

# المجلة الجزائرية للعلوم

Revue Algérienne des Sciences

Numéro 03

Septembre 2019



*Edition Spéciale  
Sciences Techniques*



تصدرها جامعة الشاذلي بن جديد الطارف  
Éditée par l'université Chadli Bendjedid - El Tarif

**Directeur de la revue**  
Pr. Dr. Abdelmalik Bachkhaznadji

**Directeur de la publication**  
Pr. Dr. Benakhla Ahmed

**Rédacteur en chef**  
Dr. Aissaoui Chadli

**Rédacteur en chef adjoint**  
Dr. Chemam Chaouki

**Responsable de la conception**  
Dr. Boucheikhchoukh Mehdi

### **Comité de rédaction**

Dr Boutabia Lamia, Université Chadli Bendjedid, Faculté des Sciences de la Nature et de la vie, El Tarf

Dr Hadef Ahmed, Université Chadli Bendjedid, Faculté des Sciences de la Nature et de la vie, El Tarf

Dr Righi Souad, Université Chadli Bendjedid, Faculté des Sciences de la Nature et de la vie, El Tarf

Dr Youbi Zahra, Université Chadli Bendjedid, Faculté des Sciences Techniques, El Tarf

Ferdenache Ahlam, Université Chadli Bendjedid, Faculté des Sciences Techniques, El Tarf

### **Ont participé comme référés à ce numéro**

Dr Telailia Salah

Maitre de conférences A

Université Chadli Bendjedid - El Tarf

Dr Benrachou Nora

Maitre de conférences A

Université Chadli Bendjedid - El Tarf

Pr Heleili Nouzha

Professeur

Institut des Sciences Vétérinaires et

Dr Katiba BEROUAL

Maitre de conférences A

des Sciences Agronomiques - Batna

Dr Medjeldi Saida

Maitre de conférences B

Institut des Sciences Vétérinaires El

Dr Hadef Ahmed

Maitre de conférences A

Khroub, Université des frères

Dr Boucheikhchoukh Mehdi

Maitre de conférences B

Mentouri - Constantine

Université Chadli Bendjedid - El Tarf

Université Chadli Bendjedid - El Tarf

## SOMMAIRE

		Page
1	<b>Rietveld Fitting Method For The Combined Structural and Microstructural Determination In Iron Phosphides Diffraction</b> Tebib Wassila (Laboratory of Physico-Chemistry of Materials (LPCM), Department of Physics, Faculty of Science and Technology)	4-10
2	<b>Prévision des paramètres des cycles de densification par Compression isostatique à chaud de poudre de Tungstène</b> Rabah LAIDI (Université Chadli Bendjedid - El Tarf)	11-15
3	<b>First principles calculation of the optical properties of zinc-blende Cu<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>Br<sub>y</sub>I<sub>1-y</sub></b> S.Touam (Université Chadli Bendjedid - El Tarf)	16-24
4	<b>Modélisation d'un mur de soutènement stabilisé avec des fibres et renforcé avec des géogrilles</b> Houam Houda (LMGHU Université 20 Aout 1955 SKIKDA)	25-28
5	<b>Caractérisation géotechnique des sols, cas des argiles de Souk ahras</b> Djouimaa Sarah (INFRARES Laboratoire Universités Mohammed-Chérif Messaadia,souk ahras,Algérie)	29-34
6	<b>Traitement et épuration de l'eau potable au niveau de la station de Cheffia (Daira, Bouhadjar)</b> OTMANE RACHEDI Khadidja (Université Chadli Bendjedid - El Tarf)	35-38
7	<b>Toward a Combined Approach for Requirements Engineering of SaaS</b> Farida Kherissi (Université Badji Mokhtar , Faculté de Sciences de l'Ingénierat, Laboratoire LISCO)	39-45
8	<b>Passage de la langue naturelle à une requête SPARQL</b> CHEMAM Chaouki (Département d'Informatique Université Chadli Bendjedid - El Tarf)	46-50
9	<b>Recommendation approach of educational resources in a frequent subnet</b> Gasmi Sara (Département d'informatique, Université Badji Mokhtar - Annaba, Algérie)	51-55



## Rietveld Fitting Method For The Combined Structural and Microstructural Determination In Iron Phosphides Diffraction

Tebib Wassila<sup>a,\*</sup>, Khadraoui Iman<sup>a</sup>, Belkhiri Wissem<sup>a</sup>, Chenouga Ismahane<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Physico-Chemistry of Materials (LPCM), Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Eltarf University, P.B. 73, Eltarf 36000, Algeria

### Informations

#### Key-words :

Rietveld Method  
X-ray diffraction  
Nanomaterials  
Mechanical alloying  
phosphides

#### \*Correspondance :

[wassilmss@yahoo.fr](mailto:wassilmss@yahoo.fr)

Reçu le, Révisé le, Accepté le

### Abstract

The Rietveld refinement allows the overall profile of the experimental diffraction pattern to be directly adjusted by using as variables the instrumental characteristics in addition to the structural and microstructural parameters of the sample. More precisely, the refinement program minimizes, by an algorithm based on the least squares method, the function called residue. This refinement using the Rietveld method is an efficient procedure for the analysis of X-ray diffraction patterns of Fe-20P (wt. %) nanostructured powders prepared by high energy ball milling. As a result, during milling, the deviations of the crystals parameters of the nanocrystallines phases, namely the solid solution of the phosphorus in the iron and the phosphates Fe<sub>2</sub>P, FeP and Fe<sub>3</sub>P, the refinement of the grain size and the increase of the average rate of micro-stresses exhibit significant distortion of the crystal lattices and the variation phase's percentages.

### 1. Introduction

Studies on nanostructured metal phosphides were much immature in comparison to other materials. Many of the bulk metal phosphides alloys are adequately investigated and applied in practice as phosphorescent, magnetic and electronic materials [1]. Iron phosphides alloys have been prepared by a variety of methods such as electrodeposition [2] sonochemical [3] and solvothermal methods [4].

High energy ball milling which is a powder metallurgy technique that involves the mechanical milling of reactants to form product phases has proved its convenience as one of the powerful methods for material processing to produce many types of non-equilibrium alloys like amorphous [5], nanostructured materials and solid solutions [6]. The powder particles are periodically trapped between balls and are plastically deformed. According to the low melting temperature and red phosphorus thermodynamic properties such as its combustion during an impact or a friction, high energy ball milling has been used to prepare Fe-P alloys starting either from elemental powder mixtures [7], Fe-P ingot [8] or both of them [9] owing to the extremely small solubility of phosphorus (<0.026 at.% P) in iron at room

temperature [10]. The mechanical alloying of the Fe-8P (wt.-%), in a planetary ball mill, led to the formation of a mixture of a disordered two phases,  $\alpha$ -Fe1 and  $\alpha$ -Fe2, Fe<sub>3</sub>P nanophase and a small amount of a paramagnetic FeP phosphide phase (~2.3%), after 21 h of milling [11]. Recently, thermal stability of Fe-8P (wt.-%) ball milled powders was investigated by differential scanning calorimetry

X-ray diffraction and <sup>57</sup>Fe Mössbauer spectrometry. The effect of structural disorder is evidenced in the DSC thermogram by the presence of a large exothermic reaction consists of several overlapping peaks and spread over the temperature range (150-700) °C. The result of the Rietveld refinement of the XRD patterns indicates that during the annealing of the powders up to 210°C, three phases are observed:  $\alpha$ -Fe(P), solid solution Fe<sub>3</sub>P and FeP phosphides. The Mössbauer spectra analyses show that the paramagnetic FeP phosphide phase is the only product after the annealing (~2%). The annealing at 450°C leads to a mixture of  $\alpha$ -Fe(P) solid solution, Fe<sub>3</sub>P nanophase and a small amount of a paramagnetic Fe<sub>x</sub>P (1<x<2) phosphide phase (~ 3%) in addition to iron oxides [12].

The present work is proposed to examine the process by which the structural change occurs in the mechanically alloyed Fe-20P (wt.%) during the milling process using the Rietveld refinement which allows the overall profile of the experimental diffraction pattern to be directly adjusted by using as variables the instrumental characteristics in addition to the structural and microstructural parameters of the sample. These structural and microstructural changes of the milled powders were studied by XRD using Rietveld method

## 2. Materials and methods

### 2.1 Experimental details

Fe-20P (wt.%) powder mixtures in weight ratios were obtained from pure elemental Fe (99.998%, average particle size  $\sim 45 \mu\text{m}$ ) and amorphous red phosphorus (99.9%). The powder mixtures were ball milled under an argon atmosphere in a planetary ball mill (P7), at room temperature, using hardened steel balls and vials. The powder-to-ball weight ratio was 3/35 and the rotation speed was 1300 rpm. The vials were sealed inside an argon-filled glove box for preventing contamination and self-ignition in air of the mechanically activated phosphorus. Structural and microstructural changes of the milled powders were studied by XRD on a Siemens D501 powder diffractometer in ( $\theta$ - $2\theta$ )geometry using Cu-K $\alpha$  radiatio ( $\lambda_{\text{Cu}}=0.154056 \text{ nm}$ ). The microstructural parameters: lattice parameters (a, b, c), effective crystallite size,  $\langle L \rangle$ , and microstrains,  $\langle \sigma^2 \rangle^{1/2}$ , were derived from the Rietveld refinement of the XRD patterns using Maud program version 2.26.

### 2.2 Theory

The non-equilibrium phases synthesized include supersaturated solid solutions, metastable crystalline and quasicrystalline phases, nanostructures, and amorphous alloys. These solid state transformation can be studied by X ray diffraction using theoretical calculation like Reitveld method [13].

The Rietveld refinement makes it possible to directly adjust the total profile of the experimental diagram of diffraction by using like variables the instrumental characteristics and the structural and microstructural parameters of the sample. The principle of the Rietveld Method is to minimise a function M which analyzes the difference between a calculated profile  $y_c$  and the observed data  $y_i$ . Rietveld defined such an equation as:

$$M = \sum_i w_i (y_i - y_{ci})^2 \quad (1)$$

Where  $W_i$  is the statistical weight and c is an overall scale factor with the intensity  $y_i$

measured at the i th step of the given diagram by :

$$w_i = 1/y_i \quad (2)$$

The calculated intensity is obtained by the summation of the different contributions of all the peaks which are superposed at each point and that of the continuous spectra :

$$y_{ci} = y_{bi} + \sum_{\phi=1}^{phases} S_{\phi} \sum_{k=1}^K j_{\phi k} \cdot L_{P\phi k} \cdot O_{\phi k} \cdot A \cdot |F_{\phi k}|^2 \cdot \Omega_{l\phi k} \quad (3)$$

K: Miller's index for a reflection h, k, l.

y: Continuous background intensity.

S: Scale factor, proportional to the volume fraction of each refined phase.

J $\Phi$ k: Multiplicity factor of the kth reflection (peak).

L $P\phi$ k: Lorentz factor including the polarization factor for X-rays.

O $\phi$ k: Correction factor describing the preferred orientation.

A: Absorption factor.

| F $\Phi$ k | : Structure factor.

$\Omega_{l\phi k}$ : Peak profile function.

The most widely used reliability factors for validating the quality of profile refinement are Rp profile factors with Rwp-weighted profile profiles defined by the expressions :

$$R_p = \frac{\sum_i |y_i - y_{ci}|}{\sum_i y_i} \text{ and } R_{wp} = \frac{\sum_i w_i (y_i - y_{ci})^2}{\sum_i w_i y_i^2} \quad (4)$$

The quality of the fit will be controlled by the parameter  $\chi^2$  called "goodness of fit", which must tend the value of 1 to have the best refinement. It is given by the relation:

$$\chi^2 = \frac{R_{wp}}{R_{exp}} \quad (5)$$

With  $R_{exp}$  as the expected residue given by the relation:

$$R_{exp} = \left( \frac{N-P}{\sum_i w_i y_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

Where N is the number of points measured in the experimental diffraction pattern and P is the number of refined parameters.

The texture (or preferred orientations) where calculated usqing the March-Dollase formula swhere the ummation is done over all equivalent hkl reflections ( $m_k$ ):

$$P_{k,j} = \frac{1}{m_k} \sum_{n=1}^{m_k} \left( P_{MD}^2 \cos^2 \alpha_n + \frac{\sin^2 \alpha_n}{P_{MD}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (7)$$

PMD is the March-Dollase parameter and  $\alpha_n$  is the angle between the preferred orientation vector and the crystallographic plane  $hkl$  in the crystallographic cell coordinate system.

### 3. Results and discussion

The structural evolution and phase transformation during the alloying process from Fe and P elemental powders into the Fe80P20 powder mixture were followed by XRD. The broadening observed in figure 1 of the diffraction peaks and the decrease of their intensities with milling time are due to the continuous reduction of the effective crystallite size and an increase of the atomic level strain because of the heavy plastic deformation in addition to the formation of several phosphides. The induced crystal defects such as dislocations, grain boundaries, vacancies and interstitials during the milling process, through the heavy plastic deformation into the powder particles, promote the solid state reaction at ambient temperature. Depending on the initial mixture, structural changes of mechanically alloyed powders can occur as follows: grain refinement, solid solution diffusion and/or formation of new phases. Detailed analysis of the XRD pattern profiles allows a quantitative evaluation of the solid state transformation and composition changes during the milling process.

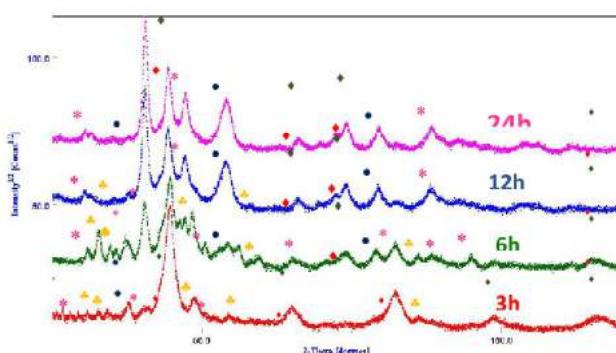


Fig 1.XRD patterns of the ball milled Fe-20P (wt.%) powder mixture.♦ α-Fe1,♦ α-Fe2,●Fe<sub>2</sub>P,  
\* Fe<sub>3</sub>P, ♦ FeP.

