentant, pour des nouvelles observations, l'écart entre les sorties du réseau et les valeurs à prédire. C'est ce qui est communément appelé "sur-apprentissage". Il y a donc un compromis à faire entre l'objectif d'obtenir une bonne prédiction sur les données d'entraînement et celui d'avoir un nombre relativement faible de connexions, ce qui assure une meilleure généralisation.

### **3 Présentation de BrainMaker**

---

BrainMaker et NetMaker forment un système complet pour construire, entraîner et tester des réseaux de neurones artificiels (RNA). NetMaker permet de manipuler des fichiers de données et de les convertir dans un certain format que BrainMaker pourra utiliser pour effectuer des opérations sur des réseaux de neurones. Les fichiers que NetMaker utilise peuvent être dans les formats ASCII, Lotus 1-2-3, Dbase III ou Excel. Des fichiers peuvent également être créés par l'éditeur SEE intégré au système.

Ce système a été développé par Mark Lawrence et Al Petterson à la fin des années 80. Il a été conçu dans le but de faciliter l'utilisation des RNA puisqu'il ne nécessite aucune programmation.

#### **Guide de base concernant l'utilisation du système :**

1. Déterminer le fichier à utiliser. Si celui-ci ne provient pas des logiciels Lotus 1-2-3, Dbase III ou Excel, ou qu'il n'est pas disponible sous format ASCII, le créer dans l'éditeur SEE:
  - a. Pour entrer dans l'éditeur, taper: SEE nom\_du\_fichier
  - b. Entrer les données du fichier
  - c. Sauvegarder le fichier en appuyant simultanément sur les touches CTRL et Z
  
2. Convertir le fichier:
  - a. Entrer dans Netmaker en tapant NETMAKER

- b. Lire le fichier à l'aide de l'option: READ IN DATA FILE
- c. Randomiser l'ordre des observations du fichier si désiré à l'aide des options:

MANIPULATE DATA - ROW - SHUFFLE ROWS

Pour retourner au menu principal : CTRL et Z

- d. Créer le fichier BrainMaker : option CREATE BRAINMAKER FILE  
Déterminer pour chaque variable du fichier si elle est une variable d'entrée (BASIS), de sortie (RESULT) ou à ignorer (IGNORE)
- e. Sauvegarder le fichier (nom\_du\_fichier.def)

### 3. Construire le réseau de neurones:

- a. Entrer dans BrainMaker avec l'option: GO TO BRAINMAKER si on se trouve dans NETMAKER ou sinon en tapant BRAINMAKER
- b. Définir le nombre de couches cachées et le nombre de neurones dans chacune d'elles : PARAMETERS - CHANGE NETWORK SIZE

À noter que le nombre maximal de couches cachées est 6.

- c. Définir les paramètres du réseau : PARAMETERS - LEARNING PARAMETERS

I. *Taux d'apprentissage* : "Learning Rate Tuning"

Ce taux doit avoir une valeur entre 0 et 1. Lorsqu'on veut garder ce paramètre constant pendant l'entraînement, changer la valeur aux 4 endroits (0%, 50%, 75%, 90%).

II. *Momentum* : "Smoothing Factor"

Ce paramètre doit avoir une valeur entre 0 et 1.

III. *Tolérance pour l'apprentissage* : "Initial Tolerance" et "Ending Tolerance"

Pour que la tolérance soit constante lors de l'apprentissage, donner la même valeur à ces deux paramètres.

*Tolérance pour le test* : "Testing Tolerance"

Les valeurs de tolérance doivent être comprises entre 0 et 1.

IV. Si désiré, un *nombre maximal d'itérations* peut être fixé : "Maximum Training Runs"

4. Sauvegarder la matrice des poids déterminés par l'entraînement si désiré avec l'option:

PRINT - WEIGHT MATRICES TO FILE ... (nom\_du\_fichier.mtx)

## 5. Entraîner le réseau avec l'option: RUN - TRAIN NETWORK

Définition des termes apparaissant à l'écran :

- Run : nombre d'itérations effectuées (à chaque itération, toutes les observations passent à travers le réseau).
- Fact : numéro de l'observation traitée dans cette itération
- Total : nombre de données d'entraînement \* nombre d'itérations
- Bad : nombre de données prédites incorrectement jusqu'à présent dans cette itération
- Last (1) : nombre total de données prédites incorrectement dans la dernière itération
- Good : nombre de données prédites correctement jusqu'à présent dans cette itération
- Last (2) : nombre total de données prédites correctement dans la dernière itération

À noter que l'entraînement se termine lorsque toutes les données ont été correctement prédites dans une itération ou lorsque le nombre maximal d'itérations a été atteint.

Pour l'entraînement, le système garde 90% des observations; le reste est conservé pour tester l'efficacité du réseau. Si on désire un pourcentage d'observations différent pour l'entraînement et les tests, il faut alors créer des fichiers d'entraînement et de tests à l'aide de l'éditeur SEE.

## 6. Sauvegarder le réseau entraîné avec l'option:

FILE - SAVE TRAINED NETWORK (nom\_du\_fichier.net)

7. Tester la performance du réseau avec l'option:

RUN - TEST NETWORK

Par défaut, le système utilise le fichier nom\_du\_fichier.tst

Pour le modifier, utiliser les options :

FILE - SELECT FILENAME - READ TESTING FACTS FROM

8. Obtenir les sorties prédites par le réseau si désiré:

a. Options : PRINT - INPUTS AND OUTPUTS

b. Sélectionner le fichier concerné :

FILE - SELECT FILENAME - READ TESTING FACTS FROM

c. Pour obtenir les sorties prédites : RUN - TEST NETWORK

9. Pour utiliser un réseau déjà entraîné, utiliser les options:

FILE - SELECT FILENAME - READ TRAINED NETWORK FROM





## **4 Application sur les données des boues usées**

---

Afin de bien comprendre la nature des observations utilisées, une brève description du processus de solubilisation des métaux dans des réacteurs en continu sera maintenant présentée.

Le processus étudié est dit “en continu”, car les boues traitées entrent dans le réacteur et sortent du réacteur de façon continue. Le temps de séjour correspond alors au temps moyen pendant lequel les boues demeurent dans le réacteur. Les observations utilisées pour entraîner les réseaux de neurones proviennent de quelques expériences décrites plus loin, mais il est important de noter que plusieurs observations sont prises pour chaque expérience à des jours différents. De façon générale, des observations sont prises à tous les jours dans les réacteurs en continu. Afin de s’assurer que les observations utilisées pour l’entraînement des réseaux de neurones sont dans un certain état d’équilibre, les observations des trois premiers jours ne sont pas utilisées pour l’entraînement (les 4 premiers jours sont exclus dans le cas des expériences avec temps de séjour de 4 jours).

Les réseaux de neurones artificiels seront maintenant utilisés sur ces données réelles relatives à l’enlèvement biologique des métaux lourds dans les boues usées. Les réseaux de neurones permettent alors d’estimer les pourcentages de métaux solubilisés pour un temps de séjour donné ou encore de déterminer le temps de séjour requis pour obtenir un certain pourcentage de solubilisation.

Les métaux étudiés sont le cuivre, le zinc et le cadmium. Les concentrations initiales de ces trois métaux sont trois variables d’entrées des réseaux de neurones. Les autres variables d’entrées pouvant être utilisées sont :

- le temps de séjour,
- le pH,

- le potentiel d'oxydo-réduction (POR),
- la concentration de  $\text{FeSO}_4$ ,
- le pourcentage de solides,

Mercier (1988) présente une définition de ces variables ainsi qu'une description de leurs intérêts dans l'enlèvement biologique des métaux lourds. Les variables de sorties des réseaux sont les concentrations finales des métaux étudiés : cuivre, zinc et cadmium.

Les boues étudiées proviennent de deux sources : 1) Dans un premier temps, des données sont tirées de Mercier (1988) pour des boues anaérobies de la ville de Deux-Montagnes (des boues du 17 juin 1987 pour les temps de séjour de 4, 2 et 1 jours et du 26 octobre pour le temps de séjour de 3 jours; 1 g/l et 3 g/l de  $\text{FeSO}_4$ ) et; 2) Les autres boues proviennent de Valcartier et sont tirées de Couillard et al. (1988). Pour chaque combinaison étudiée de "ville x temps de séjour x concentration de  $\text{FeSO}_4$ ", une seule expérience a été effectuée mais des observations sont prises sur plusieurs jours tel que décrit plus haut.

Afin de quantifier la qualité des estimations des pourcentages de solubilisation, on étudie l'écart absolu (E.A.) entre le pourcentage de solubilisation observé (% S.O.) et le pourcentage de solubilisation prédit (% S.P.) :

$$\text{E.A.} = |\% \text{S.O.} - \% \text{S.P.}|$$

Ainsi que l'écart brut (E.B.):

$$\text{E.B.} = \% \text{S.O.} - \% \text{S.P.}$$

L'écart absolu permet d'évaluer la dispersion entre les pourcentages prédits et les pourcentages observés alors que l'écart brut permet d'évaluer la présence de biais et donc de sous-estimation ou de surestimation.

## 4.1 Essai 1: Entraînement et test sur boues de provenances différentes

Afin de juger des limitations de l'utilisation des réseaux de neurones pour l'estimation du pourcentage de solubilisation des métaux, le premier essai consiste en un entraînement d'un réseau de neurones sur les boues de Deux-Montagnes alors que le test est fait sur deux ensembles de données : 1) un sous-ensemble des données de Deux-Montagnes et: 2) les données de Valcartier.

La figure 4.1 montre les pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de cuivre dans les trois ensembles de données : 1) les données d'entraînement; 2) le sous-ensemble des données de Valcartier sélectionné pour le test et: 3) les données de Deux-Montagnes également utilisées pour le test. Cette figure permet facilement de mettre en évidence les difficultés du réseau de neurones pour estimer le pourcentage de cuivre solubilisé dans les boues de Valcartier lorsque les boues de Deux-Montagnes sont utilisées pour entraîner le réseau.

