UNIVERSITE KASDI MERBAH OUARGLA
Faculté des Sciences et Sciences de l'Ingénieur
Département de Génie des Procédés

N⁰ d'ordre : ……
Série : ……

Mémoire
Présenté en vue de l'obtention du diplôme de magister
En Génie des Procédés
Option : Chimie organique et physicochimie moléculaire

Présenté par :
Salemi Said

Thème

Modélisation des zones odorantes pour certains types d'odeur par la technique "Property clustering"

Soutenu publiquement le : **, devant le jury :**

Ouahrani Med Redha	Professeur UKM Ouargla	Président
Dounit Med Salah	MC. UKM Ouargla	Examinateur
Gherraf Nourredinne	MC. UKM Ouargla	Examinateur
Segni Ladjel	MC. UKM Ouargla	Rapporteur
Korichi Mourad	MA. UKM Ouargla	Encadreur

Année Universitaire 2008/2009

Remerciements

*J'adresse mes sincères remerciements à mes professeurs **SEGNI LADJEL – Maître de Conférence** et **KORICHI MOURAD – Maître Assistant** pour leurs compétences et leur rigueur, ainsi que pour leur enthousiasme vise a vie de mon travail je tien également à eux exprimer toute ma reconnaissance pour avoir su donnée a cette merveilleuse institution scientifique une âme attachante et une motivation inaltérable.*

*J'adresse mes vifs remerciements à monsieur **RIDHA- OUAHRANI** professeur à l'université de Ouargla a qui me fait aujourd'hui de présider le jury de ce mémoire.*

*Je remercie très vivement monsieur **NOURREDINE – GHERRAF – Maître de Conférence** à l'université de Ouargla d'avoir mobiliser son temps et ses compétences pour juger ce travail.*

*J'adresse également mes remerciements au monsieur **MOHAMED SALAH - DOUNIT – Maître de Conférence** à l'université de Ouargla, de m'avoir fait l'honneur de juger ce travail.*

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à tout ce qui ont chers, et surtout mes parents, mon épouse, mes fils Salem, Sirine, tous mes frères et sœurs, tout mes amis et tous qui m'aiment.

Je dédie aussi ce travail à tous qui m'ont enseigné durant mes études.

Je souhaite de mon fond cœur le succès de tous les étudiants

Salemi Said

Introduction générale:

Dans les vingt années passées, les résines des animaux et les sources des plantes ont été utilisés pour obtenir des parfums et des fleurs, ces derniers ont des propriétés préservatives.

L'histoire de cet odeur ou arôme commence par l'homme qui le découvrait du produit naturel.

Autrefois, il utilisait des matériels anciens, mais maintenant il utilise des matériels très développés comme l'extracteur, le distillateur… alors, il atteint à des bons résultats.

Dans notre travail, l'odeur occupe une place importante à cause de leurs divers propriétés (physiques, chimiques physico-chimiques, économiques, …) et de plus, il est l'ami de l'homme car il est indispensable pour notre organismes.

Alors, l'odeur se situe dans un lieu très intéressant parce que tous les hommes ont besoin de ce type des produits, en vue de grand préparation et utilisation dans les divers domaines.

Dans notre travail, on essaye de faire ou d'utiliser des propriétés qui forment la base de performance de plusieurs unités, dans ce cas le choix des propriétés, au lieu de composés, mais lorsque les composés (produits chimiques) sont conservés, et les propriétés ne sont pas conservés .

Alors : Ets ce qu'il est possible d'utiliser ces propriétés à la place des composés? La réponse est oui, le récent travail donné par Shelly et ELHALWAGI (2000) [1] a montrée qu'il est possible de tailler des quantités conservées appelées clusters qui sont des sous propriétés au lieu des composés.

L'essentiel de cet approche et de développer les quantités conservées (clusters qui sont reliées aux quantités non conservées (propriétés).

En outre, on doit rechercher des molécules odorants nouvelles proches de molécules commerciales existantes nécessite la connaissance de la relation entre la structure moléculaire – odeur (on évite les molécules toxiques, qui causent des maladies…). Cette dernière (odeur) à difficile à modéliser, en raison de la subjectivité de l'odeur.

Alors, la recherche scientifique dans ce domaine est orientée vers l'utilisation des paramètres qui représentent la structure moléculaire (descripteurs moléculaires) tels que : indices topologiques, indices géométriques… pour développer le modèle.

Pour cette raison, ou a utilisé les expressions de base mathématique pour les clusters qui sont données par Shelly et ELHALWAGI (2000).

Ces rélations (expressions) sont en détails dans ce qui suit.

Donc, d'une façon générale, on essaye d'étudier la classification de l'odeur des molécules, en se basant sur les principes des clusters, ces composantes sont basés sur les descripteurs moléculaires et quelques relations mathématiques, thermodynamiques…

Organisation du mémoire :

Dans ce travail de recherche, nous nous sommes intéressés à la modélisation par des techniques de clusters des zones odorantes pour des molécules d'odeurs typiques. En conséquence, ce mémoire est organisé en trois chapitre :

Le premier chapitre de ce mémoire est consacré à l'étude bibliographique sur les odeurs, leur organisation et comment élaborer ses domaines.

Aprés avoir réalisé une étude théorique sur les odeurs, suivi par une description mathématique et achévé par une modélisation des zones odorantes.

Finalement, le troisième chapitre aborde les résultats de simulaion de notre étude.

I-1- Introduction:

Dans les années anciennes, les épices et les résines des animaux et de plantes ont été utilisés. Pour les parfums(odeurs) et les fleurs. Leur histoire commençait par l'homme qui découvrait l'arome de produit naturel.

Les techniques de la distillation étaient développées en 9^{éme} siècle par les arabes, les productions et les applications restaient inchangés. Le développement systématique commençait en 13ème siècle, où les pharmaciens, commençaient à préparer les médicaments d'huile et après enregistrer les propriétés et les effets physiologiques de ceux huiles dans le pharmacopoeias. Au 16ème et 17ème siècle l'huile est utilisée comme parfums.

Dans les premières années du 19ème siècle, cette production était industrialisée car le demande de ce huile comme un parfum.

En 1850 les seuls composés organiques étaient utilisés pour le même proposition, ce développement était la conséquence de l'isolation de cinnamaldehyde par l'extrait d'amande par « Liebig » et « Wohler » en 1937.

La première synthétique "Huile d'Arome" était utilisée entre 1845 et 1850.

Il est utile de travailler dans ce domaine car il est nouvel et tous les travaux ont lieu une grande importance dans les dernières années.

Même leur relation avec l'industrie des arômes des parfums est très importante car il touche tous les êtres humains et on peut pas vivre sans sens (parfum).

I-1-1-Définition:

Fragrance et les fleurs sont des odeurs organiques dures, elles étaient utilisées pour les parfums et des produits parfumés.

I-1-2- Importance physiologique:

Les signales chimiques sont indispensables pour des organismes qui sont utilisées comme un chimiorécepteur pour faciliter leurs vie, pour classer, les ennemis, et pour sex-appeal… etc. Toutes ces fonctions sont très importantes pour l'humanité. Dans les 10 ans passés les chercheurs ont travaillé sur la sensation et les résultats ont été publiés dans e.g [2-4b].

Le Fleur est très important pour la préparation des aliments comme les épices.

I-1-3- Les produits naturels et artificiels : nature – identique:

Les produits naturels sont obtenus directement du plante ou des sources animales par des procédures physiologiques.

Les composés de nature identiques sont produits synthétiquement, mais sont chimiquement identiques à ses contreparts naturels.

Les substances de fleurs artificielles sont des composés qui ont été identifiés dans la plante ou des produits des animaux pour la consommation humaine.

Les alcools, les aldéhydes, les cétones, les esters et les lactones sont les classés des composés qui sont représentés le plus fréquemment dans les fragrances naturels et artificiels.

I-1-4- Structure et propriétés de sens:

Il apparaît une similitude entre les odeurs parce que la non similitude des substances ou le mélange des composés peut interagir avec des récepteurs pour créer les mêmes impressions des sens dans les centres sens de cerveau.

Le groupe des odeurs de Misk (comprenant de cétones macro cyclique et des esters comme des meilleurs composés aromatiques nitreux et aromatiques cycliques).

I-1-5- Volatilité :

Les odeurs doivent être volatiles pour être observés.

De plus, dans l'addition à la nature de groupes fonctionnels et la structure moléculaire de composés, la masse moléculaire est encore un facteur important.

- Le temps ou les matériels des odeurs différent dans la volatilité, l'odeur de parfum change durant l'évaporation, est divisé au note max, la note de centre et la note fin ou humide qui consiste spécialement au composés moins volatiles. l'odeur de perception dépend encore largement à l'intensité d'odeur, de plus, la note typique n'est pas déterminée seulement par les composés les plus volatiles dans les plus des cas, les substances (fixatives) sont ajoutés au parfums pour preventer les composés les plus volatiles pour l'évaporation très rapide.

I-2- Organisation de champ des odeurs:

I-2-1- Définition:

On appelle le champ des odeurs l'endroit ou le lieu qui localise les différents types des parfums.

I-2-2- Recherche des critères objectives:

I-2-2-1- Introduction:

Tous les êtres humains sont confrontés à des effluves odorants. Cette sollicitation sensorielle s'opère soit à chaque inspiration (voie directe) soit à chaque expiration (voie rétronasale). Elle participe de manière constante à notre existence [1,2]

Ces sensations peuvent donner lieu comme chez les animaux supérieurs ou inférieurs à des réponses de type réflexes (attirante, fuite...) [3.4.5.6]; mais entraîner chez l'homme une perception olfactive, conscience dans la mesure ou le cortex cerbrale est impliqué. [7.8.9] cette perception a donné lieu à une transmission entre individus, l'expression de cette communication est formalisée au travers des expressions orales ou écrites pour qu'elles

puissent être transmises entre les individus d'une manière compréhensible; l'expression de ces sensations a conduit à toute une sémantique descriptive des notes odorantes.

Cette traduction ne peut être pas développée d'une manière rationnelle, mais elle a suivi un processus d'émergence empirique en relation avec des opportunités (apparition de nouvelles substances odorantes).

La nomenclature et le savoir de ces odeurs se caractérisent par une grande variété de terminologies.

On cite:

- Les bases faisant intervenir des empruntes à d'autres perceptions "notes douces, acides, rondes, lourdes, grasses…"
- Les bases ayant un référentiel d'origines:

a- Botanique: notes orangées, florales, fruitées, boisées, alliacées…

b- Zoologique: notes musquées, ambrées,… ou bien encore faisant intervenir l'environnement, notes, terreuses, argeste, marines, animales.

- Les bases hédoniques: notes agréables, repoussantes…
- Les bases chimiques: notes caryophyllées, aminés, soufrées…
- Les bases correspondant à un état de transformation physique: notes pyrogènées, fumées... etc.

Ces différentes catégories des descripteurs sont le plus souvent, sans liens objectifs avec la molécule causale: mais ces descripteurs font généralement intervenir le "vecu" individuel ou collectif qui s'est trouvé associé à chacune de ces perceptions.

Ce besoin d'une communication des odeurs a améné les utilisateurs à des démarches visant à une simplification suivie par une schématisation de la description des caractères odorantes.

Alors, chaque molécule odorante à une empreinte associée, donc, cette démarche conduit naturellement à des associations et à des classifications de produits odorantes et (ou) de notes odorantes [10, 11,12].

A partir de ce souci d'efficacité, sont nées d'innombrables classifications des odeurs qui n'ont pu déboucher à ce jour, faute d'une rationalisation des bases descriptives de la connaissance ou d'une volonté unificatrice, sur une nomenclature universelle et objective des nuances olfactives, ceci contrairement on a pu observé d'autres sens (ouie, vision, etc.), de nombreuses tentatives de rationalisation des descripteurs olfactifs ont néanmoins été entreprisés.

Le problème qui se pose, et auquel nous allons essayer d'apporter quelques éléments de réponse. Dans notre sujet on doit chercher et développer quelques facteurs de coïncidence entre:

- Le stimulus, produits odorants: en mélanges ou purs en tant que tels ou identifiés au plan de la structure chimique.
- La sensation de base physiologique.
- La perception consciente des effluves odorants.
- La réponse qui passe pour ce qui nous préoccupe, par l'expression sémantique des caractéristiques olfactives de ces produits.

I-2-2-2- L'olfactométrie

Le terme 'olfactométrie' désigne à la fois la **mesure des odeurs** et la **mesure des capacités olfactives** d'un sujet. Dans les deux cas un capteur est mis en présence d'une odeur (le stimulus). Un stimulus connu permet de caractériser le capteur, un capteur étalonné permet d'objectiver le stimulus.

I-2-2-2-1- La mesure des odeurs

Les paramètres d'une odeur sont :

- Quantitatif : son intensité, sa force
- Qualitatif : sa description comme la référence à un objet odorant (ex. la rose) ou la constitution chimique du mélange odorant
- Temporel : l'évolution dans le temps de son intensité et/ou de sa qualité (ex. note de tête d'un parfum)

Dans de nombreux domaines il s'avère nécessaire d'évaluer une odeur par exemple dans la parfumerie et les cosmétiques, le contrôle de qualité et les tests de préférence dans l'agro-alimentaire, le traitement des nuisances olfactives, etc. Les méthodes utilisées pour mesurer les odeurs sont l'analyse physico-chimique et l'utilisation d'un 'jury de nez' entraîné. Dans le cas de l'évaluation de nuisance olfactive, on utilise aussi les enquêtes auprès des populations concernées. Enfin des nez artificiels ou nez électroniques commencent à apparaître sur le marché.

I-2-2-2-2- L'analyse physico-chimique

Une odeur est liée à la présence de composés chimiques de l'air. La méthode physico-chimique consiste à rechercher et quantifier les éléments chimiques présents dans l'atmosphère puis à se reporter à une table des propriétés olfactives de chaque corps pour caractériser l'odeur résultante. Cette méthode a des limites :

- la concentration des produits odorants est souvent si faible qu'ils ne sont pas détectables, même par les analyseurs les plus performants,
- les propriétés olfactives des mélanges sont différentes de celles des constituants pris séparément, et souvent varient avec la concentration
- enfin, tous les composés chimiques ne sont pas odorants, mais ils peuvent influencer la sensation perçue avec le mélange.

I-2-2-2-3- Le jury de nez

Pour un spécialiste les études de nuisances olfactives, le terme 'olfactométrie' désigne la mesure des odeurs à l'aide d'un jury de nez. Par rapport à un instrument d'analyse l'être humain fait une évaluation directe de l'odeur : le mélange est-il odorant ou non?, quel est l'intensité de la sensation ?, quels sont les composantes du mélange ?

Un jury est constitué de quatre à seize sujets sélectionnés sur leurs capacités olfactives, ils doivent être représentatifs de la moyenne de la population. Ces sujets sont entraînés en fonction de la tâche qui leur sera confiée : s'ils doivent décrire des odeurs complexes leur entraînement consistera à détecter et nommer les constituants d'un mélange, s'ils doivent mesurer des intensités ils classeront par ordre de concentration croissante des solutions. Si ces solutions sont distribuées dans une large gamme, il est alors possible de déterminer les seuils de détection des sujet pour le produit considéré.

Ce jury, une fois entraîné, est placé dans les situations olfactives pour caractériser une source de nuisance, tester l'efficacité d'un procédé de déodorisation, évaluer la dilution d'une odeur dans l'environnement. Les recommandations AFNOR X43-101, X43-103, X43-104 décrivent la constitution et l'entraînement du jury, les procédures de mesures ainsi que les méthodes de traitement statistique des réponses.

I-2-2-2-4- Mesure de l'intensité de l'odeur

L'intensité perçue d'un mélange odorant est une fonction de sa concentration, la mesure de la concentration requiert un olfactomètre à dilution. Il existe plusieurs méthodes permettant d'objectiver la concentration d'un mélange.

La méthode la plus courante consiste à placer le jury et l'olfactomètre dans un local déodorisé. Le mélange odorant, après avoir été dilué par un gaz inodore, est présenté aux membres du jury. Par des essais successifs, on cherche la dilution maximum (N=Vo/Vo+Vg, Vo : volume d'air odorant, Vg : volume du gaz inodore) pour laquelle le stimulus est détectable, c'est le seuil de perception du mélange odorant. On caractérisera alors l'intensité comme étant N fois le seuil de perception.

Une autre méthode, applicable sur le terrain, utilise un olfactomètre pouvant délivrer un stimulus odorant d'intensité connue et réglable de n-butanol. La méthode consiste à demander au jury d'égaliser l'intensité du stimulus et celle de l'air ambiant. On caractérisera alors l'intensité comme étant équivalente à une concentration de n-butanol.

I-2-2-2-5-. Les méthodes d'enquêtes

Pour définir la gêne supportée par la population, il est possible d'utiliser une méthode d'enquête autour du site concerné. La mise en œuvre de ces méthodes reste encore complexe et onéreuse. Par ailleurs des programmes de recherche à grande échelle n'ont pas permis de dégager de relations entre intensité et nuisance odorante.

I-2-2-2-6- Les nez artificiels

Un nez artificiel est constitué d'un ensemble de capteurs chacun faiblement sélectif à un composé chimique. Il existe des capteurs de type oxydes métalliques, de type polymères conducteurs et des biosenseurs à base de bicouches lipidiques. Ces capteurs sont associés à un dispositif de traitement des informations par réseau de neurone formel de type perceptron multi-couches. Après une période d'entraînement, supervisée à l'aide d'une règle de rétro-propagation de l'erreur, ces dispositifs sont capables d'identifier certains mélanges mais surtout d'évaluer les différences d'un mélange odorant avec un prototype. Les performances de ces nez électroniques sont très inférieurs à celles d'un nez humain mais ils sont infatigables, c'est pourquoi ils commencent à être utilisés dans le contrôle de qualité principalement dans l'agro-alimentaire.

I-2-3- Situation du problème:

Le problème posé peut se représenter très schématiquement de la manière suivante (fig.1).

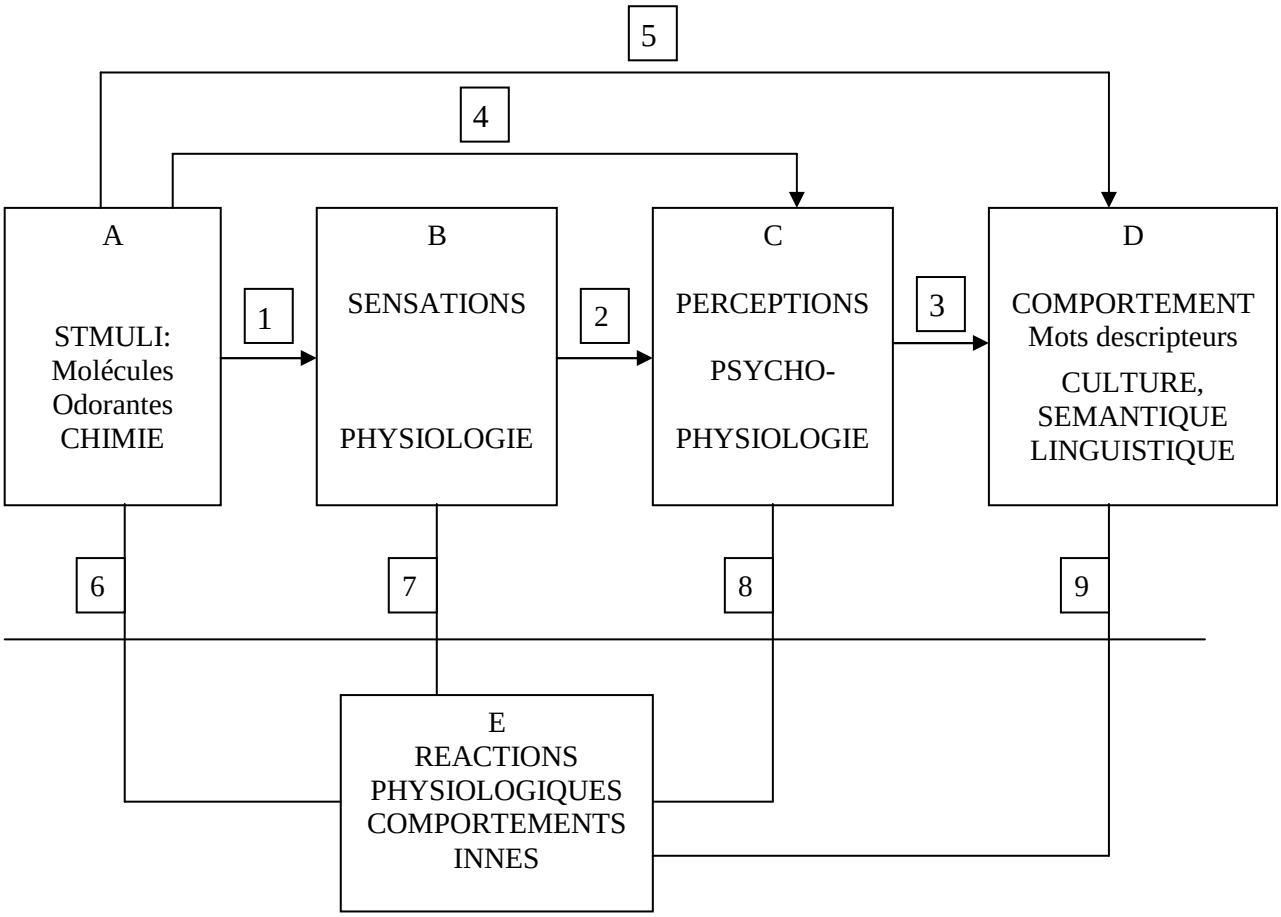


Figure (1) : présentation schématique de situation du problème

- L'ensemble (A), concerne l'espace chimique, il rassemble des différentes molécules connues et décrites.
- L'ensemble (B), concerne l'espace sensoriel olfactif, il regroupe les différentes sensations odorantes reçues, là encore on peut parler d'un système particulièrement ouvert.
- L'ensemble (C) concerne l'espace des perceptions.
- L'ensemble (D) représente également faute d'une possibilité d'expression quantitative des odeurs.
- En fin, un ensemble (E) des comportements innés devrait aussi être considéré, il concerne les effets aromatiques en relation avec les réflexes innés au niveau du plateo-cortex.

Cette présentation est par nature extrêmement simplifiée. Elle ne tient en effet pas compte d'une structuration préexistante de ces données élémentaires. Ainsi:

- L'utilisation de matière isolées des molécules odorantes et exceptionnelle qu'il s'agisse: des sources d'approvisionnement constituée encore en majeure partie par des mélanges naturels (huiles essentiels, oléorésines,...)

- La sensibilité pour chacune des molécules odorantes est très variable d'un individu à l'autre.
- La "perception" de mélanges odorants est différent suivant les personnes: Sélection des composantes prépondérantes, repère d'identification…
- La complexité préside également à l'expression de la réponse olfactive.
- Enfin, au plan purement sémantique, une complexité intrinsèque existe également dans la mesure où les notes odorantes telles qu'elles sont utilisées ne sont pas forcements indépendants les unes au autres.
- Indépendamment de la corrélation privilégiée qui nous préoccupe, c'est-à-dire celle entre les espaces A et D différents autres liens peuvent cependant être recherchés entre ces 4 espèces:
    - La corrélation entre les espaces A et B, elle concerne quelques dizaines de milliers des molécules qui sont réputées, posséder de propriétés odorantes.
    - La corrélation entre les espèces C et D, elle délimite le champ sémantique d'usage dans la description des odeurs, on a pu ainsi recenser aux travers des différents systèmes de classification et de description des odeurs.
    - Quant aux corrélations entre les espaces A et C, B et C, B et D, leur accès direct est à priori exclu.

La recherche d'une adéquation globale entre l'espace chimique A et l'espace sémantique D court-circuit, donc les étapes sont intermédiaires.

I-2-4- Sélection d'items significatifs:

Cette étape préliminaire a consisté à rassembler pris à classer les informations disparaîtes dont il est possible de disposer au plan des composés odorants.

Ces savants ont ainsi été amenés à effectuer un inventaire:

- Des molécules odorantes usuelles, ainsi que ces produits naturels utilisés en parfumerie et en aromatique, sur la base de ce dénombrement, ils ont rassemblé les principales caractéristiques (chimiques et physicochimiques mais aussi olfactives, économiques, toxicologiques) de ces composés.
- Des principales expressions sémantiques utilisées pour caractériser ces composés.