Figure 2 displays the Rietveld refinement of the XRD patterns of the Fe-20P (wt.%) powder mixtures milled for 3 h. The best Rietveld refinements of the XRD patterns of the powders have been obtained using a combination of different phases. A bcc α-Fe with lattice parameter ; an orthorhombic FeP structure with

space group Pnma ; a tetragonal Fe3P structure with space group I-4 and an hexagonal Fe<sub>2</sub>P with space group P62m. This refinement isotropic model of the XRD pattern (Fig. 2) reveals the existence of two-bcc α-Fe structures, designated here as α-Fe1 and α-Fe2 in order to distinguish them. These two-bcc α-Fe structures have different lattice parameters, average crystallite sizes,<L>, microstrains, <σ<sub>2</sub>>>1/2. The formation of the phosphides at the beginning of milling can be explained by the self ignition reaction of red phosphorus induced by milling which was observed during the mechanochemical synthesis of phosphides in a mixture of elemental powders [12].

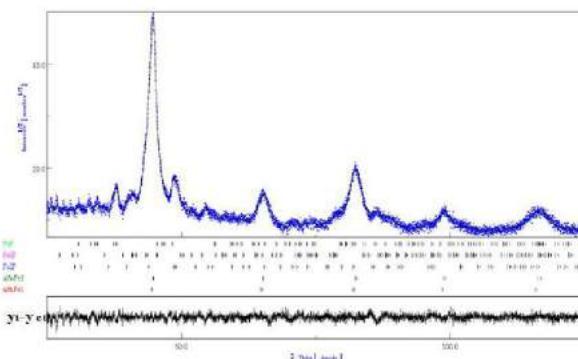


Fig 2. XRD patterns of the Fe-20 P powder mixture milled for 3 h. The reliability factors of the refinement are: (Sig=1.11 ; R<sub>w</sub>=8.78 ; R<sub>wnb</sub>= 6.93; R<sub>b</sub>=6.38 ; R<sub>exp</sub>=7.85).

The significant enthalpy variations associated with the chemical reactions were responsible for the combustion reaction. If the temperature generated during the milling process, T<sub>g</sub>, following ball-powder-ball collisions is higher than the ignition temperature, T<sub>ig</sub>, the combustion reaction can occur. These temperatures are a function of the enthalpy change and the microstructural parameters such as the reduction of the particle size with the milling time. Thus leading to the decrease of T<sub>ig</sub> and the increase of T<sub>g</sub>. The point of intersection of T<sub>g</sub> and T<sub>ig</sub> is the critical milling time where combustion occurs [14]. At this point, the mixing of the particles, their refinement and the accumulation of structural defects favor the combustion reaction.

The mechanical activation of a combustion reaction was observed during the these low adiabatic temperature. Indeed, according to the

thermodynamic data of the Fe-P system, the ratio of the enthalpy of reaction to specific heat which represents a rough estimate of the temperature adiabatic is of the order of 1740 and 1910 K for the phosphides  $\text{Fe}_2\text{P}$  and  $\text{Fe}_3\text{P}$ , respectively, from which the formation of the phosphate  $\text{Fe}_2\text{P}$  before that of  $\text{Fe}_3\text{P}$  which is thermodynamically more stable [15]. Especially, in binary systems where adiabatic temperature is very high, the reaction between the elemental powders is to a combustion reaction without thermally activated atomic diffusion [16].

The heat generated by the mechanical milling process a transfer of kinetic energy from the balls to the powders, thus promoting the formation of phosphides. It is noted that phosphides phases was obtained by crystallization of the alloy amorphous  $\text{Fe}_{82}\text{P}_{9}\text{B}_9$  at a temperature of between 300 and 350°C [17] we then assume that the local temperature reached inside the vials is about 300°C. This temperature, which is higher than that of the melting point of phosphorus, can promote its combustion by friction or impact. It is also believed that the molten phosphorus particles dissolve the neighboring iron grains to a certain thickness in the form of a phosphide layer which coats the iron crystallites. This supposition can be confirmed by the large size of the phosphides crystallites which is between 91 nm and 107 nm after 3 h of milling.

The X-ray diffractogram of the powder mixture milled for 6 hours, (Fig. 3), reveals the presence of the same phases but the increase in the intensity of its diffraction peaks. The intrinsic reason for the extension of the solubility limit, during grain refinement, is the increase in free energy that results from the introduction of a large interfacial energy of the grain boundaries. The large volume fraction of grain boundaries and/or interfaces in nanocrystalline materials promotes increased solubility.

The existence of the two-bcc  $\alpha$ -Fe structures was assigned to the non-homogeneity in concentration of the milled  $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$  powder mixture. Indeed, according to the very low solubility limit of phosphorus into iron, which is less than 0.026 at.% P at roomtemperature, and to the fact that the mixture contains more of P atoms than the bcc  $\alpha$ -Fe phase can dissolve, the

surplus must separate out to give regions with high concentration of P as well as chemical compounds such as phosphides. This results was in agreement with that on the  $\text{Fe}_{92}\text{P}_8$  [11-12].

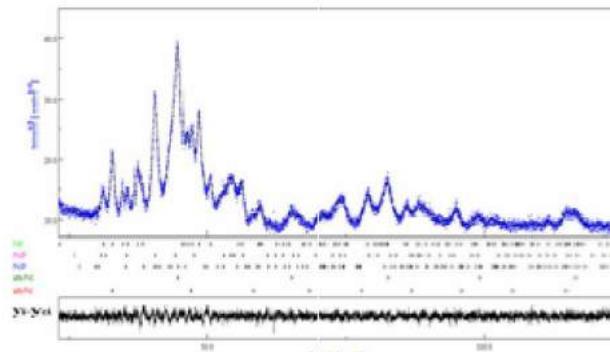


Fig 3. XRD patterns of the Fe-20P powder mixture milled for 6 h. The reliability factors of the refinement are: ( $\text{Sig}=1.11$  ;  $\text{Rw}=8.46$  ;  $\text{Rwnb}=7.71$  ;  $\text{Rb} = 6.58$  ;  $\text{Rexp} = 7.60$ ).

The slight fluctuations of the crystal parameters (3%) of the phases  $\alpha$ -Fe1 and  $\alpha$ -Fe2, with the milling time can be assigned to the change in composition of the solution solid  $\alpha$ -Fe(P) and consequently to the variation of the P concentration in the two phases. Indeed, according to the law of Vegard the crystalline parameter of a solid solution varies linearly with the composition. The extension of the solubility limit is commonly observed in the non-equilibrium processes and the deviation of the Vegard law has been confirmed for several systems and for large areas of composition. This positive deviation is often observed in nature [18].

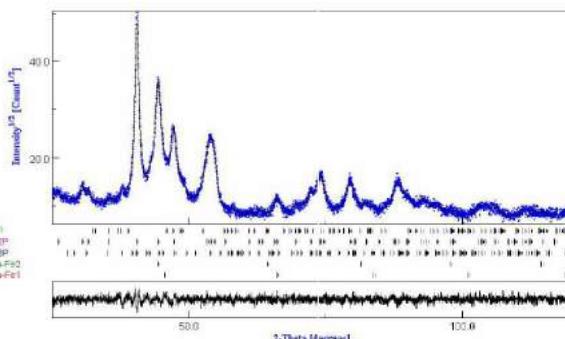
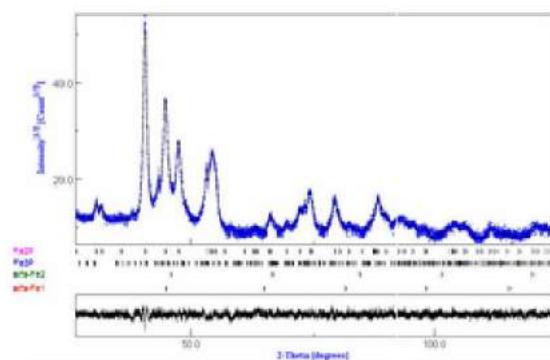


Fig 4. XRD patterns of the Fe-20 P powder mixture milled for 12 h. The reliability factors of the refinement are: ( $\text{Sig}=1.15$  ;  $\text{Rw} = 8.74$  ;  $\text{R}_{\text{exp}} = 7.54$  ;  $\text{R}_b = 6.66$ ).

The X-ray diffractogram of  $\text{Fe-20P}$  (wt.%) milled for 12 h, (Fig. 4) reveals again the formation of an orthorhombic phosphide  $\text{FeP}$ , a homogeneous  $\text{Fe}_3\text{P}$  phase in addition to  $\text{Fe}_2\text{P}$  phosphide and the two phases of the same cubic structure  $\alpha$ -

Fe1 and  $\alpha$ - Fe 2. At this stage of milling, the intensity of the peaks of the phosphides increases at the expense of the solid solution of phosphorus in iron,  $\alpha$ -Fe (P). The peaks are more Lorentzian and well resolved for evidence of the grains growth of the formed phases.

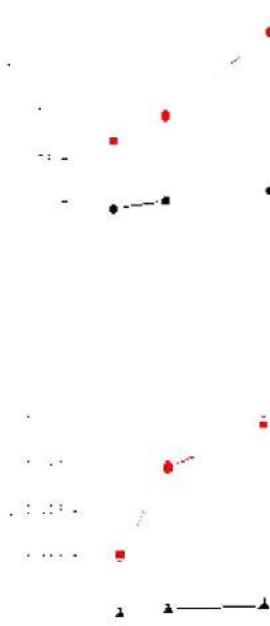
The Rietveld refinement of the X-ray diffractogram of the Fe-20P (wt.%) mixture milled for 24 h (Fig. 5) reveals the total disappearance of the Bragg peaks of the FeP phosphide. Thus, the best Rietveld refinement was obtained with four phases: a solid solution  $\alpha$ -Fe (P) with two disordered cubic centered structures denoted  $\alpha$ -Fe1 and  $\alpha$ -Fe2, the tetragonal  $Fe_3P$  and hexagonal  $Fe_2P$  phosphides. The phosphide  $Fe_2P$  is the most predominant with a coarse grain structure represented by intense Lorentzien peaks. The  $Fe_3P$  and  $\alpha$ -Fe (1 and 2) phases are more or less disordered, have fine grains and high microstrains characteristic of a Gaussian peaks. The disappearance of the FeP phase at 24 h of milling may be due to the accumulation of structural defects and microdeformations that increase the free energy of the FeP phase and therefore promote its decomposition.



**Fig 5.** XRD patterns of the Fe-20P powder mixture milled for 24 h. The reliability factors of the refinement are: ( $Sig=1.1316$ ;  $R_w=8.5455$ ;  $R_{Wnb}=7.8547$ ;  $R_b=6.4998$ ;  $R_{exp}=7.5515$ )

The evolution of structural and microstructural parameters of the solid solution phase's (Fig.6), such as the average crystallite size,  $\langle L \rangle$ , and the crystalline parameter,  $a$ , as a function of the milling time, reveals that these parameters are almost stable for the  $\alpha$ -Fe1 phase during milling. This result proves that this phase is more or less pure than  $\alpha$ -Fe2 and the small variations of the order of the error are due to the repeated and random phenomena of fracture and welding. On the other hand, for  $\alpha$ -Fe2, these parameters increase gradually. The largest crystallites size

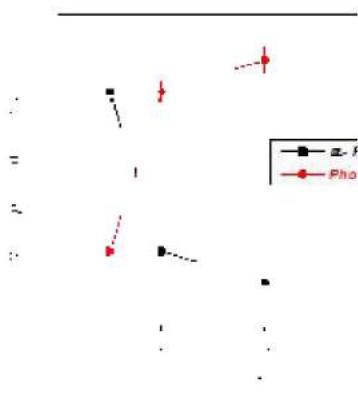
and crystallite parameter are detected after 24 hours of milling to equal a values of 117 and 0.2892 nm, respectively. According to these results we can assume the  $\alpha$ -Fe1 phase, which has a crystalline parameter which varies little with respect to the perfect mesh parameter by increasing in long milling times and which has a stable average grain size and Lorentzian diffraction peaks, is the phase of pure iron. On the other hand, the increase of the crystalline parameter and the variation of the average grain sizes of the second phase and its Gaussian peaks is that which undergoes transformations in the solid state,  $\alpha$ -Fe2, that we can conclude that it is the most enriched phase in phosphorus and the place of all solid transformations.



**Fig 6.** Milling time dependence of the mean crystallite size and the lattice parameters for  $\alpha$ -Fe1 and  $\alpha$ -Fe2 structures

Figure 7 shows that the variation of the iron phosphides and  $\alpha$ -Fe(P) solid solution proportions, as a function of milling time, exhibit antagonist behaviour. Indeed, the phosphides percentage increases with increasing milling time from 25 to 91 % for 3 and 24 h, respectively, while that of the iron solid solution decreases from 75 to 9 %. At the beginning of

milling the increase of the local temperature inside the balls is noted. This temperature, which is higher than that of phosphorus melting, can promote its combustion by friction or impact. This property of phosphorus takes over and then the formation of the largest percentage of phosphides, 75%, is observed at the first hours of milling. Exceeding the combustion reaction, diffusion, fracture and welding takes over and continuoussolid state transformations are observed.



**Fig 7.** Milling time dependence of the phase percentage.

#### 4. Conclusion

The formation of the phosphide alloy is the result at first of combustion of phosphorus then diffusion by repeated fracture and welding phenomena, which tend to agglomerate and deagglomerate the ground powders particles. Rietveld analysis of the diffraction peak profiles using isotropic model reveals the presence of two cubic structures centered  $\alpha$ -Fe1 and  $\alpha$ -Fe2 from 3 hours of milling. The product obtained, after 24 hours of milling, consists mainly of the three phosphides  $Fe_2P$  and  $Fe_3P$  of grain sizes equal to 26, 65 nm, respectively. We assume that the use of the anisotropic model and the study of the mechanical properties like "Young modulus and Poisson coefficient" as well as the calculation of the probability of the presence of stacking faults and the dislocation density by the Rietveld method will help us to explain better the solid state reactions in iron phosphides alloys.

#### 5. Acknowledgements

This work was supported by the Ministry of Higher Education and Scientific Research, Algeria. The authors are very grateful to A. M. Mercier from the IMMM UMR CNRS 6283, Maine University, France for performing X-ray

diffraction measurements. All the thanks for Professor J.M. Grenèche for his hospitality at the Institute of Molecules and Materials of Maine University, France, where we elaborate the powders and Professor S. Alleg from LM2S laboratory of Annaba University, Algérie for the elemental powders.

