

Monsieur VALENTIN Nicolas

**Construction d'un capteur logiciel pour le contrôle
automatique du procédé de coagulation en traitement
d'eau potable**

**Thèse présentée pour l'obtention du grade de Docteur de l'UTC
Spécialité : Contrôle des Systèmes**

Soutenue le 20 Décembre 2000 devant le jury composé de :

**MM. DUBUISSON B. (Président)
BLOCH G. (Rapporteur)
CANU S. (Rapporteur)
FOTOOHI F.
DENOEUX T. (Directeur de thèse)**

Ce travail a été réalisé au CIRSEE,
Centre International de Recherche sur l'Eau et l'Environnement,
dans le cadre d'une convention CIFRE
avec la Lyonnaise des Eaux
et sous la tutelle de
l'Unité de Recherche Associée CNRS 817 Heudiasyc,
Heuristique et Diagnostic des Systèmes Complexes.

Cette thèse s'inscrit également dans un des thèmes de recherche du SIME,
Systèmes Intelligents appliqués aux Métiers de l'Eau,
laboratoire commun entre la
Lyonnaise des Eaux, l'UTC, et le CNRS.

Remerciements

Que Mr Denoeux, Professeur à l'Université de Technologie de Compiègne, trouve ici le témoignage de ma profonde reconnaissance. Ses encouragements, mais aussi ses critiques, ont largement contribué à l'aboutissement de cette thèse. A travers ces quelques années, j'ai pu apprécier le directeur de thèse tout autant que la personne.

Je tiens également à remercier Mr Fotoohi, directeur du Pôle Informatique Technique du CIRSEE, pour l'accueil qu'il m'a réservé au sein de son établissement. Ses encouragements, sa sensibilisation à la recherche et à l'innovation ont permis la réalisation de cette thèse. C'est aussi grâce à toi, Farrokh, si je suis arrivé au bout de cette thèse. Je tiens tout particulièrement à te remercier de ta confiance tout au long de ces années de collaboration et de la liberté, l'autonomie que tu m'as offert dans la conduite de mes travaux.

Mes remerciements vont également aux membres du jury. Merci à vous Mr Dubuisson, Professeur à l'université de Technologie de Compiègne, d'avoir accepté d'assurer la responsabilité de président de jury. Je tiens également à remercier Mr Canu, Professeur à l'INSA de Rouen, d'avoir accepté d'en être le rapporteur, fonction toujours lourde de responsabilité et de labeur. Je tiens à remercier également Mr Bloch, Maître de Conférence à l'ESSTIN (Ecole des Sciences et Technique de l'Ingénieur de Nancy), d'avoir accepté d'évaluer mon travail. C'est à vous que je dois mes premiers pas dans la recherche sur les réseaux de neurones.

Mes remerciements s'adressent aussi aux personnels de l'usine de Viry-Chatillon, pour leurs disponibilités et leur aide quant à la compréhension des procédés mis en jeu sur l'usine de traitement d'eau potable. Cette thèse ne serait certainement pas allée aussi loin sans leur aide précieuse.

Enfin je n'oublie pas tous ceux, du Pole Informatique Technique (ex CITI) qui ont rendu ces années de thèse agréables et sympathiques. Je n'oublierais jamais cette ambiance qui règne dans les locaux du CITI à Compiègne. Je tiens à remercier tout le monde: les collègues qui ont suivi d'autres directions comme ceux qui sont restés fidèles au CITI. C'est dans un entourage stimulant et enrichissant, sur le plan professionnel et personnel, que j'ai passé ces quelques années dont l'aboutissement est ce travail.

Je n'oublie pas mes proches, sans qui cette thèse n'aurait peut-être jamais aboutie. Je les remercie de m'avoir soutenu durant la phase finale de rédaction qui fut longue et souvent assez décourageante.

Table des Matières

| | |
|---|-----------|
| INTRODUCTION..... | 1 |
| CHAPITRE 1 PRINCIPES GÉNÉRAUX DE TRAITEMENT DES EAUX | 5 |
| 1. INTRODUCTION..... | 6 |
| 2. PRÉ-TRAITEMENT | 7 |
| 3. PRÉ-OXYDATION | 8 |
| 4. CLARIFICATION | 8 |
| 4.1 Introduction..... | 8 |
| 4.2 Coagulation-Floculation | 9 |
| 4.2.1 Les particules | 9 |
| 4.2.2 But de la coagulation-floculation..... | 10 |
| 4.2.3 La coagulation..... | 11 |
| 4.2.4 La floculation..... | 12 |
| 4.3 La séparation solide-liquide | 13 |
| 4.4 La filtration | 14 |
| 4.4.1 Définition..... | 14 |
| 4.4.2 Critères de choix d'un filtre | 14 |
| 4.4.3 Evolution de la perte de charge et de la turbidité de l'eau filtrée | 14 |
| 4.4.4 Lavages..... | 15 |
| 5. DÉSINFECTION | 15 |
| 5.1 Procédés de désinfection..... | 15 |
| 5.1.1 Les désinfectants | 15 |
| 5.1.2 Le temps de contact..... | 16 |
| 5.1.3 La concentration des oxydants | 16 |
| 5.2 Paramètres de contrôle..... | 17 |
| 6. TRAITEMENT FINAL : MISE À L'ÉQUILIBRE CALCO-CARBONIQUE..... | 17 |
| 6.1 Définitions | 17 |
| 6.2 Importance de l'équilibre calco-carbonique..... | 18 |
| 6.3 Comment mettre l'eau à l'équilibre calco-carbonique..... | 18 |
| 7. CONCLUSION..... | 19 |
| BIBLIOGRAPHIE | 20 |
| CHAPITRE 2 INSTRUMENTATION, RÉGULATION ET SUPERVISION..... | 23 |
| 1. INSTRUMENTATION | 24 |
| 1.1 Généralités | 24 |
| 1.2 Principes de mesures des principaux paramètres..... | 24 |
| 1.2.1 Mesure des paramètres usuels | 24 |
| 1.2.2 Mesure des paramètres spécifiques..... | 25 |
| 1.3 Qualité des capteurs..... | 26 |
| 1.3.1 Sensibilité, précision, gamme de mesure | 26 |
| 1.3.2 Fiabilité, environnement et dérive | 27 |
| 2. AUTOMATISATION | 27 |

| | | |
|-------|--|----------------------------|
| 2.1 | Généralités | 27 |
| 2.2 | Le contrôle automatique en traitement de l'eau..... | 28 |
| 3. | LE CONTRÔLE AUTOMATIQUE DU PROCÉDÉ DE COAGULATION | 30 |
| 3.1 | Méthode actuelle : essais de traitabilité en laboratoire..... | 30 |
| 3.2 | | Contrôle automatique 30 |
| 3.2.1 | Régulation en aval basée sur le résultat de l'adjonction du coagulant à l'eau brute..... | 30 |
| 3.2.2 | Modélisation du procédé de coagulation en utilisant des paramètres descripteurs de la qualité de l'eau | 32 |
| 4. | SUPERVISION..... | 34 |
| 4.1 | L'acquisition des données | 34 |
| 4.1.1 | Les types d'acquisition | 34 |
| 4.1.2 | Amélioration de la qualité..... | 35 |
| 4.2 | Supervision ou Gestion Technique Centralisée (GTC)..... | 35 |
| 4.2.1 | Fonctions temps réel..... | 35 |
| 4.2.2 | Fonctions temps différé | 36 |
| 4.3 | Aide à la décision..... | 36 |
| 4.3.1 | Aide à la maintenance..... | 36 |
| 4.3.2 | Aide à la conduite..... | 37 |
| 5. | CONCLUSION..... | 38 |
| | BIBLIOGRAPHIE | 39 |
| | CHAPITRE 3 PRÉ-TRAITEMENT DES DONNÉES : VALIDATION ET RECONSTRUCTION..... | 43 |
| 1. | PRINCIPE GÉNÉRAL..... | 44 |
| 2. | VALIDATION MONO-PARAMÈTRE..... | 44 |
| 3. | VALIDATION MULTI-PARAMÈTRES..... | 45 |
| 3.1 | Approche générale..... | 45 |
| 3.2 | Les cartes de Kohonen..... | 45 |
| 3.2.1 | Historique | 45 |
| 3.2.2 | Les différents problèmes d'apprentissage..... | 46 |
| 3.3 | Le modèle SOM | 47 |
| 3.3.1 | Apprentissage par compétition..... | 47 |
| 3.3.2 | Description du modèle SOM..... | 49 |
| 3.3.3 | L'algorithme SOM | 51 |
| 3.4 | Les critères de qualité de la représentation..... | 53 |
| 3.4.1 | Erreur de distribution..... | 54 |
| 3.4.2 | Erreur de discrétisation..... | 54 |
| 3.4.3 | Préservation du voisinage | 55 |
| 3.5 | Applications | 57 |
| 3.6 | Application à la validation des données..... | 58 |
| 3.6.1 | Principe de la méthode..... | 58 |
| 3.6.2 | Définition du seuil α | 59 |
| 4. | APPLICATION AU TRAITEMENT DE DONNÉES MANQUANTES ET INVALIDES | 60 |
| 4.1 | Principe de la méthode..... | 60 |
| 4.2 | Estimation des données manquantes..... | 60 |
| 5. | CONCLUSION..... | 62 |
| | BIBLIOGRAPHIE | 63 |

| | |
|--|-----------|
| CHAPITRE 4 LES PERCEPTRONS MULTICOUCHES..... | 69 |
| 1. INTRODUCTION : NOTION DE NEURONE FORMEL..... | 70 |
| 2. LES RÉSEAUX NEURONAUX MULTICOUCHES..... | 71 |
| 2.1 Architecture..... | 71 |
| 2.2 Différents types de neurones..... | 71 |
| 2.3 Capacité d'approximation des PMCs..... | 74 |
| 3. APPRENTISSAGE D'UN RÉSEAU DE NEURONES..... | 75 |
| 3.1 Algorithme de rétropropagation..... | 75 |
| 3.2 Variantes de l'algorithme de RP..... | 78 |
| 3.2.1 Fonctions coût..... | 79 |
| 3.2.2 Introduction d'un terme de moment..... | 79 |
| 3.2.3 Taux d'apprentissage adaptatifs..... | 79 |
| 3.2.4 Autres procédures d'optimisation..... | 80 |
| 4. THÉORIE DE LA GÉNÉRALISATION..... | 81 |
| 5. CONTRÔLE DE LA COMPLEXITÉ..... | 83 |
| 5.1 Introduction..... | 83 |
| 5.2 Méthode d'élagage..... | 84 |
| 5.2.1 Principe de la méthode OBD..... | 84 |
| 5.2.2 Algorithme d'élagage..... | 85 |
| 6. GÉNÉRATION D'INTERVALLE DE CONFIANCE PAR BOOTSTRAP..... | 86 |
| 6.1 Le ré-échantillonnage par Bootstrap..... | 86 |
| 6.2 Application à la génération d'intervalles de prédiction..... | 87 |
| 7. CONCLUSION..... | 88 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 89 |
| CHAPITRE 5 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS..... | 95 |
| 1. CADRE DE L'APPLICATION : LE SITE DE VIRY-CHATILLON..... | 96 |
| 2. LES DONNÉES DE VIRY-CHATILLON..... | 97 |
| 2.1 Description sommaire des données..... | 97 |
| 2.2 Analyse et pré-traitement des données..... | 98 |
| 3. VALIDATION ET RECONSTRUCTION DES DONNÉES..... | 101 |
| 3.1 Résultats des cartes de Kohonen..... | 101 |
| 3.2 Application à la validation de données et à la reconstruction des données manquantes et invalides..... | 103 |
| 3.2.1 Définition du seuil α | 104 |
| 3.2.2 Cas 1 : Simulation d'un défaut sur le pH..... | 104 |
| 3.2.3 Cas 2 : Simulation d'un défaut sur l'oxygène dissous..... | 104 |
| 3.2.4 Cas 3 : Simulation de deux défauts consécutifs..... | 104 |
| 3.2.5 Conclusion..... | 108 |
| 4. MODÉLISATION DU PROCÉDÉ DE COAGULATION..... | 108 |
| 4.1 Construction de la base d'apprentissage..... | 108 |
| 4.2 Apprentissage du modèle..... | 110 |
| 4.3 Intervalle de confiance..... | 112 |
| 5. APPLICATION DU CAPTEUR LOGICIEL..... | 113 |

| | |
|--|------------|
| 6. CONCLUSION..... | 116 |
| BIBLIOGRAPHIE | 117 |
| CHAPITRE 6 PRÉSENTATION DE L'IMPLÉMENTATION SUR SITE | 119 |
| 1. DESCRIPTION GÉNÉRALE..... | 120 |
| 2. SEINE..... | 121 |
| 2.1 La carte de Kohonen..... | 121 |
| 2.2 La station d'alerte d'Evry..... | 123 |
| 3. USINE DE VIRY..... | 124 |
| 3.1 Clarification | 124 |
| 3.2 Qualité Refoulement..... | 125 |
| 4. CONCLUSION..... | 126 |
| CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES..... | 129 |
| ANNEXE A A NEURAL NETWORK-BASED SOFTWARE SENSOR FOR COAGULATION CONTROL IN A WATER TREATMENT PLANT..... | 131 |
| ABSTRACT | 131 |
| 1. INTRODUCTION..... | 131 |
| 2. PROBLEM DESCRIPTION | 132 |
| 2.1 Overview of water treatment operations | 132 |
| 2.2 Coagulation control | 133 |
| 3. DATA VALIDATION AND RECONSTRUCTION..... | 133 |
| 3.1 General Approach..... | 133 |
| 3.2 Multi-parameter Data Validation and Reconstruction | 134 |
| 3.2.1 Basic Approaches..... | 134 |
| 3.2.2 Principles of SOM..... | 134 |
| 3.2.3 Application to Sensor Failure Detection and Reconstruction | 135 |
| 4. PREDICTION OF COAGULANT DOSAGE..... | 136 |
| 4.1 The model | 136 |
| 4.2 Computation of confidence bounds | 137 |
| 5. RESULTS..... | 138 |
| 6. CONCLUSION..... | 139 |
| 7. REFERENCES | 139 |
| 8. FIGURES..... | 141 |
| 9. TABLES..... | 148 |
| ISTE DES FIGURES | 151 |
| LISTE DES TABLES..... | 153 |

Introduction

L'établissement de modèles du comportement des systèmes est un problème incontournable en automatique, aussi bien en ce qui concerne la conduite que le diagnostic. Les systèmes industriels étant de plus en plus complexes, le contrôle automatique des procédés est primordial afin de maintenir une bonne qualité de service. Ces deux considérations ont motivé d'importants efforts dans le développement de méthodes de contrôle et de surveillance automatique durant ces dernières années. Le présent travail s'inscrit dans ce courant de recherche, en proposant une nouvelle approche pour l'automatisation du dosage de coagulant en traitement d'eau potable.

Description du problème

Une usine de production d'eau potable a deux fonctions clairement identifiées : satisfaire la demande en eau et assurer un niveau de qualité d'eau élevé et uniforme. Cela nécessite la surveillance permanente des divers procédés de traitement, ainsi que des paramètres relatifs à la qualité de l'eau en entrée, aux différentes étapes du traitement et en sortie de la station. Le procédé de coagulation est l'une des étapes les plus importantes dans le traitement des eaux de surface (90 % des usines sont concernées). Le contrôle et la surveillance automatique de ce procédé sont essentiels pour atteindre trois objectifs : la maîtrise de la qualité de l'eau traitée en sortie, le contrôle du coagulant résiduel en sortie (réglementation de plus en plus stricte relative à la présence de coagulant résiduel dans l'eau traitée) et la diminution des contraintes et des coûts de fonctionnement.

En traitement de l'eau, comme dans beaucoup d'autres domaines, le contrôle efficace des procédés est fortement dépendant de la précision et de la fiabilité des capteurs. Etant donné la grande variabilité de l'entrée du système (eau brute), et l'hétérogénéité des données délivrées par des capteurs de principes physiques très différents, les problématiques de validation et de reconstruction de données seront au centre de ce mémoire.

De nombreux paramètres du procédé peuvent être mesurés en continu à l'aide de capteurs physiques relativement simples et peu onéreux. A l'opposé, la détermination de certaines quantités exige des analyses de laboratoire coûteuses qui ne peuvent être exécutées en ligne. Une telle information de « haut niveau » peut être obtenue à partir d'un modèle statistique désigné sous le nom de « capteur logiciel ». Dans certains cas, la connaissance explicite du système permet la constitution de modèles de comportement déterministes. Compte tenu de la complexité des phénomènes physiques et chimiques impliqués dans les usines de traitement d'eau potable, il n'existe actuellement que très peu de modèles utilisables. Lorsque l'on ne dispose que d'un historique relatif aux mesures effectuées sur le système, on peut envisager une approche basée sur les réseaux de neurones artificiels (RNA). Cette approche consiste à mettre en œuvre des techniques d'apprentissage permettant de construire un modèle approprié à partir d'une base de vecteurs de référence.

Validation et reconstruction des données

Dans une application réelle, les connaissances dont on dispose sont en général imparfaites. Certaines variables pertinentes du système sont souvent partiellement manquantes ou peu fiables. Cette étape de traitement de l'incertitude et de l'imprécision des données d'entrées est fondamentale pour la précision des algorithmes ultérieurs d'estimation des sorties d'un système à partir de ces données. Les causes de ces imperfections peuvent être multiples. L'acquisition d'information, au moyen de capteurs, est généralement sujette à des erreurs ou à des imprécisions. La fiabilité des capteurs peut entraîner une incertitude dans les données. Mais

cette incertitude peut également être générée par le conflit entre plusieurs paramètres. Comment peut-on détecter ce type d'incertitude dans les données et invalider ces valeurs ?

Il existe un cas particulier où le problème de la détection ne se pose pas mais où l'imprécision est totale : la cas de la donnée manquante. Dans ce cas, le vecteur de paramètre d'entrée est incomplet. Les capteurs, servant à l'acquisition de ces paramètres, peuvent être en panne ou en maintenance. Que l'imprécision sur les données soit grande ou totale, comment peut-on traiter ce type de problème ? Peut-on envisager de reconstruire ces valeurs manquantes ou invalides en s'appuyant sur les corrélations avec d'autres paramètres ? La réponse à ces questions constituent l'un des objectifs de cette thèse.

Les réseaux de neurones (RNA)

Le domaine du connexionnisme a suscité ces dernières années un grand intérêt de la part de la communauté aussi bien scientifique qu'industrielle. Les RNAs ont été appliqués dans de nombreux domaines, tels que le contrôle des systèmes, la médecine, la robotique, etc. Les réseaux de neurones ont suscité un vif intérêt vraisemblablement à cause de leur grande flexibilité qui permet de réaliser des modèles très divers. En effet, ils offrent la possibilité de faire de l'inférence statistique et de l'extraction de règles à partir des données numériques sans se fixer un modèle particulier a priori : ils constituent donc une méthode d'inférence non-paramétrique.

Le regain d'intérêt pour les RNAs coïncide avec la redécouverte, en 1985 par Rumelhart, Hinton et Williams, de l'algorithme de rétropropagation du gradient (RP) qui permet de réaliser l'apprentissage de réseaux de neurones multicouches. Depuis une quinzaine d'années, l'algorithme de RP a suscité de nombreux travaux, et de nouvelles variantes ont été proposées pour accélérer l'apprentissage et améliorer la capacité de généralisation des réseaux. Outre leur succès dans les applications, l'intérêt pour les RNAs a été conforté un peu plus tard par l'apparition de résultats théoriques concernant les propriétés d'approximation des perceptrons multicouches (PMCs). Ces résultats montrent, en particulier, qu'un PMC est un approximateur universel, dans le sens où il est capable d'approximer avec une précision arbitrairement grande tout élément d'une classe très large de fonctions, étant donné un nombre suffisant de neurones cachés.

Les résultats théoriques sur l'approximation universelle ne sont, pour l'essentiel, que des preuves d'existence. Ils laissent totalement ouverte la question de la détermination de l'architecture : étant donné un problème particulier, comment détermine-t-on une architecture convenable, sinon optimale ? Peut-on déterminer une mesure d'incertitude attachée à la prédiction ? Ces questions sont essentielles dans les applications, et sont abordées dans notre travail au travers d'une méthodologie que nous avons essayé de rendre aussi rigoureuse que possible.

Contribution de la thèse

Nous décrivons dans ce mémoire le problème de la construction d'un « capteur logiciel » pour la détermination en ligne de la dose optimale de coagulant en fonction de différentes caractéristiques de la qualité de l'eau brute telles que la turbidité, le pH, la conductivité, etc.

L'innovation de ce travail réside principalement dans l'intégration de différentes techniques dans un système global permettant : la validation et la reconstruction de données, la prévision de la dose de coagulant, et l'analyse des incertitudes. Etant donné la forte variabilité des entrées et la fiabilité des capteurs disponibles, un objectif important pour un tel système est en effet la robustesse par rapport aux défaillances possibles des capteurs ou à des caractéristiques inattendues de l'eau brute, dues à des pollutions accidentelles par exemple. Dans notre système,

une telle robustesse est obtenue par une architecture modulaire à deux niveaux : un premier niveau de pré-traitement permet le rejet des mesures invalides et la reconstruction des données manquantes ; un deuxième niveau de prévision effectue la détermination de la quantité optimale de coagulant à partir des caractéristiques de l'eau brute et l'analyse de l'incertitude attachée à cette prédiction (Figure I-1).

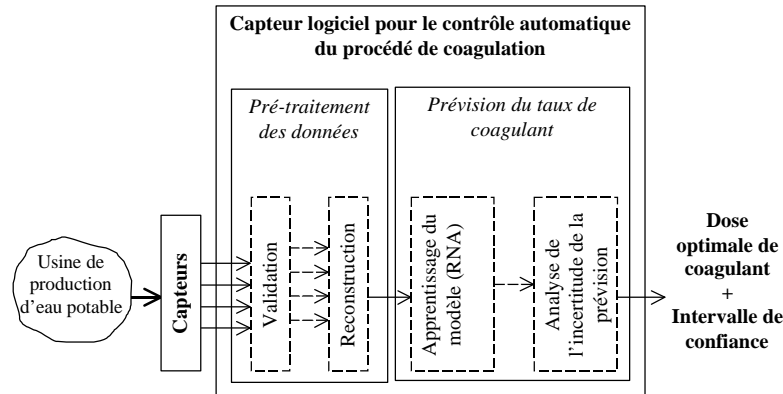


Figure I-1 : Structure du système pour le contrôle automatique du procédé de coagulation.

De plus, une contrainte importante de ce travail est d'offrir la possibilité d'installer le système à faible coût sur plusieurs sites. Ceci impose la mise en place d'une méthodologie facilement reproductible, pour concevoir et construire le capteur logiciel automatiquement à partir d'une nouvelle base d'apprentissage. Cette méthodologie doit inclure la mise au point des modules de pré-traitement de données et de prévision du taux de coagulant.

Plan du mémoire

Ce mémoire est divisé en trois parties distinctes. La première partie est consacrée à une introduction générale et à une description du problème (chapitres 1 et 2). La deuxième partie décrit la méthodologie utilisée pour la construction du capteur logiciel (chapitres 3 et 4). La dernière partie présente la mise en œuvre de ce système sur une usine de production d'eau potable (chapitres 5 et 6).

Dans le chapitre 1, nous étudierons les différents procédés mis en jeu sur une chaîne de traitement d'eau potable. Le chapitre 2 s'attachera à décrire les différents problèmes d'automatisation rencontrés sur une usine de production d'eau potable. Nous détaillerons les différentes approches envisageables pour le contrôle automatique du procédé de coagulation, dont l'optimisation est l'objectif principal de cette thèse.

Le premier module du système est présenté dans le chapitre 3. Ce module, dédié au pré-traitement des données, est basé principalement sur l'utilisation des cartes auto-organisatrices de Kohonen. Nous décrivons le modèle de Kohonen puis son application à la détection et à la reconstruction de défauts de capteur. L'utilisation des PMCs pour le deuxième module, consacré à la prédiction du taux de coagulant, est abordé dans le chapitre 4. Nous décrivons le modèle proprement dit ainsi que la méthode utilisée pour l'apprentissage et la sélection de l'architecture optimale du réseau. Nous présentons une méthode, basée sur l'utilisation du ré-échantillonnage par bootstrap, pour la génération d'une mesure d'incertitude sur la prédiction.

Dans le chapitre 5, nous nous attacherons à présenter les résultats sur des données réelles. Il s'agit d'étudier le cadre d'application et les données recueillies. Pour terminer, le chapitre 6 dresse un bilan de l'implémentation du système sur site.

Chapitre 1

Principes généraux de traitement des eaux

Avant de traiter plus particulièrement de la façon dont nous avons utilisé les méthodes connexionnistes pour la validation de données continues et la modélisation d'un procédé de traitement, nous allons présenter, dans ce chapitre, une usine de production d'eau potable d'une manière générale, tout en détaillant plus spécifiquement le procédé sur lequel porte notre étude.

Nous décrirons une chaîne élémentaire de traitement d'eau potable. Nous présenterons la filière la plus complète et la plus courante pour le traitement des eaux de surface, sans entrer dans les détails, particulièrement fins, des procédés. Toutefois, nous nous attarderons plus longuement sur le procédé de coagulation, dont l'optimisation est l'objet principal de cette thèse.

Nous étudierons dans un premier temps le procédé de pré-traitement permettant d'éliminer l'ensemble des éléments de nature à perturber les traitements ultérieurs. Nous évoquerons le procédé de pré-oxydation constituant la première barrière face aux matières organiques en solution. Ensuite, nous aborderons la clarification qui représente l'étape la plus importante de la chaîne de traitement et que l'on va retrouver dans la majorité des usines de traitement d'eau potable. Nous présenterons également l'étape de désinfection qui permet l'élimination des derniers micro-organismes pathogènes présents dans l'eau. Pour conclure, nous décrirons la dernière étape de la chaîne de traitement qui correspond à la mise à l'équilibre calco-carbonique de l'eau.

1. Introduction

Qu'elles soient d'origine souterraine ou superficielle, les eaux utilisées pour l'alimentation humaine sont rarement consommables telles quelles. Il est souvent nécessaire de leur appliquer un traitement plus ou moins sophistiqué, ne serait-ce qu'une désinfection dans le cas des eaux souterraines.

Si l'on reprend le cycle de l'eau rappelé schématiquement sur la Figure 1-1, on constate que la « vie humaine » se situe dans une zone relativement courte du cycle.

Il faut insister sur le fait que le problème de l'eau n'est pas un problème de quantité, mais un problème de flux [7]. La quantité d'eau à la surface de la terre est constante, mais malheureusement 97 % de cette eau est salée ; ce qui nous intéresse, c'est le débit d'eau à notre disposition entre le moment où elle tombe du ciel et le moment où elle retourne à la mer.

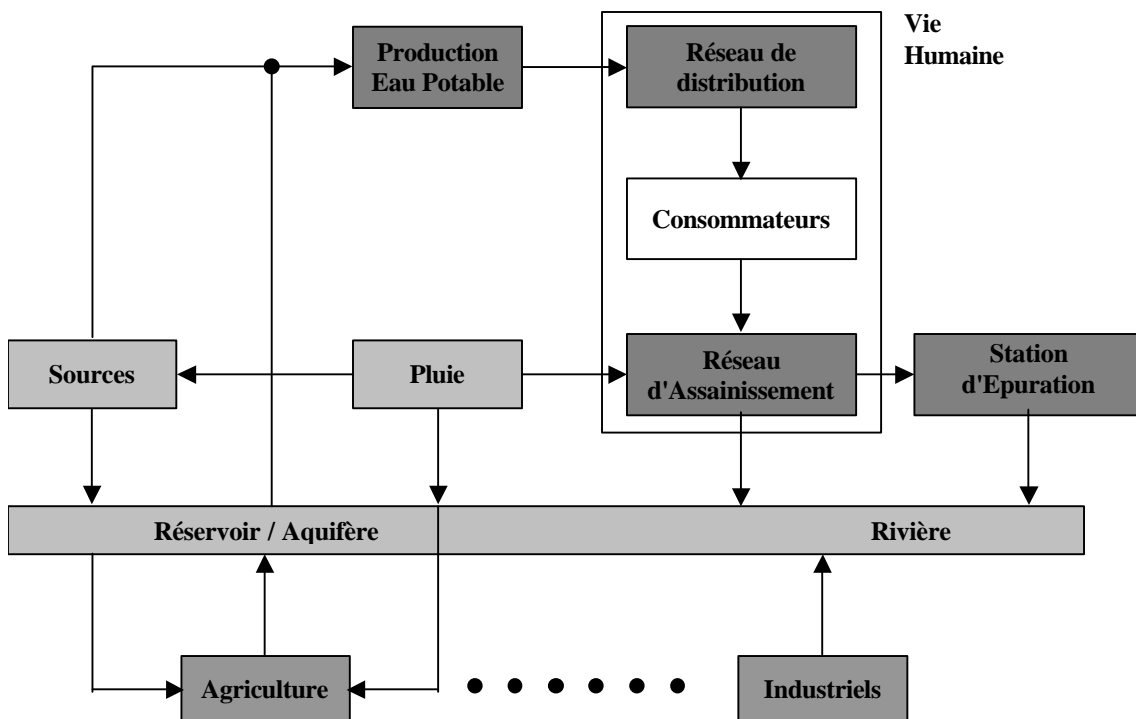


Figure 1-1 : Cycle de l'eau

Lorsque la quantité d'eau est insuffisante, l'enjeu de la gestion des eaux est d'augmenter le débit disponible dans la zone du cycle utile aux activités humaines. Il s'agira dans tous les cas de prélever de l'eau dans l'une des portions du cycle et de ramener celle-ci à l'entrée de la zone utile, c'est-à-dire en entrée d'une usine de production d'eau potable.

On pourra de cette façon prélever de l'eau de surface relativement dégradée pour l'amener à un état de potabilité suffisant, ou même, dans les cas extrêmes, utiliser de l'eau usée et la transformer directement ou indirectement en eau potable. En résumé, si l'on admet l'idée que le cycle de l'eau peut avoir une durée moyenne de trois mois (en pratique le cycle peut durer d'un jour à 20 000 ans), le rôle des traiteurs d'eau est d'accélérer le cycle normal d'épuration, ce cycle étant tout simplement un cycle de distillation solaire suivie de condensation.

Dans cette section, nous parlerons plus spécialement du traitement des eaux de surface, mais il est certain que certaines eaux souterraines doivent également être traitées. Suivant les

circonstances, ces deux types de traitement sont semblables ou différents, mais de toute façon ils présentent des points communs.

La transformation d'une eau de surface en une eau propre à la consommation nécessite de faire appel à un ensemble de procédés de traitement extrêmement divers qu'il faut assembler dans un ordre déterminé afin de fournir un produit fini conforme aux normes de potabilité. L'efficacité du traitement adopté dépendra, de plus, de la façon dont sera conduite l'exploitation de l'usine. Pour atteindre l'objectif souhaité, l'exploitant devra d'une part respecter certains principes élémentaires pour assurer le contrôle du processus de traitement et le contrôle de l'eau traitée, et d'autre part disposer d'un certain nombre de moyens techniques et humains.

Cela étant, les techniques existantes se développent et se perfectionnent. Cette évolution se traduit par la recherche de procédés nouveaux et par la mise en place de nombreux automatismes. Nous présentons ci-dessous la filière la plus complète et la plus courante du traitement des eaux de surface, sans entrer dans les détails particulièrement fins des procédés, sauf pour le procédé de coagulation. On peut admettre que la chaîne habituelle complète comporte 5 grandes étapes (cf. Figure 1-2).

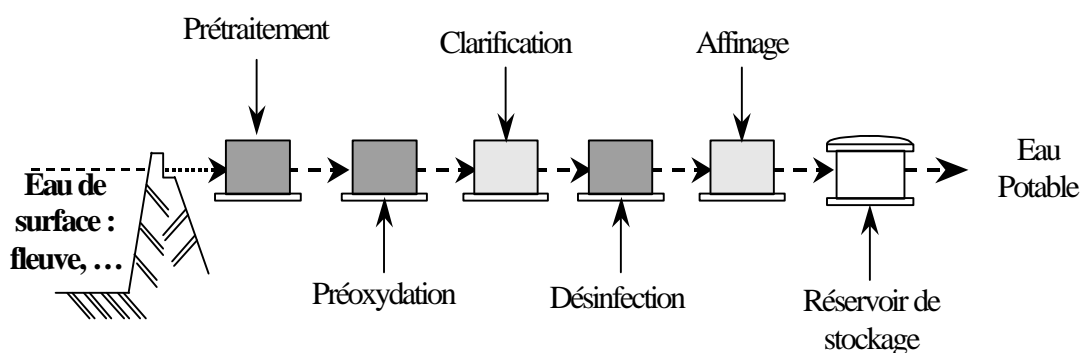


Figure 1-2 : Chaîne de traitement

2. Pré-traitement

Une eau, avant d'être traitée, doit être débarrassée de la plus grande quantité possible d'éléments dont la nature et la dimension constitueraient une gêne pour les traitements ultérieurs. Pour cela, on effectue des pré-traitements de l'eau de surface [1]. Dans le cas d'une eau potable, les pré-traitements sont principalement de deux types:

- le dégrillage,
- le tamisage.

Le dégrillage, premier poste de traitement, permet de protéger les ouvrages aval de l'arrivée de gros objets susceptibles de provoquer des bouchages dans les différentes unités de traitement. Ceci permet également de séparer et d'évacuer facilement les matières volumineuses charriées par l'eau brute, qui pourraient nuire à l'efficacité des traitements suivants, ou en compliquer l'exécution. Le dégrillage est avant tout destiné à l'élimination de gros objets: morceaux de bois, etc. Le tamisage, quant à lui, permet d'éliminer des objets plus fins que ceux éliminés par le dégrillage. Il s'agit de feuilles ou de morceaux de plastique par exemple.

3. Pré-oxydation

A l'issue du pré-traitement, on a une eau relativement propre mais qui contient encore des particules collödales en suspension, dont nous reparlerons dans la suite de ce mémoire, et des matières organiques en solution. Celles-ci n'ont en elles-mêmes rien de dangereux. Il nous arrive souvent de consommer de l'eau en contenant : le thé, le café, le vin ou le lait. Ces produits sont des eaux chargées en matières organiques, mais on sait qu'elles s'oxydent spontanément en présence d'air (une bouteille de vin qui reste ouverte se transforme en vinaigre). On va donc les détruire dans la mesure du possible par une pré-oxydation. Celle-ci peut être faite de trois façons différentes :

- ajout de chlore ou pré-chloration,
- ajout de dioxyde de chlore,
- ajout d'ozone ou pré-ozonation.

La pré-chloration, effectuée avant le procédé de clarification, s'est surtout développée dans les années 60. Moins en vogue dans les 80, elle tend à disparaître actuellement. Le chlore est le réactif le plus économique, mais il a comme inconvénient de former avec certains micropolluants des composés organochlorés du type chloroforme ou des composés complexes avec les phénols du type chlorophénol dont le goût et l'odeur sont désagréables [1].

On préfère donc parfois utiliser le dioxyde de chlore qui coûte plus cher mais n'a pas les inconvénients de l'oxydation par le chlore cités ci-dessus. Ce type de traitement est cependant réservé à des cas spécifiques. En effet, l'utilisation du dioxyde de chlore présente, lui aussi, des inconvénients non négligeables. Premièrement, il est sans effet sur l'ammonium. Deuxièmement, le dioxyde de chlore dans l'eau se décompose à la lumière, ce qui entraîne une augmentation importante du taux de traitement à appliquer en période d'ensoleillement. En conclusion, le dioxyde de chlore est un oxydant plus puissant que le chlore mais il ne s'agit pas d'une solution économique. Il reste très peu utilisé en pré-oxydation mais représente une alternative intéressante à l'utilisation du chlore lorsque celui-ci entraîne des problèmes de qualité d'eau.

Enfin, depuis quinze à vingt ans, on utilise comme pré-oxydant l'ozone, qui non seulement a l'avantage de détruire les matières organiques en cassant les chaînes moléculaires existantes, mais également a une propriété virulicide très intéressante, propriété que n'a pas le chlore. Généralement utilisée en désinfection finale, cette technique peut être mise en œuvre en pré-oxydation. Elle peut aussi être employée pour l'amélioration de la clarification. L'un des avantages d'une pré-ozonation est l'oxydation des matières organiques, et une élimination de la couleur plus importante. Un autre avantage est la diminution du taux de traitement (taux de coagulation) dans le procédé de clarification. En conclusion, la pré-ozonation est une solution de substitution à la pré-chloration. On évite ainsi les problèmes liés aux sous-produits de la chloration. Néanmoins, ce procédé ne résout pas tous les problèmes car certaines algues résistent à l'ozone. De plus, son coût reste plus élevé que celui du chlore.

4. Clarification

4.1 Introduction

La clarification est l'ensemble des opérations permettant d'éliminer les matières en suspension (MES) d'une eau brute ainsi que la majeure partie des matières organiques. La clarification comprend les opérations de coagulation, de floculation et de filtration.

La coagulation est l'une des étapes les plus importantes dans le traitement des eaux de surface. 90 % des usines de production d'eau potable sont concernées. La difficulté principale est de déterminer la quantité optimale de réactif à injecter en fonction des caractéristiques de l'eau brute.

Un mauvais contrôle de ce procédé peut entraîner une augmentation importante des coûts de fonctionnement et le non-respect des objectifs de qualité en sortie. Cette opération a également une grande influence sur les opérations de décantation et de filtration ultérieures. En revanche, un contrôle efficace peut réduire les coûts de main d'œuvre et de réactifs et améliorer la conformité de la qualité de l'eau traitée.

En résumé, le contrôle de cette opération est donc essentiel pour trois raisons : la maîtrise de la qualité de l'eau traitée en sortie (abattement de la turbidité), le contrôle du coagulant résiduel en sortie (réglementation de plus en plus stricte relative à la présence de coagulant résiduel dans l'eau traitée) et la diminution des contraintes et des coûts de fonctionnement (coûts des réactifs et des interventions humaines).

Nous rappellerons les différentes méthodes existantes pour le contrôle du procédé de coagulation dans le deuxième chapitre de ce mémoire. Dans la suite de cette section, nous allons nous focaliser davantage sur l'aspect physico-chimique de la clarification.

4.2 Coagulation-Floculation

4.2.1 Les particules

Le but de la coagulation-floculation est d'enlever les particules contenues dans l'eau et dont la taille varie du visible au microscopique. L'efficacité de ce traitement dépend donc du type de particules rencontrées. Le Tableau 1-1 indique le temps de décantation des différentes particules en fonction de leur dimension, de leur densité et de la température de l'eau (15 °C).

| Type de particules | Diamètre en mm | Temps de chute | | |
|--------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| | | Densité de 2.6 | Densité de 2.0 | Densité de 1.1 |
| Gravier | 10.0 | 0.013 s | 0.02 s | 0.20 s |
| Sable grossier | 1.0 | 1.27 s | 2.09 s | 20.90 s |
| Sable fin | 0.1 | 2.11 min | 3.48 min | 34.83 min |
| Glaise | 0.01 | 3.52 h | 5.80 h | 2.42 j |
| Bactéries | 0.001 | 14.65 j | 24.19 j | 241.9 j |
| Collédales | 0.000 1 | 4.12 a | 6.66 a | 66.59 a |
| Collédales | 0.000 01 | 412.2 a | 665.9 a | 6659 a |
| Collédales | 0.000 001 | 41222 a | 66590 a | 665990 a |

s : secondes ; min : minutes ; h : heures ; a : années.

Tableau 1-1 : Temps de décantation des particules

On observe qu'à densité égale, les particules plus petites ont une durée de chute plus longue. Cela conduit à l'impossibilité pratique d'utiliser la décantation seule pour éliminer le maximum de particules. Cette remarque est surtout valable pour les collédales, c'est-à-dire les particules dont la taille est comprise entre 10^{-6} m et 10^{-9} m. Les colloïdes sont des suspensions stables qui existent sous forme d'ions négatifs dans l'eau, impossibles à décanter naturellement. Ils peuvent être d'origine organique (acides humiques, bactéries) ou minérale (argiles, glaise). Ces substances sont, en partie, responsables de la turbidité et de la couleur de l'eau.

La chute d'une particule dans l'eau est régie par le loi de Stokes :

$$V = \frac{g}{18 \cdot \eta} \cdot (\rho_s - \rho_l) \cdot d^2 \quad (1.1)$$

avec

- V : vitesse de décantation de la particule,
- g : accélération de la pesanteur,
- η : viscosité dynamique,
- ρ_s : masse volumique de la particule,
- ρ_l : masse volumique du liquide,
- d : diamètre de la particule.

Il apparaît clairement que plus le diamètre et la masse volumique de la particule sont grands, plus la vitesse de chute est importante. Le but va donc être d'augmenter la taille et la masse volumique des particules pour que le temps de décantation devienne acceptable.

4.2.2 But de la coagulation-floculation

L'opération de coagulation-floculation a donc pour but la croissance des particules (qui sont essentiellement colloïdales) par déstabilisation des particules en suspension puis formation de flocons par absorption et agrégation [1, 6]. Les flocons ainsi formés seront décantés et filtrés par la suite (cf. Figure 1-3).

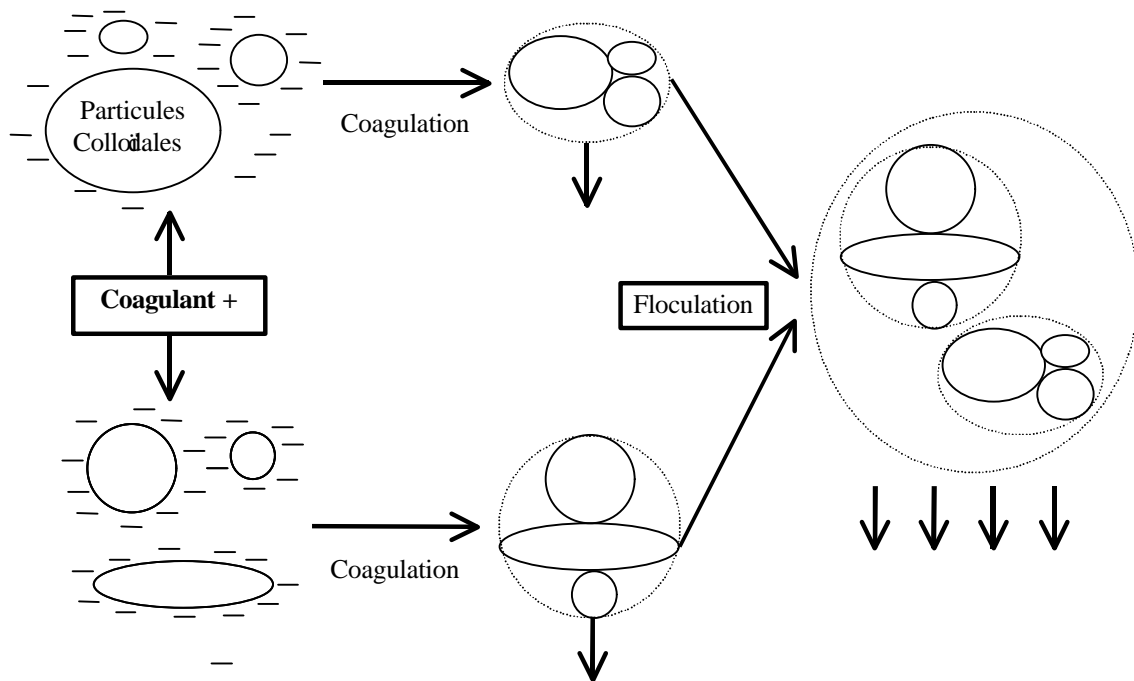


Figure 1-3 : Coagulation / Floculation

4.2.3 La coagulation

Les particules colloïdales en solution sont « naturellement » chargées négativement. Ainsi, elles tendent à se repousser mutuellement et restent donc en suspension. On dit qu'il y a stabilisation des particules dans la solution.

La coagulation consiste en la déstabilisation des particules en suspension par la neutralisation de leurs charges négatives. On utilise, pour ce faire, des réactifs chimiques nommés coagulants. Le procédé nécessite une agitation importante.

Les coagulants sont des produits capables de neutraliser les charges des colloïdes présents dans l'eau. Le choix du coagulant pour le traitement de l'eau de consommation doit tenir compte de l'innocuité du produit, de son efficacité et bien sûr de son coût. Le type de coagulant et la dose ont une influence sur :

- la bonne ou la mauvaise qualité de l'eau clarifiée,
- le bon ou le mauvais fonctionnement de la floculation et de la filtration,
- le coût d'exploitation.

Il existe deux principaux types de coagulants [3] : les sels de fer (chlorure ferrique) et les sels d'aluminium (sulfate d'aluminium). Le choix du coagulant peut varier avec la température et donc avec la saison. Le sulfate d'aluminium, par exemple, est un coagulant utilisé pour une température d'eau supérieure à 10-12 °C. Rappelons également que plus un coagulant a de charges positives, plus son efficacité est grande.

Par la suite, nous allons énumérer l'ensemble des paramètres influençant le bon fonctionnement du procédé de coagulation [1, 4, 5].

Tout d'abord, le pH a une influence primordiale sur la coagulation. Il est d'ailleurs important de remarquer que l'ajout d'un coagulant modifie souvent le pH de l'eau. Cette variation est à prendre en compte afin de ne pas sortir de la plage optimale de précipitation du coagulant. La plage du pH optimal est la plage à l'intérieur de laquelle la coagulation a lieu suffisamment rapidement. En effet, une coagulation réalisée à un pH non optimal peut entraîner une augmentation significative du temps de coagulation. En général, le temps de coagulation est compris entre 15 secondes et 3 minutes. Le pH a également une influence sur l'élimination des matières organiques. En effet, plus on coagule à un pH acide plus on élimine de matières organiques. Toute régulation de l'opération de coagulation commence par un contrôle et une régulation du pH de coagulation. Cette régulation s'effectue en tenant compte du pH de l'eau brute, de la nature de l'eau (turbidité, température, etc.), de l'alcalinité de l'eau, de la nature et de la dose de coagulant. Par exemple, un sulfate d'aluminium a une efficacité optimale pour un pH compris entre 6,2 et 7,4.

La dose de réactif est également un paramètre à prendre en compte. Le coagulant qui est habituellement fortement acide a donc tendance à abaisser le pH de l'eau. Pour se placer au pH optimal, il est possible d'ajouter un acide ou une base. Une dose de coagulant excessive entraîne une augmentation du coût d'exploitation, tandis qu'un dosage insuffisant conduit à une qualité de l'eau traitée insuffisante. La quantité de réactifs ne peut pas se déterminer facilement. Des théories ont été élaborées sur les charges électriques nécessaires pour déstabiliser les colloïdes et on a mesuré un potentiel, appelé potentiel Zeta, à partir duquel apparaît un floc. Dans la pratique, il est beaucoup plus sûr de faire un essai « Jar-Test » qui consiste à mettre dans des récipients des réactifs de concentrations différentes et à faire l'essai de l'opération de coagulation (cf. Chapitre 2, §3.1). L'inconvénient de cette méthode est de nécessiter l'intervention d'un opérateur. Des méthodes automatiques existent et seront détaillées au Chapitre 2 dans le §3.2.

Les sels dissous dans l'eau (responsables de la conductivité de l'eau) exercent également une influence sur la plage de pH optimal (réduction de la plage, difficulté à se placer au pH optimal) et sur la quantité requise de coagulant.

La nature des particules influe sur l'efficacité de la coagulation. Par exemple, les argiles sont des particules beaucoup plus faciles à traiter par coagulation - floculation que les matières humiques (responsables des couleurs). La nature du coagulant est également un paramètre important à prendre en compte pour le bon fonctionnement du procédé de coagulation. L'action des sels d'aluminium ou de fer est prépondérante dans les filières de traitement de l'eau. Il reste à faire le choix du coagulant, en fonction de la nature de l'eau à traiter. Un taux élevé d'aluminium résiduel dans l'eau est nocif pour la santé (la valeur limite admissible est de 200 µg/l). L'aluminium introduit en solution comme coagulant subit de nombreuses réactions. Une certaine partie de l'aluminium reste en solution. Pour préserver la qualité des eaux sans dépasser la concentration limite admissible en aluminium, il faut se placer le plus près possible du pH optimal. On voit ici encore l'intérêt d'avoir une régulation fine du pH et de la dose de réactifs.

La température joue également un rôle important. En effet, une température basse, entraînant une augmentation de la viscosité de l'eau, crée une série de difficultés dans le déroulement du processus : la coagulation et la décantation du floc sont ralenties et la plage de pH optimal diminue. Pour éviter ces difficultés, une solution consiste à changer de coagulant en fonction des saisons.

La turbidité est, elle aussi, un paramètre influant sur le bon fonctionnement du procédé de coagulation. Dans une certaine plage de turbidité, l'augmentation de la concentration en particules doit être suivie d'une augmentation de la dose de coagulant. Quand la turbidité de l'eau est trop faible, on peut augmenter la concentration en particules par addition d'argiles. Dans le cas de fortes pluies, l'augmentation des MES favorise une meilleure décantation. Enfin, pour grossir et alourdir le floc, on ajoute un adjuvant de floculation.

Les conditions de mélange sont aussi importantes pour la coagulation que pour la floculation (cf. §4.2.4). L'opération de coagulation doit s'effectuer dans un temps très bref car le processus de déstabilisation est réversible. Le réactif doit être réparti le plus rapidement possible et de façon la plus homogène possible dans toute la masse de l'eau. Ce mélange énergétique doit durer entre 1 et 3 minutes. Si le mélange s'effectue directement dans le tuyau, il faut utiliser un bon système de dispersion rapide (écoulement turbulent). D'un point de vue pratique, l'injection du coagulant se fait soit dans une zone de forte turbulence soit en utilisant des mélangeurs statiques ou mécaniques. Il est important de noter que le point d'injection optimal varie avec le type de coagulant. Par exemple, le sulfate d'aluminium réagit selon une cinématique lente alors que les coagulants polymérisés réagissent beaucoup plus rapidement. Il faut, dans ce cas, éviter que l'injection de coagulant soit suivie d'une chute d'eau qui pourrait briser le floc formé.

4.2.4 La floculation

La floculation est le phénomène de formation de flocons de taille plus importante (agglomération des colloïdes déchargés dans un réseau tridimensionnel). On utilise, pour se faire, des floculants ou adjuvants de floculation. Contrairement à l'étape de coagulation, la floculation nécessite une agitation lente.

Les floculants ou adjuvants de floculation sont, dans leur grande majorité, des polymères de poids moléculaire très élevé. Ils peuvent être de nature minérale, organique naturelle ou organique de synthèse.

Comme pour la coagulation, il existe un certain nombre de paramètres à prendre en compte pour le bon fonctionnement de ce procédé.

Le mélange doit être suffisamment lent afin d'assurer le contact entre les floccs engendrés par la coagulation. En effet, si le mélange dépasse une certaine puissance les floccs risquent de se briser. Il faut également un temps de séjour minimal pour que la floculation ait lieu. La durée du mélange se situe entre 10 et 60 minutes. Les temps d'injection du coagulant et du floculant sont en général espacés de 1 à 3 minutes, cette durée étant fonction de la température de l'eau.

Les boues formées pendant la coagulation-floculation aboutissent après décantation dans des concentrateurs. Des floculants de masse molaire importante permettent l'obtention de boues ayant une vitesse d'épaississement plus grande, et donc un volume de boues final réduit. Les boues purgées de décanteurs sont plus concentrées dans ce cas, ce qui conduit à une perte d'eau réduite. L'emploi de floculants de synthèse, combiné à des méthodes modernes de séparation, peut permettre la production de boues très concentrées, traitables directement par une unité de déshydratation. Dans les autres cas, on passe d'abord par un épaississement avant l'unité de déshydratation.

4.3 La séparation solide-liquide

Une fois le floc formé, il faut le séparer de l'eau. C'est ce qu'on appelle la séparation solide-liquide. Elle peut s'effectuer par différents moyens :

- la coagulation sur filtre,
- la décantation,
- la flottation.

Nous ne parlerons ici que de la décantation, qui est le procédé le plus couramment utilisé actuellement. Les deux autres techniques sont, quant à elles, plus adaptées aux eaux brutes peu chargées en MES, possédant peu de coloration.

Il existe deux types de décanteurs : les décanteurs statiques et les décanteurs à contact de boues. L'usage a consacré le terme « statique » pour désigner les décanteurs qui ne sont ni à circulation de boues, ni à lit de boues, bien que, dans ces appareils, la décantation s'effectue en fait selon un processus dynamique.

Afin d'augmenter la probabilité qu'ont les particules de se décanter dans les décanteurs à contact de boues, on met l'eau additionnée de réactifs (eau brute + coagulant) en contact avec des boues concentrées provenant de la décantation. Deux procédés peuvent être employés pour assurer le contact avec les boues [1] :

- les *appareils à re-circulation de boues* : les boues sont séparées de l'eau clarifiée dans une zone de décantation. Elles sont ensuite re-circulées dans une zone de mélange munie d'une agitation mécanique ou hydraulique. L'eau brute, additionnée de réactifs, est également introduite dans cette zone de mélange.
- les *appareils à lit de boues* proprement dit : on ne cherche pas à faire circuler la boue. Il s'agit également de la maintenir sous forme d'une masse en expansion que l'eau peut traverser de bas en haut, d'une façon aussi régulière et uniforme que possible. Le brassage, très doux, est réalisé au niveau de l'introduction de l'eau à traiter.

4.4 La filtration

4.4.1 Définition

La filtration est définie comme le passage d'un fluide à travers une masse poreuse pour en retirer les matières solides en suspension [2]. La filtration représente donc le moyen physique pour extraire de l'eau les particules non éliminées préalablement lors de la décantation. De façon générale, un filtre aura une longévité entre deux lavages d'autant plus importante que les traitements préalables auront été efficaces (coagulation-floculation-décantation).

4.4.2 Critères de choix d'un filtre

Les principaux critères de choix d'un filtre sont :

- le matériau : on peut utiliser du sable ou du charbon actif en grain. Ce deuxième type de matériau est le plus souvent utilisé en traitement d'affinage (adsorption) en deuxième étage de filtration afin d'éliminer les pesticides et les sous-produits d'oxydation (odeurs et goûts) ;
- la taille de grain du milieu filtrant ;
- le coefficient d'uniformité : si l'homogénéité des tailles n'est pas respectée, le lavage classe les grains selon leur taille, les grains les plus gros se trouvant au fond du filtre et les plus fins en surface. Dans ce cas, l'encrassement de surface entraîne un cycle de filtration plus court.
- la hauteur de la couche filtrante : il faut vérifier périodiquement si le filtre perd du matériau et compléter au besoin ;
- le taux de filtration (en $m^3/m^2.h$) ou vitesse de filtration.

Le choix de ces différents critères est guidé par les caractéristiques de l'eau à traiter et la qualité de l'eau que l'on souhaite obtenir. Un filtre doit produire une eau de qualité satisfaisante et constante tout au long d'un cycle de filtration.

4.4.3 Evolution de la perte de charge et de la turbidité de l'eau filtrée

Durant la filtration, le filtre s'encrasse et, par conséquent, la perte de charge augmente. Il faut veiller à ne pas dépasser la perte de charge maximale admissible par construction pour éviter une crevaison du filtre. Pour conserver un encrassement acceptable du filtre, il faut augmenter la « hauteur de couche » de celui-ci. Le temps pendant lequel on maintient un filtrat clair (eau filtrée) est proportionnel à cette « hauteur de couche ».