Puis dans une seconde étape, après une phase de regroupement par élimination des synonymes, rassemblement de termes ou des composés voisins … etc. Ils ont procédé à une recherche d'archétypes (moléculaires ou sémantiques) afin de consulter un référentiel de base susceptible d'apporter une traduction réciproque.

I-2-4-1- Archétype sémantique/archétype moléculaire:

L'objectif de cette démarche est de parvenir à une liste limitée de substances qui seront les plus distincts possibles les unes des autres, et qui serviront ensuite de descripteurs odorants de base.

I-2-4-2-Recherche d'un échantillon significatif des molécules odorantes:

Pour des raisons évidentes de reproductibilité, et afin d'éliminer une grande part de la variabilité évoquée précédemment, ils ont focalisé leur attention sur l'analyse des composés chimiques identifiées et purs (au sens de la profession) plutôt que sur les mélanges.

De plus, ne prétendant pas embrasser la totalité du champ des odeurs possibles mais entendant leur limiter aux seuls composés utilisés actuellement dans la profession de la parfumerie et l'aromatique.

Ils ont croisé les contenus des informations rassemblées au sein d'un certain nombre de documents classiques sur le sujet:

- Parfum et fleur chimique qui recense [13] 3102 molécules de base.
- Hand–book de flaveur ingrédients qui fournit [14] une monographie de 1120 composés clefs.
- Le répertoire de 1222 substances artificiel de l'aromatique qui sont examinées par les experts des conseils d'Europe dans le cadre de recommandation concernant la toxicologie [15].
- La compilation du TND de S van straten [16], qui présente 3500 molécules odorantes identifiées dans 142 produits alimentaires naturels de base.
- Les répertoires de composés disponibles chez les fabricants et négociants de l'industrie aromatiques.

Leur sélection des archétypes moléculaires essentiels a reposé sur la prise en compte des molécules décrites dans au moins deux ces sources.

I-2-4-3- Choix des descripteurs sémantique de notes odorants:

Leur souci a été de procéder à un inventaire aussi large que possible des termes employés tant en France que dans le pays Anglo-Saxons pour décrire des notes odorantes.

Ils ont pu ainsi recenser plus de 300 termes utilisés dans les:

- Diverses classifications empiriques des odeurs.
- Répertoires et catégories de produits odorants.
- Cahiers de parfumeurs et aromaticiens.
- Descripteurs de négociants.
- Travaux universitaires sur les produits odorants.

I-2-4-4- Recherche d'une adéquation entre molécules et descripteurs- étalon établissement d'archétypes:

Sur la base des ces 64 descripteurs élémentaires, utilisées seuls en association (2, 3 notes associées), les 1356 molécules de base ont pu être décrites, sans problème majeur, au plan de leurs caractéristiques odorantes, les concentrations employées étaient conformes aux usages de la profession.

Une recherche sémantique de l'adéquation qui lie ces deux champs (structural et odorant) nous permis au travers d'analyses multidimensionnelles de proximité de mettre en évidence plusieurs archétypes moléculaires individualisés qui peuvent être structures autour d'une molécule odorante que l'on peut considérer comme un étalon.

La liste de ces substances étalons avec en regard le descripteur odorant le plus fréquemment utilisé est présenté sur le tableau (1).

Pour des raisons évidentes de traductions et de commodité d'expression, ils utiliseront dans la suite de cette présentation le descripteur le plus couramment associé à chacun de ces groupes en lieu et place de la substance étalon, le lecteur devra cependant toujours lier la signification de ce descripteur avec l'image olfactive de la substance associée (perception objective) et non avec le contenu traditionnel qu'il attribue à ce terme (perception subjective).
Cette approche se démarque donc des tableaux d'équivalence proposés par d'autres auteurs, par le fait que notre sélection n'a pas été établie suivant des a priori mais qu'elle repose sur une structuration aromatique d'une information provenant de données préexistences.
L'intérêt pratique de cette procédure est lié au fait qu'elle permet de remplacer, lors de la caractérisation d'une substance inconnue ou nouvelle, des expressions sémantiques dont le contenu à un sens variable suivant les expérimentateurs par un référentiel concret et précis qui certes recèle une part d'arbitraire lié aux choix initial de notre population de molécules et des descripteurs d'odeurs qui leur sont associées, mais qui n'en représente pas moins une base de comparaison objective et univoque dans le contexte historique et culturel actuel des odeurs.
A partir de cette typologie élémentaire "objective" le problème se pose de recherche des proximités entre ces maillons élémentaires:
Cette proximité peut se considérer:

- Dans l'absolu.
- Sur les bases de relations entre structure chimique (notes odorantes).
- Sur la base de relations avec d'autres référentiels sensoriels (couleurs).

I-2-5- Etude des relations entre notes odorantes et caractéristiques chimiques:

ils ont déjà développé dans d'autres cadres (17, 18) les problèmes liés à l'étude des relations entre la structure chimique des molécules odorantes et leurs caractéristiques odorants prédéfinies, ces études de corrélation sont intéressants au plan de l'analyse de l'organisation du champs des odeurs. En effet à l'instar des autres recherches de relation de type structure (Activité menées aux plans biochimique ou pharmaco toxicologique [19, 20].
L'analyse globale de l'ensemble des lieux qui associent des caractères chimiques à des caractères odorants et de nature à permettre une structuration réciproque et objective de ces types d'informations:

- Classification de notes odorantes sur la base des caractéristiques chimiques de molécules [21, 22]
- classification des caractéristiques chimiques de molécules sur la base de leur association avec des notes odorantes [23, 24, 25].

Malheureusement, si la structure chimique de molécules peut être perçue à priori d'une manière plus objective que celle des notes odorantes, la description rigoureuse des éléments structuraux qui caractérisent des différents molécules n'est, au plan pratique, rien moins qu'évidente à mettre en œuvre de manière univoque.

Ainsi à l'instar des problèmes posés au niveau de la pharmacologie moléculaire, et en raison de l'impossibilité présente d'appréhender la nature exacte des interactions entre petites et grosses molécules (molécule odorante et protéine réceptrice dan le cas qu'il préoccupe) la prise en compte des éléments structuraux caractéristiques d'une population des molécules, passe, soit:

-par l'emploi des descripteurs moléculaires traditionnels: familles chimiques, fonctions, atomes, …etc.

-par celui de paramètre physico-chimiques: paramètre électronique et stériques.

-Enfin, en faisant appel à des descripteurs théoriques globaux des molécules (mécanique quantique), à la description de la molécule sous forme d'un graphe...

Pour leur part, ils ont principalement développé des études sur la base des descripteurs faisant intervenir des fragments caractéristiques des molécules (Reconnaissance des formes). Ils ne présenteront dans ce cadre, que des approches préliminaires faisant appel.

-Non pas à l'analyse sémantique des sous structures d'un groupe de composés par décomposition des tables de correction moléculaires.

-Mais en prenant appris sur une classification purement descriptive de leur population de plusieurs molécules odorantes sur la base de la présence ou de l'absence:

- D'atomes caractéristiques (C, H, N, S, Cl, …).
- Des fonctions chimique typiques (acides, alcool, éther, …)
- Et de l'appartenance à l'une aliphatique, système alicyclique, aromatique hétérocyclique, … etc.

Sans rentrer dans les détails qui sont développés par ailleurs, on peut préciser que:

- Une structuration du système sur la base des atomes présents dans la molécule montré (fig.2) que les tous aminés et alliacé caractéristiques de l'azote et du soufre sont les facteurs les plus descriminants du champ des odeurs.

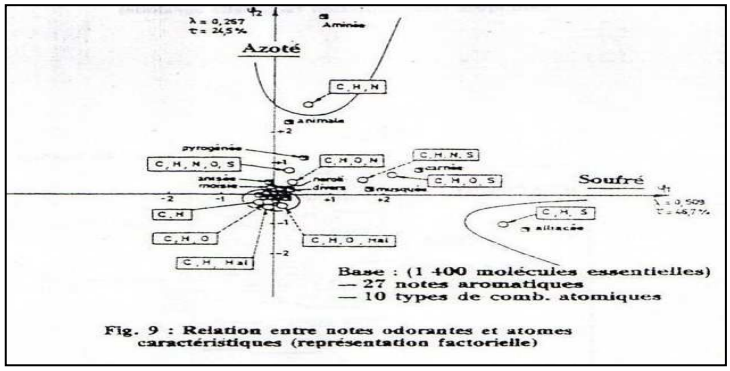


Figure (2) : Relation entre note odorantes et atomes caractéristiques (représentation factorielle)

- Une structuration chimique faisant intervenir les fonction chimiques confirme ce fait (fig.3, 4)

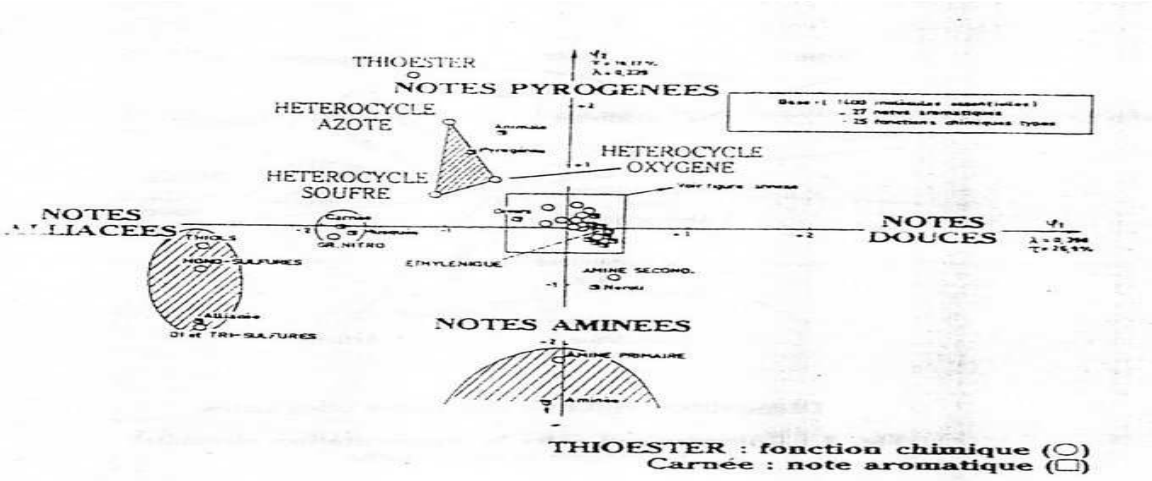


Figure (3) : Relation entre les notes odorantes et les fonctions chimiques (représentation factorielle agrandie)

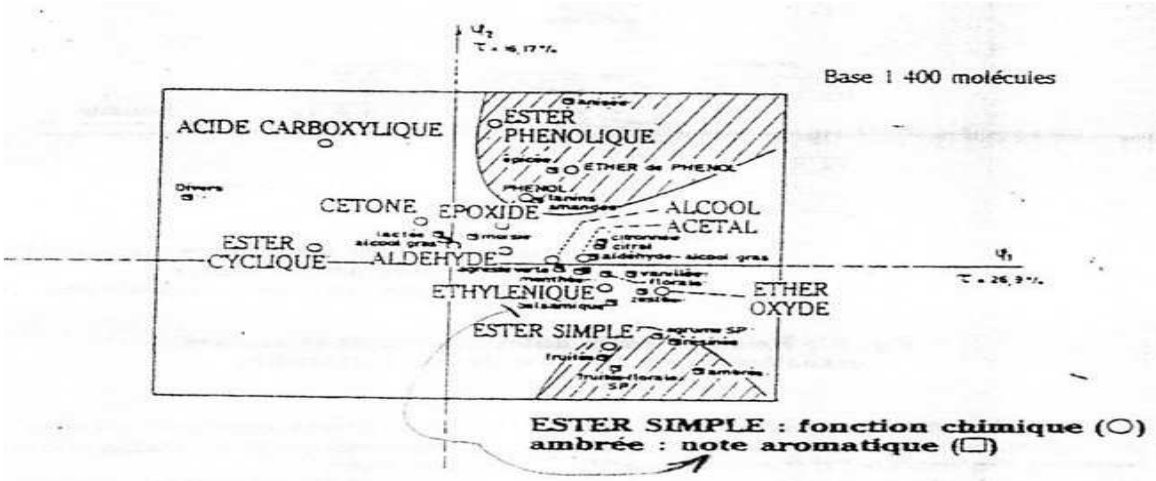


Figure (4) : Relation entre les notes odorantes et les fonctions chimiques (représentation factorielle agrandie). Suite

-Enfin une structuration développée sur la base de l'appartenance de chacune de 1336 molécules à l'une ou l'autre des 14 grandes familles moléculaires.

Les différentes structurations obtenues sur la base d'une recherche des liaisons entre caractères chimiques et notes odorantes montrant donc la cohérence des résultats avec ceux qui président pour lesquels la molécule odorante n'a pas été considérée que comme un substrat anonyme au plan structural. Il va de soi que les approches qu'ils viennent de présenter ne sont que préliminaires et schématiques. Dans des travaux plus approfondis en cours de développement, ils prennent en compte:

- Des sous structures plus complètes.
- Des échantillons des molécules plus ciblés dans un champ particulier

I-2-6- Essai de typologie de notes odorantes sur la base de descripteurs non sémantiques:

Ils ont successivement présenté des approches permettant de classer des notes sur la base d'une proximité odorante entre molécules, puis entre paramètres structuraux. Un autre moyen consiste à faire appel à d'autres catégories de descripteurs sensoriels chez des sujets n'ayant que peu d'à priori au niveau des notes odorantes, dans le mesure où l'on peut considérer que l'apprentissage "péri" et post- natal ne concerne pas tout l'espace odorant et reste limité aux relations avec la mère [26].

C'est la raison pour laquelle nous avons exploré la possibilité de classer des molécules odorantes sur la base de l'association avec des couleurs[(27] ils ont obtenu une typologie de 28 molécules de base (Tableau N) –IV et figure 5).

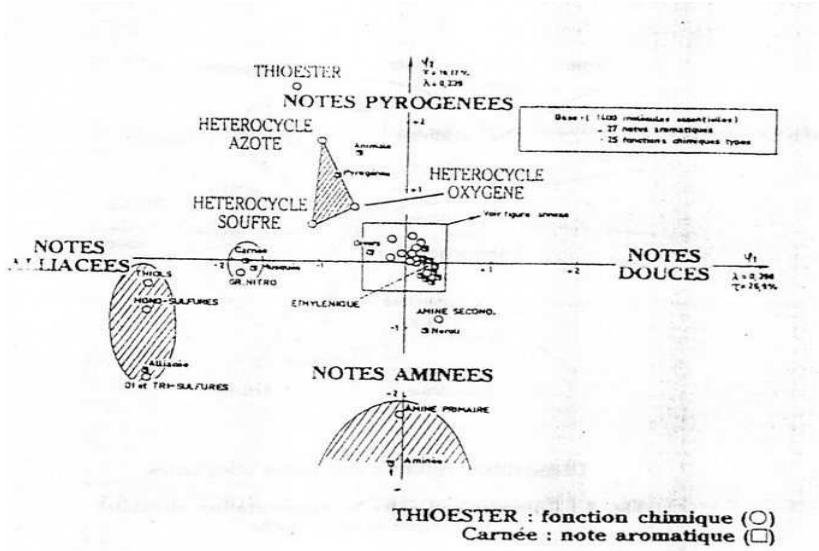


Figure (5) : relation entre notes odorantes et couleurs (projection factorielle principale).

Bien que l'interprétation de tels résultats ne puisse être que très délicate du fait que les très réponses font intervenir de nombreuses données dont une part est affective, la typologie fait apparaître certaines convergences avec les études précédentes. Les traits principaux mettent en évidence deux oppositions:

- note fruitées et notes fraîches.
- Note grasses et notes "typées".

On remarquera que les notes typées sont corrélées avec la couleur rouge qui a en général une connotation d'agressivité. On peut être surpris de trouver l'anéthol dans cette zone; cependant Engen [28] avait déjà interprété le comportement du nouveau-né soumis à la stimulation d'une anisée comme une réaction de défense.

Cette approche restait limitée dans la mesure où ils n'avaient pas alors analysé l'ensemble du spectre des odeurs défini depuis, mais cette étude a permis d'associer des relations colorées avec les odeurs dans l'élaboration de notre modèle général de classification des notes odorantes.

I-2-7- Description synthétique du champ des odeurs:

Les différentes études qui viennent d'être résumées permettent d'obtenir plusieurs images cohérentes de l'espace odorant.

Comme on a pu s'en rendre compte, ces différentes sont suffisamment convergents pour qu’ils soient en mesure d'un proposer une synthèse.

Les approches statistiques utilisées leur permis, non seulement de structurer, mais encore de Hiérarchiser les informations disponibles sur les notes odorantes.

Alors on propose une distribution naturelle de ces différentes familles de notes odorantes car une représentation tridimensionnelle du champ des odeurs présente des inconvénients majeurs ou plans de:

- La complexité du graphisme qui ne permet pas de positionner l'ensemble des notes étudiées.
- L'utilisation concrète de cette structure pour procéder par exemple à un rangement d'échantillons de produits à la construction d'un orgue de composition, … etc.

Ces raisons leur ont amené à simplifier encore ce modèle en procédant à une projection symbolique dans un espace plan.

Afin d'obtenir un modèle schématique qui soit le plus objectif possible, ils ont exploré des années passées avec le concours d'un parfumeur, différentes possibilités de représentation du champ des odeurs.

Cette collaboration leur a conduit à présenter rapidement un premier modèle destiné à être employé dans le cadre de l'enseignement prodigué, sur la reconnaissance des substances odorantes, par l'institut supérieurs des industries de la parfumerie de la cosmétique et des Aromes. Ce modèle est toujours en vigueur, et il est utilisé avec un profil pour former chacune des promotions d'élèves de cet institut.

Depuis cette date, forts de l'expérience acquise, ils ont systématiquement recherché à améliorer ce modèle par un retour à des résultats quantitatifs.

On peut dire que la note florale qu'ils ont conservée pour respecter la traduction, est bien "à cheval" sur plusieurs familles.

Des molécules odorantes quelconques peuvent se trouver positionnées entre 2 ou plusieurs familles. Elles se situent alors:

- Soit au niveau d'une jonction, lorsqu'elles ont pu être représentées sur la figure plane.
- Soit au niveau de ponts, lorsque les connections qui existaient dans l'espace n'ont pu être transposées au niveau de système plan.

Dans la pratique, la mémorisation des substances odorantes commence toujours par un positionnement des échantillons sur notre diagramme représentatif du champ des odeurs. Ce qui permet de situer chaque entité odorant (X) par rapport à la globalité des notes.

L'identification proprement dite de cette entité n'est demandée qu'ensuite, et se trouve, ainsi facilitée par la première étape.

Bien entendu "tout positionnement" fait appel à la recherche de similitudes par rapport aux archétypes donnés, et exclut toute prise en compte d'une quelque image suggérée par la substance elle-même. Il va de soi qu'une substance n'est jamais identique à tel ou tel archétype. Mais elle viendra se placer par éliminations successives plus près de telle note que de telle autre.

On a remarqué assez souvent que les sujets procédant à de telles opérations préféraient s'exprimer en utilisant dans un premier temps le vocabulaire des couleurs avant de faire appel à des descripteurs sémantiques ou moléculaires.

Afin d'illustrer par quelques exemples types la mise en œuvre pratique de cette procédure de reconnaissance, ils peuvent citer:

- L'α. Pinène qui se trouve au cœur du pole terpénique (bleu).
- L'acétate de vétivéryle qui est caractéristique d'une des notes intermédiaires, en l'occurrence la note boisée (marron).
- Le patchoulol qui se situe entre les notes boisées et mousse moisie (marron).

Ils attirent l'attention du lecteur sur le fait que leur étude propose des descripteurs élémentaires qui devront être combinées pour décrire les produits complexes de la nature.

Cela n'est bien entendu par contradictoire avec la conception des thèmes qui présentent l'image globale vers laquelle peut tendre un "créateur" ainsi, le "thème rose" contiendra des notes fraîches, des notes florales, rosées, … etc.

I-2-8- Conclusion:

Cette description de l'organisation de l'espace odorant, qu'ils viennent de présenter, ne prétend pas proposer une $(N+1)^{ème}$ organisation théorique des notes odorantes. Elle s'est au contraire fixé comme objectif, de restituer de plus objectivement et le plus clairement possible, l'essentiel des différents points communs qui reliaient les différents modes de pensée et d'habitudes empiriques en matière d'odeur.

Des analyses synthétiques du contenu d'un grand nombre d'information hétérogènes, développées au moyen de méthodes de réduction de données multidimensionnelles, ils ont ainsi permis de mettre au jour des structures sous- jacentes stables:

Ces structures étaient en effet jusque là:

- Noyées au milieu d'un important bruit de fond.
- Ou perçues sur la base d'informations ponctuelles on d'idées personnelles "préconçues".

Ces structures "surnageantes" ont sans conteste un poids considérable dans la perception olfactive (prés de 50% de la variance l'information considérée), ce qui traduit qu'une base réelle de communication s'est progressivement insaturée dans nos civilisations au plan de la communication des odeurs.

Ils ne cherchent pas les causes de cette convergence, dans la même où les implications mises en jeu sont certainement très complexes. Ce consensus est en effet la résultante de nombreux phénomènes qui peuvent se situer au niveau de la chimie, de l'écosystème de la physiologie, de la culture globale ou de l'expérience personnelle [29]. Mais quelle qu'en soit l'origine ou les origines, on peut cependant s'interroger sur la manière dont les dépositaires d'une culture globale peuvent distinguer des caractères chimiques, sans avoir recours à une information scientifique objective.

En tout état de cause ces travaux permettent de proposer dorénavant un outil simple et cohérent pour la description des odeurs connues.

Même s'il subsiste dans cette représentation des imperfections ponctuels ou bien sillaffectif de tel ou tel utilisateur est gêné par des choix aux quels, ils leur ont dû livrer (archétype moléculaires ou odorants), il leur a semblé indispensable de proposer un système de communication qu’une fois appris, à la manière d'un alphabet, puisse permettre une

communication univoque entre les humaines dans un domaine où, à ce jour, la portée de chacun des différents systèmes utilisés n'a pas franchi le cercle étroit des ses initiateurs.

La forme des lettres que nous apprenons dans l'enfance et la manière de les prononcer ce sont en fait que la résultante de conventions spatio-temporelles. Ces conventions laissent une trace organisée qui permet de mémoriser un référentiel, or l'enseignement de l'olfaction ne permet pas jusqu'à présent de conserver ce type d'empreinte.

Ils pensent que l'approche qu'ils proposent est destinée à avoir un grand nombres d'applications pratiques, dans la mesure où son fonctionnement a pu être d'ores et déjà testé avec succès, ses principaux développements leur semblent devoir se situer ou niveau de:

- La découverte et l'apprentissage de l'odorat chez les enfants (opération que ils développent depuis 1980 dans des classes d'écoles maternelles et primaires).
- La formation d'étudiants et d'adultes à la profession.
- La communication à l'intérieur d'une entreprise ou à l'intérieur d'une profession ou bien encore entre les membres de cette profession et ses partenaires.

I-3- La position du problème:

1-3-1- problèmatique:

Durant les vingt années passées, le processus d'intégration est remarqué comme un progrès significatif dans les développements des méthodologies systématiques, outils et applications.

En particulier deux grands branches d'intégration de processus ont été développés: énergie intégration et masse intégration, l'énergie intégration a un lieu géométrique au système d'optimisation à chaud et son utilité, mais la masse intégration est un approche sur la fixation, la séparation et la génération des sources et des espèces envers les processus.

La masse intégration et par conséquent, la conception des processus a été toujours orienté au sens des bases des composés chimiques.

De plus le trackage, la manipulation et la fixation des espèces sont les outils et les clés de cette conception.

En commençant avec les composés d'équilibre aux équations de processus modèle qui sont basés sur les espèces demandés. Cependant, est ce que ces composés peuvent toujours constituent les bases pour la conception et l'optimisation de processus? La réponse est non.

Plusieurs unités de processus sont établies pour accepter ou refuser certaines propriétés des sources sans faire attention aux constituants chimiques.

Pour cette instant, la performance et la conception de la fabrication des papiers (papermaking machine) est basé aux propriétés (par exemple: réflectivité, opacité, et densité…).