#### Référence

- [1] Arinsson B., Landstrom T., Randquist S., Borides, Silicides and phosphides, Weley, New York, 1965.
- [2] Garcia-Arribas A. M., Fdez-Gubieda L., Orue I., Barandiaran J. M., (1995) Correlation between structure and magnetic behavior of Fe-P amorphous alloys, Phys. Rev. B 52 (17) : 12805. DOI:[https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.12805-12810](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.12805).
- [3] Hu C. G., Li Y., Liu J. P., Zhang Y. Y., Bao G., Buchine B., Wang Z. L., (2006) "Sonochemical Synthesis of Ferromagnetic Core-shell  $Fe_3O_4$ - $FeP$  Nanoparticles and  $FeP$  Nanoshells", Chem. Phys. Lett. 428 343-347. DOI:<https://doi:10.1016/j.cplett.2006.07.037>
- [4] Gu Y., Guo F., Qian Y., Zheng H., Yang Z. (2002) A solvothermal synthesis of ultra-fine iron phosphide, Mat. Res. Bull. 37: 1101-1105. [https://doi.org/10.1016/S0025-5408\(02\)00749-3](https://doi.org/10.1016/S0025-5408(02)00749-3)
- [5] Dekhil L., Alleg S., Bououdina M., Suñol J.J. and Grenèche J.M. (2015) Phase transformations and magnetic properties of ball-milled Fe-6P-1.7C powders, Adv. Pow. Tech. 26 : 519-526. <https://doi.org/10.1016/j.apt.2014.12.011>.
- [6] Tebib, W., Chenouga, I. (2018) Effects of substitutional site in mechanical behavior of highly reactive nanostructured iron phosphides alloys, J. Phys. Energ. 2 : 26-30. <https://ipebechar.org/wp-content/uploads/2018/05/jpe v02 y2018 a 06 tebib.pdf>
- [7] Kim Y. K., Cho Y. W., (2005) Magnetic transition of  $(MnFe)_{y}P_{1-x}As_x$  prepared by mechanochemical reaction and post-annealing J. Alloys Compounds 394: 19-23. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.10.023>.
- [8] Yelsukov E. P., Konygin G. N., Zagainov A. V., Barinov V. A., (1999) Magnetic properties of amorphous Fe78P22 alloy obtained by mechanical grinding, J. Magn. Magn. Mater. 195 :601-604. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00175-4](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00175-4).
- [9] Mihalca I., Morariv M., Lita M., Bibicu I., Ercuta A., Luca D., (1999) Structural characterization of FeCrP-type mesoscopic system, J. Magn. Magn. Mater. 201: 53-57. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00169-9](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00169-9).
- [10] Okamoto H., ASM Handbook, 2•200/ Binary Alloy Phase Diagrams (1992).
- [11] Tebib W., Alleg S., Bensalem R., Bensebaa N., Bentayeb F.Z., Sunol J.J., Grenèche J.M., (2008) Structural characterization of nanostructured Fe-8P powder mixture. J. Nanosci. Nanotech. 8 : 2029-2036. DOI: 43010.1166/jnn.2008.056.
- [12] Tebib W., Alleg S., Grenèche J. M., and Suñol J., (2018) Thermal stability of the

- nanocrystalline Fe-8P (wt.%) powder produced by ball milling, J. Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Relat. Elemt. **193:8** 500.  
DOI: [10.1080/10426507.2018.1452233](https://doi.org/10.1080/10426507.2018.1452233)
- [13] SenGupta S.P. & Chatterjee P. (Eds.) Powder Diffraction. Proc. II Int. School on Powder Diffraction, IACS, Kolkata, Allied Publishers Ltd, ISBN 81-7764-262-6, 63-76, 2002.
- [14] Suryanarayana, (2001) Mechanical alloying and milling Inter. Prog. Mat. Scie. 46 :1-184. [https://doi.org/10.1016/S0079-6425\(99\)00010-9](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00010-9)
- [15] Kim Y. K. and Cho Y. W., (2005) Synthesis of transition metal pnictide nanocrystalline powders by mechanochemical reaction, J. Alloys Compds 393: 211-218. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.10.022>
- [16] Byun, J.S.; Shim, J.H.; Cho, Y.W. (2003) Influence of Mn on Microstructural Evolution in Ti-Killed C-Mn Steel. Scr. Mater., 48: 449-454. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(02\)00437-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(02)00437-2)
- [17] Hu Z., Fan Y., Wu Y., Yan Q. and Chen Y. (1995) A study on  $Fe_{100-x-y}P_xBy$  ultrafine amorphous alloy particles, J. Magn. Magn. Mater. 140-144 : 413-414. [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(94\)01517-1](https://doi.org/10.1016/0304-8853(94)01517-1)
- [18] Najafabadi R., Srolovitz D. J., Ma E. and Atzman M.,(1993) Thermodynamic properties of metastable Ag-Cu alloys, J. Appl. Phys. 74:3144-3149.<https://doi.org/10.1063/1.354582>



# REVUE ALGERIENNE DES SCIENCES-A-

## Sciences de la Nature et de la Vie

## Sciences techniques

ISSN : 2661-7064

<http://univ-eltarf.dz/fr/>



## Prévision des paramètres des cycles de densification par compression isostatique à chaud de poudre de Tungstène

Rabah LAIDI<sup>a\*</sup>, Locif REDOUANI<sup>b</sup>

<sup>a,b</sup>Université Chadli Bendjedid - El Tarf, Faculté des Sciences et de la Technologie, Laboratoire de physico-chimie des matériaux, El Tarf, Algérie, 36000.

### Informations

### Résumé

#### Mots clés :

CIC

compaction de poudre

densification de poudre diagrammes de densifications mécanisme de densification.

#### Correspondance :

[laidirabah@gmail.com](mailto:laidirabah@gmail.com)

[locifredouani@gmail.com](mailto:locifredouani@gmail.com)

Reçu le : Révisé le :Accepté le :

Ce travail consiste en la modélisation du procédé de compression isostatique à chaud (CIC), en vue d'une compréhension approfondie des différents mécanismes physiques et mécaniques impliqués dans la densification de poudre. Le modèle est formulé après une étude détaillée des différentes équations qui décrivent chaque mécanisme. A partir de données issues de simulations microscopiques du mécanisme CIC pour le cas de particules de poudre de tungstène, des traitements numériques ont été réalisés et un nouveau type de diagramme de densification est ainsi réalisé.

### 1. Introduction

Cette étude a pour objet d'exploiter la modélisation numérique de la compaction isostatique à chaud (CIC, *Hot Isostatic Pressing HIP*) de façon à pouvoir mettre en œuvre de nouvelles cartes de densification.

La CIC est un procédé d'élaboration de pièces métalliques ou céramiques à partir de poudres. Par cette technique, on cherche à obtenir des pièces, de microstructure uniforme et contrôlée, de tailles variables et de formes plus ou moins complexes.

La poudre à densifier est introduite dans un moule, appelé conteneur, beaucoup plus malléable que le matériau de base de la poudre. Le conteneur est ensuite sellé et mis dans une enceinte haute pression.

Une pression et une température sont alors appliquées simultanément et progressivement jusqu'atteindre les paramètres de traitement suivant un cycle opératoire bien déterminé.

Dans la CIC, la modélisation du processus de densification de la poudre est très complexe vu le grand nombre de phénomènes

physiques qui peuvent intervenir simultanément ou successivement. Il y a lieu ainsi de faire un aperçu sur ces mécanismes dont les équations sont utilisées pour établir les diagrammes de densification qui permettent de prévoir la densité relative des comprimés et les paramètres des cycles opératoires.

### 2. Modélisation de la CIC

Dans ce travail nous allons adopter l'approche micromécanique qui consiste à assimiler les agrégats de poudres à des empilements aléatoires denses (EAD) de particules sphériques monodimensionnelles. Cette théorie n'est pas évidemment réaliste mais permet de simplifier considérablement l'étude de la densification des poudres.

## 2.1 Etude des EAD

L'évolution de la morphologie des particules permet de diviser la densification en deux étapes. Le stade I, où la densité relative D est comprise entre 0,64 et 0,92, caractérisé par une porosité ouverte et interconnectée et le Stade II avec une densité qui évolue de 0,92 à 1 et où la porosité est fermée et de forme sphérique [1-3].

Les paramètres de densification, soient le nombre de coordination (Z), la surface de contact (a) et la pression efficace ( $P_{\text{eff}}$ ), sont évalués par plusieurs auteurs [2-5]. Ils permettent de calculer les équations des différents mécanismes susceptibles de contribuer à la densification.

**Tab.1** Tableau récapitulatif des expressions des paramètres des EAD.

Paramètre de l'EAD	Stade I : 0,64 ≤ D ≤ 0,92	Stade II : 0,92 ≤ D ≤ 1
Nombre de coordination	$Z = 12D$	$Z = 12$
Surface moyenne de contact	$a = \frac{2\pi}{3} \left( \frac{D - D_0}{D_0} \right)$	$a = \frac{\pi R^2}{3} \left[ 1 - 5 \left( \frac{1-D}{5D} \right)^{2/3} \right]$
Pression efficace	$P_{\text{eff}} = \frac{D_0}{2D(D - D_0)}$	$P_{\text{eff}} = \frac{1}{1 - 5 \left( \frac{1-D}{5D} \right)^{2/3}} P$

## 2.2 Mécanismes de densification

La modélisation du processus CIC est basée sur l'évaluation les contributions à la densification des mécanismes de déformation et de transport de matière en fonction des paramètres de densification (temps, pression et température). Dans l'approche microscopique (micromécanique), les mécanismes concernés sont l'écoulement plastique, le fluage en loi de puissance, les mécanismes de diffusion (diffusion intergranulaire et diffusion en volume à partir des joints de grains) et de l'écoulement diffusionnel (fluage de Nabarro-Herring et Coble) [6]. Ce dernier mécanisme n'est pas considéré dans notre cas, car la condition principale pour

qu'il puisse intervenir durant la densification est que la taille des grains cristallographiques soit négligeable devant celle des particules de poudre, or cette condition n'est pas vérifiée dans le cas du tungstène qui constitue l'objet de notre application.

On admet que la déformation plastique a lieu quand la pression efficace exercée sur un contact est supérieure ou égale à la valeur limite  $3\sigma_y$ . Ainsi, l'expression de la contribution de la déformation plastique est évaluée par [2]:

$$\Delta D_y = D_y - D_0 = \frac{D_0}{2} \left[ \left( 1 + \frac{2}{3D_0} \frac{P}{\sigma_y} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (1)$$

La quantité  $D_y$  représente la densité relative atteinte dans le comprimé après déformation plastique des contacts entre les particules.

Les autres mécanismes contribuent à la densification durant le palier du cycle CIC. Dans cette étape, l'agrégat de poudre est soumis à l'action de la pression appliquée sous l'effet d'une température élevée.

Au stade I, les équations des vitesses de fluage en loi de puissance, de diffusion intergranulaire et de diffusion en volume sont exprimées successivement par [2,7]:

$$\dot{D} = 2A \left( \frac{D_0}{D} \right)^{1/3} \left[ \frac{D(D - D_0)}{D_0} \right]^{1-n} \left( \frac{P}{6} \right)^n \quad (2)$$

$$\dot{D} = 72 \frac{\delta D_b \Omega}{KTR^3} \frac{D_0^{5/3} D^{1/3}}{(D - D_0) g(D)} P \quad (3)$$

$$\dot{D} = 59 \frac{D_V \Omega}{KTR^2} \frac{D_0^{7/6} D^{1/3}}{(D - D_0)^{1/2} g(D)} P \quad (4)$$

Avec :

$$g(D) = \left[ \left( \frac{D}{D_0} \right)^{1/3} - 1 \right] \left\{ 2Z_0 + C \left[ \left( \frac{D}{D_0} \right)^{1/3} - 1 \right] \right\} \quad (5)$$

où  $Z_0=7.3$  est le nombre de coordination initial et  $C=15.5$  est une constante.

Au stade II, elles sont exprimée successivement par [2,7,8]:

$$\dot{D} = \frac{3}{2} A \frac{D(1-D)}{[1-(1-D)^{1/n}]^n} \left( \frac{3}{2n} P \right)^n \quad (6)$$

$$\dot{D} = 27 \frac{\delta D_b \Omega}{KTR^3} \left\{ D^2 / \left[ 1 - 5 \left( \frac{1-D}{5D} \right)^{2/3} \right] \right\} P \quad (7)$$

$$15 \frac{D_V \Omega}{KTR^2} \left\{ D^2 \left( \frac{1-D}{5D} \right)^{1/3} / \left[ 1 - 5 \left( \frac{1-D}{5D} \right)^{2/3} \right] \right\} P \quad (8)$$

## 3. Simulation numérique

La méthode utilisée est celle habituellement utilisée par les artisans de

l'approche micromécanique [4-6]. Elle consiste à considérer que la densification des poudres par CIC est déclenchée par la déformation plastique qui s'opère au début du palier du cycle CIC. Ensuite, les autres mécanismes, dépendant du temps, interviennent jusqu'à la fin de la densification.

Le programme de simulation est établi en calculant d'abord la densité relative après déformation plastique. Ensuite, l'incrémentation est effectuée par itération avec un intervalle de temps  $\Delta t=1$ , où les contributions des autres mécanismes sont additionnées à la densité calculée précédemment. Des tests sont effectués à chaque fois afin de déterminer lesquelles des équations du Stade I ou stade II à utiliser [2].

#### 4. Résultats et discutions

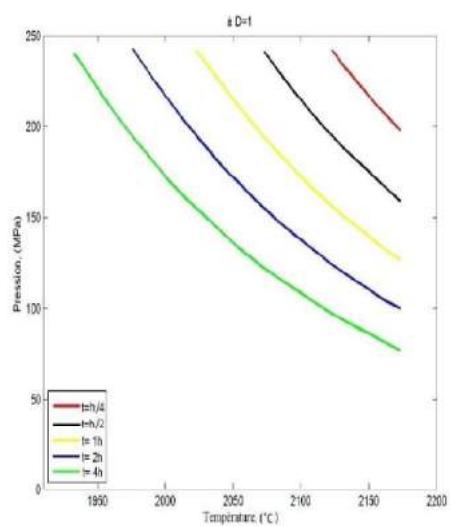
Les figures 1 et 2 représentent un nouveau type de diagrammes de densification que nous proposons pour prévoir les paramètres à choir (température, pression et temps) afin d'aboutir une densité relative voulue.

Dans le premier type de diagrammes (Fig. 1), la pression de traitement est représentée en fonction de la température pour

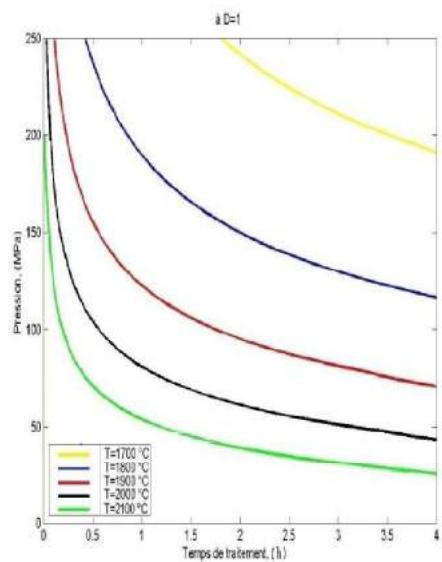
différents temps de traitement afin d'obtenir une densification complète de la poudre de tungstène.