Il faut cependant noter que les problèmes du réseau de neurones dans ce cas particulier ne sont peut-être pas causés par une composition différente des boues mais plutôt par d'autres variables d'entrées qui diffèrent d'un ensemble de données à l'autre. En effet, les boues de Deux-Montagnes sont traitées avec des temps de séjour de 1, 2, 3 et 4 jours alors que les boues de Valcartier sont traitées avec des temps de séjour de 0.5, 0.75, 1.5 et 3 jours.

La figure 4.2 montre les pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de zinc dans les trois mêmes ensembles de données : 1) les données d'entraînement; 2) le sous-ensemble des données de Valcartier sélectionné pour le test et: 3) les données de Deux-Montagnes également utilisées pour le test. On remarque de nouveau les difficultés du réseau de neurones pour estimer le pourcentage de métal

Figure 4.1. Solubilisation du cuivre: Entraînement sur les boues de Deux-Montagnes et test sur boues de Deux-Montagnes et Valcartier.

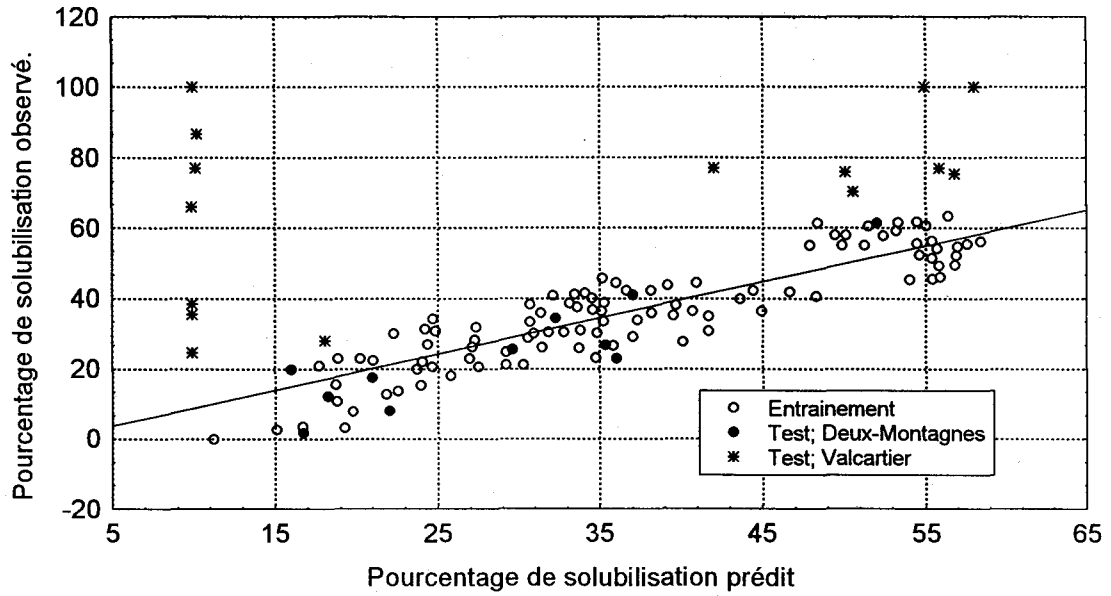
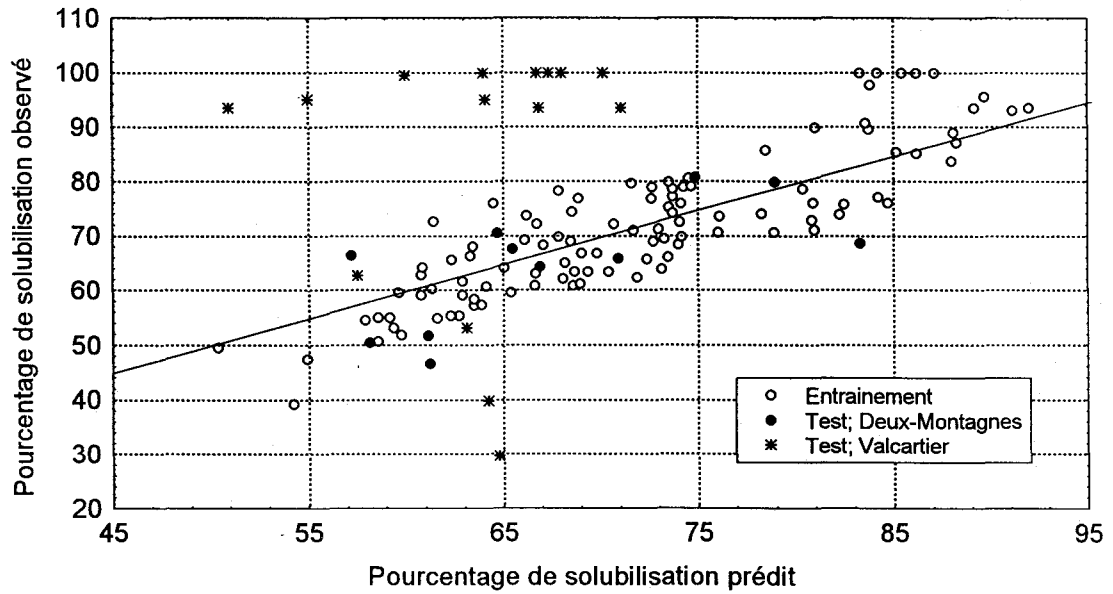


Figure 4.2. Solubilisation du zinc; Entraînement sur les boues de Deux-Montagnes et test sur boues de Deux-Montagnes et Valcartier.



solubilisé dans les boues de Valcartier lorsque les boues de Deux-Montagnes sont utilisées pour entraîner le réseau.

Le tableau 4.1 présente les statistiques descriptives associées aux écarts absolus des trois ensembles de données pour les deux métaux: cuivre et zinc, alors que le tableau 4.2 présente les statistiques descriptives associées aux écarts bruts pour les mêmes ensembles de données.

**Tableau 4.1**

Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit.

	n	Minimum	Maximum	Moyenne	Écart type
<b>Cu, Entraînement Deux-Montagnes</b>	118	0,23	16,93	5,86	3,39
<b>Cu, Test Deux-Montagnes</b>	13	1,08	14,88	7,20	4,65
<b>Cu, Test Valcartier</b>	24	1,15	90,13	30,72	27,15
<b>Zn, Entraînement Deux-Montagnes</b>	118	0,02	16,73	5,33	3,73
<b>Zn, Test Deux-Montagnes</b>	13	0,98	14,59	6,68	4,37
<b>Cu, Test Valcartier</b>	24	3,53	42,54	21,68	14,12

Le tableau 4.1 montre que le réseau de neurones permet d'estimer adéquatement les données d'entraînement de ville Deux-Montagnes: 1) écart absolu moyen de 5,86% pour le cuivre et 5,33% pour le zinc et; 2) écart absolu maximum de 16,93% pour le cuivre et 16,73% pour le zinc. Ces résultats apparaissent tout à fait acceptables en pratique. On note également que pour les données de test (observations, choisies aléatoirement, non utilisées dans l'établissement du réseau de neurone) de ville Deux-Montagnes, les écarts absolus moyens (7,20% pour le cuivre et 6,68% pour le zinc) et les écarts absolus maximums

(14,88% pour le cuivre et 14,59% pour le zinc) apparaissent tout à fait acceptables en pratique. Cependant lorsqu'on regarde les résultats pour les données tests de Valcartier, les écarts absolus moyens (30,72% pour le cuivre et 21,68% pour le zinc) et les écarts absolus maximums (90,13% pour le cuivre et 42,54% pour le zinc) montrent clairement que l'ensemble de données de ville Deux-Montagnes peut difficilement être utilisé pour prédire le pourcentage de solubilisation pour l'ensemble de données de Valcartier.

**Tableau 4.2**

Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit.

	n	Minimum	Maximum	Moyenne	Écart type
<b>Cu, Entraînement Deux-Montagnes</b>	118	-16,93	13,27	-0,69	6,76
<b>Cu, Test Deux-Montagnes</b>	13	-14,88	9,62	-4,16	7,69
<b>Cu, Test Valcartier</b>	24	-2,06	90,13	30,55**	27,35
<b>Zn, Entraînement Deux-Montagnes</b>	118	-14,93	16,73	-0,30	6,51
<b>Zn, Test Deux-Montagnes</b>	13	-14,59	9,29	-2,51	7,79
<b>Cu, Test Valcartier</b>	24	-35,05	42,54	14,99**	21,33

\*\* signifie significativement différent de 0 au seuil 1%, \* signifie significativement différent de 0 au seuil 5%.

L'absence de biais significatif (écarts bruts moyens non significativement différents de 0) au tableau 4.2 confirme que le réseau de neurones permet d'estimer adéquatement : 1) les données d'entraînement de ville Deux-Montagnes (écart brut moyen de -0.69% pour le cuivre et -0.30% pour le zinc) et; 2) les données de test de ville Deux-Montagnes (écart brut moyen de -4.16% pour le cuivre et -2.51% pour le zinc). Cependant, des biais fortement significatifs sont observés pour les données tests de Valcartier (écarts bruts moyens de 30,55% pour le cuivre et 14,99% pour le zinc).

## 4.2 Essai 2. Prédiction pour un temps de séjour différent pour le test

Ce deuxième essai vise à voir les possibilités de l'utilisation des réseaux de neurones pour l'estimation du pourcentage de solubilisation des métaux pour un temps de séjour différent. L'entraînement d'un réseau de neurones est fait pour les temps de séjours de 1, 2.5, 3, 4 et 5 jours sur les boues de Deux-Montagnes alors que le test est fait sur les données recueillies pour le temps de séjour de 2 jours dans les boues de la même provenance (Deux-Montagnes).

La figure 4.3 montre les pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de cuivre dans les deux ensembles de données : 1) les données d'entraînement; 2) les données tests. Cette figure montre deux groupes de points dans les données tests (temps de séjour de 2 jours): 1) un groupe dans le nuage de points des données d'entraînement et; 2) un groupe montrant une surestimation du pourcentage de solubilisation du cuivre (pourcentages prédits entre 25% et 30% alors que les pourcentages de solubilisation observés sont de l'ordre de 0% à 15%).