La performe d'Exchange à chaud basait aux capacités à chaude pour assortir aux sources.

L'indentification chimiques de composés est seulement utilisé pour le grandissement, en déterminant les valeurs des capacités à chauds et les cœfficients des transferts à chaud.

Même exemples peuvent être donnés pour autre plusieurs unités (exemple: pression de vapeur dans le condenseur, la gravité spécifique dans la décantation, la volatilité relative dans la distillation, les cœfficients de Henry dans l'absorption…).

Les propriétés (fonctionnalités) forment les bases de performance de plusieurs unités, il peut être connu de développer la conception de procédures basées sur la résolution, (le choix) de propriétés au lieu des composés, mais est que lorsque les composés (produits) chimiques sont conservés, les propriétés sont non.

De plus, la question est: est ce qu'il est possible d'utiliser ces propriétés à la place des compositions (composé)? La réponse est oui.

Le récent travail donné par Shelly et El-Halwagi (2000) a montré qu'il est possible. De tailorer les quantités conservées, appelées qui sont des sous propriétés et permet la conservation tracking de propriétés au lieu des composés.

L'essentiel de cet approche est de développer les quantités conservées clusters qui sont reliés aux quantités non conservées (propriétés).

Les expressions de base mathématique pour ces clusters sont données par Shelly et El-Halwagi 2000 [30] sont englobées dans la section suivante.

On suppose qu'on a N_s sources, chaque source est caractérisé par N_c propriétés primaires, sont données par l'équation suivant:

$$\psi_s(P_i) = \sum_{s=1}^{N_i} x_i.\psi_i(P_{i,s}) \quad \text{(I-1)}$$

x_1: la contribution fractionnelle de la source s

C'est le flux de la source s par rapport aux flux total du mélange.

$\psi_s(P_{i,s})$ C'est l'opérateur sur $P_{i,s}$.

Qui peut être normalisé à l'opérateur adimensionnelle en divisant par sa valeur de référence.

$$\Omega_{i,s} = \frac{\psi_i(P_{i,s})}{\psi_i ref} \quad \text{(I-2)}$$

Avec, l'index de propriété augmenté (AUP), pour chaque source est définie par la somme des opérateurs des propriétés adimensionnelles.

$$AUP_s = \sum_{s=i}^{Nc} \Omega_{i,s} \qquad i=1,2,\ldots\ldots Ns \quad \text{(I-3)}$$

Le cluster a pour propriété i dans la source s, est défini comme suit:

$$C_{i,s} = \frac{\Omega_{i,s}}{AUP_s} \quad \text{.....(I-4)}$$

DE plus en plus constater pour la conservation des clusters intra sources.

C'est-à-dire pour un corps pur, on a la relation suivant:

$$\sum_{s=1}^{N_i} C_{i,s} = 1 \quad , s=1, 2, \ldots\ldots N_s \text{.....(I-5)}$$

Mais, pour la conservation des clusters inter sources, alors on est dans le cas de mélange.

Donc la relation est la suivante:

$$\overline{C_i} = \sum_{S=1}^{N_S} B_S \times C_{i,S} \qquad i=1, 2, \ldots\ldots N_C \text{ .....(I-6)}$$

Ou : $\overline{C_i}$: le cluster qui résulte de tous les individuels clusters ajoutés de N_S sources.

B_S: l'arm de cluster qui est défini comme:

$$B_S = \frac{X_S . AUP_S}{AUP} \text{.....(I-7)}$$

Ces relations (équations) sont en détails dans ce qu'il revient.

D'une façon générale, dans notre sujet, on essaye d'étudier la classification de l'odeur des molécules en se basant sur les principes des clusters, ces composantes sont basés sur les descripteurs moléculaires et quelques relations mathématiques, thermodynamiques,….

1-3-2- Les travaux de Mata:

I-3-2-1- Mata 2006:

I-3-2-1-1- Définition:

La nouvelle methodologie s'appelle: "diagramme ternaire de parfumerie" aide les parfumeurs dans la prèdiction des odeurs, permetant une évaluation rapide de la valeur d'odeur pour tous les combinaisons possibles.

Etant donné trois composés odorés et un ou plusieurs solvants, dans ce travail la determination des points ternaire de parfumerie (PTP) et lignes binaires de parfumerie (PBL) est mentionné, permetant une définition complète de "diagramme ternaire de parfumerie" (PTD) des zones odorants.

La methodologie de (PTP) et (PBL) était appliquée pour le sysème limonène – geraniol – vaniline et etanol.

1-3-2-1-2- La conception de la valeur d'odeur (OV):

Il a remarqué que la valeur d'odeur prend une grande importance, que nous aide à placer notre molécule dans un espace bien déterminé diagramme.

Pour ce la, il a trouvé les relations qui nous permettent à chercher ces valeurs, telque:

$$C_i^g = \frac{y_i \, M_i \, P}{RT} \qquad \text{.....(I-8)}$$

C_i^g : la concentration de composant i

y_i **:** la fraction molaire du composant à la phase gazeuse

M_i: la masse moléculaire.

P: la préssion totale.

R: constante du gaz parfait.

$$y_i = \gamma_i \, x_i \, \frac{P_i^{sat}}{P} \qquad \text{.....(I-9)}$$

γ_i**:** coefficient d'activité.

x_i: la fraction molaire de i dans la phase liquide.

P_i^{sat}: la préssion de vapeur saturée de composant i.

$$OV_i = \frac{C_i^g}{T\,h\,r_i} \qquad \text{.....(I-10)}$$

T h r_i**:** la concentration threshold de i dans l'air.

En combinant les équations 01 et 03 on obtient:

$$OV_i = \gamma_i \, x_i \, \frac{P_i^{sat} \, M_i}{T\,h\,r_i \, RT} \qquad \text{.....(I-11)}$$

I-3-2-1-3- Diagramme ternaire de parfumerie:

En considèrant un mélange liquide ternaire A+B+C, constitué par trois composés chimique ayant différents volatilités chaqu'un a un type de note d'odeur qui représente comme suite:

Note top ..... A

Note moyen.....B

Note Bas.....C

On considère un solvant S qui est l'etanol qui est ajouté au mélange, en résultant c'est un mélange quaternaire appelé "parfum teste".

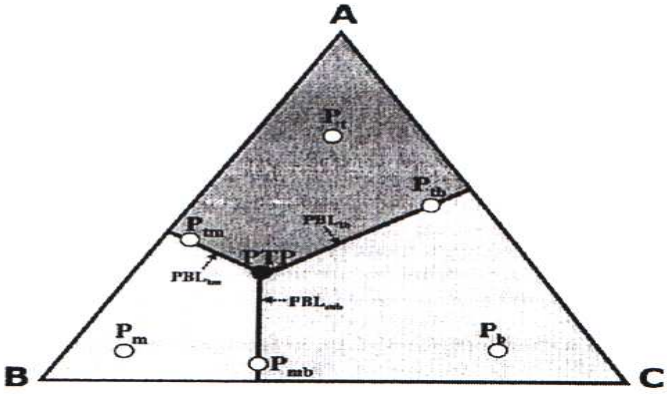


Figure (6): Diagramme ternaire da parfumerie montrant les lignes binaires de parfumerie et le points ternaire de parfumerie

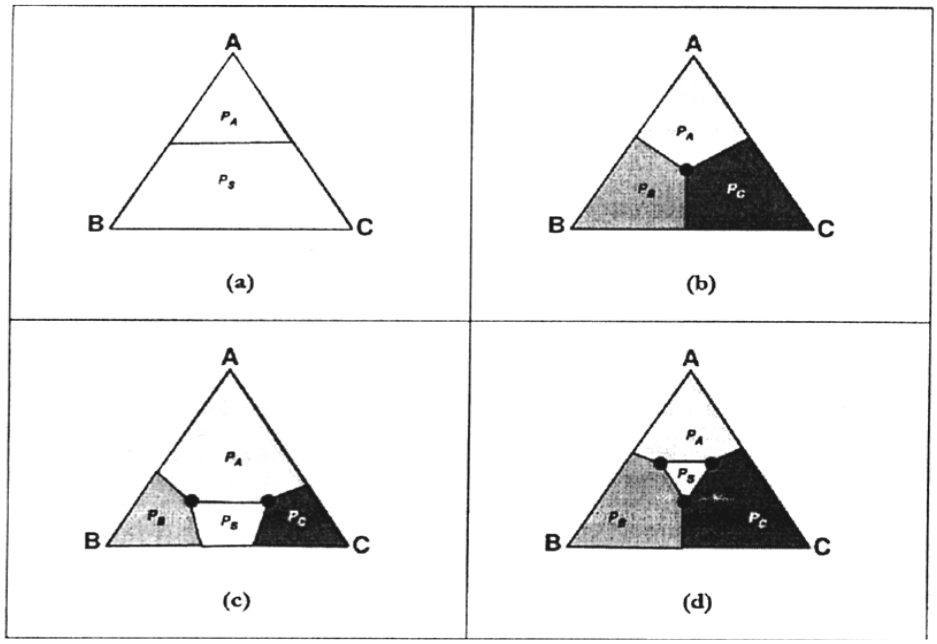


Figure (7): Diagrammes ternaire de parfumerie (PTD_s) ayant différents nombres de points ternaire de parfumerie (PTP).

(a)0 PTP, (b) 1 PTP, (c) 2 PTP, et (d) 3 PTP.

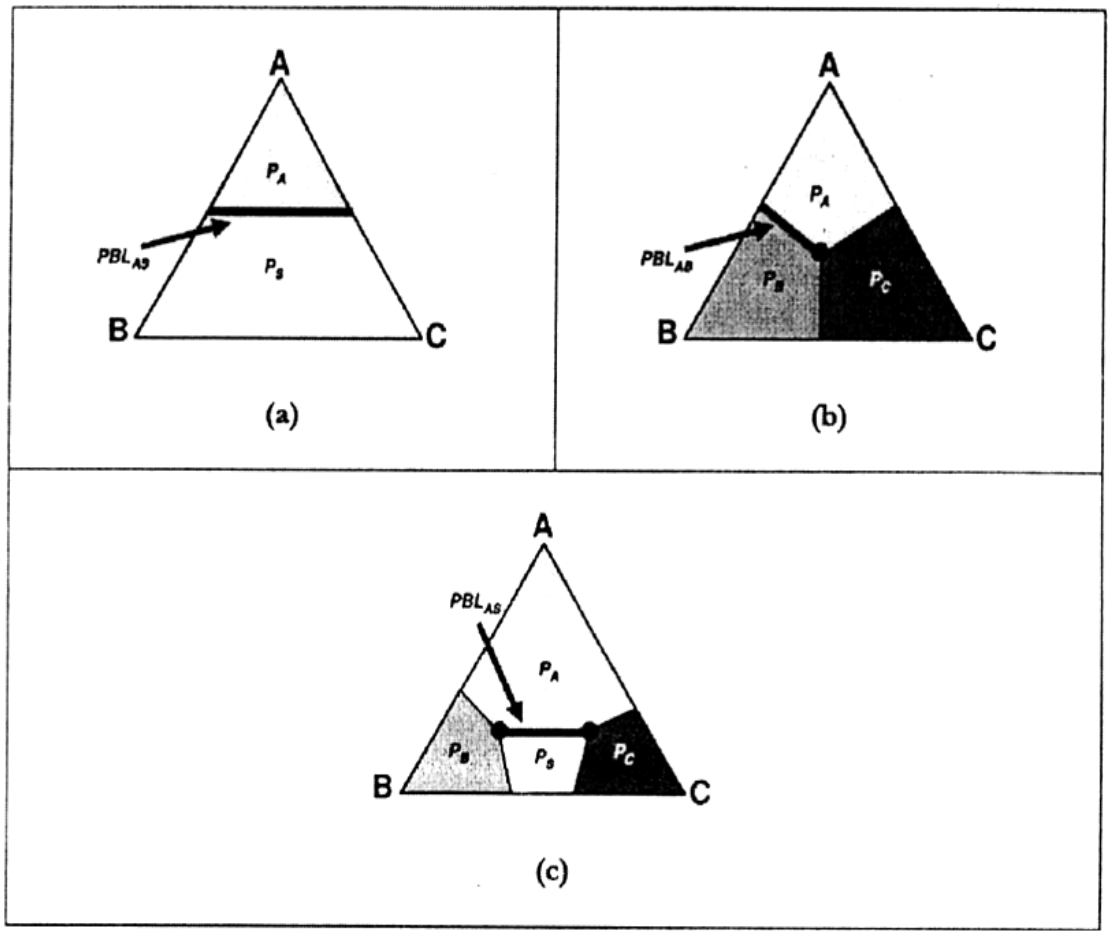


Figure (8): Diagrammes trnaire de parfumerie ayant différents types de lignes binaire de parfumerie.

I-3-2-1-4- Conclusion:

La definition complète de chaque diagramme ternaire de parfumerie PTD est developpé dans ce travail, basée sur la determination de lignes binaires de parfumerie (PBL) et les points ternaire de parfumerie (PTP).

Cette méthode était basée sur des solution severes des systèmes non linéaires des équations, en utilisant la modification d'algorithme hybrid de powell et l'approximation de différence finie de Jaccobien.

I-3-2-2- Mata 2005:

I-3-2-2-1- Définition:

La nouvelle conception de diagramme ternaire de parfumaire (PTP), basée sur l'analyse entre la structure pyramide de parfum et les diagrammes ternaire d'engenering est mentionnée.

Ces diagrammes permettent une rapide évaluation théorique de la valeur d'odeur pour tous les concentrations possibles de la mélange liquide qui est constituée par trois composants

odorants et un base de solvant, de plus les interactions moléculaire sont analysées d'une bon façon.

C'est le même exemple qu'on doit appliqué (limonène – geraniol – vaniline et etanol).
Les valeurs des odeurs (OV) ont les mêmes formules mentionées au paravant (Mata 2006).

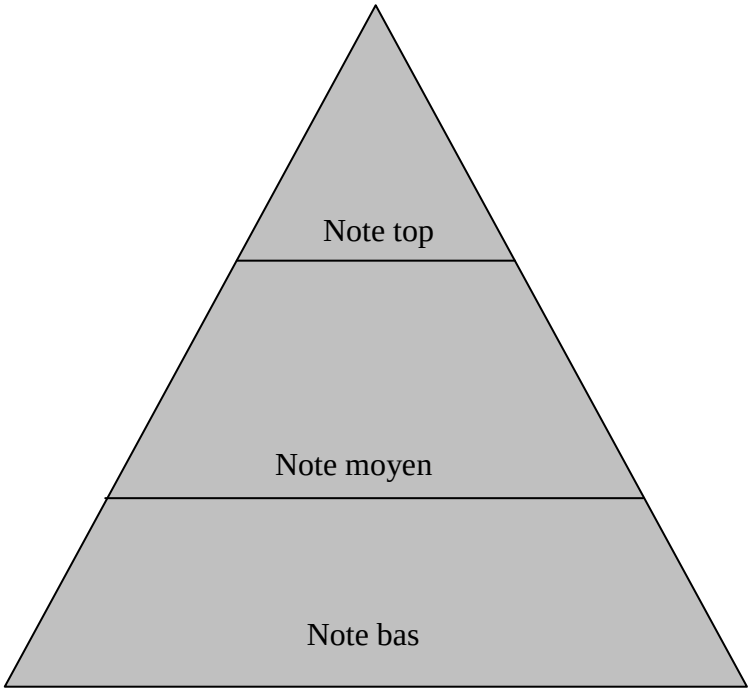


Figure (9): structure pyramide de parfum

I-3-2-2-2- Objectives de ce travail:

Cette nouvelle méthodologie est developpée pour aider les parfumeurs dans la prèdiction de la valeur d'odeur pour la mélange ternaire de parfum qui peut être dilué ou non dans l'ethanol.

I-3-2-2-3- Mélanges binaires de parfum:

On considère un mélange de liquide binaire A+B, consiste de deux composants chimiques ayant différents volatilités, chaqu'un a un type note de fragrant qui est:

A: représente note top.

B: représente note moyen.

I-3-2-2-4- Mélange ternaire de parfum:

On considère un mélange de liquide ternaire A+B+C, consistant de trois composants chimique des différents volatilités, chaqu'un a un type note de fragrant qui est:

A: représente note top.

B: représente note moyen.

C: représente note bas.

I-3-2-2-5- Conclusion:

La prèdiction de cette méthodologie de mélange des parfums binaire et ternaire dans la base de solvant était developpée.

Cette technique est basée sur la conception de diagramlme ternaire de parfumerie qui permet une prèdiction théoriquie rapide de la Valeur d'Odeur (VO) pour chaque combinaison de ces matriels dans la solution de liquide correspondant.

La conception de (PTD) était appliqué pour le système limonène – geraniol – vaniline et etanol.

I-3-3- Travaux de Fadwa – Shelly et El Halwagi:

I-3-3-1- Fadwa El-Jack :

Elle a basé sur les contributions des groupes, leurs travaux sont en détails dans ce qui suit.

I-3-3-2- Mark D-Shelly:

I-3-3-2-1- Définition:

Ils ont introduit de 1er temps un technique de clustering qui utilise des propriétés aux lieu des espèce chimiques. Ce problème est adressé le recovery et l'allocation de complexe des mélanges infinies des composés hydrocarbonés. Deux propriétés fondamentales de la conservation d'inter et d'intra sources qui permettent le développement de constituants des règles additives le long avec la représentation ternaire.

Le découplage des équations constitutives de l'équilibre et les équations contraintes permet pour la conception du problème conventionnel d'être reformulée comme deux problèmes inverses.

La première conception (variables constitutives) sont identifiées et les buts de cette conception sont assortis par la relation des équations constitutives pour employer les récents techniques de propriétés de clusters, une constatation des variables est donnée, mais la deuxième problème inverse resoud les équations constitutives, pour identifier les opérations unitaires les conditions d'opérations et /ou les produits par assortant les synthèses au conception des buts.

La constatation de ce problème est finie (terminée) par l'emploi des récents techniques des propriétés de clusters développés qui permet au problème de dimension élevé d'être visualisé dans deux on trois dimensions.

Ces clusters par définition satisfont à la conservation d'inter source et intra source vers les règles de mélange linéaire qui permet pour le développement le long.

Des règles additives avec leur représentation ternaire.

$F_{obj} = \min\left[A^T y + f(x)\right]$ …….(I- 12)

$h_1(x,y) = 0$ …….…..(I-13)

$h_2(x,y) = 0$ …….…..(I-14)

$\rho_1(x,y) > 0$…….…...(I-15)

$h_1(x,y) > 0$…….……(I-16)

$B.y+C.x>d$…….……..(I-17)

F.EL JACK a utilisé des équations qui obéissent et satisfont aux besoins demandés.

Par exemple:

Elle a utilisé la fonction objective F_{obj} : leur utilisation maximise et minimise les besoins et satisfait aux performances demandés.

Aussi les autres fonctions (h_1,h_2: les équations modèles de processus; g_1,g_2 représentent les processus reliés aux inéquations des contraintes mais l'inégalité de l'équation (I-17) représente les contraintes structurales qui relient le processus au produits).

I-3-3-2-2- Les techniques de propriétés de clusters *:*

L'essentiel dans cette nouvelle proche et de développer les quantités conservées appelée clusters qui sont reliées aux quantités de propriétés non conservées.

Ces clusters peuvent être expliqués comme des fonctions des propriétés primaires, sont obtenus, en décrivant la propriété des relations vers le domaine bas, dimensionnel, qui permettant pour la constatation de ce problème.

I-3-3-2-3- Fonction de propriété d'opérateur :

De clustering, l'approche utilise les propriétés des opérations qui sont des fonctions, de propriétés physiques originales primaires.

Pour chaque source, les propriétés P_{js} peuvent être évalués, en utilisant l'un des options suivantes :

-Les mesures empérique, la corrélation empérique,- la simulation de processus.

- Les moments primaires, intégraux ou algébriques les fonctions de propriété d'opérateur décrit les classes de propriété qui peuvent être décrit par la règle de mélange généralisée suivante:

$$\psi_j(P_{jM}) = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{F_s}{\sum_{s=1}^{N_s} F_s} \psi_j(l_{js}) = \sum_{s=1}^{Ns} x_s \psi_j(p_{js}) \text{ …….. (I-18)}$$

Dans l'équation (7)

$\psi_j(l_{js})$ est un opération de j^{ème} propriété P_{js} de la source S.

La formulation de cette opérateur permet pour les règles de linéaire, ces opérateurs correspondent aux propriétés actuelles comme donné dans l'équation (I-18), alors les opérateurs peuvent décrire les relations fonctionnelles ex: densité, ou les résultats de propriété de mélange de deux sources sont donnés par l'inverse de la somme avec les valeurs réciproques de propriété x par ces contributions fractionnelles x_s comme montré dans l'équation (I-19).

$$p_{jM} = \sum x_s \rho_{js} \ , \ \psi_j(p_{jM}) = p_{jM} \quad \text{…….…… (I-19)}$$

$$\psi_j(p_{js}) = p_{js}$$

$$p_{jM} = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . \frac{1}{\rho_{js}} \quad , \quad \psi_j(p_{jM}) = \frac{1}{\rho_{jM}}$$

$$\psi_j(p_{js}) = \frac{1}{\rho_{js}} \quad \text{……..……(I-20)}$$

Comme les propriétés peuvent avoir des variétés des formes fonctionnels et units, alors ces opérateurs sont normalisées vers la forme adimentionnelle en divisant par l'opérateur de référence, comme montré dans l'équation (I-21) le référence est choisi d'une façon arbitraire.

$$\Omega_{js} = \frac{\psi_j(p_{js})}{\psi_j(p_j^{ref})} \quad \text{……...…..…… (I-21)}$$

L'index de propriété on quantité AUP, pour chaque source s est définie comme la somme de NP opérateurs de propriétés adimensionnelles.

$$AUP_s = \sum_{j=1}^{Np} \Omega_{js} \quad \text{…….…….…… (I-22)}$$

Le propriété de cluster de propriété j de la sources est définie comme:

$$C_{js} = \frac{\Omega_{js}}{AUP_s} \quad \text{……... (I-23)}$$

En additionnant les clusters vers la masse intégration de structure qui permettent l'identification des stratégies optimaux pour la recovery et l'allocation.

Ces processus sont obtenus envers la constatation des outils basés sur l'optimisation des concepts.

Comme ces clusters sont tailorés pour maintenir les deux grands règles fondamentales pour la conservation inter source et intra source, le niveau des analyses peut être employé pour

identifier le recyclage de potentiels pour la constatation proposée, le nombre de cluster est limité à trois, mais lorsqu'on utilise de programmation mathématique, cette limitation est variée.

Ces détails pour la conservation de cluster à été présentée par EL-HALWAGI (2000) mais les détails des analyses prouvés que la minimisation des résultats de niveau de clusters arm dans la minimisation de la contribution fractionnelle x_s de la source correspondante est donnée par EL-HALWAGI (2004).

Les premières expressions données par ces épreuves sont présentés:

$$C_{jM} = \frac{\sum_{s=1}^{Ns} x_s \Omega_{js}}{AUP_M} = \frac{\sum_{s=1}^{Ns} x_s AUP_s C_{js}}{AUP_M} = \sum B_s . C_{js} \quad \text{.....(I-24)}$$

$$B_s = \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} \quad \text{.....(I-25)}$$

$$\sum \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} = 1 \Leftrightarrow AUP_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . AUP_s \quad \text{..... (I-26)}$$

Il peut être noté pour la visualisation proposée, le nombre de clusters est limité à trois, ce n'implique pas que le nombre de propriété décrivent chaque source est encore limité à trois. Il doit être que le nombre nécessaire de propriétés décrivant les sources de processus est 5, alors un à un décrivant aux propriétés des clusters pouvait descendre à 5 clusters, s'il est demandé de constater ce problème, alors, il est nécessaire de reformuler les descriptions de propriété d'opérateur dans un chemin dont le nombre total des opérateurs est 3, la propriété d'opérateur peut être une fonction des propriétés sevrés.

I-3-3-2-4- Visualisation et analyse:

Les clusters sont tailloirés pour les deux règles fondamentales pour la conservation inter et intra source, en ajoutant ces clusters au masse de structure qui permet l'identification de stratégies optimales pour la recovery et la précision (allocation), ces processus demandés pour obtenir envers la visualisation des outils basés sur l'optimisation de concepts, la 1ère constatation de la masse de structure est la source de sink décrit.