Le graphique de la Figure 1-4 représente, de manière schématique, l'évolution de la turbidité de l'eau filtrée en fonction du temps. La première phase est la maturation du filtre (a), suivie de la période de fonctionnement normal (b). Lorsque la turbidité de l'eau filtrée augmente, cela correspond à un début de crevaison de la masse filtrante (c) et l'on atteint alors rapidement la limite de turbidité acceptable (d) à ne pas dépasser.

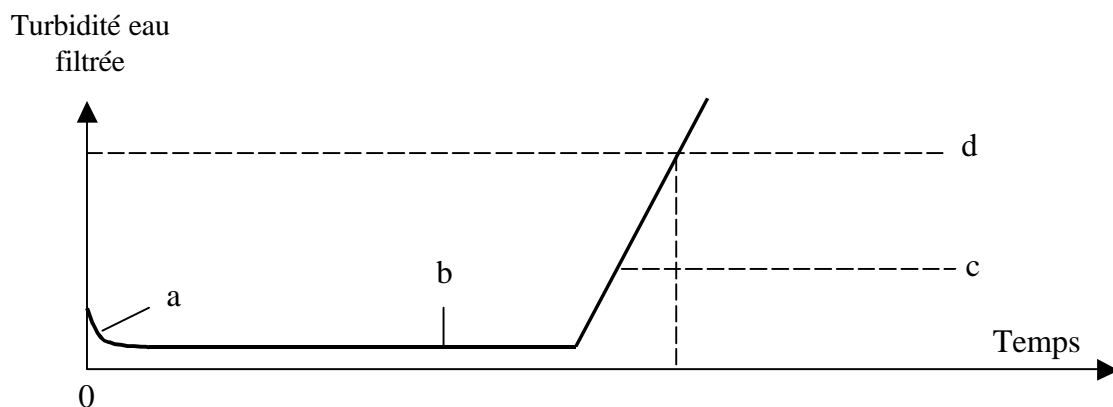


Figure 1-4 : Evolution de la turbidité de l'eau filtrée d'un filtre : (a) maturation du filtre, (b) période de fonctionnement normal, (c) début de crevaisson du filtre, (d) limite de turbidité.

4.4.4 Lavages

Le but du lavage est d'évacuer les impuretés du matériau filtrant. Pour cela, il existe différents types de lavages, le plus courant étant le lavage par air et eau simultanément. Cette méthode consiste à utiliser un débit de retour d'eau insuffisant pour provoquer l'expansion du sable et à agiter celui-ci par une injection d'air sur-pressé.

5. Désinfection

Le but de la désinfection est d'éliminer tous micro-organismes pathogènes présents dans l'eau afin d'empêcher le développement de maladies hydriques [1]. Au niveau de l'exploitant, les dangers liés à la présence de micro-organismes pathogènes dans les eaux distribuées sont multiples :

- *risque à très court terme* amplifié par le délai d'analyse qui est au minimum de 24 heures ;
- *risque omniprésent*, les problèmes pouvant intervenir sur tous types de ressource et dans n'importe quel réseau de distribution ;
- *gravité des maladies*, qui peuvent être mortelles ;
- *ampleur de la contamination* qui peut aller jusqu'à plusieurs milliers de personnes.

5.1 Procédés de désinfection

Le principe de la désinfection est de mettre en contact un désinfectant à une certaine concentration pendant un certain temps avec une eau supposée contaminée. Cette définition fait apparaître trois notions importantes : les désinfectants, le temps de contact et la concentration en désinfectant.

5.1.1 Les désinfectants

Les trois principaux désinfectants utilisés en eau potable sont les suivants :

- le chlore : c'est le plus connu et le plus universel. En solution, le chlore réagit avec l'eau pour former deux composés, l'acide hypochloreux (HClO) et des ions hypochlorites (ClO⁻). L'acide hypochloreux a un effet bactéricide plus important que l'ion hypochlorite.

Le pourcentage respectif de ces deux espèces dans l'eau dépend du pH de l'eau. Plus le pH de l'eau est élevé, moins il y a d'acide hypochloreux pour une dose donnée de chlore.

– l'ozone : l'ozone est un gaz extrêmement instable et un oxydant très puissant. Il n'a pas de pouvoir rémanent et donc ne dispense pas d'un ajout de chlore sur le réseau pour une action bactériostatique. L'ozone est fabriqué sur place à partir d'oxygène au travers d'un champ électrique créé par une différence de potentiel entre deux électrodes de 10 à 20 kV. L'oxygène provient soit d'air sec, soit d'oxygène pur du commerce. L'ozone est certainement l'oxydant le plus efficace sur les virus, le fer et le manganèse. Il ne donne pas de goût à l'eau, contrairement au chlore, et oxyde fortement les matières organiques. Pour obtenir un effet désinfectant, le temps de contact doit être suffisamment long, d'où la nécessité d'ouvrages adaptés (tours de contact par exemple).

– le rayonnement UV : l'irradiation par une dose suffisante de rayonnement UV permet la destruction des bactéries, virus, germes, levures, champignons, algues, etc. Les rayonnements UV ont la propriété d'agir directement sur les chaînes d'ADN des cellules et d'interrompre le processus de vie et de reproduction des micro-organismes. Comme pour l'ozone, elle n'est pas caractérisée par un effet rémanent.

Chacun de ces produits possède un pouvoir désinfectant différent que l'on peut classer dans cet ordre :

UV > Ozone > Chlore

5.1.2 Le temps de contact

En règle générale, le temps de contact varie entre quelques minutes et plusieurs heures. Il peut être très inférieur au temps de séjour théorique, calculé en fonction du débit de l'eau dans le réacteur. En effet, l'eau ne se déplace pas de façon uniforme dans le réacteur. Le plus souvent, il existe des passages préférentiels et des zones mortes. Par exemple, pour une bêche de chloration ayant un temps de séjour théorique d'une heure, certaines molécules d'eau sortiront au bout d'un quart d'heure et d'autres y resteront deux heures.

Le cloisonnement des réacteurs permet d'améliorer l'écoulement du fluide et donc de diminuer les effets indésirables dus aux zones mortes et aux passages préférentiels et ainsi d'homogénéiser le temps de séjour dans le réacteur. Le temps de contact dépend de la taille et de l'hydraulique du réacteur de contact.

5.1.3 La concentration des oxydants

Pratiquement, il s'agit du seul paramètre sur lequel l'opérateur peut intervenir. Il faut retenir que l'efficacité de la désinfection dépend, en partie, du suivi de la concentration en oxydant. L'évolution de la concentration en oxydant est liée à la demande en oxydant de l'eau. Cette demande dépend :

- de la qualité de l'eau,
- du pH,
- des températures (différentes entre été et hiver),
- des matières organiques,
- de la concentration en ammoniacque.

Si l'on prend l'exemple du chlore (le plus courant), une fois la demande instantanée en chlore assurée, le chlore résiduel disparaît progressivement dans le réseau. La dose de chlore libre mesurée diminue au cours du temps. En fonction de la demande en chlore de l'eau, on

observe au bout de quelques heures une quasi-stabilité de la concentration résiduelle. Cet aspect caractéristique du chlore et de ses dérivés est qualifié d'effet rémanent. L'aspect de la courbe de demande en chlore est caractérisée par une forte consommation de chlore lors des premières minutes ou des premières heures. C'est la raison pour laquelle il faudra s'efforcer de désinfecter avec une bêche de stockage afin d'obtenir en sortie d'usine un résiduel de chlore le plus stable possible. Le paramètre de demande en chlore étant difficile à contrôler, on choisit en général de maintenir un niveau de résiduel (consigne) dans l'eau.

Il est indispensable de mesurer régulièrement le résiduel de désinfectant afin de le maintenir au niveau souhaité et d'éviter des problèmes sur le réseau de distribution par la suite.

5.2 Paramètres de contrôle

Pour chaque type de traitement de désinfection, il est nécessaire de contrôler divers paramètres. Les paramètres contrôlés doivent permettre d'évaluer l'efficacité de la désinfection :

- *la température* : lorsqu'elle augmente, la prolifération micro-biologique s'accélère. Par ailleurs, la consommation en désinfectant est plus importante. Il est donc nécessaire d'être vigilant sur l'évolution de ce paramètre et d'ajuster les consignes de désinfectant en conséquence.
- *le pH* : l'efficacité du chlore présent dans l'eau varie avec le pH. Il est donc indispensable de mesurer le pH en même temps que le chlore libre afin d'évaluer au mieux l'efficacité du traitement.
- *la turbidité* : elle caractérise la présence des particules dans l'eau. La présence de turbidité est le signe d'un traitement incomplet. Les particules non retenues lors du traitement peuvent « véhiculer » des micro-organismes qui seront plus difficiles à inactiver par les désinfectants. Enfin, la turbidité révèle la présence de matières en suspension qui pourront former des dépôts dans le réseau, lesquels favorisent, à l'abri de l'action des désinfectants, la prolifération microbienne.
- *NH_4^+ et NO_2^-* : ils sont consommés par le chlore et peuvent être considérés comme des indicateurs de contamination.

Ces contrôles sont le plus souvent effectués en entrée ou en sortie des contacteurs de désinfection, mais aussi en différents points de réseau.

6. Traitement final : mise à l'équilibre calco-carbonique

6.1 Définitions

L'eau suit un cycle naturel dans lequel les éléments chimiques qu'elle contient évoluent [2]. L'eau de pluie contient naturellement du dioxyde de carbone (CO_2). Quand celle-ci traverse les couches d'humus, riches en acides, elle peut s'enrichir fortement en CO_2 . Lors de sa pénétration dans un sol calcaire, c'est-à-dire riche en carbonate de calcium ($CaCO_3$), elle se charge en calcium (Ca^{2+}) et en ions bicarbonates (HCO_3^-). En fait, le calcium est dissous par l'eau chargée en CO_2 . On dit qu'elle est entartrante ou incrustante. En revanche, quand l'eau de pluie traverse une roche pauvre en calcium (région granitique), elle reste très chargée en CO_2 dissous. Cette eau est, en général, acide. On dit qu'elle est agressive.

Les espèces alors présentes dans l'eau réagissent de façon à tendre vers un équilibre chimique appelé équilibre calco-carbonique. Il correspond à une certaine valeur de pH : le pH_e ou pH d'équilibre. Ce pH dépend des concentrations des différentes espèces chimiques présentes

en solution. Le pH des eaux naturelles peut être supérieur, égal ou inférieur au pH d'équilibre. Cela dépend du parcours de l'eau, des conditions climatiques et de l'hydrogéologie du sol. La température influe sur l'équilibre calco-carbonique de l'eau. De façon pratique, lorsqu'on fait bouillir de l'eau, il n'est pas rare de voir au fond des casseroles se déposer du calcaire. La concentration en ions HCO_3^- s'évalue à partir de la mesure du Titre Alcalimétrique Complet (TAC) alors que la concentration en Ca^{2+} est liée au Titre Hydrotimétrique TH.

6.2 Importance de l'équilibre calco-carbonique

Il est très important d'avoir une eau à l'équilibre calco-carbonique lors de la distribution. Une eau qui n'est pas à l'équilibre calco-carbonique attaque les matériaux (canalisations) dans le cas d'une eau agressive, ou provoque la formation des dépôts de calcaire dans le cas d'une eau entartrante. Il en résulte la dégradation des ouvrages et de la qualité de l'eau. Une eau agressive attaque les canalisations du réseau et relargue des métaux toxiques dans le réseau (50 % des branchements présents sur le réseau sont en plomb). Les conséquences sont une dégradation de la qualité de l'eau en cours de distribution et donc des plaintes de la part des usagers. En revanche, une eau incrustante colmate les canalisations. Ceci se traduit par une augmentation de la turbidité et donc des risques de prolifération bactérienne. Les conséquences sont des coûts de nettoyage élevés et des problèmes mécaniques sur les vannes. La dégradation des réseaux se traduit par des dépenses de renouvellement élevées et des perturbations d'exploitation importantes. Par exemple, le renouvellement de 1 km de canalisation de diamètre 200 mm peut coûter jusqu'à 1 million de francs. Dans tous les cas, il est indispensable de maîtriser les caractéristiques de l'eau et donc de lui faire subir un traitement approprié pour atteindre l'équilibre calco-carbonique.

6.3 Comment mettre l'eau à l'équilibre calco-carbonique

Il y a typiquement deux problèmes distincts : corriger une eau agressive et corriger une eau incrustante. La correction d'une eau agressive peut s'effectuer de plusieurs façons. Premièrement, on peut éliminer le CO_2 par aération. Du fait de l'élimination du CO_2 , le pH augmente et se rapproche du pH d'équilibre. Deuxièmement, on peut ajouter une base à l'eau. L'ajout de base permet d'augmenter le pH et d'atteindre le pH d'équilibre. La correction d'une eau incrustante peut se faire soit par traitement direct soit en réduisant le potentiel d'entartrage par décarbonatation. Le traitement direct correspond à un ajout d'acide.

7. Conclusion

Ce premier chapitre a servi d'introduction au domaine lié à notre étude. Nous avons décrit les différentes étapes d'une chaîne de traitement d'eau potable en nous basant sur la chaîne la plus complète possible et la plus courante. Nous avons détaillé, plus particulièrement, le procédé de coagulation sur lequel porte notre étude. Nous avons décrit les différents paramètres physico-chimiques influençant le bon fonctionnement du procédé de coagulation.

Le chapitre suivant est consacré à la partie régulation et contrôle. Nous verrons en détail les différentes techniques existant pour le contrôle automatique du procédé de coagulation.

Principes généraux de traitement des eaux

Bibliographie

1. Centre International De Formation (C.I.D.F.), Principes généraux de traitement des eaux, Lyonnaise des Eaux.
2. Degrémont, Mémento technique de l'eau : Tome 1, Lavoisier - Technique et documentation, Paris, 1989.
3. Lind C., A coagulant road map, *Public Works*, 36-38, March 1995.
4. Lind C., Coagulation Control and Optimization: Part one, *Public Works*, 56-57, October, 1994.
5. Lind C., Coagulation Control and Optimization: Part two, *Public Works*, 32-33, November, 1994.
6. Valiron F., *Gestion des Eaux : alimentation en eau - assainissement*, Presses de l'école nationale des ponts et chaussées, Paris, 1989.
7. Valiron F., *Gestion des Eaux : principes - moyens - structures*, Presses de l'école nationale des ponts et chaussées, Paris, 1990.

Chapitre 2

Instrumentation, régulation et supervision

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons aux problèmes liés à l'automatisation d'une usine de traitement d'eau potable.

La première partie fera le point sur l'instrumentation. En particulier, nous détaillerons la mesure des différents paramètres spécifiques de l'eau et les problèmes liés à cette instrumentation en continu.

Nous aborderons ensuite le problème de l'automatisation d'une usine de traitement. Nous verrons de façon précise les différents automatismes mis en œuvre dans une station de traitement d'eau potable et nous attacherons plus longuement au procédé de coagulation. Nous décrirons les différentes méthodes existantes pour le contrôle automatique de ce procédé ainsi que le principe de l'approche qui sera développée par la suite.

Finalement, nous présenterons la supervision d'une station de traitement, notamment la phase d'acquisition des données. Nous aborderons également l'ensemble des outils « d'aide à la décision » mis à la disposition des opérateurs en vue d'un contrôle optimal des différents procédés de traitement.

1. Instrumentation

1.1 Généralités

Le contrôle permanent et automatique des processus de traitement implique la mesure d'un certain nombre de paramètres à l'aide de capteurs en continu. Ceux-ci peuvent se classer en deux grandes familles : les paramètres usuels et les paramètres spécifiques de l'eau [27].

Les paramètres usuels sont principalement les débits, les niveaux de liquides ou de solides, les pressions, les températures. Dans toute installation de traitement d'eau la connaissance du débit est impérative. De plus, le traitement d'une eau conduit à lui ajouter un certain nombre de réactifs. Ceux-ci sont généralement stockés soit sous forme liquide dans des bâches, soit sous forme pulvérulente dans des silos. La mesure des débits et des niveaux de produits dans ces unités de stockages permet de connaître à chaque instant l'autonomie prévisionnelle de l'installation et d'établir un planning de livraison des produits. Ces mesures de niveaux s'appliquent également aux différents réservoirs de stockage (eau traitée, boue, etc.). Dans ces installations, les mesures de pression sont également nombreuses : au refoulement des pompes, dans les filtres, les dégazeurs, etc. La bonne conduite d'une installation de filtration nécessite la connaissance permanente du degré de colmatage des lits filtrants qui est généralement donné par une mesure de pression différentielle, ou simplement de pression, dans le cas d'un filtre ouvert à niveau constant. La mesure de température est essentielle, elle est souvent utile sur les réacteurs biologiques, et quelquefois en coagulation-floculation d'eau froide.

La mesure en continu d'un certain nombre de paramètres spécifiques permet de libérer l'opérateur de l'astreinte d'analyse de routine et d'optimiser les traitements en réduisant les temps de réponse. Elle porte principalement sur la turbidité, la conductivité, le pH et la concentration de certains corps dissous. La turbidité est la réduction de la transparence d'un liquide due à la présence de matières en suspension non dissoutes. Elle permet de connaître le degré de pollution physique des eaux à traiter ainsi que la qualité d'une eau livrée à la consommation humaine. Des corrélations sont souvent établies entre turbidité, matières en suspension et couleur. La mesure de la conductivité ou de son inverse, la résistivité, est impérative pour le contrôle des eaux de très haute pureté. La mesure en continu du pH d'une eau, pratiquée à de nombreux stades du traitement, est en particulier utilisable pour le contrôle de la coagulation-floculation, de la désinfection, etc. La mesure en continu de l'oxygène dissous permet de contrôler le maintien en fonctionnement aérobie dans les installations d'épuration par voie biologique, ainsi que les conditions nécessaires à la vie aquatique dans les eaux de surface. La mesure de l'alcalinité et de la dureté de l'eau permet, par le maintien de ces paramètres en deçà de certaines limites, de rester à l'équilibre calco-carbonique de l'eau et donc d'éviter les phénomènes d'entartrage ou de corrosion des canalisations. Le contrôle habituel de la désinfection se fait par la mesure de la quantité résiduelle de l'agent désinfectant : chlore, ozone, etc.

1.2 Principes de mesures des principaux paramètres

1.2.1 Mesure des paramètres usuels

Les mesures de débits

Elles diffèrent selon que l'écoulement du liquide s'effectue à l'air libre ou dans une tuyauterie. Dans le cas d'une usine de traitement d'eau potable la majeure partie des mesures de débit s'effectue en tuyauterie fermée. La mesure de débit en tuyauterie est réalisée selon des principes variés ; suivant le type de fluide (eau brute ou eau traitée) et selon la gamme de débit.

Les mesures de perte de charge

La mesure de perte de charge est très importante pour la conduite du procédé de filtration. Elle se ramène toujours à des mesures de pression. On peut utiliser des capsules manométriques différentielles soumises aux pressions régnant de part et d'autre du lit granulaire du filtre ; la différence représente alors la perte de charge.

La température

La température de l'eau est généralement mesurée à l'aide d'un thermomètre à résistance afin de pouvoir être transmise à distance. On utilise la croissance de la résistivité des métaux avec la température. Le courant électrique traversant une telle résistance alimentée sous tension sera donc inversement proportionnel à la température du milieu environnant.

1.2.2 Mesure des paramètres spécifiques

Dans les appareils utilisés pour la mesure des paramètres spécifiques de l'eau, les différentes méthodes d'analyse sont mises en œuvre de façon automatique, en particulier : la néphélométrie (mesure de turbidité), la mesure de résistivité ou de conductivité, la potentiométrie (mesure de pH), l'ampérométrie (mesure de concentration en agent oxydant, chlore, ozone), la photolorimétrie et la titrimétrie (mesure de la concentration de certaines substances dissoutes dans l'eau) [12]. On peut classer ces différents appareils en deux grandes catégories : celle des capteurs physiques et celle des analyseurs chimiques qui réalisent, préalablement à toute mesure, une ou plusieurs réactions chimiques.

Capteurs physiques

Le turbidimètre mesure la quantité de lumière diffusée par un échantillon d'eau brute du fait de la présence de particules dans l'eau. Cette valeur est directement proportionnelle à la turbidité de l'échantillon mesuré. Un faisceau lumineux vient toucher la surface sous une incidence telle que ni lui-même ni le faisceau réfléchi ne peuvent impressionner une cellule photorésistante placée sensiblement perpendiculairement au faisceau incident. Par contre, la lumière diffusée par les particules en suspension vient modifier d'autant plus l'éclairement de la cellule que leur nombre est élevé, ce qui permet d'obtenir la mesure de la turbidité de cette eau. Selon l'appareil de mesure, les gammes de mesure s'étendent de 0 à 5 000 unités néphélométriques de la turbidité (NTU). La turbidité de la Seine varie de 5 à 200 NTU.

Le principe mis en œuvre pour la mesure de la conductivité, et de son inverse la résistivité, est simple puisqu'il consiste à mesurer l'intensité du courant électrique recueilli aux bornes de deux électrodes de géométries connues, plongées dans l'eau et soumises à une différence de potentiel alternatif, dont la fréquence doit être d'autant plus élevée que la concentration en acides, sels ou bases dissous est grande, pour éviter les phénomènes de polarisation. La résistivité d'une eau étant fonction du degré de dissociation des molécules dissoutes, la plupart des appareils comportent une compensation automatique de température pour ramener la valeur de la mesure à une température de référence donnée.

Industriellement, la mesure du pH se fait toujours par potentiométrie à l'aide de deux électrodes : une électrode de référence et une électrode de mesure. L'électrode de référence est plongée dans une solution de concentration constante en ions hydrogène. Une cloison, laissant passer le courant électrique, sépare la solution de référence de celle dont on veut mesurer le pH et dans laquelle est plongée l'électrode de mesure. Une tension, fonction linéaire de la concentration en ions hydrogène de la solution, apparaît alors aux bornes des électrodes. Il suffit donc de relier ces bornes à un voltmètre pour connaître la valeur du pH. En pratique, les électrodes sont réunies pour former une sonde.

L'ampèremètre est utilisé industriellement en traitement des eaux pour la mesure en continu de la concentration en agents oxydants et met en œuvre une méthode simplifiée d'analyse par ampérométrie. La cellule de mesure, qui est alimentée à débit constant en eau à analyser, comporte une cathode inattaquable, par exemple en platine, et une anode qui peut-être en cuivre, en cadmium, en argent, etc. En l'absence d'agent oxydant, la pile ainsi formée est polarisée et n'est traversée que par un courant très faible. Sa dépolarisation et, par conséquent, l'intensité du courant qu'elle débite sont sensiblement proportionnelles à la concentration de l'agent oxydant qui vient se réduire à la cathode. On mesure ainsi la concentration en chlore, ozone, oxygène d'une eau. L'inconvénient de ces appareils réside dans le fait qu'ils mesurent la somme des agents oxydants et qu'ils ne peuvent être vraiment utilisés que dans le cas où un seul corps se trouve en solution à concentration variable. L'effet d'un autre corps, éventuellement présent à concentration constante, peut être annulé par action sur le zéro de l'appareil.

Analyseurs spécifiques

Les photolorimètres automatiques réalisent automatiquement les opérations préliminaires à l'analyse quantitative par photolorimétrie de certains éléments à l'état dissous dans l'eau. Ces opérations consistent à transformer, à l'aide de réactifs, l'élément dont on recherche la concentration en un composé coloré, le plus souvent complexe, dont l'intensité de la coloration est d'autant plus grande que la concentration est grande. Ainsi, sont actuellement mesurées, de façon entièrement automatique, les concentrations en silice, phosphate, phénols, détergents, fer, la dureté de l'eau douce, etc.

1.3 Qualité des capteurs

Nous allons maintenant aborder les problèmes liés à la qualité et à l'utilisation en continu de ces différents capteurs. En effet, pour que le fonctionnement de l'ensemble d'une boucle de mesure soit correct, il est essentiel de s'assurer de la compatibilité de chacun des instruments de la boucle et en particulier du capteur. L'information ainsi délivrée, surtout si elle est utilisée dans une régulation automatique ou comme entrée d'un modèle, doit être la plus représentative possible de la valeur vraie du paramètre mesuré et être très fiable [27].

1.3.1 Sensibilité, précision, gamme de mesure

De nombreux facteurs conditionnent l'écart entre la valeur du paramètre mesuré et l'information délivrée. Le premier facteur est la précision du capteur. Celle-ci, exprimée en pourcentage, est le quotient de l'incertitude de la valeur obtenue par l'étendue de mesure pour des conditions de mesure données. La précision du capteur est fonction du processus de mesure mais aussi des corrections annexes qui y sont apportées. Une bonne précision finale dépend d'une bonne corrélation entre une caractéristique ou un phénomène annexe, pouvant être mesuré avec une bonne précision, et le phénomène à mesurer. Un autre facteur peut être l'existence d'erreurs systématiques dues à un étalonnage incorrect ou trop peu fréquent du capteur. Les erreurs accidentelles peuvent également être causées par des signaux parasites, ou des absences de correction de température, de pression, etc. La sensibilité initiale d'un appareil de mesure est un autre facteur à prendre en compte. Celle-ci est la valeur minimum du paramètre à mesurer en dessous duquel l'appareil ne réagit pas. La sensibilité en fonctionnement est la plus petite variation du paramètre mesuré décelable par la mesure. Elle n'est pas nécessairement constante dans toute la gamme de mesure. Il faut enfin tenir compte de la gamme de mesure du capteur, qui correspond aux valeurs de seuils au delà desquels la précision et la sensibilité du capteur se dégradent.

1.3.2 Fiabilité, environnement et dérive

La fiabilité est définie comme la capacité du capteur à fonctionner correctement, c'est-à-dire à fournir des données avec la précision annoncée. Elle dépend naturellement de la qualité de conception du matériel qui doit être robuste et avoir été entretenu conformément aux spécifications du constructeur. Mais elle dépend également de son adaptation à l'environnement dans lequel il va se trouver. Les contraintes des capteurs concernant la gestion de l'eau sont principalement l'humidité et la nature de l'eau. L'humidité peut provoquer de la condensation dans les boîtiers du matériel. Ceux-ci doivent être étanches, des submersions étant toujours possibles, et doivent comporter des dispositifs éliminant la condensation. Cette atmosphère humide peut également provoquer des courts circuits au niveau des câbles de jonction ou d'alimentation. La nature de l'eau, notamment celle des rivières, peut perturber les capteurs immergés avec des dépôts en modifiant les réactions. C'est en particulier le cas de nombreuses sondes dont le nettoyage doit être effectué très régulièrement car ces dépôts provoquent une dérive du capteur. C'est le principal défaut de ce type de capteur dont la surveillance doit être constante, les dispositifs de nettoyage automatique sous forme de brosses ou de rétro-lavage de la sonde n'étant pas toujours efficaces.

C'est l'une des raisons pour lesquelles certains de ces capteurs opèrent à partir de bacs extérieurs auxquels on amène l'eau à analyser, notamment dans les stations d'analyse ou d'alerte en rivière. Le problème est alors celui de la prise d'eau, de l'entretien de la crépine d'aspiration et de la bonne représentativité de l'eau dans le bac.

En conclusion, pour tirer pleinement parti des avantages des capteurs de mesure et de l'instrumentation associée, il est indispensable d'accepter certaines contraintes telles que le nettoyage des sondes de mesures, l'étalonnage régulier, etc. Malgré ces précautions, certains facteurs peuvent encore perturber l'information délivrée par les capteurs. Il sera donc indispensable d'avoir une phase de validation de ces informations avant toute utilisation dans une boucle de régulation ou en entrée d'un modèle.

2. Automatisation

2.1 Généralités

La première fonction d'une automatisation est l'amélioration des conditions d'exploitation. En effet, il est souhaitable de supprimer le maximum de tâches répétitives et pénibles pour l'opérateur, par exemple en installant des actionneurs sur des vannes importantes ou manœuvrées fréquemment. Plus récemment, l'automatisation et la supervision par ordinateur ont conduit à une augmentation du confort en permettant une meilleure maîtrise, même à distance, d'un grand nombre d'informations, ce qui permet de simplifier les tâches d'exploitation, de surveillance, de maintenance et de gestion [12, 27].

Une autre fonction de l'automatisation est l'amélioration des performances de l'installation. En premier lieu, on peut viser à améliorer la qualité du traitement en mettant en œuvre des mesures et régulations automatiques, comme par exemple le dosage des réactifs. L'automatisation des procédés permet aussi de s'affranchir de certaines faiblesses humaines et d'accroître la fiabilité, comme par exemple, le lavage automatique des filtres. Mais un objectif important est d'améliorer la sûreté de fonctionnement d'une installation en tenant compte des critères de fiabilité, en étudiant les marches dégradées, c'est-à-dire en prévoyant la manière dont l'installation peut continuer à fonctionner en cas de panne d'un organe, en assurant la mise en œuvre automatique d'équipements de secours, etc. De plus l'automatisation, couplée à un stockage d'information, permet d'envisager des études statistiques des données recueillies ouvrant la voie à des études de modélisation et donc d'optimisation des procédés de traitement.

L'automatisation peut, également, viser à augmenter la productivité par diminution des coûts d'exploitation. On peut ainsi optimiser les coûts d'énergie en fonction des tarifs horaires ainsi que ceux des matières consommables. L'aide à la surveillance est un point important dans l'automatisation d'une usine de traitement d'eau potable. Elle comprend l'installation de capteurs, la détection d'alarmes, la mise en place de moyens d'enregistrement de données et de transmission à distance, qui peut aller jusqu'à la supervision par ordinateur.

Cependant, l'automatisation n'est pas un objectif en soi. Le niveau de complexité de l'installation doit être adapté aux compétences disponibles localement et aux objectifs. L'automatisme doit être considéré comme une aide et non une contrainte. Une des conséquences d'une automatisation fiable peut être une « perte de mémoire » de l'exploitant qui n'est plus en contact assez direct avec le procédé. Cependant, ses avantages sont évidents si l'installation est conçue et mise en route par un spécialiste du traitement bénéficiant d'une longue expérience acquise dans des conditions locales et sur des procédés très différents.

2.2 Le contrôle automatique en traitement de l'eau

Dans les usines de traitement d'eau, l'évolution de la qualité de la matière première qu'est l'eau brute est généralement relativement lente. Les variations des quantités à traiter, qui dépendent de la demande en eau potable, sont en revanche souvent importantes et le débit est généralement un paramètre clé dans l'automatisation des installations.

L'inertie de la plupart des traitements biologiques mis en œuvre, la complexité des phénomènes de coagulation-floculation rendent parfois difficile la régulation de ces procédés. Mais la progression des connaissances ainsi que des technologies de mesure permettent graduellement d'accroître les possibilités de modélisation grâce notamment à l'apparition des techniques connexionnistes très bien adaptées pour la modélisation de tels procédés fortement non linéaires.

L'usine entièrement automatisée sans intervention humaine n'existe pas cependant. Même si aucun personnel d'exploitation n'est présent en continu sur certains sites, des agents sont nécessaires pour assurer la maintenance, certaines tâches de réglage, l'établissement de diagnostic sur des périodes plus ou moins longues. Toutefois, un grand nombre de fonctions d'automatismes sont déjà réalisées couramment dans les installations de traitement d'eau. Les plus courantes sont présentées dans le tableau ci-dessous (cf. Tableau 2-1), sans prétendre couvrir tous les cas d'application ni prendre en compte les importants progrès à venir.

On constate que la majorité des régulations sont liées au débit d'eau. Il existe également quelques modèles mathématiques pour la régulation de certains procédés. En particulier, pour la régulation du pompage de l'eau traitée, un modèle expert basé sur la prévision de consommation permet d'optimiser les niveaux de réservoir [14].

Dans le paragraphe suivant, nous nous intéresserons plus particulièrement au procédé de coagulation qui fait l'objet de notre étude.

| Fonction Automatisée | Paramètres de référence | Moyen | Observations |
|---|---|--|---|
| Pompage eau brute | Mesure de niveau de la bêche d'eau traitée et coût d'énergie selon l'heure. | Variation du débit pour que le bilan énergétique soit le plus faible (débit maximum la nuit) [10] | |
| Pompage eau traitée | Niveaux de réservoir et prévision de consommation. | Modèle mathématique ou système expert pour déterminer les consignes en fonction de la prévision de consommation [9, 14]. | Relativement complexe. A réserver aux réseaux de distribution important alimentés par plusieurs usines. |
| Débit réactif (coagulant, acide, etc.) | Débit eau | Proportionnalité au débit, la dose étant généralement fixée pour la coagulation par essai Jar-Test. | |
| Dose de réactifs (débit de réactif / débit d'eau brute) | SCD (Streaming Current Detector) | | En test |
| | Divers paramètres de qualité d'eau brute : turbidité, pH, température, etc. | Algorithme spécifique | Etude spécifique |
| Extraction des boues de décantation | Débit d'eau et concentration des boues extraites | Extraction proportionnelle au débit avec arrêt au seuil bas de concentration de boue extraite | |
| Enclenchement d'un lavage de filtre | Perte de charge et temps de filtration | Automate programmable avec gestion des priorités pour ne concerner qu'un seul filtre à la fois. | |
| Régulation filtre | Niveau d'eau dans le filtre | Régulation spécifique avec démarrage lent. | |
| Désinfection chlore | Résiduel de chlore | Régulation spécifique pour maintenir une consigne de résiduel de chlore constante [23, 24]. | |
| Désinfection Ozone | Débit d'eau et résiduel d'ozone | Régulation spécifique | |

Tableau 2-1 : Principaux automatismes dans une station de traitement d'eau potable.

3. Le contrôle automatique du procédé de coagulation

Quand on parle de contrôle du procédé de coagulation, il s'agit en fait de régulation en continu de la dose de réactifs.

3.1 Méthode actuelle : essais de traitabilité en laboratoire

Cette technique a pour but de rechercher la dose de réactifs à injecter en fonction de la qualité de l'eau brute. La dose optimale de coagulant est, traditionnellement, déterminée à l'aide d'un essai expérimental appelé « Jar-test ». On utilise, à cet effet, un flocculateur de laboratoire, appareil permettant d'agiter simultanément, à une vitesse bien déterminée, le liquide contenu dans une série de béchers. Il faut en effet que la vitesse de rotation soit identique dans tous les béchers pour que les résultats soient comparables. Cet essai consiste à mettre dans ces récipients, contenant la même eau brute, des doses croissantes de coagulant et de faire l'essai de coagulation [4, 5]. Après quelques instants, on procède sur l'eau décantée à toutes les mesures utiles de qualité de l'eau (turbidité, matières organiques, pH, etc.). La dose optimale est déterminée en fonction de la qualité des différentes eaux comparées.

La fréquence de ces Jar-Test est souvent irrégulière. En général, sur les usines importantes un seul essai est effectué par jour. L'opérateur fera un nouvel essai entre temps pour changer la dose de coagulant uniquement si la qualité de l'eau traitée se dégrade. L'inconvénient de cette technique est qu'elle nécessite une intervention de l'opérateur. Ce type d'approche a également le désavantage d'avoir un temps de retard relativement long. En effet, on ne modifie la dose de coagulant qu'une fois l'événement apparu. De plus, elle ne permet pas de suivre finement l'évolution de la qualité de l'eau brute. Par exemple, si l'eau brute devient plus « facile à traiter » l'opérateur ne le verra pas forcément et donc ne modifiera pas la dose de coagulant d'où un coût d'exploitation plus élevé que nécessaire et une économie non réalisée.

On voit ici tout l'intérêt de disposer d'un contrôle efficace de ce procédé pour une meilleure efficacité de traitement et une réduction des coûts d'exploitation. Deux grandes méthodes peuvent être utilisées pour la régulation de ce procédé :

- la régulation en aval basée sur la qualité de l'eau brute immédiatement après l'injection du coagulant ;
- la modélisation du procédé utilisant des paramètres descripteurs de la qualité d'eau brute.

Dans le §3.2 nous détaillerons le principe de ces deux méthodes et comparerons leurs avantages et inconvénients.

3.2 Contrôle automatique

3.2.1 Régulation en aval basée sur le résultat de l'adjonction du coagulant à l'eau brute

La première solution est donc la régulation basée sur la qualité de la coagulation (cf. Figure 2-1). La dose de coagulant est alors déterminée en fonction du résultat de l'adjonction du coagulant à l'eau brute. Cette solution n'est envisageable que si l'utilisation d'un capteur spécifique de la coagulation est possible.

La mesure du potentiel Zeta (cf. Chapitre 1 §4.2.3 p. 11) est une technique bien connue pour évaluer la neutralisation des charges des collodes. Cependant, sa mise en œuvre de façon automatique et en continu est actuellement difficile. Depuis longtemps, on sait mesurer un

paramètre que l'on appelle le courant d'écoulement et dont certains auteurs [13] ont établi la relation avec le potentiel Zeta. Cette mesure s'effectue en forçant l'écoulement d'un fluide à travers un tube capillaire ou un support poreux. La migration, avec le fluide, des anions arrachés à la surface des colloïdes crée un courant électrique que l'on peut mesurer en plaçant judicieusement des électrodes. Ce courant appelé « courant d'écoulement » est d'autant plus faible que les charges de surface sont neutralisées. Il est en général négatif sur les eaux de surface rencontrées, par analogie avec le potentiel Zeta.

En 1966, un capteur appelé *Streaming Current Detector* (SCD) a été présenté [16] et il est commercialisé depuis par plusieurs sociétés. Cet analyseur a fait l'objet, de plusieurs publications [4, 13] montrant son intérêt. Son principe reprend la technique de mesure du courant d'écoulement moyennant quelques modifications permettant un fonctionnement en continu. Celui-ci évalue en continu l'addition d'un coagulant à l'eau brute et renvoie un signal directement proportionnel au résultat de cette coagulation [2, 3, 17]. Une présentation théorique du principe a été donnée par Dentel [13].

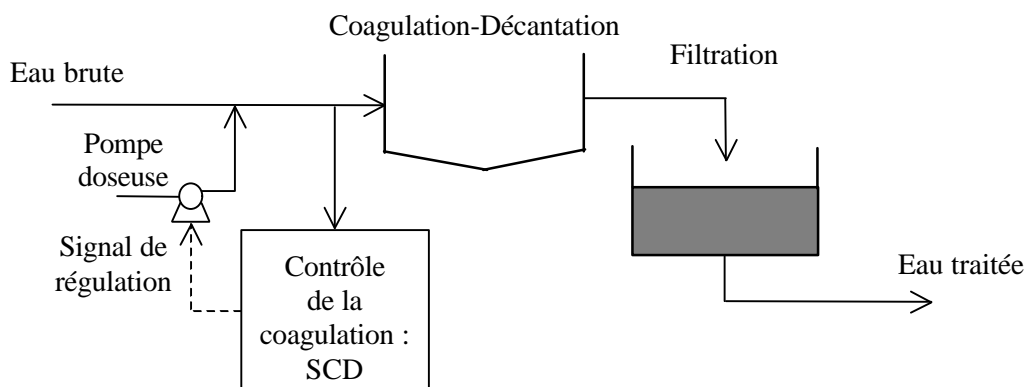


Figure 2-1 : Contrôle basé sur la qualité de la coagulation.

Le SCD mesure donc la charge résiduelle des colloïdes et des particules dans l'eau. Comme ces particules ont une charge négative et que les ions du coagulant ont une charge positive, l'ampleur et le signe des charges électriques sont imposés par la dose de coagulant. Le système SCD délivre un courant électrique directement proportionnel à l'ampleur des charges électriques. Ce système nécessite la définition d'un point de référence qui correspond à une coagulation optimale pour une certaine plage de qualité d'eau brute. Ce point de référence ou consigne est défini en utilisant un essai Jar-test pour déterminer la dose de coagulant optimal et donc la valeur de consigne du signal de mesure du SCD. Par la suite, le but est de maintenir le signal délivré par ce système à cette consigne en augmentant ou en diminuant la dose de coagulant en fonction de la variation du signal du SCD. Cette régulation est, en général, effectuée à l'aide d'un contrôleur PID (Proportionnel Intégral Dérivé).

L'avantage de ce système est de pouvoir disposer à un instant donné, pour une qualité d'eau brute constante, un signal directement proportionnel au résultat de la coagulation. Il permet donc :

- de détecter toute anomalie dans le système d'injection de réactif,
- de servir de système d'alerte.

L'inconvénient de ce système est en premier lieu son coût d'exploitation élevé. De plus, le fonctionnement en continu de cet appareil demande le réajustement du point de référence assez fréquemment (environ une fois par mois) ce qui nécessite de faire un essai Jar-test. Enfin, il a également été montré [13] que son efficacité était limitée pour certains types de qualité d'eau brute ; en particulier lorsque le pH de l'eau brute est élevé ($\text{pH} > 8$).

3.2.2 Modélisation du procédé de coagulation en utilisant des paramètres descripteurs de la qualité de l'eau

Une autre approche, qui se développe le plus actuellement, est la régulation du procédé de coagulation basée sur les paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute. Cette technique impose de trouver un modèle reliant la dose optimale de coagulant à ces différents paramètres (cf. Figure 2-2). Cette méthode possède les mêmes avantages que le contrôle basé sur la qualité de la coagulation mais elle permet de s'affranchir des coûts d'exploitation élevés du SCD et de son efficacité limitée pour certains types de qualité d'eau.

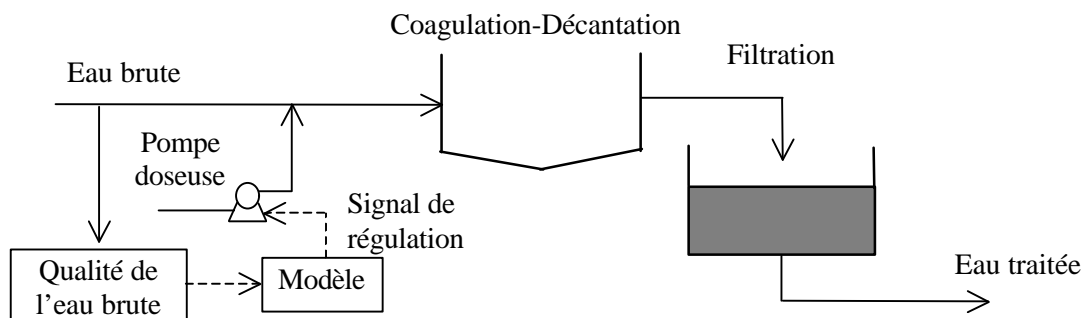


Figure 2-2 : Contrôle basé sur les paramètres descriptifs de l'eau brute.

Les premières études [5, 8] sont basées sur un modèle linéaire reliant les paramètres descripteurs de l'eau et le taux de traitement. Brodard et al. [5] proposait d'utiliser un modèle linéaire pour relier la turbidité, la température et le débit de la rivière à la dose de coagulant. Ces études ont montré l'intérêt de cette approche mais également les limites de la modélisation linéaire pour ce procédé.

Néanmoins, cette approche est redevenue très prometteuse depuis le développement de nouvelles techniques comme les réseaux de neurones artificiels (RNA). Les procédés de traitement d'une usine de production d'eau potable, en particulier le procédé de coagulation, étant relativement complexes et fortement non-linéaires, on peut penser que cette technique est bien adaptée pour la modélisation de ce type de procédé. De plus, nous n'avons pas de connaissance explicite du procédé de coagulation. Il est donc très difficile de le modéliser de manière déterministe.

Les réseaux de neurones artificiels peuvent être utilisés pour essayer de fournir des modèles de procédés de traitement avec deux objectifs principaux : une meilleure efficacité du traitement et une réduction des coûts d'exploitation. En effet, les réseaux de neurones ne nécessitent pas de connaissance explicite sur le procédé à modéliser. Le réseau de neurones va élaborer lui-même ces connaissances à partir d'exemples qu'on lui présentera. Il faut donc passer par une phase d'apprentissage pour ajuster les différents paramètres du réseau. Par la suite le réseau est capable d'analyser de nouveaux cas.

Plusieurs études [1, 7, 15, 21, 22] ont déjà montré le potentiel de ces techniques pour la modélisation du procédé de coagulation. L'ensemble de ces études proposent de relier la dose de coagulant à différents paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute tel que la turbidité, le pH, la conductivité, etc. à l'aide d'un réseau de neurones. La base d'apprentissage est construite à l'aide d'un historique d'essai « Jar-Test » afin de modéliser la dose de coagulant optimale.

Cox et al. [1] proposent d'utiliser la couleur, la conductivité et la turbidité de l'eau brute pour prédire la dose de coagulant. Les résultats obtenus sur un site pilote [7] semblent encourageants. Cependant, le manque de paramètres descripteurs en entrée ne permet pas de prendre en compte l'ensemble des variations de la qualité de l'eau brute. Une autre étude [21] propose d'utiliser beaucoup plus de paramètres en entrée du modèle RNA. Mirsepassi et al. proposent également d'utiliser un historique de ces différents paramètres, c'est-à-dire de prendre en compte la valeur des paramètres aux instants $t-1$, $t-2$, ..., $t-6$ (t représente le jour courant). Gagnon et al. [15] montrent l'intérêt de construire des modèles saisonniers. Ils utilisent quatre paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute : pH, turbidité, conductivité, température. Cette étude permet de comparer la précision d'un modèle annuel, applicable toute l'année, et de quatre modèles saisonniers. Néanmoins, la détermination des quatre périodes d'application de chaque modèle semble difficile.

Dans ce mémoire, nous proposons également un système pour la détermination en ligne de la dose optimale de coagulant en fonction des caractéristiques de l'eau brute que nous désignerons sous le terme de « capteur logiciel ». L'originalité de notre travail réside principalement dans l'intégration de différentes techniques dans un système global permettant : la validation et la reconstruction de données, la prévision du taux optimal de coagulant, et l'analyse des incertitudes. Nous proposons un système global basé sur des RNA supervisés et non-supervisés. Les deux objectifs principaux de notre système sont :

- la robustesse aux incertitudes,
- la portabilité du système.

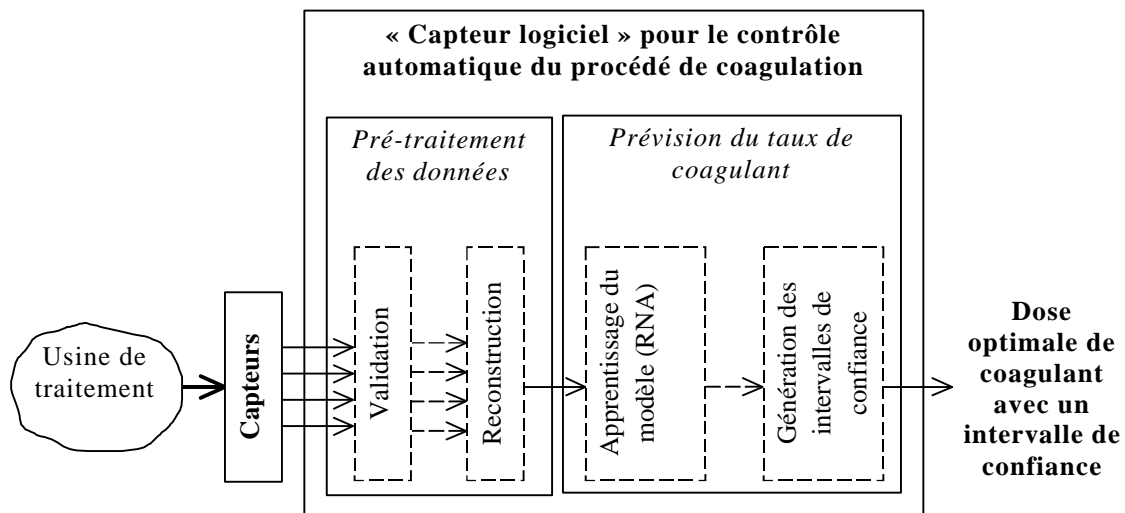


Figure 2-3 : Structure du système pour le contrôle automatique du procédé de coagulation.

Etant donné la forte variabilité des entrées et la fiabilité des capteurs disponibles, une propriété importante pour un tel système est en effet la robustesse par rapport aux défaillances possibles des capteurs ou à des caractéristiques inattendues de l'eau brute, dues à des pollutions accidentelles par exemple. Dans notre système, une telle robustesse est obtenue par une architecture modulaire à deux niveaux : un niveau de pré-traitement permettant le rejet des mesures invalides et de la reconstruction des données manquantes, et un niveau de prévision effectuant la détermination de la quantité optimale de coagulant à partir des caractéristiques de l'eau brute. L'ensemble de ces méthodes et leurs applications sont présentées dans la deuxième partie de ce mémoire.

4. Supervision

La partie commande fournit des ordres au procédé composé de pompes doseuses, de vannes, etc., grâce à des actionneurs et reçoit des informations sur l'état du procédé grâce à des capteurs. L'ensemble procédé, actionneurs, capteurs et partie commande constitue le système automatisé. En plus du dialogue ordres-comptes-rendus entre les capteurs, les actionneurs et la partie commande, cette dernière échange des informations avec l'opérateur dont elle reçoit des consignes et à qui elle fournit des informations.

Un système de supervision d'une installation consiste à réaliser cette « boucle » qui passe par l'opérateur. L'acquisition des données est la fonction qui relie la partie commande à la fonction de supervision.

4.1 L'acquisition des données

Si un capteur peut fournir des informations en continu ou à une certaine fréquence f , que faut-il acquérir en vue d'une utilisation directe et donc transporter, ou encore, que doit-on stocker pour un usage ultérieur ?

Compte tenu du coût du transport et du stockage des données, il faut se limiter à une information utile aussi performante que possible en éliminant les défauts ; il faut donc la sélectionner et l'améliorer.

Ce sont ces différents points qui vont être évoqués dans la suite de ce paragraphe.

4.1.1 Les types d'acquisition

Pour réduire la quantité d'information recueillie, il faut limiter les valeurs redondantes successives. Deux méthodes classiques sont généralement mises en œuvre dans les systèmes d'acquisition.

L'acquisition à pas de temps constant (réglable et choisi par l'opérateur) consiste à n'acquérir que des valeurs discrètes correspondant aux temps $0, t_0, 2t_0, \dots, nt_0$; t_0 étant le pas de temps choisi. Plus t_0 sera long, moins on acquerra d'informations, mais plus les lignes de transport et la mémoire seront préservées. Cette méthode conserve justesse, fidélité et sensibilité à condition que le pas de temps soit choisi correctement en fonction du phénomène physique à mesurer. La difficulté pour l'opérateur est de fixer de façon judicieuse le pas de temps t_0 . En effet, si celui-ci est mal réglé on risque de perdre des informations utiles ou, au contraire, de stocker des informations redondantes.

Une autre méthode est l'acquisition sur « bande morte ». On prend comme base de sélection de la mesure le pas de variation de celle-ci. Ce pas est fixé en tenant compte de la sensibilité de l'événement physique que l'on mesure. On compare à la dernière valeur acquise les valeurs mesurées qui suivent et on conserve la première dont l'écart est supérieur ou égal au pas de variation maximum retenu. Cette nouvelle valeur mesurée et acquise sert de point de comparaison pour la suivante et ainsi de suite. On constate que la mesure est acquise à des instants multiples du pas de temps t_0 . Si T est la date de la mesure en cours d'acquisition, la mesure ayant fait l'objet de la précédente acquisition au temps T_a s'applique jusqu'au temps T . Cette méthode permet de réduire le pas de temps t_0 sans stocker d'information redondante ni perdre d'informations.

C'est cette dernière méthode qui est la plus fréquemment utilisée sur les usines de production d'eau potable. En effet, les phénomènes peuvent avoir une variation relativement lente ou, à l'opposé, très rapide lors d'une pollution accidentelle de la ressource.

4.1.2 Amélioration de la qualité

Un enregistrement en continu d'un événement constant fait apparaître très souvent de petites variations erratiques correspondant à des irrégularités locales des conditions de mesure ou encore à des variations aléatoires du signal de mesure. Ces variations non-significatives peuvent être éliminées par « lissage », opération consistant à moyenniser la mesure pendant l'acquisition. C'est cette valeur moyenne qui intervient dans le processus de comparaison décrit plus haut.

Une autre amélioration consiste à éliminer les mesures qui sortent d'une plage type fixée par l'exploitant et à afficher un message de « défaut » si cette situation se reproduit pour les données suivantes.

C'est l'ensemble de ces techniques, avec d'autres plus élaborées, que nous décriront dans le troisième chapitre « Pré-traitements des données ». Cette étape est fondamentale pour obtenir des données brutes validées en vue de toute modélisation future.

4.2 Supervision ou Gestion Technique Centralisée (GTC)

Un système de GTC a deux rôles principaux :

- faciliter l'exploitation de l'usine en rassemblant en un même lieu (salle de commande) toutes les informations utiles à l'exploitant (mesures en continu, alarmes, ...) et en lui permettant depuis ce même lieu d'agir sur la partie commande. Ces fonctions doivent s'exécuter en temps réel.
- permettre une analyse du fonctionnement de l'usine en vue de tendre vers son exploitation optimale. Ces fonctions s'exécutent en temps différé.

4.2.1 Fonctions temps réel

La notion de temps réel est ici relative à un temps de réaction humaine, c'est-à-dire de l'ordre de quelques secondes, voire même quelques minutes dans certains cas de communication à distance.

Le système de GTC dans sa fonction de conduite et de surveillance en temps réel doit permettre de :

- communiquer avec les éléments réalisant la partie commande,
- constituer une base de données, véritable image de l'installation,
- trier les informations obtenues,
- mettre à la disposition de l'opérateur les informations significatives,
- permettre à l'opérateur de fournir des ordres et des consignes à la partie commande.

Le matériel utilisé est constitué d'une unité centrale (micro-ordinateur ou automate programmable haut de gamme pour de petites configurations) dans laquelle se situe la base de données et qui gère les périphériques de communication homme-machine : console de visualisation (synoptique de l'installation) et imprimante.

L'imprimante consigne les événements au fur et à mesure qu'ils apparaissent. La console de visualisation peut présenter les informations sous forme alphanumérique mais, pour améliorer l'ergonomie du poste de travail de l'opérateur, on utilise souvent des représentations schématiques sur un écran (synoptique sur console graphique).

Ces systèmes sont munis également d'un signal automatique d'appel de l'opérateur d'astreinte pour les cas d'alarme urgente.

4.2.2 Fonctions temps différé

L'adjonction d'une mémoire de masse complémentaire permet de mémoriser des informations en vue d'une exploitation à posteriori.

On peut ainsi constituer :

- des bilans d'exploitations (journaliers, hebdomadaires ou mensuels) dans lesquels sont présentés les moyennes ou totalisations des mesures les plus significatives, les cumuls des temps de marche pour l'aide aux opérations de maintenance, etc.,
- des courbes de valeurs de mesures permettant de visualiser l'évolution de paramètres significatifs,
- un archivage d'informations sur un support fiable permettant d'effectuer des analyses statistiques.

Nous avons également développé, dans le cadre de cette étude, un outil de surveillance et de reporting qualité des unités de traitement. L'application permet de surveiller la qualité de la ressource en eau et de générer des bilans de qualité de l'usine. L'avantage de cet outil réside essentiellement dans l'aide qu'il apporte aux exploitants pour la validation et la génération de bilans pertinents. Cet outil utilise les méthodes de pré-traitement des données que nous aborderons dans le troisième chapitre. Nous détaillerons, également, l'implémentation de cet outil sur une usine dans le chapitre 6.