Une vérification des points du deuxième groupe permet d'identifier les raisons pouvant expliquer cette surestimation du pourcentage de solubilisation : 1) deux observations correspondent à deux jours qui suivent un bris de l'agitateur dans le réacteur en continu; 2) deux points représentent les deux premiers jours de l'essai dans le réacteur avec recyclage (donc avant atteinte de stabilité dans le réacteur) et; 3) trois observations correspondent à trois jours qui suivent l'obstruction du tuyau d'aération. On note donc qu'à l'exception de problèmes externes au processus de biolixiviation, le réseau de neurone permet d'estimer adéquatement le pourcentage de solubilisation du cuivre pour un temps de séjour de deux jours même, si ce temps de séjour n'était pas utilisé dans l'entraînement du réseau.

La figure 4.4 montre les pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de zinc dans les deux mêmes ensembles de données. On remarque de nouveau les difficultés du réseau de neurones pour estimer le pourcentage de zinc solubilisé pour certaines journées de traitement. Le nombre d'observations fortement surestimées est cependant plus faible que pour le cuivre. Une étude plus approfondie montre que le bris de l'agitateur et l'obstruction du tuyau d'aération semblent affecter moins longtemps la solubilisation du zinc comparativement à la solubilisation du cuivre.

Le tableau 4.3 présente les statistiques descriptives associées aux écarts absolus des deux ensembles de données pour les deux métaux: cuivre et zinc, alors que le tableau 4.4 présente les statistiques descriptives associées aux écarts bruts pour les mêmes ensembles de données.

**Tableau 4.3**

Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit;  
Estimation du temps de séjour de 2 jours.

	<b>n</b>	<b>Minimum</b>	<b>Maximum</b>	<b>Moyenne</b>	<b>Écart type</b>
<b>Cu, Entraînement</b> T.S.=1, 2, 5, 3, 4, 5	102	0,03	18,37	5,13	3,57
<b>Cu, Test</b> T.S.=2 jours	18	0,98	26,62	12,66	8,93
<b>Zn, Entraînement</b> T.S.=1, 2, 5, 3, 4, 5	102	0,08	17,11	5,60	3,83
<b>Zn, Test</b> T.S.=2 jours	18	0,29	50,70	12,45	12,62



Figure 4.3. Solubilisation du cuivre: Entraînement sur les temps de séjour 1, 2.5, 3, 4 et 5 jours et test sur temps de séjour 2 jours.

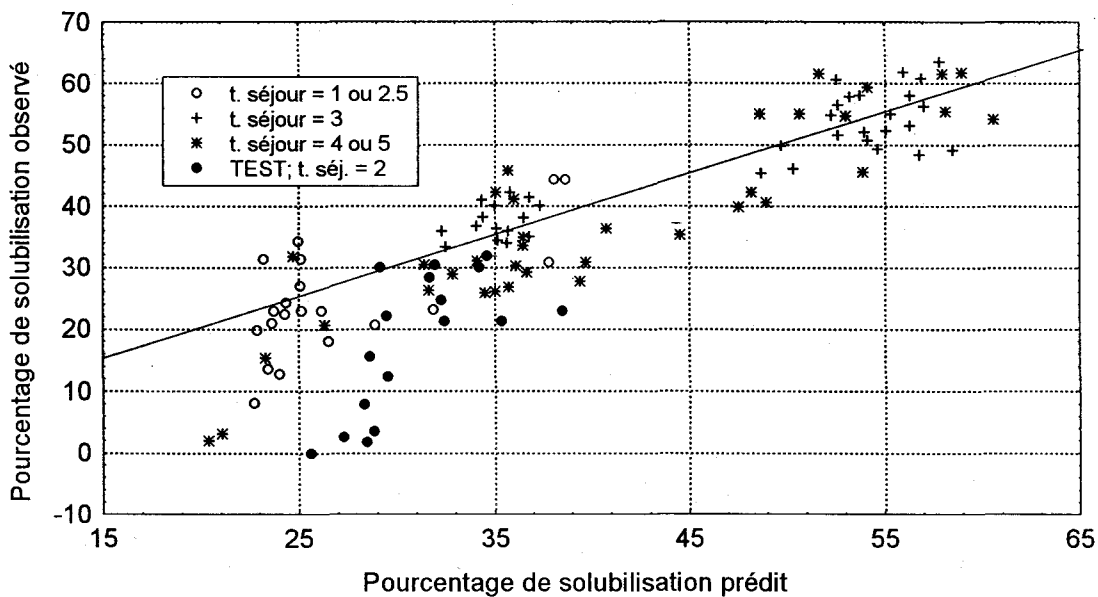
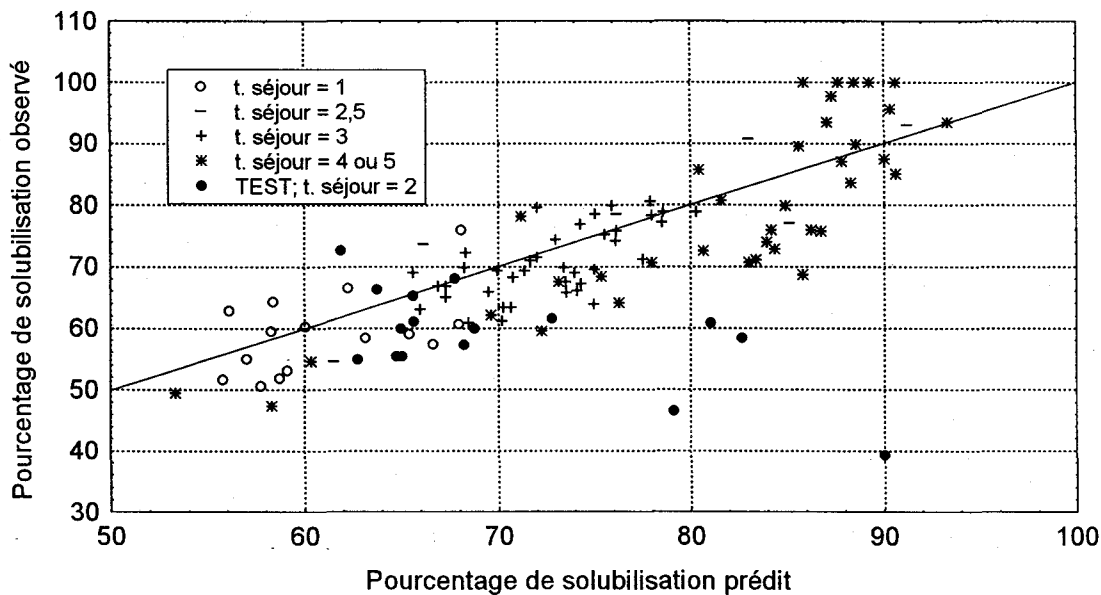


Figure 4.4. Solubilisation du zinc: Entraînement sur les temps de séjour 1, 2.5, 3, 4 et 5 jours et test sur temps de séjour 2 jours.



**Tableau 4.4**

Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit; Estimation du temps de séjour de 2 jours.

	n	Minimum	Maximum	Moyenne	Écart type
<b>Cu, Entraînement</b> T.S.=1, 2.5, 3, 4, 5	102	-18,37	10,13	-1,17	6,16
<b>Cu, Test</b> T.S.=2 jours	18	-26,62	0,98	-12,55**	9,10
<b>Cu, Test sans v.a.</b> T.S.=2 jours	11	-15,44	0,98	-6,68**	5,23
<b>Zn, Entraînement</b> T.S.=1, 2.5, 3, 4, 5	102	-17,11	14,12	-1,89**	6,54
<b>Zn, Test</b> T.S.=2 jours	18	-50,70	10,85	-10,92**	14,04
<b>Zn, Test sans v.a.</b> T.S.=2 jours	11	-9,63	10,85	-3,22	6,23

\*\* signifie significativement différent de 0 au seuil 1%, \* signifie significativement différent de 0 au seuil 5%

Le tableau 4.3 montre que le réseau de neurones permet d'estimer adéquatement les données d'entraînement pour les temps de séjour 1, 2.5, 3, 4 et 5 : 1) écart absolu moyen de 5,13% pour le cuivre et 5,60% pour le zinc et; 2) écart absolu maximum de 18,37% pour le cuivre et 17,11% pour le zinc. Ces résultats apparaissent tout à fait acceptables en pratique. Pour les données de test (temps de séjour de 2 jours) les écarts absolus moyens (12,66% pour le cuivre et 12,45% pour le zinc) et les écarts absolus maximums (26,62% pour le cuivre et 50,70% pour le zinc) laissent croire à des faiblesses du réseau de neurones pour estimer les pourcentage de solubilisation pour un temps de séjour différent. Les observations faites à propos des graphiques 4.3 et 4.4 expliquent cependant que les grands écarts sont attribuables à des facteurs externes (bris de l'agitateur et obstruction du tuyau d'aération).

La présence de plusieurs biais significatifs au tableau 4.4 montre que le réseau de neurone a tendance à surestimer le pourcentage de solubilisation du cuivre et du zinc pour un temps de séjour de 2 jours à partir des autres temps de séjour. En particulier lorsque les valeurs aberrantes (v.a.) sont dans l'échantillon test, la surestimation est gonflée par des facteurs externes impossibles à modéliser par le réseau de neurones. En ce qui concerne le biais du réseau de neurones dans l'estimation du pourcentage de solubilisation pour le temps de séjour de 2 jours, il faut donc se reporter aux lignes "Cu, Test sans v.a." et "Zn, Test sans v.a." pour en avoir une estimation adéquate. On estimera donc la surestimation du pourcentage de solubilisation à 6,7% (significatif au seuil 1%) pour le cuivre et à 3,2% (non significatif au seuil 5%) pour le zinc.