Cet outil permet l'identification de recyclage de mélange potentiel.

On considère, le cas de deux sources qui ne rencontrent pas les contraintes de sink de processus.

Comme le mélange de source dans l'espace de cluster suit le niveau des règles due à la dérivation de cluster, la ligne de mélange doit être une ligne droite entre les deux clusters.

Si la ligne passe envers la région du sink, le mélange direct de deux sources résulte dans l'alimentation convenable au sink.

La source sink décrivant pour ce cas est donnée dans la figure 10.

La région du sink dans la figure 6 est comme un hexagone, il pouvait être sûr que ce n'est pas toujours le cas.

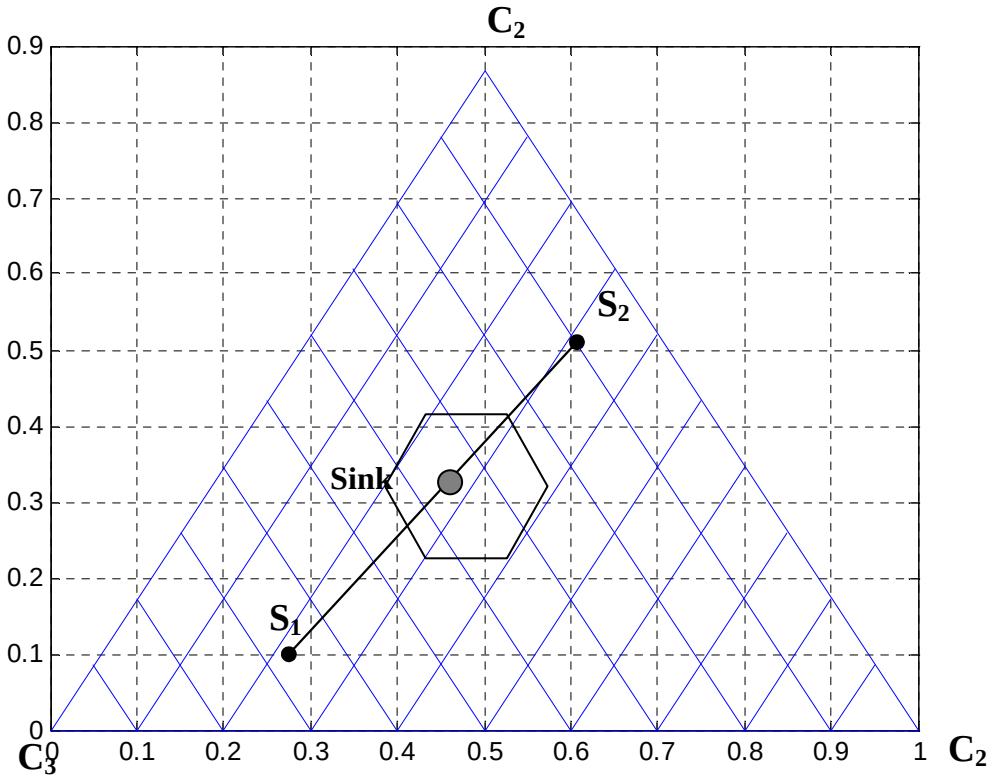


Figure (10) : Sink de source en utilisant clusters mapping

La région du sink est déterminée par les contraintes sur les conditions d'alimentation pour les processus particulière et peuvent avoir des différentes formes géométriques.

La méthode systématique pour la détermination de région du sink a été présentée par EL-HALWAGI (2004) et les résultats primaires sont hors de la ligne dans la section 5.3.

I-3-3-2-5- Les limites de la région de la feasibilité:

$$(\Omega_1^{mim},\Omega_2,^{mim},\Omega_3^{\max})(\Omega_1^{mim},\Omega_2,^{\max},\Omega_3^{\max})(\Omega_1^{mim},\Omega_2,^{\max},\Omega_3^{\min})$$
$$(\Omega_1^{\max},\Omega_2,^{\max},\Omega_3^{\min})(\Omega_1^{\max},\Omega_2,^{mim},\Omega_3^{\min})(\Omega_1^{\max},\Omega_2,^{mim},\Omega_3^{\max})$$

I-3-3-2-6- Exemple:

La conservation dans la préparation de papiers :

Dans ce cas, l'utilisation mal de constitution ou des propriétés basés au modèles.

Le cas étudié de papermaking est facilement présenté, le schéma de ce processus est donné la figure 11.

Les fragments des bois sont chimiquement faites dans un digesteur en utilisant le liquide blanc, alors le liquide noir est converti au liquide blanc pour faire le cycle (évaporation…).

La digestion est passée par un système blanchant pour produire le pulpe blanchi (fibre), après les déchets de fibres sont référés au broque, et on complète le recyclage lorsque on atteint à aucun déchet resté.

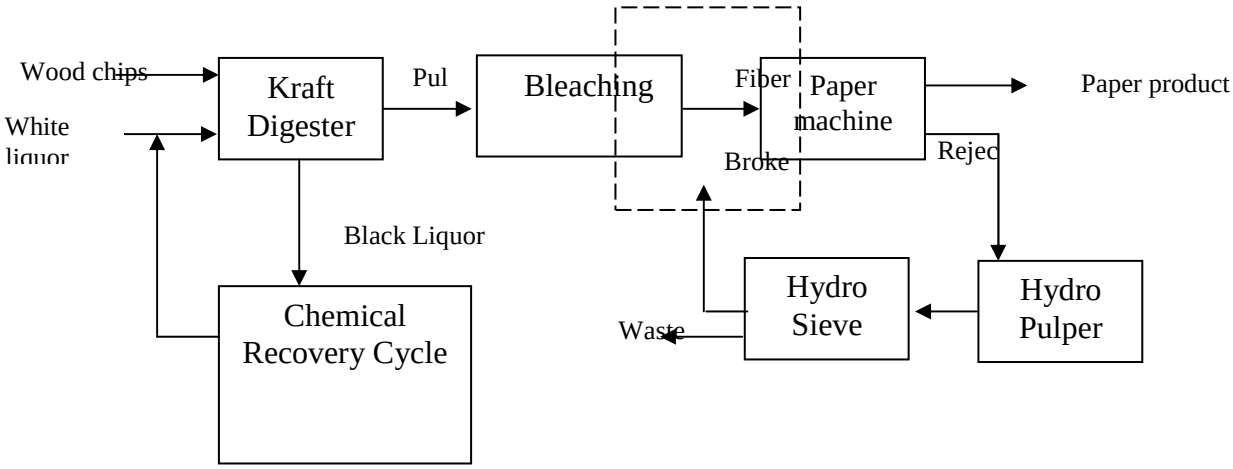


Figure (11) : Schematic representation of pulp and paper process

L'objective de ce travail est d'identifier le potentiel pour le recyclage du broque au papier machine, c'est la réduction de fibre fraîche déjà demandé et maximise l'utilisation de ressource.

Comment ces propriétés pouvaient être varié pour atteindre à leur recyclage max.

Trois propriétés primaires déterminent la performance de papier machine et par conséquent c'est la qualité de papier produite.

- Objectionnable matériel (O M) : indique les espèces indesirés dans les fibres et expresse la fonction de masse.
- Le coefficient d'absorption (k) : la propriété intensive équipant la mesure d'absorptivité de la lumière vers les fibres (le papier noire a une valeur élevé de k).
- La réflectivité (R∞) : est définie comme la réflectance d'une infinité de matériel épais comparé à la valeur standard qui est (MgO).

Les relations de ces paramètres obéissent aux équations déjà faites:

Alors:

$$OM_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_{s.} OM_S \qquad OM^{ref} = 0.01 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (\text{I-27})$$

$$K_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_s..K_s \qquad k^{ref} = 0.001 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(\text{I-28})$$

$$R_{\infty M}{}^{5.92} = \Sigma n_s.R_{\infty 5}{}^{5.92}.R_{\infty}{}^{5.92} = 1.0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (\text{I-29})$$

Les tableaux (2) et (3) donnent les propriétés des sources de fibre, et l'alimentation des contraintes pour le papier machine respectivement.

Tableau 2 : Propriété des source pour les fibres

Propriété	Fibres	Broque
OM (fraction massique)	0.000	0.115
K (m^2 /g)	0.0012	0.0013
R_∞ (fraction)	0.82	0.90
Flux (t/h)	100	30

Tableau 3 : Alimentation des contraintes pour le papier machine

Propriété	Limite bas	Limite haut
OM (fraction massique)	0.00	0.02
K (m^2 /g)	0.00115	0.00125
R_∞ (fraction)	0.80	0.90
Flux (t/h)	100	105

Du tableaux (2) et (3), il est apparent que le but pour la fin de ressource minimale de fibres fraîches est 70 t/h (100-30), il peut que tout le broque être recyclé au papier machine.

I-3-3-3- Travail d'El-HalwaGi :

I-3-3-3-1- Définition:

Son travail est basé sur les propriétés d'intégration leurs travaux sont en détails dans ce qui suit.

Les techniques standards pour le conception de processus sont basés sur la suivie (tracking) individuelle des espèces chimiques, les équilibres de matériel de constituant sont le cerveau de telle (conception) approche conceptionelle.

Plusieurs problèmes de conception ne dépendent pas des composés (constituants) mais ils sont conduits par des propriétés.

Autrefois, le concept de clustering a été introduit de permettre le trackage conservé de sous propriété.

D'ici, la conception de processus peut être optimise, basée sur les propriétés intégrantes au lieu des espèces chimiques.

Les techniques systématiques ont été développes pour cette nouvelle structure (paradigme) de propriété intégrée pour illustrer ses applicabilités.

La propriété d'intégration est définie comme une fonctionnalité basée.

L'approche de précision (allocation) et la manipulation des sources et des unités qui est basée sur la suivie, l'ajusté, le fixage, et l'assorti des fonctionnalités (propriétés) dans tous les lieux de processus.

Les règles de nouveau arm sont découvertes pour permettre l'allocation (précision) optimal qui maintenant la conservation intra et inter source des propriétés basés aux clusters.

Le problème d'intégration de propriété est décrit vers le domaine de cluster.

Ce double problème est résolue dans des termes de clusters et encore décrit le problème primaire dans le domaine de propriété

Les nouvelles règles sévères sont dérivées pour les techniques graphiques, particulièrement les règles systématiques et la visualisation des techniques pour l'identification de mélange optimal de source de ces allocations aux unités de plus, la dérivation de ce correspondance entre les clustering arms et la contribution fractionnelle de sources est présente cette correspondance, est employé pour diminuer l'utilisation de ressource fraîches par la diminution de cluster arms.

Comme les propriétés (on fonctionnalités) forment les bases de performance de plusieurs unités, il peut être très utile de développer les processus basés sur les propriétés au lieux des composés (espèces chimiques).

La question est la suivante:

Est-ce que les composants chimiques sont conservés la réponse est oui, mais les propriétés → nom.

Une autre question, est il possible de suivre ces propriétés au lieu des composés, la réponse est oui.

Le travail passé fait par SHELLY EL HALWAGI a montré que le possible de tailorer les quantités conserves (clusters) qui s'appellent (sous propriétés) et permettent au suivant conservé de propriétés au lieu des composés.

L'essentiel de cette approche de composé (petit) est de développer les quantités, conservés appelées clusters qui sont reliées aux propriétés non conservés.

Les bases des expressions mathématiques de clusters sont données par Shelly et El Halwagi (2000) sont sommés dans la section suivante.

On suppose que nous avons Ns streams, chaque source s est caractérisée par N_c de propriétés primaires.

On considère, les classes de propriétés on les règles de mélange pour chaque propriété primaire sont données par l'équation suivante:

$$\psi_j(p_{js}) = \sum_{s=1}^{Ni} x_s \psi_i(p_{i,s}) \quad \text{(I-30)}$$

Ou x_s est la contribution fractionnelle de $s^{ème}$ source vers le flux total du mélange et $\psi_i(p_{i,s})$ est l'opérateur sur $P_{i,s}$ qui peut être normalisée vers l'opérateur adimentionnelle en le divisant par sa valeur de référence.

$$\Omega_{js} = \frac{\psi_j(p_{i,s})}{\psi_i^{ref}(p_j^{ref})} \quad \text{(I-31)}$$

Alors, l'index de propriété augmenté (AUP) pour chaque source s, est définie comme la somme des opérateurs adimensionnelles de propriétés primaires

$$AUP_s = \sum_{s=1}^{Np} \Omega_{js} \quad \text{s=1,2……Ns} \quad \text{(I-32)}$$

La propriété i de cluster dans la source s est définie comme suit:

$$C_{js} = \frac{\Omega_{js}}{AUP_s} \quad \text{(I-33)}$$

De plus, on peut montrer la conservation intra sources pour les clusters.

Dans l'autre terme, pour chaque sources s, la somme de clusters doit être conservée en ajoutant à un constant (par exemple: unitaire (pur)) qui est:

$$\sum_{i=1}^{Nc} C_{i,s} = 1 \quad \text{s=1,2…….Ns} \quad \text{(I-34)}$$

Le cluster arm peut être défini comme:

$$B_s = \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} \quad \text{(I-35)}$$

$$\overline{AUP} = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . AUP_s \quad \text{(I-36)}$$

De plus, l'autre peut montrer la conservation inter source pour le mélange qui implique que:

$$\overline{C}_i = \sum_{s=1}^{Ns} B_s . C_{i,s} \quad \text{i=1,2……..Nc……} \quad \text{(I-37)}$$

Où Ci est le mean cluster résultant de l'ajout des clusters individuelle N_s.

La conservation inter source permet pour les règles de niveau de mélange d'appliquer à ce système.

I-3-3-3-2- La statut de problème:

Donne un processus avec les sources et les sinks (unités) le long avec ces propriétés et contraintes, il est demande de développer les techniques graphiques qui identifient les stratégies optimum pour l'allocation et l'interception qui intègre les propriétés des sources sink et intercepteur,

Alors, On optimise le processus objective désirable (exemple: utilisation min des ressources fraîches, utilisation max de ressources de processus, le coût min des sources externes) qui satisfont les contraintes sur les propriétés et les flux pour les sinks.

Ce problème peut être formellement étudié comme suit :

Donné un groupe de sources : SOURCES = {s/s= 1, Ns}, ces sources sont classées à deux catégories : un nombre $N_{interne}$ (processus) streans où les flux sont limités par leur avalabilité dans le processus et le nombre $N_{externe}$ des sources externes ou le coût par unité de masse est le $coût_s$.

Chaque source s est caractérisé par un groupe de propriétés: $PROP_s = \{P_{nis}\}_i = 1,2\ldots N_s$

Donné encore un groupe de sinks (unités) ou unité de processus:

SINKS ={u/u=1,N sinks}

Chaque sink a des contraints sur les propriété et le flux de ce alimentation qui est:

$P_{i,u}^{\min} \leq$ propriété de l'alimentation au sinks $\leq P_{i,u}^{\max}$ ……(I-38)

i=1,2…..N_c et u= 1,2…….N_s

$F_u^{\min} \leq$ flux de l'alimentation au sinks $\leq F_u^{\max}$ ……..(I-39)

u= 1,2…….N_s

Notre objective est de développer la constatation des outils qui optimise systématiquement certain processus objective (par exemple: utilisation min de ressources fraîches…).

Que les contraintes satisfont aux contraintes sur les propriétés et les flux pour les sinks.

I-3-3-3-3- Les analyses théoriques :

Détermination de limites de la région du feasibilité (BFR):

Comme l'étude passé, le mapping exacte de la région de la feasibilité de propriété de domaine au domaine de cluster impose la conversion de nombre infini des points feasibles.

Au lieu, il est hautement demandé d'identifier la forme exacte de la feasibilité du région hors l'énumération.

Pour une représentation précise de région de feasibilité, deux questions s'opposent

- Quelle est le nombre min des lignes limites définissant la région de la feasibilité?

- Quelles sont les expressions mathématiques pour les vertices et les lignes constituant le BFR?

Les analyses mathématiques suivant répondent à ces questions et établissent les expressions exactes pour le BFR a priori et hors l'énumération.

Considère un cluster de source s alimenté au unit u avec 3 propriétés i,j et k.

Revenons à la définition de clusters qui est donnée par l'équation (4), nous avons.

$$C_{i,s} = \frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{1 + \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{i,s}} + \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s}}} \quad \text{(I-40)}$$

$$C_{j,s} = \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{j,s}} + 1 + \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{j,s}}} \quad \text{(I-41)}$$

$$C_{k,s} = \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{k,s}} + \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{k,s}} + 1} \quad \text{(I-42)}$$

Alors :

$$C_{1,s}^{\max} = \frac{1}{1 + \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}} + \frac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{(I-43)}$$

Ou :

$\Omega_{i,s}^{\max}; \Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\min}$ sont les max, min et min valeurs feasibles de $\Omega_{i,s}^{\max}, \Omega_{i,s}^{\max}$ et $\Omega_{k,s}^{\min}$ respectivement, ils sont des valeurs calculés du domaine de propriété.

On considère un sink u, ou les contraintes pour le propriété d'opérateur ψ_i qui augmente proportionnellement avec le propriété primaire $P_{i,s}$,alors :

$$\Omega_{i,s}^{\min} = \frac{\psi(P_{i,u}^{\min})}{\psi_i^{ref}} \quad \text{(I-44)}$$

Et :

$$\Omega_{i,s}^{\min} = \frac{\psi_i(P_{i,u}^{\max})}{\psi_i^{ref}} \quad \text{(I-45)}$$

Similairement:

$$C_{i,s} = \frac{1}{1+\frac{\Omega^{\min}_{j,s}}{\Omega^{mzx}_{i,s}}+\frac{\Omega^{\min}_{k,s}}{\Omega^{\max}_{i,s}}} \quad \text{…… ……(I- 46)}$$

Même chose:

Pour: $$C^{\max}_{j,s} = \frac{1}{\frac{\Omega^{\min}_{i,s}}{\Omega^{\max}_{j,s}}+1+\frac{\Omega^{\max}_{k,s}}{\Omega^{\min}_{j,s}}} \quad \text{…….....(I-47)}$$

$$C^{\min}_{j,s} = \frac{1}{\frac{\Omega^{\max}_{i,s}}{\Omega^{\min}_{j,s}}+1+\frac{\Omega^{\max}_{k,s}}{\Omega^{\min}_{j,s}}} \quad \text{……... ……...(I-48)}$$

$$C^{\max}_{k,s} = \frac{1}{\frac{\Omega^{\min}_{i,s}}{\Omega^{\max}_{k,s}}+\frac{\Omega^{\min}_{j,s}}{\Omega^{\max}_{k,s}}+1} \quad \text{…… ……..(I-49)}$$

$$C^{\min}_{k,s} = \frac{1}{\frac{\Omega^{\max}_{i,s}}{\Omega^{\min}_{k,s}}+\frac{\Omega^{\min}_{j,s}}{\Omega^{\max}_{k,s}}+1} \quad \text{……(I-50)}$$

Notre stratégie pour l'identification du BFR doit commencer par la détermination de l'overestimation et le sous estimation de la région de la feasibilité, en identifiant le région centre.

On considère les diagrammes ternaires de cluster avec les sommets c_i, c_j et c_k.

La ligne parallèle d'overestimation à c_j et c_k a une valeur de i^{ème} cordonnée égale à $c_{i,s}$ comme donné par l'équation suivante.

Sur cette ligne d'overestination, nous pouvons identifier un point feasible avec:

$$\Omega^{\min}_{i,s}, \Omega^{\min}_{j,s}, \Omega^{\max}_{k,s} = \Omega^{\min}_{i,s}, \Omega^{\max}_{j,s}, \Omega^{\max}_{k,s}$$

Qui correspond au point de cluster suivant :

$$\left(\frac{\Omega^{\max}_{i,s}}{\Omega^{\max}_{i,s}+\Omega^{\min}_{j,s}+\Omega^{\max}_{k,s}}, \frac{\Omega^{\min}_{j,s}}{\Omega^{\min}_{i,s}+\Omega^{\min}_{j,s}+\Omega^{\max}_{k,s}}, \frac{\Omega^{\min}_{k,s}}{\Omega^{\min}_{i,s}+\Omega^{\min}_{j,s}+\Omega^{\max}_{k,s}}\right) \quad \text{…….(I-51)}$$

Maintenant, on doit limiter la BFR entre l'overestimation et le sous-estimation, on peut additionner les points sur le BFR, un seul chemin, l'identification de point additionnels sur le BFR est extencé les lignes de sous estimation au sommet, alors il identifie la ligne avec la pente max ou min qui passe par le point feasible, ce point doit se reposer sur le BFR, la collection de tous les points convenables identifiés sur le BFR constitue le BFR.

Dans l'ordre de maintenir cette recherche qui inclue les pentes max et min, il est utile de transformer les coordonnées ternaires de cluster en coordonnées cartésiennes, comme peut être montré du figure 12.

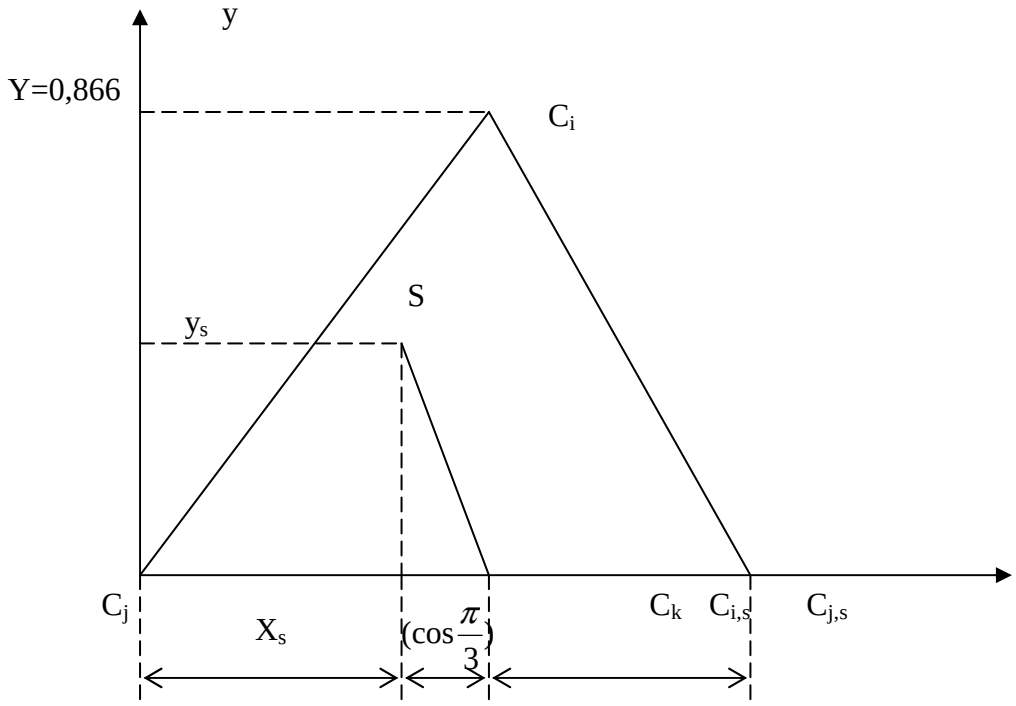


Figure (12): relation entre les coordonnées ternaires et les coordonnées cartésiennes

$$Y_s = (\sin\frac{\pi}{i,s})C_{i,s} = 0{,}866C_{i,s} = \frac{0866\Omega_{i,s}}{\Omega_{i,s}+\Omega_{j,s}+\Omega_{k,s}} \quad \text{.....(I-52)}$$

$$X_s = 1 - C_{j,s} - (\cos\frac{\pi}{3})C_{i,s}$$

$$X_s = 1 - C_{j,s} - 0{,}500C_{i,s}$$

$$X_s = \frac{0{,}500\Omega_{i,s}+\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s}+\Omega_{j,s}+\Omega_{k,s}} \quad \text{..... (I-53)}$$

On considère les deux points caractérisés par :

$(\Omega^{\min}_{i,s}, \Omega^{\min}_{j,s}, \Omega^{\max}_{k,s})$ et $(\Omega^{\min}_{i,s}, \Omega^{\max}_{j,s}, \Omega^{\max}_{k,s})$

La pente de la ligne connectant ces deux points et donnée par:

L'ordonnée à l'origine de cette pente est un point sur la ligne qui est:

$$\text{Pente} = \frac{\dfrac{0{,}866\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \dfrac{0{,}866\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\max} + \Omega_{k,s}^{\max}}}{\dfrac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\max} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \dfrac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}} = 0$$

Alors :

$$Pente = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \quad \text{.....(I-54)}$$

L'ordonnée a l'origine de cette pente est un point sur cette ligne qui est: *intercepte*

$$= 0{,}866\frac{\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \times \left(\frac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}\right) = 0 \quad \text{....(I-55)}$$

Les coordonnées a l'origine sont: C_i=0, C_j=1 , C_k =0 qui correspond à y=0, x=0, alors le zéro d'intercepte indique que la ligne droite connectant les 2 points feasibles par l'origine

$$Slope_{froin(\overline{y_0},\overline{x_v})} = \frac{0{,}866C_i - \overline{y_v}}{1 - C_i - 0{,}5C_j - \overline{x_v}} \quad \text{.....(I-56)}$$

Ou (C_i, C_j et C_k) est un point qui se repose sur le ligne menant le point de vertex.