4.3 Aide à la décision

Les systèmes d'automatisme et de supervision déchargent l'agent d'exploitation des tâches routinières ou fastidieuses, en lui laissant la responsabilité des tâches de plus haut niveau ou exceptionnelles pour lesquelles il peut être assisté par un système d'aide à la décision. On peut classer de tels systèmes en deux catégories :

- ceux qui se rapportent à la maintenance, qu'elle soit curative ou préventive,
- ceux qui se rapportent à la conduite d'une installation en vue de son optimisation.

Des progrès très rapides ont été réalisés dans ce domaine depuis quelques années pour le développement de systèmes d'aide à la maintenance et d'aide à la conduite des exploitations.

4.3.1 Aide à la maintenance

Des dispositifs d'aide au dépannage peuvent être prévus au niveau des automates programmables, pour réaliser par exemple des contrôles de discordance, des détections d'anomalies par rapport à un fonctionnement habituel pré-programmé, etc. Les pupitres opérateurs programmables permettent par exemple d'afficher, pour l'opérateur qui vient d'être appelé, des messages d'aide au dépannage qui précisent l'origine de l'anomalie.

Comme nous l'avons mentionné précédemment (cf. §4), la fonction supervision fournit fréquemment des informations utiles pour l'aide à la maintenance préventive, par exemple, en

calculant des temps de marche de pompe, en interprétant des dérives de courbes de mesure pour demander un ré-étalonnage de capteur, etc.

Par ailleurs, le coût raisonnable des micro-ordinateurs possédant de grosses capacités mémoire permet maintenant l'assistance de l'informatique pour la conservation et la recherche de fichiers, l'établissement de programme d'entretien, l'aide au diagnostic, etc. C'est la GMAO (gestion de la maintenance assistée par ordinateur).

4.3.2 Aide à la conduite

L'utilisation d'ordinateurs de plus en plus performants permet d'effectuer des tâches d'aide à la conduite en utilisant des calculs de simulation à partir de modèles mathématiques. L'un des problèmes rencontrés dans le domaine du traitement de l'eau potable est le manque de connaissances explicites sur les différents procédés. De plus, ceux-ci sont relativement complexes et les phénomènes mis en jeu sont fortement non-linéaires. Le développement de nouvelles techniques telles que les réseaux de neurones, très adaptés pour la modélisation de systèmes non-linéaires, a rendu particulièrement intéressante la modélisation des différents procédés de traitement intervenant dans une usine de traitement d'eau potable. L'inconvénient de ces systèmes est qu'ils doivent disposer de nombreux exemples pour établir leurs connaissances. Le développement rapide des micro-ordinateurs disposant de grosses capacités mémoire à des coûts acceptables permet maintenant de disposer d'informations suffisantes pour l'apprentissage des réseaux de neurones.

Ces logiciels d'aide à la conduite permettent de capitaliser les connaissances des opérateurs sur les différents procédés de traitement, d'automatiser et de fiabiliser la conduite de certains procédés [25, 29]. Mais l'utilisation de ces systèmes pour la conduite de procédés en temps réel est encore freinée par le manque de fiabilité et le coût encore élevé d'un certain nombre de capteurs.

5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé les différents problèmes liés à l'instrumentation, l'automatisation et la supervision d'une usine de traitement d'eau potable.

Les principes du procédé de coagulation et l'intérêt de disposer d'un contrôle automatique et fiable de ce procédé ont, également, été exposés en détail. De même, nous avons fait le point sur les différentes techniques existant pour le contrôle de ce procédé en montrant leurs avantages et leurs inconvénients. Il est, d'ores et déjà, apparu que le contrôle basé sur les paramètres descripteurs de la qualité de la ressource est la solution la plus intéressante.

Dans les chapitres suivants, nous allons proposer plusieurs outils connexionnistes pour le pré-traitement des données et la prévision du taux de coagulant. Ces différentes techniques s'intègrent dans un système global de contrôle automatique du procédé de coagulation, que nous avons désigné sous le terme de « capteur logiciel ». Nous présenterons, au chapitre suivant, une technique de validation et de reconstruction de données en continu, basée sur le modèle connexionniste de Kohonen.

Instrumentation, régulation et supervision

Bibliographie

1. Adgar A., Cox C.S., Daniel P.R., Billington A.J, Lowdon A., Experiences in the application of the artificial neural networks to water treatment plant management, in *Proceedings of the International COMDEM'95*, Vol. 1, 33-38, Canada, June 1995.
2. Bernazeau F., Hubele C., Brodard E., Dalga N., Utilisation du streaming current detector pour l'asservissement de la clarification d'une eau de surface, *Water Supply*, Vol. 9, 39-47, Amsterdam, 1990.
3. Bernazeau F., Pieronne P., Duguet J.P., Interest in using a streamline current detector for automatic coagulant control, organics removal and safety, *Water Supply*, Vol. 10, 87-96, Hong Kong, 1992.
4. Bombaugh K. J., Dark W. A., Costello L. A., Application of the Streaming Current Detector to Control Problems, in *Proceedings of the 13th National ISA Analysis Instrument Symposium*, Houston, USA, 1967.
5. Brodard E., Bordet J. P., Bernazeau F., Mallevalle J. et Fiessinger F. Modélisation stochastique d'une usine de traitement d'eau potable. *2^{ème} Rencontres Internationales Eau et Technologies Avancées*, Montpellier, 1989.
6. Centre International De Formation (C.I.D.F.), Principes généraux de traitement des eaux, Lyonnaise des Eaux.
7. Cox C.S., Daniel P., Adgar A., Lowdon A., Chemical dosing philosophies for a water treatment plant: results of some pilot plant experimentation, in *Proceedings of the IEE Conference Publication*, Vol. 427 (2), 1052-1057, 1996.
8. Critchley R.F., Smith E.O., Pettit P., Automatic coagulation control at water-treatment plants in the north-west region of England, *Journal IWEM*, Vol. 4, 535-543, 1990.
9. Crommelynck V., Duquesne C., Miniussi C., Mercier M., Préviation des consommations d'eau de la banlieue parisienne par la technique des réseaux de neurones, *L'eau, l'industrie, les nuisances*, Vol. 155, 40-43, 1992.
10. Daguinos T., Kora R., Fotoohi F., Emeraude : optimised automation system for water production plants and small networks, in *Proceedings of IWSA*, Amsterdam, 1998.
11. Degrémont, Mémento technique de l'eau : Tome 1, Lavoisier - Technique et documentation, Paris, 1989.
12. Degrémont, Mémento technique de l'eau : Tome 2, Lavoisier - Technique et documentation, Paris, 1989.

13. Dentel S.K., Use of the streaming current detector in coagulation monitoring control, *Journal of Water Sciences Research and Technologies - Aqua*, Vol. 44 (2), 70-79, 1995.
14. Fotoohi F., Kora R., Nace A., Saphir : an optimising tool on drinking water distribution networks, in *Proceedings of HYDROINFORMATICS'96*, Zurich, 1996.
15. Gagnon C., Grandjean B.P.A., Thibault J., Modelling of coagulant dosage in a water treatment plant, *Artificial Intelligence in Engineering*, Vol. 11, 401-404, 1997.
16. Gerdes W. F., A new instrument - The Streaming Current Detector, in *Proceedings of the 12th National ISA Analysis Instrument Symposium*, Houston, USA, 1966.
17. Kan C. et Huang C., Coagulation monitoring in surface water treatment facilities, *Journal of Water Science Technology*, Vol. 38 (3), 237-244, 1998.
18. Lind C., A coagulant road map, *Public Works*, 36-38, March 1995.
19. Lind C., Coagulation Control and Optimization: Part one, *Public Works*, 56-57, October, 1994.
20. Lind C., Coagulation Control and Optimization: Part two, *Public Works*, 32-33, November, 1994.
21. Mirsepassi A., Cathers B., Dharmappa H.B., Application of Artificial Neural Networks to the Real Time Operation of Water Treatment Plants, in *Proceeding of the International Conference on Neural Networks*, Vol. 1, 516-521, Perth, Australia, 1995.
22. Nahm E., Lee S., Woo K., Lee B., Shin S., Development of an optimum control software package for coagulant dosing process in water purification system, in *Proceedings of the Society of Instrument and Control Engineers Annual Conference*, Vol. 35, 1157-1161, Tottori, Japan, 1996.
23. Rodriguez M. J. et Sérodes J. B., Neural network-based modelling of the adequate chlorine dosage for drinking water disinfection, *Canadian Journal of Civil Engineering*, Vol. 23, 621-631, 1996.
24. Rodriguez M. J., Sérodes J. B. et Côté P. A., Advanced chlorination control in drinking water systems using artificial neural networks, *Water Supply*, Vol. 15 (2), 159-168, Amsterdam, 1997.
25. Shepherd A., Ortolano L., Water-Supply Operations : Critiquing Expert-System Approach, *Journal of water Resources Planning and Management*, Vol. 122 (5), 348-355, 1996.
26. Valiron F., *Gestion des Eaux : alimentation en eau - assainissement*, Presses de l'école nationale des ponts et chaussées, Paris, 1989.
27. Valiron F., *Gestion des Eaux : automatisation - informatisation - télégestion*, Presses de l'école nationale des ponts et chaussées, Paris, 1988.
28. Valiron F., *Gestion des Eaux : principes - moyens - structures*, Presses de l'école nationale des ponts et chaussées, 1990.
29. Zhu X. et Simpson A. R., Expert system for water treatment plant operation, *Journal of environmental engineering*, Vol. 122 (9), 822-829, 1996.

Chapitre 3

Pré-traitement des données : validation et reconstruction

Dans ce chapitre, nous proposons d'appliquer le principe des cartes topologiques de Kohonen aux problèmes de la validation de données et de l'estimation de données manquantes. Dans un tableau de données, l'existence de valeurs aberrantes ou l'absence de données peuvent avoir des causes très diverses. La donnée peut être indisponible à cause d'un dysfonctionnement de l'appareil de mesure qui la délivre. Dans la collecte de données, il peut s'agir d'absence de réponses ou de réponses contradictoires qui doivent être invalidées par un système de validation de données. La validation de données et l'estimation de données incomplètes ne sont souvent pas un but en soi, mais constituent un pré-traitement des données. Néanmoins, cette étape va conditionner la précision des algorithmes ultérieurs d'estimation des sorties d'un système telle que la prédiction du taux de coagulant à partir de données réelles.

Face à un problème de données manquantes, deux attitudes sont possibles. D'une part, on peut éluder la question en ne retenant dans la base de données que les vecteurs complets. Cette méthode d'élimination, d'une simplicité évidente, présente l'avantage de permettre l'application de techniques classiques d'analyse de données sans modification pour des traitements ultérieurs. Mais cette méthode ne donne des résultats satisfaisants que lorsque les vecteurs incomplets sont peu nombreux, ce qui s'avère difficile dans le cas de vecteurs de grande dimension.

D'autre part, on peut remplacer les valeurs manquantes par une estimation de celles-ci. Les méthodes d'estimation de données manquantes font appel à des techniques très variées. Elles supposent en général un cadre probabilistique. Les méthodes heuristiques, souvent utilisées, comme le remplacement par la moyenne, la médiane ou une autre valeur de référence, constituent des solutions simples et peu coûteuses. Les méthodes paramétriques basées sur la maximisation de la vraisemblance, comme l'algorithme EM [29], ont prouvé leur efficacité et sont largement utilisées, mais elles requièrent la connaissance ou l'estimation des lois de probabilités des variables et sont généralement coûteuses en temps de calcul.

Nous présentons dans ce chapitre un module de pré-traitement des données, comprenant la validation et l'estimation de données manquantes, basées sur l'utilisation des cartes topologiques de Kohonen. Dans un premier temps, nous présentons une méthode de validation mono-paramètre simple. Nous étudions, ensuite, plus en détails, l'algorithme des cartes auto-organisatrices (SOM) introduit par Kohonen et son application à la validation et à la reconstruction de données invalides ou manquantes.

1. Principe général

Les applications dans le domaine environnemental font généralement appel à des capteurs complexes situés sur des sites distants. Le traitement des mesures correspondantes en vue de fournir une information de niveau plus élevé (telle que la prévision de la dose optimale de coagulant) doit donc permettre de détecter les pannes possibles de capteur et les incohérences des données d'entrée. Dans beaucoup de cas, même les experts ne peuvent se prononcer de manière catégorique sur la validité des données par manque d'information et de connaissance sur les phénomènes physiques sous-jacents. Pour cette raison, il est préférable d'envisager la validation des données comme la détermination d'un degré de confiance dans chaque observation, basée sur une comparaison entre les mesures et des modèles incorporant des connaissances de base relatives au domaine d'application. Par exemple, la validité d'une mesure de température peut être remise en cause pour différentes raisons : valeur anormalement haute ou basse ; variation trop importante entre deux mesures successives ; valeur observée incompatible avec d'autres mesures de la même quantité obtenues par un dispositif indépendant, etc.

Dans notre système, on peut considérer que la validation des données est effectuée à deux niveaux. Un premier niveau simple dit de validation mono-paramètre et un deuxième niveau plus complexe dit de validation multi-paramètres.

2. Validation mono-paramètre

Le premier niveau, très simple, est basé sur la comparaison de chaque paramètre d'entrée et de sa dérivée à une distribution des valeurs historiques obtenues en l'absence de défaut de capteur. Un niveau de confiance est calculé, et les données brutes auxquelles sont associées une confiance inférieure à un seuil prédéfini par l'utilisateur, sont déclarées invalides [9].

On estime la distribution de possibilité des valeurs historiques obtenues en l'absence de défaut de capteur. On fait l'hypothèse que le signal suit une loi normale, c'est-à-dire que les n valeurs considérées appartiennent à une population normale : $x_i \sim N(m, \sigma^2)$. On estime également la distribution de possibilité des différences successives obtenues en l'absence de défaut de capteur. On suppose également que cette différence $d_j = x_{j+1} - x_j$ suit une loi normale.

Ensuite, on considère chaque nouvel échantillon du signal x et on lui affecte un indice de confiance P_x en fonction de sa valeur et un indice de confiance P_d en fonction de sa dérivée. Pour affecter un indice de confiance global P_g à chaque x_i nous prenons comme opérateur de combinaison le minimum. En fixant un seuil sur l'indice global P_g , on peut invalider les informations aberrantes contenues dans le signal.

Cette approche simple permet dans beaucoup de cas de détecter les erreurs les plus grossières sur les mesures brutes. Néanmoins, la détection d'incohérences dans les données impliquant plus d'un paramètre exige l'utilisation de techniques multidimensionnelles plus sophistiquées telles que le modèle de carte auto-organisatrice de Kohonen mis en application dans notre système.

3. Validation multi-paramètres

3.1 Approche générale

Les approches neuronales pour la détection et la reconstruction des données invalides incluent les réseaux de neurones auto-associatifs ou *Autoassociative Artificial Neural Networks* (AANN) et les cartes auto-organisatrices de Kohonen [5].

L'idée fondamentale de l'approche AANN est d'approcher à l'aide d'un réseau de neurones multicouches la fonction identité, en utilisant des valeurs de sorties identiques aux entrées. La couche cachée permet typiquement de limiter la capacité et joue le rôle d'un goulot d'étranglement, qui force le réseau à coder de façon optimale les vecteurs d'entrée, exécutant de ce fait une compression de l'information et une réduction de dimension. Avec une seule couche cachée d'unités linéaires, cette approche s'est avérée équivalente à l'analyse en composante principale (ACP) [6]. En conséquence, des réseaux plus complexes avec des non-linéarités peuvent être vus comme implémentant une certaine forme « d'ACP non linéaire ». Une telle approche est proposée dans la référence [26], où un perceptron multicouches à cinq couches est utilisé pour la validation et la reconstruction de données. Ce réseau peut être vu comme deux réseaux de neurones de trois couches indépendantes reliées en série. Le premier réseau combine les variables redondantes de l'espace d'entrée \mathfrak{R}^n en un plus petit nombre de variables caractéristiques supposées représenter les caractéristiques essentielles des n entrées. Le deuxième réseau fonctionne de façon opposée et emploie l'information comprimée pour reconstruire les mesures redondantes initiales de l'espace d'entrée \mathfrak{R}^n . Une fois l'apprentissage effectué sur des valeurs historiques obtenues en l'absence de défaut de capteur, ce réseau peut être employé pour détecter les données invalides. Elles sont identifiées par leur erreur de reconstruction plus élevée que les autres [5]. Cependant, l'efficacité d'un tel système en présence de vecteurs d'entrée incomplets n'est pas entièrement prévisible.

Une autre approche neuronale pour la détection et la reconstruction des données invalides, qui sera présentée plus en détail dans ce mémoire, est basée sur l'utilisation des cartes auto-organisatrices de Kohonen [23]. Cette approche repose sur le calcul de distances entre les vecteurs d'entrée et des vecteurs de référence, ou prototypes. La détermination des prototypes peut être effectuée par l'algorithme des cartes auto-organisatrices (SOM) introduit par Kohonen. Le modèle SOM combine les atouts des méthodes de projection (analyse en composantes principales ou positionnement multidimensionnel, par exemple) et des algorithmes de classification ; il s'agit d'une méthode permettant d'organiser automatiquement des données de grande dimension. L'algorithme SOM peut également être utilisé comme une méthode d'analyse exploratoire des données. Cette méthode peut être employée en même temps pour visualiser des classes dans un jeu de données, et pour représenter les données sur une carte bidimensionnelle de telle sorte que des éléments semblables soient représentés dans des positions voisines sur la carte. L'intérêt pour notre application, par rapport à d'autres algorithmes tels que les centres mobiles, est de pouvoir visualiser l'évolution de la qualité de l'eau en deux dimensions. Des applications de SOM à la surveillance de la qualité de l'eau sont décrites dans [38-39].

3.2 Les cartes de Kohonen

3.2.1 Historique

La représentation économique de données préservant l'information utile est l'un des problèmes fondamentaux des sciences du traitement de l'information. Le but est, en général, de créer une image simplifiée, à différents niveaux d'abstraction, du monde observé, qui pour nous constitue l'ensemble des paramètres relatifs à la qualité de l'eau brute. Ce n'est que très

récemment qu'il a été montré que le cerveau forme des représentations neuronales sur des aires corticales spécialisées (traitement de la parole, vision, audition, ...) qui sont des images des différentes expériences sensorielles vécues. Entre ces aires, sont présentes des aires associatives sur lesquelles des signaux de différentes modalités convergent : il s'agit de véritables cartes respectant la topologie des informations qu'elles traitent. Bien que les neurones semblent placés sur des cartes (aires) spécifiques ils peuvent participer à différentes activités grâce à une grande plasticité neuronale qui illustre parfaitement les processus d'auto-organisation simple. La formation de cartes topologiquement correctes de distribution des signaux, en dimension 1 ou 2, à l'aide d'unités de traitement de configuration initiale arbitraire, inspira Kohonen [17] pour la formalisation, par un modèle neuronal artificiel, des représentations internes du cerveau. Ce modèle est une généralisation des travaux de Von der Marlsburg [43], qui a décrit le cortex visuel et ses capacités d'auto-organisation et de ceux de Willshaw [44] et Amari [1] portant sur la formation de projections topographiques directes entre deux structures laminaires.

Le premier article de T. Kohonen sur ce sujet a été publié en 1982 [22]. Son modèle, que nous décrivons plus précisément au §3.3 porte le nom de *Cartes topologiques auto-organisatrices* ou *Self Organising Feature Map*, ou *Self Organizing Map* (SOM). Il publie en 1984 la première version de son ouvrage : *Self Organization and associative memory* [21], qui est régulièrement remis à jour. Récemment (1995) il a publié un nouvel ouvrage *Self Organizing Maps* présentant sa méthode et ses dernières évolutions, le tout complété par plus d'un millier de références bibliographiques [23].

Dès 1988 de nombreuses études ont commencé à voir le jour pour comprendre le fonctionnement de ce modèle appartenant au domaine de l'apprentissage non-supervisé. De nombreuses améliorations relatives à l'architecture du réseau, au réglage des paramètres, à l'étude théorique du fonctionnement et à la représentation des sorties ont été apportées dans les années 90. Les cartes topologiques n'ont commencé à apparaître en milieu industriel qu'au début des années 90.

3.2.2 Les différents problèmes d'apprentissage

Avant de décrire le fonctionnement du modèle SOM nous présentons les différentes catégories d'apprentissage, et tout particulièrement l'apprentissage non-supervisé. La suite du chapitre sera consacré au modèle SOM : sa description, son analyse théorique, ses diverses évolutions et améliorations et ses applications.

Les mécanismes d'apprentissage mis en œuvre par les modèles connexionnistes peuvent être classés en plusieurs catégories. Les quatre principales sont :

- l'auto-association : un ensemble de vecteurs est présenté de manière répétitive et il est mémorisé par le système. Par la suite, lorsqu'une partie des composantes d'un vecteur ou un vecteur similaire est présenté au système, celui-ci devra retourner le vecteur original.
- l'hétéro-association : ce paradigme est une variante du précédent. On présente des paires de vecteurs de manière répétitive de sorte que le système apprenne à reproduire un élément d'une paire lorsque l'autre est présenté. L'objectif est d'associer un jeu de vecteurs d'entrée à un jeu de vecteurs de sortie.
- la discrimination : c'est la classification des vecteurs d'entrée parmi un ensemble fini de classes connues. Dans ce cas, une phase d'apprentissage est effectuée où chaque vecteur est présenté avec sa classe d'appartenance. Le but est de déterminer la classe d'appartenance de tout nouveau vecteur.

- la détection de régularités : chaque élément d'une famille de vecteurs est présenté au système avec une certaine probabilité. On souhaite que les caractéristiques fondamentales de l'ensemble des entrées soient identifiées. Il n'y a pas dans ce cas de connaissance *a priori* sur l'ensemble des classes.

Les deux derniers paradigmes permettent de mettre à jour des classes de méthodes d'apprentissage :

- le mode supervisé,
- le mode non-supervisé.

Le premier utilise un *professeur* comme source d'information. A tout élément de l'ensemble d'apprentissage est associée la valeur de la sortie désirée. C'est la différence entre la sortie du réseau et la sortie désirée qui sert à faire la correction des poids synaptiques du réseau, durant l'apprentissage.

Dans le cas de l'apprentissage non-supervisé il n'y a pas de connaissance sur les sorties désirées. Le réseau doit trouver de lui-même une interprétation des données (caractéristiques, corrélations ou catégories) basée sur les similitudes contenues dans les données, si elles existent. On dit que l'apprentissage se fait sans professeur.

3.3 Le modèle SOM

3.3.1 Apprentissage par compétition

Une méthode pour la détection de similarités est l'apprentissage par compétition. Soit W un ensemble de N cellules, éléments de base dans un réseau de neurones, représentées dans l'espace d'entrée $V \subseteq \mathcal{R}^n$ par des vecteurs *prototypes* $w_i = (w_{i1}, w_{i2}, \dots, w_{in})$, $i \in \{1 \dots N\}$, initialisés aléatoirement. Chaque cellule est reliée aux vecteurs d'entrée par des connexions (Figure 3-1), son vecteur prototype peut être interprété comme définissant une pondération de ces connexions.

Le principe de la méthode consiste à modifier le vecteur prototype d'une cellule seulement si celle-ci est activée. Il existe deux possibilités pour déterminer le nombre de cellules actives :

- Une seule cellule est active à chaque présentation. Cette règle est utilisée dans la plupart des réseaux en mode non supervisé.
- Plusieurs cellules sont actives en même temps, on parle alors de représentation distribuée. L'analyse de cette règle est très complexe et elle a été peu étudiée à ce jour.

Nous retenons la première règle où, pour chaque entrée $x \in V$ une seule cellule, d'indice b appelée *bmu* (best matching unit), est activée. Elle est sélectionnée comme étant celle dont le vecteur prototype w_b ¹ est le plus proche de l'entrée x :

$$d^V(x, w_b) = \min_{i \in \{1 \dots N\}} d^V(x, w_i) \quad (3.1)$$

où $d^V(x, w_i)$ est une mesure de la distance entre les vecteurs x et w_i .

¹ Dans toute la suite du document, w_b représente le prototype le plus proche ou prototype gagnant.

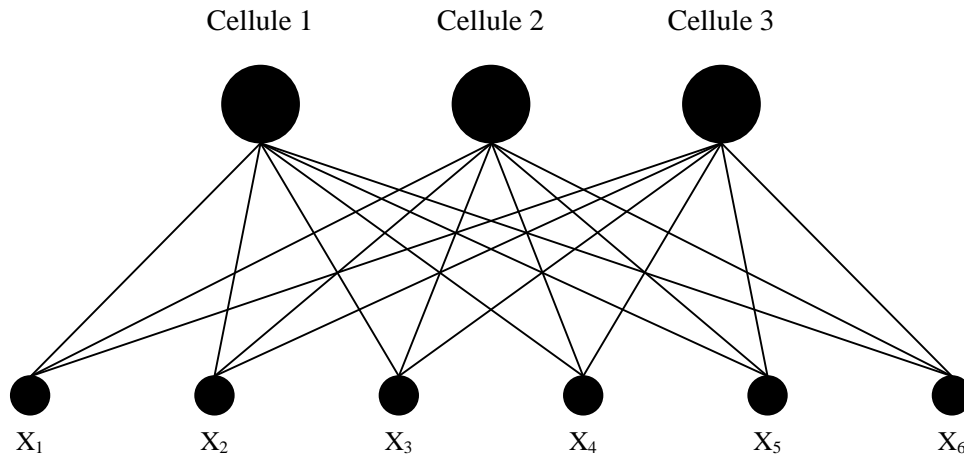


Figure 3-1 : Relations entre entrées et cellules.

La modification des vecteurs prototypes se fait selon la règle d'apprentissage dite du *winner take all* (le gagnant prend tout) et dont la forme la plus simple est :

$$\Delta w_i = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq b \\ \mathbf{a}(t) \cdot (x - w_b) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (3.2)$$

où $\Delta w_i = w_i(t+1) - w_i(t)$ et $\mathbf{a}(t)$ est une fonction, appelée taux d'apprentissage, permettant la convergence en probabilité des w_i vers le centre de gravité de chaque classe sous les conditions suffisantes suivantes :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{a}(t) = 0 \quad (3.3)$$

$$\text{et } \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{t=1}^T \mathbf{a}(t) = \infty \quad (3.4)$$

Un exemple de fonctionnement est représenté en Figure 3-2 : l'ensemble d'apprentissage est composé de points, symbolisés par des x, répartis sur deux nuages, et de deux points isolés ; deux cellules sont utilisées. Les vecteurs prototypes (symbolisés par des o pleins) sont initialisés aléatoirement. On constate qu'en fin d'apprentissage ils ont atteint leurs positions d'équilibre aux centres de gravité des deux ensembles de points, les deux points isolés n'ayant que très peu d'influence.

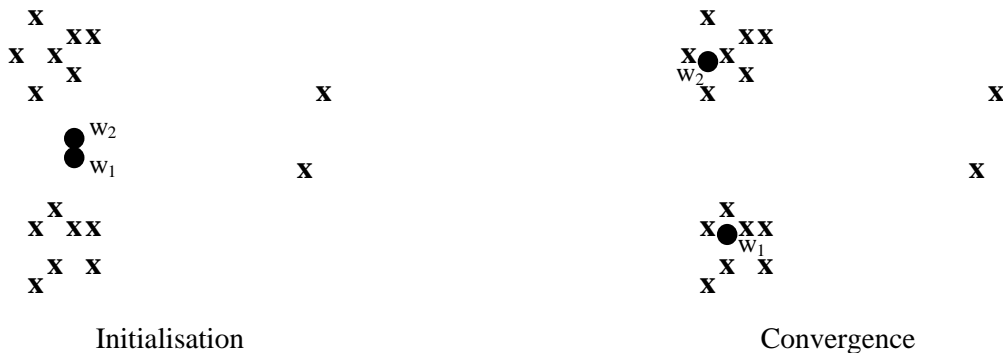


Figure 3-2 : Exemple de convergence.

3.3.2 Description du modèle SOM

Kohonen a proposé de compléter cette méthode par l'adjonction de relations de voisinage entre les cellules. Se basant sur les modèles biologiques, dans lesquels les cellules nerveuses ne sont pas des entités indépendantes et isolées mais un ensemble fortement interconnecté, il définit un ensemble de liens entre les cellules. Cet ensemble ainsi que le nombre de cellules employées constituent une architecture. La méthodologie employée pour relier les cellules entre elles va permettre d'organiser la disposition des vecteurs prototypes tout en préservant les relations de voisinage dans V : Kohonen parle de la *topologie* de V . Les cellules sont disposées physiquement aux nœuds d'un réseau dont les schémas de connexion les plus classiques : linéaire, rectangulaire, hexagonal, sont présentés dans la Figure 3-3. Le maillage défini par les relations inter-cellules, que nous nommerons relations de voisinage, est appelé carte. Une cellule i est représentée par ses coordonnées $i = (i_1, i_2)$ (ici dans le cas d'un voisinage bi-dimensionnel) dans un espace de sortie discret A , que l'on peut représenter comme étant une grille, chaque intersection de celle-ci représentant une position possible pour une cellule. Chaque cellule est représentée par un vecteur prototype dans V et par des coordonnées dans A (cf. Figure 3-4).

Avant de poursuivre, posons quelques définitions importantes pour la compréhension de ce qui va suivre :

Définition 1 : Distance dans A entre deux cellules i et j . La carte est un système de coordonnées mono ou bi-dimensionnelles dans la majeure partie des cas, sur lequel une distance peut être définie. La plus commune est la distance euclidienne. Il est également possible de définir la distance dans A comme étant le nombre minimal de liens reliant les cellules i et j . On la note $d^A(i, j)$.

Définition 2 : Voisine de rang k dans A d'une cellule. On dira que la cellule i possède comme voisine de rang k la cellule j si le nombre minimal de lien reliant ces deux cellules est égal à k , et on note $j \in n_k^A(i)$. Il peut exister plusieurs cellules voisines de même rang.

Définition 3 : Voisin de rang k dans V d'un vecteur prototype. Lorsque les distances de w_i à tous les autres vecteurs prototypes sont classées par ordre croissant, si $d^V(w_i, w_j)$ est classée en position k , on dira que le vecteur w_i possède comme $k^{\text{ième}}$ plus proche voisin le vecteur w_j et on note $n_k^V(i) = j$. Il peut exister plusieurs vecteurs prototypes voisins de même rang.

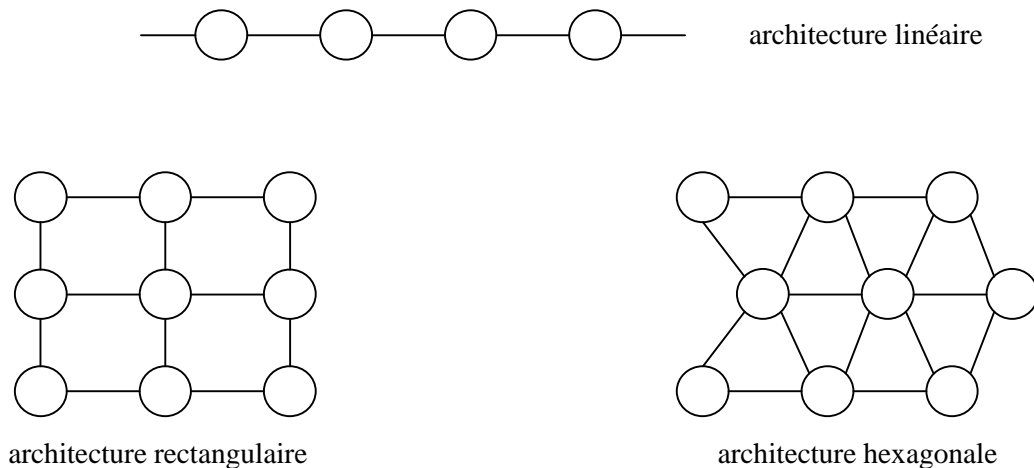


Figure 3-3 : Exemples d'architecture possibles.

Définition 4 : Voisinage de rang k d'une cellule i . Comme le montre la Figure 3-3 une cellule possède en général plusieurs voisines de même rang. Son voisinage de rang k sera constitué par l'ensemble des cellules voisines de rang inférieur ou égal à k . On le note :

$$N_k^A(i) = \{n_l^A(i) \mid 1 \leq l \leq k\} \quad (3.5)$$

Définition 5 Dimension géométrique n_a : c'est la dimension de l'espace de sortie A, elle est directement liée à la forme retenue pour le voisinage. Elle est égale à 1 si la carte est mono-dimensionnelle (voisinage linéaire), à 2 si la carte est bi-dimensionnelle (voisinage rectangulaire, hexagonal,...).

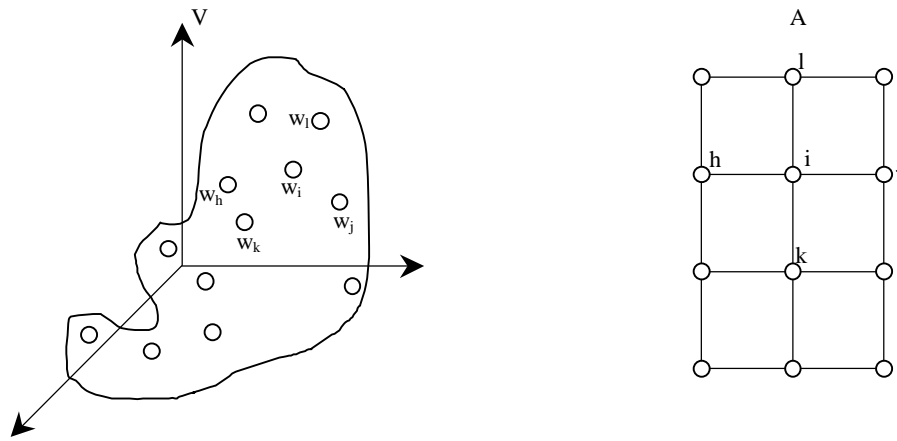


Figure 3-4 : Un carte et ces vecteurs.

La carte étant définie, Kohonen a proposé d'introduire une modification dans l'algorithme d'apprentissage par compétition. Au lieu de laisser la cellule gagnante être la seule à modifier son vecteur prototype, les relations de voisinage permettent aux diverses voisines de cette cellule de bénéficier de son apprentissage en modifiant leurs vecteurs prototypes. La règle (3.2) va être modifiée en *winner take most* (le gagnant prend l'essentiel), l'idée étant d'amener une relaxation locale (effet de lissage) sur les vecteurs prototypes voisins de la cellule gagnante, de telle sorte qu'une organisation globale apparaisse [23].

La règle (3.2) devient :

$$\forall i \in \{1 \dots N\}, \Delta w_i = h_{b,i} \cdot \mathbf{a}(t) \cdot (x - w_i) \quad (3.6)$$

avec

$$\begin{cases} h_{b,i} = 1 & \text{si } i = b \\ 0 < h_{b,i} < 1 & \text{si } i \in N_k^A(b) \\ h_{b,i} = 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.7)$$

$h_{b,i}$ est une constante définissant l'influence du déplacement de w_b sur les vecteurs prototypes des cellules situées dans un voisinage de rang maximum k . Pour améliorer l'équation (3.6) on prend pour $\mathbf{a}(t)$ une fonction décroissante, monotone et positive de t : $1 > \mathbf{a}_0 \geq \mathbf{a}(t) \geq 0$. $\mathbf{a}_0 = \mathbf{a}(0)$ est la valeur initiale, son initialisation est traitée plus loin. Ceci permet d'ordonner les vecteurs prototypes, au regard de l'ordonnement des cellules sur la carte, durant les

premières étapes d'apprentissage puis d'affiner leur placement pendant le reste de l'apprentissage.

La valeur $h_{b,i}$ est, elle aussi, rendue dépendante du temps sous forme d'une fonction monotone décroissante appelée *fonction de voisinage*, de manière à ce qu'un grand nombre de voisines, de rangs plus ou moins éloignés, soit influencées par le déplacement de w_b durant les premières étapes d'apprentissage, toujours dans le but d'ordonner les vecteurs prototypes. Pour la suite de l'apprentissage l'étendue de cette influence va diminuer jusqu'à ne plus concerner aucune cellule. Le type de fonction à employer sera présenté plus loin.

La règle (3.6) devient :

$$\forall i \in \{1 \dots N\}, \Delta w_i = h_{b,i}(t) \mathbf{a}(t) \cdot (x - w_i) \quad (3.8)$$

Ecrivons la forme retenue dans la littérature pour la règle de modification des vecteurs prototypes dans l'algorithme de Kohonen, $\forall i \in \{1 \dots N\}$:

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \mathbf{a}(t) \cdot h_{b,i}(t) \cdot (x - w_i(t)) \quad (3.9)$$

3.3.3 L'algorithme SOM

L'algorithme décrivant ce modèle est donc le suivant :

1. $t \leftarrow 0$, initialiser aléatoirement les vecteurs prototypes, initialiser le nombre maximum d'étapes d'apprentissage t_{max} ,
2. présenter un vecteur x , pris aléatoirement dans l'ensemble d'apprentissage,
 - (a) sélectionner la bmu :

$$d^V(x, w_b) = \min_{i \in \{1 \dots N\}} d^V(x, w_i) \quad (3.10)$$

- (b) modifier le vecteur prototype de chaque cellule :

$$w_i(t+1) \leftarrow w_i(t) + \mathbf{a}(t) \cdot h_{b,i}(t) \cdot (x - w_i(t)) \quad (3.11)$$

3. SI $t < t_{max}$, ALORS $t \leftarrow t + 1$, retourner au point 2.

SINON fin.

Réglages

Lors de la présentation du modèle, différentes fonctions et différents paramètres ont été employés. Chacun, par le respect de certaines règles qui vont être décrites dans ce paragraphe, contribue au bon fonctionnement du modèle. Les réglages envisageables concernent :

- le taux d'apprentissage $\alpha(t)$: c'est une fonction qui doit être positive, décroissante et monotone. Le but est de laisser les w_i s'ordonner pendant les premières étapes et de consacrer le reste des étapes à l'affinage des positions. On notera α_0 sa valeur initiale.

Kohonen [23] recommande de prendre α_0 proche de 1 pour les 1000 premières étapes puis de le laisser décroître. Il précise que la forme de la fonction (linéaire, exponentielle ou inversement proportionnelle à t) n'a pas d'importance.

– la fonction de voisinage $h_{b,i}(t)$: la méthode la plus simple consiste à définir un rang de voisinage k maximum pour déterminer la zone d'influence du déplacement de la *bm* de telle sorte que seules les cellules présentes dans $N_k^A(b)$, soient déplacées proportionnellement à $\alpha(t)$. On aura donc :

$$\begin{aligned} h_{b,i}(t) &= 1 & \text{si } i \in N_k^A(b) \\ h_{b,i}(t) &= 0 & \text{si } i \notin N_k^A(b) \end{aligned} \quad (3.12)$$

La fonction de voisinage proposée par Kohonen [21-22] est directement inspirée des modèles biologiques où une cellule active ses voisines les plus proches et inhibe les plus éloignées. Dans le cas d'un réseau, les cellules les plus proches de la *bm* voient leur vecteur prototype déplacé vers l'entrée proportionnellement à $\alpha(t)$ tandis que les vecteurs prototypes des cellules les plus éloignées sont repoussés. La fonction utilisée dans ce cas est celle du chapeau mexicain :

$$h_{b,i}(t) = a \cdot \exp(-d^A(b,i)^2) \cdot \cos(c \cdot d^A(b,i)) \quad (3.13)$$

où a et c représentent des amplitudes (cf. Figure 3-5 où la valeur de la fonction de voisinage est indiquée pour les 6 cellules autour de la *bm*).

Cependant, Erwin et al. [11] ont montré qu'il est nécessaire d'utiliser une fonction convexe pour éviter que la carte ne passe, en cours d'apprentissage, par des états stables, alors que les vecteurs prototypes n'ont pas encore atteint leur positions finales. Une telle situation peut amener un blocage de l'organisation alors qu'elle n'est pas terminée. Depuis cette étude la fonction la plus employée est de type gaussienne (cf. Figure 3-5) :

$$h_{b,i}(t) = e^{\left(\frac{-d^A(i,b)^2}{2 \cdot \sigma(t)^2} \right)} \quad (3.14)$$

où $\sigma(t)$ est également une fonction décroissante du temps, définissant le rayon d'influence du voisinage autour de la *bm*. Il sera tout d'abord grand pour permettre à la carte de se déplier puis se restreindra à la seule *bm*, ou à ses voisines directes [18], pour affiner le placement des vecteurs prototypes.

Quelque soit la fonction retenue, le choix du rayon d'influence de $h_{b,i}(t)$ a une grande importance car, si l'étendue du voisinage de départ est trop restreinte, la carte ne pourra pas s'ordonner globalement. Pour éviter de voir des zones de la carte désordonnées il est recommandé [23] de prendre une valeur initiale $h_{b,i}(0)$ très grande, voire même plus grande que la taille de la carte et de la laisser décroître jusqu'à 1 au cours de l'apprentissage.

– le nombre d'échantillons à présenter t_{\max} : Kohonen recommande, pour obtenir une bonne précision statistique, de prendre t_{\max} au moins égal à 500 fois le nombre de cellules constituant la carte.

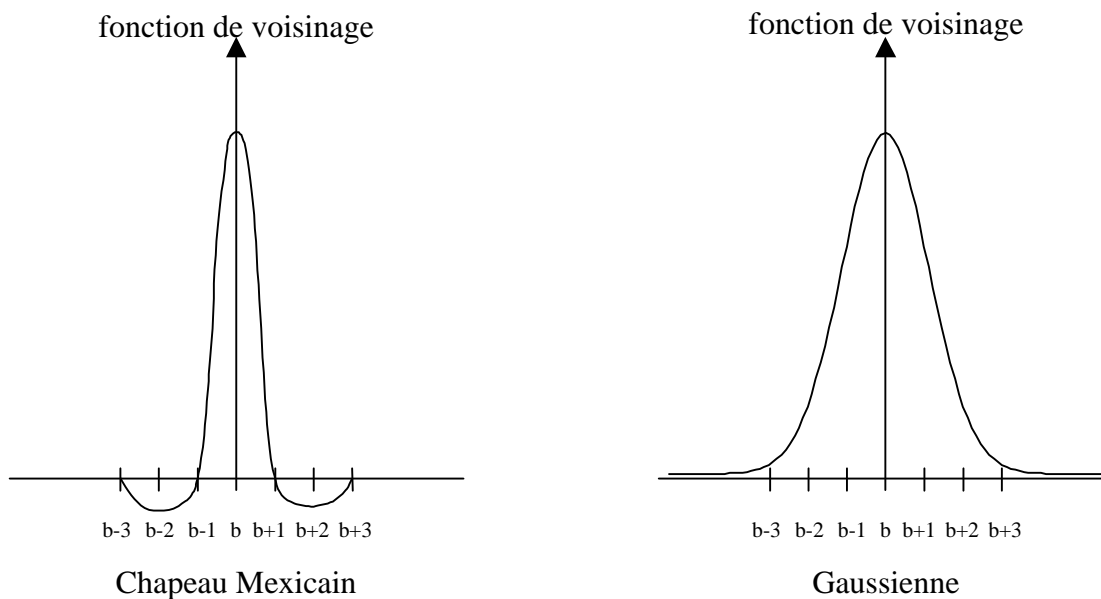


Figure 3-5 : Valeur de la fonction de voisinage autour de la bmu pour une carte linéaire.

3.4 Les critères de qualité de la représentation

Il est nécessaire de trouver des méthodes pour évaluer quantitativement les représentations **fournies par les SOM**. Il est, de plus, souhaitable que de telles méthodes d'évaluation soient exploitables pour régler au mieux les différents paramètres retenus (taille de la carte, α_0 , σ_0 , type de voisinage). Contrairement à d'autres méthodologies de représentation des données, le modèle SOM n'offre pas d'objectif analytique clair et précis ; les démonstrations vues précédemment ne permettent pas, sans modification importante du modèle, de définir, par exemple, une fonction d'énergie générale à minimiser.

En revanche, nous connaissons désormais les conditions que doit remplir une SOM pour être jugée efficace sur un ensemble d'entrées donné :

- Représente-t-elle de manière correcte la distribution des entrées ? Il faut que les vecteurs prototypes approximent la densité de probabilité des vecteurs d'entrée.
- Minimise-t-elle l'erreur de discrétisation ? Les distances d'un vecteur prototype aux entrées qui l'activent sont-elles minimales ?
- La carte respecte-t-elle les relations de voisinage de l'espace d'entrée ? Deux entrées proches dans V doivent être représentées par deux cellules proches sur la carte.
- La carte est-elle organisée ? Est-ce que les vecteurs prototypes sont ordonnés ? Il faut que deux cellules proches aient deux vecteurs prototypes proches.

Ce n'est que vers le début des années 90 que des critères, que nous allons maintenant décrire, ont été proposés.

3.4.1 Erreur de distribution

Définition

Un ensemble de vecteurs prototypes modélise une densité de probabilité $f_X(x)$, associée à la variable aléatoire X de \mathfrak{R}^n , si la *densité locale* des vecteurs prototypes dans V approxime la densité de probabilité des vecteurs d'entrée. On disposera alors d'un modèle implicite de la densité de probabilité décrite par les entrées. La carte modélisant la densité de probabilité sera tolérante aux erreurs, car chaque cellule est activée par une fraction de tous les vecteurs d'entrée. Si des cellules sont détruites la capacité de représentation de la carte sera dégradée proportionnellement au nombre de cellules détruites.

Pour une cellule i , avec V_i le polyèdre de Voronoï associé, la probabilité que l'entrée x vienne l'activer est :

$$b_i = \int_{V_i} f_X(x) dx \quad (3.15)$$

La variance d'excitation [27] sur la carte sera alors :

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (b_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i)^2 \quad (3.16)$$

L'écart type σ est nommé *erreur de distribution* [14]. La fonction de densité de probabilité $f_X(x)$ est inconnue : il faut estimer σ .

Estimation de l'erreur de distribution

On se dote, à cet effet, d'un ensemble de test $E_t \subset V$. Soit $B_i \subset V_i$ l'ensemble des $x \in E_t$ pour lesquels une cellule i est *bm*u :

$$B_i = \left\{ x \in E_t \mid d^V(x, w_i) = \min_{j \in \{1 \dots N\}} d^V(x, w_j) \right\} \quad (3.17)$$

La carte doit représenter la densité de probabilité des entrées "au plus juste" : les régions de V à forte densité seront représentées par plus de cellules que celles à faible densité. Autrement dit, les cellules doivent être réparties de manière à ce que chacune représente le même nombre d'entrées : $\forall i, j \in \{1 \dots N\}, \text{card}(B_i) \approx \text{card}(B_j)$.

On pose : $\hat{b}_i = \text{card}(B_i)$, le carré de l'erreur de distribution approximée est :

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{b}_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{b}_i)^2 \quad (3.18)$$

Cette estimation doit tendre vers une valeur limite en fin d'apprentissage, valeur que l'on souhaite proche de 0.

3.4.2 Erreur de discrétisation

Définition

Pour une réalisation x de X , on appelle *erreur de discrétisation* $q(x)$ la distance entre x et le vecteur prototype de la *bm*u :

$$q(x) = d^V(x, w_b) \quad (3.19)$$

L'ensemble des vecteurs prototypes minimise l'erreur de discrétisation totale [14] lorsque l'espérance Q des $q(x)$ est minimale pour une densité de probabilité donnée. Ce qui nous donne pour la fonction de densité de probabilité $f_X(x)$:

$$Q = \int_V q(x) \cdot f_X(x) dx \quad (3.20)$$

Remarques :

- Dans le cadre de la reconstruction d'un ensemble de vecteurs d'entrée, la valeur de l'erreur de discrétisation définira l'aptitude à reconstruire cet ensemble sans faire d'erreur.
- Il est à noter que la disposition des vecteurs prototypes minimisant l'erreur de discrétisation peut être différente de celle minimisant l'erreur de distribution.

Estimation de l'erreur de discrétisation

La densité $f_X(x)$ étant inconnue, il n'est pas possible de calculer Q exactement. Une approximation de Q est obtenue comme suit : soit un ensemble de test $E_t \subset V$, pour chaque $x \in E_t$ on mesure :

$$q(x) = d^V(x, w_b) \quad (3.21)$$

L'erreur de discrétisation moyenne sera :

$$\hat{Q} = \frac{1}{\text{card}(E_t)} \sum_{x \in E_t} q(x) \quad (3.22)$$

\hat{Q} tend vers une limite, que l'on souhaite aussi proche de 0 que possible, de manière décroissante au cours de l'apprentissage.

3.4.3 Préservation du voisinage

Les deux critères précédents sont utilisés pour vérifier la qualité du placement des vecteurs prototypes. Tout comme pour la démonstration de la convergence du modèle SOM, il faut également considérer leur ordonnancement par rapport aux relations de voisinage définies sur la carte : on parlera alors de *préservation de voisinage* et de *voisinage inverse*.

Propriétés

Une carte SOM peut être vue comme définissant une application Θ_A^V de V , de dimension n , dans A , de dimension p :

$$\begin{aligned} \Theta_A^V : V &\rightarrow A \\ w_i &\rightarrow i \end{aligned} \quad (3.23)$$

Cette application doit préserver les relations de *voisinage*. On dit que celles-ci sont préservées lorsque deux vecteurs d'entrée proches sont représentés par deux cellules proches sur

la carte. Par exemple, la Figure 3-6 montre une carte mono-dimensionnelle de 30 cellules après apprentissage d'une distribution de probabilité uniforme sur un triangle. Les deux cellules en bordure de carte, indicées 1 et 30, ont des vecteurs prototypes réagissant à des entrées proches et pourtant 1 et 30 sont des cellules très éloignées sur la carte. Le voisinage n'est pas respecté dans ce cas.

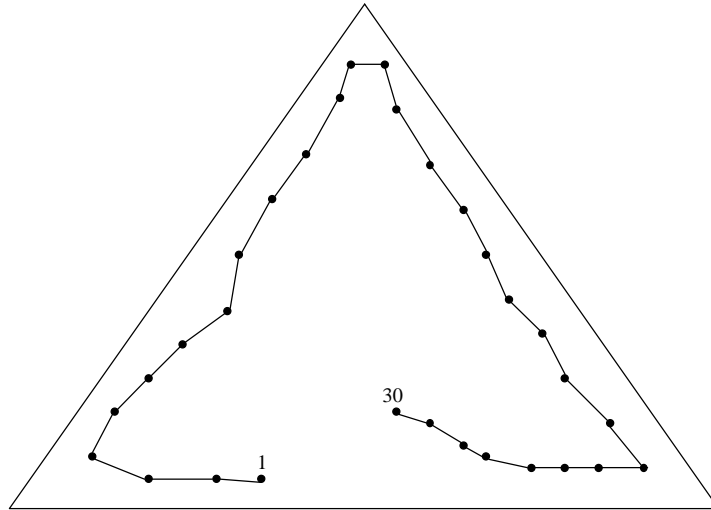


Figure 3-6 : Un exemple de voisinage non respecté.

Comme la carte SOM doit également être organisée (ordonnée), les vecteurs prototypes doivent être placés de telle sorte que les relations de voisinage définies sur la carte soient elles aussi respectées : il faut que deux cellules proches aient deux vecteurs prototypes proches. Si c'est le cas alors on dira que $\Theta_A^{V^{-1}}$ préserve *le voisinage inverse*. La Figure 3-7 illustre le cas d'un voisinage inverse non respecté, les cellules i et j , voisines directes, ayant des vecteurs prototypes w_i et w_j éloignés.

Les relations de voisinage sont respectées si et seulement si l'application Θ_A^V (respectivement $\Theta_A^{V^{-1}}$) préserve le voisinage (respectivement le voisinage inverse). La première propriété est vérifiée si des entrées proches dans V sont représentées par des cellules proches dans A . On dit alors que la projection Θ_A^V est robuste aux distorsions. Cette propriété est fondamentale dans le cas des applications sur des données réelles bruitées entraînant des déviations du signal. La projection $\Theta_A^{V^{-1}}$ est *robuste* si des cellules voisines dans A ont des vecteurs prototypes voisins dans V .

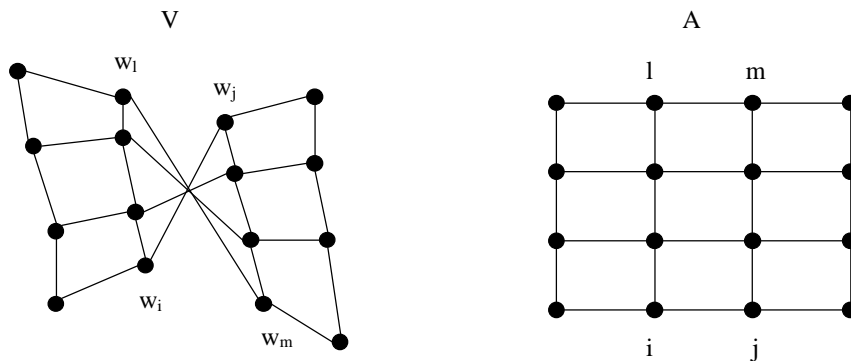


Figure 3-7 : Un exemple de voisinage inversé non respecté.

Mesure de la préservation du voisinage

Il existe différents critères d'évaluation de ces préservations de voisinage. Un résumé de ces principaux critères est proposé par Trautmann dans [37]. Il est utile de proposer plusieurs critères pour vérifier un type de préservation de voisinage car il existe différentes méthodes d'évaluation de ces préservations. Pour la mesure de la préservation du voisinage Θ_A^V , le *produit topographique*, critère proposé par Bauer et Pawelzik [4], compare les relations de voisinage de deux cellules en considérant leurs vecteurs prototypes et leurs positions sur la carte. Pour la mesure de la préservation de voisinage inverse $\Theta_A^{V^{-1}}$ on veut vérifier si deux cellules dans A ont des vecteurs prototypes proches dans V . Zrehen et Blayo [45-46] proposent un ensemble de mesures basées sur la géométrie caractérisant la carte appelée *Bmap* et *Dmap*. Trautmann [37] propose un critère noté R permettant d'affiner la mesure de préservation du voisinage inverse par une mesure liée non plus à un couple de cellules ou à une distance moyenne, mais au voisinage de chaque cellule.