### **4.3 Essai 3. Réseau de neurones sur la totalité des données disponibles**

Ce troisième essai vise à voir les possibilités de l'utilisation des réseaux de neurones sur l'ensemble des données disponibles. On a donc plusieurs temps de séjour, deux sources d'approvisionnement (Valcartier et Deux-Montagnes), plusieurs concentrations de  $\text{FeSO}_4$ , l'estimation du pourcentage de solubilisation des métaux pour un temps de séjour différent. L'entraînement d'un réseau de neurones est fait sur 140 observations alors que le test est fait sur 15 observations sélectionnées de façon aléatoire.

Les figures 4.5 et 4.6 montrent les pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de cuivre et de zinc. Ces figures montrent que les observations utilisées pour le test se retrouvent dans le nuage de points formé par les observations ayant servi à l'entraînement. Il apparaît donc que le réseau de neurones peut bien s'adapter à la présence d'observations de caractéristiques assez différentes.

Figure 4.5. Solubilisation du cuivre: Entraînement et test sur l'ensemble des données de Deux-Montagnes et Valcartier.

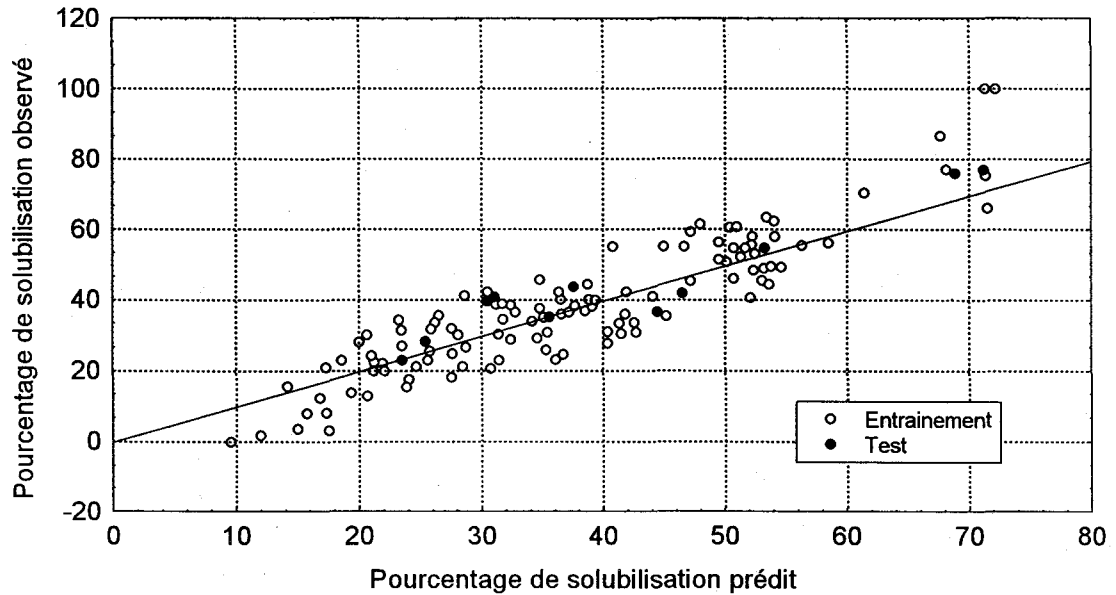
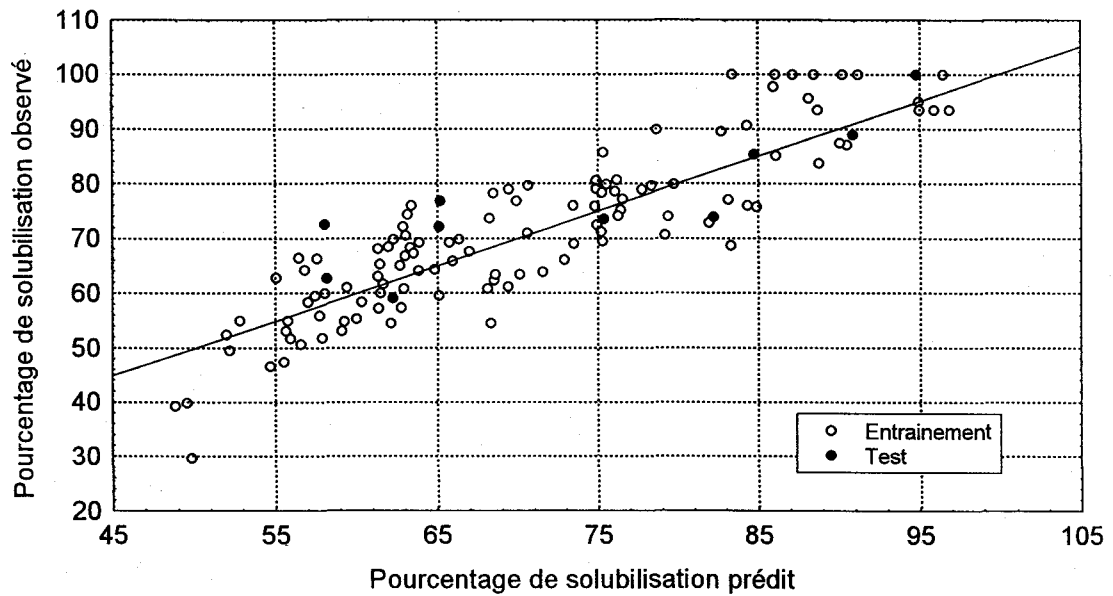


Figure 4.6. Solubilisation du zinc: Entraînement et test sur l'ensemble des données de Deux-Montagnes et Valcartier.



Le tableau 4.5 présente les statistiques descriptives associées aux écarts absolus des deux ensembles de données pour les deux métaux: cuivre et zinc, alors que le tableau 4.6 présente les statistiques descriptives associées aux écarts bruts pour les mêmes ensembles de données.

**Tableau 4.5**

Statistiques descriptives des écarts absolus entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit;  
Utilisation de toutes les données disponibles.

	n	Minimum	Maximum	Moyenne	Écart type
<b>Cu, Entraînement</b>	140	0,07	29,11	6,73	5,20
<b>Cu, Test</b>	15	0,24	28,14	6,67	6,61
<b>Zn, Entraînement</b>	140	0,04	20,09	5,40	3,89
<b>Zn, Test</b>	15	0,68	14,67	5,13	3,85

**Tableau 4.6**

Statistiques descriptives des écarts bruts entre le pourcentage de solubilisation observé et le pourcentage de solubilisation prédit;  
Utilisation de toutes les données disponibles.

	n	Minimum	Maximum	Moyenne	Écart type
<b>Cu, Entraînement T.S.=1, 2.5, 3, 4, 5</b>	140	-15,63	29,11	1,26	8,43
<b>Cu, Test T.S.=2 jours</b>	15	-8,02	28,14	4,16	8,53
<b>Zn, Entraînement T.S.=1, 2.5, 3, 4, 5</b>	140	-20,09	16,61	0,76	6,63
<b>Zn, Test T.S.=2 jours</b>	15	-8,28	14,67	2,20	6,15

\*\* signifie significativement différent de 0 au seuil 1%, \* signifie significativement différent de 0 au seuil 5%.

Le tableau 4.5 montre que le réseau de neurones permet d'estimer adéquatement les données d'entraînement : 1) écart absolu moyen de 6,73% pour le cuivre et 5,40% pour le zinc et; 2) écart absolu maximum de 29,11% pour le cuivre et 20,09% pour le zinc. Ces résultats apparaissent tout à fait acceptables en pratique. Pour les données de test (sélection aléatoire) les écarts absolus moyens sont tout à fait comparables aux écarts des données d'entraînement: 1) écarts absolus moyens de 6,67% pour le cuivre et 5,13% pour le zinc et; 2) écarts absolus maximums de 28,14% pour le cuivre et 14,67% pour le zinc.

L'absence de biais significatif (écarts bruts moyens non significativement de 0) au tableau 4.6 confirme que le réseau de neurone permet d'estimer adéquatement les données d'entraînement (écart brut moyen de 1,26% pour le cuivre et 0,76% pour le zinc) et les données de test (écart brut moyen de 4,16% pour le cuivre et 2,20% pour le zinc).

### **4.3.1 Effet de la concentration de $\text{FeSO}_4$ et du temps de séjour sur la solubilisation du CUIVRE**

La figure 4.7 reprend la figure 4.5 (pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de cuivre) mais en identifiant les temps de séjour plutôt que l'appartenance aux groupes d'entraînement ou de test. Des regroupements sont également identifiés par rapport à une forte proportion d'observations avec une même concentration de  $\text{FeSO}_4$ . On remarque sur cette figure que l'augmentation de la concentration de  $\text{FeSO}_4$  apparaît comme le premier facteur qui explique l'augmentation du pourcentage de solubilisation du cuivre. Ainsi, un passage de 1g/l de  $\text{FeSO}_4$  à 3g/l de  $\text{FeSO}_4$  amènerait le pourcentage de solubilisation du cuivre de l'intervalle (10%-40% de solubilisation) à l'intervalle (50%-60% de solubilisation), alors qu'un passage à 4g/l de  $\text{FeSO}_4$  produirait généralement un pourcentage de solubilisation supérieure à 60%. Il faut cependant noter que ces conclusions sont associées à des tendances générales puisque certains points de 4g/l

Figure 4.7. Effet du temps de séjour et de la concentration de FeSO<sub>4</sub> sur la solubilisation du cuivre; données Deux-Montagnes et Valcartier.