On peut écrire cette équation d'une autre façon.

$$Slope_{froin(\overline{y_0},\overline{x_v})} = \frac{(0{,}866 - \overline{y_v})\Omega_{i,s} + y_v - \overline{y_v}\Omega_{k,s}}{(0{,}500 - \overline{x_v}) \times \Omega_{i,s} ... x_1\Omega_i\,(1 - \overline{x_v})} \quad \text{..... (I-57)}$$

$$\left[(0{,}500 - \overline{x_v}).slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} - 0{,}866 + \overline{y_v}\right] + \left[y_v - \overline{x_v}.slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})}\right]\Omega_j + \left[(100 - x_v)slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} - y_v\right]\Omega_k = 0$$

$$\overline{y_v} = 0, \qquad \overline{x_v} = 0 \quad \text{.....(I-58)}$$

Alors

$$slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s}}} \quad \text{.....(I-59)}$$

$$Minslope_{\min(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \quad \text{.....(I-60)}$$

C'est exactement la pente de la ligne connectant les deux points caractérisés par ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\max}$) et ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}, \Omega_{k,s}^{\max}$) avec les résultats qui sont des points non feasibles entre cette ligne et l'overestimateur.

Du plus la ligne connectant ces deux points se reposent aux limites actuels de BFR vraie, la dérivation peut être répété pour les autres points de BFR on considère les 2 points caractérisés par ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\max}$) et ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\min}$)

La plante de la ligne connectant ces 2 points est donnée par :

$$slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{.....(I-61)}$$

Et l'intercepte est ($\overline{y_v} = 0, \quad et \quad \overline{x_v} = 1{,}0$) qui correspond à ($C_i$=0, C_j=0 et C_k=1).

Les mêmes résultats peuvent être obtenus :

$$Slope_{fro(0,1,0)} = \frac{-0{,}866\Omega_{i,s}}{0{,}500\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s}} \quad \text{.....(I-62)}$$

Et:

$$Min \quad Slope_{(0,1,0)} = \frac{-1{,}732}{1{,}00 + 2\dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{.....(I-63)}$$

Maintenant on peut enregistrer (englober) tous les coordonnées et les pentes de BFR dans un tableau 4.

Table 1. Coordinates and Slopes for the BFR

Ternary Coordinates for the Vertex (C_i, C_j, C_k)	Cartesian Coordinates for the Vertex (Y, X)	Equation of Maximum Slope from the Vertex	Two Connecting Points on BFR	Equation for Minimum Slope from the Vertex	Two Connecting Points on BFR
(0.0, 1.0, 0.0)	(0.000, 0.000)	$\dfrac{1.732}{1.000 + 2 * \dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}}$	($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$) and ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$)	$\dfrac{1.732}{1.000 + 2 * \dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}}$	($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$) and ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$)
(1.0, 0.0, 0.0)	(0.866, 0.500)	$1.732\left(\dfrac{1 + \dfrac{\Omega_{j,s}^{\max}}{\Omega_{k,s}^{\min}}}{1 - \dfrac{\Omega_{j,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}}\right)$	($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$) and ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$)	$1.732\left(\dfrac{1 + \dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{k,s}^{\max}}}{1 - \dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}}\right)$	($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$) and ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$)
(0.0, 0.0, 1.0)	(0.000, 1.000)	$\dfrac{-1.732}{1.000 + 2 * \dfrac{\Omega_{j,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}}$	($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$) and ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$)	$\dfrac{-1.732}{1.000 + 2 * \dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}}$	($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$) and ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$)

Tableau (4) : Coordonnés de pentes pour le BFR.

I-3-4- Résumé de l'approche:

On peut dire que FADWA a basé sur les contributions des groupes pour placer les molécules, c'est à dire, il a utilisé le masse intégration en suivant les 2 règles fondamentales de la conservation d'intra et inter source.

Lorsqu'on a un source et un sink, la ligne passant par le sink résulte un point feasible, et on a constaté que ce région est un hexagone, presque le même cas que pour ELHALWAGI, mais ne pas toujours le même cas(hexagone).

On peut conclure que FADWA a basé sur les contributions des groupes, la liaison source-sink, mélange, pour placer les clusters dans ce lieu, en suivant les deux règles.

Comme on a fait dans la partie bibliographique, Shelly et EL HALWAGI ont basé sur les intégrations des propriétés pour placer les molécules dans un lieu géométrique (diagramme ternaire), mais FADWA EL-JACK a basé sur les contributions des groupes.

Notre travail est l'étudier la classification de l'odeur des molécules, en se basant sur les principes des clusters, ces composants sont basés sur les descripteurs moléculaires et quelques relations mathématiques.

Ces savants ont fait les travaux mentionnés au paravant, ils ont abouti aux résultats, et presque ils ont utilisé les mêmes équations, mais chaqu'un a basé sur des principes logiques.

Maintenant, pour mon travail qui est le suivant :

J'applique les mêmes équations qu'ils ont appliqué, mais avec la projection des ces équations aux bases de données.

Alors :

Je posais : $\psi_i(p_{i,s})$ comme des descripteurs

Ces descripteurs sont des (propriétés moléculaires, charges, indices topologiques, ….)

Et après, je calculais :

$$\Omega_{i,s} = \frac{\psi_i(p_{i,s})}{\psi_i^{ref}(p_i)}$$

Lorsqu'on dit que $\psi_i(p_{i,s})$ sont des descripteurs dans l'application, on utilise les valeurs des ces descripteurs.

$\psi_i(p_{i,s})$: la valeur de référence de ψ_i est choisie d'une façon arbitraire de tel façon qu'elle obéisse à la relation suivante :

$$\psi^{\min} \leq \Psi^{ref} \leq \Psi^{\max}$$

Après le choix de Ψ^{ref} et le calcule de $\Omega_{i,s}$.

On calcule maintenant, AUP_s.

$$AUP_s = \sum_{i=1}^{Np} \Omega_{i,s}$$

i=1,3 (diagramme ternaire).

s= la source (le molécule).

Et enfin, on calcule les $C_{i,s}$

$$C_{i,s} = \frac{\Omega_{i,s}}{AUP_s}.$$

Et puisque, notre travail est basé sur les principes de clusters dans un diagramme ternaire, alors, on calcul seulement les $C_{i,s}$ (i=1,3) ($C_{1,s}$, $C_{2,s}$, $C_{3,s}$).

($C_{1,s}$, $C_{2,s}$, $C_{3,s}$) : les coordonnées d'un point de ce diagramme.

Pour placer, ces molécules (odeur des molécules) dans ce diagramme, on a utilisé un programme qui sert à exécuter ce genre de problèmes.

Le logiciel utilisé, c'est le MATLAB, version 6.5, ce dernier a pour but de placer les points dans un lieu géométrique.

L'organigramme s'exécute comme suit :

- on a pris les valeurs de $\Psi^{ref}=\Psi^{ma.x}$
- on a pris les valeurs de ψ qui sont les descripteurs (AMW, Ss, Se ….)
- on a calculé les valeurs de $\Omega_{i,s}$ (i= 1 ; 3).
- Puis on a calculé les valeurs de AUP_s.
- Et enfin on a calculé les valeurs de $C_{i,s}$; (i= 1 ; 3).

$C_{i,s}$: représente les coordonnées des points qui doivent situer dans le triangle.

- on répète l'exécution plusieurs fois pour des différentes combinaisons**.**

II-1- Introduction :

Après avoir vu l'importance de ce travail et sa relation avec les industries des arômes et des parfums. Autre chose les champs des odeurs et comment on a les placés d'après J.N. Jaubert, et on a terminé par la problèmatique (position du problème) qui est résumée comme suit:

- Comment doit-on placer les clusters dans ce diagramme?
- Après on a parlé sur les travaux faits par Mata 2005-2006, Shelly et El Halwagi 2004-2005 et on a fait une approche entre ces travaux.
- Maintenant, on doit appliqué ces derniers pour avoir les utilités et l'importance dans notre vie.

Est ce qu'on peut placer ces clusters ou ces composants dans un lieu géomètrique?

Quelles sont les problèmes que nous attendent pour placer ces clusters?

Plusieurs travaux faites concernant les zone odorants dans les diagrammes ternaires, parmi ces travaux, ceux qui ont fait par:

II-2- Développement mathématique de l'approche:

II-2-1- Travaux de Mata :

II-2-1-1- Mata 2006:

La nouvelle methodologie s'appelle: "diagramme ternaire de parfumerie" aide les parfumeurs dans la prèdiction des odeurs, permetant une évaluation rapide de la valeur d'odeur pour tous les combinaisons possibles.

II-2-1-2- La conception de la valeur d'odeur (OV):

$$C_i^g = \frac{y_i \, M_i \, P}{RT} \quad \text{..... (II-1)}$$

C_i^g : la concentration de composant i

y_i **:** la fraction molaire du composant à la phase gazeuse

M_i: la masse moléculaire.

P: la préssion totale.

R: constante du gaz parfait.

$$y_i = \gamma_i \, x_i \, \frac{P_i^{sat}}{P} \quad \text{..... (II-2)}$$

γ_i**:** coefficient d'activité.

$\mathbf{x_i}$: la fraction molaire de i dans la phase liquide.

$\mathbf{P_i^{sat}}$: la préssion de vapeur saturée de composant i.

$$\mathbf{OV_i = \frac{C_i^g}{T\,h\,r_i}} \quad \text{..... (II-3)}$$

T h r_i: la concentration threshold de i dans l'air.

En combinant les équations 01 et 03 on obtient:

$$\mathbf{OV_i = \gamma_i\, x_i\, \frac{P_i^{sat}\, M_i}{T\,h\,r_i\, RT}} \quad \text{..... (II-4)}$$

II-2-1-3- Diagramme ternaire de parfumerie:

En considèrant un mélange liquide ternaire A+B+C, constitué par trois composés chimiques ayant différents volatilités, chaqu'un a un type de note d'odeur qui représente comme suite:

Note top ..... A

Note moyen.....B

Note Bas.....C

On considère un solvant S qui est l'etanol qui est ajouté au mélange, en résultant c'est un mélange quaternaire appelé "parfum teste".

II-2-1-4- Conclusion:

La definition complète de chaque diagramme ternaire de parfumerie PTD est développée dans ce travail, basée sur la determination de lignes binaires de parfumerie (PBL) et les points ternaire de parfumerie (PTP).

II-2-2- Mata 2005:

II-2-2-1- Définition:

La nouvelle conception de diagramme ternaire de parfumaire (PTP), basée sur l'analyse entre la structure pyramide de parfum et les diagrammes ternaires d'engeigner est mentionnée.

II-2-2-2- Objectives de ce travail:

Cette nouvelle méthodologie est developpée pour aider les parfumeurs dans la prèdiction de la valeur d'odeur pour la mélange ternaire de parfum qui peut être dilué ou non dans l'ethanol.

II-2-2-3-Mélanges binaires de parfum:

On considère un mélange de liquide binaire A+B, consiste de deux composants chimiques ayant différents volatilités, chaqu'un a un type note de fragrant qui est:

A: représente note top.

B: représente note moyen.

II-2-2-4- Mélange ternaire de parfum:

On considère un mélange de liquide ternaire A+B+C, consistant de trois composants chimique des différents volatilités, chaqu'un a un type note de fragrant qui est:

A: représente note top.

B: représente note moyen.

C: représente note bas.

II-2-2-5- Conclusion:

La prèdiction de cette méthodologie de mélange des parfums binaire et ternaire dans la base de solvant était developpée.

Cette technique est basée sur la conseption de diagramlme ternaire de parfumerie qui permet une prèdiction théoriquie rapide de la valeur d'odeur (OV) pour chaque combinaison de ces matriels dans la solution de liquide correspondant.

La conception de (PTD) était appliqué pour le système limonène – geraniol – vaniline et etanol.

II-2-3- Travaux de Shelly et El-Halwagi

II-2-3-1- Introduction

Les techniques standards pour la conception de processus sont basées sur le trackage individuel des espèces chimiques des composants qui sont le coeur de chaque approche.

L'essentiel de cette approche est de développer les quantités conservées appelés clusters qui sont reliés aux propriètés non conservées.

Pour cela on a utilisé des expressions des bases mathématique de clusters qui sont donnés par Shelly et El Halwagi (2000).

II-2-3-2- Développement mathèmatique de ce travaux:

Pour placer les clusters dans le diagramme, on a utilisé des équations de base mathèmatique

$$\Omega_{js} = \frac{\psi_j(p_{i,s})}{\psi_i^{ref}(p_j^{ref})} \quad \text{…….....….(II-5)}$$

$$AUP_s = \sum_{s=1}^{Np} \Omega_{js} \quad \text{s=1,2……Ns ……(II-6)}$$

$$C_{js} = \frac{\Omega_{js}}{AUP_s} \quad \text{…….…..(II-7)}$$

$$\sum_{i=1}^{Nc} C_{i,s} = 1 \quad \text{s=1,2…….Ns ……..(II-8)}$$

Le cluster arm peut être défini comme:

$$B_s = \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} \quad \text{…….(II-9)}$$

$$\overline{AUP} = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . AUP_s \quad \text{…….(II-10)}$$

De plus, l'autre peut montrer la conservation inter source pour le mélange qui implique que:

$$\overline{C}_i = \sum_{s=1}^{Ns} B_s . C_{i,s} \quad \text{i=1,2……..Nc……..... (II-12)}$$

Chaque sink a des contraints sur les propriétés et le flux de ce alimentation qui est:

$$P_{i,u}^{\min} \leq \text{propriété de l'alimentation au sinks} \leq P_{i,u}^{\max} \quad \text{……(II-13)}$$

i=1,2…..N_c et u= 1,2…….N_s

$$F_u^{\min} \leq \text{flux de l'alimentation au sinks} \leq F_u^{\max} \quad \text{…….(II-14)}$$

u= 1,2…….N_s

Considère un cluster de source s alimenté au unit u avec 3 propriétés i,j et k.

Revenons à la définition de clusters qui est donnée par l'équation (4), nous avons.

$$C_{i,s} = \frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{1 + \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{i,s}} + \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s}}} \quad \text{…….. (II-15)}$$

$$C_{j,s} = \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{j,s}} + 1 + \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{j,s}}} \quad \text{……..(II-16)}$$

$$C_{k,s} = \frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}}{\Omega_{k,s}} + \frac{\Omega_{j,s}}{\Omega_{k,s}} + 1} \quad \text{…… (II-17)}$$

Alors :

$$C_{1,s}^{\max} = \frac{1}{1 + \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}} + \frac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{…… (II-18)}$$

Ou :

$\Omega_{i,s}^{\max}; \Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\min}$ sont les max, min et min valeurs feasibles de $\Omega_{i,s}^{\max}, \Omega_{i,s}^{\max}$ et $\Omega_{k,s}^{\min}$ respectivement, ils sont des valeurs calculés du domaine de propriété.

On considère un sink u, ou les contraintes pour le propriété d'opérateur ψ_i qui augmente proportionnellement avec le propriété primaire $P_{i,s}$,alors :

$$\Omega_{i,s}^{\min} = \frac{\psi(P_{i,u}^{\min})}{\psi_i^{ref}} \quad \text{……..(II-19)}$$

Et :

$$\Omega_{i,s}^{\min} = \frac{\psi_i(P_{i,u}^{\max})}{\psi_i^{ref}} \quad \text{……... ……..(II-20)}$$

Similairement:

$$C_{i,s} = \frac{1}{1 + \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{mzx}} + \frac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{……. ……(II-21)}$$

Même chose:

Pour: $$C_{j,s}^{\max} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{j,s}^{\max}} + 1 + \frac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{j,s}^{\min}}} \quad \text{…….....(II-22)}$$

$$C_{j,s}^{\min} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}^{\max}}{\Omega_{j,s}^{\min}} + 1 + \frac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{j,s}^{\min}}} \quad \text{……... ……...(II-23)}$$

$$C_{k,s}^{\max} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{k,s}^{\max}} + \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{k,s}^{\max}} + 1} \quad \text{……. ……..(II-24)}$$

$$C_{k,s}^{\min} = \frac{1}{\frac{\Omega_{i,s}^{\max}}{\Omega_{k,s}^{\min}} + \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{k,s}^{\max}} + 1} \quad \text{.....(II-25)}$$

Notre stratégie pour l'identification du BFR doit commencer par la détermination de l'overestimation et le sous estimation de la région de la feasibilité, en identifiant le région centre.

On considère les diagrammes ternaires de cluster avec les sommets c_i, c_j et c_k.

La ligne parallèle d'overestimation à c_j et c_k a une valeur de $i^{ème}$ cordonnée égale à $c_{i,s}$ comme donné par l'équation (14).

Sur cette ligne d'overestination, nous pouvons identifier un point feasible avec:

$$\Omega_{i,s}^{\min}, \Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\max} = \Omega_{i,s}^{\min}, \Omega_{j,s}^{\max}, \Omega_{k,s}^{\max}$$

Qui correspond au point de cluster suivant :

$$\left(\frac{\Omega_{i,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\max} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}, \frac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}, \frac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}\right) \text{.....(II-26)}$$

D'après le triangle de la figure 8, on a:

$$Y_s = (\sin\frac{\pi}{i,s})C_{i,s} = 0{,}866C_{i,s} = \frac{0866\Omega_{i,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} \text{.....(II-27)}$$

$$X_s = 1 - C_{j,s} - (\cos\frac{\pi}{3})C_{i,s}$$

$$X_s = 1 - C_{j,s} - 0{,}500C_{i,s}$$

$$X_s = \frac{0{,}500\Omega_{i,s} + \Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s} + \Omega_{k,s}} \text{..... (II-28)}$$

On considère les deux points caractérisés par :

$(\Omega_{i,s}^{\min}, \Omega_{j,s}^{\min}, \Omega_{k,s}^{\max})$ et $(\Omega_{i,s}^{\min}, \Omega_{j,s}^{\max}, \Omega_{k,s}^{\max})$

La pente de la ligne connectant ces deux points est donnée par:

L'ordonnée à l'origine de cette pente est un point sur la ligne qui est:

$$\text{Pente} = \frac{\frac{0{,}866\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \frac{0{,}866\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\max} + \Omega_{k,s}^{\max}}}{\frac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\max} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \frac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}} = 0$$

Alors :

$$Pente = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\frac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \quad \text{……..…..(II-29)}$$

L'ordonnée a l'origine de cette pente est un point sur cette ligne qui est: *intercepte*

$$= 0{,}866\frac{\Omega_{i,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}} - \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\frac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \times \left(\frac{0{,}500\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min} + \Omega_{j,s}^{\min} + \Omega_{k,s}^{\max}}\right) = 0 \text{ ….(II-30)}$$

Les coordonnées a l'origine sont: C_i=0, C_j=1 , C_k =0 qui correspond à y=0, x=0, alors le zéro d'intercepte indique que la ligne droite connectant les 2 points feasibles par l'origine

$$Slope_{froin(\overline{y_0},\overline{x_v})} = \frac{0{,}866C_i - \overline{y}_v}{1 - C_i - 0{,}5C_j - \overline{x_v}} \quad \text{……...…(II-31)}$$

Ou (C_i, C_j et C_k) est un point qui se repose sur le ligne menant le point de vertex.

On peut écrire (27) d'une autre façon.

$$Slope_{froin(\overline{y_0},\overline{x_v})} = \frac{(0{,}866 - \overline{y_v})\Omega_{i,s} + y_v - \overline{y}_v\Omega_{k,s}}{(0{,}500 - \overline{x_v}) \times \Omega_{i,s} ... x_1\Omega_i\,(1 - \overline{x_v})} \quad \text{……. (II-32)}$$

$$\left[(0{,}500 - \overline{x_v}).slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} - 0{,}866 + \overline{y_v}\right] + \left[y_v - \overline{x_v}.slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})}\right]\Omega_j + \left[(100 - x_v)slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} - y_v\right]\overline{\Omega}_k = 0$$
(29)

$$\overline{y_v} = 0, \qquad \overline{x_v} = 0 \text{ .....(II-3)}$$

Alors

$$slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\frac{\Omega_{k,s}}{\Omega_{i,s}}} \quad \text{.....(II-34)}$$

$$Minslope_{\min(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\frac{\Omega_{k,s}^{\max}}{\Omega_{i,s}^{\min}}} \quad \text{……...(II-35)}$$

C'est exactement la pente de la ligne connectant les deux points caractérisés par ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$) et ($\Omega_{i,s}^{\min}$, $\Omega_{j,s}^{\max}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$) avec les résultats qui sont des points non feasibles entre cette ligne et l'overestimateur.

Du plus la ligne connectant ces deux points se reposent aux limites actuels de BFR vraie, la dérivation peut être répété pour les autres points de BFR ou considère les 2 points caractérisés par ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\max}$) et ($\Omega_{i,s}^{\max}$, $\Omega_{j,s}^{\min}$, $\Omega_{k,s}^{\min}$)

La plante de la ligne connectant ces 2 points est donnée par :

$$slope_{(\overline{y_v},\overline{x_v})} = \frac{1{,}732}{1{,}000 + 2\dfrac{\Omega_{k,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{…….(II-36)}$$

Et l'intercepte est ($\overline{y_v} = 0, \quad et \quad \overline{x_v} = 1{,}0$) qui correspond à (C_i=0, C_j=0 et C_k=1).

Les mêmes résultats peuvent être obtenus :

$$Slope_{fro(0,1,0)} = \frac{-0{,}866\Omega_{i,s}}{0{,}500\Omega_{i,s} + \Omega_{j,s}} \quad \text{…….(II-37)}$$

et:

$$Min \quad Slope_{(0,1,0)} = \frac{-1{,}732}{1{,}00 + 2\dfrac{\Omega_{j,s}^{\min}}{\Omega_{i,s}^{\max}}} \quad \text{……..(II-38)}$$

II-2-4- Travaux de Fadwa El Jack:

II-2-4-1- Introduction:

La decouplage des équations permet pour la reformulation de ce problème ou des grands problèmes inverses.

La première problème est l'inverse du problème de la simulation ou le modèle de processus est resolue dans des termes de variables au lieu de variables de processus, mais la seconde problème résoud les équations constitutives.

Les clusters par définition obéissent à la conservation d'inter et d'intra sources.

II-2-4-2- Développement mathèmatique de ce travaux::

L'approche de cluster utilise les propriètés d'opérateurs qui sont des fonctions de proriètés physique**s** primaires et originales.

Les fonctions de propriètés d'opérateurs décrivent la classe de propriètés qui peuvent être décrit par la régle généralisée du mélange.

$$\psi_j(P_{jM}) = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{F_s}{\sum_{s=1}^{N_s} F_s} \psi_j(l_{js}) = \sum_{s=1}^{Ns} x_s \psi_j(p_{js}) \quad \text{……..... (II-39)}$$

Dans l'équation (7)

$\psi_j(l_{js})$ est un opération de j^{ème} propriété P_{js} de la source S.