3.5 Applications

La méthode SOM est, en premier lieu, une méthode de représentation de données multidimensionnelles qu'il est possible de comparer à d'autres méthodes de représentation telles que l'analyse en composantes principales. Cette technique permet également de définir une fonction analytique linéaire $F : \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^p$ permettant de projeter tout nouveau point. D'autres méthodes de projection, telles que celle de Sammon ou la projection triangulaire, sont non-linéaires mais peuvent ne représenter qu'un ensemble d'apprentissage fini car elles ne définissent pas de fonctionnelle F . En revanche, la méthode SOM définit une fonctionnelle F non-linéaire, dont le nouvel espace de représentation est discret. La majeure partie des applications des SOM se situe dans le domaine de la représentation de données multidimensionnelles (classification, discrimination, analyse exploratoire des données) :

- Classification : Vercauteren [42] utilise les SOM pour classer des tumeurs cérébrales dans des bases de données de grande taille. Dans le même ordre d'idée on trouve l'article de Elo *et al.* [10] qui se servent des SOM pour classer des électroencéphalogrammes épileptiques (EEG). Ils prétraitent le signal de l'EEG par une phase de segmentation et d'extraction de caractéristiques. Simula et Visa [36], quant à eux, font de la classification de textures et de la segmentation.
- Discrimination : La première application des SOM sur des données réelles et complexes fut le Phonetic Typewriter de Kohonen [19]. Toutes sortes d'applications sur le traitement du langage et la parole ont suivi : reconnaissance de formes statistiques (parole) [24, 19] et sémantique. Koyuzumi [25] applique un mélange de SOM et de chaînes de Markov pour faire de la reconnaissance de phonèmes. Scholtes [35] utilise deux cartes, la première pour extraire les contextes et la seconde pour les caractéristiques du langage. Dans le domaine de la robotique les travaux ont essentiellement porté sur l'apprentissage. Ritter *et al.* présentent un premier essai [33] en dimension 2 pour l'apprentissage des placements d'un bras à l'aide de caméras visualisant ses positions. Ce travail a été étendu dans un espace de dimension 3 avec une carte ayant une architecture en 3D [28]. Kohonen *et al.* proposent un détecteur de signaux discrets [20]. Il est bon de citer le très bon ouvrage de Ritter, Martinetz et Schulten qui reprend tous ces résultats [34].
- Analyse exploratoire des données : Le milieu industriel ne s'est intéressé aux SOM qu'au début des années 90, suite aux essais fructueux dans le domaine scientifique. La majeure partie des applications portent sur le suivi de processus de fabrication : Kasslin *et*

al. ont généralisé les possibilités des SOM pour ce type de suivi [15]. Tryba et Goser proposent de suivre des processus chimiques [40, 41]. Il existe également des applications en télécommunications [7, 16]. Badran *et al.* [3] proposent une adaptation des cartes topologiques pour faire du lissage de nuages de points.

Un domaine d'application plus marginal des SOM est celui de l'optimisation. Une carte mono-dimensionnelle peut être assimilée à un parcours quasi optimal passant par des points définis. L'idée de résoudre le problème du voyageur de commerce en découle. L'article le plus fréquemment cité est celui d'Angéniol *et al.* [2]. Le premier à s'être penché sur ce problème est Oja [30], qui utilise un modèle étudié par Kohonen en 1981, ayant servi de base pour les SOM. Fort [13] présente également une étude du problème. Favata et Walker [12] montrent que les algorithmes capables de générer des cartes topologiques permettent tous de résoudre ce genre de problèmes et que celui de Kohonen n'est pas le seul à avoir cette capacité.

3.6 Application à la validation des données

Dans les sections précédentes, nous avons vu l'algorithme SOM de façon détaillée ainsi que ses diverses applications. Nous allons maintenant voir comment ce modèle peut-être utilisé pour définir une méthode de validation de données multi-paramètres. En effet, les cartes topologiques de Kohonen ne sont pas seulement une méthode de visualisation et de classification de données de grandes dimensions, mais elles peuvent également être utilisées pour détecter des données atypiques en contrôlant la distance entre chaque vecteur d'entrée x et la *bm*. Cette technique peut être vue comme une variante du concept de rejet de distance introduit par Dubuisson et Masson [8].

3.6.1 Principe de la méthode

Supposons donc que l'on possède un ensemble de N prototypes ou vecteurs de référence $\{w_1, \dots, w_N\}$. Chaque prototype w_k est représentatif d'une classe W_k de vecteurs de X . L'espace de référence est ainsi divisé en N classes $(W_k)_{k=1}^N$.

Nous définissons « l'activation » du prototype i pour le vecteur d'entrée x en utilisant un noyau Gaussien:

$$K_i(x) = \exp\left(\frac{-1}{2\mathbf{s}_i^2} \|x - w_i\|^2\right) \quad (3.24)$$

où \mathbf{s}_i^2 est un paramètre qui définit la région d'influence du prototype i . \mathbf{s}_i^2 peut être défini comme la moyenne empirique des variances des n vecteurs d'entrées activant le prototype i . Plus \mathbf{s}_i^2 est grand, plus la zone d'influence de w_i est grande et donc, plus l'activation $K_i(x)$ est proche de 1.

Si l'activation $K_b(x)$ du prototype le plus proche w_b est inférieure à un certain seuil α , le vecteur x est alors considéré comme invalide. Une illustration du mécanisme de validation de données en trois dimensions est proposée à la Figure 3-8.

Ce procédé de rejet des données atypiques met en application une procédure de détection de nouveaux échantillons qu'il faut peut-être inclure dans l'ensemble d'apprentissage. Le rejet peut être dû à un défaut de capteur ou tout simplement à une limitation de l'ensemble d'apprentissage. Il est donc nécessaire de stocker ces vecteurs rejetés pour permettre une interprétation ultérieure par un utilisateur et un éventuel ré-apprentissage du système.

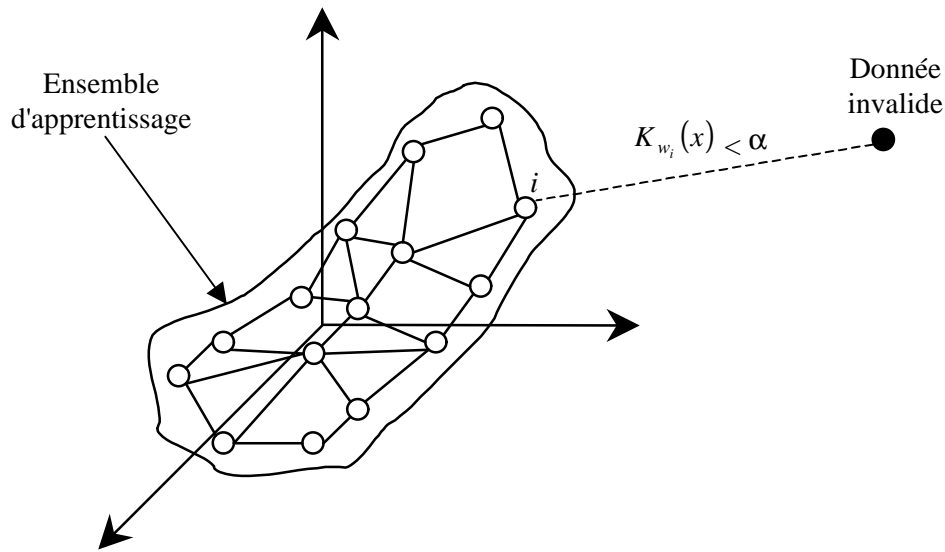


Figure 3-8 : Illustration du mécanisme de validation des données en trois dimensions.

Pour déterminer plus précisément quelles sont les composantes invalides du vecteur x , la contribution de chaque composante est examinée séparément. On calcule alors pour chaque composante j du vecteur x la distance avec les composantes du plus proche prototype : $|x_j - w_{bj}|$. On déconnecte alors la composante ayant la distance la plus élevée et on recalcule un nouveau prototype gagnant uniquement avec les composantes valides du vecteur x .

Cette procédure de détection peut recevoir une interprétation probabiliste, les vecteurs d'entrée x étant supposés suivre un mélange de distributions normales (ou classes) de moyenne w_i et de variance $\mathbf{S}_i^2 \mathbf{I}$ (\mathbf{I} représente la matrice identité). L'activation du plus proche prototype i par les vecteurs d'entrée x peut être considérée comme une approximation de la densité de probabilité conditionnelle de la classe i sachant x (à une constante près). Notre procédure de rejet des données invalides permet d'éliminer les vecteurs x qui paraissent peu vraisemblables pour chacune de ces densités de classe (voir [32, page 25] sur ce sujet). D'autres approches basées sur l'estimation de densité de probabilité, comme l'algorithme EM [29], peuvent également être utilisées.

3.6.2 Définition du seuil α

Nous avons à notre disposition l'ensemble de n_A vecteurs x de l'ensemble d'apprentissage. Nous allons considérer que 1% de ces données sont invalides ou aberrantes. Nous calculons donc l'activation $K_b(x)$ du plus proche prototype pour ces n vecteurs. Nous considérons donc que 1% des données de l'ensemble d'apprentissage ont une activation trop faible pour être considérées comme valides. Nous classons les données par ordre croissant d'activation. Le seuil α correspond donc à l'activation $K_b(x)$ de rang $n/100$.

4. Application au traitement de données manquantes et invalides

Dans la section précédente, nous avons présenté l'application de l'algorithme SOM à la détection de données atypiques. Nous allons maintenant montrer comment on peut utiliser ce modèle pour le traitement de données invalides ou manquantes.

4.1 Principe de la méthode

Si les prototypes fournissent une bonne représentation des données, nous pouvons espérer reconstruire les valeurs manquantes d'un vecteur proche d'un prototype donné à l'aide des autres coordonnées.

Soit x un nouveau vecteur, composé de deux parties x^o et x^m , contenant respectivement les variables observées et manquantes². L'objectif est de reconstruire x^m à l'aide des informations fournies par la carte topologique de Kohonen. Intuitivement, la méthode que nous proposons repose sur des similitudes entre ce nouveau vecteur $x = (x^o, x^m)$ et les vecteurs de référence ou prototypes w_k . Soient X^o et X^m les sous-espaces de X restreints aux variables observées et manquantes de x et, w_k^o et w_k^m les projections de w_k sur ces sous-espaces. Plus x^o est « proche » de w_k^o au sens de l'activation définie par l'équation (3.24), plus on aura de chance que x^m soit « proche » de w_k^m .

$$K_i(x^o) = \exp\left(\frac{-1}{2\mathbf{S}_i^2} \|x^o - w_i^o\|^2\right) \quad (3.25)$$

Pour la suite on désignera par $O(x) \subset \{1, \dots, r\}$ et $M(x)$, les ensembles d'indices des composantes observées et manquantes.

4.2 Estimation des données manquantes

Pour l'estimation ou la reconstruction des données manquantes x^m , nous avons envisagé deux méthodes.

Dans un premier temps, nous avons utilisé une méthode simple qui estime les données manquantes par la valeur de la composante correspondante du prototype gagnant w_b :

$$\forall l \in M(x), \hat{x}_l = w_{bl} \quad (3.26)$$

Cette méthode est très sensible au changement de prototype entre deux vecteurs successifs x . Pour remédier à ce problème, nous avons envisagé une autre méthode, assez similaire, qui prend en compte l'influence des k plus proches prototypes. Chaque composante manquante de x^m est estimée par une combinaison des composantes correspondantes des k plus proches prototypes :

² Dans toute la suite, les indices m et o correspondent respectivement aux variables manquantes et observées.

$$\forall l \in M(x), \hat{x}_l = \frac{\sum_{i=1}^k K_i(x^o) \cdot w_{il}}{\sum_{i=1}^k K_i(x^o)} \quad (3.27)$$

Si on se place dans un contexte probabiliste, on peut voir le calcul de cette composante manquante de x^m comme une légère modification de la méthode des fonctions de base radiale à noyau Gaussien.

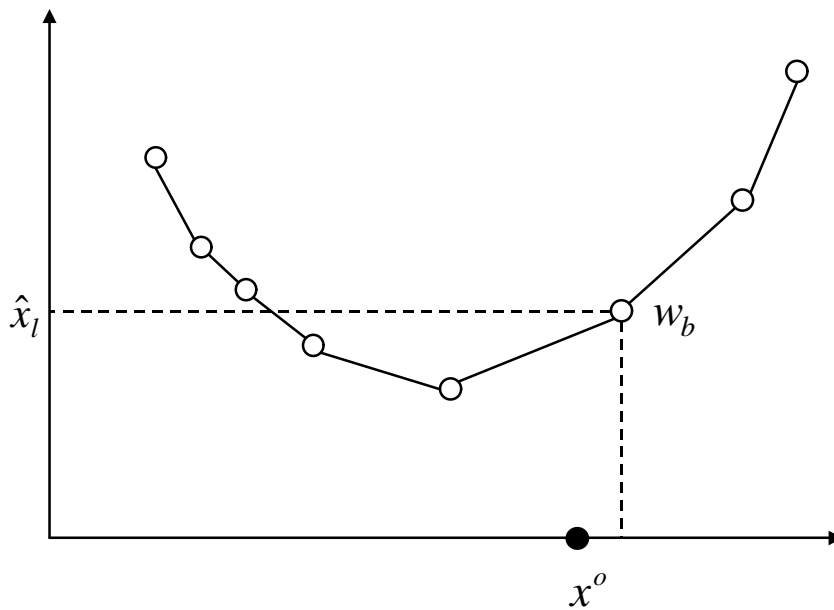


Figure 3-9 : Illustration du mécanisme d'estimation de données manquantes en 2 dimensions

5. Conclusion

Nous avons proposé dans ce chapitre un système basé sur l'application des cartes topologiques de Kohonen à la validation multi-capteurs et à la reconstruction de variables manquantes. Cette méthode permet de représenter la connaissance acquise à partir de données sous forme de prototypes ou vecteurs de référence. La méthode propose d'estimer toutes les valeurs manquantes d'un vecteur dans un même système, quel que soit le nombre de variables disponibles. Mais il est bien évident que la précision de la reconstruction dépendra du nombre de variables disponibles par rapport au nombre de variables manquantes. Cette méthode est similaire au réseau de neurones à fonction radiale de base (RBF), et à l'approche sous forme de système flou décrite dans [31].

Notre système a été appliqué à des données réelles environnementales représentant les différents paramètres de qualité de l'eau brute en entrée d'une usine de traitement d'eau potable. Ces résultats et la description des données sont présentés dans le chapitre 5.

A ce stade, nous disposons donc du module de pré-traitement des données de notre « capteur logiciel » pour le contrôle automatique du procédé de coagulation. Nous allons donc aborder dans le chapitre suivant la méthode utilisée pour le module de prévision du taux de coagulant. Nous développerons une approche connexioniste globale d'apprentissage et de sélection de l'architecture optimale du réseau.

Pré-traitement des données : validation et reconstruction

Bibliographie

1. Amari, S. A., Topographic organization of nerve fields. *Bulletin of mathematical biology*, Vol. 42, pages 339-364, 1980.
2. Angeniol B., de la Croix-Vaubois G., et Le Texier J. Y. Self organizing feature maps and the TSP. *Neural Networks*, 1:289-93, 1988.
3. Badran F., Thiria S., et Main B. Lissage par carte topologique. In *Proceedings of NeuroNimes92*, Nîmes, November 1992.
4. Bauer H. U. et Pawelzik K. Quantifying the neighborhood preservation of the Self Organizing Feature Map. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 3:570-79, 1992.
5. Böhme, T.J., Cox, C.S., Valentin, N. et Denoeux, T., Comparison of autoassociative neural networks and Kohonen maps for signal failure detection and reconstruction. In C. H. Dagli et al., editors, *Intelligent Engineering Systems through Artificial Neural Networks 9*, 637-644, New-York: ASME Press, 1999.
6. Bourlard, H. et Kamp, Y., Auto-association by multilayer perceptrons and singular value decomposition, *Biological Cybernetics*, 59, 291-294, 1988.
7. Bradburn D. S. Reducing transmission error effects using a self organizing network. In *Proceedings of IJCNN*, volume 2, pages 531-37, Washington, 1989.
8. Dubuisson, B. et Masson, M.. A statistical decision rule with incomplete knowledge about classes, *Pattern Recognition*, 26(1), 155-165, 1993.
9. Denoeux *et al.* EM2S - High level data fusion. Rapport n°: P 22442 - EM2S, November 1997.
10. Elo, P., Saarinen, J., Varri, A., Nieminen, H., et Kaski, K.. Classification of epileptic EEG by using Self Organizing Maps. In I. Aleksander and J. Taylor, editors, *Proceedings of ICANN92*, Vol. 2, 1147-1150, North Holland, 1992.
11. Erwin, E., Obermayer, K., et Schulten, K.J., Convergence properties of Self Organizing Maps. *Proceedings of ICANN91*, pages 409-14, 1991.
12. Favata F. et Walker R.. A study of the application of Kohonen type neural network to the TSP. *Biological Cybernetics*, 64:463-68, 1991.
13. Fort J. C. Solving a combinatorial problem via Self Organizing process: an application of the Kohonen algorithm to the TSP. *Biological Cybernetics*, 64:3340, 1988.
14. Fritzke B. Kohonen feature maps and Growing Cell Structures - A performance comparison. In C. L. Giles, S. J. Harson, and J. D. Cowan, editors, *Advances in Neural*

Information Processing Systems, volume 5, pages 123-30. Kaufmann San Mateo CA, 1993.

15. Kasslin, M., Kangas, J., et Simula, O. Process state monitoring using self organizing maps. In I. Aleksander and J. Taylor, editors, *Artificial Neural Networks II*, 1531-1534. North-Holland, Amsterdam, 1992.
16. Kohonen T., Raivio K., Simula O., Nenta O., et Enriksson J. An adaptative discrete signal detector based on Self Organizing Maps. In *Proceedings of IJCNN*, volume 2, pages 249-52, Washington, 1990.
17. Kohonen, T., Automatic formation of topological maps of patterns in a self organizing system. In *Proceedings of 2nd Scandinavian Conference on Image Analysis*, pages 214-220, 1981.
18. Kohonen, T., Hynninen, J., Kangas, J., et Laaksonen, J., The Self Organizing Map program package SOM PAK V3.1 SOM Programming Team of the Helsinki University of Technology – Laboratory of Computer and Information Science, 1995.
19. Kohonen, T., Makisara, K. et Saramaki., T. Phonotopic maps - Insightfull representation of phonological features for speech recognition. In *Proceedings of the 7th International Conference on Pattern Recognition*, 182-185, Montreal, 1984.
20. Kohonen, T., Raivio, K., Simula, O., Nenta, O., et Enriksson, J. An adaptative discrete signal detector based on Self Organizing Maps. In *Proceedings of IJCNN*, Vol. 2, 249-252, Washington, 1990.
21. Kohonen, T., *Self organization and associative memory*, 2nd ed, Springer Verlag, 1984.
22. Kohonen, T., Self organized formation of topological correct feature maps. *Biological Cybernetics*, 43, 1982.
23. Kohonen, T., *Self Organizing Maps*, volume 30 of *Springer series of information sciences*. Springer Verlag, 1995.
24. Kohonen., T. The neural phonetic typewriter. *IEEE Transactions on Computer*, Vol. 3, 11-225, 1988.
25. Koizumi, T., Vrata, J., et Taniguchi., S. A phoneme recognition using Self Organizing Feature Maps and hidden Markov models. In T. Kohonen, K. Makisara, O. Simula, and J. Kangas, editors, *Proceedings of ICANN91*, Vol. 1, 777-782, North Holland, 1991.
26. Kramer, M.A., Nonlinear Principal Component Analysis using Autoassociative Neural Networks, *AICHE Journal*, 37(2), 233-243, 1991.
27. Lampinen J. et Oia E. Fast Self Organization by the probing algorithm. In *Proceedings of IJCNN89*, volume 2, 1989.
28. Martinetz, T., Ritter, H. J. et Schulten, K. J. 3 dimensional neural network for learning visuo-motor coordination of a robot. *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol. 1, 131-36, 1990.
29. McLachlan, G.J. et Basford, K.E., *Mixture Models: Inference and Applications to Clustering*, New-York: Marcel Dekker, 1988.

30. Oja, E. A simplified neuron as a principal component analyser. *Journal of mathematical biology*, 15:267-73, 1982.
31. Petit-Renaud, S. et Denoeux, T., A neuro-fuzzy system for missing data reconstruction. *Proc. IEEE Workshop on Emerging Technologies, Intelligent Measurement and Virtual systems for instrumentation and measurement*, 78-84, Saint-Paul, USA, May 1998.
32. Ripley, B. D., *Pattern Recognition and Neural Networks*, Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
33. Ritter, H. J., Martinetz, T. M., et Schulten, K. J. Topology conserving maps for learning visuo-motor coordination. *Neural Networks*, Vol. 2(3), 159-168, 1989.
34. Ritter, H., Martinetz, T. et Schulten., K. *Neural computation and Self Organizing Maps: an introduction*. Addison Wesley, New-York, 1992.
35. Scholtes., J. C. Recurrent Kohonen Self Organizing in natural language processing. In T. Kohonen, K. Makisara, O. Simula, and J. Kangas, editors, *ICANN91*, Vol. 2, 1751-1754, North Holland, 1991.
36. Simula, O., et Visa, A.. Self Organizing Feature Maps in texture classification and segmentation. In I. Aleksander and J. Taylor, editors, *Proceedings of ICANN92*, Vol. 2, 1621-1628, North Holland, 1992.
37. Trautmann T. *Développement d'un modèle de cartes topologique auto-organisatrices à architecture dynamique Application au diagnostic*. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne, 1995.
38. Trautmann, T. et Denoeux, T., A constructive algorithm for S.O.M. applied to water quality monitoring, in Dagli, Fernandez, Ghosh and Kumara (Eds), *Intelligent Engineering Systems through artificial neural networks 4*, 17-22, New-York: ASME Press, 1994.
39. Trautmann, T. et Denoeux, T., Comparison of dynamic feature map models for environmental monitoring, in *Proceedings of ICNN'95*, Vol. 1, 73-78, Perth, Australia, 1995.
40. Tryba V. et Goser K. Self Organizing Feature Maps for process control in chemistry. In T. Kohonen, K. Makisara, O. Simula, and J. Kangas, editors, *Proceedings of ICANN91*, volume 1, pages 847-852. North Holland, 1991.
41. Tryba V., Marks K. M., Rueckert U. , et Goser K. Selbstorganisierende karten als lernende klassifizierende speicher. In *Proceedings of TTG Fachtagung Digitale Speicher*, 409-22, 1988.
42. Vercauteren, L., Sieben, G., Praet, M., Otte, G., Vingerhoeds, L., Boullart, L., Lalliauw, L., and Roeds, H., The classification of brains tumours by a topological map. In *Proceedings of ICNN*, Vol. 1, 387-391, Paris, 1990.
43. Von der Malsburg, C., Self organization sensitive cells in the striate cortex. *Kybernetics*, 14:85-100, 1973.
44. Willshaw, D. J. et Von der Malsburg, C., How patterned neural connections can be set up by self organization. In *Proceedings of the Royal Society of London*, Vol. B194, pages 431-445, 1976.

45. Zrehen S. et Blayo F. A geometric organization measure for Kohonen's map. *In Proceedings of NeuroNimes*, pages 603-10, Nîmes, November 1992.
46. Zrehen S. et Blayo F. Parametrized self organizing map. In S. Gielen and B. Kappen, editors, *Proceedings of ICANN93*, pages 568-75, Amsterdam, 1993. Springer Verlag.

Chapitre 4

Les perceptrons multicouches

Dans ce chapitre, nous décrivons la méthodologie utilisée pour la construction du module de prédiction du taux de coagulant. Nous proposons une approche connexioniste globale d'apprentissage et de sélection optimale de l'architecture. En effet, un objectif important d'un tel système est la « portabilité ». Nous devons pouvoir installer ce système à faible coût sur plusieurs sites. Nous décrivons une méthodologie globale basée sur des méthodes de contrôle de la complexité du réseau qui ont l'avantage d'être facilement reproductibles et automatisables. Nous abordons également le problème de la génération d'une mesure de l'incertitude attachée à la prédiction. En effet, pour une utilisation industrielle, un réseau de neurones doit non seulement fournir une estimation mais également une mesure de l'incertitude de cette prédiction, sous forme d'un intervalle par exemple. Ceci nous permet de prendre en compte l'incertitude liée à la taille limitée de l'ensemble d'apprentissage.

Après une brève introduction où nous rappelons la notion de neurone formel introduite par Mc Culloch et Pitts [41], la deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux perceptrons multicouches (PMCs). Nous décrivons l'architecture et rappelons les propriétés d'approximation universelle de cette catégorie de réseaux de neurones à apprentissage supervisé, vraisemblablement la plus utilisée. Dans la troisième partie nous présentons l'algorithme d'apprentissage par rétropropagation du gradient et ses principales variantes. La quatrième partie est consacrée au problème du contrôle de la complexité de l'architecture. Nous y présentons en particulier une méthode dite d'élagage, qui consiste à détecter et à éliminer les poids qui contribuent peu à la performance du réseau. La dernière partie porte sur le traitement de l'incertitude liée à la prédiction. Nous développons une approche basée sur le ré-échantillonnage par Bootstrap pour l'estimation d'un intervalle de prédiction.

1. Introduction : notion de neurone formel

La recherche en Intelligence Artificielle (IA) se distingue de l'informatique classique par le fait qu'elle tente d'imiter le raisonnement, et plus largement, le comportement humain. Ses objectifs sont l'obtention de résultats similaires à ceux qu'obtiendrait une personne confrontée à un certain problème, et d'en tirer des enseignements sur la nature de l'intelligence. On distingue traditionnellement deux courants de recherche en IA : l'approche *symbolique* qui vise à la représentation de connaissances de haut niveau et à la modélisation du raisonnement, et l'approche *connexionniste* qui s'inspire d'une modélisation du cerveau et met l'accent sur les mécanismes d'apprentissage.

Selon toute vraisemblance, l'idée des réseaux de neurones artificiels est apparue la première fois dans les années 40 lorsque McCulloch & Pitts [41] ont proposé une représentation mathématique de la cellule nerveuse ou *neurone* comme unité de calcul binaire (Figure 4-1). Cette unité calcule la somme pondérée de ses entrées, appelée l'entrée résultante. Ensuite, l'unité émet une sortie o_j égale à « 0 » ou « 1 » selon que l'entrée résultante est inférieure ou supérieure à un certain seuil s_j :

$$o_j = \Theta \left(\sum_{i=1}^n w_{ji} x_i - s_j \right) \quad (4.1)$$

où le coefficient w_{ji} représente le poids ³ de la connexion reliant l'entrée i à l'unité j , le signal d'entrée x_i est une entrée externe ou le signal de sortie d'un autre neurone, et $\Theta(u)$ la fonction échelon (Figure 4-3-a) définie par :

$$\Theta(u) = \begin{cases} 1 & \text{si } u \geq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.2)$$

McCulloch & Pitts ont montré comment des unités de calcul simples associées en parallèle peuvent réaliser des opérations et des décisions complexes lorsque les poids sont convenablement choisis.

Un neurone de McCulloch & Pitts est appelé neurone linéaire à seuil. Une généralisation simple du modèle de McCulloch & Pitts, décrit par l'équation (4.1), consiste à remplacer la fonction échelon $\Theta(u)$ par une fonction non-linéaire plus générale $h(u)$, appelée fonction de transfert ou d'activation :

$$o_j = h \left(\sum_{i=1}^n w_{ji} x_i - s_j \right) \quad (4.3)$$

La variable o_j est appelée *état*, *sortie* ou *activation* de l'unité j . Pour simplifier les notations la quantité $-s_j$ est considérée comme étant le poids d'une entrée x_0 dont la valeur est égale à 1. Cette entrée est appelée le biais. Ainsi, l'équation (4.3) peut être réécrite de la façon suivante:

$$o_j = h \left(\sum_{i=0}^n w_{ji} x_i \right) \quad (4.4)$$

³ Dans les réseaux de neurones les paramètres sont traditionnellement appelés des poids.

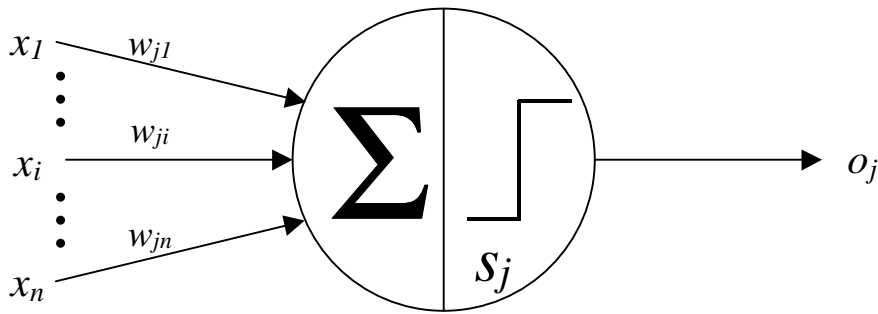


Figure 4-1 : Neurone de McCulloch et Pitts.

avec $w_{j0} = -s_j$ et $x_0 = 1$.

2. Les réseaux neuronaux multicouches

2.1 Architecture

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons à la famille des *réseaux de neurones unidirectionnels*. La caractéristique de ces réseaux est l'absence de circuits dans le graphe des connexions, chaque couche étant uniquement connectée à la couche suivante. Les réseaux multicouches unidirectionnels ont été appelés *perceptrons* quand ils ont été introduits et étudiés par Rosenblatt [50, 51]. Les perceptrons sont constitués par :

- Un ensemble d'unités d'entrée dont le rôle est de recevoir les signaux externes et de les diffuser aux unités de la couche suivante. Les unités d'entrée sont organisées en une couche appelée couche d'entrée. Bien que la couche d'entrée n'effectue aucune opération sur les signaux d'entrée, nous la comptabilisons dans le nombre des couches du réseau.
- Une couche de sortie qui produit la réponse du réseau au signal d'entrée.
- Une ou plusieurs couches cachées se trouvant entre la couche d'entrée et la couche de sortie. Elles sont appelées ainsi car elles n'ont aucune connexion avec les entrées ni avec les sorties. La fonction des unités cachées est le traitement des entrées.

Les réseaux de neurones unidirectionnels formés d'une couche d'entrée et d'une couche de sortie sont appelés *perceptrons simples* (Figure 4-2-a). En revanche, lorsqu'une ou plusieurs couches cachées ⁴ s'interposent entre la couche d'entrée et la couche de sortie, on parle de *perceptrons multicouches* (Figure 4-2-b) (PMC). Selon la convention que nous avons adoptée, le réseau de la Figure 4-2-a est un perceptron à deux couches et le réseau de la Figure 4-2-b un perceptron à trois couches.

2.2 Différents types de neurones

La fonction de transfert utilisée dans le modèle de McCulloch & Pitts est la fonction *échelon* (Figure 4-3-a). Elle fait passer l'activation du neurone d'une valeur à une autre dès que l'entrée résultante dépasse un certain seuil (équation (4.1)). L'inconvénient de cette fonction est qu'elle n'est pas différentiable, ce qui pose un problème pour les algorithmes basés sur le gradient. Pour remédier à cet inconvénient, on cherche à approximer Θ par une fonction non-linéaire $h(u)$ différentiable.

⁴ On peut caractériser un réseau de neurones par le nombre de couches cachées et le nombre de cellules dans chacune de ces couches.

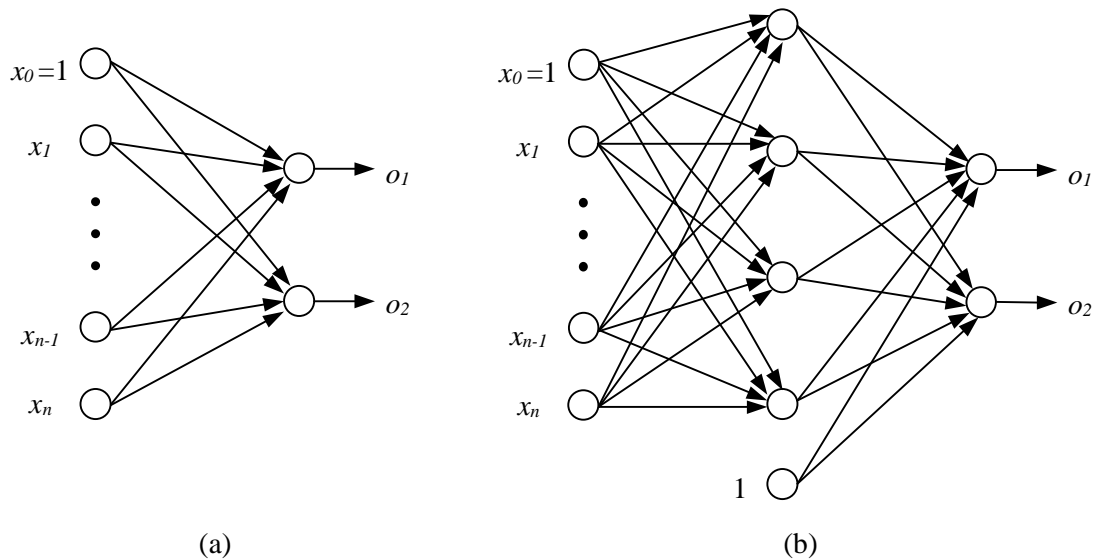


Figure 4-2 : Architecture : (a) d'un perceptron simple (b) et d'un perceptron multicouches avec une seule couche cachée.

Deux fonctions de ce type sont particulièrement intéressantes et sont souvent utilisées : la fonction tangente hyperbolique (Figure 4-3-c) définie par

$$h(u) = \tanh(\mathbf{b}u) = \frac{e^{\mathbf{b}u} - e^{-\mathbf{b}u}}{e^{\mathbf{b}u} + e^{-\mathbf{b}u}} \quad (4.5)$$

et la fonction logistique (Figure 4-3-b) dont l'expression est la suivante :

$$h(u) = f_{\mathbf{b}}(u) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{b}u}} \quad (4.6)$$

La fonction tanh est bornée entre -1 et +1 alors que la fonction logistique est bornée entre 0 et 1. Ces deux fonctions, appelées fonctions sigmoïdes, sont liées par la relation :

$$\tanh(\mathbf{b}u) = 2f_{\mathbf{b}}(u) - 1 \quad (4.7)$$

Le paramètre \mathbf{b} est appelé le gain. Plus le gain est important, plus la saturation du neurone est rapide. La fonction logistique est liée à la fonction échelon par la relation suivante :

$$\lim_{\mathbf{b} \rightarrow \infty} f_{\mathbf{b}}(u) = \Theta(u), \forall u \neq 0 \quad (4.8)$$

Les fonctions sigmoïdes ont la propriété d'être différentiables, ce qui est nécessaire pour certains algorithmes d'apprentissage (cf. §3.1). Une autre propriété intéressante est le fait que les fonctions dérivées peuvent s'exprimer facilement à l'aide des fonctions elles-mêmes, ce qui permet un gain de temps de calcul :

$$\tanh'(\mathbf{b}u) = \mathbf{b}(1 - \tanh^2(\mathbf{b}u)) \quad (4.9)$$

et

$$f_{\mathbf{b}}'(u) = \mathbf{b}f_{\mathbf{b}}(u)(1 - f_{\mathbf{b}}(u)) \quad (4.10)$$

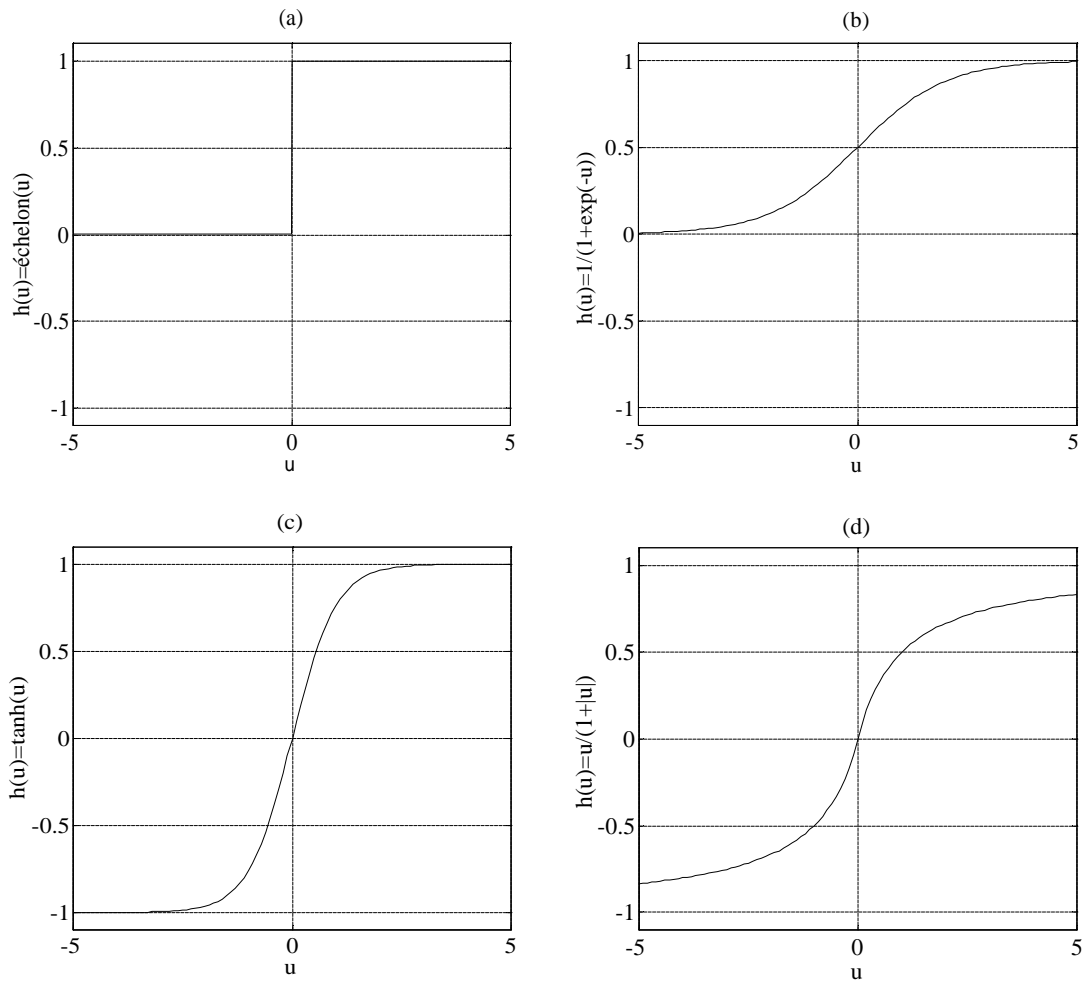


Figure 4-3 : Quatre fonctions d'activation différentes.

Elliott [14] a proposé une autre fonction d'activation sigmoïde différentiable et bornée entre -1 et 1 (Figure 4-3-d), définie par :

$$f_e(u) = \frac{u}{1+|u|} \quad (4.11)$$

L'absence de terme exponentiel dans la fonction f_e rend son calcul plus rapide que celui de \tanh et f_b .

Pour des problèmes particuliers, une autre catégorie de neurones pouvant être intéressante est celle utilisant les fonctions de base radiale [46]. Ces fonctions sont définies de la manière suivante :

$$h(x, m) = \mathbf{f}[\mathbf{d}(x, m)] \quad (4.12)$$

où $\mathbf{d}(.,.)$ est une mesure de distance entre le centre de l'unité m et l'entrée x et \mathbf{f} une fonction de $\Re_+ \rightarrow \Re_+$ généralement décroissante. Un exemple de fonction de base radiale est la fonction gaussienne :

$$h(x, m) = \exp\left(-\frac{1}{2\mathbf{s}^2} \|x - m\|^2\right) \quad (4.13)$$

où $\| \cdot \|$ est la distance euclidienne.

Dans une étude comparative de fonctions d'activation [11], la fonction sigmoïde s'est révélée meilleure en terme de capacité d'approximation. Mhaskar et Micchelli [42] ont établi une relation entre la précision de l'approximation, le nombre d'unités cachées dans un réseau à une seule couche cachée et la régularité de la fonction d'activation. D'après leur théorème, plus la fonction d'activation est régulière, plus la précision de l'approximation est bonne. Cependant, Fombellida et al. [20] ont constaté que l'utilisation de fonctions d'activation non monotones peut présenter certains avantages : accélération de l'apprentissage, réduction du nombre d'unités cachées, etc.

2.3 Capacité d'approximation des PMC

Les réseaux de neurones à deux couches ne peuvent résoudre qu'une classe restreinte de problèmes (approximation de fonctions linéaires et discrimination de classes linéairement séparables). Du fait de cette limitation, les réseaux de neurones, et en particulier le perceptron, ont été sévèrement critiqués [43], ce qui a causé l'abandon quasi total de l'approche connexionniste pendant une longue période.

Les réseaux multicouches avaient déjà été définis par Rosenblatt [50], mais on ne savait pas en faire l'apprentissage. Avec la redécouverte de l'algorithme de rétropropagation de l'erreur (RP) par Rumelhart et al. [53], on a commencé à pouvoir faire de l'apprentissage des réseaux de neurones multicouches à partir d'exemples. Cette méthode de détermination des poids est appelée apprentissage supervisé.

Les capacités d'approximation des PMC peuvent être considérées de trois points de vue différents : la réalisation de fonctions logiques booléennes, le partage de l'espace d'entrée pour les problèmes de discrimination, et la réalisation de transformations non-linéaires pour les problèmes d'approximation de fonctions [30]

Toute fonction logique pouvant être mise sous forme normale conjonctive (ou disjonctive), il est facile de montrer que deux couches suffisent à la représentation exacte des fonctions booléennes [30].

Pour les problèmes de classification, Lippmann a montré qu'un PMC à trois couches est capable de réaliser des frontières de décision arbitrairement complexes [37]. Ensuite, Makhoul et al. ont démontré qu'un PMC à trois couches permet d'approcher, d'aussi près que l'on veut, toute frontière de décision non-linéaire [40]. Il a également été démontré qu'un PMC à trois couches est capable de donner une approximation, avec une précision arbitraire, de toute fonction non-linéaire continue [29, 10].

Cependant, ces résultats n'impliquent pas qu'il faille nécessairement se contenter d'une seule couche cachée. Par exemple, Chester [9] a montré qu'un réseau à quatre couches peut être meilleur du point de vue de la précision de l'approximation et du nombre de neurones utilisés. Pour certains problèmes, on a montré par ailleurs que le nombre d'unités cachées croît exponentiellement avec la précision souhaitée dans un réseau à trois couches, tandis qu'il croît de manière polynomiale dans un réseau à quatre couches (cf. synthèse dans [30]). Dans [57], Sontag a également constaté que, pour certains problèmes telle que l'approximation de l'inverse d'une fonction, deux couches sont parfois nécessaires.

En contrepartie, un certain nombre de précautions doivent être prises lorsqu'il y a plus d'une couche cachée. En effet, une étude numérique réalisée par Saarineri et al. [54] a montré que, dans le cas des réseaux à fonctions d'activation sigmoïdes, la dégénérescence du rang de la

matrice jacobienne ne peut qu'augmenter lorsque le nombre de couches cachées augmente. Ceci est dû à la saturation des fonctions sigmoïdes. La dégénérescence du rang pour un réseau avec une seule couche cachée pourrait en principe être moins importante. Comme la grande majorité des méthodes numériques utilisent la jacobienne pour déterminer leurs directions de recherche lors de l'apprentissage, toute dégénérescence du rang se traduit par une information incomplète sur la direction de recherche. Autrement dit, la solution obtenue pourrait être sous-optimale et l'apprentissage plus lent.

3. Apprentissage d'un réseau de neurones

Un réseau de neurones définit une famille de fonctions. L'apprentissage consiste à déterminer la solution du problème posé au sein de cette famille de fonctions. Ces fonctions pourront avoir des capacités limitées comme les fonctions linéaires ou au contraire permettre la construction de fonctions aussi complexes qu'on le désire comme les PMCs. Le principe d'apprentissage est l'optimisation d'une fonction de coût qui représente le but de l'apprentissage. Les méthodes numériques utilisées sont le plus souvent des méthodes approchées basées sur des techniques de gradient (parce qu'on ne sait pas résoudre analytiquement un système d'équations non linéaires).

Dans cette présentation, nous formulerons tout d'abord, plus précisément, le problème de l'apprentissage en termes statistiques. Nous décrirons, ensuite, les critères utilisables pour l'apprentissage ainsi que les méthodes et algorithmes de recherche de la solution dans le cas des PMCs.

3.1 Algorithme de rétropropagation

L'algorithme de rétropropagation du gradient (RP) est certainement à la base des premiers succès des réseaux de neurones. Sa mise en application a permis au domaine du connexionnisme de sortir de la période de silence qui a régné après la sortie du livre « Perceptrons » de Minsky et Papert [43]. Il figure aujourd'hui parmi les algorithmes d'apprentissage les plus utilisés. Il a été appliqué avec succès à une grande variété de problèmes tels que la prononciation de l'anglais à partir du texte (NETtalk) [55], la discrimination des échos sonar [24], la prévision de consommation d'eau [7, 8, 13] ou de trafic autoroutier [4], etc. Il a également été appliqué à la prédiction de la dose de coagulant en fonction des paramètres descriptifs de la qualité de l'eau brute [44, 16, 58].

Selon la littérature, (cf. par exemple [26, 28]), la RP a été proposée plusieurs fois et de manière indépendante par : Bryson et Ho en 1969 [6], Werbos en 1974 [62], Parker en 1985 [47], Rumelhart et les membres du groupe PDP en 1986 [53]. Une approche similaire a également été proposée par Le Cun en 1985 [32]. D'après [26], des liens peuvent être établis avec la technique de Robbins & Monro introduite en 1951 [49]. Cependant, la popularisation de la RP et son développement restent liés aux travaux du groupe PDP [53].

On considère un réseau à trois couches illustré par la Figure 4-4. Les conventions de notation sont les suivantes :

o_k activation de la k^{e} unité de sortie, $k = 1, \dots, M$;

t_k activation désirée de la k^{e} unité de sortie;

c_j activation de la j^{e} unité cachée, $j = 0, 1, \dots, n_h$; $c_0 = 1$: c'est l'entrée du biais pour la couche de sortie;

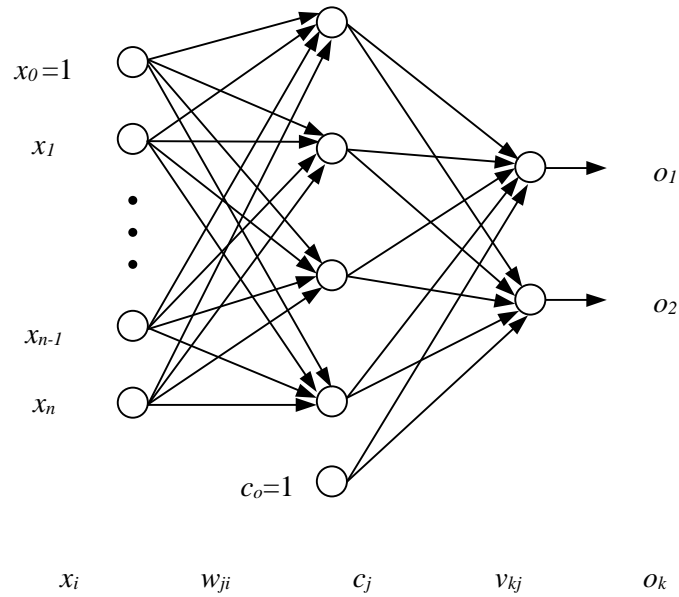


Figure 4-4 : Définition des notations pour un PMC.

x_i i^e entrée externe du réseau ; $i = 0, 1, \dots, n$; $x_0 = 1$: entrée du biais pour la couche cachée;

w_{ji} poids d'une connexion entre la i^e entrée et la j^e unité cachée;

v_{kj} poids d'une connexion entre la j^e unité cachée et la k^e unité de sortie.

Les indices i, j et k font référence aux unités d'entrée, aux unités cachées et aux unités de sortie, respectivement. L'exposant p correspond au numéro de l'exemple présenté à l'entrée du réseau : $p = 1, \dots, n_A$, où n_A est le nombre d'exemples d'apprentissage. Le p^e exemple est noté $\mathbf{x}^p = [x_0^p, \dots, x_i^p, \dots, x_n^p]$ et la i^e composante x_i^p désigne la i^e entrée lorsque le p^e exemple est présenté au réseau. Les valeurs x_i^p peuvent être binaires ou continues. Pour un exemple p , la j^e unité cachée a l'entrée résultante I_j^p :

$$I_j^p = \sum_{i=0}^n w_{ji} x_i^p \quad (4.14)$$

et une activation c_j^p :

$$c_j^p = h(I_j^p) = h\left(\sum_{i=0}^n w_{ji} x_i^p\right) \quad (4.15)$$

où h est la fonction d'activation. La k^e unité de sortie reçoit une entrée résultante I_k^p définie par :

$$I_k^p = \sum_{j=0}^{n_h} v_{kj} c_j^p \quad (4.16)$$

et génère en sortie l'activation o_k^p :

$$o_k^p = h(I_k^p) \quad (4.17)$$

Pour l'application des PMCs en régression, la fonction d'activation des neurones de sorties est linéaire. L'équation (4.17) devient :

$$o_k^p = I_k^p \quad (4.18)$$

On prend une fonction d'activation non-linéaire h uniquement dans le cas de l'application en discrimination. Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéresserons uniquement à l'application des PMCs en régression.

La fonction de coût usuelle est l'erreur quadratique moyenne définie par :

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{k,p} (t_k^p - o_k^p)^2 \quad (4.19)$$

où \mathbf{w} est le vecteur contenant tous les poids du réseau. La fonction $E(\mathbf{w})$ est continue et différentiable par rapport à chaque poids. Pour déterminer les poids qui la minimisent, on peut donc utiliser l'algorithme de descente du gradient. Pour faciliter la notation, $E(\mathbf{w})$ sera notée E dans ce qui suit.

Pour les poids des connexions des unités cachées vers les unités de sortie, le terme d'adaptation des poids au cours de l'apprentissage est défini par :

$$\begin{aligned} \Delta v_{kj} &= -\mathbf{h} \frac{\partial E}{\partial v_{kj}} \\ &= \mathbf{h} \sum_p \mathbf{d}_k^p c_j^p \end{aligned} \quad (4.20)$$

avec

$$\mathbf{d}_k^p = (t_k^p - o_k^p) \quad (4.21)$$

dans le cas de sorties linéaires.

Pour les poids des connexions entre la couche d'entrée et la couche cachée, le terme d'adaptation des poids est :

$$\begin{aligned} \Delta w_{ji} &= -\mathbf{h} \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} \\ &= -\mathbf{h} \sum_p \frac{\partial E}{\partial c_j^p} \frac{\partial c_j^p}{\partial w_{ji}} \\ &= \mathbf{h} \sum_{k,p} (t_k^p - o_k^p) v_{kj} h'(I_j^p) x_i^p \\ &= \mathbf{h} \sum_p \mathbf{d}_j^p x_i^p \end{aligned} \quad (4.22)$$

avec

$$\mathbf{d}_j^p = h'(I_j^p) \sum_k v_{kj} \mathbf{d}_k^p \quad (4.23)$$

On peut constater que les équations (4.20) et (4.22) ont la même forme et ne diffèrent que par la définition de la quantité \mathbf{d} . Ces formules se généralisent facilement aux cas des réseaux possédant un nombre quelconque de couches cachées. D'après l'équation (4.23), le calcul de \mathbf{d}_j pour une unité cachée j nécessite les \mathbf{d}_k des unités de sortie, qui sont fonctions des erreurs en sortie du réseau ($t_k - o_k$). Ainsi, pour corriger les poids des connexions entre la couche d'entrée et la couche cachée, on a besoin de rétropropager l'erreur depuis les sorties vers les entrées, d'où le nom de l'algorithme d'apprentissage : *rétropropagation de l'erreur*.

D'après l'équation (4.23), le calcul de \mathbf{d}_j pour une unité cachée j utilise la dérivée de l'activation de cette même unité et la somme des \mathbf{d}_k pour toutes les unités de sortie. Le calcul de \mathbf{d}_j se fait donc de manière locale (indépendamment de toutes les autres unités cachées). Ceci permet d'envisager une parallélisation de l'algorithme de RP.

Après avoir calculé le terme d'adaptation des poids, la mise à jour se fait selon la formule suivante :

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) + \Delta w_{ji} \quad (4.24)$$

et

$$v_{kj}(t+1) = v_{kj}(t) + \Delta v_{kj} \quad (4.25)$$

où t est l'indice de l'itération. Le mode d'adaptation des poids tel qu'il est présenté par les équations (4.20) et (4.22) s'appelle mode « *batch* ». La mise à jour des poids se fait après avoir passé en revue tous les exemples d'apprentissage. Ce mode d'apprentissage est encore appelé déterministe, « *off-line* » ou « *by epoch* ».

Une autre approche consiste à modifier les poids après chaque présentation d'un exemple d'apprentissage. C'est l'apprentissage en mode « *on-line* » ou « *by pattern* ». Lorsque les exemples sont choisis dans un ordre aléatoire, le chemin suivi lors de la recherche du minimum de la fonction coût est rendu stochastique. Ceci permet à l'algorithme d'apprentissage d'effectuer une exploration plus vaste et dans certains cas d'éviter des minima locaux.

Il y a des avantages et des inconvénients pour chaque mode d'adaptation des poids, et le choix de l'un ou de l'autre dépend du problème à traiter. Les algorithmes « *off-line* » sont faciles à analyser pour ce qui concerne les propriétés de convergence. Ils peuvent utiliser un taux d'apprentissage optimum à chaque itération et peuvent conduire à des solutions assez précises (avec de faibles variantes). En revanche, ils ont l'inconvénient d'induire un temps de calcul du terme d'adaptation de poids dépendant de la taille de l'ensemble d'apprentissage. Les méthodes « *on-line* » peuvent être utilisées lorsque les exemples ne sont pas tous disponibles au début de l'apprentissage, et quand on désire réaliser une adaptation continue à partir d'une suite de couples entrée - sortie issus d'une relation qu'on cherche à identifier. L'aspect aléatoire dans l'adaptation des poids aide à échapper aux minima locaux. Le calcul des termes d'adaptation est indépendant du nombre d'exemples dans l'ensemble d'apprentissage.

3.2 Variantes de l'algorithme de RP

Depuis son introduction, l'algorithme de RP a été largement étudié et plusieurs modifications y ont été apportées. L'algorithme de base décrit ci-dessus converge très lentement pour les réseaux multicouches. Pour certaines tâches complexes, comme le problème de

discrimination entre deux spirales (problème proposé pour la première fois par Alexis Wieland de MITRE Corp.), la méthode ne permet pas d'aboutir à une solution [18]. Les variations apportées à l'algorithme de RP ont pour objectifs l'accélération de la convergence du processus d'apprentissage et l'amélioration de la capacité de généralisation. Nous présentons ci-dessous quelques variantes parmi les plus importantes.

3.2.1 Fonctions coût

Le choix de la fonction d'erreur utilisée pour l'apprentissage des réseaux de neurones multicouches a une certaine influence sur la rapidité d'apprentissage et sur la qualité de généralisation du réseau. Cette question a été étudiée par plusieurs chercheurs [22, 45].

Le critère d'erreur le plus utilisé est la fonction d'erreur quadratique moyenne (cf. équation (4.19)). Cette fonction a tendance à amplifier les erreurs les plus importantes. Par conséquent, au cours de l'apprentissage, la mise à jour des poids est largement déterminée par la correction des grandes erreurs, ce qui est recherché en général [17, 26]. Lorsque la fonction d'activation est la fonction logistique de l'équation (4.6), les sorties du PMC obtenu par minimisation de l'erreur quadratique approximent les probabilités *a posteriori* [35].

Cependant le choix de fonction quadratique n'est pas la seule possibilité. On peut remplacer $(t_k^p - o_k^p)^2$ par tout autre fonction $e(t_k^p, o_k^p)$ différentiable et minimale lorsque ses deux arguments sont égaux. Le développement précédent montre que seule l'expression de l'équation (4.20) dépend de la fonction coût. Le reste de l'algorithme de RP reste inchangé.