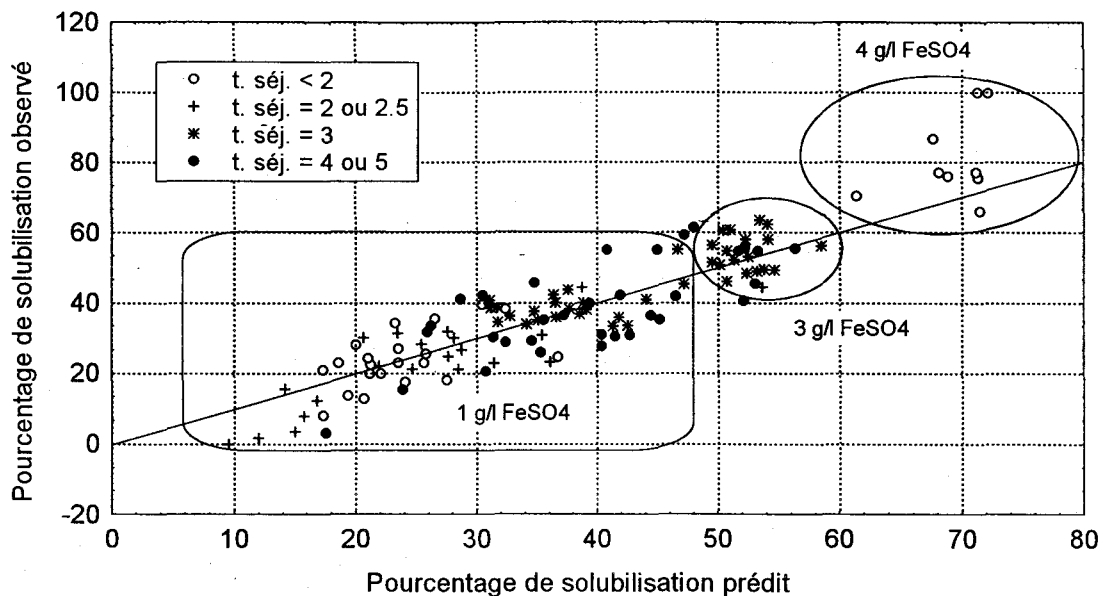
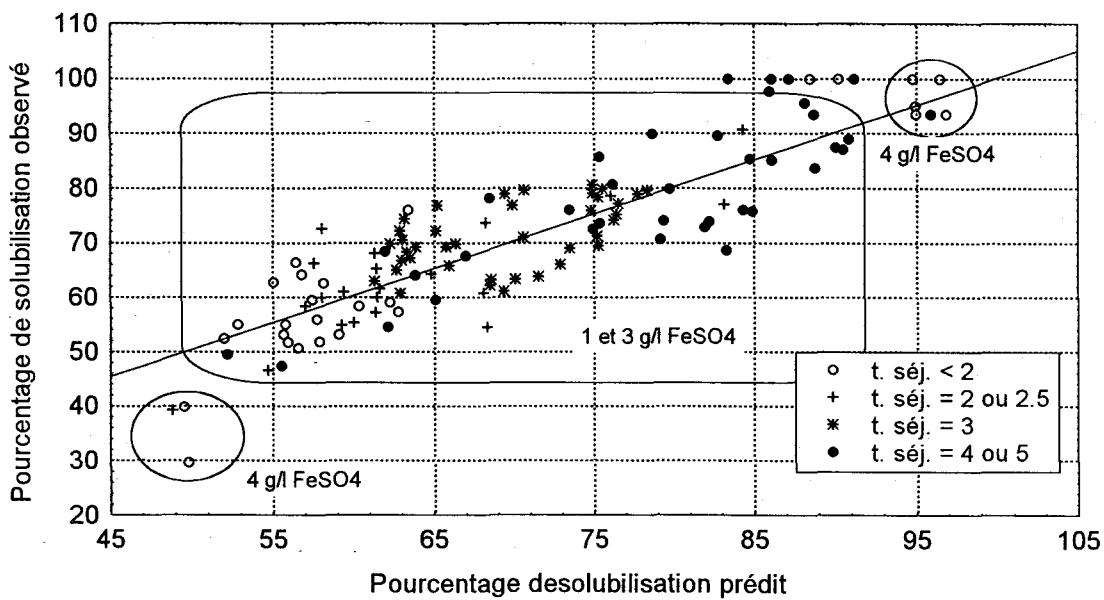


Figure 4.8. Effet du temps de séjour et de la concentration de FeSO<sub>4</sub> sur la solubilisation du zinc; données Deux-Montagnes et Valcartier.



présentent des pourcentages de solubilisation inférieurs à 40%. Il faut aussi noter que l'utilisation de 5g/l de  $\text{FeSO}_4$  ne semble pas permettre une augmentation du pourcentage de solubilisation puisque les points associés à cette concentration se retrouvent dans le nuage de points de 1 et 3 g/l de  $\text{FeSO}_4$ .

En ce qui concerne les temps de séjour, on note une tendance à l'augmentation du pourcentage de solubilisation suite à une augmentation du temps de séjour pour les observations de 1g/l de  $\text{FeSO}_4$ . L'absence d'observations associées à plusieurs temps de séjour pour les plus grandes concentrations de  $\text{FeSO}_4$  empêche de juger de la présence d'une tendance semblable pour ces concentrations de  $\text{FeSO}_4$ .

Il est cependant hors des objectifs du présent rapport d'expliquer les points particuliers de l'effet de l'augmentation de la concentration de  $\text{FeSO}_4$  ou encore de l'augmentation du temps de séjour. On note cependant que les réseaux de neurones peuvent adéquatement tenir compte de ces particularités dans l'estimation des pourcentages de solubilisation tout en présentant des écarts absolus moyens de l'ordre de 7%.

#### **4.3.2 Effet de la concentration de $\text{FeSO}_4$ et du temps de séjour sur la solubilisation du ZINC.**

La figure 4.8 reprend la figure 4.6 (pourcentages de solubilisation prédits et observés pour les concentrations de zinc) mais en identifiant les temps de séjour plutôt que l'appartenance aux groupes d'entraînement ou de test. Des regroupements sont également identifiés par rapport à une forte proportion d'observations avec une même concentration de  $\text{FeSO}_4$ . On remarque sur cette figure que l'effet de la concentration de  $\text{FeSO}_4$  est beaucoup moins marqué que dans le cas de la solubilisation du cuivre. Dans le groupe de 1g/l et 3 g/l de  $\text{FeSO}_4$ , on remarque une tendance à une augmentation du pourcentage de solubilisation suite à une augmentation du temps de séjour. Comme on a deux groupes associés à 4 g/l



de  $\text{FeSO}_4$  et que ces groupes se trouvent de part et d'autre du groupe de 1g/l et 3 g/l de  $\text{FeSO}_4$ , on peut donc croire que le facteur temps de séjour est celui qui explique prioritairement la solubilisation du zinc. On aurait donc deux facteurs différents qui influencent la solubilisation du cuivre et du zinc.

Comme dans le cas du cuivre, on note que les réseaux de neurones peuvent adéquatement tenir compte des particularités des variables d'entrée pour l'estimation des pourcentages de solubilisation du zinc tout en présentant des écarts absolus moyens de l'ordre de 5%.

Les résultats des trois essais de la section 4 nous amènent à croire que les réseaux de neurones peuvent adéquatement être utilisés pour l'estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre et du zinc dans le traitement de biolixiviation des boues usées. La prochaine section utilise de nouveau l'ensemble des données disponibles dans le but de trouver une méthode d'optimisation des paramètres utilisés dans l'établissement des réseaux de neurones.



## 5. Optimisation des paramètres des réseaux de neurones

---

Dans l'établissement des réseaux de neurones, plusieurs paramètres doivent être fixés:

- Nombre de couches cachées
- Nombre de neurones par couche cachées
- Taux d'apprentissage
- Momentum
- Tolérance

Le choix de valeurs différentes pour ces différents paramètres amènera des prévisions différentes pour les pourcentages de solubilisation du cuivre et du zinc. Il est donc important de connaître l'effet possible de ces paramètres. De plus nous cherchons à savoir s'il est possible d'optimiser le choix de ces paramètres dans le cas qui nous intéresse : estimation du pourcentage de solubilisation des métaux dans le processus de biolixiviation des boues usées.

Afin d'étudier les possibilités d'optimisation de la sélection des valeurs des paramètres des réseaux de neurones, une série de simulations est effectuée avec l'ensemble des données disponibles pour Valcartier et Deux-Montagnes; les observations avec 5 g/l de  $\text{FeSO}_4$  et 14 jours de temps de séjour ont cependant été enlevées à cause du faible intérêt qu'ils présentent au point de vue pratique.

L'ensemble de données a donc été utilisé pour établir 90 réseaux de neurones associés à 5 combinaisons de couches cachées et de neurones par couche cachée (0 couche cachée, 1 couche cachée de 10 neurones, 1 couche cachée de 20 neurones, 2 couches cachées de 5 neurones et 2 couches cachées de 10 neurones), 3 taux d'apprentissage (0.1, 0.5 et 1), 3 niveaux de momentum (0.1, 0.5 et 0.9) et 2 niveaux de tolérance (0.15 et 0.20).

Pour chacun des 90 réseaux on a calculé l'écart absolu moyen pour les 130 observations d'entraînement et les 14 observations de test. L'étude de simulation vise à optimiser par rapport à ces écarts absolus moyens. Il faut noter ici que les mêmes observations d'entraînement et de test sont utilisées dans les 90 réseaux de neurones.

## 5.1 Optimisation pour les concentrations de cuivre

Les figures 5.1A,B,C et D présentent les écarts absolus moyens des observations d'entraînement et de test pour la solubilisation du cuivre. Les points associés aux 90 réseaux de neurones sont identifiés par: 1) le nombre de couches cachées et le nombre de neurones par couche cachée dans la figure 5.1A; 2) le taux d'apprentissage dans la figure 5.1B; 3) le niveau de momentum dans la figure 5.1C et; 4) le niveau de tolérance dans la figure 5.1D.

La figure 5.1A montre que les plus faibles écarts absolus moyens sont associés à une couche cachée de 20 neurones. On note cependant que l'écart absolu moyen le plus grand est également associé à une couche cachée de 20 neurones. On remarque également que les réseaux sans couche cachée présentent des écarts absolus moyens plus grands pour les observations d'entraînement (écarts moyens à entre 7% et 8%) comparativement aux observations de test (écarts moyens à environ 6%). Les autres combinaisons de nombre de couches et de nombre de neurones forment un nuage de points avec des écarts moyens entre 6% et 8% pour les observations d'entraînement et entre 6% et 10% pour les données de test. Il n'est donc pas possible de conclure qu'une combinaison est optimale, puisqu'à l'exception du cas de 0 couche cachée, les autres combinaisons présentent toutes des bons et des mauvais résultats. La combinaison 1 couche cachée de 10 neurones présente les résultats les moins variables puisque les écarts moyens varient entre 6% et 8,5% pour les entraînements et entre 6% et 10,5% pour les tests, alors que la combinaison 1 couche

Figure 5.1A. Variation des écarts moyens selon le nombre de couches cachées et le nombre de neurones; solubilisation du cuivre.