La formulation de cette opérateur permet pour les règles linéaires, ces opérateurs correspondent aux propriétés actuelles comme donné dans l'équation (8), alors les opérateurs peuvent décrire les relations fonctionnel ex: densité, ou les résultats de propriété de mélange

de deux sources sont donnés par l'inverse de la somme avec les valeurs réciproques de propriété x par ces contributions fractionnelles x_s comme montré dans l'équation (9).

$$p_{jM} = \sum x_s \rho_{js} \ , \ \psi_j(p_{jM}) = p_{jM} \quad \text{…….....…. (II-40)}$$

$$\psi_j(p_{js}) = p_{js}$$

$$p_{jM} = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . \frac{1}{\rho_{js}} \quad , \quad \psi_j(p_{jM}) = \frac{1}{\rho_{jM}}$$

$$\psi_j(p_{js}) = \frac{1}{\rho_{js}} \quad \text{…….....…(II-41)}$$

Comme les propriétés peuvent avoir des variétés des formes fonctionnels et units, alors ces opérateurs sont normalisées vers la forme adimentionnelle en divisant par l'opérateur de référence, comme montré dans l'équation (10) le référence est choisi d'une façon arbitraire.

$$\Omega_{js} = \frac{\psi_j(p_{js})}{\psi_j(p_j^{ref})} \quad \text{…….....…. (II-42)}$$

L'index de propriété on quantité AUP, pour chaque source s est défini comme la somme de NP opérateurs de propriétés adimensionnelles.

$$AUP_s = \sum_{j=1}^{Np} \Omega_{js} \quad \text{…….....…. (II-43)}$$

Le propriété de cluster de propriété j de la sources est défini comme:

$$C_{js} = \frac{\Omega_{js}}{AUP_s} \quad \text{……..... (II-44)}$$

Les premières expressions données par ces épreuves sont présentés:

$$C_{jM} = \frac{\sum_{s=1}^{Ns} x_s \Omega_{js}}{AUP_M} = \frac{\sum_{s=1}^{Ns} x_s AUP_s C_{js}}{AUP_M} = \sum B_s . C_{js} \quad \text{……(II-45)}$$

$$B_s = \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} \quad \text{…….....…(II-46)}$$

$$\sum \frac{x_s AUP_s}{AUP_M} = 1 \Leftrightarrow AUP_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_s . AUP_s \quad \text{……..... (II-47)}$$

Les limites de la région de la feasibilité :

$$(\Omega_1^{mim}, \Omega_2,^{mim}, \Omega_3^{\max})(\Omega_1^{mim}, \Omega_2,^{\max}, \Omega_3^{\max})(\Omega_1^{mim}, \Omega_2,^{\max}, \Omega_3^{\min})$$
$$(\Omega_1^{\max}, \Omega_2,^{\max}, \Omega_3^{\min})(\Omega_1^{\max}, \Omega_2,^{mim}, \Omega_3^{\min})(\Omega_1^{\max}, \Omega_2,^{mim}, \Omega_3^{\max})$$

- Trois propriétés primaires déterminent la performance de papier machine et par conséquent c'est la qualité de papier produite.

Les relations de ces paramètres obéissent aux équations déjà faites:

Alors:

$$OM_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_{s.} OM_S \qquad OM^{ref} = 0.01 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (\text{II-48})$$

$$K_M = \sum_{s=1}^{Ns} x_s .. K_s \qquad k^{ref} = 0.001 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (\text{II-49})$$

$$R_{\infty M}{}^{5.92} = \Sigma n_s . R_{\infty 5}{}^{5.92} . R_{\infty}{}^{5.92} = 1.0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (\text{II-50})$$

II-3-Les différentes organigrammes et programmes:

II-3-1- Définition:

Dans notre mémoire, on a utilisé $\psi_i(p_{i,s})$**:** qui est l'opérateur, cette dernière peut être normalisé vers l'operateur on le divisant par sa référence

$$\Omega_{i,s} = \frac{\psi_i(p_{i,s})}{\psi_i^{ref}(p_i)} \quad [\Psi^{ref} : \text{choisi d'une façon arbitraire tel que } \psi^{\min} \leq \Psi^{ref} \leq \Psi^{\max}]$$

Et après on calcule, l'index de propriété augmenté *AUP*

$$AUP_s = \sum_{i=1}^{Np} \Omega_{i,s}$$

Et enfin on calcule le $C_{i,s}$ comme suit:

$$C_{i,s} = \frac{\Omega_{i,s}}{AUP_s}$$

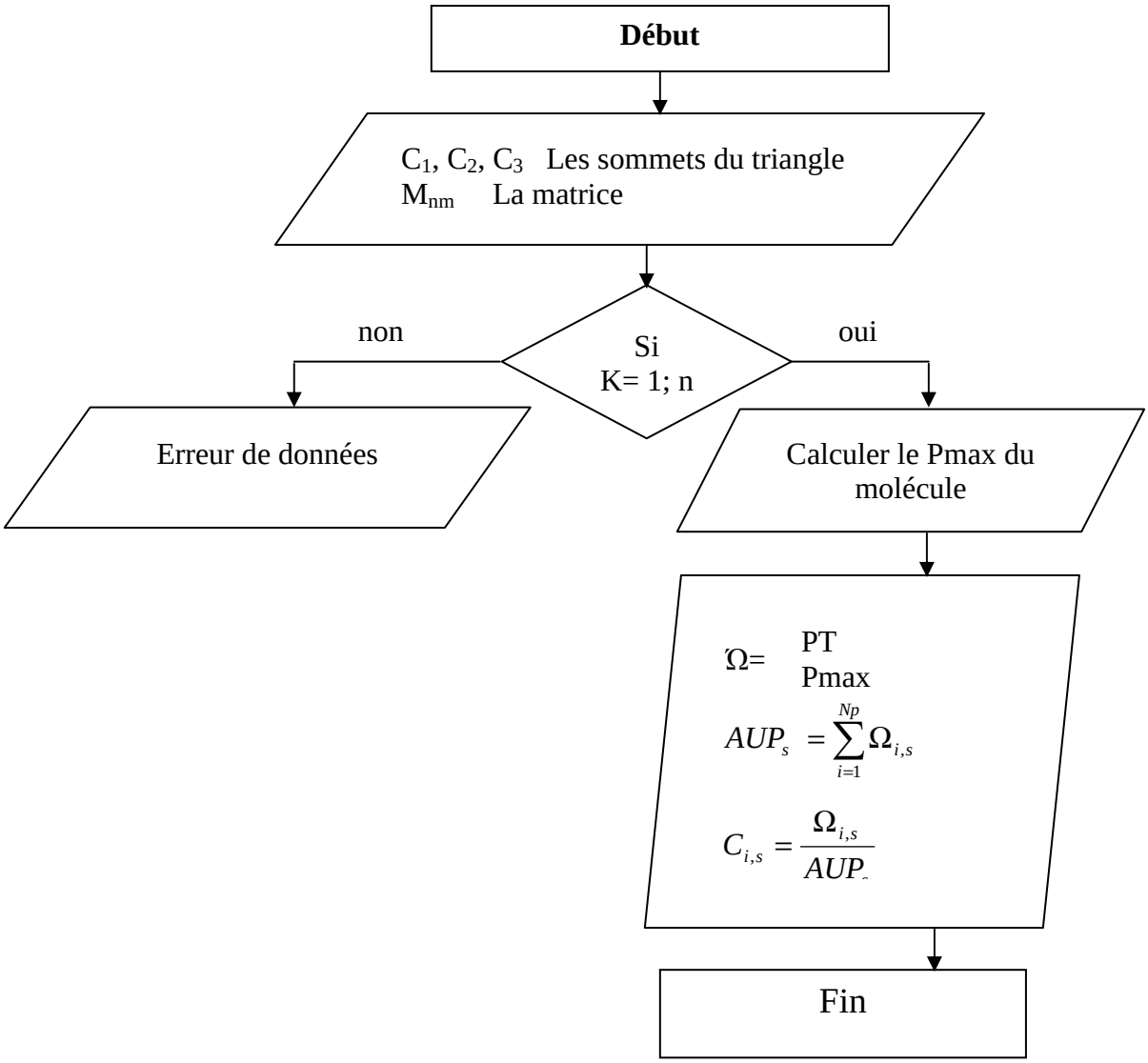
Puisqu'on a des blocks des données qui accumulent les odeurs qu'on doit les placer dans ces diagrammes.

Alors

Ces bases des données se trouvent sous forme des matrices ou le nombre des colonnes indique le nombre des paramétres de ces odeurs et le nombre des lignes indique les molécules.

Et pour placer ces odeurs dans ces diagrammes, on a utilisé plusieurs organigrammes, l'un d'eux est comme les suivants:

II-3-2- Organigramme I:



Puisqu'on a entraine de placer les points dans ce triangle alors:

On doit

a)- chercher les équations qui nous aide a tracer les lignes a l'interieur du triangle (équilateral).

b)- on prend la matrice [UUU]=[n,m] [n: nombre des colonnes, m: nombre des lignes]

pour k= 1; n (k: nombre des paramètres]

Pmax = max [UUU] (P: l'operateur)

Pour J = 1; m (J: le nombre des itérations)

C'est à dire lorsque les iterations sont très grandes alors les points se grandissent et le contraire.

Puisqu'on a dans un diagramme ternaire, chaque fois on prend trois valeurs et on met les coordonnées d'un points et on suit la même procedure jusqu'à atteindre les coordonnées de plusieurs points.

Et puisqu'on a trois groupes des odeurs (Nutty, Green, Belleper)

Alors chaque fois on cherche les coordonnées des molécules de chaque groupes jusqu'on obtient dans chaque diagramme tous les odeurs des molécules..

On repète ce procedure plusieurs fois en changeant les combinaisons, puisqu'on a trois groupe et pour chaqu'un on a 20 sous groupes (Nutty 23, Green 32, Belleper 43)

Et l'assemblage de chaqu'un de sous groupes elabore tous les molécules.

Mais les combinaisons doivent être choisis d'une façon à savoir les paramètres de chaque sous groupe et leur importance.

II-3-3- Conclusion:

On peut conclure qu'après le placement des molécules dans ce diagramme pour différents cas, on a constaté que ces trois groupes des odeurs sont placés dans le même place (pas eloignés) alors la localisation des molécules est mauvaise.

Et enfin on a abouti au mauvais résultats.

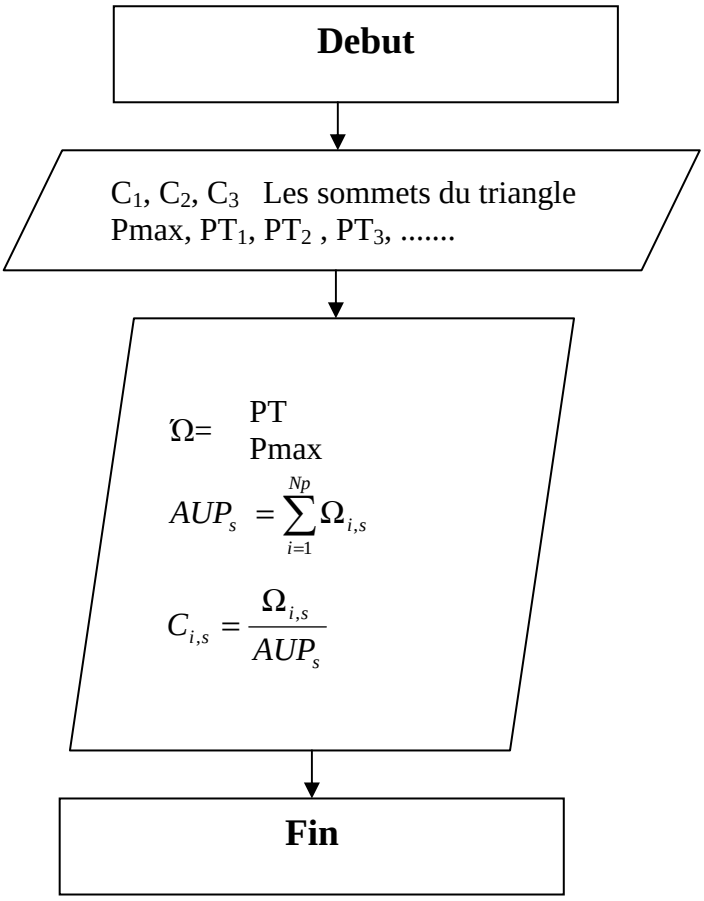
II-3-4-Programme I:

```
clc
clear
%close all
%%%%%  pour triangle
plot([0 1],[0 0]),hold on
plot([0 0.5],[0 0.866]),hold on
plot([0.5 1],[0.866 0]),hold on
a2=sqrt(3)
for i=1:9
    xi=i*0.1;  yi= a2*(0.5+xi/2) -a2*xi;
   plot([xi 0.5+xi/2],[0 yi]),hold on
   yi= -a2*xi/2 +a2*xi;
   plot([xi xi/2],[0 yi]),hold on
end
grid on
%%%%%%%%%%%%%%%%%%% paramètres à varier%%%%%%%%%%
%%%%%%% NUTTY%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
load moleculardatan2
[n,m]=size(UUU);
for k=1:n
    Pmax=max(UUU(k,:));
   for j=1:200
j1=round(rand*length(UUU(k,:)));
while j1==0
    j1=round(rand*length(UUU(k,:)));
end
  j2=round(rand*length(UUU(k,:)));
while j2==0
    j2=round(rand*length(UUU(k,:)));
end
j3=round(rand*length(UUU(k,:)));
```

```
while j3==0
   j3=round(rand*length(UUU(k,:)));
end
PT=[UUU(kj,1);UUU(k,j2); UUU(k,j3)]
%
%
% %%%%%%%% GREEN %%%%%%%%%%
% load moleculardatay5
%
% [n,m]=size(UUU);
% for k=1:n
%     Pmax=max(UUU(k,:));
%    for j=1:200
% j1=round(rand*length(UUU(k,:)));
% while j1==0
%     j1=round(rand*length(UUU(k,:)));
% end
%   j2=round(rand*length(UUU(:,k)));
% while j2==0
%     j2=round(rand*length(UUU(:,k)));
% end
% j3=round(rand*length(UUU(:,k)));
% while j3==0
%     j3=round(rand*length(UUU(:,k)));
% end
% PT=[UUU(j1,k);UUU(j2,k); UUU(j3,k)]
%%%%%%%%%%%%%%%%%% BELLEPER %%%%%%%%%%%%%%
% load moleculardataz12
% % WWW = AMW  ARR  Me   Mp   Ms   RBF nBO  nO;
% [n,m]=size(UUU);
% for k=1:m
%     Pmax=max(UUU(:,k));
%    for j=1:200
% j1=round(rand*length(UUU(:,k)));
% while j1==0
%     j1=round(rand*length(UUU(:,k)));
% end
%   j2=round(rand*length(UUU(:,k)));
% while j2==0
%     j2=round(rand*length(UUU(:,k)));
% end
% j3=round(rand*length(UUU(:,k)));
% while j3==0
%     j3=round(rand*length(UUU(:,k)));
% end
% PT=[UUU(j1,k);UUU(j2,k); UUU(j3,k)]
Omega=PT./Pmax
AUP=sum(Omega);
c1=Omega(1)/AUP;
c2=Omega(2)/AUP;
```

```
c3=Omega(3)/AUP;
yc3=(1-c3)*cos(pi/6);
yA=c2*cos(pi/6);
(matrice)
xA=c1+yA/tan(pi/3);
yA=c2*cos(pi/6);
plot(xA,yA,'r*')
end
%
end % end for k
```

II-3-5- Organigramme II:



a) on essaye de cherché les coordonnées pour chaque molécule, c'est à dire pour chaque sous groupe, on prend seulement une molécule.

b) On prend les valeurs de paramètres de chaque molécule puis on cherche leur valeur max, telque:

Pmax = x (valeur max)

P_{T1} = [a;b;c;x;y;z].

Après:

On doit chercher les équations que nous aident à tracer les lignes à l'interieur de triangle.

On prend la ligne qui cractérise la molécule en prenant sa valeur max et on applique les formules précédentes jusqu'à atteindre aux coordonnées de chaque molécule et on suivant ce travail jusqu'à la localisation de tous les molécules dans le diagramme.

On a remarqué que les molécules de trois groupes sont éloignés ce qui implique qu'on a des bons résultats.

II-3-6- Conclusion:

On peut conclure, à l'aide de cet organigramme qu'on a abouti à des bons résultats

II-3-7- Programme II:

```
clc
clear
%close all
 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%paramètres à varrier
Pmax=9.01

PT1=[6.760; 7.870; 7.300]

 PTT=[PT1]
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
c3=Omega(3)/AUP;

yc3=(1-c3)*cos(pi/6);
yA=c2*cos(pi/6);

xA=c1+yA/tan(pi/3);
yA=c2*cos(pi/6);

plot(xA,yA,'b'*)
end
```

III-1- Introduction :

Avant de chercher les résultats a l'aide de ce programme ou organigramme, on doit suivre les étapes suivantes :

1. on a élaboré une base de données qui porte des molécules et leurs descripteurs.
2. on a exécuté cet organigramme en utilisant ces bases des données.
3. cet organigramme est expliqué comme suit :

- on a pris la valeur de $\Psi^{ref} = \Psi^{max}$
- on a pris les valeurs de ψ qui sont les descripteurs (AMW, Ss, Se ….)
- on a calculé les valeurs de $\Omega_{i,s}$ (i= 1 ; 3).
- Puis on a calculé les valeurs de AUP_s.
- Et enfin on a calculé les valeurs de $C_{i,s}$; (i= 1 ; 3).

$C_{i,s}$: représente les coordonnées des points qui doivent situer dans le triangle.

Maintenant, on commence les calcules des Ci, s pour les différents valeurs de Ψ

Tableau (5) : Liste des blocks

Block	Descripteur
01	**Descripteurs constitutionnelles**
02	**Indices topologiques**
03	**walk and path counts**
05	**indices d'information**
09	**indices des charges topologiques**
12	**Descripteurs géométriques**
17	**Groupes fonctionnels**
18	**Fragments des atomes centrés**
19	**Proprieties moléculaires**
20	**Charge de descripteurs**

On a choisi seulement le cas $\Psi^{ref}=\Psi^{max}$ car pour les autres ψ, on n'a pas abouti à des résultats.

Tableau (6): Les combinaisons des molécules

	Combinaisons
01	Nutty 1 + Green 1 + Belleper 1
02	Nutty 5 + Green 5 + Belleper 5
03	Nutty 3 + Green 17 + Belleper 18
04	Nutty 5 + Green 5 + Belleper 2
05	Nutty 9 + Green 12 + Belleper 20
06	Nutty 18 + Green 19 + Belleper 20
07	Nutty 5 + Green 17 + Belleper 20
08	Nutty 1 + Green 2 + Belleper 5
09	Nutty 9 + Green 12 + Belleper 12
10	Nutty 12 + Green 19 + Belleper 1
11	Nutty 9 + Green 19 + Belleper 17

Tableau (7): Les couleurs des molécules:

Molecules de Nutty

Molecules de Green

Molecules de Belleper

III-2- Résultats et discussions

$$\psi^{ref} = \psi^{max}$$

a. Combinaison des mêmes blocks de différentes odeurs

1 ère cas :

J= 1; m j: le nombre des tests

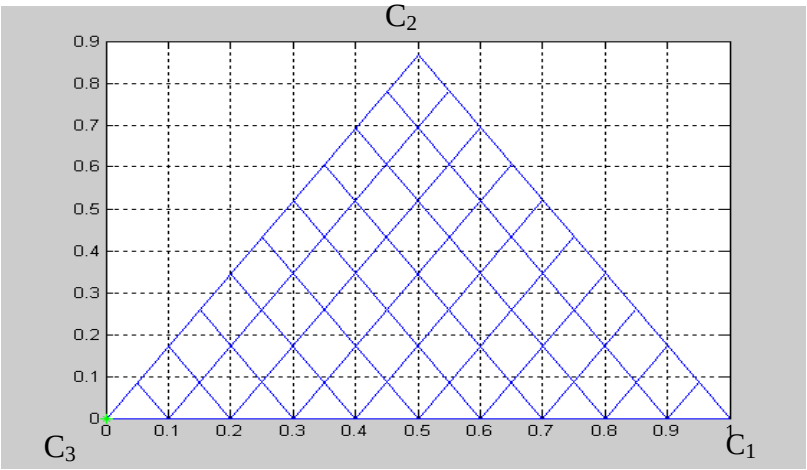


Figure $(1)_0$: La distribution de molécules (Nutty1 + Green1 +Belleper1)

Figure $(1)_0$: indique une distribution **0** dimentionnelle

On constate que la distribution de molécules sont localisés au point (0,0), puisque xA=0 , yA=0 ; on a dans une distribution **0** dimentionnel.

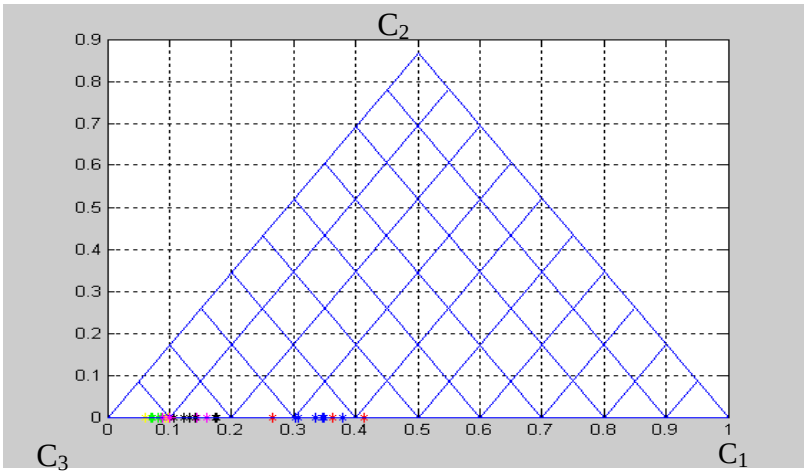


Figure $(1)_1$: La distribution de molécules (Nutty1 + Green1 +Belleper1)

Figure $(1)_1$: indique une distribution mono dimentionnelle

On constate que la distribution de molécules sont localisés sur la ligne xA , puisque yA=0 ; on a dans une distribution mono dimentionnel.

Figure (1) → figure (27): Distribution bidimentionnelle

Bloc 1 (Descripteurs constitutionnelles)

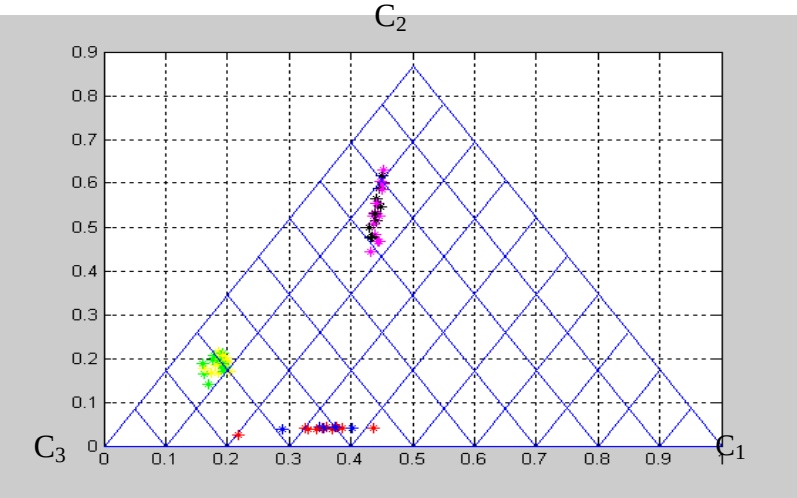


Figure (1) : La distribution de molécules (Nutty1 + Green1 +Belleper1)

On constate que les distributions de molécules (Nutty1 + Green1 +Belleper1) sont séparées, ont formés des lignes pour le Nutty et le Belleper et une forme ovale pour le Green, alors on a atteint à une meilleure distribution à cause de bonne séparation pour les types de molécules.