3.2.2 Introduction d'un terme de moment

Le paramètre η (appelé taux d'apprentissage) joue un rôle important. S'il est trop faible, la convergence est lente, et, s'il est trop grand, l'algorithme oscille entre des points différents à cause de l'existence de vallées et de plateaux à la surface de la fonction coût. Pour stabiliser la recherche des poids optimisant la fonction coût, une méthode consiste à ajouter un terme dit de « moment » à l'expression d'adaptation des poids [48]. L'idée est de donner une certaine « inertie » pour chaque poids, de sorte que sa mise à jour ne se fasse pas de manière brutale. Ceci permet alors d'utiliser un taux d'apprentissage relativement important sans pour autant augmenter les oscillations de la trajectoire sur la surface d'erreur. La nouvelle formule d'adaptation des poids est définie par :

$$\Delta w(t+1) = -\mathbf{h} \frac{\partial E}{\partial w} + \alpha \Delta w(t) \quad (4.26)$$

où α est le terme de moment dont la valeur est souvent prise proche de 1 (≈ 0.9). Cette méthode peut être utilisée en modes « off-line » ou « on-line ».

3.2.3 Taux d'apprentissage adaptatifs

Les paramètres \mathbf{h} et \mathbf{a} de l'algorithme RP ne sont pas faciles à fixer *a priori* pour un problème donné. En outre, des valeurs données peuvent être bien adaptées au début de l'apprentissage, sans l'être nécessairement au milieu ou à la fin du processus. Pour résoudre ce problème, certains auteurs ont proposé d'ajuster automatiquement ces paramètres au cours de l'apprentissage. Plusieurs heuristiques d'adaptation dynamique du taux d'apprentissage ou du terme de moment ont été proposées [31, 56, 60] (cf. [45] pour une synthèse plus complète). On se contente ici de rappeler le principe des méthodes adaptatives et de citer l'algorithme de Silva et Almeida [56] comme exemple.

Le principe des méthodes adaptatives est d'étudier à chaque itération l'effet de la mise à jour des poids des connexions sur la fonction coût. Si cette fonction augmente, alors le taux d'apprentissage \mathbf{h}_{pq} associé au poids w_{pq} doit être réduit. En revanche, si la fonction coût décroît régulièrement suite aux modifications des poids, alors on peut augmenter \mathbf{h}_{pq} pour accélérer la recherche de l'optimum. Différents critères peuvent être retenus, comme par exemple la diminution de la fonction coût pendant plusieurs itérations successives. En partant de ce principe, Silva et Almeida ont proposé la règle suivante :

$$\mathbf{h}_{pq}(t) = \begin{cases} \gamma \mathbf{h}_{pq}(t-1) & \text{si } \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t)} \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t-1)} > 0 \\ \zeta \mathbf{h}_{pq}(t-1) & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.27)$$

où w_{pq} est un poids quelconque du réseau, γ et ζ sont des paramètres respectivement supérieur et inférieur à 1 (par exemple: $\gamma = 1.2$ et $\zeta = 0.7$). Les auteurs montrent expérimentalement que les valeurs précises de ces deux paramètres ne sont pas décisives. Ils proposent également d'utiliser un terme de moment identique et non adaptatif pour tous les poids du réseau. La procédure d'adaptation des poids est alors la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} w_{pq}(t+1) = w_{pq}(t) - \mathbf{h}_{pq}(t) z_{pq}(t) \\ \text{et} \\ z_{pq}(t) = \alpha \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t)} + \alpha z_{pq}(t-1) \end{array} \right. \quad (4.28)$$

où α est le terme de moment.

3.2.4 Autres procédures d'optimisation

L'algorithme de RP dans sa forme de base utilise la technique de descente du gradient. Celle-ci est parmi les plus simples, mais elle n'est pas très efficace car elle utilise peu d'information sur la surface de l'erreur. Dans la littérature, on trouve une grande quantité de techniques plus sophistiquées [19]. Une synthèse des principales méthodes est présentée dans [28].

En effectuant le développement au second ordre de la fonction coût $E(\mathbf{w})$ autour du point courant \mathbf{w}_0 et en négligeant les termes d'ordre supérieur, on peut écrire :

$$E(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}_0) + (\mathbf{w} - \mathbf{w}_0)^T \nabla E(\mathbf{w}_0) + \frac{1}{2} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_0)^T \mathbf{H} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_0) \quad (4.29)$$

avec \mathbf{H} la matrice Hessienne calculée au point \mathbf{w}_0 . En dérivant l'équation (4.29), on obtient :

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \nabla E(\mathbf{w}_0) + \mathbf{H} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_0) \quad (4.30)$$

En annulant la dérivée, l'équation (4.30) donne une estimation de la localisation du minimum :

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}_0 - \mathbf{H}^{-1} \nabla E(\mathbf{w}_0) \quad (4.31)$$

En posant $\mathbf{w}_0 = \mathbf{w}(t)$ et $\mathbf{w} = \mathbf{w}(t+1)$, on obtient une procédure itérative d'estimation du vecteur des poids minimisant la fonction coût :

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) - \mathbf{H}^{-1} \nabla E(\mathbf{w}(t)) \quad (4.32)$$

Cette méthode est appelée *méthode de Newton*. Elle permet une convergence rapide chaque fois que les poids se trouvent au voisinage de la solution. Son inconvénient est la nécessité de calculer \mathbf{H}^{-1} . Deux solutions ont été proposées face à ce problème. L'une consiste à négliger les termes non diagonaux de \mathbf{H} (*méthode pseudo-Newton* [33]), l'autre à estimer itérativement la matrice \mathbf{H}^{-1} (*méthode quasi-Newton*). Pour plus de détails sur ces techniques, cf. par exemple [19].

Les méthodes de minimisation présentées jusqu'ici se basent sur l'utilisation de dérivées de la fonction coût. Une autre approche consiste à utiliser des procédures de *minimisation stochastique* [5] ou les *algorithmes génétiques* [23]. Ces algorithmes effectuent une recherche globale et présentent par conséquent moins de risques d'aboutir à des minima locaux assez superficiels. Cependant, ils nécessitent des calculs plus lourds.

4. Théorie de la généralisation

La généralisation concerne la tâche accomplie par le réseau une fois son apprentissage achevé [21]. Elle peut être évaluée en testant le réseau sur des données qui n'ont pas servi à l'apprentissage. Elle est influencée essentiellement par quatre facteurs : la complexité du problème, l'algorithme d'apprentissage, la complexité de l'échantillon (le nombre d'exemples et la manière dont ils représentent le problème) et enfin la complexité du réseau (nombre de poids). La complexité du problème est déterminée en partie par sa nature même : on peut parler de « complexité intrinsèque ». Par ailleurs, l'algorithme d'apprentissage influe sur la généralisation par son aptitude à trouver un minimum local assez profond, sinon le minimum global. Dans la suite, nous étudions les deux autres types de complexité.

L'un des facteurs influant sur la capacité de généralisation est la complexité de l'échantillon. Supposons que l'on cherche à extraire une règle $a(\mathbf{x}, \mathbf{q})$ à partir d'exemples (\mathbf{x} : est le vecteur d'entrée et \mathbf{q} est le vecteur de paramètres). La Figure 4-5 définit la situation. La zone U représente l'ensemble des couples entrée-sortie possibles. La partie R représente la région dans laquelle la règle qu'on cherche à extraire est valable. On dit que R est consistante avec la règle. On sélectionne un certain nombre d'exemples pour l'apprentissage du réseau. Ces exemples forment l'ensemble d'apprentissage X_A . On sélectionne un autre ensemble distinct X_T pour tester le réseau et estimer sa généralisation. Les deux ensembles X_A et X_T doivent être représentatifs de la région R .

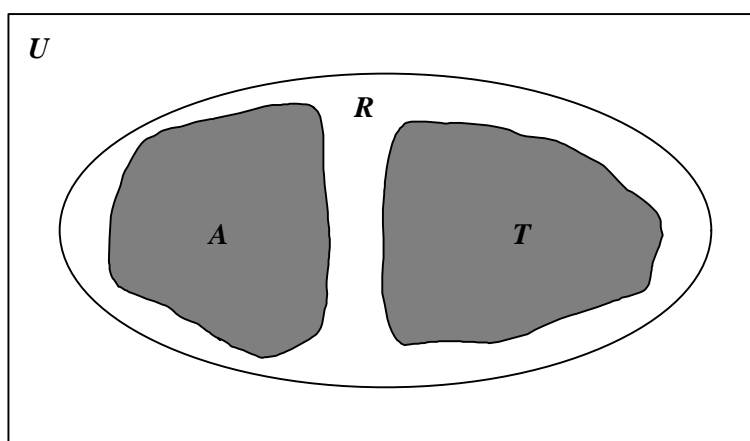


Figure 4-5 : Extraction de règles (d'après Denker et al., [12]).

L'autre facteur influant sur la généralisation est la complexité du réseau. Pour bien cerner cet aspect, on fait l'analogie avec un problème de régression polynomiale classique. Supposons que l'on dispose d'un nuage de points issus d'une fonction F d'une variable réelle inconnue. Les exemples à notre disposition sont des couples (x_i, y_i) bruités de la forme :

$$y_i = F(x_i) + e_i \quad (4.33)$$

où les e_i sont des réalisations d'une variable aléatoire. L'objectif est de modéliser la fonction F par un modèle polynomial en utilisant les exemples d'apprentissage. Les Figure 4-6(a)-(c) représentent la modélisation de F par trois modèles qui diffèrent par leur nombre de paramètres. On peut constater que le modèle ayant très peu de paramètres n'a pas assez de flexibilité pour réaliser un apprentissage correct des exemples d'apprentissage. Les erreurs d'apprentissage et de test sont toutes deux importantes: c'est la situation de *sous-apprentissage* (Figure 4-6 (a)). En revanche, le modèle constitué de nombreux paramètres, lisse parfaitement les exemples d'apprentissage. Il commet donc une erreur faible sur ces données, mais probablement une erreur plus importante sur les données de test. C'est la situation de *surapprentissage* (Figure 4-6(c)). Finalement, le modèle possédant un nombre de paramètres modéré réalise un bon compromis entre précision d'apprentissage et bonne généralisation (Figure 4-6(b)).

Le problème de la généralisation est souvent vu sous trois perspectives différentes. Dans la première, la taille du réseau est fixée (en accord avec la complexité du problème) et la question est : combien d'exemples d'apprentissage sont nécessaires pour atteindre une bonne généralisation ? Cette perspective est intéressante dans les applications où l'on a la possibilité d'acquérir autant d'exemples que l'on veut. Dans le second cas, le nombre d'exemples d'apprentissage est fixé et la question est : quelle taille du réseau donne la meilleure généralisation pour ces données ? On est conduit à adopter ce point de vue lorsque l'on est limité dans la possibilité d'acquérir des données d'apprentissage : il importe alors de déterminer quelle est la taille permettant au réseau de décrire au mieux les données en notre possession. La variante de l'estimation due à la taille finie de l'échantillon induit un écart entre la capacité réelle de généralisation et la capacité estimée. Dans la troisième perspective, on se donne des complexités d'échantillon et de modèle et on cherche, pour une probabilité fixée, l'écart maximum entre la vraie capacité de généralisation et la capacité de généralisation estimée à partir de l'échantillon.

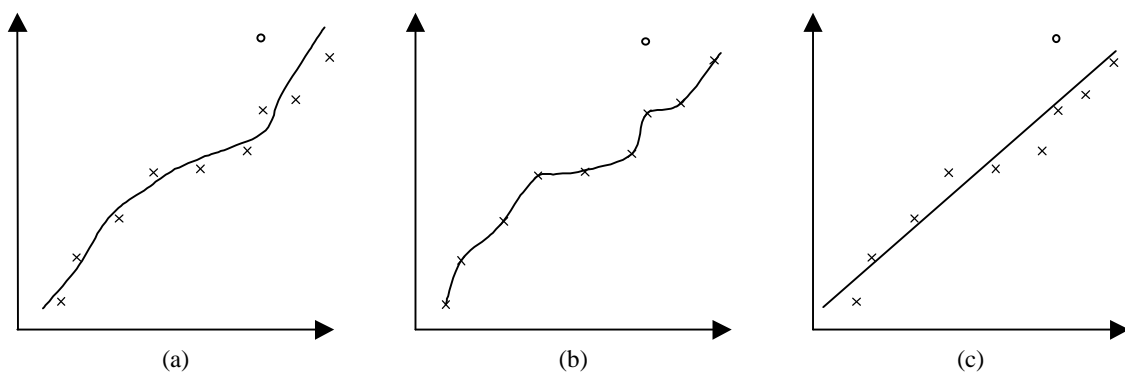


Figure 4-6 : (a) Apprentissage correct : un bon lissage des données ; (b) Surapprentissage : l'apprentissage est parfait sur l'ensemble d'apprentissage ('x'), et vraisemblablement moins bon sur le point de test ('o') ; (c) Sous-apprentissage : apprentissage insuffisant.

La théorie de Vapnik permet de répondre à la première et à la troisième question. On peut se référer aux travaux de Vapnik [61] pour plus de détails. Les notions de *dimension de Vapnik-Chervonenkis* [39] et de la théorie des courbes d'apprentissage [1] permettent d'établir un lien entre la complexité de l'échantillon et la complexité du réseau.

5. Contrôle de la complexité

Dans les problèmes réels, on ne peut pas toujours faire varier la taille de l'échantillon. Pour un problème donné, on se donne alors un algorithme d'apprentissage, une complexité d'échantillon et on cherche à contrôler la complexité du réseau pour avoir la meilleure généralisation possible. Ce problème du contrôle de la complexité constitue le sujet de ce paragraphe.

5.1 Introduction

L'une des caractéristiques essentielles des réseaux de neurones artificiels est leur flexibilité et leur capacité d'adaptation à des problèmes nouveaux grâce à la modification des poids des connexions selon une règle d'apprentissage. D'après des résultats théoriques récents (cf. §2.3), un réseau avec une seule couche cachée composée d'un nombre suffisant d'unités est capable d'approximer toute fonction continue. Des bornes théoriques de la taille du réseau en fonction de la taille de l'échantillon d'apprentissage ont été proposées pour garantir une bonne qualité de généralisation [2]. Cependant, si ces résultats sont d'une grande importance sur le plan théorique, ils le sont nettement moins dans la pratique. En effet, ces résultats ne constituent que des preuves d'existence et ne permettent pas de déterminer l'architecture d'un réseau de neurones pour un problème donné.

Comment déterminer le nombre de couches cachées et le nombre d'unités par couche cachée nécessaires pour réaliser une bonne approximation? La difficulté de répondre à cette question a quelquefois été considérée comme un inconvénient majeur des modèles connexionnistes puisqu'un mauvais choix peut conduire à de médiocres performances du réseau correspondant. Les premières tentatives de résolution du problème de détermination de l'architecture ont consisté à tester plusieurs réseaux ayant des architectures différentes jusqu'à atteindre la performance désirée.

Ces dernières années, de nombreux travaux ont été consacrés au développement de méthodes d'optimisation de l'architecture des réseaux de neurones. Les principaux algorithmes qui ont été proposés peuvent être classés en cinq familles :

1. Les méthodes de *pénalisation* consistent à modifier la fonction coût de manière à pénaliser les poids ou les unités peu utiles pour le réseau, voire nuisibles au bon fonctionnement du réseau.
2. Les méthodes *d'injection de bruit*. En général, ces méthodes ajoutent une quantité de bruit aux vecteurs d'entrée avant de les présenter au réseau pour l'apprentissage [25].
3. Les algorithmes *d'élagage* détectent et éliminent les poids ou les unités qui contribuent peu à la performance du réseau.
4. Les algorithmes *constructifs*, ou *ascendants*, partent d'une solution approchée au problème avec un réseau simple, puis ajoutent, si nécessaire, des unités ou des couches cachées pour améliorer les performances du réseau [36].
5. Enfin, les algorithmes *directs* définissent une architecture convenable puis réalisent l'apprentissage ou effectuent les deux opérations en même temps.

Les algorithmes de pénalisation et d'élagage sont appelés algorithmes *destructifs* ou *descendants*. Dans certains articles, les méthodes de pénalisation sont considérées comme des algorithmes d'élagage. Les trois premières familles supposent que le réseau est initialement surdimensionné.

Cette liste n'est pas exhaustive. Dans la suite du paragraphe, nous nous attacherons uniquement à l'approche par élagage et à l'algorithme utilisé dans notre étude.

5.2 Méthode d'élagage

L'élagage des ressources (poids ou unités) superflues suppose que l'on ait effectué l'apprentissage d'un réseau surdimensionné par rapport à la complexité de la tâche à résoudre. L'élagage est l'opération de suppression de connexions ou d'unités dont la présence est jugée inutile, voire nuisible à la généralisation. Une fois l'apprentissage du réseau achevé, la question est alors : quels sont les poids ou unités qui doivent être supprimés ? Comment ajuster les poids restants pour obtenir de meilleures performances ? Comment réaliser un tel élagage de manière efficace et économique en temps de calcul ?

Plusieurs méthodes existent pour l'élagage des poids dans un PMC. La méthode *Optimal Brain Damage* (OBD), que nous détaillons dans le paragraphe suivant, proposée par Le Cun *et al.* a été initialement utilisée pour l'optimisation de l'architecture des réseaux de neurones dans le domaine de la reconnaissance de caractères [34]. La méthode *Optimal Brain Surgeon* (OBS) proposée par Hassibi et al. est une extension de la méthode OBD [26]. Thomas et al. proposent une méthode robuste d'élagage des poids basée sur l'algorithme OBS [59].

5.2.1 Principe de la méthode OBD

Cette méthode est basée sur l'estimation de l'augmentation de la fonction coût lorsqu'un poids est supprimé du réseau [34]. Elle repose sur l'approximation de la fonction coût par un développement limité du second ordre par rapport aux poids. On obtient l'approximation suivante de l'erreur E :

$$\begin{aligned} E &= E(w_0 + \Delta w) \\ &= E_0 + \nabla E^T \mathbf{d}w + \frac{1}{2} \mathbf{d}w^T \mathbf{H} \mathbf{d}w + O(\|\mathbf{d}w\|^3) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Où E_0 est la valeur de la fonction erreur où l'approximation de Taylor est effectuée, et $\mathbf{d}w$ la variation des poids. On peut réduire l'équation (4.34), en faisant l'hypothèse que la fonction d'erreur E est, dans le voisinage du minimum, proche d'une fonction quadratique, donc $O(\|\mathbf{d}w\|^3) = 0$. On réduit alors l'équation (4.34) en :

$$E \approx E_0 + \nabla E^T \mathbf{d}w + \frac{1}{2} \mathbf{d}w^T \mathbf{H} \mathbf{d}w \quad (4.35)$$

Pour simplifier les calculs, la méthode OBD utilise l'approximation diagonale de H : $H_{ij} = 0$, pour chaque $j \neq i$.

La méthode utilisée pour estimer la variation de la fonction erreur, quand on supprime un poids, suppose que l'apprentissage du réseau est bien effectué ; la fonction erreur a alors atteint un minimum. Avec cette condition, le gradient de la fonction erreur par rapport à chaque poids, peut être supposé nul. Suite à une variation δw_i l'augmentation de la fonction d'erreur est :

$$dE_i = \frac{1}{2} h_{ii} (dw_i)^2 \quad (4.36)$$

où

$$h_{ii} = [\mathbf{H}]_{ii} = \frac{\partial^2 E}{\partial w_i^2} \quad (4.37)$$

Supprimer le poids w_i du réseau revient à l'annuler. La variation de poids est alors :

$$d w_i = -w_i \quad (4.38)$$

L'estimation de la variation dans la fonction erreur suite à la suppression du poids w_i est :

$$S_i = d E_i = \frac{1}{2} h_{ii} w_i^2 \quad (4.39)$$

S_i est appelée la *pertinence* ou la *sensibilité* du poids w_i . Elle représente la quantité par laquelle sera augmentée l'erreur E suite à la suppression du poids w_i . Les poids ayant les plus faibles S_i sont supprimés. Ensuite, une opération de réapprentissage est effectuée pour compenser l'effet de la suppression. Les auteurs de la méthode ont conseillé de supprimer plusieurs poids avant le réapprentissage du réseau [34]. Cependant, il n'y a aucune recommandation concernant le choix du nombre de poids à supprimer. Comme H est diagonale, le coût résultant de la suppression de m poids est égal à la somme des coûts lorsque les poids sont supprimés individuellement. La pertinence des m poids est estimée par :

$$S_m = \sum_{i=1}^m S_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m h_{ii} w_i^2 \quad (4.40)$$

D'après les équations (4.39) et (4.40), on peut déduire que les poids de faibles amplitudes ne sont pas obligatoirement inutiles pour le réseau. En effet, seuls ceux qui correspondent à des faibles S_i peuvent être élagués.

5.2.2 Algorithme d'élagage

La procédure de d'élagage par OBD se déroule parallèlement à l'algorithme d'apprentissage par rétropropagation du gradient : l'élagage OBD se fait juste après avoir trouvé un minimum local. Ensuite, la procédure « apprentissage RP + OBD » continue. OBD démarre seulement si la moyenne relative de variation de la fonction de coût pendant deux périodes consécutives d'apprentissage est assez petite. On la mesure à chaque itération de RP en mode « one-line » (voir Figure 4-7). Le processus RP + OBD s'arrête selon les conditions d'arrêt de l'algorithme RP : on arrête le processus dès que l'erreur mesurée sur un ensemble indépendant de validation augmente.

L'algorithme d'apprentissage et d'élagage par RP + OBD est le suivant :

1. Choisir une architecture de réseaux surdimensionnée
2. Apprentissage du réseau en utilisant l'algorithme RP
3. Calculer les dérivées secondes h_{ii} pour chaque poids et évaluer la pertinence S_i de chaque poids avec l'équation (4.39).
4. Ordonner les pertinences et éliminer les q poids de plus faible pertinence.
5. Retourner à l'étape 2 tant que l'erreur mesurée sur l'ensemble indépendant de validation n'augmente pas.

Dans ce paragraphe, nous avons présenté une méthode de contrôle de complexité des réseaux de neurones : l'algorithme OBD. Lors de la construction d'un PMC, l'objectif est de déterminer la meilleure architecture et le meilleur jeu de poids au sens d'un critère donné (la généralisation par exemple). Sous cet angle, la construction du PMC peut être vue comme un problème de recherche d'une solution dans l'espace des architectures et des poids.

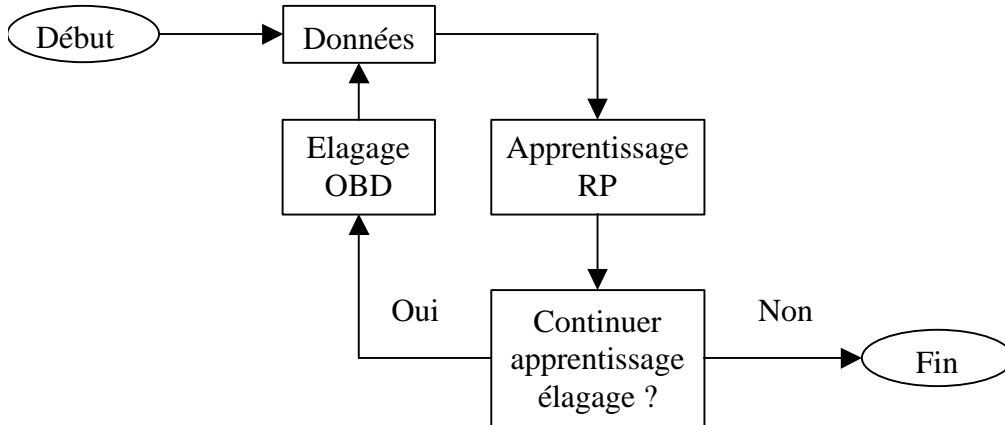


Figure 4-7 : Schéma de procédure RP + OBD.

Le paragraphe suivant est consacré au problème d'estimation de l'incertitude attachée à la prédiction. Le ré-échantillonnage par Bootstrap a été utilisé pour générer un intervalle de confiance sur la prédiction.

6. Génération d'intervalle de confiance par Bootstrap

6.1 Le ré-échantillonnage par Bootstrap

La technique s'appuie sur le fait de pouvoir, par ré-échantillonnage dans l'ensemble d'apprentissage, estimer les caractéristiques du phénomène aléatoire qui a engendré ces données. Pour le cas des réseaux de neurones, la totalité de l'ensemble d'apprentissage est néanmoins utilisée grâce à la formation de nombreuses partitions de l'échantillon. L'ouvrage de Efron et Tibshirani [14] détaille de nombreuses applications des techniques de ré-échantillonnage.

Soit un échantillon $\mathbf{x} = \{x^1, x^2, \dots, x^{n_A}\}$, réalisation d'une distribution F . On souhaiterait estimer un paramètre \mathbf{q} en fonction de \mathbf{x} . On calcule pour cela, un estimateur $\hat{\mathbf{q}} = s(\mathbf{x})$, déduit de \mathbf{x} . Quelle est la précision de $\hat{\mathbf{q}}$? Le bootstrap a été introduit en 1979 comme une méthode d'estimation de l'écart-type de $\hat{\mathbf{q}}$. Elle présente l'avantage d'être totalement automatique.

Les méthodes de Bootstrap dépendent de la notion d'échantillon de Bootstrap. Il s'agit d'une technique d'inférence statistique qui crée un nouvel ensemble d'apprentissage par ré-échantillonnage avec remise à partir de l'ensemble de départ (les exemples peuvent être réintroduits plus d'une fois).

Soit \hat{F} la distribution empirique, donnant la probabilité $1/n_A$ à toute observation x_i , $i = 1, 2, \dots, n_A$. Un échantillon de bootstrap est défini comme un échantillon aléatoire de taille n_A issu de \hat{F} : $\mathbf{x}_{boot} = \{x_{boot}^1, x_{boot}^2, \dots, x_{boot}^{n_A}\}$. L'échantillon de bootstrap \mathbf{x}_{boot} n'est pas identique à \mathbf{x} mais constitue plutôt une version aléatoire, ou ré-échantillonnée de \mathbf{x} . On effectue un tirage équiprobable avec remise sur tous les points de l'échantillon \mathbf{x} . Ainsi, si $\mathbf{x} = \{x^1, x^2, x^3, x^4, x^5\}$,

un échantillon de bootstrap pourra être formé de $\mathbf{x}_{boot} = \{x^1, x^1, x^2, x^5, x^5\}$. Les données de \mathbf{x}_{boot} sont issues du fichier original, certaines apparaissant zéro fois, d'autres une fois, d'autres deux fois, etc. Si $\mathbf{x}_{boot}^1, \dots, \mathbf{x}_{boot}^B$ sont B échantillons de bootstrap générés à partir de \mathbf{x} , la distribution de $s(\mathbf{x}_{boot}^1), \dots, s(\mathbf{x}_{boot}^B)$ approxime la distribution de l'estimateur $\hat{\mathbf{q}}$. Par exemple, la variance de $\hat{\mathbf{q}}$ peut être estimée par la variance empirique des $s(\mathbf{x}_{boot}^i)$ pour $i = 1, \dots, B$.

6.2 Application à la génération d'intervalles de prédiction

L'estimation par intervalle est souvent plus utile que l'estimation par un seul point $\hat{\mathbf{q}}$. Pris ensemble, ces deux types d'estimation indiquent quel est le meilleur candidat pour θ et quel est le niveau d'erreur raisonnable apporté par cet estimateur.

L'application de cette technique de ré-échantillonnage à la génération d'intervalle de confiance pour les réseaux de neurones est décrite par Lipmann et al. [38]. Elle est illustrée dans la Figure 4-8. On peut se référer à [14 page 170] pour une analyse théorique concernant l'utilisation d'intervalles de confiance basés sur les percentiles de bootstrap.

Dans cette approche, B échantillons de bootstrap sont générés à partir de l'ensemble d'apprentissage de départ. Ensuite, B PMCs sont générés en utilisant la procédure d'apprentissage décrite précédemment. On utilise comme ensemble d'apprentissage chacun des B ensembles de bootstrap. Quand un nouveau vecteur est présenté au B PMCs on calcule les B sorties correspondantes. Ces sorties nous donnent une estimation de la distribution de la prédiction du réseau de neurones.

Ensuite, ces valeurs sont classées par ordre croissant. En se fixant un seuil à 10% et 90%, on peut déterminer un intervalle de confiance. Par exemple, si on prend $B = 50$, l'estimation du point 10% est la 5^{ème} plus grande valeur et l'estimateur du point 90% est la 45^{ème} plus grande valeur. On estime que les autres valeurs ne sont pas plausibles, elles ne sont donc pas pris en compte pour la génération de l'intervalle de prédiction.

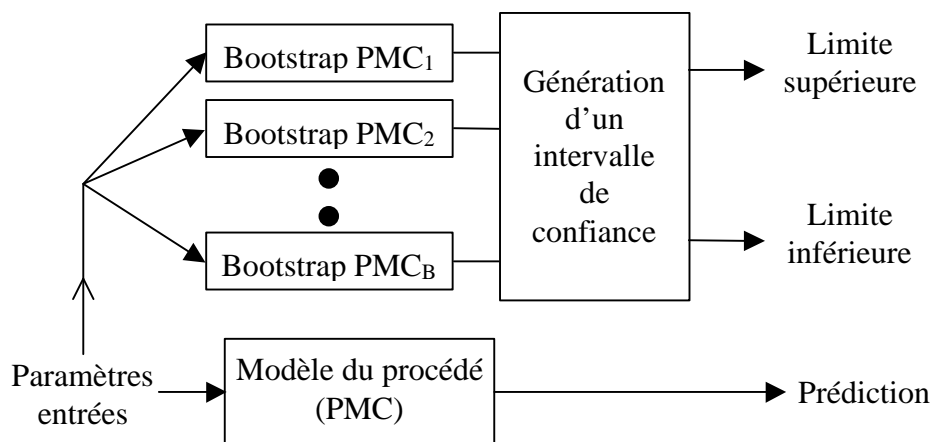


Figure 4-8 : Rééchantillonnage bootstrap pour la génération d'intervalle de prédiction.

7. Conclusion

Après la définition de l'architecture du PMC et le rappel de quelques théorèmes relatifs à ses capacités d'approximation, nous avons présenté un algorithme d'apprentissage très utilisé dans la communauté connexionniste : l'algorithme de RP. Plusieurs travaux lui ont été consacrés et un certain nombre de modifications ont été proposées pour accélérer le temps d'apprentissage et améliorer les performances du réseau obtenu. Nous en avons rappelé dans ce chapitre les principales variantes.

L'objectif d'un PMC est d'apprendre une tâche à partir des données d'apprentissage, puis de la généraliser sur de nouvelles données. La capacité de généralisation peut être analysée sous deux angles : analyse dans le pire des cas et analyse en moyenne. Le §4 de ce chapitre a été consacré à un exposé succinct du problème et à l'évocation des outils théoriques utiles concernant ces deux types d'analyse.

Dans le §5, nous avons présenté un algorithme de contrôle de complexité des réseaux de neurones basé sur la méthode d'élagage. Lors de la construction d'un PMC, l'objectif est de déterminer la meilleure architecture possible et le meilleur jeu de poids au sens d'un critère donné (la généralisation par exemple). Sous cet angle, la construction du PMC peut être vue comme un problème de recherche d'une solution dans l'espace des architectures et des poids : c'est l'approche de l'optimisation globale. Le prix à payer pour cette approche est le temps de calcul. En général, on se contente dans la pratique d'utiliser des méthodes qui ne garantissent pas l'optimalité de la solution, mais ont l'avantage d'être plus rapides.

Les méthodes connexionnistes présentées dans ce chapitre sont utilisées au chapitre suivant pour le développement d'un module de prédiction du taux de coagulant à partir d'indicateurs de qualité de l'eau brute.

Les perceptrons multicouches

Bibliographie

1. Amari S. I. et Murata N. Statistical theory of learning curves under entropy loss criterion. *Neural Computation*, Vol. 5, pp. 140-153, 1993.
2. Baum E. B. et Haussler D. What size net gives valid generalization. *Neural Computing*, Vol. 1(1), pp. 151-160, 1989.
3. Baum E. B. et Wilczek F. Supervised learning of probability distributions by neural networks. In Anderson D. Z., editor, *Neural Information Processing Systems (Denver 1987)*, American Institute of Physics, pp. 52-61, New York, 1988.
4. Boisseau J. M., Monier B., Lefèvre O., Denoeux T. et Ding X., Prédiction du trafic autoroutier par réseaux de neurones artificiels. In *Les systèmes Intelligents dans les Entreprises*, EC2 & Cie, Montpellier, 1995.
5. Bruenelli R. Training nets through stochastic minimization. *Neural Networks*, Vol. 7(9), pp. 1405-1412, 1994.
6. Bryson A. E., Ho Y-C. *Applied Optimal Control*. Hemisphere Publication, New-York, 1975, [Revised Printing of 1969 edition].
7. Canu S., Sobral R. et Lengellé R. Formel neural network as an adaptative model for water demand. *Proceedings of INNOC'90*, Kluwer Academic Publishers, Vol. 1, pp. 131-136, Paris, 1990.
8. Canu S., Ding X., Granvalet Y., Une application des réseaux de neurones pour la prédiction à un pas de temps, S. Thiria, Y. Lechevallier, O. Gascuel et S. Canu editeurs. « *Statistiques et méthodes neuronales* », Chapitre 7, pp.120-131, Dunod, Paris, 1997.
9. Chester D. L. Why two hidden layers are better than one. In *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks*, Vol. 1, pp. 265-268, Washington, DC, 1990.
10. Cybenko G. Approximation by superposition of a sigmoid function. *Math. of Control, Signals and Systems*, Vol. 2(4), pp. 303-314, 1989.
11. DasGupta B., Schnitger G. The power of approximating : a comparison of activation functions. In Hanson S. J., Cowan J. D., and Giles C. L., editors, *Advances in Neural Networks Information Processing Systems 5*, pp. 615-622, Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA, 1993.
12. Denker J., Schwartz B., Wittner B., Solla S., Howard R., Jackel L. et J. Hopfield. Large automatic learning, rule extraction, and generalization. *Complex Systems*, Vol. 1, pp. 877-922, 1987.
13. Ding X., Canu S., et Denoeux T. Neural network models for forecasting. In J. G. Taylor, editor, *Neural Networks and their Applications*, John Wiley and Sons, Chichester, pp. 243-252, 1996

14. Efron, B. et Tibshirani, R.J., *An Introduction to the Bootstrap*, New York: Chapman & Hall, 1993.
15. Elliott D. L. A better activation function for artificial neural networks. Technical Report TR-93-8, Institute for Systems Research, College Park, MD, January 29, 1988.
16. Evans, J., Enoch, C., Johnson, M. et Williams P., Intelligent based auto-coagulation control applied to a water treatment works, in *Proceedings of International Conference on Control*, pp. 141-145, 1998.
17. Fahlman S. E. An empirical study of learning speed. Technical Report CMU-CS-88-162, School of Computer Science, Carnegie Mellon University - Pittsburgh, PA, September 1988.
18. Fahlman S. E. et Lebiere C. The cascade-correlation learning architecture. Technical Report CMU-CS-90-100, School of Computer Science, Carnegie Mellon University - Pittsburgh, PA 15213, February 14, 1990.
19. Fletcher R. *Practical methods of optimization*. John Wiley and Sons Ltd, second edition, New-York, USA, 1987.
20. Fombellida M. R. J., Minsoul M. J. M., et Destine J. L. O. Perceptrons multi-couches & fonctions d'activation non-monotones. In *Proc. Neuronîmes'90*, EC2 & Cie, Nîmes, France, 1990.
21. Gallinari P., Heuristiques pour la généralisation, S. Thiria, Y. Lechevallier, O. Gascuel et S. Canu editeurs. « *Statistiques et méthodes neuronales* », Chapitre 14, pp.230-243, Dunod, Paris, 1997.
22. Gayner R. J. et Downs T. On the properties of error functions that affect the speed of backpropagation learning. In Marinaro M. and Morasso P. G., editors, *ICANN'94 - Proceeding of the International Conference on Artificial Neural Networks ; 26-29 May 1994*, pp. 557-560, Sorrento, Italy, 1994.
23. Goldberg D. E., *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning*. Addison Wesley, New-York, NY, 1989.
24. Gorman R. P. et Sejnowski T. J. Analysis of hidden units in a layered network trained to classify sonar targets. *Neural Networks*, Vol. 1, pp. 75-89, 1988.
25. Grandvalet Y., Canu S., Boucheron S. Noise injection : theoretical prospects. *Neural Computation*, Vol. 9, N°7, pp. 1241-1256, 1997.
26. Hassibi B. et Stork D. G., Second order derivatives for network pruning : Optimal brain surgeon. In S. J. Hanson, J. D. Cawnan, and C. L. Giles, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 5*, pp. 164-171, Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1993
27. Hecht-Nielsen R. *Neurocomputing*. Addison-Wesley, New-York, NY, 1990.
28. Hertz J., Krogh A., et Palmer R. G. Introduction to the theory of neural computation. *Computation and neural systems series*. Addison-Wesley, New-York, NY, 1991.
29. Hornik K., Stinchcombe M., White H. Multi-layer Feedforward Networks are Universal Approximation, *Neural Networks*, Vol. 2, pp. 359-366, 1989.

30. Hush D. R. et Horne B. G.. Progress in supervised neural networks. *IEEE Signal Processing Magazine*, pp. 8-39, January 1993.
31. Jacobs R. A. Increased rates of convergence through learning rate adaptative. *Neural Networks*, Vol. 1, pp. 295-307, 1988.
32. Le Cun Y. Une procédure d'apprentissage pour réseau à seuil asymétrique. In *Cognitiva 85: A la Frontière de l'Intelligence Artificielle des Sciences de la connaissance des Neurosciences*, Paris: CESTA, pp. 599-604, Paris, 1985.
33. Le Cun Y., Boser B., Denker J. S., Hendersen D., Howard R. E., Hubard W., Jackel L. D. Backpropagation applied to handwritten zip code recognition. *Neural Computation*. Vol. 1, pp. 541-551, 1989.
34. Le Cun Y., Denker J. S., et Solla S. A. Optimal brain damage. In Tourtetzky D. S., editor, *Advances in Neural Information Processing Systems 2*, pp. 598-605, Morgan Kaufman, San Mateo, CA, 1990.
35. Lee A.-S., Srihari S. N. et Gaborski R. Bayesian and neural network pattern recognition : a theoretical connection and empirical results with hand-written characters. In Sethi I. K. and Jain A. K., editors, *Artificial Neural Networks and Statistical Pattern Recognition - Old and New Connections*, Elsevier Science Publisher B. V., pp. 89-108, 1991.
36. Lengellé R. et Denoeux T. Training MLPs layer by layer using an objective function for internal representations. *Neural Networks*, 9:83-97, 1996.
37. Lippmann R. P. An introduction to computing with neural nets. *IEEE ASSP magazine*, Vol. 4(2), pp. 4-22, 1987.
38. Lippmann R.P., Kukolich L. et Shahian D., Predicting of Complications in Coronary Artery Bypass Operations using Neural Networks, In G. Tesauro et al. (Eds), *Advances in Neural Information Processing System 7*, Menlo Park, CA: MIT Press, 1055-1062, 1995.
39. Maass W. Vapnik-Chervonenkis dimension of neural nets. Technical Report NeuroCOLT Technical Report Series, NC-TR-96-015, Royal Holloway University of London, Department of Computer Science - Egham neuro-colt@dcs.rhnc.ac.uk, January, 1996.
40. Makhoul J., El-Jaroudi A., et Schwartz R. Formation of disconnected decision regions with a single hidden layer. In Proceedings of the *International Joint Conference on Neural Networks*, Vol. 1, pp. 455-460, 1989.
41. McCulloch W. S., Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Math. Bio.*, Vol. 5, pp. 115-133, 1943.
42. Mhaskar H. N. Micchelli C. A. How to choose an activation function. In Cowan J. D., Tesauro G., and Alspector J., editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 6*, pp. 319-326, Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco, 1994.
43. Minsky M., et Papert S. *Perceptrons*. MIT Press, Cambridge, MA, 1969.
44. Mirsepassi, A., Cathers, B. et Dharmappa, H.B., Application of Artificial Neural Networks to the Real Time Operation of Water Treatment Plants, in *Proceedings of the International Conference on Neural Networks*, Vol. 1, pp. 516-521, Perth, Australia, 1995.

45. Moller M. *Efficient training of feed-forward neural networks*. Ph.D thesis, Computer Science departement ; Aarhus University, Denmark, December 1993.
46. Moody J., Darken C. Learning with localized receptive fields. In Toutzky D., Hinton G. and Sejnowski T., editors, *Processings of the 1988 Connectionist Models Summer School*, pp. 133-143, Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA, 1988.
47. Parker D. B. Learning-logic. Technical Report TR-47, Center for Computational Research in Economics and Management Sci., MIT, April, 1985.
48. Plaut D. C., Nowlan S. J. et Hinton G. E. Experiments on learning by back-propagation. Technical Report CMU-CS-86-126, Carnegie Mellon University - Pittsburgh, PA 15213, 1990.
49. Robbins H. et Monro S. A stochastic approximation method. *Annals of Math. Stat.*, Vol. 22, pp. 400-407, 1951.
50. Rosenblatt F. *Principles of Neurodynamics*. Spartan, New York, 1962.
51. Rosenblatt F. The perceptron : A probabilistic model for information storage and organisation in the brain. *Psychological Review*, Vol 65, pp. 386-408,1958.
52. Rosenblatt F. The Perceptron: a Perceiving and Recognizing Automaton, *Project PARA Report 85-460-1*, Cornell Aeronautical Lab., 1957.
53. Rumelhart D. E., Hinton G. E., et Williams R. J. Learning internal representations by error propagation. In Rumelhart D. E. and McClelland J., editors, *Parallel Distributed Processing*. MIT Press, Cambridge, MA, 1986.
54. Saarinen S., Bramley R. et Cybenko G. Ill-conditioning in neural network training problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 4(1), pp. 67-790, 1991.
55. Sejnowski T. J. et Rosenberg C. M. Parallel networks that learn to pronounce english text. *Complex Systems*, Vol. 1, pp. 145-168, 1987.
56. Silva F. M. et Almeida L. B. Speeding up backpropagation. In R. Eckmiller, editor, *Advanced Neural Computers*, pp. 151-158. Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland, 1990.
57. Sontag E. D. Feedback stabilization using two-hidden-layer nets. Technical Report SYCON-90-11, Department of Mathematics, Rutgers University, October 1990.
58. Stanley S. J., Zhang Q., The use of Artificial Neural Networks for Process Modeling of Enhanced Coagulation, In *Proceedings of Water Quality Technology Conference*, 1997.
59. Thomas P. et Bloch G., Robust Pruning for Multilayer Perceptrons. In *Proceedings of IMACS/IEEE Multiconference on Computational Engineering in Systems Applications CESA '98*, Vol. 4, pp. 17-22, Nabeul-Hammamet, Tunisia, April 1-4, 1998.
60. Tollenaere T. SuperSAB: fast adaptive back propagation with good scaling properties. *Neural Networks*, Vol. 3, pp. 561-573, 1990.
61. Vapnik V. N. *Estimation of dependences based on empirical data*. Springer series in statistics. Springer-Verlag, Berlin, 1982.

62. Werbos P. *Beyond regression: new tools for prediction and analysis in the behavioral sciences*. PhD thesis, Harvard University, Cambridge, MA., 1974.

Chapitre 5

Présentation des résultats

L'application étudiée dans ce travail a pour cadre l'usine de traitement d'eau potable de Viry-Chatillon située au sud de Paris. Le but est de développer un capteur logiciel pour le contrôle automatique de la dose de coagulant à partir d'un historique de données. Nous allons décrire la mise en œuvre des différents modules de ce système, dont le principe a été présenté dans les chapitres précédents.

Dans un premier temps, les données utilisées pour la mise au point de ce capteur logiciel sont mises en évidence. Ensuite, les résultats de l'algorithme SOM sont commentés ; et nous montrons, sur des exemples de simulation, sa capacité à valider des données et à reconstruire des données manquantes ou invalides. Dans la partie suivante, nous présentons les résultats des différentes étapes (apprentissage du modèle et génération des intervalles de confiance) utilisées pour la construction du module de prédiction de la dose de coagulant. Pour terminer, nous présentons les résultats et l'intérêt du système global de contrôle automatique de la dose de coagulant. En particulier, nous montrons l'intérêt d'utiliser un module de validation et de reconstruction de données en amont du module de prédiction proprement dit.

Cette application a fait l'objet de plusieurs publications dans des congrès [1, 2, 3, 4] et dans une revue (cf. Annexe A).

1. Cadre de l'application : le site de Viry-Chatillon

La distribution d'eau potable dans le sud de l'agglomération parisienne repose sur un ensemble cohérent d'infrastructures. L'eau est, en majeure partie, prélevée dans la Seine puis traitée dans trois usines : Morsang sur Seine, Vigneux sur Seine et Viry-Chatillon. Le reste de l'eau provient d'une cinquantaine de forages situés dans la vallée de l'Yerres. Pilotés depuis le centre de télécontrôle situé à Montgeron, ces sites de production, d'une capacité totale de 450.000 m³/j, alimentent, via un réseau interconnecté de plus de 4500 km, près d'un million d'habitants répartis sur 4 départements : l'Essonne, le Val de Marne, la Seine et Marne et les Yvelines (cf. Figure 5-1).

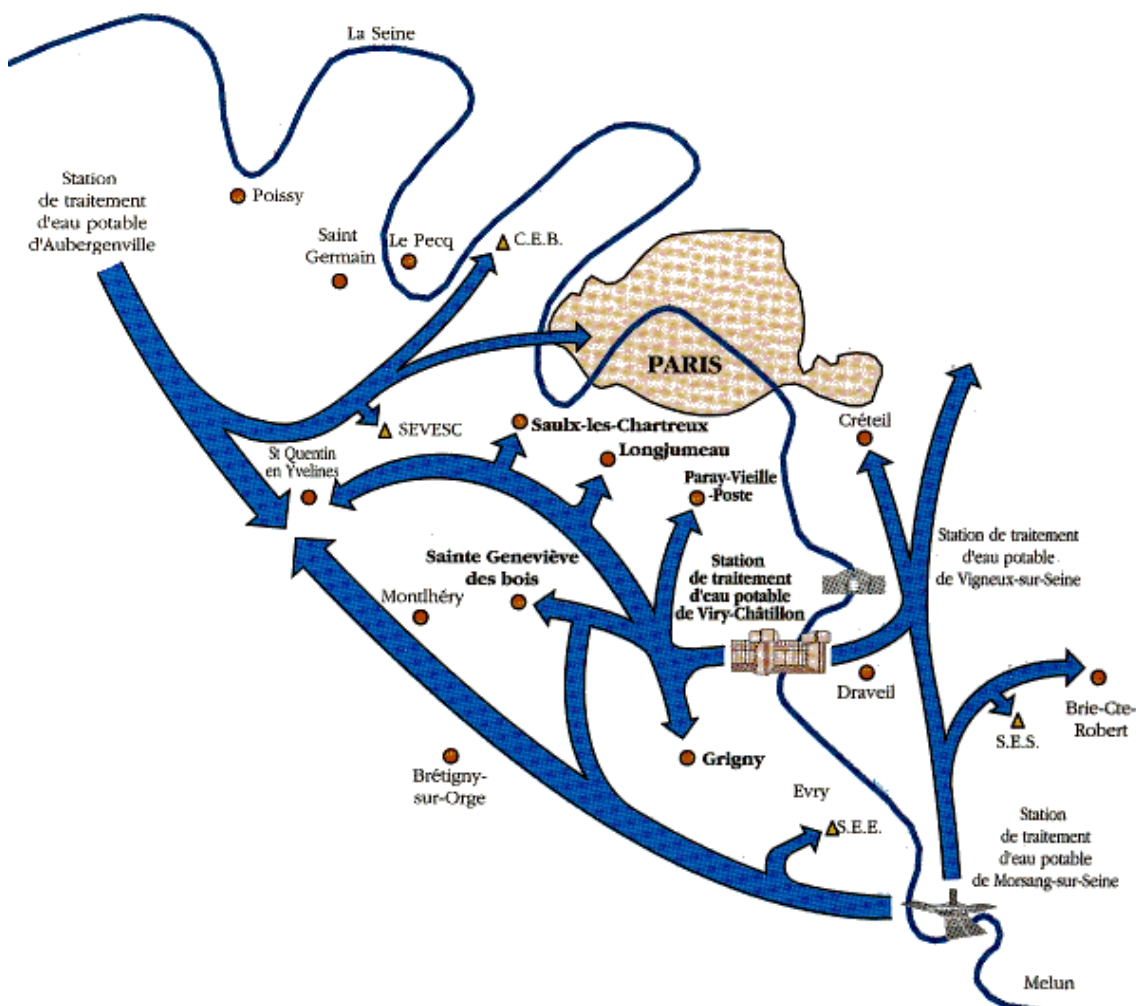


Figure 5-1 : Réseau de distribution d'eau potable du sud de l'agglomération parisienne.

La partie appliquée de ce travail a été réalisée sur le site de Viry-Chatillon. Cette usine approvisionne en eau plus de 300 000 habitants. Elle a une capacité nominale de 120 000 m³ par jour et elle est bien instrumentée depuis plusieurs années. Pour anticiper l'apparition de pollutions sur la ressource et protéger ainsi la production, une station d'alerte a été installée à Evry, à 4 km en amont de la prise d'eau en Seine de la station de Viry-Chatillon. Ce dispositif contrôle en permanence 8 paramètres de qualité grâce à un système de prélèvement en continu.

La filière de traitement correspond à celle décrite dans le Chapitre 1 de ce mémoire (cf. Figure 5-2). L'eau, prélevée dans la Seine, est pompée jusqu'à la station de traitement. L'étape

de clarification est assurée par le procédé de coagulation - floculation, grâce à un décanteur de type « Pulsator », et à un premier étage de filtration sur sable. L'étape de désinfection est réalisée à l'aide d'une tour d'ozonation. L'étape finale d'affinage est effectuée par une seconde filtration sur charbon actif pour supprimer les molécules responsables des goûts et des odeurs. Une addition de soude permet de rétablir l'équilibre calco-carbonique de l'eau pour qu'elle ne soit ni incrustante, ni corrosive. Un ultime ajout de chlore permet de préserver la qualité de l'eau tout au long des centaines de kilomètres du réseau jusqu'au robinet du consommateur.

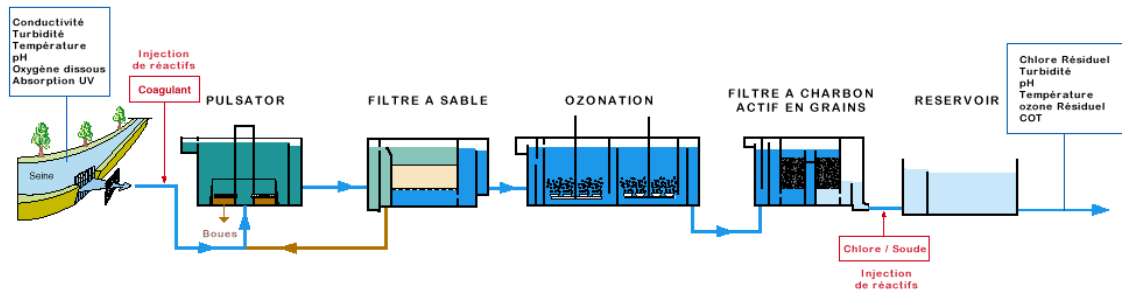


Figure 5-2 : Usine de Viry-Chatillon.

2. Les données de Viry-Chatillon

Comme nous l'avons vu dans la première section de ce mémoire (cf. Chapitre 2 §3 p. 30), nous cherchons à estimer le taux de coagulant en fonction des paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute. Nous ne connaissons pas de modèle de ce procédé. Notre connaissance du procédé est limitée à des données enregistrées en temps réel depuis plusieurs années et aux différents paramètres influençant le bon fonctionnement de ce procédé.

Les données disponibles proviennent de diverses sources et sont de qualités différentes. On trouve :

- des mesures en continu issues de capteurs plus ou moins précis,
- des analyses faites en laboratoire,
- et des résultats d'essais de jar-test.

Plusieurs paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute sont mesurés en ligne à l'aide de la station d'alerte d'Evry, et des essais de jar-test sont réalisés quotidiennement.

2.1 Description sommaire des données

Nous disposons de six paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute en continu :

1. turbidité,
2. conductivité,
3. pH,
4. température,
5. oxygène dissous,
6. absorption UV.

Ces différents paramètres sont mesurés par la station d'alerte d'Evry en amont de l'usine. De plus, nous disposons de la dose de coagulant optimale injectée sur l'usine en continu. Cette dose de coagulant est déterminée par des essais jar-test effectués en laboratoire, elle est réactualisée par l'opérateur une fois par jour. Elle peut également être réactualisée plus fréquemment s'il y a une forte variation de la qualité de l'eau brute.

Nous disposons d'un historique de données d'environ deux ans : de décembre 1997 à mai 2000. La période d'échantillonnage des données n'est pas constante, mais les données sont stockées sur « bande morte » (cf. Chapitre 2 §4.1.1 p.34). Rappelons que cette procédure est basée sur la définition d'une période minimale, d'une période maximale, et d'une variation minimale. Si la variation du capteur est supérieure à la variation minimale alors les données sont échantillonnées à la période minimale. Sinon, les données sont échantillonnées à la période maximale. Cette technique nous permet de visualiser l'ensemble des variations sur le signal sans stocker trop de données. Comme la période d'échantillonnage minimale des données est de 5 minutes, nous ré-échantillons avec une période fixe de 5 minutes.

2.2 Analyse et pré-traitement des données

Nous disposons donc d'une base de données composée de 260 000 échantillons. Une fois les données ré-échantillonnées, elles subissent une première phase de validation simple (cf. Chapitre 3 §2 p.44) afin de détecter les valeurs aberrantes. On utilise les histogrammes des valeurs obtenues en l'absence de défaut de capteurs pour estimer la distribution de possibilité de chaque paramètre. On peut ainsi affecter à chaque vecteur de paramètre un indice global de validité et invalider les informations aberrantes contenues dans le signal brut. Les données sont ensuite filtrées à l'aide d'un filtre moyenne mobile classique sur une période de 1 h.

Des statistiques descriptives simples des données brutes sont présentées dans le Tableau 5-1. Il faut noter que ce jeu de données couvre une période de deux ans et reflète donc, dans une certaine mesure, les variations saisonnières de la qualité de l'eau brute. Il est évident, cependant, qu'un ré-apprentissage périodique du système sera nécessaire pour prendre en compte l'ensemble des situations susceptibles d'être rencontrées, et pour permettre l'adaptation continue du système à toute évolution à moyen ou à long terme de la qualité de l'eau brute.

Tableau 5-1 : Résumé statistique des paramètres de l'eau brute sur l'usine de Viry pour la période de décembre 1997 à mai 2000.

| Propriété | Turbidité (NTU) | Conductivité (µS) | PH (uph) | Température (°C) | Oxygène Dissous (mg/l) | UV (do/m) | Dose de Coagulant (ppm) |
|------------|-----------------|-------------------|----------|------------------|------------------------|-----------|-------------------------|
| Maximum | 103,9 | 556,8 | 8,48 | 26 | 15,2 | 12 | 8,5 |
| Minimum | 2 | 340 | 7,63 | 4,1 | 7,2 | 2,16 | 2 |
| Moyenne | 18,5 | 455,8 | 8,1 | 13,8 | 11,2 | 6,1 | 4,7 |
| Ecart type | 20,2 | 41,4 | 0,14 | 6 | 1,7 | 2 | 1,6 |

L'évolution des différents paramètres en continu, filtrés et validés, de la qualité de l'eau au cours du temps est présentée dans les Figure 5-3 et Figure 5-4. Les mesures sont affichées en fonction de leur date d'acquisition. On remarque l'existence d'un certain nombre de « trous » dans les données, qui sont dus à des défauts de capteur ou à des données aberrantes.