Dans le deuxième type (Fig. 2), la pression est donnée en fonction du temps pour différentes températures.

Il est utile de signaler que ce genre de diagramme est très intéressant, notamment pour les industriels, car il permettra de réduire les tests de mise au point et par la même occasion de faire des économies en temps, donc en énergie.



**Fig. 1.** Diagramme de densification par CIC de poudre de tungstène représentant la variation de la pression en fonction de la température pour différents temps de traitement afin d'obtenir une densité relative complète.

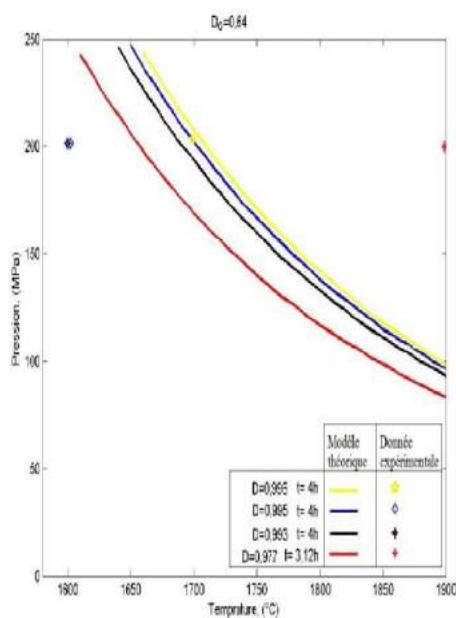


**Fig. 2.** Diagramme de densification par CIC de poudre de tungstène représentant la variation de la pression en fonction du temps de traitement pour différentes températures du palier de cycle opératoire pour une densité  $D=1$ .

Dans le cadre de l'analyse des résultats des simulations numériques du procédé CIC, nous avons effectué des comparaisons avec des données expérimentales trouvées dans la littérature pour la poudre de tungstène [9].

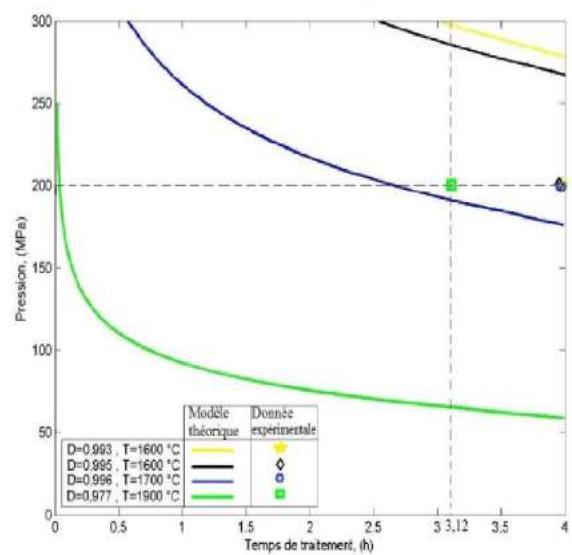
Les mêmes comparaisons sont réalisées sur deux les deux figures 3 et 4 (respectivement en fonction de la température et en fonction du temps).

Les résultats de simulation ont été confrontés à des mesures directes de densification tirées de la littérature et concernent la poudre à base de tungstène.



**Fig.3.** Comparaison des prévisions théoriques des simulations CIC aux données expérimentales de poudres de tungstène pour différentes densités avec des courbes représentant la pression en fonction de la température.

Nous cherchons par-là, à démontrer que le choix préalable dans les expériences des paramètres de densification pourrait donner des résultats erronés. En effet, les comparaisons que nous avons effectuées montrent qu'une seule mesure expérimentale est prévue par la théorie, soit la densité relative  $D=0,996$  à  $1700^{\circ}\text{C}$ . Cela peut s'expliquer par le fait qu'en pratique, on ne sait pas dans quelles conditions peut-on avoir la densité voulue, alors qu'il suffit de changer un paramètre (température ou pression) pour enclencher un important gradient de densité.



**Fig. 4.** Comparaison des prévisions théoriques des simulations CIC aux données expérimentales de poudres de tungstène pour différentes densités avec des courbes représentant la pression en fonction de temps.

## 5. Conclusion

Dans ce travail, nous avons proposé un nouveau type de diagrammes de densification de poudres métalliques par le procédé CIC. Ces diagrammes peuvent prévenir les paramètres (pression et température) des cycles opératoires à utiliser en fonction de temps pour l'obtention de densité voulue.

Il est constaté que ces diagrammes sont très utiles vu les informations que peuvent offrir.

Par ailleurs, des écarts importants entre les données expérimentales et les prévisions théoriques sont révélés par les résultats. Plusieurs facteurs peuvent être à l'origine de ces écarts, tels que le manque de fiabilité des valeurs des constantes de matériau de base des poudres, la négligence de l'étape de montée en pression et en température dans les simulations, l'influence des conditions de départs (densité relative initiale, taille des particules, etc.) sur les densités finales des comprimés et, enfin, la distribution aléatoire de la taille des particules de poudres, etc.

## References :

- [1] Boudrahem, S., Grosbras, M. (1999) Évolution de la morphologie des pores durant la compression isostatique à chaud de poudres sphériques. Mater. Tech. 87: 21-24.
- [2] Redouani, L., Boudrahem, S. (2012) Hot isostatic pressing process simulation: application to metal powders. Can. J. Phys. 90: 573-583.
- [3] Redouani, L., Boudrahem, S., Alem, S. (2019) New hot isostatic pressing (HIP) simulation method with taking into account of the operating cycle ramp. Int. J. Adv. Manuf. Technol. 102: 3291-3299.
- [4] Arzt, E., Ashby, M. F., Easterling, K.E. (1983) Practical applications of Hot Isostatic Pressing Diagrams: Four case studies, Metall. trans. A. 14A: 211-220.
- [5] Helle, A.S., Easterling, K.E., Ashby, M.F. (1985) Hot-isostatic pressing diagrams: new developments. Acta. Metall. 33: 2163-2174.
- [6] Ashby, M.F. (1974) A first report on sintering diagrams, Acta Metall. 22: 275-289.
- [7] Redouani, L. (2013) Nouvelle approche de la modélisation de la densification de poudres par compression isostatique à chaud. thèse de doctorat. Université de Béjaia. Algérie.
- [8] Wilkinson, S., Ashby, M. F. (1975) Pressure sintering by power law creep. Acta. Metall. 23: 1277-1285.
- [9] Jasper, B., Coene, J.W., Riesch, J., Höschken, T., Bram, M., Linsmeier, C. (2015) Powder Metallurgical Tungsten Fiber-Reinforced Tungsten. Materials Science Forum. 825-826 : 125-133.

## Liste des symboles

$A$	Constante de fluage en loi de puissance
$A'$	Constante de Dorn
$b$	Vecteur de Burger
$D$	Densité relative
$D_0$	Densité relative initiale
$D_h$	Coefficient de diffusion intergranulaire
$D_V$	Coefficient de diffusion en volume
$K$	Constante de Boltzmann
$n$	Exposant de fluage en loi de puissance
$R$	Rayon moyen des particules de poudre
$T$	Température
$\delta$	Epaisseur de joint de contact
$\Omega$	Volume atomique
$\sigma_y$	Limite élastique du matériau



## First principles calculation of the optical properties of zinc-blende $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$

S.Touam<sup>a</sup>, R.Belghit<sup>b</sup>, S.Chelli<sup>a</sup>, L.Hamioud<sup>a</sup>, S.Ghemid<sup>a</sup>, H.Meradji<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire LPR, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université d'Annaba ,Algérie

<sup>b</sup>Laboratoire LESIMS, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université d'Annaba Algeria

Informations	Abstract
<b>Key-words :</b> FP-LAPW quaternary alloys, lattice matched	We have presented The structural, electronic and optical properties of $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$ quaternary alloys in the zinc-blende phase have been calculated by using the full potential-linearized augmented planewave method within density functional theory. (DFT). We use both Wu-Cohen and Engel-Vosko generalized gradient approximations of the exchange-correlation energy that are based on the optimization of total energy and corresponding potential, respectively.. We study the effect of composition on lattice constants, bulk modulus, band gap ,optical dielectric constant and refractive index shows a non-linear dependence and. reflectivity, absorption coefficient and energy-loss, The energy band gap $Eg(x,y)$ alloy deviates from a planar behavior displaying a two-dimensional gap bowing in the x - y plane. . In addition, the energy band gap of zinc-blende $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$ quaternary alloys lattice matched to GaAs substrate is investigated. It should be noted that the present work is the first theoretical study of the quaternary alloys of interest.
<b>*Correspondance :</b>  Reçu le, Révisé le, Accepté le	

### 1. Introduction

The I-VII copper halides CuCl, CuBr and CuI crystallize under ambient conditions in the zinc blende structure(space group F43m) ,and known to be semiconductors with a large and direct gap falls between 1 and 3 eV.

The 3d level of Cu plays an important role in the electronic properties of the copper halides. Unlike to III-V and II-VI compounds which have a localized 3d level (core states), in the copper halides this level is very close to those of the p levels of the halogen. This fact leads to a very heavy hybridization between the 3d and p electrons and increases noticeably the number of valence electrons per unit formula from 8 to 18. Accordingly, the electronic behaviors of copper halides were misused because of the presence of this 3d level of Cu. In particular, the spin-orbit splitting was found to be negative in these compounds [1], due to a strong admixture of the d copper electrons to the p electrons of the anion.

Copper halides attract much attention. Because of the possibility of producing micro-crystals [2]. As promising candidates for photosensitive and semiconducting materials, silver halides have attracted considerable

interest of experimental and theoretical researchers due to their prime role in the valued technological applications

The silver halides also find application in different areas like photographic processes [3], as well as in photo- and electro-chemistry [4] , They are also very good solid electrolytes [5], holography [6], catalysis [7,8] and as liquid semiconductors [9] , etc. . The promotion of electrons from the valence to the conduction bands in these halides by light capture plays a major role in the photographic process. Silver bromide (AgBr) (I-VII) under normal conditions in the rock-salt (space group Pm3m) structure ,whereas silver iodide (AgI) ( I-VII) crystallizes in the zinc-blende structure as well as in wurtzite structure at ambient conditions but at high pressures it transforms first into NaCl structure and at further high pressure then into CsCl structure [10-11].

The silver atom possesses a completely filled 4d shell, followed by a lone 5s electron which can be transferred to the halide atom. However, there is also hybridization of the silver d states and the halide p states leading to a more complicated electronic structure. In fact, on the Phillips [13].ionicity scale, silver halides lie close

to the borderline dividing ionic and covalent compounds; and AgBr is on the ionic side and AgI is on the covalent side.

The strong p-d hybridization separates the silver halides from the other compounds of the group II-VI, III-V and IV-IV.

In this work, we have examined the lattice constants, bulk modulus, band gap and refractive index, dielectric, constant reflectivity, absorption coefficient and energy-loss. Calculations are performed over the entire composition range of  $x$  and  $y$ . Second, the energy band gap, natural band offset, optical properties of alloys of interest lattice matched to CuI and InP substrate have been investigated.

After introducing the problem, the remaining paper is organized as follows. In Section 2 a brief description of the ab initio theoretical method is given. In Section 3, we describe the computational details; results and discussions for structural, electronic properties of the investigated quaternary alloys and their related binary compounds and ternary alloys. Finally, our work is summarized in Section 4.

## 2. Theoretical aspects and computational method

The calculations were performed by the FP-LAPW method [27] within the DFT to solve the Khon Sham equations as implanted in the WIEN2K code [28]. In the FP-LAPW method the wave function, charge density and potential were expanded differently in two regions of the unit cell by spherical harmonic functions inside non-overlapping spheres surrounding the atomic sites (muffin-tin spheres(MT)) , and by plane waves basis set in the remaining space of the unit cell (interstitial region(I)). Our calculations for valence electrons were performed in a scalar-relativistic approximation,

Table 1- Calculated lattice parameter (a), bulk modulus (B), and gap energy (Eg) for the binary compounds in the zinc-blende structure at equilibrium volume.

	<u>Lattice constant a(Å)</u>			<u>Bulk modulus B (GPa)</u>			<u>E<sub>g</sub>(eV)</u>			
	This work	Exp	Theo	This work	Exp	Theo	This work mbj/GGA	EV	Exp EV	Theo EV
CuI	5,988	<b>6,05<sup>g</sup></b>	6.062 <sup>j</sup>	50,495	36.6 <sup>g</sup>	39.447 <sup>h</sup> , 35.2 <sup>i</sup>	2,345	1,091	<b>1,97</b>	2.95 <sup>c</sup> , 1.764 <sup>q</sup> , 3.10 <sup>f</sup>
CuBrAgI	6.082 <sup>i</sup>			55,411	36.6 <sup>g</sup>	44 <sup>d</sup> , 34.8 <sup>k</sup>	1,731	0,383	1,346	2,91 <sup>l</sup> 1,118 <sup>c</sup>
AgBr	5,624	5,69 <sup>p</sup>	5.732 <sup>k</sup>	34,54	24 <sup>e</sup>	40.4 <sup>c</sup> , 26.667 <sup>q</sup>	3,896	0,632	1,464	2.077 <sup>q</sup> , 1.4 <sup>a</sup>
	6,48	6,49 <sup>a</sup>	6.61 <sup>b</sup> , 6.36 <sup>c</sup>	53,1466	41 <sup>o</sup>	60.3 <sup>r</sup> , 38 <sup>m</sup>	2,516	0,465	0,712	2,7 <sup>s</sup> 1.46 <sup>s</sup>
	5,682	5.75 <sup>n</sup>	5.64 <sup>r</sup>							

The calculated total energies using WCGGA scheme at many different volumes around equilibrium were fitted by Murnaghan's equation-of-state [31]. The equilibrium lattice parameter, bulk modulus and gap energy were presented and compared with the experimental data in **Table 1**. It is seen that the structural parameters are in good agreement with theoretical and experiment results.

with neglecting spin-orbit coupling, while the core electrons were treated fully relativistic. In this program, the valence and core states origin energies have been separated, and the -6Ry energy bound separating between the valence electrons and the core states was chosen. The exchange correlation potential for structural properties was calculated by the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (PBE-GGA) [29], while for electronic properties in addition to that, the Engel-Vosko (EV-GGA) formalism [30]

In the calculations reported here, we use the maximum 1 quantum number for the wave function expansion inside atomic spheres was confined to  $l_{\max} = 10$ . The plane wave cutoff of  $K_{\max} = 8.0/RMT$  where RMT is this equation should be the smallest muffin-tin radius in the unit cell) is chosen for the expansion of the wave functions in the interstitial region while the charge density is Fourier expanded up to  $G_{\max} = 14(\text{Ryd})^{1/2}$ . The muffin-tin radius RMT was assumed to be 2.4, 2.5, 2.5 and 2.2 a.u. for Cu, Ag, Br and I atoms, respectively.