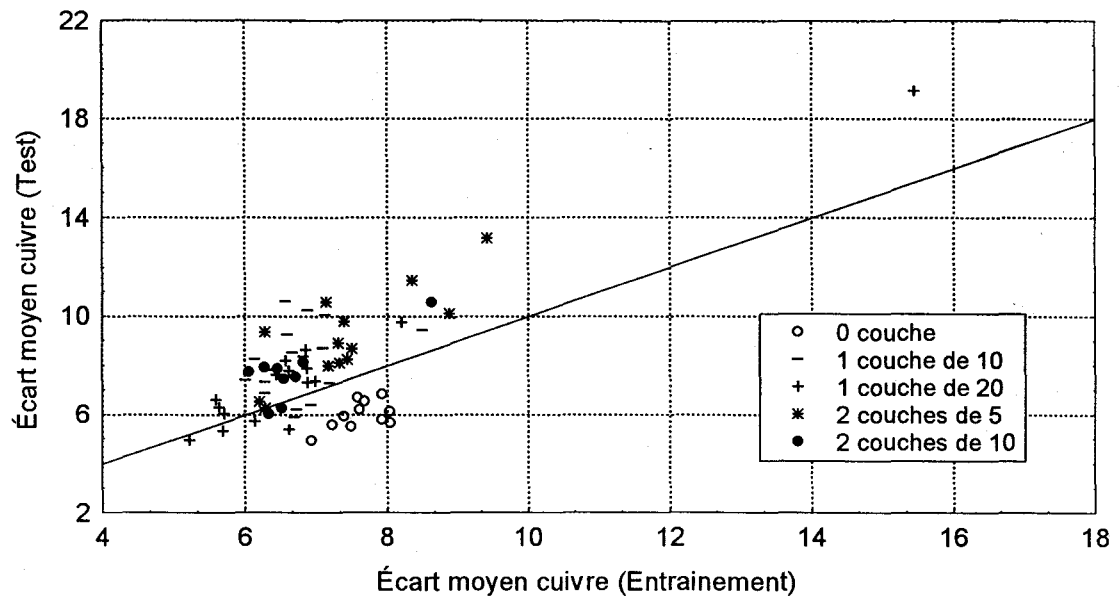
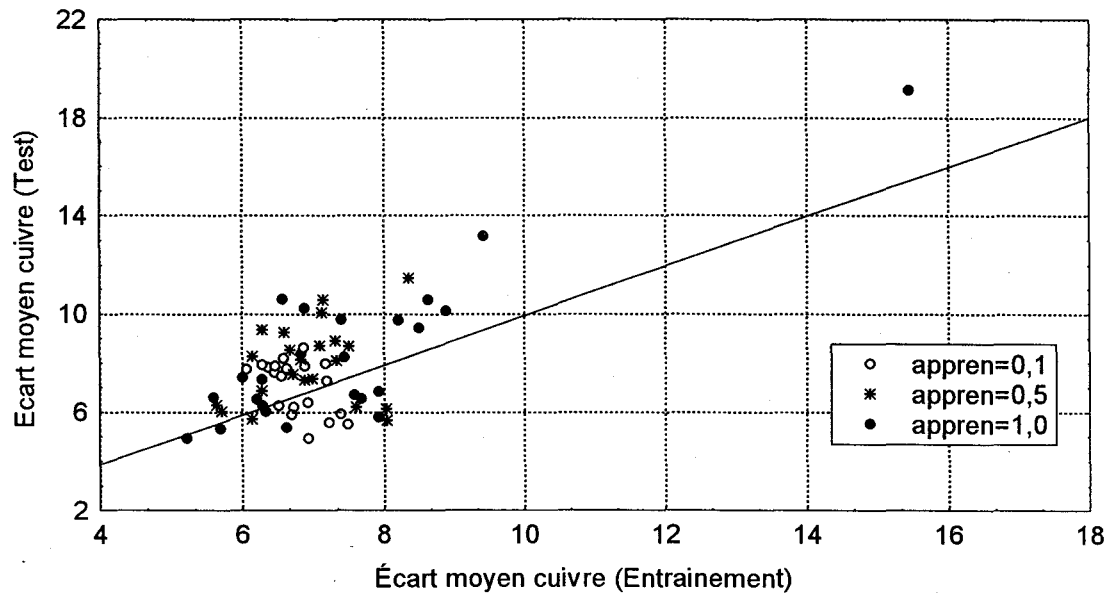


Figure 5.1B. Variation des écarts moyens selon le taux d'apprentissage pour l'estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre.



cachée de 20 neurones présente les résultats les plus variables avec des écarts moyens variant de 5% à 16% pour les entraînements et entre 4,5% et 19% pour les tests.

La figure 5.1B montre que les plus faibles écarts absolus moyens sont associés à un taux d'entraînement de 1. On note cependant que les écarts absolus moyens les plus grands sont également associés à un taux d'entraînement de 1. Les autres réseaux de neurones forment un nuage de points avec des écarts moyens généralement entre 6% et 8% pour les observations d'entraînement et entre 6% et 10% pour les données de test. Tout comme pour le nombre de couches cachées et le nombre de neurones, il semble impossible d'optimiser de façon générale la valeur de ce paramètre. Il est cependant intéressant de voir que le choix d'un taux d'apprentissage faible (0,1) permet de minimiser les différences entre les réseaux de neurones mais ne permettrait pas d'obtenir le meilleur réseau. Le choix d'un taux d'apprentissage élevé (1,0) peut permettre un réseau avec un écart moyen minimal mais les possibilités de surapprentissage peuvent également amener un réseau avec des résultats inacceptables en comparaison avec les autres réseaux.

La figure 5.1C montre que le plus faible écart absolu moyen est associé à un momentum de 0,5 alors que l'écart absolu moyen le plus grand est associé à un momentum de 0,9. Parmi les 6 plus grands écarts absolus moyens suivants, 4 sont associées à un momentum de 0,1. Les autres réseaux de neurones forment un nuage de points avec des écarts moyens généralement entre 6% et 8% pour les observations d'entraînement et entre 6% et 10% pour les données de test. À l'exception des points extrêmes, rien ne laisse croire qu'une optimisation soit possible au niveau du momentum pour les données de solubilisation du cuivre.

La figure 5.1D montre que le plus faible écart absolu moyen est associé à un niveau de tolérance de 0,15. L'écart absolu moyen le plus grand est également associé à un niveau de tolérance de 0,15. Les autres réseaux de neurones forment un nuage de points avec des

Figure 5.1C. Variation des écarts moyens selon le momentum; estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre.

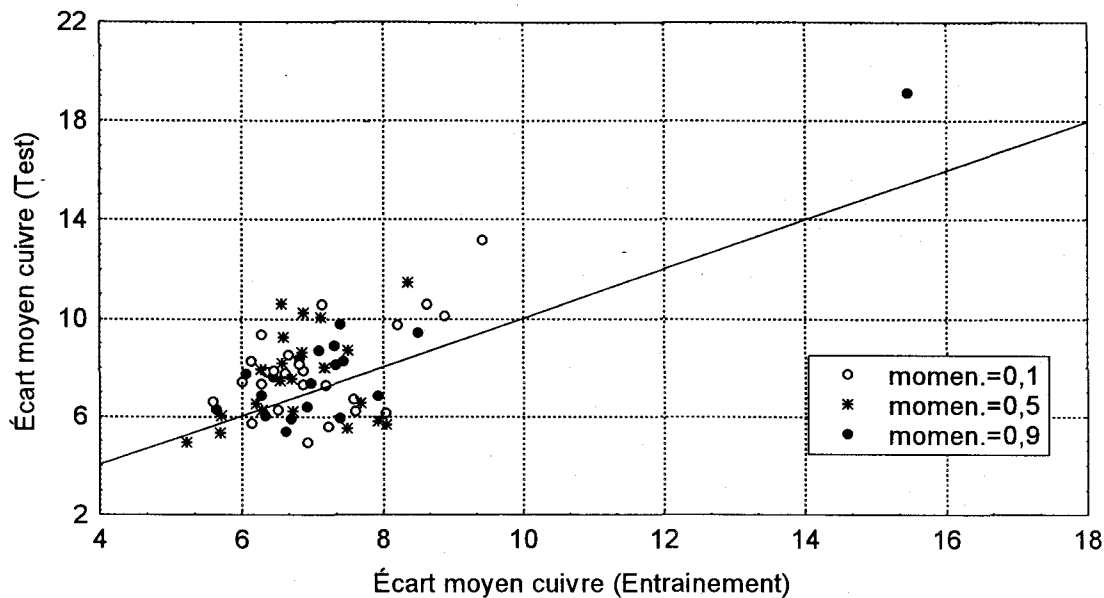
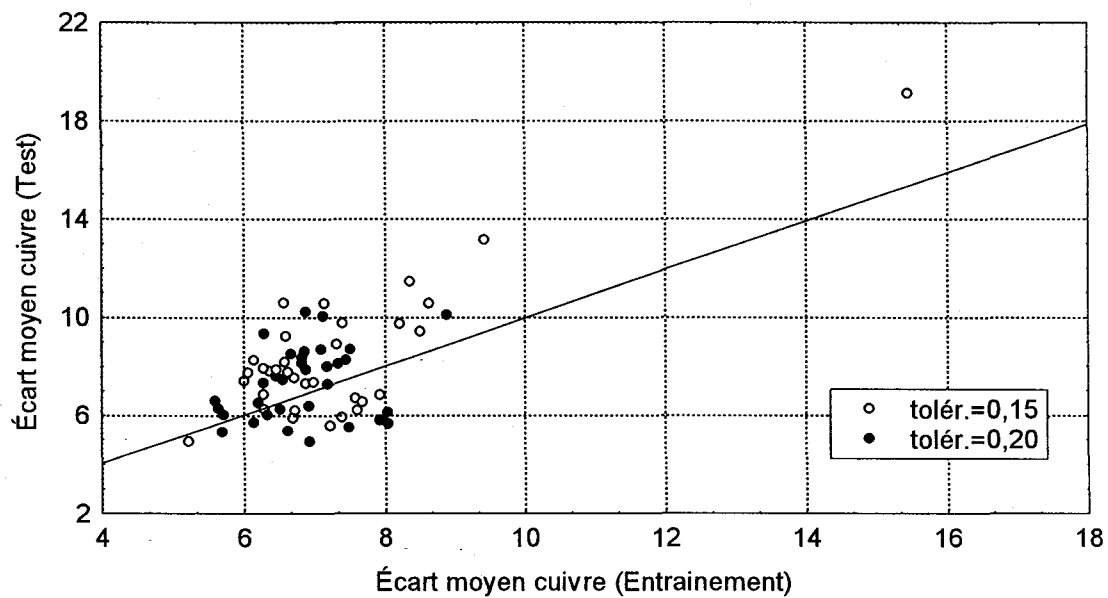


Figure 5.1D. Variation des écarts moyens selon la tolérance; estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre.