2ème cas :

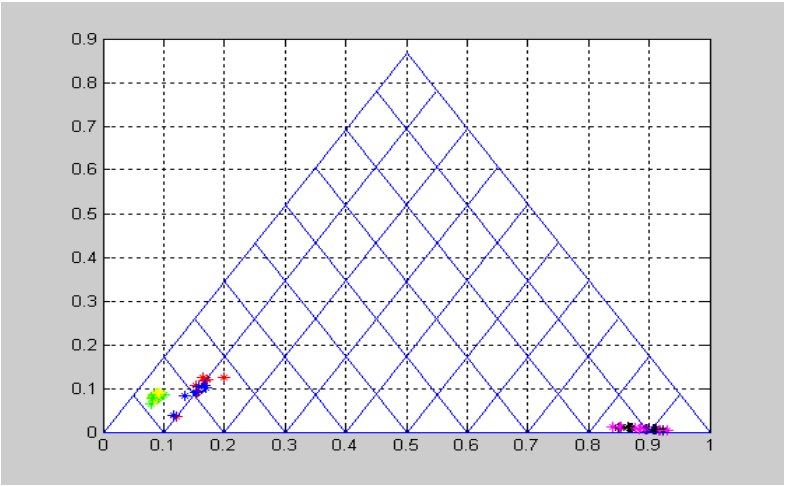


Figure (2) : La distribution de molécules (Nutty 5 + Green 5+ Belleper 5)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 5 + Green 5 + Belleper 5) sont moins séparées (les Nuttys et les Greens sont attachés, mais le Belleper est loin des autres), alors on a atteint à une meilleure distribution de Belleper d'une coté et de Nutty et Green d'une autre coté, et une distribution moyenne des molécules de (Nutty 5 + Green 5 + Belleper 5)

b. Combinaison des differents blocks de différentes odeurs

3 ème cas:

Bloc 3 (walk and path counts)

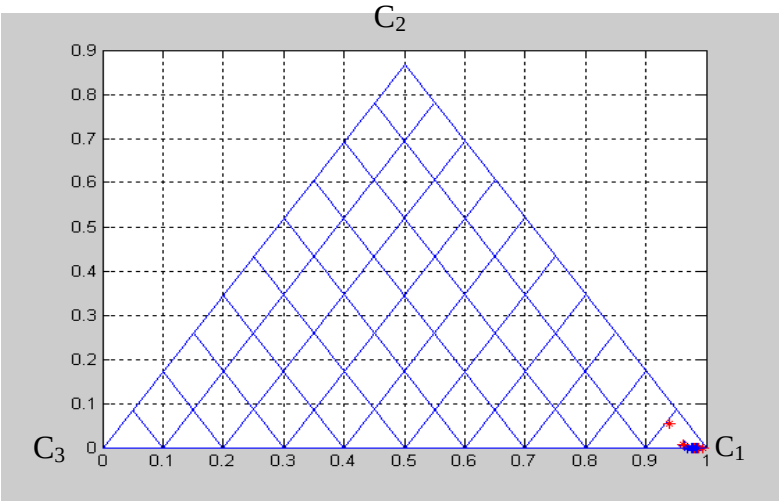


Figure (3) : La distribution de molécules de Nutty 3

On constate que La distribution de molécules de Nutty 3 est localisée au point de cluster C_1 à cause des valeurs qui se convergent.

4 ème cas :

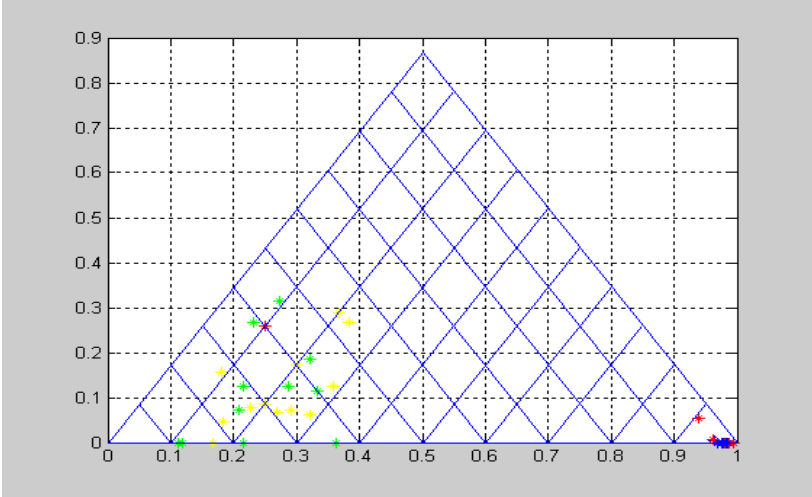


Figure (4) : La distribution de molécules (Nutty 3 + Green 17)

On constate que les distributions des molécules (Nutty 3 + Green 17) sont bien séparées, Nutty 3 est localisée au coin de C_1 et Green 17 se trouve sous forme des points distribués, on peut dire que les distributions des molécules (Nutty 3+ Green 17) sont meilleures.

5 ème cas :

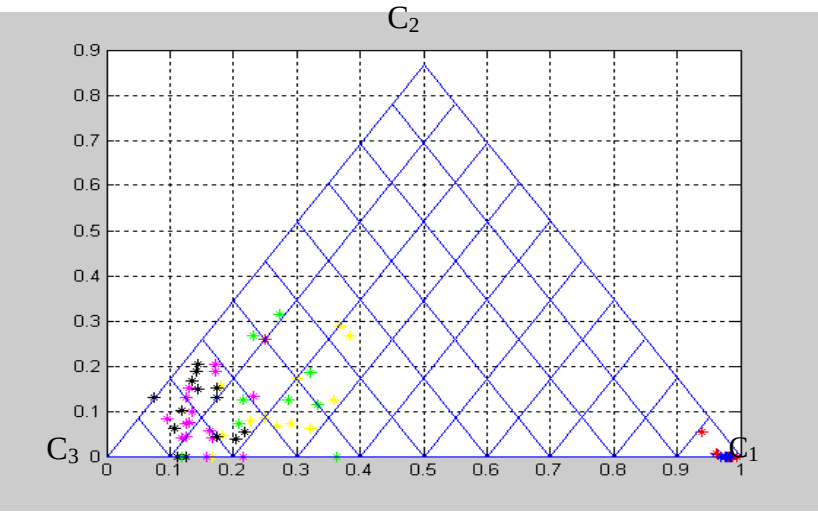


Figure (5) : La distribution de molécules (Nutty 3 + Green 17 +Belleper 18)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 3 + Green 17+ Belleper 18) sont moyennement séparées, et presque les Greens et les Bellepers sont attachés, alors, on peut dire que les distributions des molécules sont moyennes.

6 ème cas :

Bloc 5 (indices d'informations)

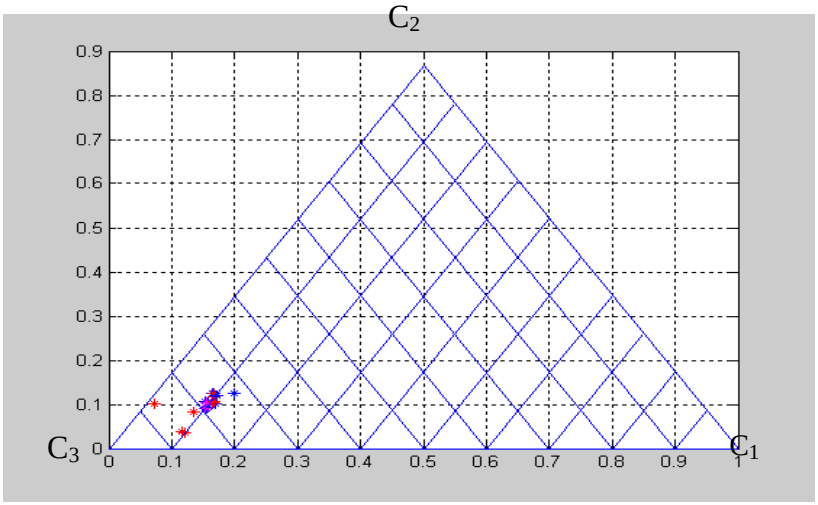


Figure (6) : La distribution de molécules de Nutty 5

On constate que les distributions des molécules de Nutty 5 sont près de C_2 sous forme des points.

7 ème cas :

Bloc 5 (indices d'informations)

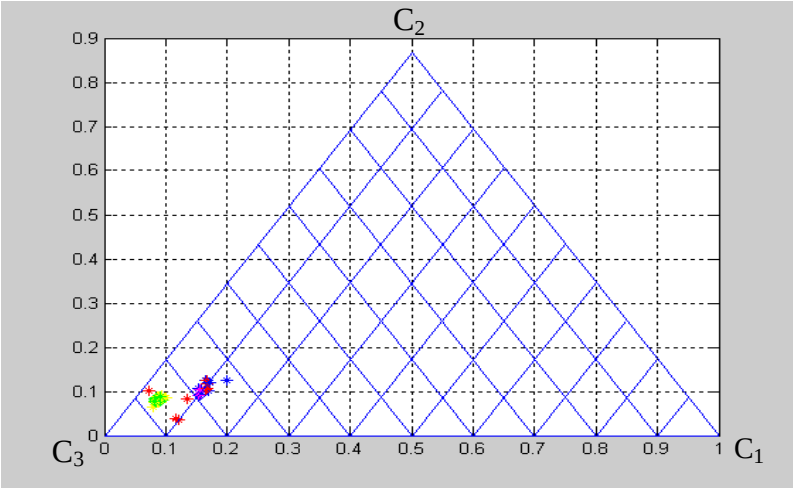


Figure (7) : La distribution de molécules (Nutty 5 + Green 5)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 5 + Green 5) sont moins séparées les une aux autres, alors, on a atteint à une distribution moins meilleure que les autres cas.

8 ème cas :

Bloc 2 (Indices topologiques)

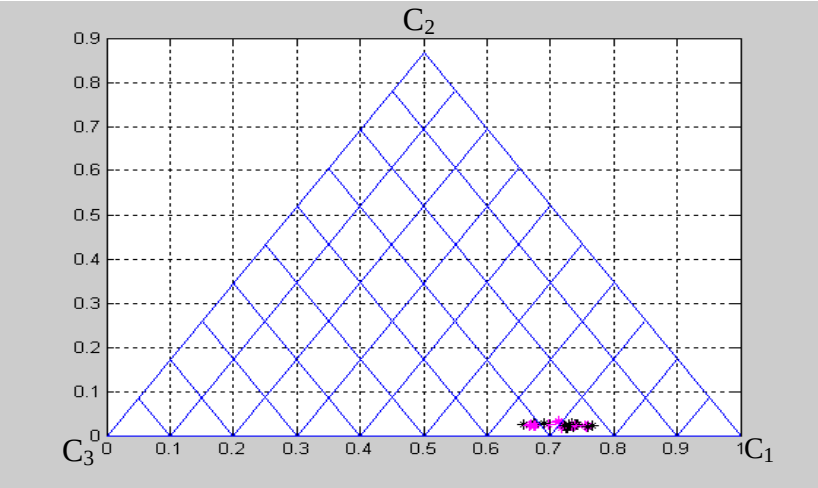


Figure (8) : La distribution de molécules de Belleper 2

On constate que les distributions des molécules de Belleper 2 formé une ligne.

9ème cas :

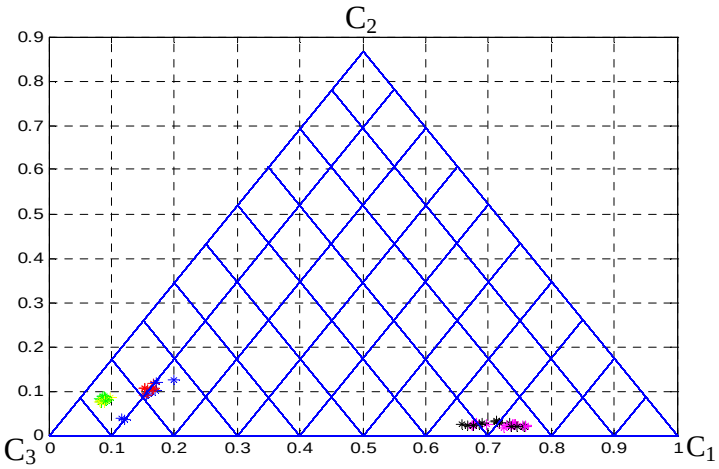


Figure (9) : La distribution de molécules (Nutty 5 + Green 5 + Belleper 2)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 5 + Green 5 + Belleper 2) sont séparées, mais les deux premiers sont près.

Alors on a atteint à une distribution moyenne.

10ème cas :

Bloc 9 (indices des charges topologiques)

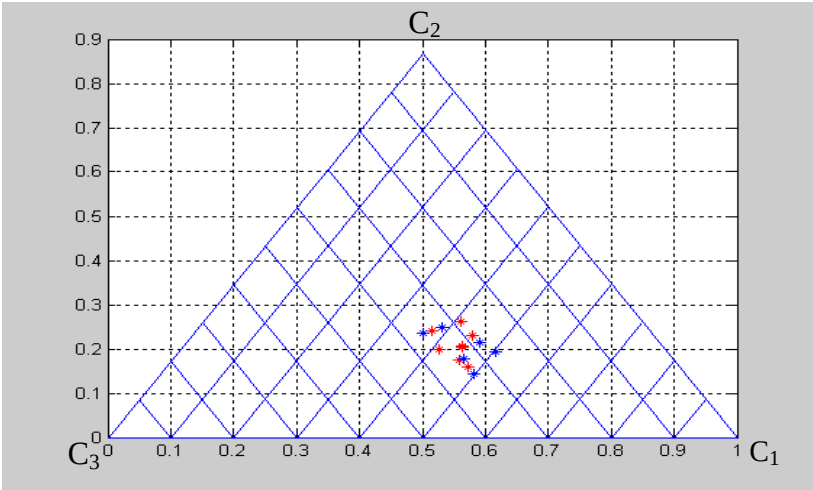


Figure (10) : La distribution de molécules de Nutty 9

On constate que les distributions des molécules de Nutty 9 se trouvent sous forme des points.

11 ème **cas :**

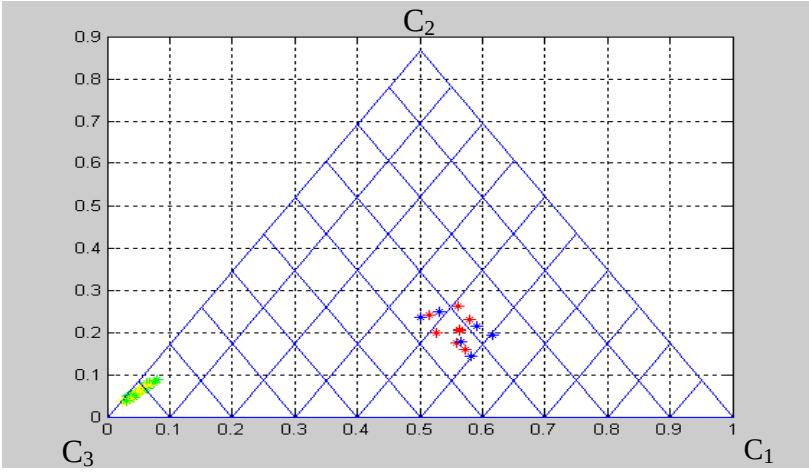


Figure (11) : La distribution de molécules (Nutty 9 + Green 12)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 9 + Green 12) sont bien séparées, alors, on a atteint à une meilleure distribution.

12 ème cas :

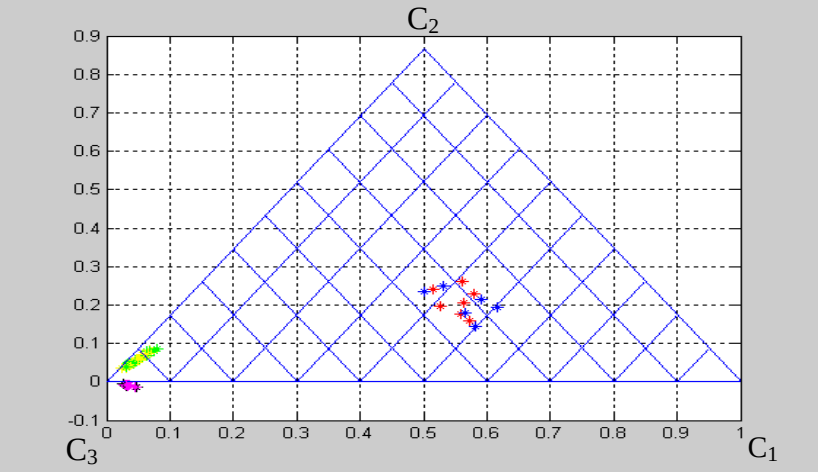


Figure (12) : La distribution de molécules (Nutty 9+ Green 12+Belleper20)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 9 + Green 12 + Belleper 20) sont séparées, mais les Greens et les Bellepers sont près (belleper se trouve hors du triangle a cause de leurs valeurs négatif, alors on a atteint à une distribution moyenne.

13 ème **cas :**

Block 18 (Fragments des atomes centrés)

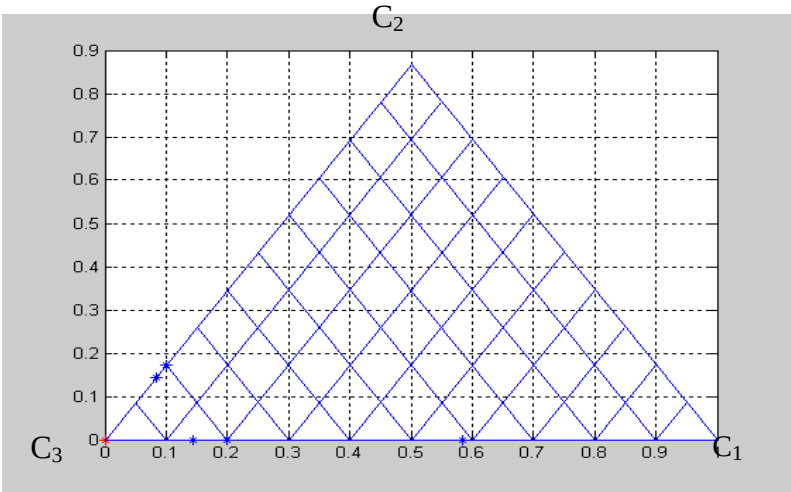


Figure (13) : La distribution de molécules de Nutty 18

On constate que les distributions des molécules de Nutty 18 se trouvent sous forme des points dispersés dans le triangle.

14 ème **cas :**

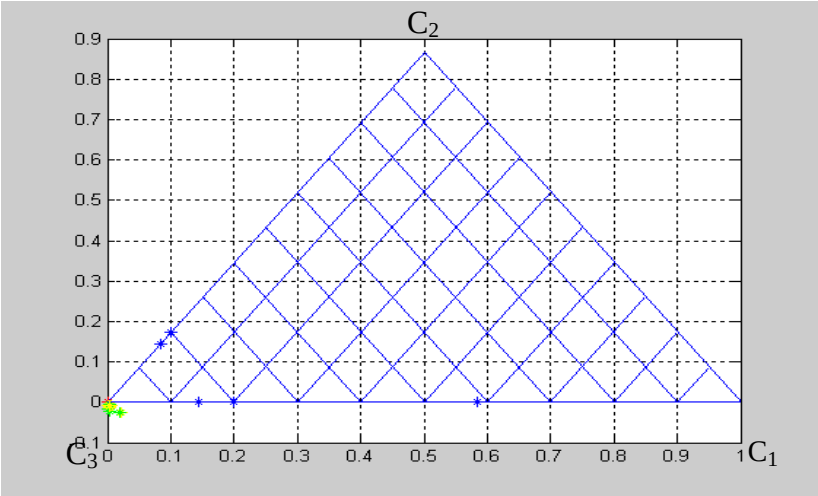


Figure (14) : La distribution de molécules (Nutty 18 + Green 19)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 18 + Green 19) sont presque séparées avec Green 19 qui se trouve hors du triangle, alors, la distribution est moyenne.

15 ème **cas :**

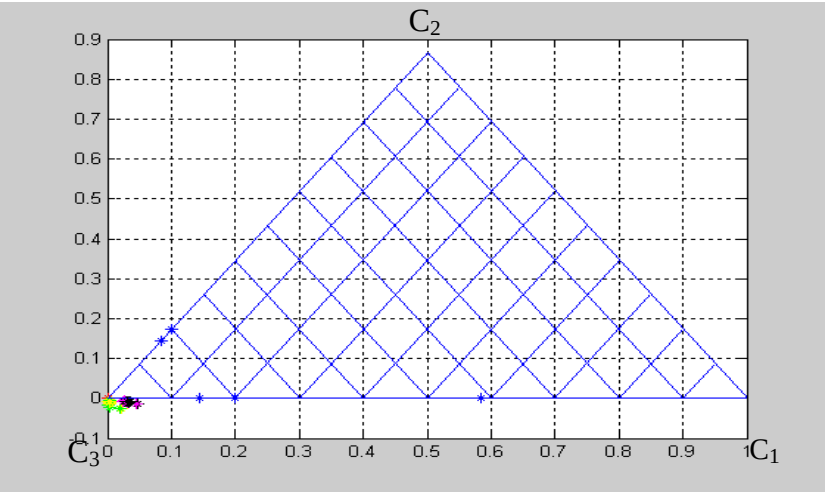


Figure (15) : La distribution de molécules (Nutty18+ Green 19+ Belleper20)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 18 + Green 19 + Belleper 20) sont presque localisées dans un même espace, alors, on a atteint à une mauvaise distribution

16 ème cas :

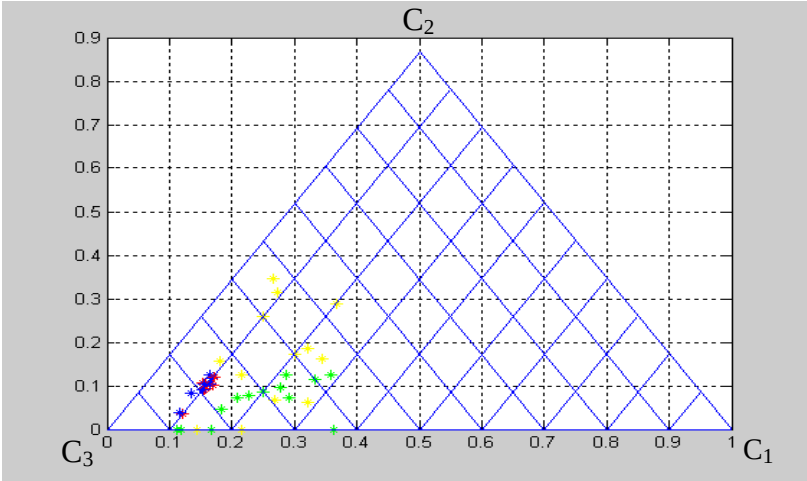


Figure (16) : La distribution de molécules (Nutty 5 + Green 17)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 5 + Green 17) sont moins séparées (Green sous forme des points dispersés et le Nutty sous forme d'un ligne), alors, la distribution est moyenne.

17 ème cas :

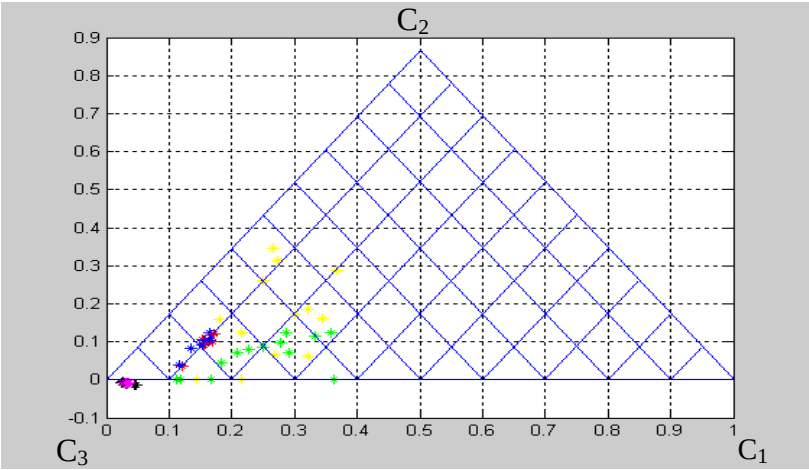


Figure (17) : La distribution de molécules (Nutty5 + Green 17+ Belleper 20)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 5 + Green 17 + Belleper 20) sont presque localisés dans un même lieu, a lors on a atteint à une distribution assez moyenne.