A mesh of 72 special k points for binary compounds, 32 special k points for ternary alloys, and 32 special k points for quaternary alloys were taken in the irreducible wedge of Brillouin zone. for the energy calculation,

## 3. Results and discussion

### 3.1 Binary compounds

The quaternary compounds **Cu<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>Br<sub>y</sub>I<sub>1-y</sub>** are bordered by the ternary alloys AgBr<sub>1-x</sub>I<sub>x</sub>, AgBr<sub>1-x</sub>I<sub>x</sub>, **Cu<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>I**, **Cu<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>Br** and **CuBr<sub>x</sub>I<sub>1-x</sub>** which are bounded, in their turn, by four binary compounds **CuI**, **CuBr** and **AgI** in the zinc blend structure and **AgBr**, in the NaCl structure.

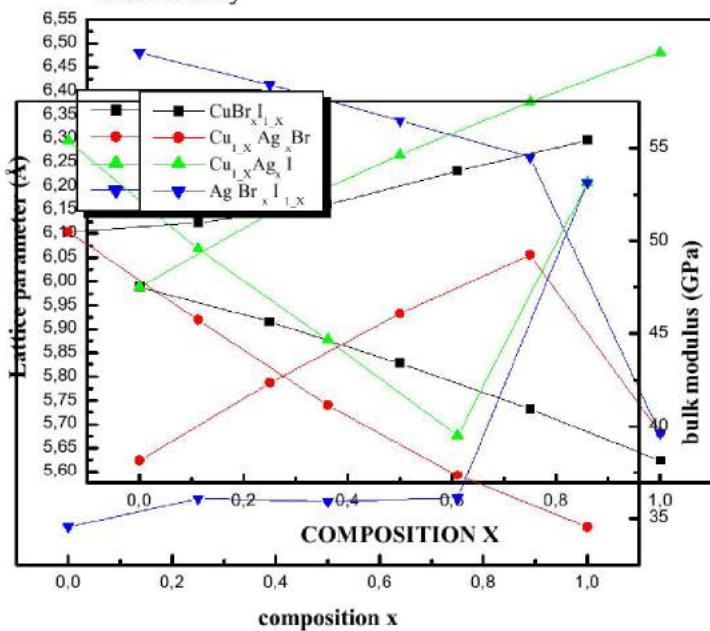
The computed band structures of binary compounds using mbj and EV schemes indicate a direct band gap for **CuI** and **CuBr** and **AgI**, while **AgBr** are an indirect band gap with the X-L-Γ ordering of the conduction valley minima. In fact the results are presented in Table 1. , these results within mbj are in very good agreement with the available experimental values. This is

mainly due to the fact that the functionals within this approximation have simple forms that are not sufficiently flexible to reproduce accurately both exchange- correlation energy and its charge derivative.

### 3.2 Ternary alloys

In this section, our simulations was to study the pseudobinary  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x\text{Cu}_{1-x}$ ,  $\text{Ag}_x\text{I}_x\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$  and  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ alloys which have been modeled at some selected compositions  $x=0.25, 0.5, 0.75$  with ordered structures described in terms of periodically repeated supercells following the SQS approach.

The second step of our calculations was to study the structural properties of  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}_x\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$  and  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ alloys. Our calculated lattice constants at different compositions, as shown in Fig. 1(a), were found to vary almost linearly following Vegard's law with amarginal upward bowing parameters equal to  $-0.69956$ ,  $+0.48696$ ,  $-0.07716$ and  $-0.36516\text{\AA}$ , respectively. However, violation of Vegard's law has been reported in semiconductor alloys both experimentally ,and theoretically



**Fig. 1.**Composition dependence of the calculated lattice constant (a) and bulk modulus (b) of the four pseudo-binary alloys using WC-GGA.

A comparison of the lattice constant and bulk modulus of these alloys shows that an increase of the earlier parameter is accompanied by a decrease of the later one, which is in agreement with the well-known relationship between B and the lattice constant:  $B \propto V_0^{-1}$ , where  $V_0$  is the unit cell volume. It represents bond strengthening or weakening effects induced by changing the composition [50].

We observe an important deviation of the bulk modulus from the linear concentration dependence in Fig. 1(b) with downward bowing equal to  $-1,0712, 1,266, 1,0596$  and  $-0,5892\text{GPa}$  for  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$ and  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ alloys, respectively,

It should be noted that the values of the bulk modulus bowing are closed each other which should be mainly due to the small mismatches of the bulk modulus of the binary compounds.

A more precision comparison of the behaviors of the  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$  and  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ ternary alloys (Fig. 1) shows that the decrease of the lattice constant is accompanied by the increase of the bulk modulus. It represents bond strengthening or weakening effects induced by changing the composition. We turn our attention to study the electronic properties of the ternary alloys via calculating the energy gaps.

The results of the gap bowing parameter of  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$ ,  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$  and  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$ alloys are, respectively, equal to  $3,732, 2,466, 2,144$  and  $2,332\text{ eV}$  for (mbj ), while for EVGGA they are equal to  $1,566, 1,98$ (Ref [51]:  $2,056$ ),  $1,24$  and  $1,973\text{eV}$ .

The variation of the energy band gaps as a function of composition  $x$  for ternary alloys  $A_xB_{1-x}C$  providing a positive gap bowing. Hence it is usually expressed by

$$E_g = xE_{AC} + (1-x)E_{BC} - x(1-x)b_E \quad (1)$$

Where  $b_E$  is the gap bowing and  $E_{AC}$  and  $E_{BC}$  energy gap of the binary

It is clearly seen that the direct band gap increases non-linearly with increasing concentration  $x$ , and seen that the band gap values given by MBJ are in good agreement with the experiments. Fig. 2 shows the composition dependence of the calculated band gaps for the material of interest.

Using both the mBJ exchange potential approximation, EV-GGA ,we observed a direct band gap located at the  $\Gamma$  point in the whole range of concentrations. The value of the bowing parameter at different concentrations is

calculated by fitting the non-linear variation of the calculated direct band gap with polynomial function Results as shown in Fig. 2 are summarized as follows:

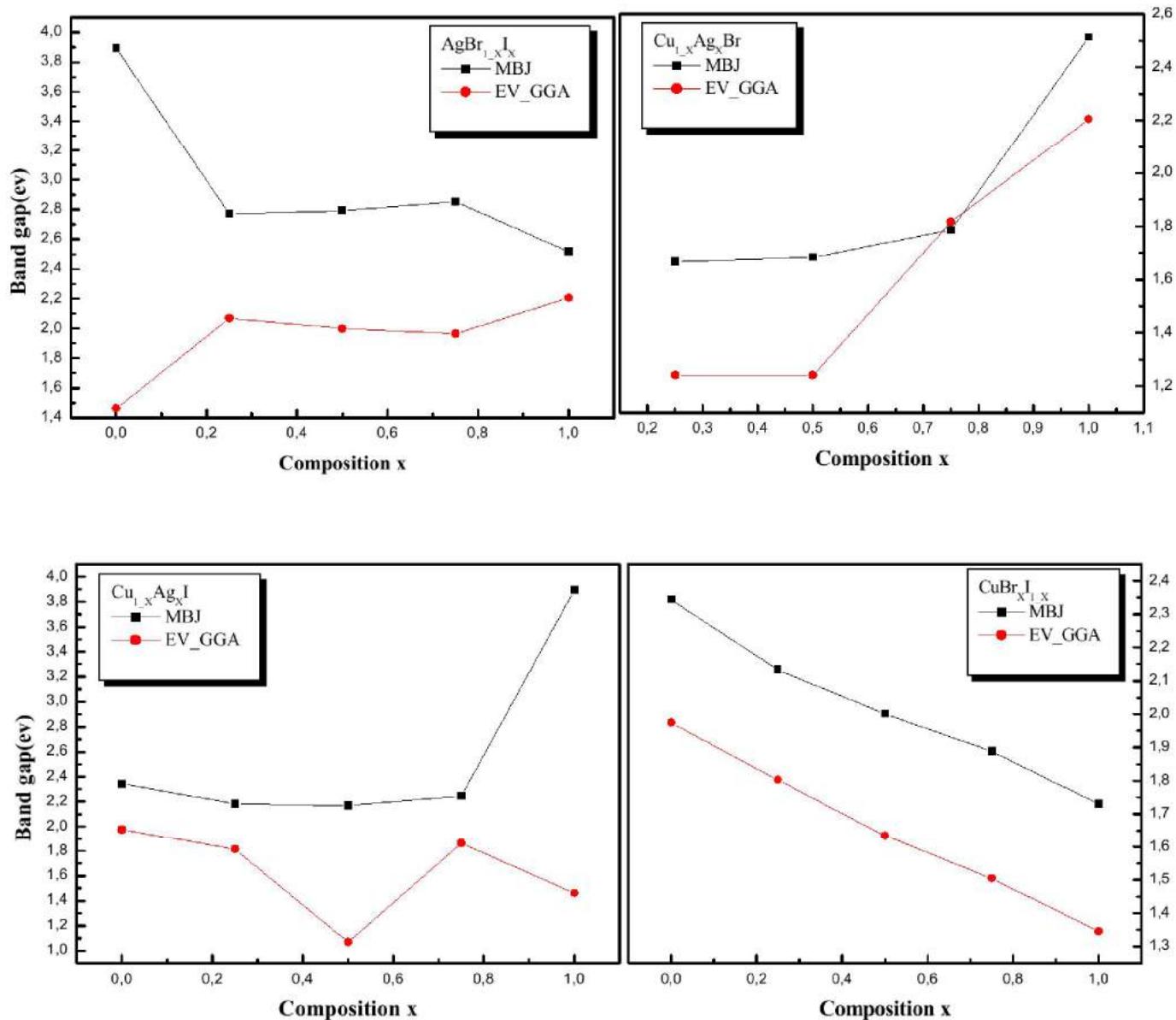


Fig. 2 - Energy band gap as functions of the composition  $x$  for the ternary alloys: (a)  $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ , (b)  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}$ , (c)  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{I}$ , (d)  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$  by MBJ and EV-GGA.

### 3.3 Quaternary $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$ alloys

In this section, we present the structural, electronic and optical properties of the  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys, are crystallized in the zincblende structure, where the lattice parameter, bulk modulus, energy band gap and refractive index for different composition rates ( $x, y$ ) We have adopted the

"Special Quasirandom Structures" (SQS) approach.

The supercell used in our calculations of  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  alloys were thus obtained by a simulated annealing procedure by among 64-atom simple-cubic structures including systems with random, high symmetry, and low symmetry atomic positions, the ones minimize the total

energy with respect to the cell parameters and the atomic positions were searched.

We found out that the structure with the most symmetric atomic positions is the most stable system and has the least total energy. Our results concerning lattice constant and bulk modulus versus x and y concentration for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys is presented in Fig.3, respectively. have marginal deviation of the lattice constant from Vegard's law can be observed, and a large deviation of bulk modulus from linear concentration dependence (LCD) is visible.

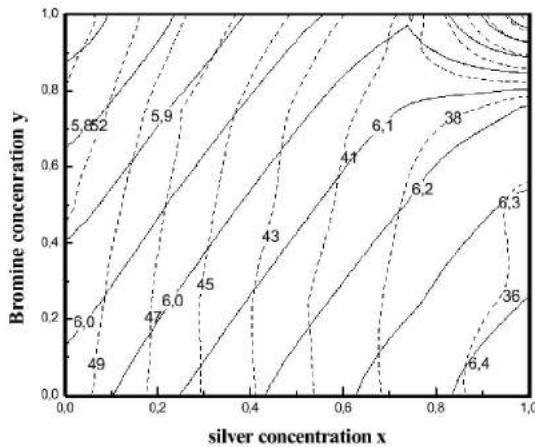


Fig.3 - Contour map of the calculated lattice constant in ( $\text{\AA}$ ) (solid lines) and bulk modulus in (GPa) (dashed lines) versus the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys

The formation energies  $E_{\text{Form}}(x, y)$  of quaternary alloys at different concentrations were calculated using the following formula:

$$E_{\text{Form}}(x, y) = E_{\text{CuAgBrI}} - xyE_{\text{AgBr}} - (1-x)yE_{\text{CuBr}} - x(1-y)E_{\text{AgI}} - (1-x)(1-y)E_{\text{CuI}} \quad (2)$$

Where  $E_{\text{AgI}}$ ,  $E_{\text{CuBr}}$ ,  $E_{\text{AgI}}$ ,  $E_{\text{CuI}}$  are the total energy of the binary compounds and  $E_{\text{CuAgBrI}}$  is the total energy of quaternary alloys at the related concentration.

We note that the results of the formation energy do only to some extent provide insight onto stability and for a more complete study the entropy of the system should be included. Figure 4 shows the results in a contour plot form, the darker part of the graph the more stable the corresponding alloy. It is clear the least stable alloys are around 25 and 75% concentrations of both Ag and Br atoms.

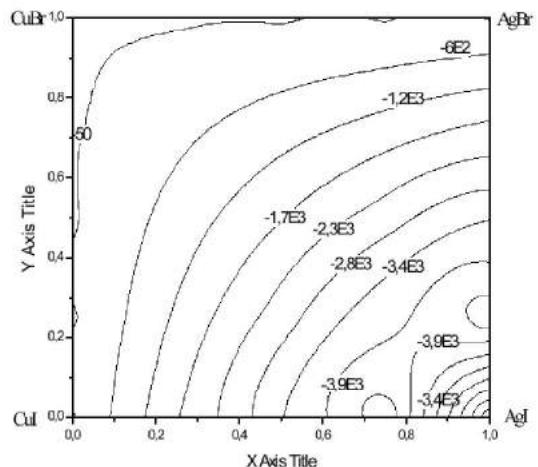


Fig.4 - Contour map of the calculated formation energy contour lines (Ryd/cell) versus the compositions x and y  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys

### 3.4 Electric properties

We discuss the band structure of  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  alloys for the transitions from the high-symmetry points  $\Gamma$  in the Brillouin zone. It should be noted that our direct band-gap value for composition  $x=y=0.85$  (2.85 eV) using by mBJIn view of Fig 5 The variation of the band gaps depend nonlinearly on the compositions especially at high concentration of Cu and Br.