L'évolution de la dose optimale de coagulant au cours du temps est également présentée dans la Figure 5-5. On constate de fortes variations de turbidité durant la saison hivernale. Les valeurs maximum du pH (> 8) sont également obtenues durant cette même période. On remarque aussi que la turbidité, le pH, l'oxygène dissous et la dose de coagulant sont fortement dépendants des phénomènes saisonniers. On voit ici tout l'intérêt de disposer d'au moins un an d'archives de données pour déterminer un modèle de prédiction fiable capable de fonctionner sur une année complète.

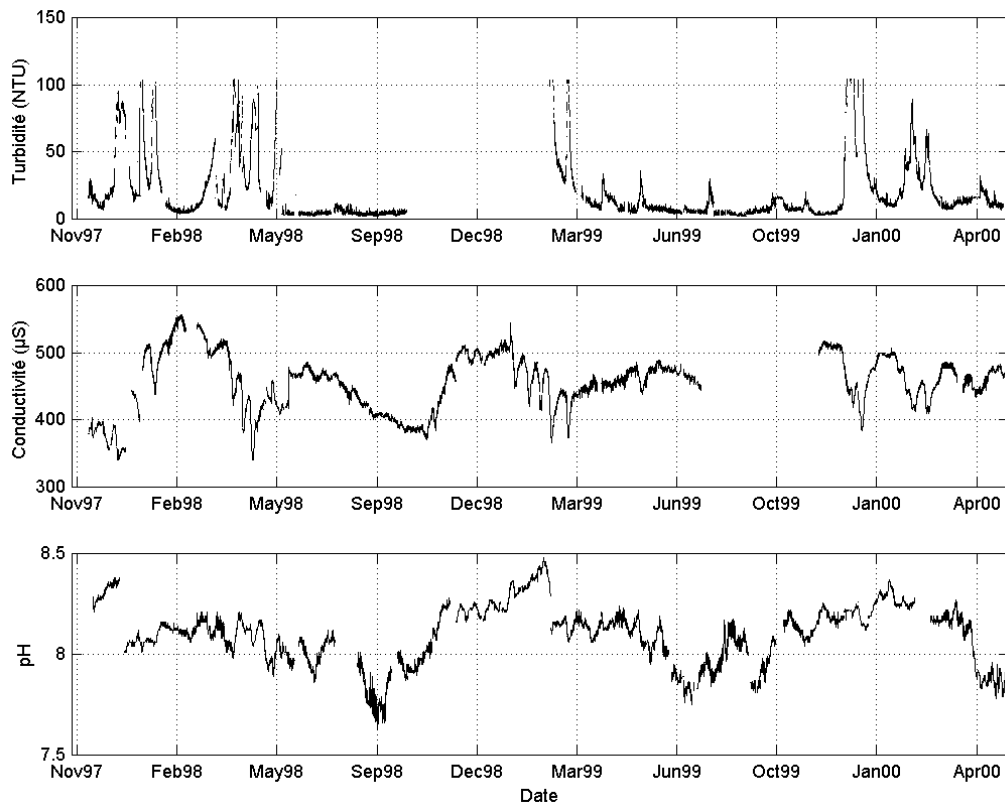


Figure 5-3 : Evolution des paramètres descripteurs de l'eau brute au cours du temps (1).

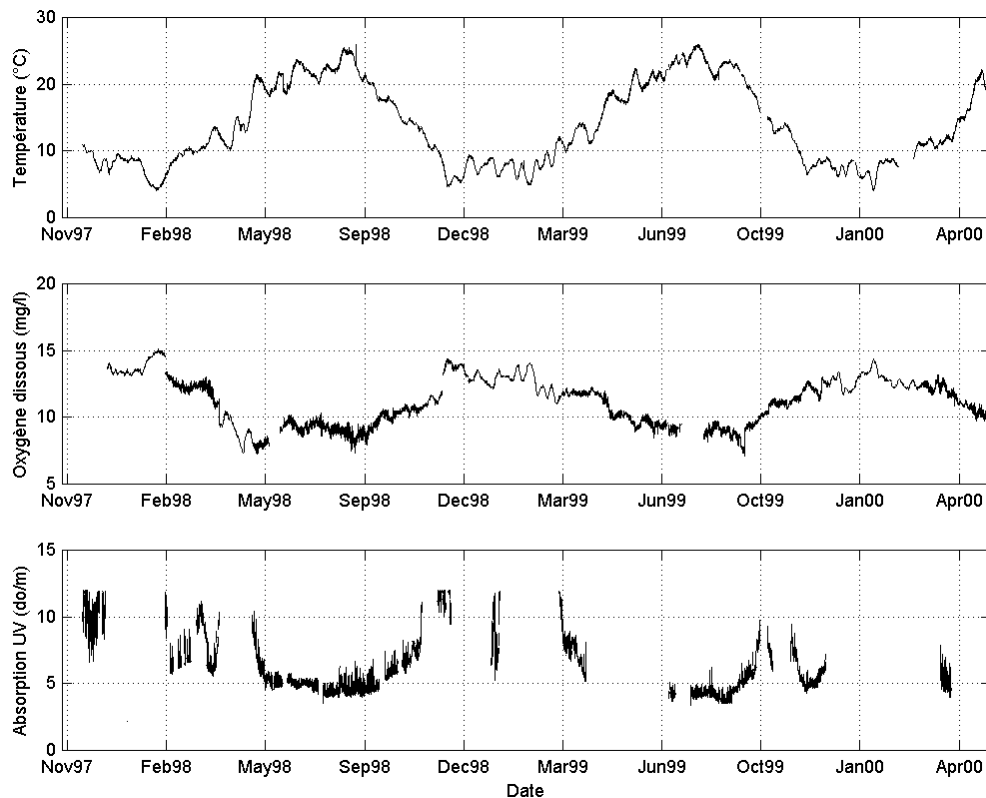


Figure 5-4 : : Evolution des paramètres descripteurs de l'eau brute au cours du temps (2).

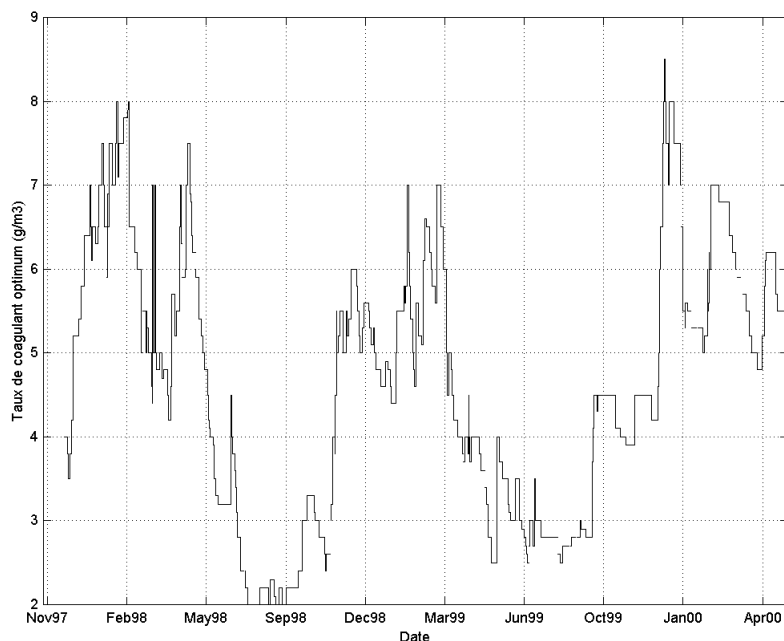


Figure 5-5 : Evolution de la dose optimale de coagulant appliquée sur l'usine au cours du temps.

La grande disparité des valeurs entre les différents paramètres nous a amené à utiliser, par la suite, des valeurs centrées et normées de chaque paramètre.

L'objectif est d'estimer la dose de coagulant, à une date t , en fonction des différents paramètres de la qualité de l'eau brute. De plus, nous voulons également estimer, à une date t , les valeurs manquantes d'un sous-ensemble quelconque de ces 6 paramètres. Nos méthodes ne nécessitent pas forcément de « bonnes » corrélations entre les variables. Néanmoins, la précision des estimations en dépend. La Figure 5-6, qui représente les relations entre les variables prises deux à deux, nous montre ces différentes corrélations. Les graphiques de la Figure 5-6 situés sur la diagonale représentent les histogrammes des différents paramètres. Le coefficient r représente le coefficient de corrélation entre les variables prises deux à deux. Par exemple, le coefficient de corrélation entre la température et l'oxygène dissous est de -0.92.

On distingue des liens entre la température, le pH et l'oxygène dissous. En revanche, il est difficile de mettre en avant des corrélations nettes entre les 6 paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute. On constate que le coefficient de corrélation entre ces différents paramètres et la dose de coagulant varie de 0,4 à 0,8. Cette analyse simple ne nous permet cependant pas de sélectionner les variables pertinentes pour la prédiction du taux de coagulant.

Nous allons maintenant décrire les résultats obtenus sur les 6 paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute avec le modèle SOM. Puis, nous décrirons les résultats obtenus pour la validation et la reconstruction des données.

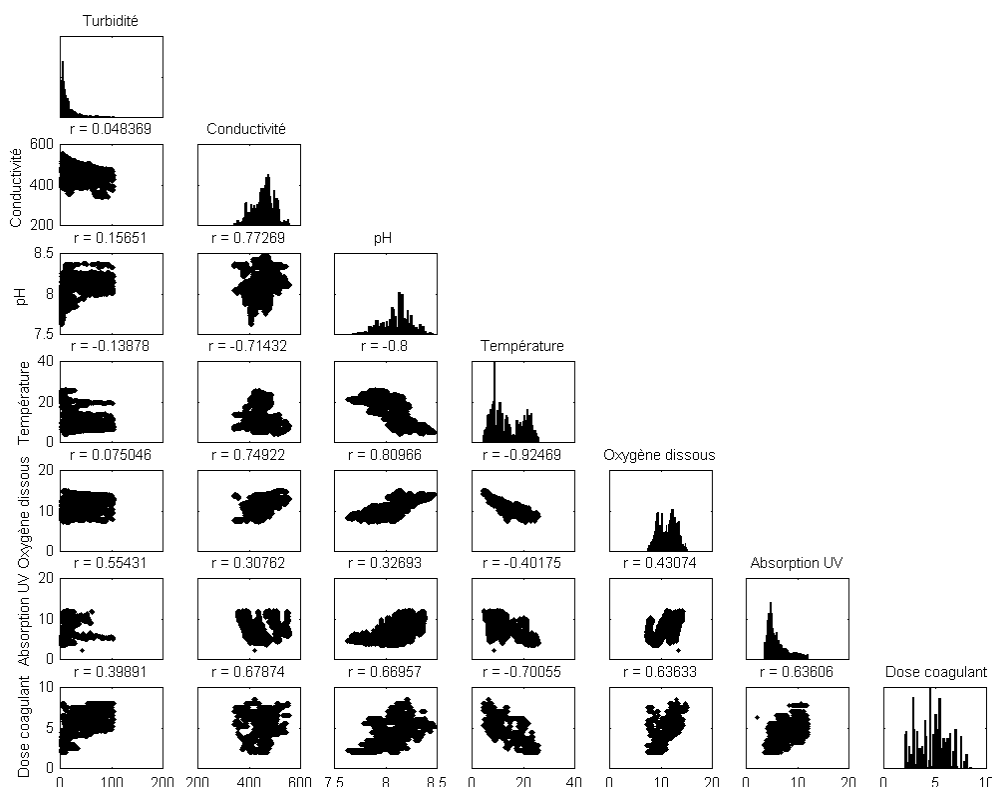


Figure 5-6 : Relations entre les variables, prises deux à deux et coefficients de corrélation croisés.

3. Validation et reconstruction des données

3.1 Résultats des cartes de Kohonen

L'ensemble d'apprentissage se compose de 260 000 échantillons. Nous avons retenu pour la suite une carte constituée de $k \times k$ cellules, avec un voisinage hexagonal. La sélection de la taille de la carte s'effectue à l'aide de l'erreur de discrétisation. Nous avons vu dans le Chapitre 3 (§3.4.2 p.54), que l'erreur de discrétisation définit l'aptitude à reconstruire l'ensemble d'apprentissage. Comme les cartes de Kohonen nous servent principalement pour la reconstruction de données, nous avons décidé de sélectionner la carte en minimisant ce critère afin d'avoir les meilleures performances possibles en reconstruction.

Les entrées sont présentées dans leur ordre d'apparition durant environ 5.10^5 étapes, ce qui revient à présenter cycliquement 2 fois l'ensemble d'apprentissage. Le Tableau 5-2 montre la valeur de l'erreur de discrétisation obtenue pour différentes tailles de carte, à la fin de l'apprentissage.

Tableau 5-2 : Valeurs de l'erreur de discrétisation pour la carte sélectionnée à la fin de l'apprentissage.

| Étape | Nombre de Cellules | Erreur de discrétisation |
|----------|--------------------|--------------------------|
| 5.10^5 | 5 x 5 | 0.75 |
| 5.10^5 | 10 x 10 | 0.47 |
| 5.10^5 | 15 x 15 | 0.34 |
| 5.10^5 | 20 x 20 | 0.30 |

La carte de taille 20 x 20 donne une erreur de discrétisation légèrement meilleure que les autres architectures, mais celle-ci comporte beaucoup de prototypes qui ne sont activés par aucun vecteur de l'ensemble d'apprentissage. Nous avons donc sélectionné une carte de taille 15 x 15.

Lorsque la dimension est inférieure ou égale à 3, il est simple de représenter la position des différents vecteurs prototypes par des points et les relations de voisinage direct entre deux cellules par un trait reliant leurs vecteurs prototypes. Cette méthode fournit une information visuelle sur la qualité de la carte et le choix de son architecture. Cependant, dans notre cas (dimension égale à 6), ce mode de représentation n'est plus utilisable. Pour la visualisation des résultats, nous utilisons une méthode qui permet d'apprécier la qualité de la carte et de la SOM employée. Nous allons représenter la réaction de la carte aux différentes composantes de l'espace d'entrée. Il est possible de représenter sur la carte, pour chaque composante, la valeur retenue pour chaque cellule en codant sur une échelle de couleurs les valeurs des éléments du vecteur prototype associé à cette composante.

Afin de disposer d'un affichage compréhensible, nous utilisons désormais, pour représenter la réaction des cellules aux paramètres, un code de 10 couleurs, numéroté de 1 à 10 et représenté sur la Figure 5-7.

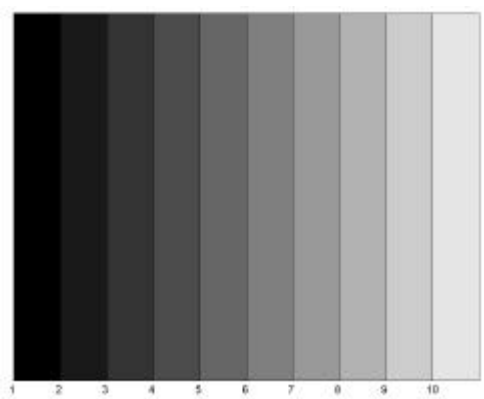


Figure 5-7 : Les 10 teintes employées pour représenter la réaction des cellules aux différents paramètres.

La Figure 5-8 représente la répartition des réactions de la carte pour chacun des 6 paramètres, les intervalles correspondant aux différentes couleurs étant définis par le Tableau 5-3.

Tableau 5-3 : Relation teinte - intervalle pour les 6 paramètres.

| Paramètres | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|-----------------|-------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Turbidité | $3.4 \leq . \leq 11.2$ | ≤ 19 | ≤ 26.8 | ≤ 34.6 | ≤ 42.4 | ≤ 50.2 | ≤ 58 | ≤ 65.8 | ≤ 73.6 | ≤ 81.4 |
| Conductivité | $384 \leq . \leq 401$ | ≤ 417 | ≤ 433 | ≤ 450 | ≤ 466 | ≤ 483 | ≤ 499 | ≤ 515 | ≤ 531 | ≤ 548 |
| pH | $7.77 \leq . \leq 7.78$ | ≤ 7.84 | ≤ 7.90 | ≤ 7.97 | ≤ 8.03 | ≤ 8.09 | ≤ 8.16 | ≤ 8.22 | ≤ 8.28 | ≤ 8.34 |
| Température | $5.7 \leq . \leq 7.6$ | ≤ 9.5 | ≤ 11.3 | ≤ 13.2 | ≤ 15.1 | ≤ 17 | ≤ 18.9 | ≤ 20.8 | ≤ 22.6 | ≤ 24.5 |
| Oxygène dissous | $7.7 \leq . \leq 8.4$ | ≤ 9 | ≤ 9.6 | ≤ 10.3 | ≤ 10.9 | ≤ 11.5 | ≤ 12.2 | ≤ 12.8 | ≤ 13.4 | ≤ 14 |
| Absorption UV | $4.1 \leq . \leq 4.1$ | ≤ 5.3 | ≤ 6 | ≤ 6.6 | ≤ 7.3 | ≤ 7.9 | ≤ 8.5 | ≤ 9.2 | ≤ 9.8 | ≤ 10.5 |

Les cellules situées en haut à droite de la carte réagissent aux fortes valeurs de température et à des valeurs faibles de la turbidité, du pH et de l'oxygène dissous. Celles situées en bas à gauche sont sensibles aux faibles températures et aux fortes valeurs d'oxygène dissous et de pH. On retrouve assez clairement les différentes saisons sur cette représentation. Les cellules du haut représentent la saison estivale et les cellules du bas la saison hivernale. Le reste des cellules gère

les valeurs moyennes sur les six paramètres. Cette représentation permet très facilement de constater l'existence d'une certaine corrélation entre la température et l'oxygène dissous. Cette représentation, relativement élémentaire, nous montre qu'avec peu de connaissances du domaine d'application il est possible d'obtenir une première représentation des données.

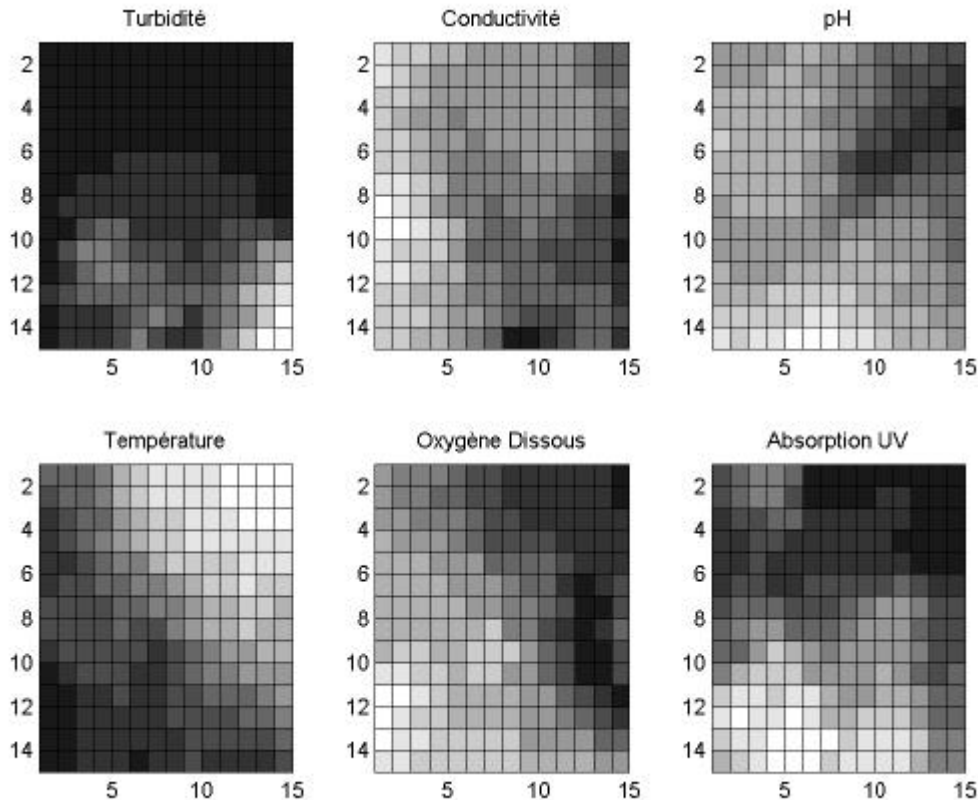


Figure 5-8 : Réaction aux différents paramètres des cellules de la carte (15 x 15) après apprentissage.

Nous verrons dans le dernier chapitre de ce mémoire (cf. Chapitre 6 §2.1 p.121) comment nous avons affecté à chaque cellule de la carte une classe de « traitabilité » de la ressource. L'opérateur peut ainsi suivre en continu l'évolution de la qualité de la ressource en deux dimensions et donc ajuster le traitement en conséquence. Cette méthode de visualisation représente un des avantages de la carte de Kohonen par rapport à d'autres méthodes de classification non supervisées telle que la méthode des centres mobiles.

Nous allons maintenant décrire les résultats de l'utilisation de cette carte pour la validation de données et la reconstruction de données manquantes et invalides sur des exemples de simulation.

3.2 Application à la validation de données et à la reconstruction des données manquantes et invalides

Afin d'évaluer les performances de cette méthode pour la validation et la reconstruction de données manquantes, une étude de simulation a été réalisée. Différents défauts de capteurs ont été introduit artificiellement dans les données afin de déterminer l'instant de détection de ce défaut et les performances de la reconstruction. Deux scénarios ont été considérés:

- le cas d'un défaut simple sur un seul capteur,
- le cas de deux défauts consécutifs sur deux capteurs différents.

Dans le premier cas, la réaction du système sera décrite relativement à deux paramètres différents : le pH et l'oxygène dissous. Dans le deuxième cas, nous étudierons la réaction du système lors de l'introduction de deux défauts successifs sur ces mêmes paramètres.

3.2.1 Définition du seuil α

Tout d'abord, nous devons définir le seuil d'activation α à partir duquel un vecteur de paramètres est déclaré invalide. Pour cela, nous utilisons l'ensemble des 260 000 vecteurs de l'ensemble d'apprentissage. Nous calculons l'activation de la bmu pour chaque vecteur. En acceptant de rejeter 1% des données valides, on trouve un seuil α de : **0.92**. Donc, si l'activation $K_b(x) < 0.92$, le vecteur d'entrée x est déclaré invalide. Ensuite, la contribution de chaque composante est examinée séparément afin de déterminer les composantes du vecteur x qui se révèlent invalides.

3.2.2 Cas 1 : Simulation d'un défaut sur le pH

Dans ce premier exemple, le capteur de pH est dégradé en utilisant une rampe de pente 0.0002 upH / 5 minutes. Le défaut est introduit le 18 juin 1998 à 12h00 (Figure 5-9-a).

La détection du défaut apparaît lorsque le seuil d'activation de la bmu est inférieur à α . Le capteur de pH est déclaré invalide 117 pas de temps après l'apparition du défaut (9h45 plus tard) le 18 juin à 21h45 (Figure 5-9-b). Pour détecter le capteur qui est en défaut, on examine la distance à la bmu selon chaque composante (Figure 5-9-c). Le pH est alors « déconnecté » et nous calculons une nouvelle bmu pour effectuer la reconstruction. La reconstruction du pH est illustrée par la Figure 5-9-a.

3.2.3 Cas 2 : Simulation d'un défaut sur l'oxygène dissous

Dans ce deuxième exemple, le capteur d'oxygène dissous est dégradé en utilisant un biais de -0.5 mg/l le 18 juin 1998 à 12h00 (Figure 5-10-a).

Dans ce cas, la détection du défaut est immédiate (Figure 5-10-b). La Figure 5-10-c nous montre la distance à la bmu sur la composante de l'oxygène dissous. La reconstruction de l'oxygène dissous est montrée dans la Figure 5-10-c.

3.2.4 Cas 3 : Simulation de deux défauts consécutifs

Dans ce dernier exemple, la valeur du pH est absente à partir du 18 juin 1998 à 12h00. Ceci peut être dû à une maintenance du capteur ou à un défaut de transmission des données en provenance du capteur. Trois jours plus tard, le 21 juin 1998 à 12h00, le capteur d'oxygène dissous est dégradé en utilisant un biais de +2 mg/l. Nous n'avons pas de problème pour détecter le premier défaut car il s'agit d'une donnée manquante. La Figure 5-11-a nous montre la reconstruction du pH. Le défaut successif sur l'oxygène dissous est détecté immédiatement. La reconstruction de l'oxygène dissous est présentée dans la Figure 5-11-b. L'activation de la bmu est montrée dans la Figure 5-11-c.

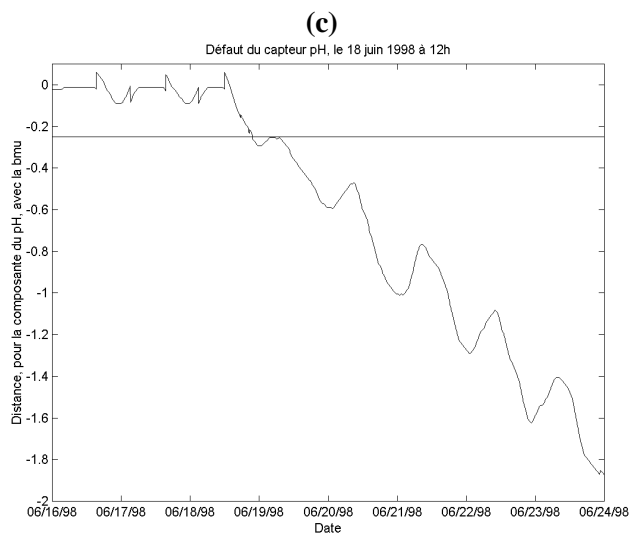
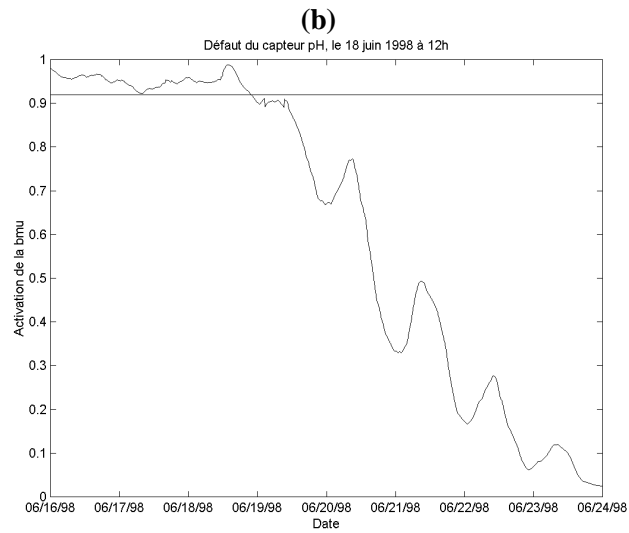
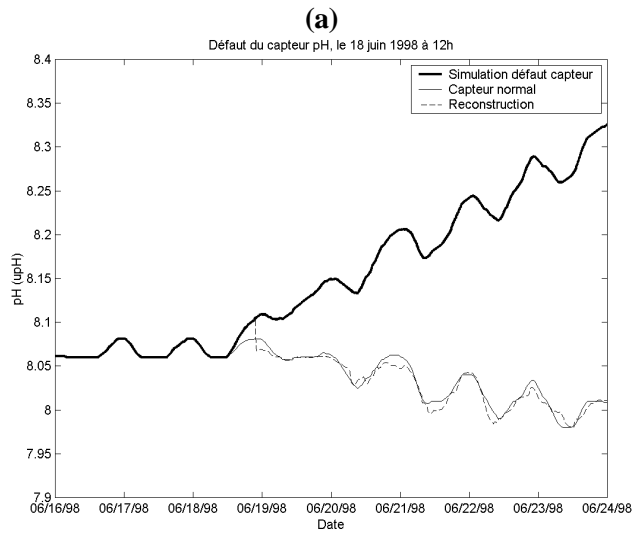


Figure 5-9 : Cas 1 : (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu ; (c) Distance à la bmu selon la composante du pH.

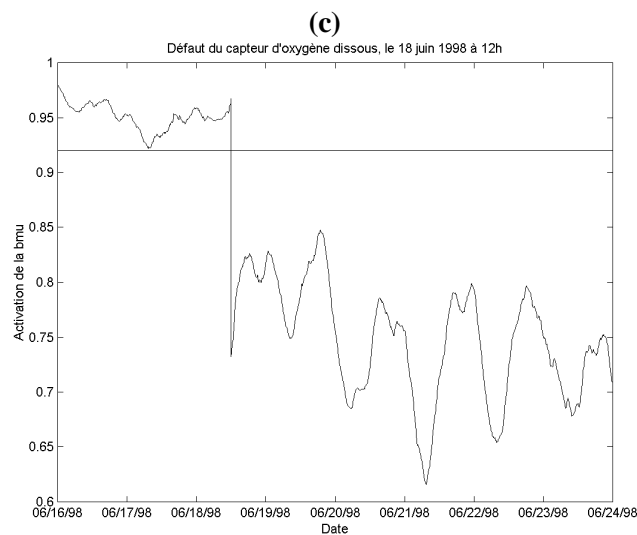
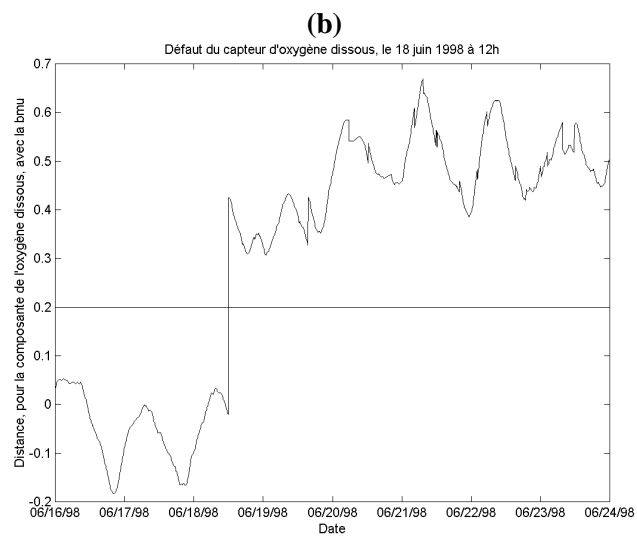
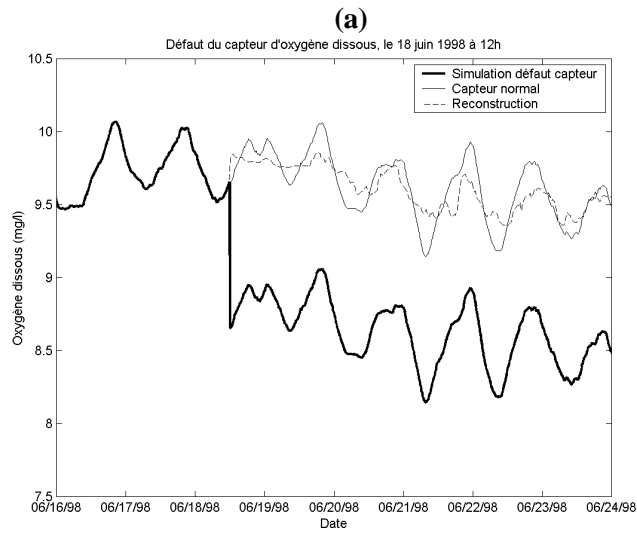


Figure 5-10 : Cas 2 : (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu ; (c) Distance à la bmu selon la composante de l'oxygène dissous.

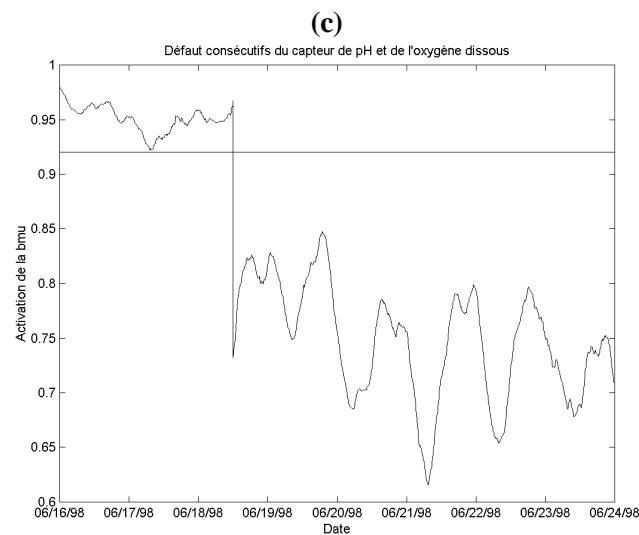
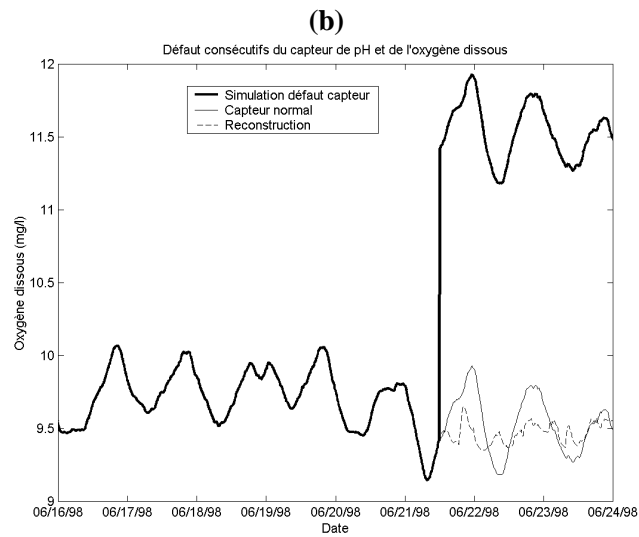
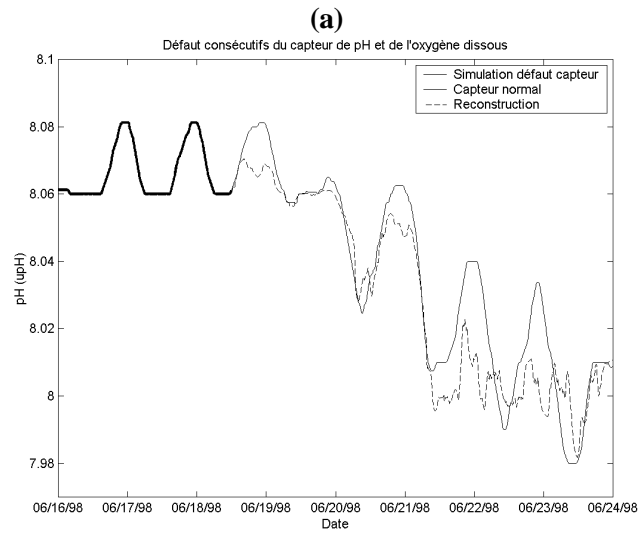


Figure 5-11 : Cas 3 : (a) Défaut capteur sur le pH. Détection et reconstruction ; (b) Défaut capteur oxygène dissous. Détection et reconstruction ; (c) Activation de la bmu.

3.2.5 Conclusion

Dans ce paragraphe, nous avons prouvé la faisabilité du module de pré-traitement des données. Nous avons montré sa capacité à reconstruire deux paramètres invalides ou manquants. Il est évident que la précision de la reconstruction est fortement liée au nombre de capteurs en défaut. Nous disposons de six paramètres différents en ligne, il est nécessaire d'avoir au moins 3 paramètres valides afin de reconstruire les composantes invalides. De plus, l'instant de détection du défaut est tout à fait acceptable pour notre application.

Nous allons maintenant décrire les résultats du module de prévision du taux de coagulant.

4. Modélisation du procédé de coagulation

4.1 Construction de la base d'apprentissage

Pour l'apprentissage du PMC, un ensemble de 3190 vecteurs complets de mesure a été construit en supprimant les données invalides et manquantes, et en moyennant les données sur une fenêtre mobile d'une heure (cf. Figure 5-12 et Figure 5-13). Un total de 2230 échantillons (environ 70 %) a été exploité pour définir le modèle, le reste (960 échantillons) étant utilisé comme ensemble de test indépendant. Parmi les données d'apprentissage, environ 30 % (670 échantillons) ont été utilisées comme ensemble de validation pour optimiser l'architecture par la procédure d'élagage définie dans le Chapitre 4 (§5.2 p. 84). On dispose donc d'un ensemble d'apprentissage de 1560 échantillons.

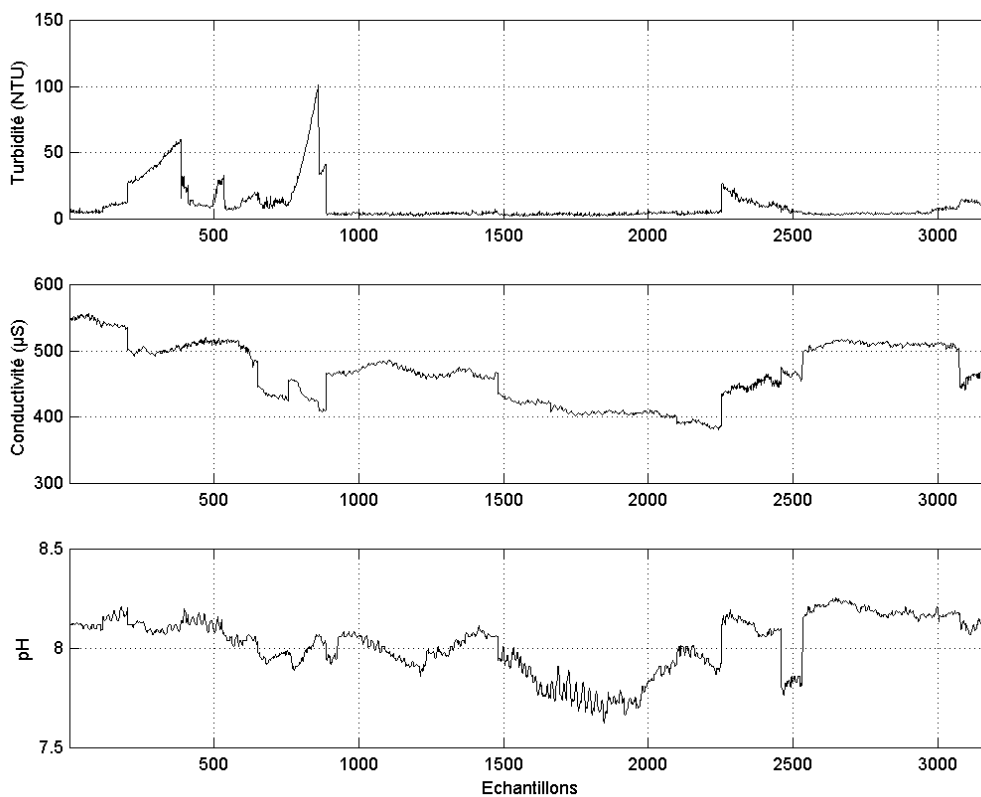


Figure 5-12 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : paramètres descripteurs de la qualité de l'eau (1).

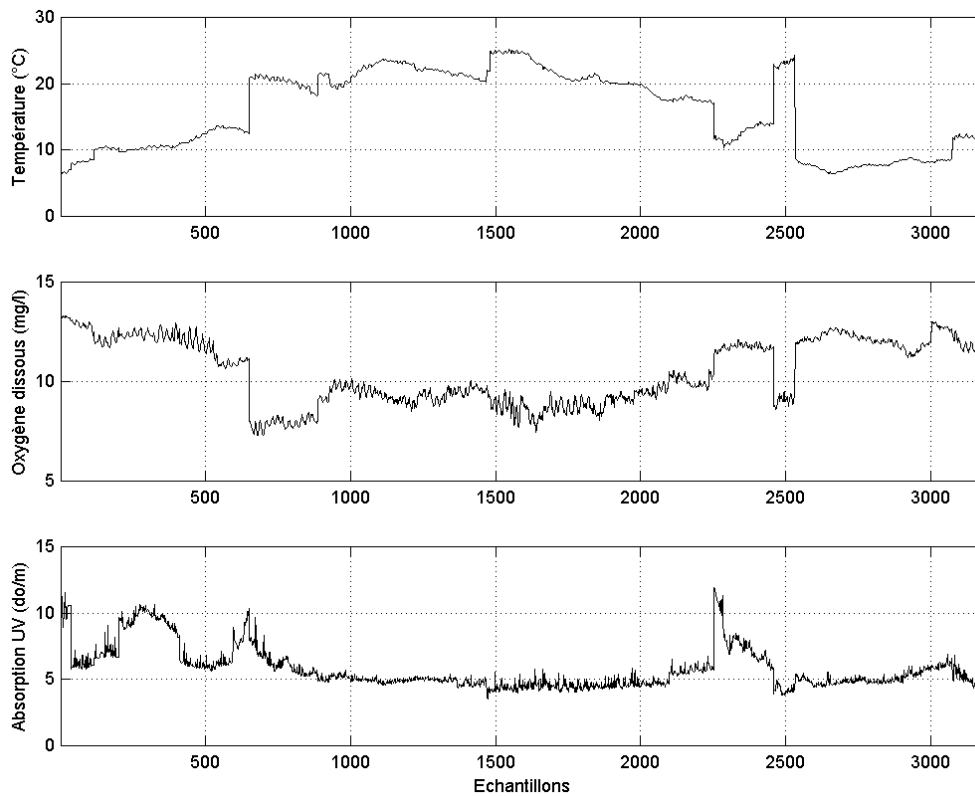


Figure 5-13 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : paramètres descripteurs de la qualité de l'eau (2).

La différence entre le nombre total d'échantillons et la taille de l'ensemble d'apprentissage s'explique par le fait que l'on veut modéliser uniquement la dose optimale de coagulant. Nous utilisons donc, pour chaque résultat d'essais jar-test la moyenne sur 4h des paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute. La Figure 5-14 représente la dose de coagulant optimale de l'ensemble d'apprentissage.

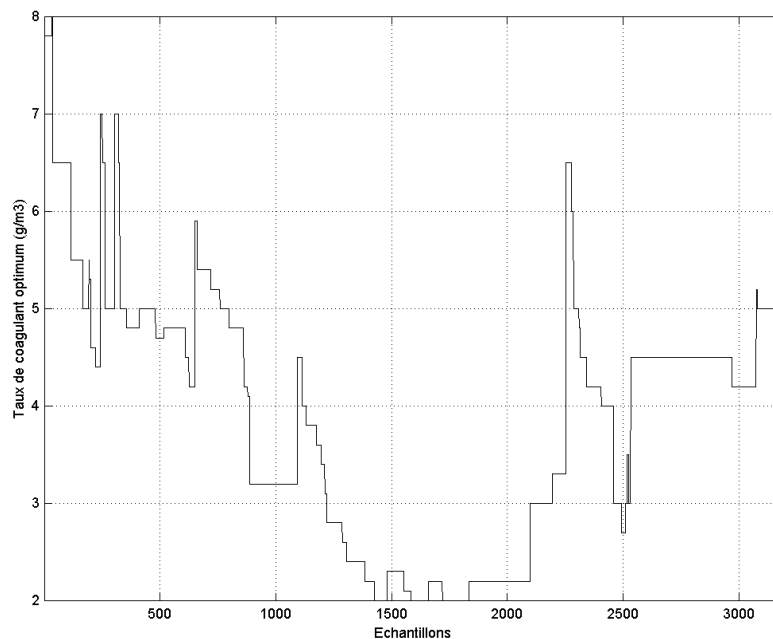


Figure 5-14 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : dose optimale de coagulant.

4.2 Apprentissage du modèle

Nous avons appliqué la méthode d'élagage décrite dans le Chapitre 4 §5.2 p.84 sur notre problème de prédiction du taux de coagulation en fonction des paramètres de qualité de l'eau brute. Nous utilisons initialement un PMC avec 20 neurones non-linéaires dans la couche cachée et une sortie linéaire. Il y a donc 161 connexions ou poids au début de l'apprentissage. Nous testons l'influence de chaque connexion sur la fonction coût. Dans nos simulations, nous éliminons un seul poids à la fois. La procédure d'élagage est arrêtée lorsque les performances sur l'ensemble de validation chutent. Cette méthode nous permet également de sélectionner l'architecture du réseau. En effet, si un neurone de la couche cachée n'a plus aucune connexion avec les entrées alors on peut le supprimer.

La Figure 5-15 nous montre l'erreur d'apprentissage après chaque élimination de poids, et l'erreur sur l'ensemble de validation. L'axe horizontal représente le nombre de connexions restantes et l'axe vertical l'erreur.

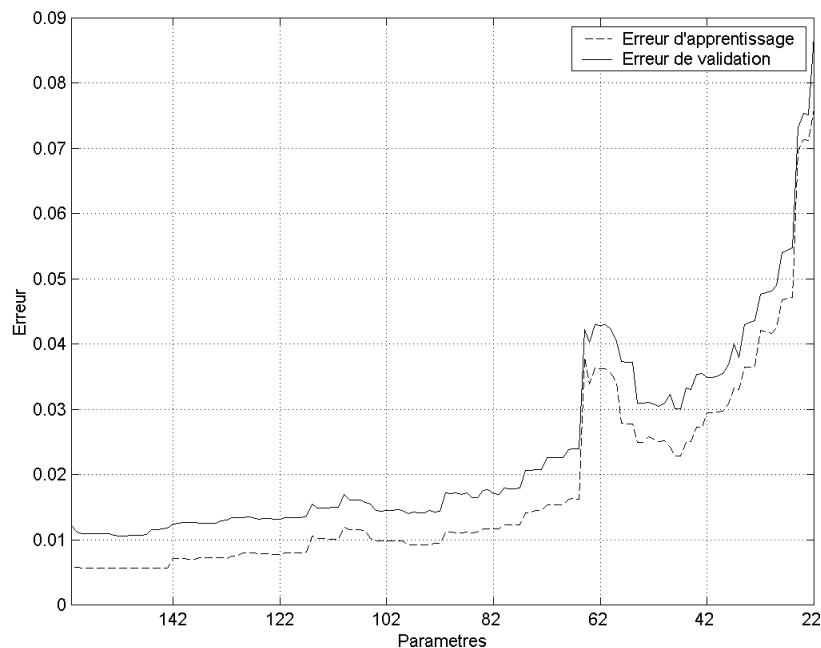


Figure 5-15 : Evolution de l'erreur d'apprentissage et de test

Nous stoppons la procédure d'élagage des poids lorsque les performances du modèle sur l'ensemble de validation commence à chuter (cf. Figure 5-15). Dans nos simulations, nous stoppons l'algorithme lorsqu'il nous reste 66 connexions (i.e. poids). La Figure 5-16 nous montre la structure du réseau à la fin de la procédure d'élagage des poids. On a un réseau de 16 neurones dans la couche cachée.

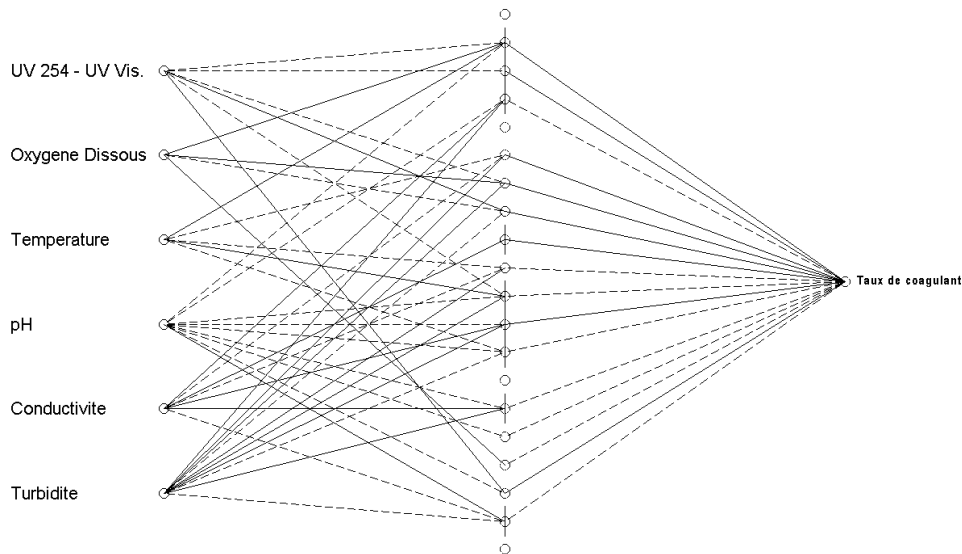


Figure 5-16 : Architecture du PMC après élagage des poids

Les résultats de prédiction ponctuelle obtenus sur l'ensemble de test indépendant sont illustrés sur la Figure 5-17.

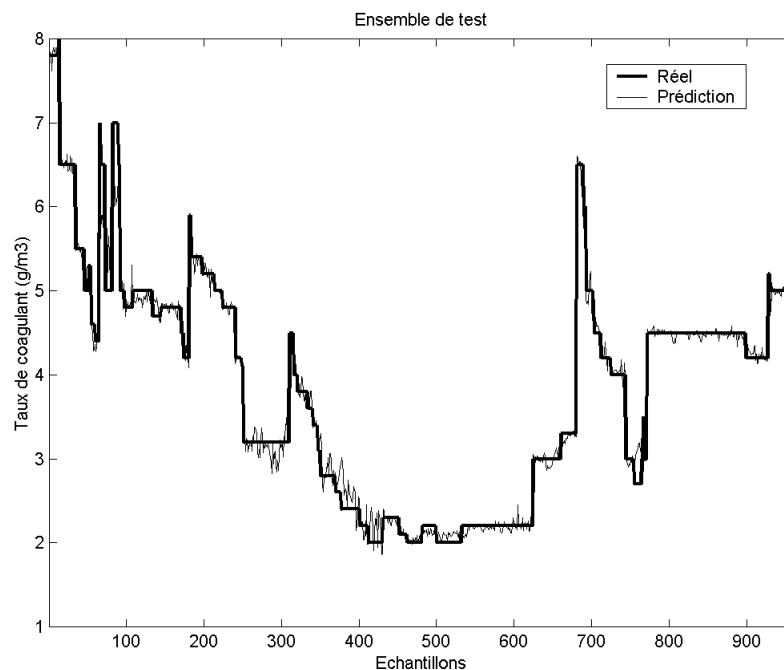


Figure 5-17 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type PMC sur l'ensemble de test.

Un modèle de régression linéaire a également été développé pour la comparaison avec le modèle de type PMC. La Figure 5-18 montre la sortie du modèle linéaire déterminé sur le même ensemble d'apprentissage que le PMC. La précision de la prédiction est clairement inférieure à celle du PMC ce qui confirme la forte non-linéarité du procédé.

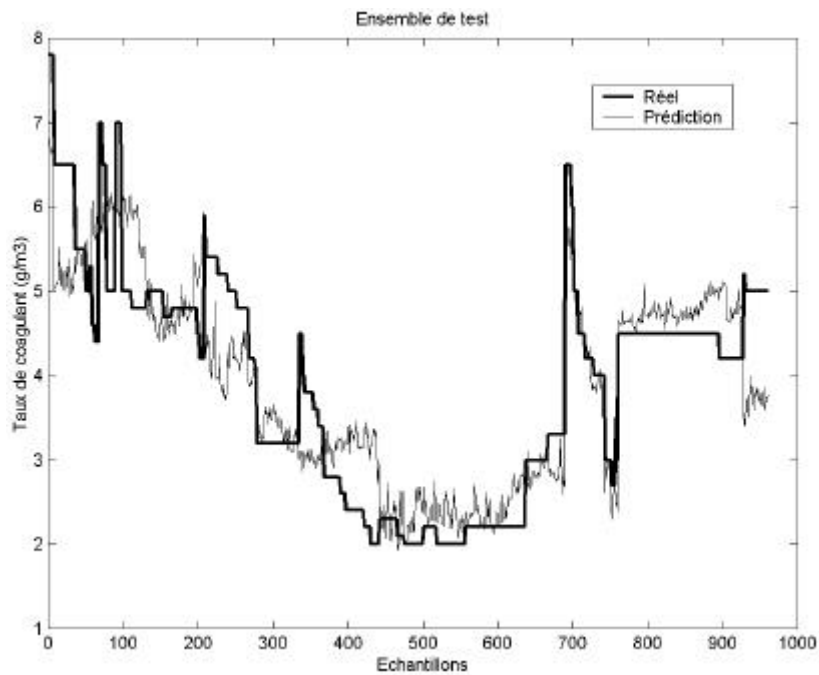


Figure 5-18 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type linéaire sur l'ensemble de test.

Les meilleurs résultats obtenus pour les deux modèles sont présentés dans le Tableau 5-4.

Tableau 5-4 : Résultats des modèles PMC et linéaire.

| | Modèle PMC | Régression linéaire |
|---|-------------------|----------------------------|
| R ² sur l'ensemble d'apprentissage | 0.985 | 0.84 |
| R ² sur l'ensemble de validation | 0.973 | |
| Erreur moyenne quadratique sur l'ensemble de test | 0.217 | 1.06 |
| Erreur moyenne absolue sur l'ensemble de test | 0.145 | 0.92 |
| Erreur absolue maximum sur l'ensemble de test | 1.58 | 2.33 |
| R ² sur l'ensemble de test | 0.974 | 0.692 |

4.3 Intervalle de confiance

Pour le traitement de l'incertitude de prédiction, nous utilisons une approche basée sur le ré-échantillonnage par bootstrap (cf. Chapitre 4 §6 p.86). Nous générons 50 ensembles de bootstrap à partir de l'ensemble d'apprentissage (1560 échantillons). 50 PMCs sont générés en utilisant la procédure d'apprentissage décrite précédemment en utilisant comme ensemble d'apprentissage chacun des 50 ensembles de bootstrap. Ensuite, pour chaque vecteur d'entrée on calcule la sortie ponctuelle prédite ainsi que les 50 sorties de chaque PMC. Ces différentes sorties nous donnent une estimation de l'incertitude liée à la prédiction que l'on peut exprimer sous forme d'intervalle. La Figure 5-19, nous montre les résultats de la prédiction ponctuelle et l'intervalle de confiance ainsi obtenus sur l'ensemble de test.

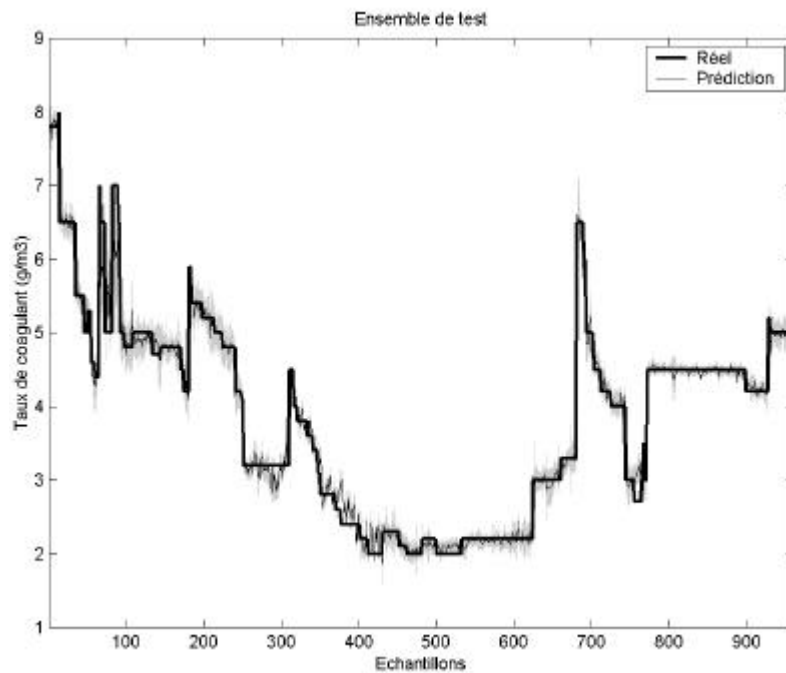


Figure 5-19 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type PMC sur l'ensemble de test et l'intervalle de prédiction (région grisée).