écarts moyens généralement entre 6% et 8% pour les observations d'entraînement et entre 6% et 10% pour les données de test. Les résultats sont tout à fait comparables entre les niveaux de tolérance de 0,15 et 0,20.

L'étude des figures 5.1A, B, C et D ne permet donc pas de faire ressortir une optimisation générale pour l'utilisation des réseaux de neurones dans l'estimation du pourcentage de solubilisation du cuivre dans les boues. On peut cependant rappeler pour le cuivre que :

- L'utilisation de 0 couche cachée ne présente pas des résultats adéquats
- L'utilisation d'un grand nombre de neurones semble augmenter la variabilité entre les réseaux de neurones lorsque les autres paramètres sont changés.
- L'utilisation d'un taux d'apprentissage élevé semble augmenter la variabilité entre les réseaux de neurones lorsque les autres paramètres sont changés.
- Les paramètres momentum et tolérance semblent moins affecter les résultats des réseaux de neurones que les paramètres nombre de couches, nombre de neurones et taux d'apprentissage.

## **5.2 Optimisation pour les concentrations de zinc**

Les figures 5.2A,B,C et D présentent les écarts absolus moyens des observations d'entraînement et de test pour la solubilisation du zinc. Les points associés aux 90 réseaux de neurones sont identifiés par: 1) le nombre de couches cachées et le nombre de neurones par couche cachée dans la figure 5.2A; 2) le taux d'apprentissage dans la figure 5.2B; 3) le niveau de momentum dans la figure 5.2C et; 4) le niveau de tolérance dans la figure 5.2D.



La figure 5.2A montre que les plus faibles écarts absolus moyens sont associés à une couche cachée de 20 neurones. On note cependant qu'un des écarts absolus moyens les plus grands est également associé à couche cachée de 20 neurones. On remarque également que les réseaux avec 0 couche cachée présentent des écarts absolus moyens plus grands pour les observations d'entraînement (écarts moyens à entre 7,5% et 8%) comparativement aux observations de test (écarts moyens à entre 6% et 7,5 %). On note finalement que les réseaux avec deux couches cachées de 5 neurones présentent des résultats généralement moins bons que les réseaux avec une couche cachée de 10 ou 20 neurones. Il n'est donc pas possible de conclure qu'une combinaison est optimale, puisque à l'exception du cas de 0 couche cachée, les autres combinaisons présentent toutes des bons et des mauvais résultats. La combinaison 1 couche cachée de 20 neurones présente plusieurs réseaux avec de très faibles écarts absolus moyens (écarts moyens plus petits que 5.5% pour l'entraînement et plus petit que 6% pour le test).

La figure 5.2B montre que les plus grands écarts absolus moyens sont associés à un taux d'entraînement de 1. Les réseaux de neurones associés à un taux d'apprentissage de 0,1 présentent en moyenne des réseaux permettant de mieux estimer le pourcentage de solubilisation du zinc. Il faut donc être plus prudent avec les concentrations de zinc qui seraient donc plus vulnérables à un surapprentissage des réseaux de neurones. En combinant les résultats des figures 5.2A et 5.2B on peut donc croire que l'utilisation d'une couche cachée de 20 neurones combinée à un faible taux d'apprentissage permettrait d'obtenir un réseau avec une bonne estimation du pourcentage de solubilisation du zinc tout en limitant les possibilités de surapprentissage.

Figure 5.2A. Variation des écarts moyens selon le nombre de couches cachées et le nombre de neurones; solubilisation du zinc.

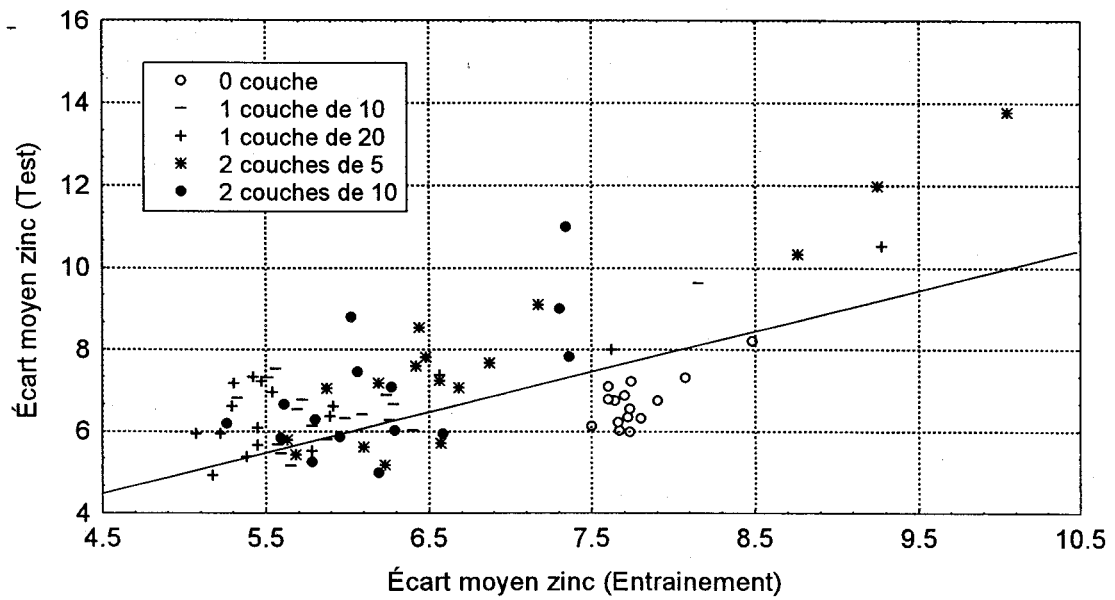
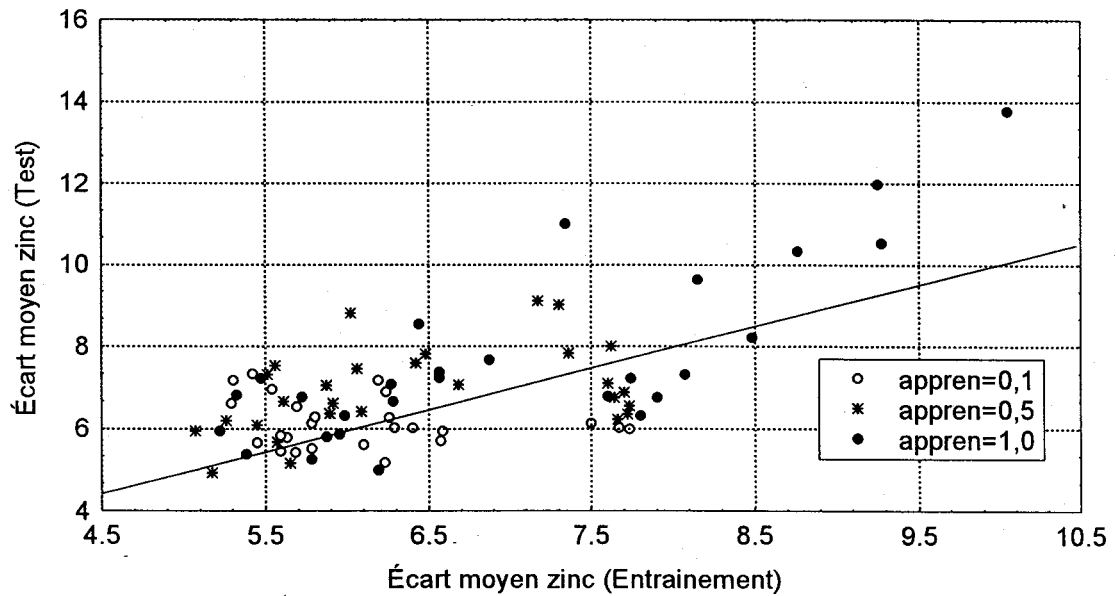


Figure 5.2B. Variation des écarts moyens selon le taux d'apprentissage; estimation du pourcentage de solubilisation du zinc.



La figure 5.2C montre que le plus faible écart absolu moyen est associé à un momentum de 0,1. L'écart absolu moyen le plus grand est également associé à un momentum de 0,1. Parmi les 5 plus grands écarts absolus moyens suivants, 4 sont associées à un momentum de 0,9. Les autres réseaux de neurones avec un momentum de 0,5 ne montrent pas d'écarts extrêmes. À l'exception des points extrêmes, rien ne laisse croire qu'une optimisation soit possible au niveau du momentum pour les données de solubilisation du zinc.

La figure 5.2D montre que la distribution des écarts absolus moyens est homogène d'un niveau de tolérance à l'autre. Les résultats sont donc tout à fait comparables entre les niveaux de tolérance de 0,15 et 0,20 et aucune optimisation n'est possible pour les paramètres sélectionnés.