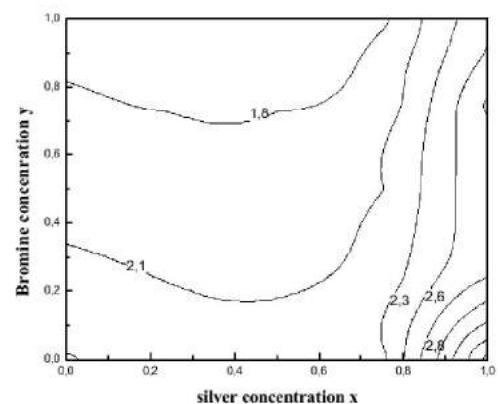


Fig.5 - Contour map of the calculated energy band gap in (eV) versus the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys.

The optical properties of the  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  system are usually described in terms of the complex dielectric function  $\epsilon(\omega)$ , which

represents the linear response of a system due to an external electromagnetic field with a small wavevector. It can be expressed as [51,52]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (3)$$

Where  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$  are the real and imaginary components of the dielectric function, respectively.

$\varepsilon_2(\omega)$  The imaginary part of the frequency dependent dielectric function has been calculated directly from the electronic structure calculation using the joint density of states and the momentum matrix elements (the optical matrix elements) we use the corresponding eigen functions of each of the occupied and unoccupied states.

- ✓ The real part  $\varepsilon_1(\omega)$  of the dielectric function can be extracted from the imaginary part  $\varepsilon_2(\omega)$  by the Kramers-Kronig relation.
- ✓ The knowledge of both the real and the imaginary parts of the dielectric function allows the calculation of important optical functions

The optical constants such as refractive index  $n = (x)$  and the extinction coefficient  $k = (x)$ , are calculated in terms of the real and imaginary part of the complex dielectric function given by:[53-55]

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2(\omega)\varepsilon_2^2(\omega)+\varepsilon_1(\omega)}{2}} \quad (4)$$

$$K(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2(\omega)\varepsilon_2^2(\omega)-\varepsilon_1(\omega)}{2}} \quad (5)$$

At low frequency ( $\omega=0$ ), we get the following relation

$$n(0) = \varepsilon^{1/2}(0) \quad (6)$$

The refractive index and dielectric constants are very important to determine the optical and electric properties of the crystal.

**Fig 6** displays the contour map of the calculated dielectric function versus the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys. One can note that dielectric function index decreases with the increasing of x and y and depend nonlinearly on the compositions. dielectric function of alloys are found to be, 2.2, 2.3 , 2.4 4.8and 6.2 respectively.

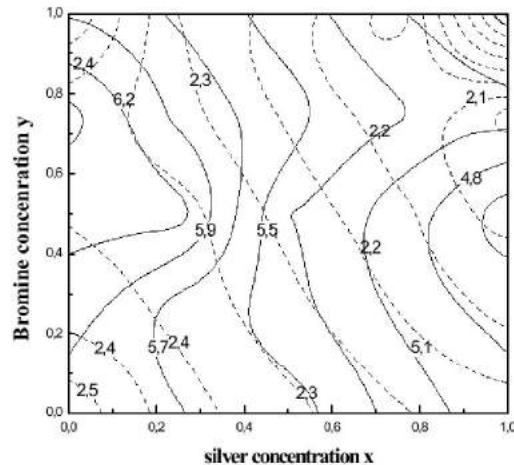


Fig. 6 - Contour map of the calculated dielectric function in (eV) (solid lines) and refractive index in(eV) (dashed lines)versus. the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys.

The results of the index refractive are given in **Fig 6.**, the compositional dependence of the index refractive of the alloy has the same trend as that of the dielectric function in the region between 2.1and 2.5 eV.

The reflection coefficient (R) is among the most important optical constants related to the dielectric function .It characterizes the reflective light energy part at the cleaved facets of the resonant cavity. For normal-incidence the reflectivity is [56, 57]

$$R = \frac{(n_r - 1)^2 + k^2}{(n_r + 1)^2 + k^2} \quad (7)$$

**Fig 7**.displays the contour map of the calculated the reflectivity versus the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_y\text{I}_{1-y}$  quaternary alloys, One can note that the reflectivity coefficients decreases with the increasing of Ag and Br and depend nonlinearly on the compositions.thereflectivitycoefficients decreases in the region between 0.13 and 0.18 eV.

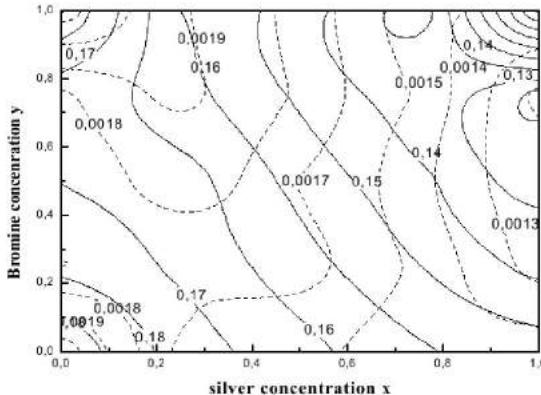


Fig. 7 - Contour map of the calculated reflection coefficient in (eV) (solid lines) and absorption coefficient in (eV) (dashed lines) versus the compositions x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$  quaternary alloys.

The light incident on the  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}/\text{ZnB}$  structure may cause excitation of the ground state electrons from the VB to the CB or from one sub band to a higher sub band, where the required energy is supplied by the photons and the light is absorbed [58]. The absorption coefficient  $\alpha(\omega)$  characterizing such a phenomenon, defined as the light energy absorbed in unit length per unit incident energy, depends on both parts of  $\varepsilon(\omega)$  and is given by [56, 67].

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{\lambda} k(\omega) \quad (8)$$

$\lambda$  is the wave length of light in the vacuum. It is well known that the optical absorption coefficient  $\alpha(\omega)$  is one of the most crucial evaluation criterions in application of the photoelectric materials.

The results of the absorption are given in Figure 7., the compositional dependence of the absorption of the alloy has the same trend as that of the dielectric function We observe lower absorption coefficient under the scissor operation in the range of 0.0013 and 0.0019 eV.. These semiconductors have fundamental absorption limit at Infrared spectrum regions.

The electron energy loss function  $L(\omega)$  for the quaternary alloy is displayed in Fig. 8. It can be determined by using the dielectric function:

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (9)$$

The energy-loss function is usually used to describe the energy loss of a fast electron traversing in the material [59]. Energy loss function defines the energy loss of the electrons

passing between bands.. Energy loss functions of alloys according to x and y values. The maximum of the energy loss function is related to plasma frequency. The material shows the dielectric or metallic characteristics when the photo frequency is above or below the plasma frequency [60].The energy loss function maximum at 25% and 50%concentrations of both Ag and Br atoms.

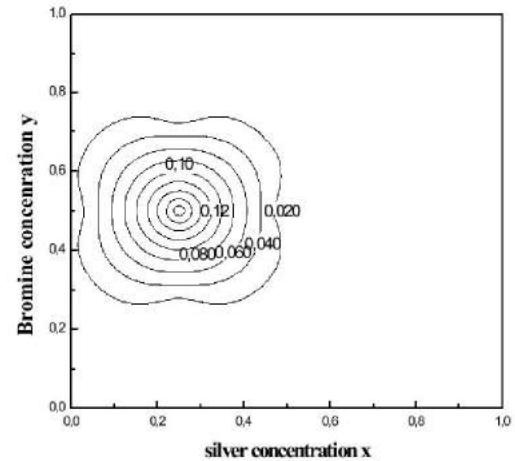


Fig.8- Contour map of the calculated energy loss versus the composition x and y for  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$  quaternary alloys.

The second goal of this work is to study the gap energy of  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$  alloys lattice matched to  $\text{CuI}$  and  $\text{InP}$  semiconductors substrate. Similar to the ternary alloys For this purpose we have used the relationships between the compositions x and y for lattice matched to quaternary alloys, is determined using Vegard's rule as

$$a(x,y) = xy a_{\text{AgBr}} + (1-x)y a_{\text{CuBr}} + x(1-y) a_{\text{AgI}} + (1-x)(1-y) a_{\text{CuI}} \quad (10)$$

Where  $a_{\text{AgBr}}$ ,  $a_{\text{CuBr}}$ ,  $a_{\text{AgI}}$ ,  $a_{\text{CuI}}$  are the lattice constants of the binary compounds. By putting equal to the lattice constant of  $\text{CuI}$  and  $\text{InP}$ ,

The lattice matching conditions for the quaternary alloy  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$  on  $\text{CuI}$  or  $\text{InP}$  substrate are as follows:

For CuI substrate

$$Y = \frac{-0.4912x}{-0.36480.4332} (0 \leq x \leq 1) \quad (11)$$

Whereas, for InP substrate

$$Y = \frac{-0,3 \ 3 \ 8 - 0,4912x}{-0,3 \ 6 \ 480,43 \ 3,2} \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (12)$$

The above expression specifies a line on the field of (x, y) silver and bromine concentration in which the corresponding alloy is lattice matched to the **CuI** and **InP** substrates. as obtained from calculations performed by WC\_GGA scheme We have considered four different concentrations along the line of lattice matching to both **CuI**: (x, y) = (1/4, 8/32); (1/2, 13/32); (3/4, 17/32); and **InP**: (x, y) = (0/32, 11/32); (1/4, 16/32); (1/2, 20/32); (3/32, 23/32).

We observe nonlinear deviation of band gap versus concentration x leads to the gap bowing parameters of 1,077eV and 0,854eV respectively.(Figure 9).The results of the quaternary  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}\text{I}_1$ -alloys should be useful for the design of optical devices with a continuous broad band gap in the Infrared spectrum regions.when it is lattice matched to the **CuI** and **InP** substrates. The WCGGA calculated band gap of  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$ -compound matched to **CuI** range from 0,865 to 0,771 eV, while in the case of the **InP**substrate, the corresponding range is from 0,859 to 0,679 eV.

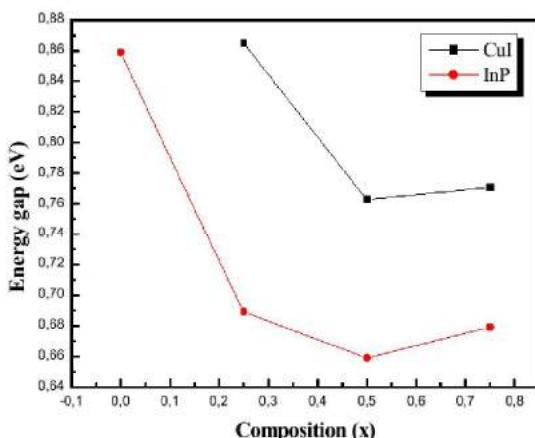


Fig.9 - Energy band gap of  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}\text{I}_1$ -quaternary alloys lattice matched to **CuI** and **InP** as function of the x composition using WC\_GGA scheme.

#### 4. Conclusion

In summary, Employing the FP-LAPW method within DFT, we have investigated the structural and electronic and optical properties of the zinc blend  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}\text{I}_1$ -quaternary and their four pseudobinary alloys as a function of the compositions x and y. A non-linear behavior of

the lattice constant, bulk modulus ,band-gap and dielectric function ,refractive index ,reflection coefficient and absorption coefficient  $\alpha(\omega)$  dependence on x and y has been observed.

- The calculations of formation energies showed that the least stable alloys are around 25% concentration of Ag atom and 75% concentration of Br atom
- The direct gap nature of the pure materials is conserved also in the alloys. The gap bowing of quaternary alloys was found strong at high compositions x and y
- Finally, the energy band gap of the quaternary alloys  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Br}_{1-y}$  lattice matched to GaAs substrate, whose optical gaps range in the entire blue-green window, has been investigated. , the results indicates that the band gap increases with the x composition.

Our results are predictions and may serve as reference for future experimental work.

#### Référence

- [1] M. Cardona, Phys. Rev. 129 (1963) 69.
- [2] D. Frohlich, E. Mohler, and P. Wiesner, Phys. Rev. Lett. 26, 554 (1971).
- [3] J.F. Hamilton, Adv. Phys. 37 (1988) 359.
- [4] B.E. Mellander, Phys. Rev. B 26 (1982) 5886.
- [5] Ebbsjo", P. Vashishta, R. Dejus, K. Sko" Id, J. Phys. C 20 (1987) L441.
- [6] J.M. Kim, B.S. Choi, S. Kim II, J.M. Kim, H.I. Bjelkhagen, N.J. Phillips, Appl. Opt. 40 (2001) 622.
- [7] S. Gu, B. Li, C. Zhao, Y. Xu, X. Qian, G. Chen, J. Alloy. Compd. 509 (2011) 5677.
- [8] M. Zhu, P. Chen, M. Liu, ACS Nano 5 (2011) 4529
- [9] J.E. Enderby, A.C. Barnes, Rep. Prog. Phys. 53 (1990) 85.
- [10] S. Hull, D.A. Keen, Phys. Rev. B 59 (1999) 750.
- [11] D. Vogel, P. Krüger, J. Pollmann, Phys. Rev. 58 (1998) 3865.
- [12] C.M.I. Okoye, Solid State Commun. 129 (2004) 69, and references therein
- [13] J. C. Phillips, Rev. Mod. Phys. 42, 317 (1970)
- [14] P.V. Smith, J. Phys. Chem. Solids 37 (1976) 581.
- [15] G.S. Nunes, P.B. Allen, Phys. Rev. 57 (1997) 5098.
- [16] D.C. Gupta, R.K. Singh, Phys. Rev. 43 (1990) 11185.
- [17] P.K. de Boer, R.A. de Groot, J. Phys. Chem. A 103 (1999) 5113.
- [18] R.H. Victora, Phys. Rev. B 56 (1997) 4417.
- [19] K. Kirchhoff, J.M. Holender, M.J. Gillan, Phys. Rev. B 49 (1994) 17420.
- [20] J. Tejeda, N.J. Shevchick, W. Braun, A. Goldmann, M. Cardona, Phys. Rev. B 12 (1975) 1557.