5. Application du capteur logiciel

Dans ce paragraphe, nous allons montrer la robustesse du système aux défauts de capteurs et l'intérêt de disposer d'une architecture à deux niveaux : pré-traitement des données et prédiction du taux de coagulant. Afin d'évaluer la robustesse du système, une simulation hors-ligne est effectuée en introduisant artificiellement des défauts dans les données d'entrée. La simulation est basée sur deux semaines de données réelles échantillonnées toutes les 5 minutes du 24 juin 1998 au 9 juillet 1998. L'oxygène dissous est dégradé avec une rampe de pente 0,005 mg/l par échantillon (toutes les 5 minutes). Le défaut se produit le 1^{er} juillet à 8 heures (cf. Figure 5-20).

En utilisant la carte de Kohonen, le défaut est détecté 45 échantillons (3 heures 45 minutes) plus tard le 1^{er} juillet à 11h45 (cf. Figure 5-20-b), et la variable oxygène dissous a été correctement identifiée en tant que paramètre défectueux. La Figure 5-20-a montre la reconstruction de l'oxygène dissous en utilisant l'approche par carte de Kohonen.

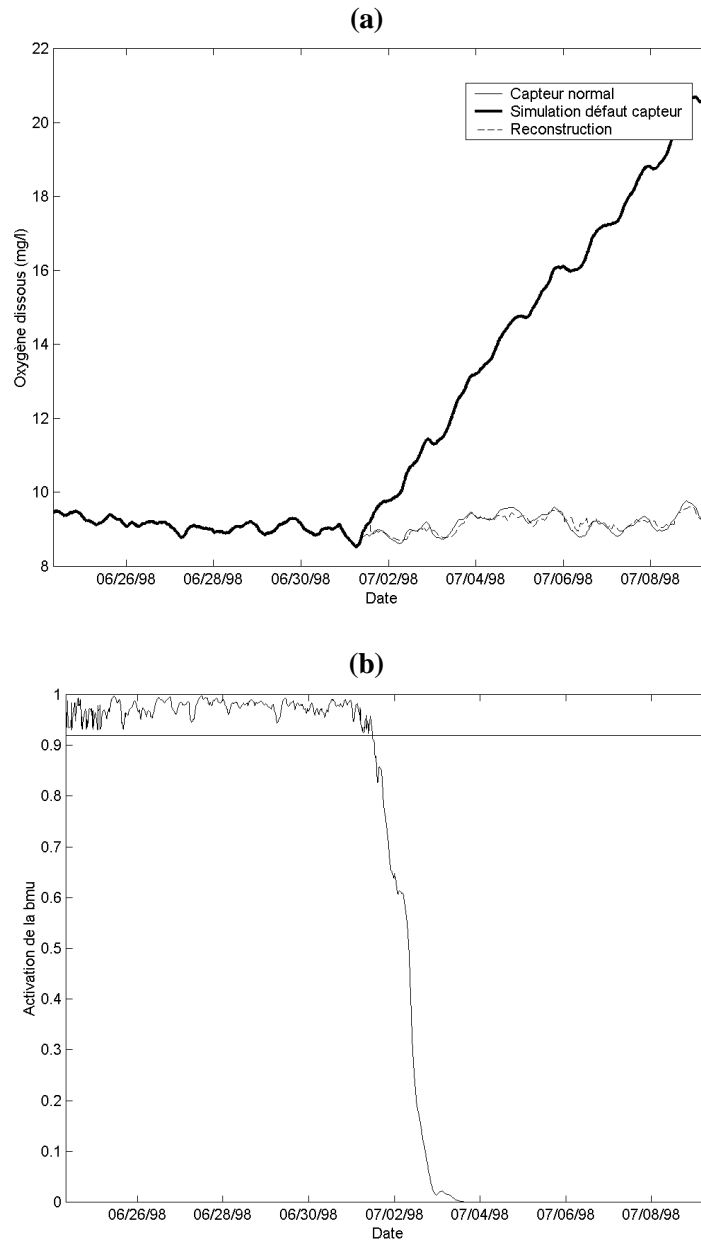


Figure 5-20 : Simulation d'un défaut capteur sur l'oxygène dissous. (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmU

La prédiction de la dose optimale de coagulant et l'intervalle de confiance sont illustrés sur la Figure 5-21-a en utilisant les données prétraitées en entrée du RNA. La Figure 5-21-b montre le résultat de la prédiction en utilisant des données brutes sans pré-traitement. Ces résultats démontrent clairement la robustesse du système et l'intérêt de disposer d'un module de pré-traitement des données.

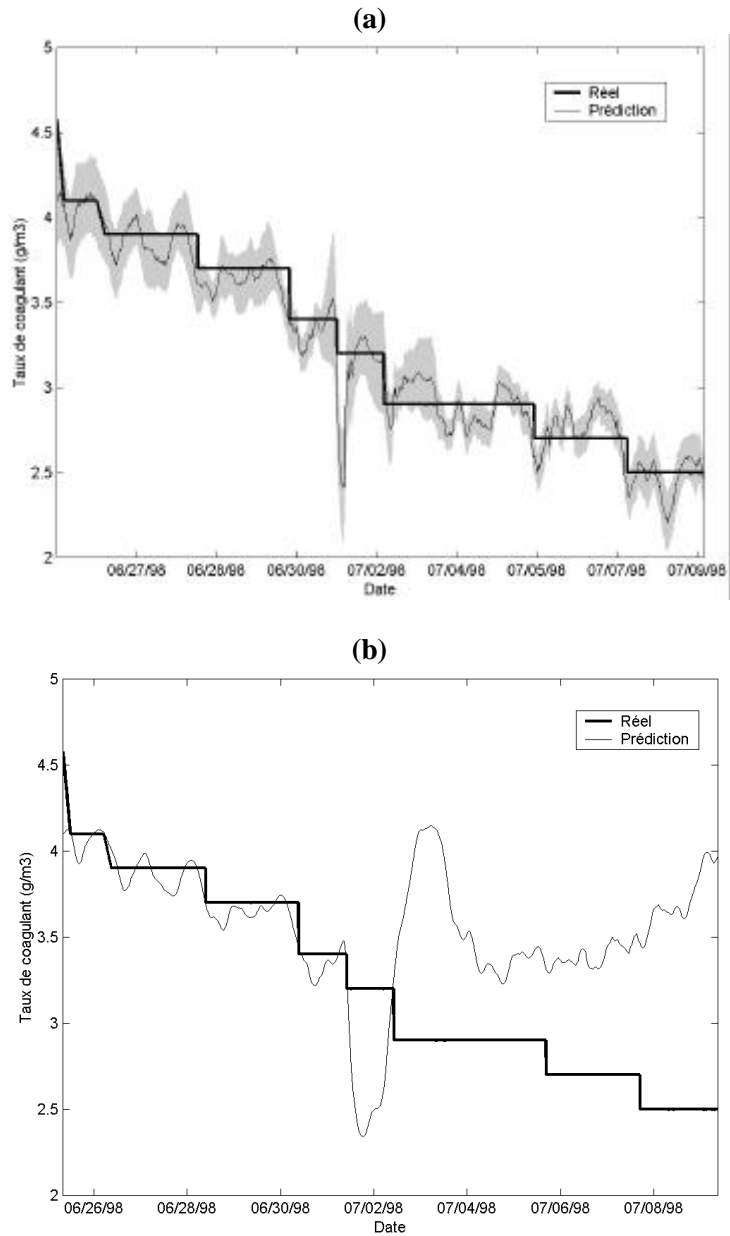


Figure 5-21 : (a) Prédiction de la dose de coagulant en utilisant les données pré-traitées ; (b) Prédiction de la dose de coagulant sans le module de pré-traitement.

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats des différents modules du système. Ces exemples nous ont montré l'efficacité avec laquelle il est possible de valider, de reconstruire les données et de prédire le taux optimal de coagulant. Nous avons montré que les données du procédé peuvent être employées pour construire par apprentissage un capteur logiciel sous la forme d'un RNA qui permet de prévoir précisément la dose de coagulant en fonction des caractéristiques physico-chimiques de l'eau brute. Les résultats expérimentaux utilisant des données réelles ont montré l'efficacité et la robustesse de cette approche. Les performances du système dépendent de la qualité et du nombre de données disponibles pour l'apprentissage du modèle.

Il faut cependant noter, que la confirmation définitive de l'intérêt de cette approche ne pourra être obtenue qu'au terme d'une validation du système sur site, dans un contexte opérationnel sur une période suffisamment longue. Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les résultats de l'implémentation sur le site.

Présentation des résultats

Bibliographie

1. Valentin N., Denoeux T., Fotoohi F., An Hybrid Neural Network Based System for Optimization of Coagulant Dosing in a Water Treatment Plant, In *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks*, Washington, DC 10-16 Juillet, 1999.
2. Valentin N., Denoeux T., Fotoohi F., Modelling of coagulant dosage in a water treatment plant, In *Proceedings of European Artificial Neural Networks Conference*, Varsovie, Septembre, 1999.
3. Valentin N., Denoeux T. Prediction of Optimum Coagulant Dosage in a Water Treatment Plant Using Neural Networks, In *Proceedings of Water Quality Technology Conference*, 31 Octobre - 3 Novembre, Tampa, Floride, 1999.
4. Valentin N., Denoeux T. Modélisation du procédé de coagulation en traitement d'eau potable à l'aide des réseaux de neurones artificiels, *Journées d'Information sur l'Eau (JIE 2000)*, Septembre, Poitiers, France, 2000.

Chapitre 6 Présentation de l'implémentation sur site

Nous avons montré dans le chapitre précédent la mise en œuvre de ce système sur des données réelles. Ce chapitre s'intéresse maintenant à l'intégration de ce capteur logiciel à l'outil de supervision de l'usine. Nous décrirons les différentes parties du système et ce qu'il apporte aux utilisateurs. Nous montrerons l'intérêt visuel des cartes de Kohonen ainsi que les résultats de l'intégration du système de prédiction du taux de coagulation.

1. Description générale

L'implémentation de ce système a été réalisée sur l'usine de Viry-Chatillon. Nous avons utilisé la plate-forme logicielle EM2S développée par le CIRSEE dans le cadre d'un projet Européen. L'architecture modulaire de cette plate-forme a l'avantage de nous permettre d'intégrer rapidement sur site l'ensemble des méthodes développées dans ce mémoire. Cette application est maintenant en fonctionnement depuis le mois de septembre 1998.

Ce logiciel a pour missions principales :

- l'acquisition et la validation des données de procédé,
- la génération d'indicateurs synthétiques,
- la surveillance intelligente des procédés,
- l'édition de rapports et de bilans.

Il recueille automatiquement les données et signaux provenant des différents procédés de l'usine, contrôle la véracité des informations et offre des outils de validation et de correction des données, et calcule des indicateurs, des données synthétiques et des grandeurs non directement mesurées. Les données recueillies sont conservées dans une base spécifique qui permet l'analyse des données ultérieures. Il permet, également, le calcul et l'édition automatique des rapports et bilans journaliers, mensuels, annuels ou autres. Cette édition de rapports se fait à l'aide d'Excel. En effet, les exploitants doivent produire de plus en plus de bilans mensuels, hebdomadaires et journaliers. Mais les données proviennent de capteurs physiques qui mesurent en continu différents paramètres, il faut donc pouvoir établir les bilans sur des données validées pour ne pas fausser le bilan. Enfin, le système offre des interfaces de consultation et d'exploitation des données.

La validation de données est un concept important dans le logiciel ; ainsi, à chaque capteur peut être associée une méthode de validation de données. Cette méthode attribue, à chaque valeur brute, un indice de validité, appelé plus communément indice de confiance. Cet indice est compris entre 0 et 1 : plus l'indice est élevé, meilleure est la confiance ; son calcul repose sur les méthodes décrites dans le Chapitre 3.

Un autre concept important est la reconstruction de données, qui offre la possibilité de substituer une nouvelle valeur à une donnée brute déclarée invalide. Il n'existe pas de méthode de reconstruction générique car le problème est souvent complexe du fait de la diversité des capteurs et des différents types d'eaux rencontrés. Par conséquent, il est souvent nécessaire de réaliser une étude pour chaque capteur. Ces méthodes sont décrites dans le Chapitre 3.

Pour un capteur donné, la validation et la reconstruction de données s'appliquent de la façon suivante :

- si une méthode de validation a été implémentée et configurée, alors, toutes les valeurs brutes possédant un indice de confiance global inférieur à un seuil de validité donné seront déclarées invalides.
- si une méthode de reconstruction de données a été implémentée et configurée, alors, toutes les valeurs déclarées invalides seront remplacées par des données reconstruites.

L'application se décompose en trois parties : *Seine*, *Usine de Viry* et *Topkapi* (cf. Figure 6-1). La partie *Seine* regroupe l'ensemble des paramètres relatifs à la station d'alerte d'Evry. La partie *Usine de Viry* regroupe les paramètres relatifs au fonctionnement de l'usine. Enfin, la dernière partie *Topkapi* regroupe l'ensemble des paramètres relatifs à la supervision. Cette partie permet de se connecter au système de supervision de l'usine. Dans ce mémoire, nous nous sommes attachés uniquement aux deux premières parties.

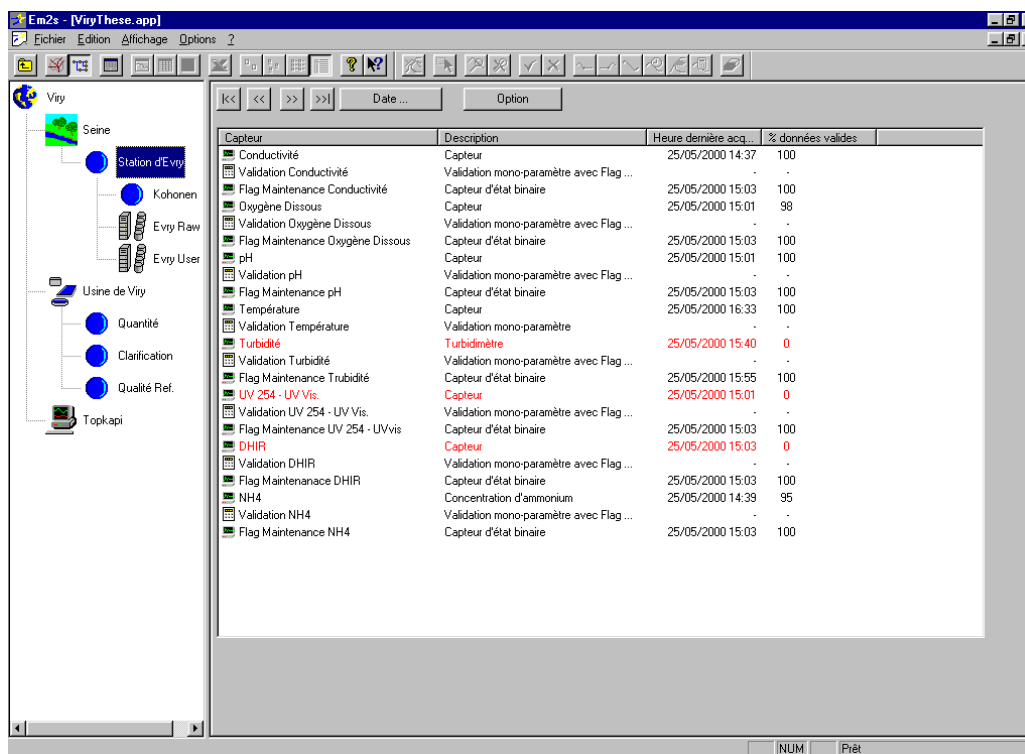


Figure 6-1 : Vue générale de l'application.

2. Seine

Dans cette partie de l'application, on peut visualiser le résultat de la carte de Kohonen ainsi que l'ensemble des paramètres relatifs à la qualité de la Seine mesurés sur la station d'alerte d'Evry en amont de l'usine.

2.1 La carte de Kohonen

On peut visualiser le résultat de la carte Kohonen directement dans l'application (cf. Figure 6-2). Cette interface permet aux utilisateurs de mieux exploiter les données des stations d'alerte. Elle permet à l'opérateur de visualiser en deux dimensions l'évolution de la qualité de l'eau brute après étiquetage des différents prototypes de la carte de Kohonen. Chaque cellule de la carte représente un état de la ressource. Un prototype peut être interprété en terme de « traitabilité » de la ressource. Cette interprétation donne à chaque cellule une couleur correspondant à la qualité de l'eau qu'elle représente. Nous avons défini 4 grandes classes de qualité de la ressource qui correspondent aux différences de « traitabilité » de celle-ci. Ces quatre catégories sont représentées par des couleurs : bleu pour une « traitabilité » facile, vert pour une moyenne, jaune pour une difficile et rouge pour une très difficile.

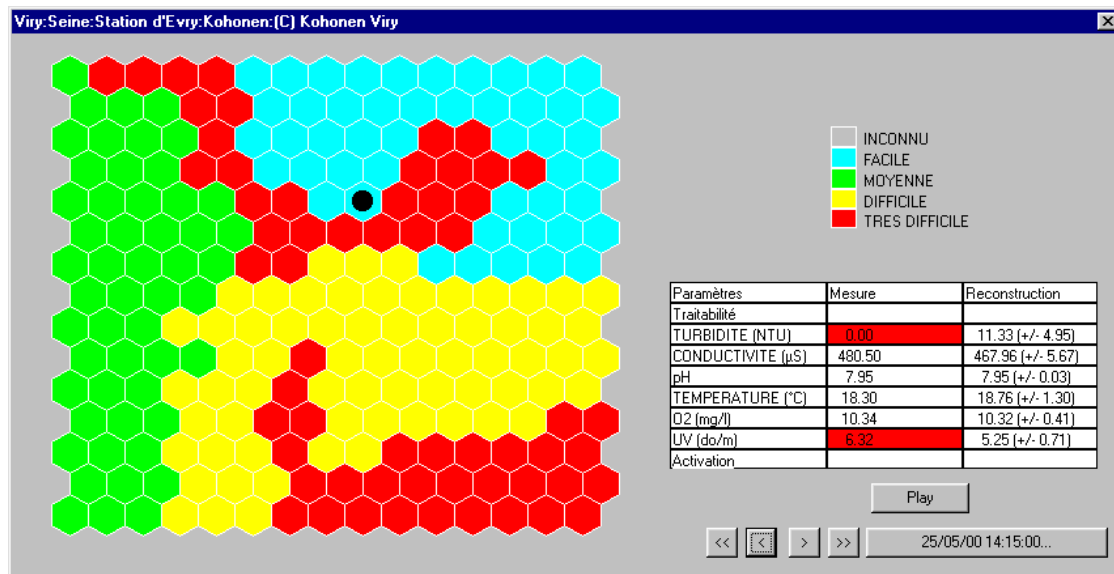


Figure 6-2 : Affichage de la carte de Kohonen.

Dans la Figure 6-2, la carte de Kohonen utilisée pour visualiser la qualité de la ressource est affichée à gauche. La cellule représentée par un rond noire est la bmu, c'est-à-dire la cellule la plus proche des valeurs des paramètres mesurés à l'instant t (ici, $t = 25/05/00$ à 14:15:00). Les valeurs des paramètres sont affichées dans le tableau de droite. La première colonne donne les noms des paramètres, la seconde les valeurs de mesures correspondantes et la troisième les valeurs reconstruites. Dans la deuxième colonne, les cases en rouge représentent les données invalides ; elles sont alors remplacées par leurs valeurs reconstruites.

En fait, on attribue à chaque paramètre de chaque prototype une couleur correspondant à sa valeur : les couleurs varient de noir à blanche pour les valeurs allant de la plus petite à la plus grande. En cliquant sur le nom d'un paramètre dans le tableau de droite, les cellules de la carte de Kohonen sont coloriées selon les valeurs des prototypes du paramètre choisi. On voit ainsi comment les prototypes sont organisés dans cette carte.

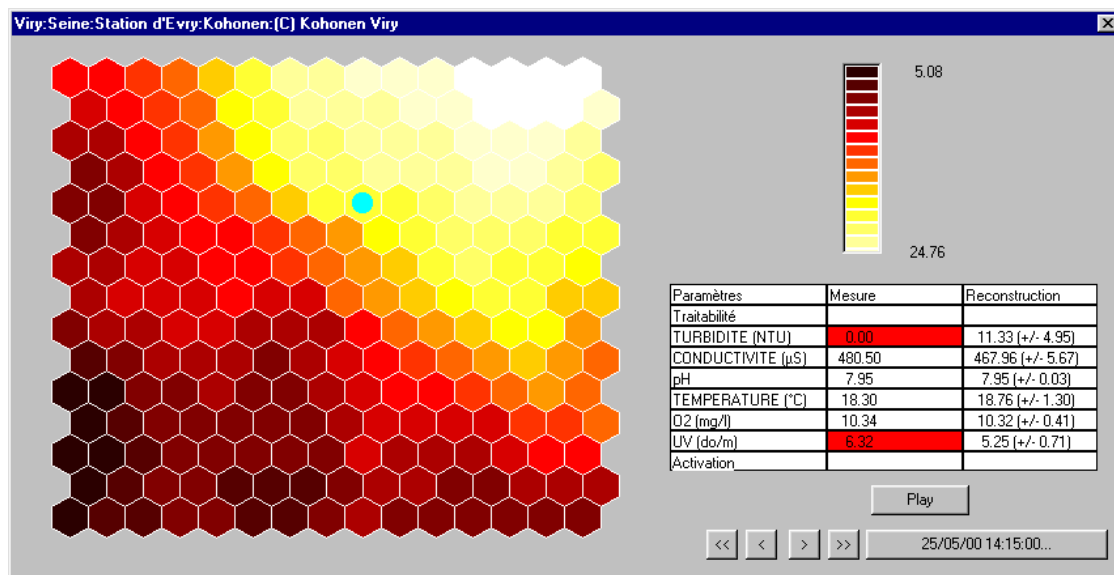


Figure 6-3 : Les valeurs du paramètre température des prototypes de la carte de Kohonen.

Par exemple, dans la Figure 6-3 on peut voir sur la carte de Kohonen, que les cellules en haut à droite correspondent à des valeurs élevées de la température, et que la valeur actuelle de la température (cellule rappelée par une marque bleue) est plutôt élevée.

2.2 La station d'alerte d'Evry

L'opérateur peut visualiser l'ensemble des paramètres relatifs à la qualité de l'eau brute ainsi que la validité de la mesure. A chaque paramètre est associé un « Flag de maintenance » qui permet de savoir si le capteur est opérationnel ou non. Cet indicateur est mis à un par l'opérateur quand le capteur est en maintenance : étalonnage, nettoyage, Il nous permet d'invalider les données lorsque le capteur n'est pas opérationnel.

Un exemple de validation et de reconstruction de données est montré sur la Figure 6-4 pour le cas de l'oxygène dissous. Dans la fenêtre supérieure, on peut visualiser la courbe brute du capteur (en vert ; les parties rouges représentent la plage de données invalides). La courbe jaune représente les données reconstruites à l'aide de l'algorithme SOM. Le graphique inférieur représente l'indice de confiance des données.

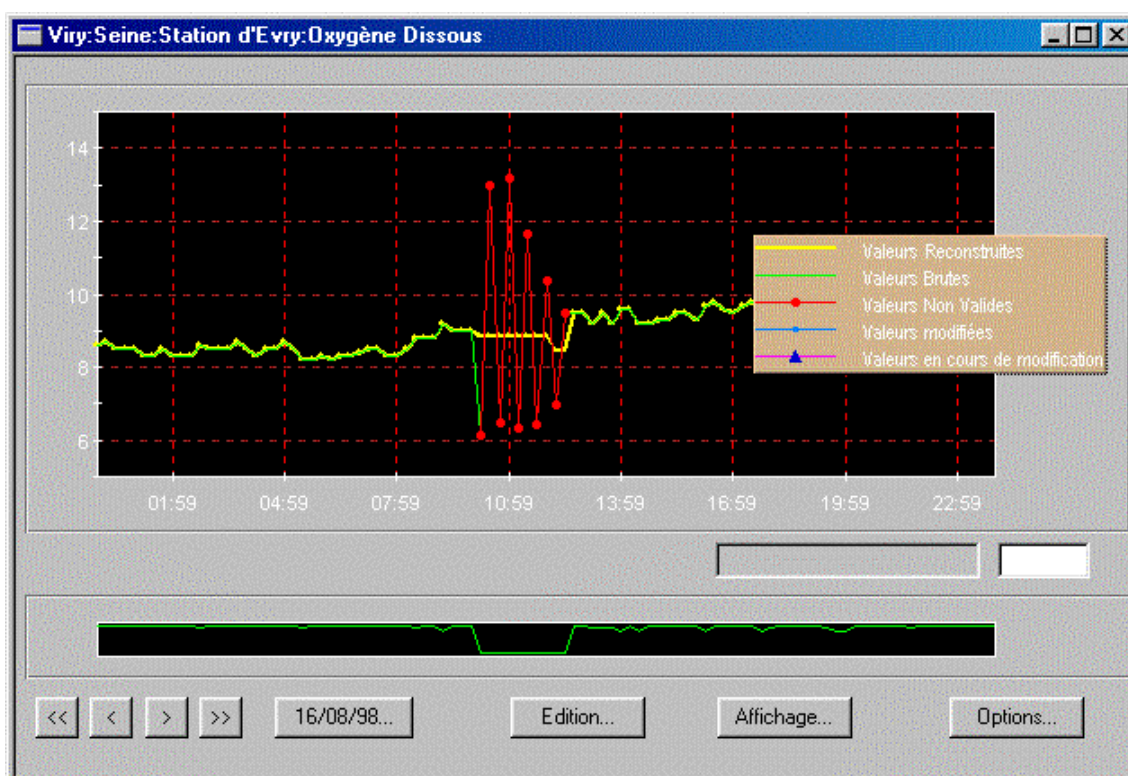


Figure 6-4 : Validation de l'oxygène dissous.

On peut également générer un bilan qui regroupe l'ensemble des paramètres de la station d'alerte d'Evry. Ce bilan est effectué sur des données validées. On génère pour chaque paramètre la moyenne, le minimum et le maximum journalier dans un fichier trame Excel prédéfini (cf Figure 6-5). L'intérêt de ce bilan est qu'il est effectué sur des données validées, ce qui nous permet de ne prendre en compte les mesures aberrantes ou invalides. L'objectif est de faciliter la tâche des opérateurs et de permettre l'édition des bilans d'exploitation automatiquement. Cependant, l'opérateur reste toujours maître de la validité des données. Il peut à tout moment décider de valider des données invalidées automatiquement et inversement invalider une plage de données qui ne l'a pas été.

The screenshot shows an Excel spreadsheet titled "Bilan Evry" with the following structure:

- Row 1:** Title "Bilan Evry"
- Row 2:** Date range "Du 01/06/99 00:00 Au 30/06/99 23:59"
- Row 3:** Blank header row
- Row 4:** Blank header row
- Row 5:** Main parameter categories: Conductivité, Oxygène Dissous, pH, Température, Turbidité, UV 254 - UV Vis., DHI
- Row 6:** Sub-headers for each category: Date, Min, Moy, Max, Min, Moy, Max, Min, Moy, Max, Min, Moy, Max, Min, Moy, Max, Min, Moy, Max, Min, Moy
- Rows 7-35:** Daily data entries for each parameter.

Figure 6-5 : Rapport de la station d’alerte d’Evry basé sur un modèle de présentation prédéfini.

3. Usine de Viry

Pour le moment, on peut distinguer trois parties : *Quantité*, *Clarification* et *Qualité Refoulement* (cf. Figure 6-1). La partie *Quantité* regroupe l’ensemble des paramètres relatifs aux volumes d’eau produits sur l’usine et permet d’éditer des bilans de production automatiquement. Dans la suite de ce paragraphe, nous ne détaillerons que les parties *Clarification* et *Qualité Refoulement*.

3.1 Clarification

C’est dans cette partie que l’on a intégré le modèle de prédiction du taux de coagulant en fonction des paramètres descripteur de la qualité de l’eau brute. Grâce à l’architecture modulaire du logiciel, l’ajout d’un module de calcul supplémentaire est rapide. On peut visualiser le taux de coagulant réel (courbe en vert) injecté par l’opérateur sur l’usine et la prédiction (courbe en gris) effectuée par le modèle (cf. Figure 6-6). Ceci nous permet de comparer en ligne la prédiction effectuée par le modèle et la dose appliquée par l’opérateur. Ce système est en validation sur l’usine depuis plus d’un an. Cet outil s’avère déjà très utile en tant qu’outil d’aide à la décision pour l’opérateur et de diagnostic du procédé de coagulation. L’opérateur peut identifier toute dérive anormale entre la dose injectée et prédite et réajuster le traitement en conséquence.

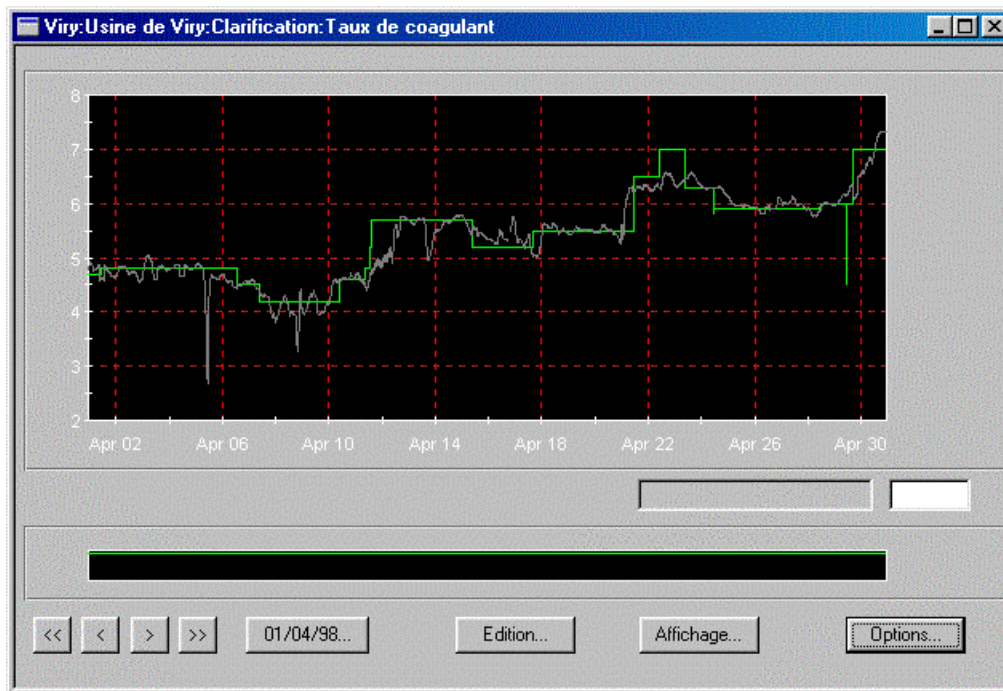


Figure 6-6 : Prédiction du taux de coagulant.

3.2 Qualité Refoulement

Cette partie regroupe l'ensemble des paramètres relatifs à la qualité de l'eau traitée en sortie de l'usine (cf. Figure 6-7). Comme pour la station d'alerte d'Evry, les paramètres sont validés par les méthodes de validation et un « Flag de maintenance ». L'opérateur peut également générer des rapports d'assurance qualité afin de valider la conformité de l'eau traitée.

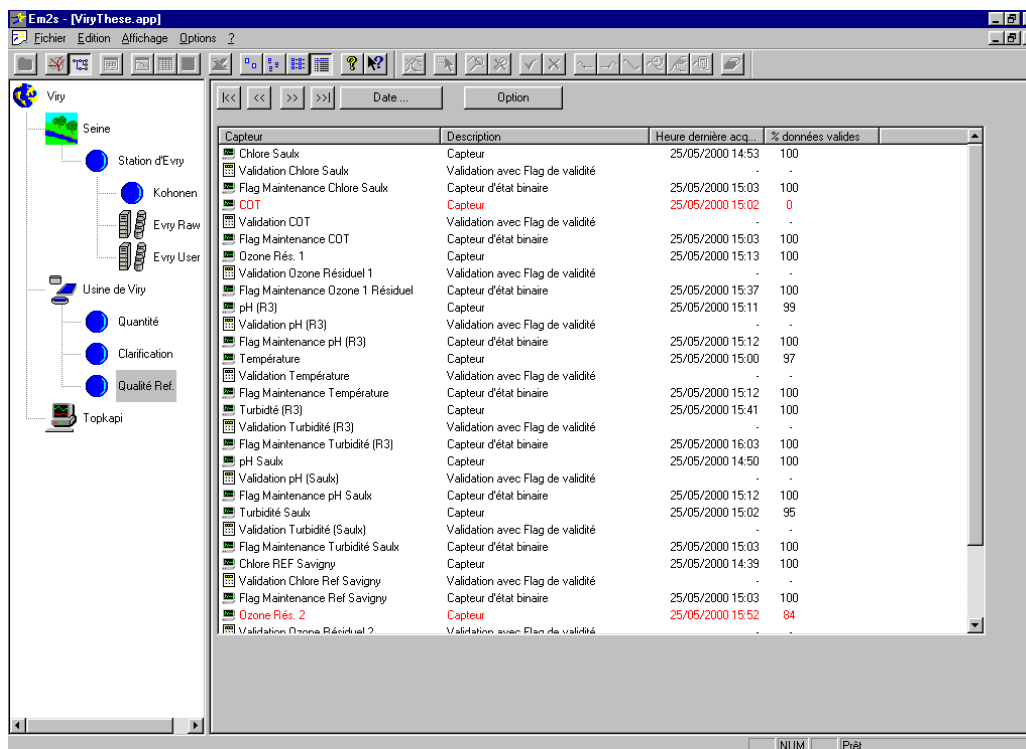


Figure 6-7 : Paramètres de qualité de l'eau traitée.

4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit le logiciel intégré sur l'usine de Viry-Chatillon. Les premiers résultats sont très encourageant quand à l'utilité de ce système. En effet l'opérateur dispose en temps réel d'une information sur les taux optimal de coagulant prédit par le modèle. Il n'est donc plus obligé de refaire un essai jar-test qui peut s'avérer long et coûteux.

Conclusions et perspectives

Nous avons tenté dans ce mémoire de montrer l'intérêt et l'apport des méthodes connexionnistes dans la réalisation d'un capteur logiciel de contrôle automatique du procédé de coagulation. L'enjeu est ici important, à l'heure où l'Homme s'interroge sur la qualité de son environnement et donc, bien évidemment, de son eau. Les normes de qualité de l'eau sont de plus en plus drastiques. Cette attente, légitime, du consommateur vis à vis des systèmes de distribution engage les industriels de ce secteur dans de nouveaux efforts de recherche en vue d'assurer les performances de leurs installations. L'objectif est, ici, d'optimiser et de fiabiliser un des procédés d'une usine de production d'eau potable afin de garantir à tout moment une qualité optimale de l'eau de consommation, et ce, si possible à un coût moindre pour l'exploitant.

Nous avons développé une méthodologie permettant la construction d'un modèle capable de prédire en temps réel la dose optimale de coagulant à partir d'un ensemble de paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute (turbidité, pH, conductivité...). Pour ce faire, nous avons utilisé l'avancée technologique des RNAs pour développer un système de contrôle intégré du procédé de coagulation basé sur des RNA supervisés et non-supervisés. L'avantage du système proposé, par rapport aux autres systèmes existants, est sa robustesse. En effet, l'architecture modulaire que nous avons définie permet de prendre en compte les différents types d'incertitudes : l'incertitude des données (données manquantes ou invalides) et l'incertitude attachée à la relation entre les paramètres de l'eau brute et le taux de coagulant. L'utilisation d'une méthodologie rigoureuse facilement reproductible nous permet d'envisager l'installation du système à faible coût sur plusieurs sites.

Nous avons montré, dans ce mémoire, que les données du procédé peuvent être employées pour construire par apprentissage un « capteur logiciel » sous la forme d'un RNA qui permet de prévoir précisément la dose de coagulant en fonction des caractéristiques physico-chimiques de l'eau brute. Les résultats expérimentaux utilisant des données réelles ont montré l'efficacité et la robustesse de cette approche. La validation sur site est en cours afin de finaliser le système avant son déploiement à grande échelle sur d'autres exploitations de Lyonnaise des Eaux. Depuis plus d'un an, la dose de coagulant réellement injectée est comparée aux résultats du modèle. Il est ainsi possible d'identifier toute dérive de la qualité de la ressource et de réagir plus rapidement. Le système se révèle déjà très utile comme outil d'aide à la décision pour les opérateurs. En particulier, cet outil est utilisé comme simulateur d'essais de jar-test par l'opérateur d'astreinte.

Compte tenu des résultats satisfaisants obtenus, cet outil pourrait, à terme, être utilisé pour piloter l'injection du coagulant sur une usine et ainsi se substituer aux capteurs en continu de type SCD (cf. Chapitre 2 §3.2.1 p.30). Ce qui permettra aux exploitants de réaliser des économies substantielles sur les coûts d'exploitation (notamment sur les coûts de main d'œuvre et de réactifs). Une comparaison de ces deux approches reste cependant à effectuer afin de valider pleinement notre système. Pour le moment, le système est en cours d'installation sur deux grosses usines (production de 2.10^6 m³ / jour) de traitement d'eau potable de la ville de Buenos Aires en Argentine. Face à de tels débits, une optimisation du taux de coagulant se traduit par une diminution des coûts de production non négligeable. La phase d'étude est terminée, il reste maintenant à intégrer l'outil dans le système de supervision de l'usine. Une autre application est prévue l'année prochaine sur l'usine de Morsang sur Seine dans la région Parisienne. Ces différentes applications permettent de valider le modèle sur différents types de ressources et donc sur des qualités d'eau différentes. Par exemple, en Argentine une turbidité de 400 NTU n'est pas à exclure alors qu'une turbidité de 200 NTU sur la Seine est assez exceptionnelle.

Les performances du système dépendent de la qualité et du nombre de données disponibles pour l'apprentissage du modèle. Une mise à jour en continu et partiellement automatisée de l'ensemble d'apprentissage permettrait d'améliorer la précision du système. De nouveaux développements sont également envisagés afin d'améliorer les performances du système. Nous envisageons, en particulier, d'intégrer des aspects déterministes dans le modèle de type « boîte noire ». Il est également prévu de développer un modèle prenant en compte la dynamique du procédé, et permettant de prévoir les paramètres de l'eau traitée (principalement, la turbidité) à la sortie du procédé de clarification. Pour le moment, nous n'utilisons que les paramètres descripteurs de la qualité de l'eau brute pour prédire le taux de coagulant. Il est envisagé d'utiliser la même méthodologie en boucle fermée avec une action corrective en fonction de certains paramètres de qualité de l'eau en sortie du procédé de coagulation.

L'architecture que nous avons progressivement mise au point n'est pas une architecture figée. Elle offre de nombreuses perspectives dans le domaine de la modélisation des procédés industriels. Il est également prévu d'appliquer cette approche à la modélisation d'autres procédés de traitement tels que la filtration et la chloration.

Annexe A

A neural network-based software sensor for coagulation control in a Water Treatment Plant

Nicolas Valentin^(1,2), Thierry Denoeux⁽²⁾

(1) CIRSEE - Suez Lyonnaise des Eaux
Technopolis, ZAC de Mercières
14, rue du Fonds Pernant
F-60471 Compiègne, France
Email: Nicolas.Valentin@lyonnaise-des-eaux.fr

(2) Université de Technologie de Compiègne
UMR CNRS 6599 Heudiasyc
BP 20529, F-60205 Compiègne, France

A paraître dans Intelligent Data Analysis, 2000.

Abstract

This paper reports on the application of Artificial Neural Network techniques to coagulation control in drinking water treatment plants. The coagulation process involves many complex physical and chemical phenomena which are difficult to model using traditional methods. The amount of coagulant ensuring optimal treatment efficiency has been shown experimentally to be non-linearly correlated to raw water characteristics such as turbidity, conductivity, pH, temperature, etc. The software sensor developed is a hybrid system including a self-organising map (SOM) for sensor data validation and missing data reconstruction, and a multi-layer perceptron (MLP) for modelling the coagulation process. A key feature of the system is its ability to take into account various sources of uncertainty, such as atypical input data, measurement errors and limited information content of the training set. Experimental results with real data are presented.

Keywords: Data validation, Missing data reconstruction, Outlier rejection, Self-organising maps, Multi-layer perceptrons, Hybrid system, Coagulation control, Water treatment.

1. Introduction

In water treatment, as in many other domains, process monitoring and control relies heavily on accurate and reliable sensor information. Whereas many process parameters can be measured continuously using relatively simple and cheap physical sensors, the determination of certain quantities of interest requires costly laboratory analyses which cannot be performed on-line. Such high level information may, however, sometimes be inferred from available measurements

of observable quantities using a statistical model usually referred to, in this context, as a "software sensor" [1].

This paper addresses the problem of building a software sensor for on-line determination of optimal coagulant dosage from raw water characteristics such as turbidity, pH, conductivity, etc. Previous studies [2-3] have shown the potential effectiveness of such an approach based on artificial neural networks. The innovative aspect of the present work resides primarily in the integration of various techniques in a global system allowing for data validation and reconstruction, prediction of the quantity of interest, and analysis of uncertainties.

Given the high variability of the inputs and the low reliability of available sensors, an important requirement for such a system is *robustness* against erroneous sensor measurements or unusual water characteristics, due to accidental pollution for instance. In our system, such a robustness is achieved using a modular architecture composed of two levels: a pre-processing level responsible for outlier rejection and missing data reconstruction, and a prediction level involving the determination of the optimal coagulant amount from raw water characteristics (Figure A-1).

A second important requirement from the considered application is the possibility to install the system at low cost in various sites, which necessitates a methodology for designing and training the neural networks automatically from new data, including the phases of data validation and model choice. Our system uses pruning and re-sampling techniques for automatic determination of the network architecture and computation of confidence bounds for the predictions.

This paper is organised as follows. Section 2 presents a general introduction to the application domain and states the problem addressed in the rest of the paper. The two main modules of the system, based on self-organising maps and multi-layer perceptrons, are then described in Section 3 and 4, respectively. Finally, experimental results are presented and discussed in Section 5.

2. Problem Description

2.1 Overview of water treatment operations

Water treatment involves physical, chemical and biological processes that transform raw water into drinking water. However, contrary to most industrial processes, for which the quality of the input raw material is under control, the quality of the given raw water source may fluctuate due to natural perturbation or occasional pollution.

Figure A-2 depicts the main processes in a typical plant for surface water treatment (the Viry-Chatillon plant, near Paris). Raw water is abstracted from the resource (a river in this case) and pumped to the treatment works. A water treatment plant invariably consists in two main process units: clarification and filtration; other units may be required depending on the quality of the water source.

The coagulation process is brought about by adding a highly ionic salt (aluminium sulphate) to the water. A bulky precipitate is formed which electrochemically attracts solids and colloidal particles. The solid precipitate is removed by allowing it to settle to the bottom of the tank and then periodically removing it as sludge. The coagulation process accounts for the removal of most of the undesirable substances from the raw water and hence tight monitoring and control of this process is essential. The next stage is filtration, where the particles passing through the previous stages are removed. Filtered water is also treated with ozonation to

eliminate the last micro-pollutants. The final stages in the process are chlorination and pH adjustment. The water is then stored in a tank and ready to be transported through the water supply network.

2.2 Coagulation control

Coagulation is one of the most important stages in surface water treatment, allowing for the removal of colloidal particles. The main difficulty is to determine the optimum quantity of chemical reagent related to raw water characteristics. Poor control leads to wastage of expensive chemicals, failure to meet the water quality targets, and reduced efficiency of sedimentation and filtration processes. In contrast, good control can reduce manpower and chemical costs and improve compliance with treated water quality targets.

The traditional method of controlling coagulant dose, called the jar-test, relies heavily upon human intervention. It involves taking raw water samples and applying different quantities of coagulant to each sample [4-5]. After a short period of time each sample is assessed for water quality and the dosage that produces the optimal result is used as a set point. Operators change the dose and make a new jar test if the quality of treated water changes. Disadvantages associated with such a procedure are the necessity to rely on manual intervention, and lack of adaptation to abrupt changes of water characteristics.

More recently, an automatic device, called a streaming current detector (SCD) [6-7] has emerged. This device is based on the measurement of the net residual charge surrounding turbidity and colloidal particles in water. It requires a set point to be entered, assumed to represent an optimum water-quality standard. Streaming-current values above the set point indicate an excess of coagulant, while values below the set point indicate insufficient coagulant dosage for full flocculation to occur. A jar test needs to be carried out to determine the set point. Disadvantages associated with the SCD are its operation cost and limited efficiency for certain types of raw water quality.

The objective of this paper is to propose an alternative to the jar-test and SCD methods allowing for the automatic determination of optimal coagulant dose from raw water characteristics, using an artificial network approach. This approach requires the availability of on-line water quality measurements at an upstream survey station. An important objective of the present study is to automatically validate the sensor measurements performed at the survey station so as to provide reliable inputs to the automatic coagulation control system.

3. Data Validation and Reconstruction

3.1 General Approach

Applications in the environmental domain such as the one considered in this paper generally rely on complex sensors located at remote sites. The processing of the corresponding measurements for generating higher level information (such as predictions of optimal coagulant dosage) must therefore account for possible sensor failures and incoherent input data.

In many cases, even domain experts are unable to categorise off-line data as “valid” or “invalid” with complete certainty, because of incompleteness of the available information or lack of knowledge of the underlying physical phenomena. For this reason, data validation should not be merely seen as the suppression of spurious data, but as the determination of a *degree of confidence* in the data, based on a comparison between observations and models incorporating background knowledge about the application domain. For example, the validity of a temperature measurement may be put in doubt because (1) the value is surprisingly high or low; (2) the rate of change between consecutive time steps is not within certain limits; (3) the

temperature measured at successive time steps normally follows a certain pattern that is not present in the data; or (5) the observed value is not compatible with other measurements of the same quantity obtained by an independent device, or of other quantities whose values are normally related to temperature, etc.

In our system, data validation is performed at two levels, referred to as *single parameter* and *multi-parameter* validation. The first level is quite simple and is based on the comparison of each input parameter and its derivative to a distribution of historical values obtained in the absence of sensor faults. A confidence level is calculated, and raw data with confidence level below a user-defined threshold are declared as invalid data.

Although this simple approach allows in many cases to detect gross measurement errors, the detection of inconsistencies in data involving more than one parameter requires the use of more sophisticated multidimensional techniques such as the self-organising feature map model implemented in our system.

3.2 Multi-parameter Data Validation and Reconstruction

3.2.1 Basic Approaches

Neural network approaches to signal failure detection and reconstruction include autoassociative neural networks (AANN) and SOM's [5].

The basic idea behind the AANN approach is to train a multilayer feedforward network to approximate the identity function by using target values identical to the input values. One of the hidden layer typically has limited capacity and plays the role of a bottleneck, which forces the network to optimally encode the input vectors, thus performing information compression and dimensionality reduction. With a single hidden layer of linear units, this approach was shown by Bourlard and Kamp to be equivalent to principal component analysis (PCA) [6]. Consequently, more complex networks with non-linearities can be seen as implementing some form of “non linear PCA”. Such an approach is proposed in Ref. [26], where a five-layer perceptron feedforward network is used for data validation. This network can be viewed as two independent three-layer neural networks connected in series. The first network mixes and compresses the n redundant measurements into a smaller number of characteristic variables which should ideally represents the essential characteristics of the process. The second network works in the opposite way and uses the compressed information to regenerate the original n redundant measurements. When trained on valid data, this network may be used to detect erroneous data, which are recognised from their higher reconstruction error [5]. However, the performance of such a system in the presence of incomplete input data is not fully predictable.

Another approach, which was adopted in this study, implies computing distances between input vectors and reference patterns, or *prototypes*. The determination of prototypes from data in an unsupervised way may be achieved using the Self-Organising Map (SOM) algorithm introduced by Kohonen [11]. The SOM model combines the goals of projection and clustering algorithms and may be seen as a method for automatically arranging high-dimensional data. It can be used at the same time to visualise the clusters in a data set, and to represent the data on a two dimensional map in a manner that preserves the non-linear relations of the data items, nearby items being mapped to neighbouring positions on the map. Applications of SOM's to water quality monitoring are described in [37-39].

3.2.2 Principles of SOM

The SOM defines a mapping from the input data space \mathfrak{R}^n (raw water quality parameters) onto a regular two-dimensional array of nodes (an hexagonal array in our case) as shown in Figure A-3. A weight vector (also called a reference vector or a prototype) $m_i \in \mathfrak{R}^n$ is associated

to every node i . Each input vector $x \in \mathfrak{R}^n$ is compared to the m_i , and the best match m_c defines the winning prototype. The input is then mapped onto the corresponding location on the grid.

The process in which the SOM is formed is an unsupervised learning process. At each time step t , a data sample $x(t) \in \mathfrak{R}^n$ is presented to the map. The node c that best represents the input is then searched for using, e.g., the Euclidean distance:

$$\|x - m_c\| = \min_i \{ \|x - m_i\| \} \quad (\text{A.1})$$

Next, the unit c as well as neighbouring units learn to represent the data sample more accurately. The weight vector of unit i is updated according to the following learning rule:

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (\text{A.2})$$

where h_{ci} is a "smearing" or neighbourhood function expressing how much unit i is updated when unit c is the winner. The neighbourhood function typically is a symmetric, monotonically decreasing function of the distance between units i and c on the map grid. During repeated application of Equation (A.2) with different inputs, the weight vectors of neighbouring units become gradually similar due to the neighbourhood function h_{ci} , eventually leading to global ordering of the model vectors. With time, the m_i then tend to become ordered along the array in a meaningful way.

3.2.3 Application to Sensor Failure Detection and Reconstruction

Self-organising maps allow not only to visualise the evolution of raw water quality in two dimensions, but also to detect atypical data or outliers by monitoring the distance between each input vector and its closest reference vector (which is a variant of the distance rejection concept introduced by Dubuisson and Masson [8]). More precisely, let us define the *activation* of unit i for input x using a Gaussian kernel as:

$$K(i) = \exp\left(\frac{-1}{2\sigma_i^2} \|x - m_i\|^2\right) \quad (\text{A.3})$$

where σ_i^2 is a parameter defining the size of the influence region of unit i . σ_i^2 may be computed as the average empirical variance of the n input features, among the samples associated to unit i . If the activation $K(c)$ of the winning prototype is smaller than a specified threshold, the current sample is considered as invalid. The contributions of each of the components of vector x to the distance $\|x - m_c\|$ are then examined to determine more precisely which sensors should be declared as faulty. These sensor measurements are then disconnected to compute a new winning prototype with only valid parameters.

Remarks:

1. Note that this procedure for detecting outliers may be given a probabilistic interpretation, the input vectors x being assumed to be taken from a mixture of normal distributions (or classes) with means m_i and scalar covariance matrices $\sigma_i^2 I$ (I being the identity matrix). The activation of the winning unit i for input x may then be considered as an approximation to the i -th class-conditional probability density at x (up to a scaling factor). Our procedure for rejecting outliers then amounts to discarding feature vectors which were "implausible" under each of the class densities (see, e.g., [32, page 25] on this topic). Other approaches to probability density estimation using, e.g., Gaussian mixture models and the EM algorithm [29], could also be used.

2. The above procedure allows for the rejection of atypical patterns and therefore implements some kind of “novelty detection”. This constitutes a very conservative approach which prevents the prediction module of the system from blindly interpolating known relationships between water characteristics and coagulant dosage to previously unseen cases. It is clear however that the “atypicality” of rejected input vectors may have several causes, such as sensor failure, abrupt changes of water quality due to an accidental pollution, or merely lack of completeness of the training set. It is therefore necessary to store the rejected input patterns for subsequent interpretation by the user, and possible retraining of the system in case of undue rejection of “normal” patterns.

For reconstruction, each missing value of a given input variable is estimated by the value of the corresponding component of the winning prototype. In order to improve the reconstruction accuracy, a combination of the k nearest nodes is used. Each missing or invalid value j is estimated by a combination of the corresponding component in the k nearest prototypes:

$$\hat{x}(j) = \frac{\sum_{i=1}^k K(i) m_i(j)}{\sum_{i=1}^k K(i)} \quad (\text{A.4})$$

where $m_i(j)$ denotes component j of prototype i . Note that this method is similar in spirit to radial basis function networks, and to the fuzzy system approach described in [31].

4. Prediction of Coagulant Dosage

4.1 The model

The prediction of optimal coagulant dosage from water characteristics is a non linear regression problem which can be tackled using multilayer perceptrons (MLP). We used a conventional MLP with one hidden layer of sigmoidal units trained by minimisation of the mean squared error function (Figure A-4). This approach is known to provide estimates of the conditional average of the output variable (here, the optimal coagulant dosing rate), given the observed values of the input variables (the raw water quality parameters) [18].

For the determination of the architecture, we used a pruning approach, starting from a relatively large network and then removing connections in order to arrive at a suitable network architecture. Several approaches to network pruning are based on the following general procedure [18]. First a relatively large network is trained using one of the standard training algorithms. Then the network is examined to assess the relative importance of the weights, and the least important are deleted. Typically this is followed by some further training of the pruned network, and the procedure of pruning and training is repeated for several cycles. Clearly, there are various choices to be made concerning how much training is applied at each stage, which fraction of the weights are pruned, and so on. These choices are usually made on a heuristic basis. The most important consideration, however, is how to decide which weights should be removed. For that purpose, some measure of the relative importance, or saliency, of weights has to be defined. The Optimal Brain Damage (OBD) method [19] provides such a measure. This method is briefly recalled here.

The method is based on the computation of the change dE in the error function E due to small changes in the values of the weights [19]. If the weight w_i is changed to $w_i + d w_i$ the corresponding change in the error function E is given by

$$\mathbf{d}E = \sum_i \frac{\partial E}{\partial w_i} \mathbf{d}w_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j H_{ij} \mathbf{d}w_i \mathbf{d}w_j + \mathbf{o}(\mathbf{d}w^3) \quad (\text{A.5})$$

where the H_{ij} are the elements of the Hessian matrix

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial w_i \partial w_j}. \quad (\text{A.6})$$

If we assume that the training process has converged, then the first term in (A.5) vanishes. As proposed by Le Cun et al. [19], the Hessian matrix can be approximated by discarding the non-diagonal terms. Neglecting the higher-order terms in the expansion then reduces (A.5) to the form

$$\mathbf{d}E = \frac{1}{2} \sum H_{ii} \mathbf{d}w_i^2. \quad (\text{A.7})$$

If a weight having an initial value w_i is set to zero, the increase in error is given approximately by (A.7) with $\mathbf{d}w_i = -w_i$. The saliency values of the weights can therefore be defined as the quantities $H_{ii} w_i^2 / 2$.