19 ème cas :

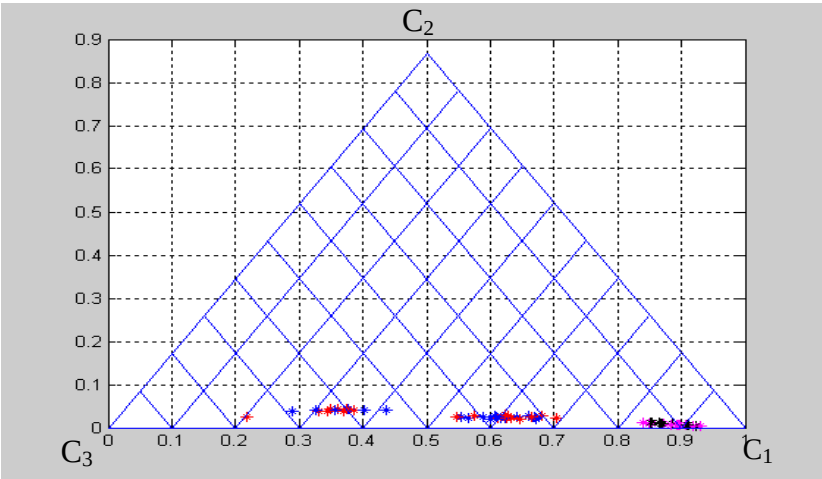


Figure (2) : La distribution de molécules (Nutty 1+ Green2 +Belleper5)

On constate que les distributions de molécules (Nutty 1+ Green2 +Belleper5) sont séparées, mais elles sont près, ont formés des lignes pour toutes les molécules alors on a atteint à une distribution moyennement meilleure.

20 ème cas :

Bloc 9 (indices des charges topologiques)

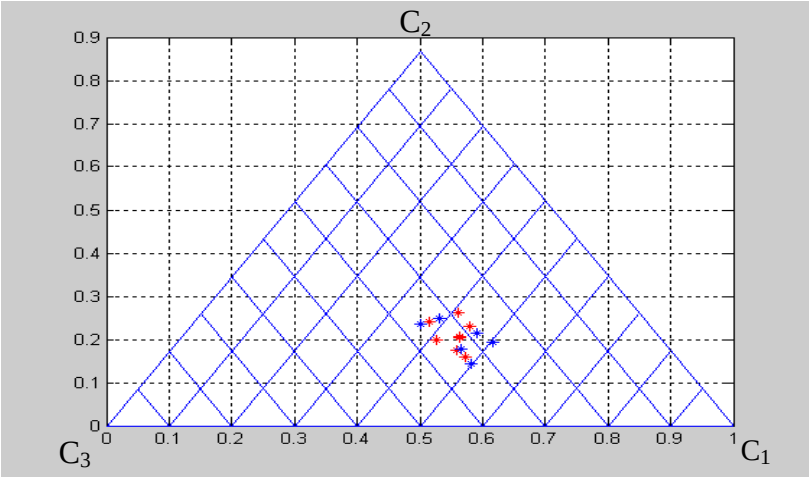


Figure (20) : La distribution de molécules de Nutty 09

On constate que les distributions des molécules de Nutty 9 se trouvent sous forme des points distribués

21 ème cas :

Bloc 12 (Descripteurs géométriques)

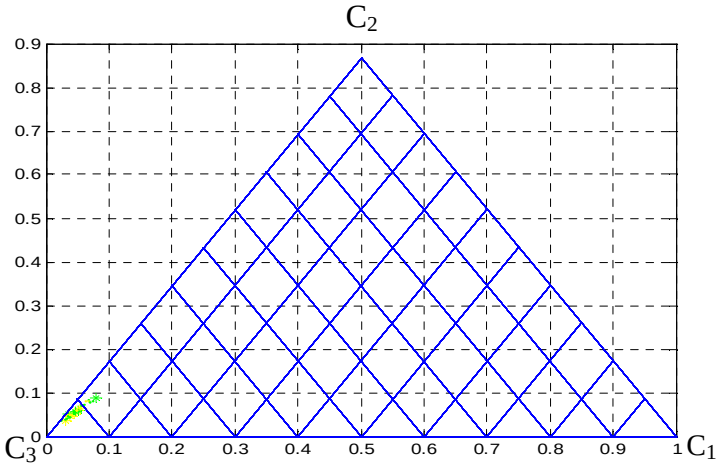


Figure (21) : La distribution de molécules Green 12

On constate que les distributions des molécules de Nutty 12 se trouvent au coin de C_3 sous forme d'un ligne.

22 ème cas :

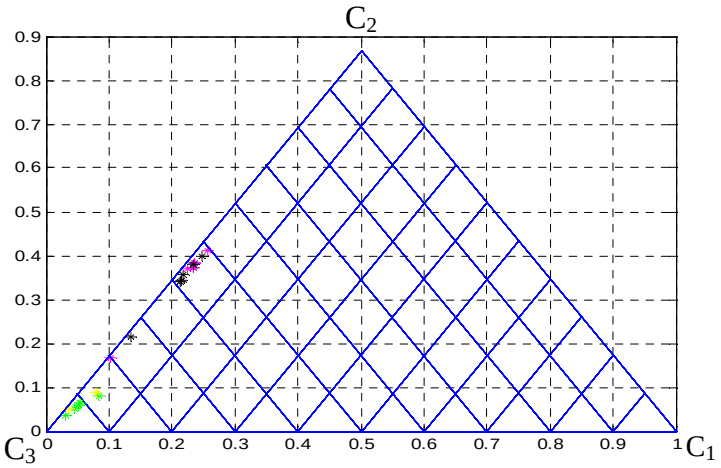


Figure (22) : La distribution de molécules de (Green 12 + Belleper 12)

On constate que les distributions des molécules de (Green 12 + Belleper 12) sont moyennement séparées, et se trouvent sous forme d'un ligne, alors, on a atteint à un distribution moyenne.

23 ème cas :

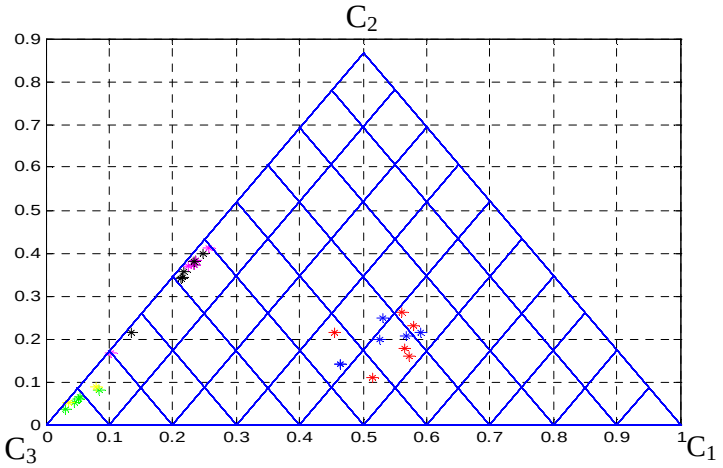


Figure (23) : La distribution de molécules (Nutty9 + Green 12 +Belleper 12)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 9 + Green 12 + Belleper 12) sont séparées et les Nutty se trouvent sous forme des points.

Alors on a atteint à une distribution assez meilleure.

24 ème cas :

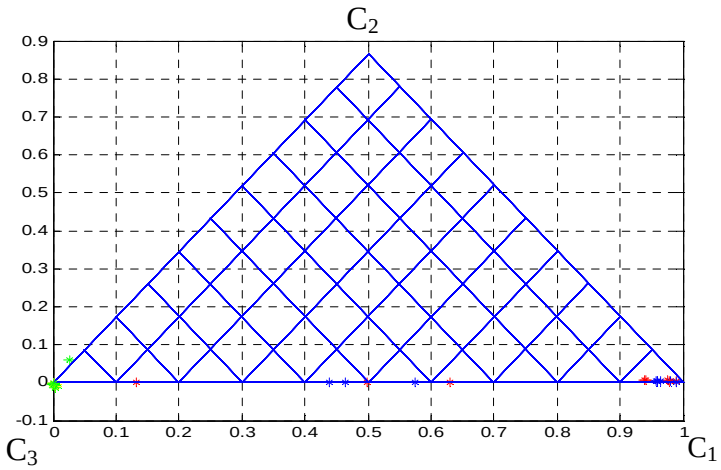


Figure (24) : La distribution de molécules (Nutty 12 + Green 19)

On constate que les distributions des molécules de (Green 12 + Belleper 19) sont meilleures car les molécules (Green 12 + Belleper 19) sont bien séparées, et les points rouge et bleu indiquent (les coordonnées de deux ou trois molécules)

25 ème cas :

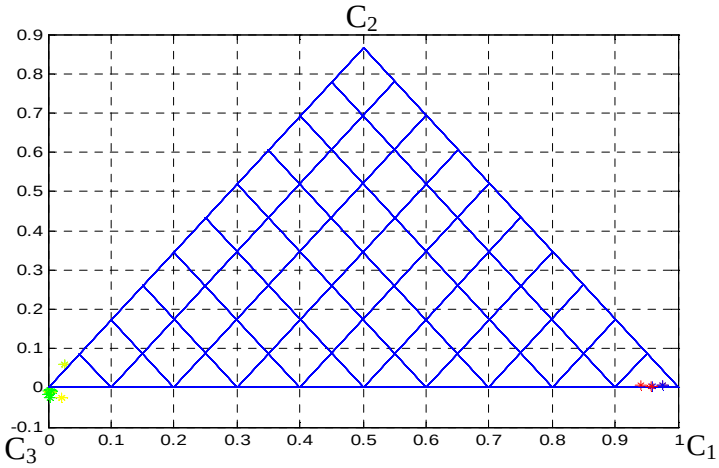


Figure (25) : La distribution de molécules (Nutty 12 + Green 19)

On constate que les distributions des molécules de (Green 12 + Belleper 19) sont meilleures car les molécules (Green 12 + Belleper 19) sont bien séparées

26 ème cas :

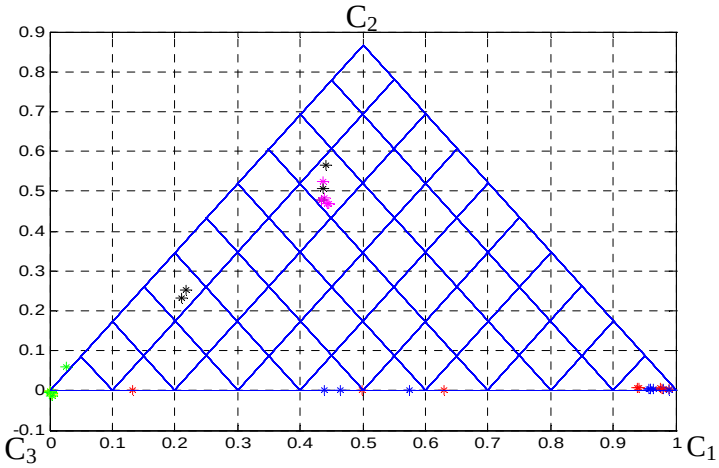


Figure (26) : La distribution de molécules (Nutty12 + Green 19 +Belleper 1)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 12 + Green 19 + Belleper 1) sont meilleures car la séparation de molécules (Nutty12 + Green 19 +Belleper 1) sont bien séparées, et les points isolés indiquent les coordonnées des deux ou plusieurs molécules.

27ème cas :

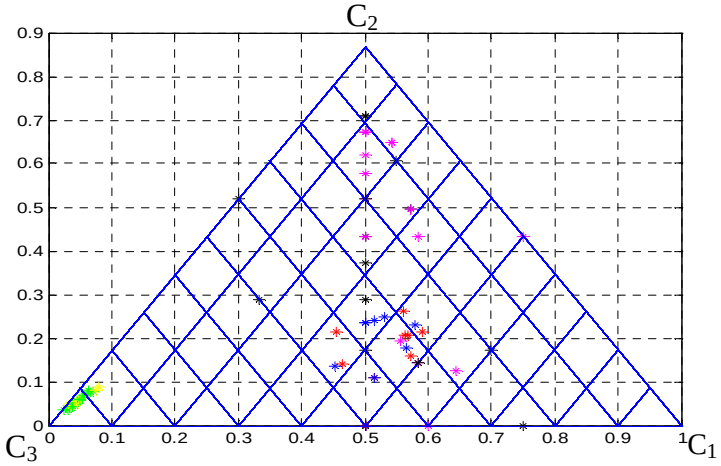


Figure (27) : La distribution de molécules (Nutty9 + Green 19 +Belleper 17)

On constate que les distributions des molécules de (Nutty 9 + Green 19 + Belleper 17) sont moins séparées car les molécules de Belleper et Nutty s'interagissent et Nutty s'éloigne des autres, alors on a atteint à une distribution assez moyenne.

III-3- Conclusion :

On peut conclure que les distributions des molécules sont concentrées dans des différents espaces de triangle, généralement ils sont séparés.

On diffère des différentes formes de distributions, celle qui sont des lignes, une forme ovale ou des points distribués au triangle.

Dans notre travail, On a choisi deux cas différents :

1ère cas : assemblage des molécules de mêmes blocs de différentes odeurs.

Les distributions des molécules sont meilleures à cause des bonnes séparations.

2ème cas : assemblage des molécules de différents blocs de différentes odeurs.

Les distributions des molécules sont moyennes à cause de leur séparation.

Conclusion générale :

Dans ce travail, nous avons fait placer les odeurs des molécules dans un lieu géométrique (diagramme ternaire), ces odeurs sont caractérisées par des descripteurs moléculaires tel que :

Indices topologiques, indices géométriques, propriétés moléculaires, et on a essayé de chercher les structures moléculaires de molécules odorantes nouvelles qui s'approchent des molécules commerciales existantes nécessite la connaissance de la relation structure moléculaire odeur, cette dernière est difficile à modéliser, en raison de la subjectivité de l'odeur.

Pour cela, nous avons utilisé des paramètres qui représentent la structure moléculaire (descripteurs moléculaires) pour développer des modèles capables de prédire/classifier on séparer l'odeur des molécules.

Pour cette raison , on a appliqué des équations des bases mathématiques qui nous servent à placer ces odeurs dans cet espèce (diagramme), en utilisant un programme d'un logiciel MATLAB version 6.5 qui résoud ce genre des problèmes et on a atteint à des bons résultats tout en variant chaque fois les blocks, et on a utilisé plusieurs cas :

- Mêmes blocks des différents odeurs.
- Différents block des différentes odeurs.

Et pour chaque cas ; on a fait des discussions et interprétations et on peut conclure que la distribution pour la 3ème cas et plus meilleure que les autres cas.

Les combinaisons des différentes types d'odeurs, sont meilleures, dans les cas où les odeurs des molécules sont bien séparés (classifiés), mais lorsqu'il y a une grande interaction entre les odeurs, c'est pour les mauvais cas, car ces derniers ont presque les mêmes paramètres et leurs valeurs se convergent, alors on a remarqué qu'il y a une condensation de ces odeurs, on ne peut pas les séparer, cependant on a constaté pour ce cas (Nutty 2 + Green 2 + Belleper 2), sa distribution est meilleure à cause des valeurs des odeurs des molécules sont éloignés

Alors :

Lorsque les combinaisons sont bien choisies, alors les distributions sont de plus en plus meilleures.

Et enfin, on peut dire pour ce cas simple (diagramme ternaire)

On a atteint à des bons résultats.

Bibliographie :

(1) P. Buser et M. Imbret - Psychophysiologie sen – sorielle -Hermann Paris 1982.
(2) B. Schaal -Presumed olfactory exchanges between mother and neonate humans - Etology and psychology ,J. le Camus et J. Cosnier editors. Privat UEC - Toulouse,1986,101.
(3) C. Chouard -Pathologie des odeurs et des flaveurs dans le comportement humain -Parf. Cosm. et Sav .de France, 3 (4), 1973 , 189.
(4) J . le Magnen – les bases physiologique de préférence olfactogustatives – Parf. Cosm. et Sav. De France,3 (2) , 1973 , 74 .
(5) R. Silverstein – Phéromones – in F. Trawert ed , Geruch und geschmackstoife. Symposium international H, et R , Holzminden , Oct 1974 .
(6) J. C. Dore et M. Renou – analyse multivariée des relations entre 9 molécules phéromonales et 11 espèces de lépidoptères Noctuidae – Acta Oecologica – Oecol , Appl , 6 (3) , 1985 ,269 .
(7) P.Blaizot – Parfums et parfumeurs, 1947. « réédition » édition du **lavet**, le lavandou , 1982 .
(8) J. N . Jaubert , motivation de nos choix organoleptiques –Parf .Cosm .Aromes, 26, 1979, 87 .
(9) G. Lazorthes – L'ouvrage des sens – Flammarion, ed , Paris 1986 .
(10) J. N . Jaubert ,G ?Gordon et J. C. Dore – Classification of odeurs and their sensorial perception , Quintessenza , 5 ,1986 , 27 .
(11) J. Carles –Sur une méthode de création en parfumerie – recherches R.B.D. 1re partie, 1961 .
(12) J. C. Ellena – Des odeurs et des mots – Conférence STPF , 19 février 1987 .
(13) S. Arctander – perfume and flavor chemicals – monteclair N. J. (U.S.A) ,1969 .
(14) G. Fenaroli – Handbook of flavor ingredients – 2 nd, ed, CRC Press , Cleveland USA,1975 .
(15) Conseil de l'Europe – Matières aromatisantes naturelles, leurs sources, net matièes aromatisantes artificielles ajoutées , maisonneuve France , 1975 .
(16) S.Van Straten – Volatile compounds in food, 4e Ed , TNO (N,L) 1977 et mises à jour .
(17) J. N. Jaubert G. Gordon et J. C. Dore – les approches des mécanismes de l'olfaction –P. C. A. 55 ,1984 ,55 .
(18) J. C. Dore G. Gordon et J. N. Jaubert – Approche factorielle des relations entre structure chimique et note odorante – C. R. Acad, Sc ,Paris 299 (II) Not 1984 ,315
(19) J. C. Dore J. Gilbert T. Ojasoo and J. P. Raynaud –Correspondence analysis applied to steroid receptor binding- J. Med Chem , 29 (1) 1986 , 54 .
(20)J. C. Dore J. lacroix R. lacroix et C. viel , Etude factorielle des relations entre structure chimique et type d'activité antiparasitaire-Eur ,J. Med. chem , 22, 1987, 109.
(21) E. Polak – is odour similarity quantifiable ? – Chem and lndus, 3,1983,125 .
(22) A. I. Stuper W. E. Brugger and P. C. Jurs .Computer assited studies of chemical structure and biological function – J. Willey and sons. New York , 1979.
(23) S. Schiffman-Physicochemical correlates of olfactory quality – science, 185 , 1974, 112.
(24) A. Holley- la perception des odeurs- la recherche, 6 (58), 1975, 629.
(25) P. Laffort F. Patte and N, Etcheto – Olfactory coding on the basis of physicochemicals properties , Ann , N. Y. Acad, Sci, 237, 1974, 193.
(26) B. Schaall – la compétence olfactive du nouveau- né humain : aspects fonctionnels- Psychologie médicale 16, n°2, 1984, 305.
(27) J. N. Jaubert-Découverte des odeurs par des populations enfantines – Parf. Cosm. Arômes. 72 ,1986 ,73 .

(28) T. Engen - Method and theory in the study of odor preferences – in «J. W. Johnston D. G. Moulton and A. Turk , Advances in chemoreception ,II. » Human responses to environmental odors, Academic Press – London 1974, 121.
(29) A. Corbin – le Miasme et la jonquille – Aubier Montaigne ,Paris, 1982.
(30) El-Halwadji, M.M. (1997) Pollution prevention, through process integration: systematic design tools. San Diego, CA, USA: Academic press.
(31) Shely M.D,& El-Halwadgi MM2000, component-less design of recovery and allocation systems: a functionality-based clustering approach. Computers and chemical Engineering, 24, 2081-2091.
(32) El-Halwagi M.M, 2004 Property Integration: Components design techniques and visualisation, tools AlchE Journal, 50(8), 1854-1869.
(33) Amboni et Al 2000.

Sommaire

Dédicace

Remerciement

Introduction générale 1

Chapitre I : Position du problème et analyse bibliographique

I-1- Introduction..... 3

I-1-1-Définition..... 3

I-1-2- Importance physiologique..... 3

I-1-3- Les produits naturels et artificiels : nature – identique..... 3

I-1-4- Structure et propriétés de sens..... 4

I-1-5- Volatilité..... 4

I-2- Organisation de champ des odeurs..... 4

I-2-1- Définition..... 4

I-2-2- Recherche des critères objectives..... 4

I-2-2-1- Introduction..... 4

I-2-2-2- L'olfactométrie..... 6

I-2-2-2-1- La mesure des odeurs..... 6

I-2-2-2-2- L'analyse physico-chimique..... 6

I-2-2-2-3- Le jury de nez..... 7

I-2-2-2-4- Mesure de l'intensité de l'odeur..... 7

I-2-2-2-5-. Les méthodes d'enquêtes..... 8

I-2-2-2-6- Les nez artificiels..... 8

I-2-3- Situation du problème…….. 9

I-2-4- Selection d'items significatifs…….. 10

I-2-4-1- Archetype sémantique/archétype moléculaire……. 11

I-2-4-2-Recherche d'un échantillon significatif des molécules odorants…… 11

I-2-4-3- Choix des descripteurs sémantique de notes odorants…… 11

I-2-4-4- Recherche d'une adéquation entre molécules et descripteurs- étalon..... 12

I-2-5- Etude des relations entre notes odorantes et caractéristiques chimiques… 14

I-2-6- Essai de typologie de notes odorantes sur la base de descripteurs non..... 17

I-2-7- Description synthétique du champ des odeurs…… 18

I-2-8- Conclusion…….. 20

I-3- La position du problème……...…… 21
1-3-1- problèmatique……. 21
1-3-2- Les travaux de Mata……... 23
I-3-2-1- Mata 2006…….. 23
I-3-2-1-1- Definition……. 23
1-3-2-1-2- La conception de la valeur d'odeur (OV)…… 23
I-3-2-1-3- Diagramme ternaire de parfumerie…….. 24
I-3-2-1-4- Conclusion……. 26
I-3-2-2- Mata 2005……. 26
I-3-2-2-1- Definition……. 26
I-3-2-2-2- Objectives de ce travail…… 27
I-3-2-2-3- Mélanges binaires de parfum……... 27
I-3-2-2-4- Mélange ternaire de parfum……. 27
I-3-2-2-5- Conclusion……... 27
I-3-3- Travaux Fadwa – Shelly et El Halwagi…….. 28
I-3-3-2- Mark D-Shelly……. 28
I-3-3-2-1- Définition:..... 28
I-3-3-2-2- Les techniques de propriétés de clusters……. 28
I-3-3-2-3- Fonction de propriété d'opérateur ……. 29
I-3-3-2-4- Visualisation et analyse…… 29
I-3-3-2-5- Les limites de la region de la feasibilité…...…… 31
I-3-3-2-6- Exemple …… 32
I-3-3-3- El-HalwaGi …… 32
I-3-3-3-1- Définition..... 34
I-3-3-3-2- La statue de problème…….. 34
I-3-3-3-3- Les analyses théoriques ……... 36
I-3-4- Résumé de l'approche……. 37
Chapitre II: Approche de modélisation..... 42
II-1- Introduction 44
II-2- Développement mathèmatique de l'approche…….. 44
II-2-1- Travaux de Mata …… 44
II-2-1-1- Mata 2006..... 44
II-2-1-2- La conception de la valeur d'odeur (OV)..... 44

II-2-1-3- Diagramme ternaire de parfumerie……..... 45
II-2-1-4- Conclusion…… 45
II-2-2- Mata 2005……. 45
II-2-2-1- Définition……... 45
II-2-2-2- Objectives de ce travail…….. 45
II-2-2-3-Mélanges binaires de parfum…….. 45
II-2-2-4- Mélange ternaire de parfum……... 46
II-2-2-5- Conclusion……. 46
II-2-3- Travaux de Shelly et al 2004…….. 46
II-2-3-1- Introduction…… 46
II-2-3-2- Développement mathèmatique de ce travaux…… 50
II-2-4- Travaux de Fadwa El Jack……. 50
II-2-4-1- Introduction…… 51
II-2-4-2- Développement mathèmatique de ce travaux……..... 52
II-3-Les différentes organigrammes et programmes…… 52
II-3-1- Définition…… 53
II-3-2- Organigramme I……. 54
II-3-3- Conclusion…….. 54
II-3-4-Programme I…… 57
II-3-5- Organigramme II…… 58
II-3-6- Conclusion:……. 58
II-3-7- Programme II…….. 59
Chapitre III: Application de la méthode.....
III-1- Introduction ……... 61
III-2- Résultats et discussions…….. 63
III-3- Conclusion 75
CONCLUSION GENERALE…….....….....… 76
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES……..... 77
ANNEXE…… 79
Liste des Figures……..... 88
Liste des Tableaux……..... 88