- [21] Barry Kunz A, Phys. Rev. B 15 (1982) 2070.
- [22] F. Bassani, R.S. Knox, W.B. Fowler, Phys. Rev. 137 (1965) A1217.
- [23] M.G. Mason, Y.T. Tan, T.J. Miller, G.N. Kwawer, F.C. Brown, A.K. Kunz, Phys. Rev. B 42 (1990) 2996.
- [24] P.M. Scop, Phys. Rev. 139 (1965) A935.
- [25] B.N. Onwuagba, Solid State Commun. 97 (1996) 267.
- [26] D.D. Koelling, B.N. Harmon, J. Phys. C: Solid State Phys. 10 (1977) 3107.
- [27] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864; W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. A 140 (1965) 1133.
- [28] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2K "An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties", Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001, ISBN 3-9501031-1-2.
- [29] E. Engel, S.H. Vosko, Phys. Rev. B 47 (1993) 13164.
- [30] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244.
- [31] S. Hull, D.A. Keen, Phys. Rev. B 59 (1999) 750.
- [32] L.A. Palomino-Rojas, M. Lo'pez-Fuentes, G.H. Cocoletzi, G. Murrieta, R. de Coss, N. Takeuchi, Solid State Sci. 10 (2008) 1228.
- [33] G.S. Nunes, P.B. Allen, J.L. Martin, Phys. Rev. B 57 (1998) 5098.
- [34] F. EL HAJ HASSAN† , A. ZAOUI‡ Superlattices and Microstructures, Vol. 30, No. 2, 2001 .
- [35] R.C. Hanson, T.A. Fjeldly, H.D. Hochheimer, Phys. Status Solidi a 70 (1975) 567.
- [36] M. Ferhat, A. Zaoui, M. Certier, J.P. Dufour, B. Khelifa, Mater. Sci. Eng. B 39 (1996) 95.
- [37] S. Hull, D. Keen, Phys. Rev. B 50 (1994) 5868
- [38] B. Amrani, T. Benmessabih, M. Tahiri, I. Chiboub, S. Hiadsi, F. Hamdache Phys. B 381 (2006) 179.
- [39] W. Sekkal, A. Zaoui, A. Laref, M. Certier, H. Aourag, J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000) 6173.
- [40] F. El Haj Hassan, A. Zaoui, W. Sekkal, Mater. Sci. Eng. B 87 (2001) 40.
- [41] W. Sekkal, H. Aourag, M. Certier, J. Phys. Chem. Solids 59 (8) (1998) 1293.
- [42] S. Ves, D. Glo"tzl, M. Cardona, H. Overhof, Phys. Rev. B 24 (1981) 3073; H. Mu"ller, S. Ves, H.D.
- [43] Y. Li, L. Zhang, T. Cui, Y. Ma, G. Zou, D.D. Klug, Phys. Rev. B 74 (2006) 054102.
- [44] R.W.G. Wyckoff, Crystal Structures, Wiley, New York, 1963.
- [45] D.S. Tannhäuser, L.J. Bruner, A.W. Lawson, Phys. Rev. 102 (1956) 1281.
- [46] C.S. Praveen, , A. Kokalj, M. Rérat, M. Valant, Solid State Sciences 14 (2012) 1412-1418
- [47] B. Amrani, F.ElHajHassan, R.Khenata, H.Akbarzadeh . Phys. Chem. Solids 70 (2009) 1055–1061
- [48] A. Zaoui, F. El Haj Hassan, Philos. Mag. B 7 (2002) 791
- [49] K.H. Hellwege, O. Madelung, in: Landolt-Bornstein (Ed.), New York Series Group III, Springer, Berlin, 1987.
- [50] M. Slimani, H. Meradji, C. Sifi, S. Labidi, S. Ghemid, E.B. Hannech, F. El Haj HassanJ. Alloys Compd. 485 (2009) 642.
- [51] J.S. Tell, Phys. Rev. 104 (1956) 1760.
- [52] R.De L. Kron, J. Opt. Soc. Am. 12 (1926) 547.
- [53] A. Delin, A.O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M.S. Brooks, T. Gasche, et al., Phys. Rev. B 54 (1996) 1673.
- [54] M. Fox, Optical Properties of Solids, Oxford University Press, New York, 2001.
- [55] M. Dressel, G. Gruner, Electrodynamics of Solids: Optical Properties of Electrons in Matter, Cambridge University Press, UK,2002
- [56] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2nd ed., WIE Willey, New York, 1981.
- [57] Sadao Adachi, Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds, John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [58] B.R. Nag, Physics of Quantum Well Devices, Kluwer Academic, Calcutta, 2000.
- [59] A. Bouhemadou, R. Khenata, Comput. Mater. Sci. 39 (2007) 803.
- [60] L. Marton, Rev. Mod. Phys. 28 (1956) 172.



## REVUE ALGERIENNE DES SCIENCES-A-

**Sciences de la Nature et de la Vie**

**Sciences techniques**

ISSN : 2661-7064

<http://univ-eltarf.dz/fr/>



# Modélisation d'un mur de soutènement stabilisé avec des fibres et renforcé avec des géogrilles.

Houam Houda<sup>a\*</sup>, Missaoui Sabrina<sup>b</sup>, Djouimaa Sarah<sup>c</sup>.

<sup>a</sup>LMGHU Université 20 Aout 1955 SKIKDA

<sup>b</sup>Université Chadli Bendjedid -El Tarf,  
laboratoire LSH.Université badji mokhtar annaba.

<sup>c</sup>Universités Mohammed-Chérif Messaadia de souk ahras

Informations	Résumé
<b>Mots clés :</b>	
Renforcement Stabilisation Géogrille Fibre	Le présent travail a pour objectif la modélisation numérique d'un mur de soutènement de la ligne de chemin de fer, réalisée en sol stabilisé aux fibres et renforcé avec des géogrilles en Corée du sud, par le logiciel de calcul Plaxis. Les résultats obtenus lors de la modélisation sont très rapprochés de celles obtenues par les essais sur modèle réduit au laboratoire. L'inclusion des fibres pour stabiliser la partie avant de l'ouvrage réduit les déplacements horizontaux. Ces derniers sont encore de magnitude moindre lorsque le remblai de sol compacté est renforcé par des inclusions linéaires. La stabilisation du sol aux fibres synthétiques améliore la stabilité de l'ouvrage en réduisant le coefficient de sécurité global de l'ouvrage. Le renforcement du remblai de sol aux géogrilles augmente beaucoup plus ce coefficient de sécurité. La stabilisation de sol aux fibres combinées avec un renforcement de sol aux géogrilles a donné le meilleur coefficient de sécurité et par conséquent la meilleure stabilité de l'ouvrage.
<b>*Correspondance :</b> djeffalhouda802@gmail.com	
Reçu le jj/mm/aa, Révisé jj/mm/aa, Accepté le jj/mm/aa.	

### 1. Introduction

Le sol a toujours été un matériau utilisé dans la construction, à cause de sa disponibilité et son coût qui représentent ses principaux avantages. Cependant ses propriétés mécaniques ne sont pas toujours satisfaisantes et cela peut mener à de nombreux problèmes pendant la construction des grandes structures. Le sol résiste bien à la compression mais très mal à la traction. Le premier objectif est donc de modifier ses propriétés mécaniques et améliorer sa résistance à la traction tout en gardant ses avantages.

Les propriétés mécaniques du sol peuvent être améliorées chimiquement ou physiquement en liant les particules ensemble de telle sorte que sa résistance augmente. Il s'agit d'ajouter la chaux, le ciment, le bitume ou autres liants. Ces méthodes sont appelées "techniques de stabilisation des sols." Toutefois, dans le cas des grandes constructions tel que les constructions linéaires et les ouvrages de soutènement, ces méthodes ne semblent pas être des solutions économiques (Holtz, 2001 et Vidal, 1969). La terre renforcée est une autre technique dans laquelle la résistance du sol est rehaussée par l'addition des inclusions linéaires disposées horizontalement.

Le mécanisme de transmettre les efforts du sol aux éléments de renforcement dépend des propriétés

géométriques des inclusions, (Holtz, 2001 et al d'et McGown., 1984), il est obtenu par le frottement, l'adhésion à l'interaction sol-inclusion.

La qualité de base de ce système est la facilité de construction et la réduction du coût, puisque les inclusions sont placées seulement dans la direction de la contrainte de traction (McGown et Andrawes, 1978).

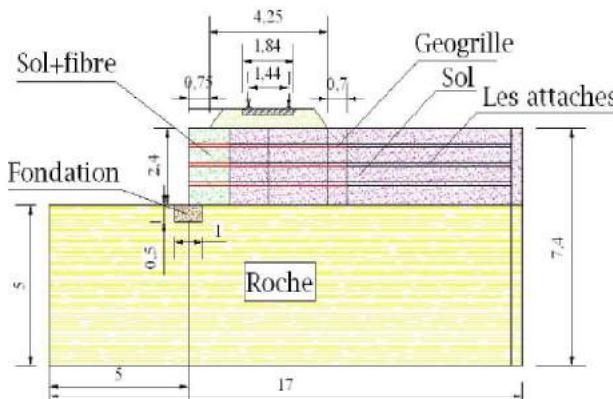
La dernière décennie a vu un développement considérable dans le domaine de l'informatique où des logiciels de calcul performant ont été mis à la disposition des géotechniciens. Parmi ces derniers le package Plaxis, un logiciel mis à jour par l'Université Technique de Delft au pays bas. Il permet la modélisation de n'importe quelle structure en remblai de sol et les ouvrages de fondation et de soutènement en étudiant plusieurs paramètres sans avoir recours à de nombreux essais au laboratoire et par conséquent réduire le prix de revient des projets à réaliser.

### 2. Matériels et méthodes

Cet article porte sur la modélisation numérique d'un mur de soutènement constitué d'un sol stabilisé mécaniquement avec des fibres en géotextile et renforcé avec des géogrilles. Le mur devait être réalisé en Corée du sud dans le cadre

des ouvrages des chemins de fer.

Le schéma détaillé du mur est donné sur la figure 1 ensemble avec la coupe géologique du sol de fondation.



**Fig.1:**Coupe transversale de l'ouvrage de chemin de fer

Les caractéristiques géotechniques des différentes couches introduites dans le code Plaxis sont données sur le tableau 1. Elles ont été obtenues lors d'une campagne d'essais réalisés au laboratoire de géotechnique de l'université de recherche KRRI (Korea Railway Research Institute) T. Park, S.A. Tan 2005.

**Tab.1 Caractéristiques géotechniques des sols**

Couche de sol	$\gamma$ ( $kN/m^3$ )	$\gamma_{SAT}$ ( $kN/m^3$ )	C ( $kN/m^2$ )	$\phi$ ( $^\circ$ )	E ( $kN/m^2$ )	v
Roche altérée	20	21	30	30	300000	0.35
fondation	21	22	35	50	500000	0.25
Sol	16	19	27	21	38000	0.4
Sol+fibre	16	19	30	21	46000	0.4
plate forme	16	19	1	30	100000	0.35

En plus des caractéristiques géotechniques des différents type de sol utilisées, les éléments de construction et de renforcement avaient ont les propriétés données sur le tableau 2 suivant :

**Tab.2 Propriétés des éléments de construction**

Éléments	$EA(kN/mL)$	$EI(kNm^2/m)$	$L_{Spacing}(m)$
Traverse	$1.32 \times 10^{12}$	$5.32 \times 10^7$	-
Attaches	150000	-	1m
Géogrilles	250	-	-

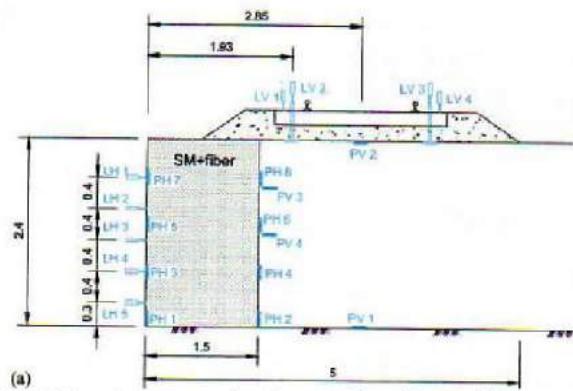
### 3. Résultats et discussion

Les deux modèles numériques à savoir (sol + fibre) et (sol+fibre+géogrid) ont été validés par les essais expérimentaux effectués au laboratoire de la Korea Railway Research Institute (KRRI)

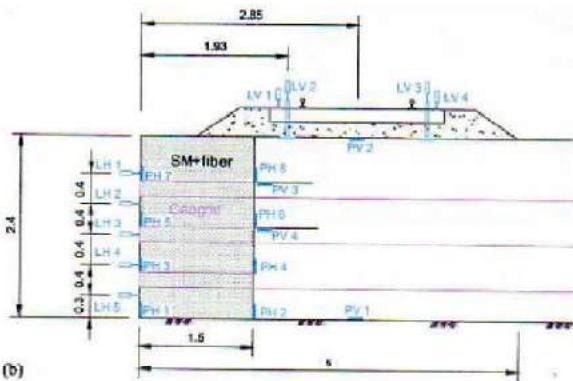
Les déplacements horizontaux, les contraintes

horizontales et verticales obtenus par le modèle numérique ont été comparés à ceux obtenus lors des essais au laboratoire sur modèle réduit aux niveaux de l'emplacement des différentes jauge de mesure.

Les déplacements horizontaux ont été mesurés sur le modèle réduit étudié au laboratoire par l'utilisation des jauge LH1, LH2, LH3, LH4, LH5. Alors que les mesures des contraintes horizontales ont été faites par les jauge PH1, PH2, PH3, PH4, PH5, PH6, PH7, PH8. Les contraintes verticales ont été mesurées par les jauge PV1, PV2, PV3, PV4. Ces différentes jauge et leurs emplacements sont montrées sur les figures relatives à chaque modèle et qui sont Fig.2 et Fig.3.



**Fig.2** Emplacement des jauge dans le modèle réduit (sol stabilisé aux fibres)



**Fig.3** Emplacement des jauge dans le modèle réduit (Sol stabilisé aux fibres et renforcé aux géogrilles)

### Modèle -sol+fibre

La validation du modèle de calcul par le code Plaxis pour l'ouvrage stabilisé mécaniquement avec des fibres en géosynthétiques a été faite par le calage des courbes obtenues avec les obtenues au laboratoire KRRI. La figure 4 montre les déplacements horizontaux en millimètre en fonction du rapport ( $h/H$ ) où  $H$  est la hauteur du mur de soutènement et  $h$  est la hauteur de l'emplacement de la jauge mesuré. Cette distance est mesurée à partir de la tête du mur.