The implementation of this technique consists in the following steps (Figure A-5):

1. Choose a relatively large initial network architecture.
2. Train the network using the back-propagation algorithm applied to the sum of squares error function.
3. Compute the second derivatives H_{ii} for each of weights, and hence evaluate the saliencies $H_{ii} w_i^2 / 2$.
4. Sort the weights by saliency and delete the q lowest saliency weights ($q=1$ in our simulations).
5. Go to step 2 and repeat until the error measured using an independent validation set starts to increase.

4.2 Computation of confidence bounds

For practical use, a software system for the prediction the optimal coagulant amount should not only provide point estimates but also confidence intervals. Bootstrap sampling was used to generate confidence intervals for the system outputs [38]. The reader is referred to the book by Efron & Tibshirani [14] for a general presentation of the bootstrap.

Bootstrap is a statistical inference technique which uses training sets created by re-sampling with replacement from the original data (so that examples may occur more than once), and re-estimates all the parameters on each bootstrap sample. The application of this technique to the computation of confidence bounds for the outputs of a neural network as proposed in Ref. [38] is illustrated in Figure A-6. In this approach, b bootstrap subsets of the initial training set are used to train b bootstrap MLP models using the architecture and training procedure described previously. When a vector is fed into these networks, the b outputs provide an estimate of the distribution of the target variable for the current input. Lower and upper confidence limits for the prediction related to any given input vector may then be obtained by sorting these outputs and selecting, e.g., the 10% and 90% cumulative levels. As argued in [38], this approach allows to measure the variability due to the training algorithm and the limited training data. A theoretical discussion concerning the use of bootstrap percentile intervals may be found in [14, page 170].

5. Results

The water treatment plant in Viry-Chatillon was used as an application site for this study. This plant provides water to more than 300,000 inhabitants. It has a nominal capacity to process 120,000 m³ of water per day and has been well instrumented for several years. Several raw water parameters are measured on-line (

Figure A-2), and jar-tests are performed quite frequently, providing the necessary target values (the optimal dosing rates to be estimated from water quality data).

The raw database consisted of 100,000 measurements of 6 input variables (turbidity, conductivity, pH, temperature, dissolved oxygen and UV absorption) sampled every 5 minutes during a period of 12 months (from November 1997 to November 1998). Simple descriptive statistics of the data are given in Table A-1. Note that this data set, which represented all the available data at the beginning of this study, covers a period of one year and so can be expected to account for seasonal variations of water quality. It is obvious, however, that periodic retraining of the system will be needed to ensure that the full range of water quality conditions (in the absence of dramatic pollution events) are accounted for, and to allow continuous adaptation of the system to any possible long-term evolution of water quality.

Component planes of a Kohonen map of size 15*15 trained on the whole data set are shown in Figure A-7. In this representation, individual components of reference vectors in the map are displayed as grey levels. Component planes are commonly used as a by-product of SOM's for "correlation hunting" in large data sets [22]. In our case, correlation between, e.g., turbidity and UV can be clearly seen on these displays. Such relationships between input variables are captured by the SOM and are exploited for the reconstruction of missing data.

For training the MLP's, a learning set of 1,600 complete measurement vectors was constructed by removing erroneous and incomplete data, and averaging the data over one hour time intervals. A total of 1,120 samples (about 70 %) was exploited to build the model, the rest being used as an independent test set. Among the training data, approximately 30 % was left out as a validation set for optimising the architecture. Training the model included: finding the best structure of the ANN and estimating the prediction accuracy by bootstrap. The prediction accuracy and confidence bounds computed on the validation set are shown in Figure A-8.

A linear regression model was also developed for comparison with the neural network model. Figure A-9 shows the outputs of the linear model trained with the same data as the ANN. As expected, the prediction accuracy is clearly less than that of the ANN model, which confirms the non linearity of the relationship of interest. Performance results for the best model obtained from this data set with ANN model and linear regression are presented in

Table A-2.

In order to assess the robustness of the system, an off-line simulation study was conducted by artificially introducing faults in the original data at certain time steps. The simulation was based on two weeks of real data sampled every 5 minutes from 24th June 1998 to 9th July 1998. The dissolved oxygen was simulated to be degraded with a rising ramp of 0.005 mg/l per samples (every 5 minutes). The faults occurs on the 1st July at 8:00 at sample 2017 as shown in Figure A-10.

Using the SOM, the fault was detected 72 samples (6 hours) later at 1st July 14:00 (Figure A-11), and the dissolved oxygen variable was correctly identified as being the faulty parameter. Figure A-12 shows the reconstruction of dissolved oxygen using the SOM approach. The prediction accuracy and confidence interval of the ANN are shown in Figure A-13 for the pre-processed data. This is to be compared with the prediction results without pre-processing as shown in Figure A-14. These results clearly demonstrate the robustness induced by the pre-processing module in our system.

6. Conclusion

An integrated coagulation control system based on unsupervised and supervised neural network models has been described. It has been demonstrated that process data can be used to develop and train a feed-forward controller in the form of a neural network to accurately predict a suitable coagulant dosing rate. Experimental results using real data have demonstrated the efficiency and soundness of this approach. Field testing is currently under way to fully validate the system before its widespread dissemination to other sites. Expected benefits are treated water of a more consistently high quality, together with improved security of service, as the system will respond reliably and effectively over long periods. Significant savings in coagulant usage can be obtained in certain cases.

The performance of the network is obviously dependent on the quality and completeness of the data available for training the system. Consequently, continuous updating of training data during operational use is expected to improve the performance of the system. This model, however, is only based on the previous behaviour of operators and jar-test results. Further work is needed to develop a model taking into account the dynamics of the process, and allowing to predict treated water parameters (mainly, turbidity) at the output of the clarification process. The concepts demonstrated in this paper will also be applied in the near future to the modelling of other water treatment processes such as filtration and chlorination.

Acknowledgements

The authors thank the management of CIRSEE, and particularly Farrokh Fotoohi for his constant support, as well as the two anonymous referees for their helpful and constructive comments.

7. References

1. Masson, M. H., Canu, S., Grandvalet, Y., Lyngaard-Jensen, A., Software sensor design based on empirical data, *Ecological Modelling*, 120, 131-139, 1999.
2. Mirsepassi, A., Cathers, B. and Dharmappa, H.B., Application of Artificial Neural Networks to the Real Time Operation of Water Treatment Plants, in *Proceedings of the International Conference on Neural Networks*, Vol. 1, 516-521, Perth, Australia, 1995.

3. Evans, J., Enoch, C., Johnson, M. and Williams P., Intelligent based auto-coagulation control applied to a water treatment works, in *Proceedings of International Conference on Control*, 141-145, 1998.
4. Lind, C., Coagulation Control and Optimization: Part One, *Public Works*, 56-57, October, 1994.
5. Lind, C., Coagulation Control and Optimization: Part Two. *Public Works*, 32-33, November, 1994.
6. Bernazeau, F., Pierrone, P. and Duguet, J.P., Interest in using a streamline current detector for automatic coagulant dose control, *Water Supply*, 10 (4), 87-96, 1992.
7. Dentel, K.S., Use of streaming current detector in coagulation monitoring and control, *Journal of Water Sciences Research and Technologies - Aqua.*, 44, 70-79, 1995.
8. Böhme, T.J., Cox, C.S., Valentin, N. and Denoeux, T., Comparison of autoassociative neural networks and Kohonen maps for signal failure detection and reconstruction. In C. H. Dagli et al., editors, *Intelligent Engineering Systems through Artificial Neural Networks 9*, 637-644, New-York: ASME Press, 1999.
9. Bourlard, H. and Kamp, Y., Auto-association by multilayer perceptrons and singular value decomposition, *Biological Cybernetics*, 59, 291-294, 1988.
10. Kramer, M.A., Nonlinear Principal Component Analysis using Autoassociative Neural Networks, *AIChE Journal*, 37(2), 233-243, 1991.
11. Kohonen, T., *Self-Organizing Maps*, Heidelberg: Springer Verlag, 1995.
12. Trautmann, T. and Denoeux, T., A constructive algorithm for S.O.M. applied to water quality monitoring, in Dagli, Fernandez, Ghosh and Kumara (Eds), *Intelligent Engineering Systems through artificial neural networks 4*, 17-22, New-York: ASME Press, 1994.
13. Trautmann, T. and Denoeux, T., Comparison of dynamic feature map models for environmental monitoring, in Proceedings of ICNN'95, Vol. 1, 73-78, Perth, Australia, 1995.
14. Dubuisson, B. and Masson, M.. A statistical decision rule with incomplete knowledge about classes, *Pattern Recognition*, 26(1), 155-165, 1993.
15. McLachlan, G.J. and Basford, K.E., *Mixture Models: Inference and Applications to Clustering*, New-York: Marcel Dekker, 1988.
16. Ripley, B. D., *Pattern Recognition and Neural Networks*, Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
17. Petit-Renaud, S. and Denoeux, T., A neuro-fuzzy system for missing data reconstruction. *Proc. IEEE Workshop on Emerging Technologies, Intelligent Measurement and Virtual systems for instrumentation and measurement*, 78-84, Saint-Paul, USA, May 1998.
18. Bishop, C.M., *Neural Network for Pattern Recognition*, Oxford: Oxford University Press, 1995.
19. Le Cun, Y., Denker, J. S. and Solla S.A., Optimal Brain Damage. In D.S. Touretzky (Ed.), *Advances in Neural Information Processing Systems 2*, 598-605, San Mateo, CA: Morgan Kaufman, 1990.
20. Lippmann, R.P., Kukolich, L. and Shahian D., Predicting of Complications in Coronary Artery Bypass Operations using Neural Networks, In G. Tesauro et al. (Eds), *Advances in Neural Information Processing System 7*, Menlo Park, CA: MIT Press, 1055-1062, 1995.
21. Efron, B. and Tibshirani, R.J., *An Introduction to the Bootstrap*, New York: Chapman & Hall, 1993.
22. Vesanto, J. SOM-based data visualization methods. *Intelligent Data Analysis* 3(2), 111-126, 1999.

8. Figures

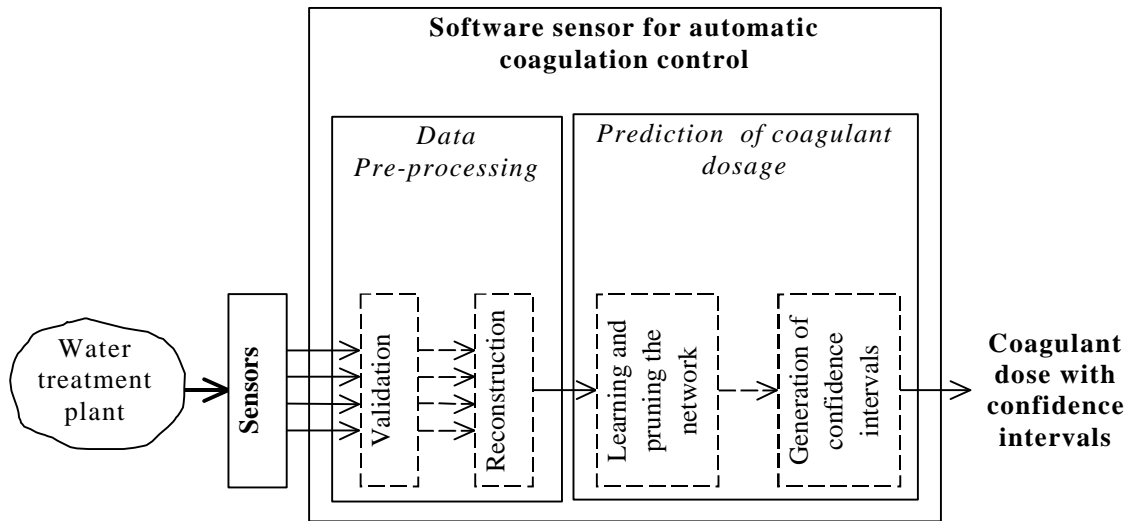


Figure A-1: Structure of the system for automatic coagulation control.

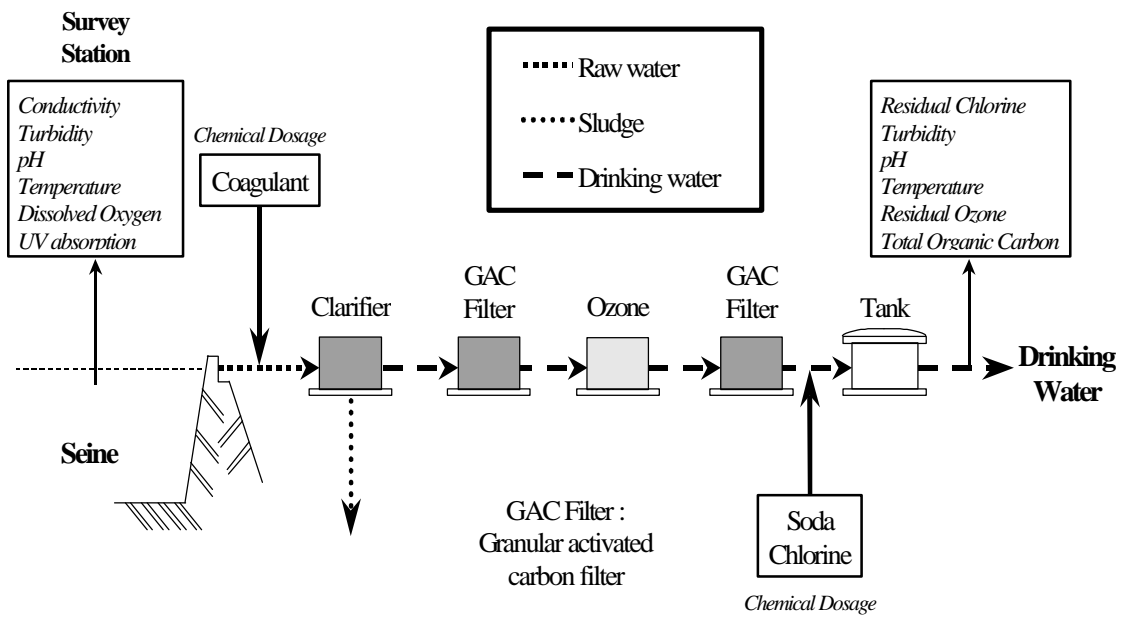


Figure A-2: Simplified synopsis of the Viry-Chatillon water treatment plant.

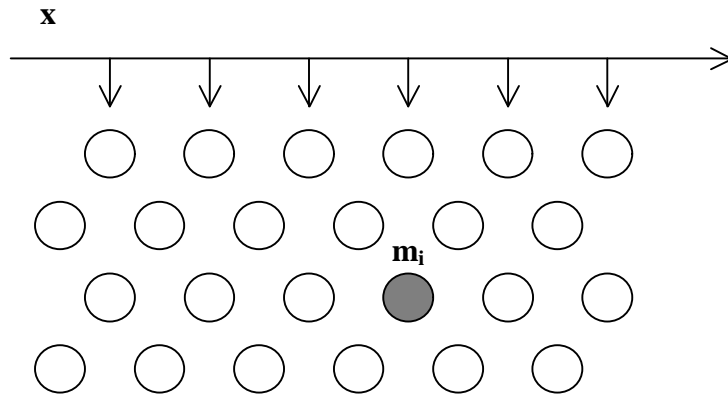


Figure A-3: Principle of the SOM

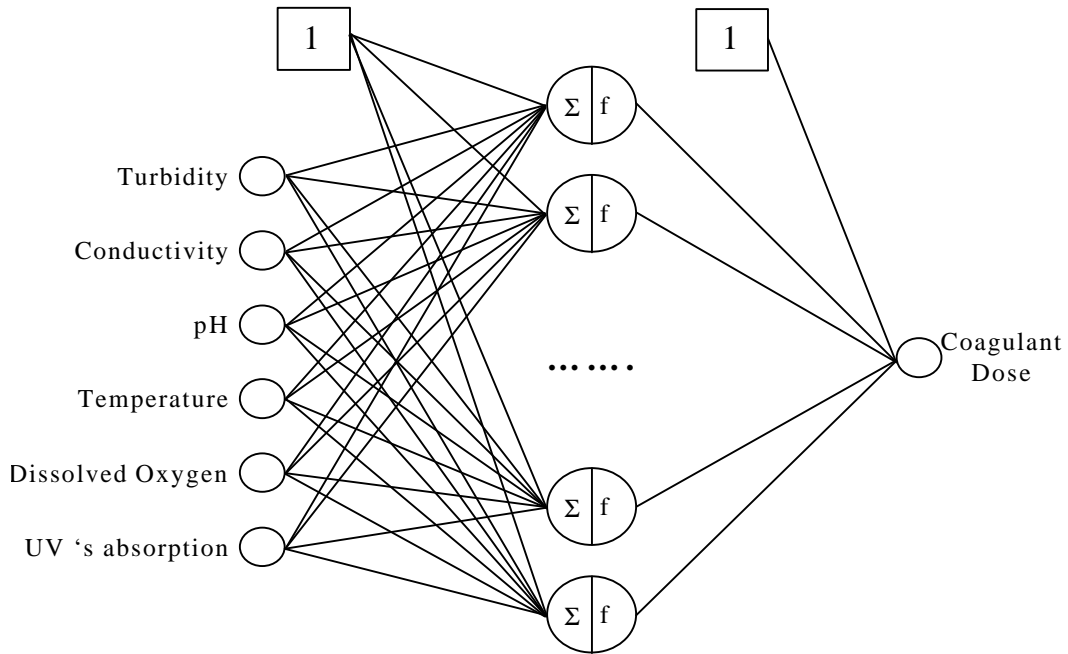


Figure A-4: Multi-layer perceptron network for prediction of coagulant dosage

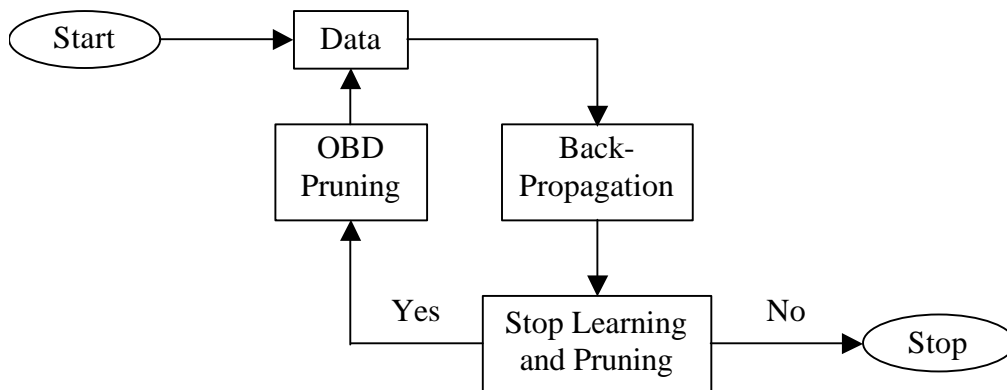


Figure A-5 : Learning and pruning algorithm

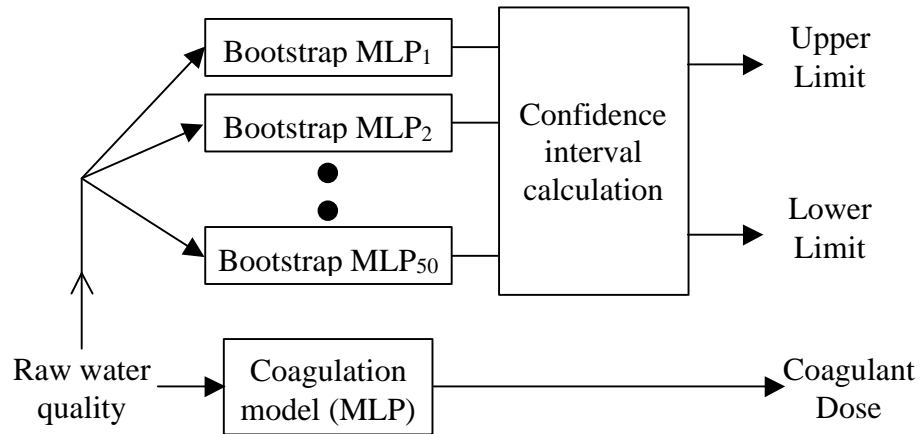


Figure A-6 : Bootstrap sampling for the generation of prediction intervals

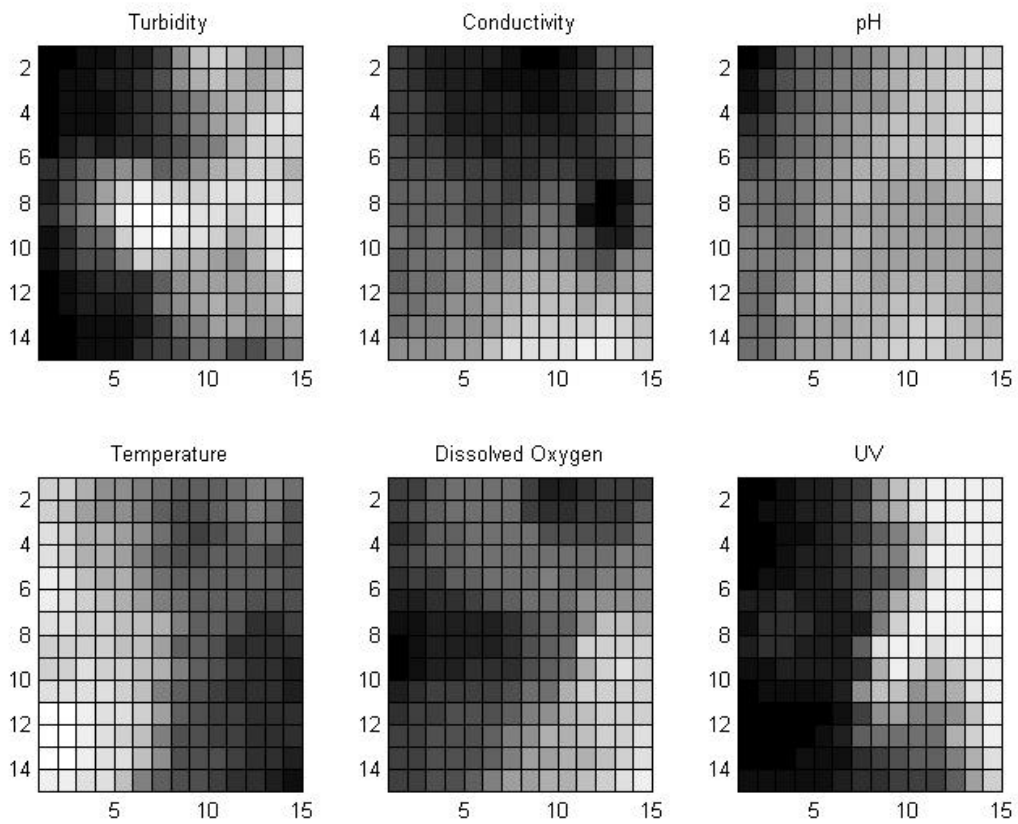


Figure A-7 : Component planes of the SOM

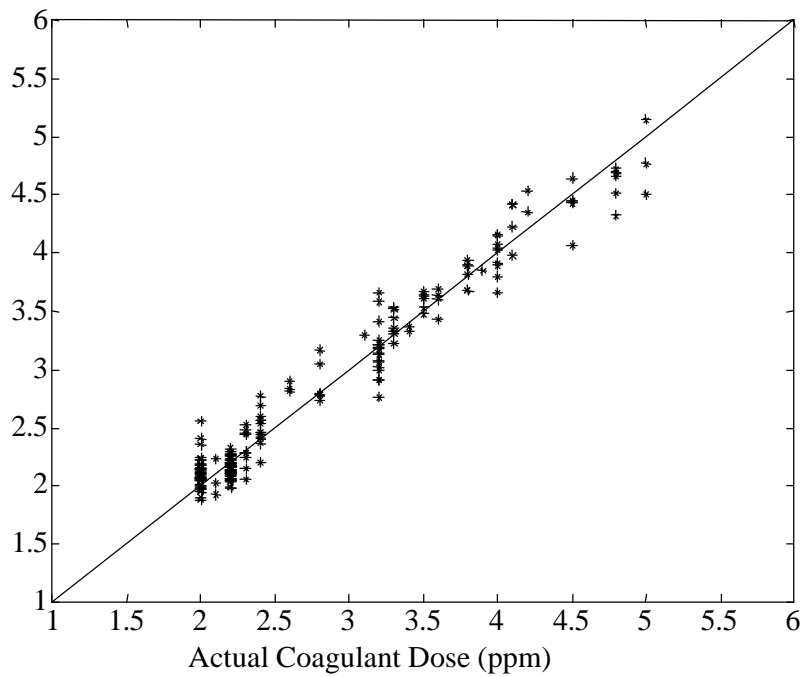
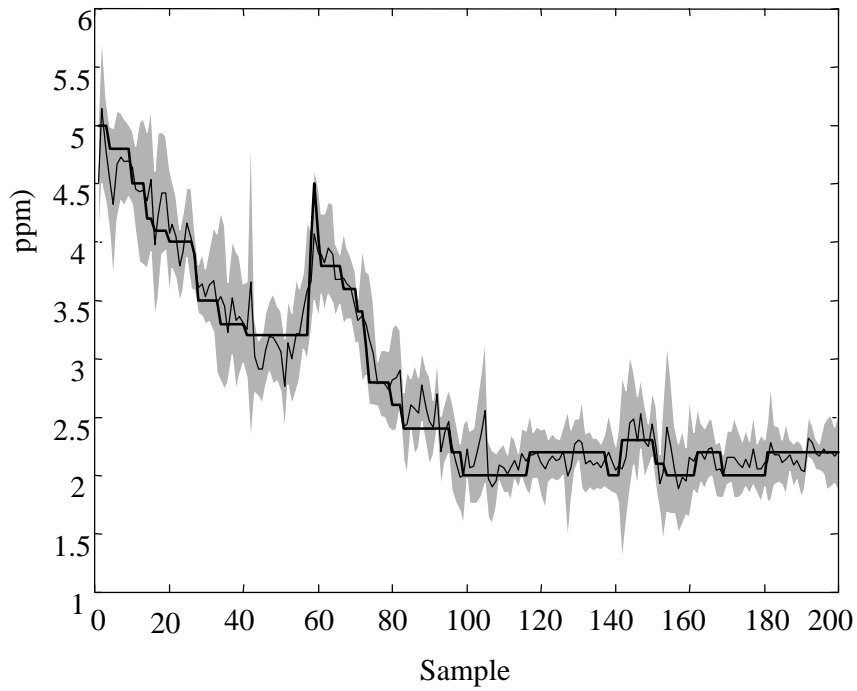


Figure A-8: Up: actual (thick line) versus predicted (thin line) coagulant dosage with ANN model on test data and confidence interval (shaded region). Down : predicted vs target coagulant dose.

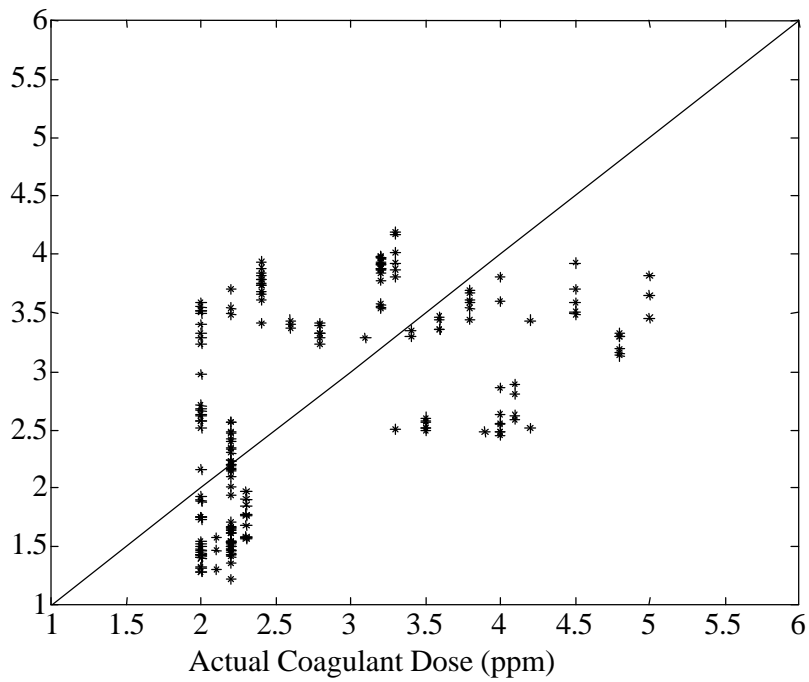
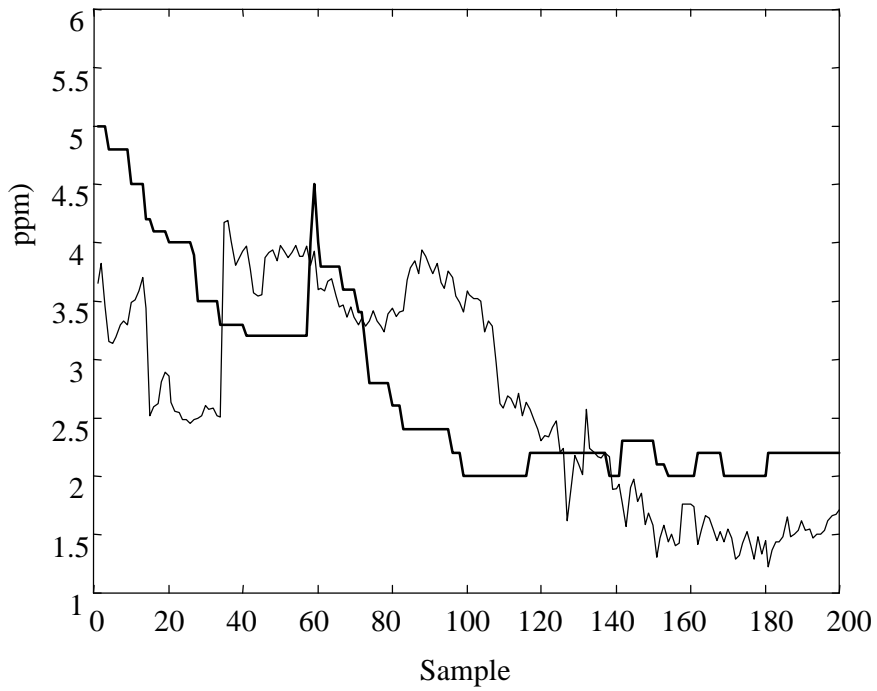


Figure A-9: Up: actual (thick line) versus predicted (thin line) coagulant dosage with linear regression model. Down : predicted vs target coagulant dose.

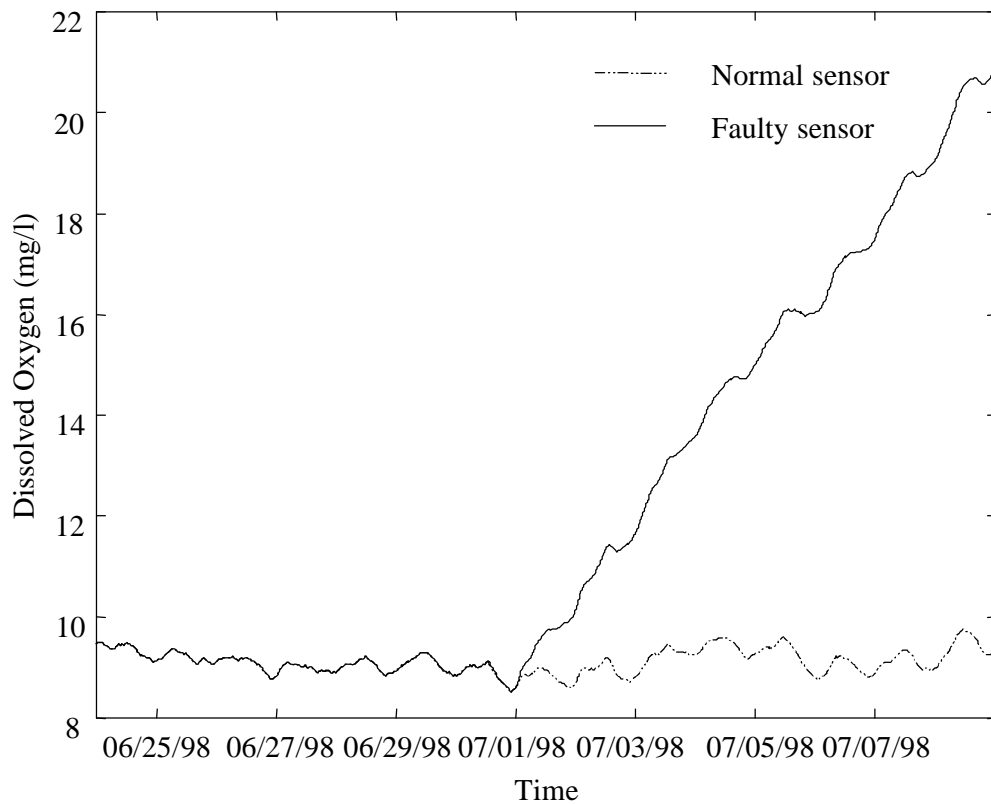


Figure A-10: Simulated dissolved oxygen sensor fault.

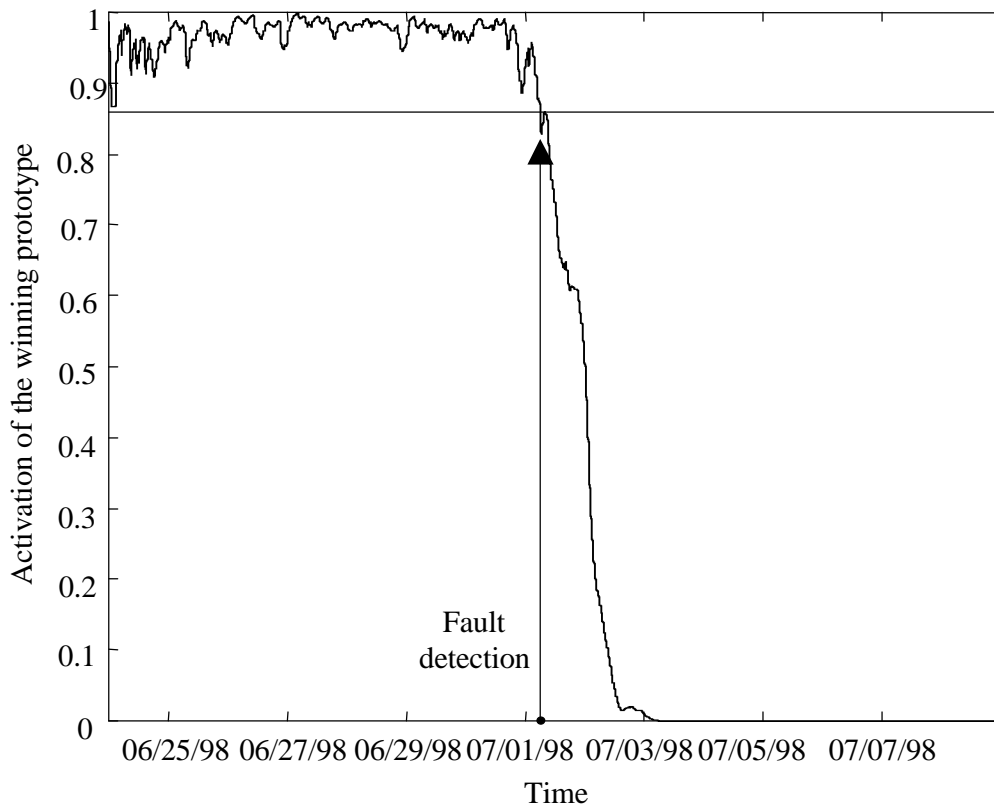


Figure A-11 - Activation of the winning prototype.

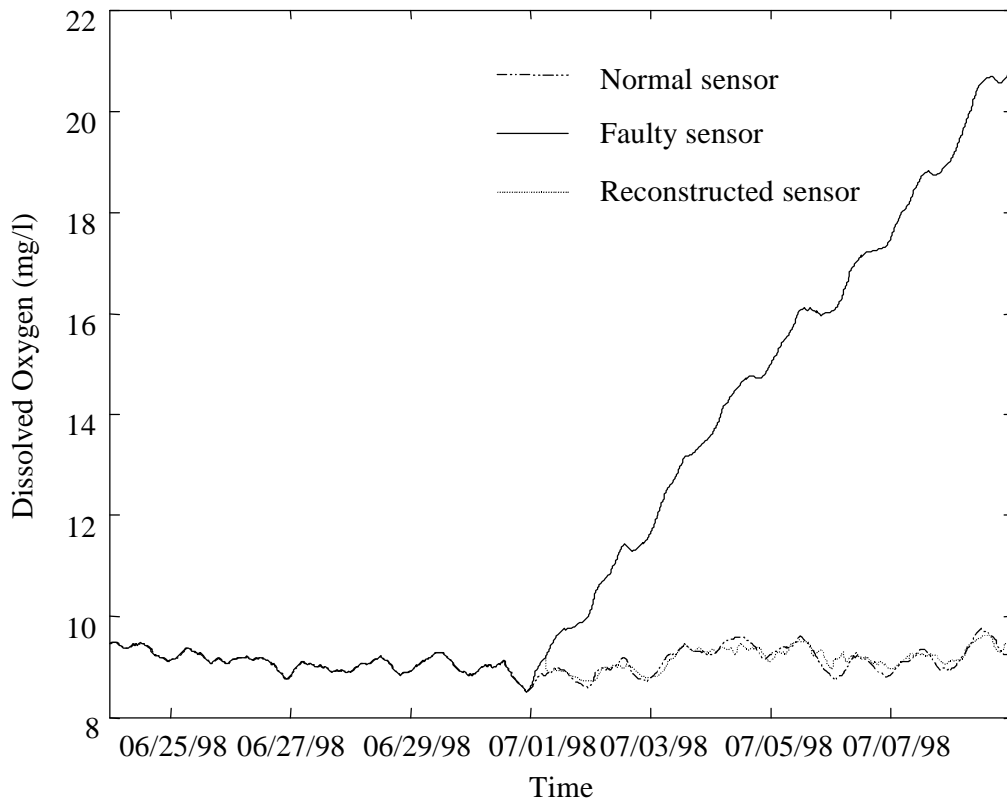


Figure A-12 - Reconstruction of dissolved oxygen.

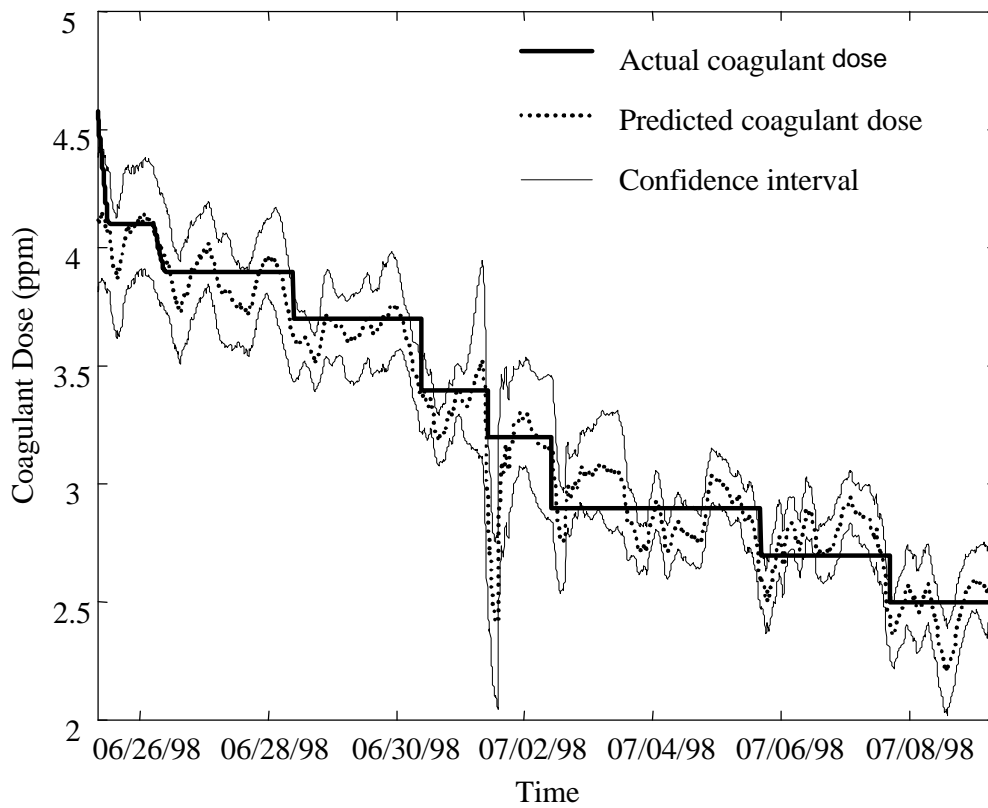


Figure A-13 - Actual (thick line) versus predicted (dotted line) coagulant dosage with ANN model and confidence bounds (thin lines).

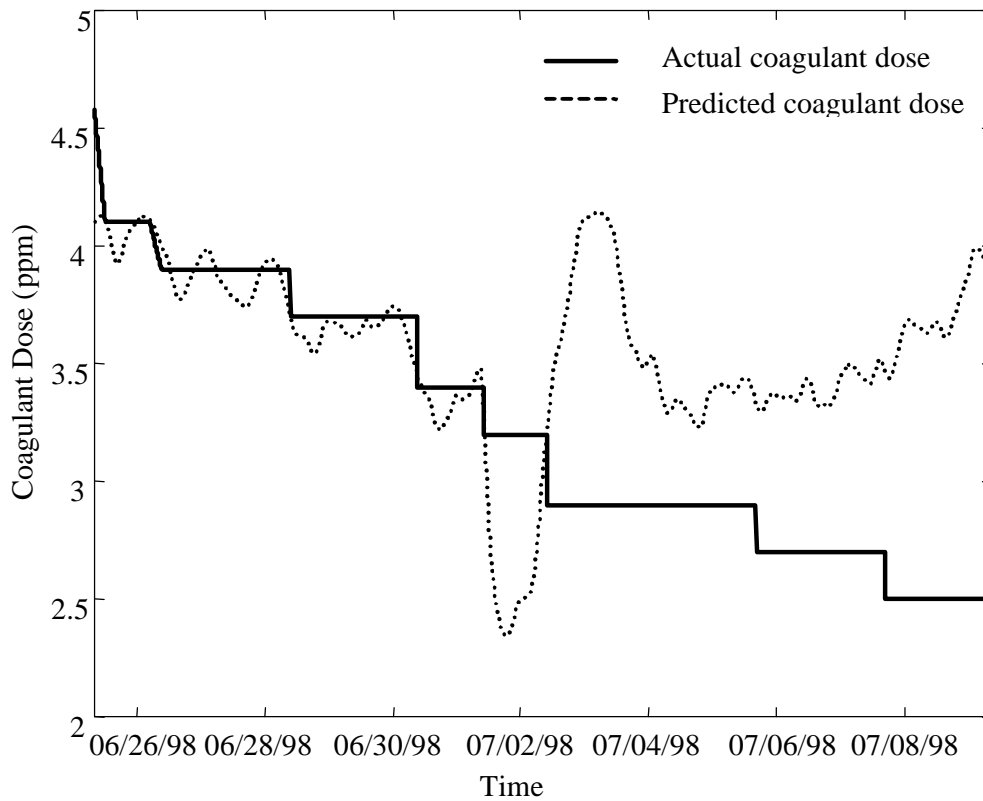


Figure A-14 - Actual (thick line) versus predicted (dotted line) coagulant dosage with ANN model without pre-processing.

9. Tables

Table A-1 : Statistical summary of raw water conditions at the Viry treatment plant between Nov. 1997 and Nov. 1998

| Property | Turbidity (NTU) | PH | Dissolved Oxygen (mg/l) | Conductivity (μ S) | Temperature ($^{\circ}$ C) | UV (do/m) | Coagulant Dose (ppm) |
|--------------------|-----------------|------|-------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------|----------------------|
| Maximum | 166,5 | 8,37 | 14,3 | 560 | 25,3 | 19,2 | 7,8 |
| Minimum | 1,1 | 7,06 | 5,7 | 264 | 5,5 | 0,4 | 2 |
| Mean | 21,5 | 7,95 | 10,4 | 445 | 10,3 | 8,6 | 4,1 |
| Standard deviation | 28,4 | 0,2 | 1,8 | 48 | 5,5 | 4,9 | 1,7 |

Table A-2: Results for ANN and linear regression models

| Models | ANN model | Linear Regression model |
|---|------------------|--------------------------------|
| R ² for training data | 0.99 | 0.78 |
| R ² for validation data | 0.96 | |
| R ² for test data | 0.96 | 0.58 |
| Root-mean-square-error for test data | 0.19 | 1.5 |
| Mean absolute error for test data | 0.14 | 1.2 |
| Maximum absolute error for test data | 0.92 | 4.4 |
| Correlation coefficient r for test data | 0.98 | 0.76 |

Liste des Figures

| | |
|---|-----|
| Figure I-0-1 : Structure du système pour le contrôle automatique du procédé de coagulation..... | 3 |
| Figure 1-1 : Cycle de l'eau..... | 6 |
| Figure 1-2 : Chaîne de traitement..... | 7 |
| Figure 1-3 : Coagulation / Flocculation | 10 |
| Figure 1-4 : Evolution de la turbidité de l'eau filtrée d'un filtre : (a) maturation du filtre, (b) période de fonctionnement normal, (c) début de crevaison du filtre, (d) limite de turbidité. | 15 |
| Figure 2-1 : Contrôle basé sur la qualité de la coagulation..... | 31 |
| Figure 2-2 : Contrôle basé sur les paramètres descriptifs de l'eau brute..... | 32 |
| Figure 2-3 : Structure du système pour le contrôle automatique du procédé de coagulation. | 33 |
| Figure 3-1 : Relations entre entrées et cellules. | 48 |
| Figure 3-2 : Exemple de convergence..... | 48 |
| Figure 3-3 : Exemples d'architecture possibles..... | 49 |
| Figure 3-4 : Un carte et ces vecteurs..... | 50 |
| Figure 3-5 : Valeur de la fonction de voisinage autour de la bmu pour une carte linéaire..... | 53 |
| Figure 3-6 : Un exemple de voisinage non respecté..... | 56 |
| Figure 3-7 : Un exemple de voisinage inversé non respecté..... | 56 |
| Figure 3-8 : Illustration du mécanisme de validation des données en trois dimensions..... | 59 |
| Figure 3-9 : Illustration du mécanisme d'estimation de données manquantes en 2 dimensions . | 61 |
| Figure 4-1 : Neurone de McCulloch et Pitts..... | 71 |
| Figure 4-2 : Architecture : (a) d'un perceptron simple (b) et d'un perceptron multicouches avec une seule couche cachée. | 72 |
| Figure 4-3 : Quatre fonctions d'activation différentes..... | 73 |
| Figure 4-4 : Définition des notations pour un PMC..... | 76 |
| Figure 4-5 : Extraction de règles (d'après Denker et al., [12]). | 81 |
| Figure 4-6 : (a) Apprentissage correct : un bon lissage des données ; (b) Surapprentissage : l'apprentissage est parfait sur l'ensemble d'apprentissage ('x'), et vraisemblablement moins bon sur le point de test ('o') ; (c) Sous-apprentissage : apprentissage insuffisant. .. | 82 |
| Figure 4-7 : Schéma de procédure RP + OBD..... | 86 |
| Figure 4-8 : Rééchantillonnage bootstrap pour la génération d'intervalle de prédiction..... | 87 |
| Figure 5-1 : Réseau de distribution d'eau potable du sud de l'agglomération parisienne..... | 96 |
| Figure 5-2 : Usine de Viry-Chatillon. | 97 |
| Figure 5-3 : Evolution des paramètres descripteurs de l'eau brute au cours du temps (1). | 99 |
| Figure 5-4 : : Evolution des paramètres descripteurs de l'eau brute au cours du temps (2). | 99 |
| Figure 5-5 : Evolution de la dose optimale de coagulant appliquée sur l'usine au cours du temps. | 100 |
| Figure 5-6 : Relations entre les variables, prises deux à deux et coefficients de corrélation croisés. | 101 |
| Figure 5-7 : Les 10 teintes employées pour représenter la réaction des cellules aux différents paramètres..... | 102 |
| Figure 5-8 : Réaction aux différents paramètres des cellules de la carte (15 x 15) après apprentissage..... | 103 |
| Figure 5-9 : Cas 1 : (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu ; (c) Distance à la bmu selon la composante du pH..... | 105 |
| Figure 5-10 : Cas 2 : (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu ; (c) Distance à la bmu selon la composante de l'oxygène dissous..... | 106 |
| Figure 5-11 : Cas 3 : (a) Défaut capteur sur le pH. Détection et reconstruction ; (b) Défaut capteur oxygène dissous. Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu..... | 107 |
| Figure 5-12 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : paramètres descripteurs de la qualité de l'eau (1). | 108 |

| | |
|---|-----|
| Figure 5-13 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : paramètres descripteurs de la qualité de l'eau (2). | 109 |
| Figure 5-14 : Ensemble d'apprentissage pour la construction du PMC : dose optimale de coagulant. | 109 |
| Figure 5-15 : Evolution de l'erreur d'apprentissage et de test | 110 |
| Figure 5-16 : Architecture du PMC après élagage des poids | 111 |
| Figure 5-17 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type PMC sur l'ensemble de test. | 111 |
| Figure 5-18 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type linéaire sur l'ensemble de test. | 112 |
| Figure 5-19 : Taux de traitement appliqué (trait épais) et prédit (trait fin) avec le modèle de type PMC sur l'ensemble de test et l'intervalle de prédiction (région grisée). | 113 |
| Figure 5-20 : Simulation d'un défaut capteur sur l'oxygène dissous. (a) Détection et reconstruction ; (b) Activation de la bmu | 114 |
| Figure 5-21 : (a) Prédiction de la dose de coagulant en utilisant les données pré-traitées ; (b) Prédiction de la dose de coagulant sans le module de pré-traitement. | 115 |
| Figure 6-1 : Vue générale de l'application. | 121 |
| Figure 6-2 : Affichage de la carte de Kohonen. | 122 |
| Figure 6-3 : Les valeurs du paramètre température des prototypes de la carte de Kohonen. | 122 |
| Figure 6-4 : Validation de l'oxygène dissous. | 123 |
| Figure 6-5 : Rapport de la station d'alerte d'Evry basé sur un modèle de présentation prédéfini. | 124 |
| Figure 6-6 : Prédiction du taux de coagulant. | 125 |
| Figure 6-7 : Paramètres de qualité de l'eau traitée. | 125 |
| Figure A-1: Structure of the system for automatic coagulation control. | 141 |
| Figure A-2: Simplified synopsis of the Viry-Chatillon water treatment plant. | 141 |
| Figure A-3: Principle of the SOM. | 142 |
| Figure A-4: Multi-layer perceptron network for prediction of coagulant dosage | 142 |
| Figure A-5 : Learning and pruning algorithm. | 142 |
| Figure A-6 : Bootstrap sampling for the generation of prediction intervals | 143 |
| Figure A-7 : Component planes of the SOM. | 143 |
| Figure A-8: Up: actual (thick line) versus predicted (thin line) coagulant dosage with ANN model on test data and confidence interval (shaded region). Down : predicted vs target coagulant dose. | 144 |
| Figure A-9: Up: actual (thick line) versus predicted (thin line) coagulant dosage with linear regression model. Down : predicted vs target coagulant dose. | 145 |
| Figure A-10: Simulated dissolved oxygen sensor fault. | 146 |
| Figure A-11 - Activation of the winning prototype. | 146 |
| Figure A-12 - Reconstruction of dissolved oxygen. | 147 |
| Figure A-13 - Actual (thick line) versus predicted (dotted line) coagulant dosage with ANN model and confidence bounds (thin lines). | 147 |
| Figure A-14 - Actual (thick line) versus predicted (dotted line) coagulant dosage with ANN model without pre-processing. | 148 |

Liste des Tables

| | |
|---|-----|
| Tableau 1-1 : Temps de décantation des particules..... | 9 |
| Tableau 2-1 : Principaux automatismes dans une station de traitement d'eau potable..... | 29 |
| Tableau 5-1 : Résumé statistique des paramètres de l'eau brute sur l'usine de Viry pour la période de décembre 1997 à mai 2000..... | 98 |
| Tableau 5-2 : Valeurs de l'erreur de discrétisation pour la carte sélectionnée à la fin de l'apprentissage..... | 101 |
| Tableau 5-3 : Relation teinte - intervalle pour les 6 paramètres. | 102 |
| Tableau 5-4 : Résultats des modèles PMC et linéaire. | 112 |
| Table A-1 : Statistical summary of raw water conditions at the Viry treatment plant between Nov. 1997 and Nov. 1998..... | 148 |
| Table A-2: Results for ANN and linear regression models | 149 |

RESUME EN FRANÇAIS :

L'établissement de modèles du comportement des systèmes est un problème incontournable en automatique. D'importants efforts dans le développement de méthodes de contrôle et de surveillance automatique ont été effectués durant ces dernières années. Le présent travail s'inscrit dans ce courant de recherche, en proposant une nouvelle approche pour l'automatisation du dosage de coagulant en traitement d'eau potable.

L'objectif des traités d'eau est la production d'une eau potable de qualité irréprochable à un faible coût. La coagulation est l'une des étapes les plus importantes dans le traitement des eaux de surface. Le contrôle de cette opération est essentiel pour la maîtrise de la qualité de l'eau traitée en sortie (turbidité), pour le contrôle du coagulant résiduel en sortie et la diminution des coûts de fonctionnement (coût des produits chimiques et opération de maintenance).

Cette thèse aborde le problème de la prédiction en ligne de la dose optimale de coagulant dans une usine de traitement d'eau potable en fonction des caractéristiques de l'eau brute (conductivité, turbidité, pH, etc.) à l'aide d'un modèle basé sur les réseaux de neurones artificiels (RNA). Le procédé de coagulation met en jeu de nombreux phénomènes physiques et chimiques complexes qu'il est difficile de modéliser en utilisant des méthodes de modélisation traditionnelles. Il a été démontré, expérimentalement, que la quantité de coagulant assurant une efficacité optimale du procédé de coagulation n'est pas linéairement corrélée avec les paramètres de qualité de l'eau brute telles que la turbidité, la conductivité, le pH, la température, etc. Le « capteur logiciel » développé est un système hybride comprenant une « carte auto-organisatrice de Kohonen » (SOM) pour la validation et la reconstruction des données, et un « perceptron multicouches » (MLP) pour la modélisation du procédé de coagulation. L'intérêt principal du système réside dans sa capacité à prendre en compte diverses sources d'incertitude, telles que des données d'entrées atypiques, des erreurs de mesure et la taille limitée de l'ensemble d'apprentissage. Des résultats expérimentaux sont présentés et montrent l'efficacité de cette approche.

MOTS-CLEFS :

Validation de données
Reconstruction de données manquantes
Carte auto-organisatrice de Kohonen (SOM)
Perceptron multicouches (PMC)
Système hybride
Procédé de coagulation
Traitement d'eau potable