L'étude des figures 5.2A, B, C et D ne permet donc pas de faire ressortir une optimisation générale pour l'utilisation des réseaux de neurones dans l'estimation du pourcentage de solubilisation du zinc dans les boues. On peut cependant rappeler pour le cuivre que :

- L'utilisation de 0 couche cachée ne présente pas des résultats adéquats
- L'utilisation d'une couche cachée de 20 neurones semble adéquate mais il est nécessaire de ne pas prendre un taux d'apprentissage élevé afin de limiter les possibilités de surapprentissage.
- L'utilisation d'un taux d'apprentissage élevé semble augmenter la variabilité entre les réseaux de neurones lorsque les autres paramètres sont changés.
- Les paramètres momentum et tolérance semblent moins affecter les résultats des réseaux de neurones que les paramètres nombre de couches, nombre de neurones et taux d'apprentissage.

Figure 5.2C. Variation des écarts moyens selon le momentum; estimation du pourcentage de solubilisation du zinc.

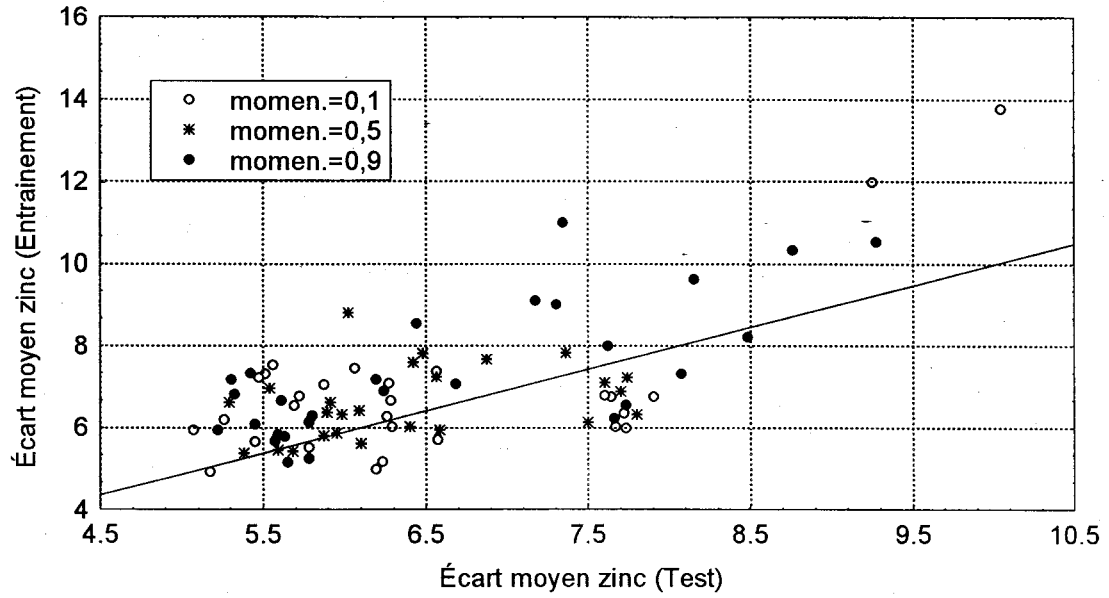
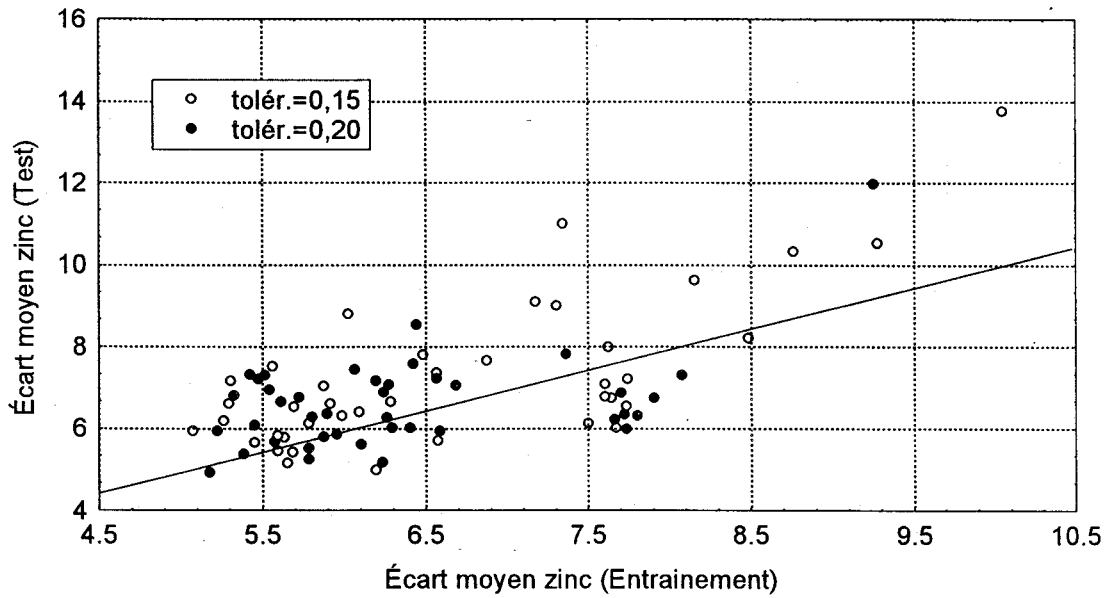


Figure 5.2D. Variation des écarts moyens selon la tolérance; estimation du pourcentage de solubilisation du zinc.



Il est également important de constater que l'effet des paramètres n'est pas identique pour la solubilisation du cuivre et la solubilisation du zinc. En particulier pour les changements du nombre de couches cachées et le nombre de neurones.

### **5.3 Réseaux optimaux pour les données du présent rapport**

Bien qu'il semble impossible d'optimiser, de façon générale, la valeur des paramètres associés aux réseaux de neurones, l'établissement de 90 réseaux différents permet de trouver un réseau optimal pour les données qui nous intéressent. Ainsi pour la solubilisation du cuivre, un réseau avec 1 couche cachée de 20 neurones, un taux d'apprentissage de 1, un momentum de 0,5 et un niveau de tolérance de 0,15 permet d'obtenir un écart absolu moyen de 5,2% pour l'entraînement et de 5,0% pour le test. Pour la solubilisation du zinc un réseau avec 1 couche cachée de 20 neurones, un taux d'apprentissage de 0,5, un momentum de 0,1 et un niveau de tolérance de 0,2 permet d'obtenir un écart absolu moyen de 5,2% pour l'entraînement et de 4,9% pour le test.



## 6 Conclusion

---

Le présent rapport visait à juger de la possibilité d'utiliser les réseaux de neurones pour estimer le pourcentage de solubilisation des métaux (cuivre et zinc) dans les boues provenant des usines d'épuration des eaux usées de Valcartier et de Deux-Montagnes lors d'un traitement de biolixiviation en continu. Les premiers essais présentés montrent que :

- 1) les réseaux de neurones permettent d'estimer de façon adéquate les pourcentages de solubilisation du cuivre et du zinc.
- 2) les réseaux de neurones sont assez versatiles pour faire face à plusieurs situations, mais ils doivent être utilisés avec des données correspondant aux données utilisées dans l'entraînement. En effet, l'utilisation des données de Valcartier sur un réseau entraîné sur les données de Deux-Montagnes montre des résultats inadéquats.
- 3) les réseaux de neurones peuvent être utilisés pour estimer le pourcentage de solubilisation pour un temps de séjour différent des temps de séjour utilisés dans l'entraînement du réseau. Le réseau de neurones utilisera alors l'information disponible sur l'augmentation du pourcentage de solubilisation associée à l'augmentation du temps de séjour. Il faut cependant s'abstenir de travailler avec des temps de séjour extrêmes (plus petit que 1 jour ou plus grand que 5 jours) car la relation entre le temps de séjour et le pourcentage de solubilisation ne semble pas tenir dans ces cas extrêmes.

Une optimisation générale des valeurs des paramètres associés aux réseaux de neurones ne semble pas possible. Cependant, l'établissement de 90 réseaux de neurones pour lesquels on a fait varier les paramètres : nombre de couches cachées, nombre de neurones par couche cachée, taux d'apprentissage, niveau de tolérance et momentum permet les conclusions suivantes :

- L'utilisation de 0 couche cachée ne présente pas des résultats adéquats
- L'utilisation d'une couche cachée de 20 neurones semble adéquate mais il est nécessaire de ne pas prendre un taux d'apprentissage élevé afin de limiter les possibilités de surapprentissage.
- L'utilisation d'un taux d'apprentissage élevé semble augmenter la variabilité entre les réseaux de neurones lorsque les autres paramètres sont changés.
- Les paramètres momentum et tolérance semblent moins affecter les résultats des réseaux de neurones que les paramètres nombre de couches, nombre de neurones et taux d'apprentissage.

Devant les résultats prometteurs des premiers essais de réseaux de neurones pour l'estimation des pourcentages de solubilisation du cuivre et du zinc, nous croyons que leur utilisation devrait être généralisée avec d'autres ensembles de données. L'entraînement sur des données complémentaires donnerait une plus grande versatilité au réseau de neurones et permettrait une utilisation adéquate dans un plus grand nombre de situations.

Une fois l'entraînement fait sur un plus grand ensemble de données on pourra alors juger de l'applicabilité des réseaux de neurones comme système expert dans les usines utilisant les processus de biolixiviation en continu.



## **Bibliographie**

---

Couillard, D., G. Mercier, F. Tran et R.D. Tyagi, 1988. Étude sur la solubilisation biologique des métaux lourds des boues anaérobies d'épuration pour fin de valorisation agricole. Inrs-Eau, Rapport scientifique #265, Université du Québec, 172 pages.

McCulloh, W.S. et W. Pitts, 1943. A logical calculus of ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics* 5:115-133.

Mercier, G. (1988). L'extraction biologique des métaux lourds des boues anaérobies d'épuration. Mémoire de maîtrise, Université du Québec: 287 pages.

Rumelhart, D.E. et J.L. McClelland, 1986. *Parallel distributed processing: Explorations in the microstructure of cognition*. MIT Press, Cambridge, Mass.