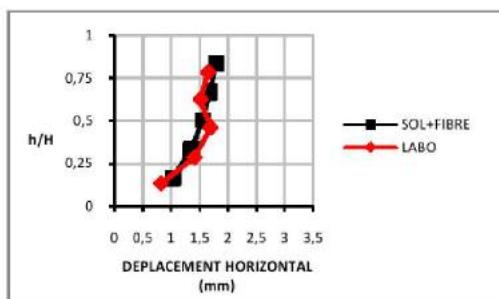


Fig.4 Déplacement horizontal après chargement

Les deux courbes obtenues au laboratoire et par calcul numérique montrent que le déplacement horizontal augmente avec l'augmentation de ratio ( $h/H$ ) leur donnant ainsi une même tendance. A la même profondeur l'essai au laboratoire et le calcul numérique montre qu'une légère différence. Il est donc claire que le déplacement horizontal est relativement le même dans les deux cas

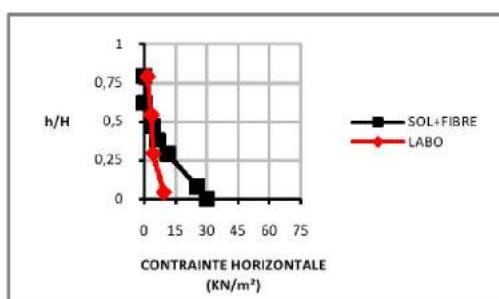


Fig.5 Contrainte horizontale avant chargement

La figure 4.11 montre la relation entre la contrainte horizontale avant chargement et le ratio( $h/H$ ). Les deux courbes représentant les résultats au laboratoire et par calcul numérique montrent une augmentation de la contrainte horizontale en profondeur ce qui tout à fait logique puisque cette contrainte augmente réellement d'après les théories classiques de la mécanique des sols. Cette observation est aussi faite pour les contraintes horizontales après chargement Fig.4.12. Ainsi les courbes de laboratoire et de calcul numérique pour les contraintes horizontales avant et après chargement concordent dans leurs allures.

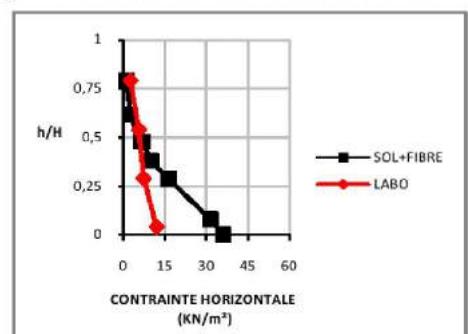


Fig.6 Contrainte horizontale après chargement

Les figures 7 et 8 montrent la variation des contraintes verticales en fonction de la

profondeur représentées par le ratio ( $h/H$ ) pour le cas d'avant et après chargement. Les courbes obtenues au laboratoire et par calcul numérique montrent une augmentation progressive de la contrainte verticale avec l'augmentation de la profondeur. Bien que l'allure deux courbes soit la même une légère différence est observée entre les résultats au labo et par calcul mais cela n'étant pas si important.

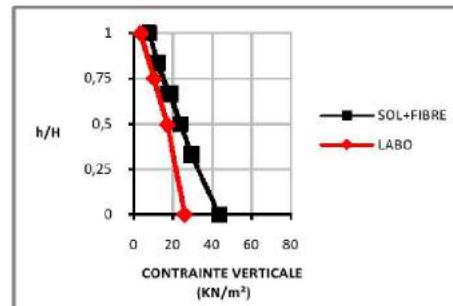


Fig.7 Contrainte verticale avant chargement

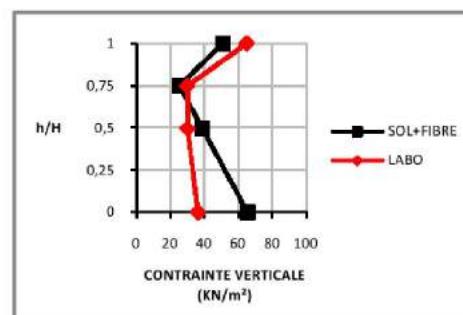


Fig.8 Contrainte verticale après chargement

#### Modèle -sol+fibre+géogrille-

Les mêmes remarques sont obtenues pour le sol stabilisé aux fibres et renforcé aux géogrilles. Les résultats concernant le déplacement horizontal de l'étude numérique et l'essai au laboratoire sont donnés sur la figure 9. Il y a une concordance parfaite dans l'évolution du déplacement en fonction du ratio  $h/H$ . En effet le déplacement augmente avec l'augmentation du ratio. Les deux courbes apparaissent très rapprochées.

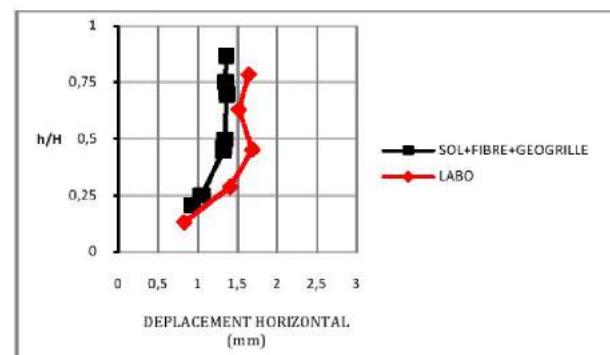


Fig.9 Déplacement horizontal après chargement

Les évolutions de la contrainte horizontale avant et après chargement sont présentées sur les

figures 10 et 11. Les deux figures montrent que les études numériques et au laboratoire donnent la même tendance. La contrainte horizontale augmente lorsque le ratio  $h/H$  diminue. La courbe du laboratoire présente une légère cassure comparée à celle obtenue par l'étude numérique.

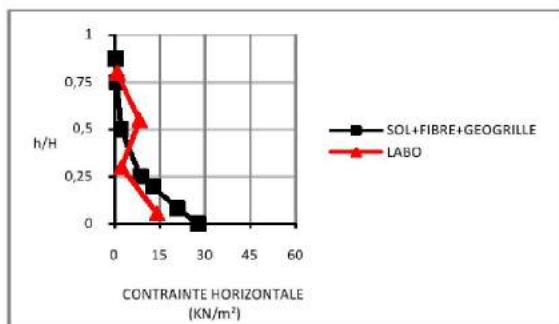


Fig.10 Contrainte horizontale avant chargement

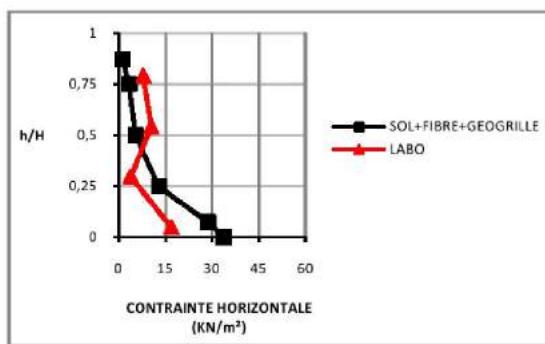


Fig.11 Contrainte horizontale après chargement

Les figures 12 et 13 présentent le calage de la variation de la contrainte verticale avant et après chargement en fonction du ratio  $h/H$  pour le modèle réduit stabilisé aux fibres et renforcé aux géogrilles. Celui-ci semble suivre les mêmes remarques faites au paravent pour les contraintes horizontales. L'évolution de la contrainte verticale pour les deux cas de figures montre une augmentation avec la diminution du ratio  $h/H$ . Pour le cas avant chargement, à un ratio de 1 la contrainte verticale est environ de  $10\text{ kN/m}^2$  pour les deux études numérique et au laboratoire alors que pour un ratio nul la même contrainte atteint approximativement  $40\text{ kN/m}^2$ .

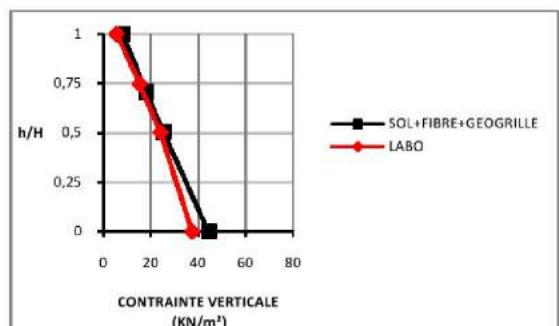


Fig.12 Contrainte verticale avant chargement

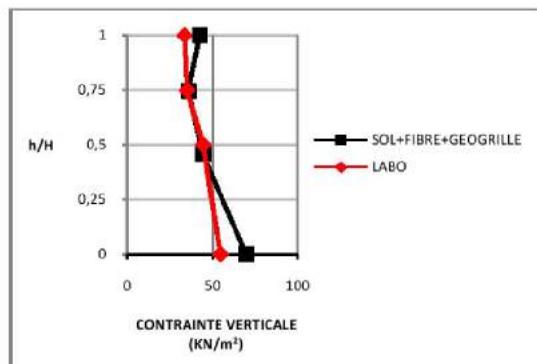


Fig.13 Contrainte verticale après chargement

#### 4. Conclusion

Toutes les figures montrent que les courbes obtenues au laboratoire et dans l'étude numérique par le code Plaxis sont pratiquement très rapprochées et montre la même évolution aussi bien pour le modèle (sol + fibre) que pour le modèle (sol + fibre + géogrilles). La comparaison des évolutions des déplacements, des contraintes verticales et horizontales après et avant chargement montre une concordance dans les résultats. Ainsi le modèle numérique établi par le code Plaxis pour l'étude des modèles réduits deux cas de murs de soutènement réalisés au laboratoire semble représentatif et peut servir pour toute études géotechnique sans que pour cela avoir besoin de réaliser des essais encore plus coûteux au laboratoire.

#### Référence :

- [1] Vidal, H and Schlosser F., (1969) "La terre armée" Bulletin de liaison du Laboratoire Central des Ponts et chaussées, Paris.
- [2] Holtz, R. D., (2001) Geosynthetic For Soil Reinforcement, The Ninth Spencer J. Buchanan Lecture, College Station, University Drive
- [3] McGown, A, Pain., N., Dubois, D.D, Andrawes, K.Z.an.A., (1984)."The use of geogrid properties in design" Proc. Symp. On Polymer Grid Reinforcement in civil Engineering, London.
- [4] McGown, A and Andrawes, K.Z. and Al Hasani, (1978). "Effect of inclusion properties on the behaviour of sand" Geotechnique, Vol.28, pp.327-346.
- [5] R.B.J. Brinkgreve, Delft University of Technology & PLAXIS bv, Pays-Bas, 'Plaxis, manuel de référence, version 8'



# REVUE ALGERIENNE DES SCIENCES-A-

**Sciences de la Nature et de la Vie**

**Sciences techniques**

ISSN : 2661-7064

<http://univ-eltarf.dz/fr/>



## Caractérisation géotechnique des sols, cas des argiles de Souk ahras

Djouimaa Sarah<sup>a\*</sup>, Missaoui Sabrina<sup>b</sup>, Houam Houda<sup>c</sup>, Sid Madani<sup>d</sup>.

<sup>a</sup>INFRARES Laboratoire Universités Mohammed-Chérif Messaadia,souk ahras,Algérie

<sup>b</sup>Université Chadli Bendjedid -El Tarf

<sup>c</sup>LMGHU Université 20 Aout 1955 SKIKDA

<sup>d</sup>INFRARES Laboratoire Universités Mohammed-Chérif Messaadia ,souk ahras,Algérie

---

### Informations

---

#### Mots clés :

Argiles gonflantes  
identification  
prévision  
estimation

#### \*Correspondance :

gc.djouimaa@gmail.com

Reçu le jj/mm/aa,  
Révisé jj/mm/aa,  
Accepté le jj/mm/aa.

---

### Résumé

---

Le gonflement des sols constitue un phénomène très important en mécanique des sols. Dans certaines régions, il est à l'origine de nombreux désordres tant pour les structures en surface que pour les ouvrages souterrains. Par suite d'une modification de leur teneur en eau, les terrains superficiels argileux varient de volume : retrait lors d'une période d'assèchement, gonflement lorsqu'il y a apport d'eau. Cette variation de volume est accompagnée d'une modification des caractéristiques mécaniques de ces sols. Ce travail présente et analyse les résultats des essais d'identification du sol par méthodes direct et méthodes indirect et aussi les difficultés que pose l'utilisation des approches disponibles dans la littérature et basées sur les paramètres physico-chimiques pour l'identification des sols gonflants. Ces résultats sont aussi comparés avec ceux obtenus des essais de gonflement à l'oedomètre.

### 1. Introduction

La quantification du phénomène de gonflement par les paramètres géotechnique est essentielle du point de vue de dimensionnement des ouvrages de génie civil (Bultel). Les méthodes de classification des sols gonflants sont souvent des méthodes indirectes car elles recouvrent l'analyse minéralogique et surtout les essais mécaniques. Elles consistent plutôt à établir une corrélation entre le taux de gonflement ou la pression de gonflement et quelques paramètres géotechniques, comme les limites d'Atterberg, la teneur en eau et la densité sèche, et rassemblent les facteurs les plus influents sur le gonflement des argiles. Ainsi après avoir déterminé les paramètres géotechniques du sol, l'emploi des formules empiriques permet de connaître rapidement le potentiel de gonflement de ce sol, c'est-à-dire d'estimer le gonflement ou la pression de gonflement qui peuvent se développer en cas de variation des conditions hydriques et par conséquent si le phénomène est à prendre en compte ou pas( Bekkouche et al), (Khemissa). En Algérie, les estimations ne sont pas disponibles mais la littérature scientifique cite de nombreux cas pathologiques de structures où la nature gonflante du sol est la principale cause des dégradations constatées (Hachichi et al., 2002, Lamara et al., 2002).

Cette étude a pour objet de caractériser le comportement des argiles expansives de la commune de M'daourouch et de déterminer les paramètres physiques et mécaniques qui jouent un rôle dans la variation de leur volume, au moyen d'essais d'identification classiques et d'essais mécaniques (essais de compressibilité oedométriques)et aussi faire Une comparaison avec l'évaluation du potentiel de gonflement par méthodes indirectes inspirés des recherches réalisés dans la littérature.

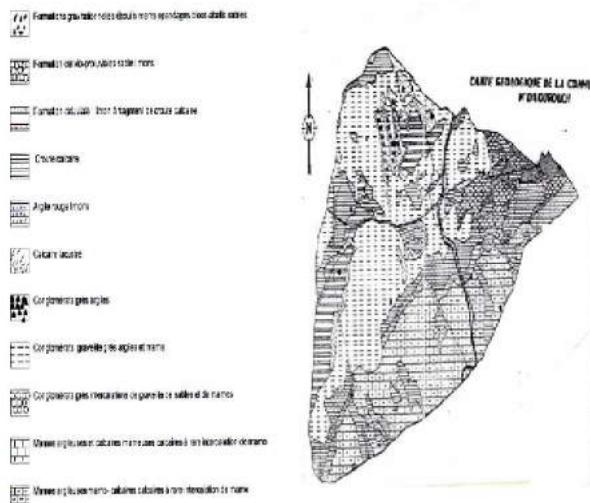
### 2. Situation géographique

M'daourouch, est une daïra de la wilaya de Souk Ahras. Elle est située à 50 km au sud de la wilaya. La ville et son agglomération compte environ 27000 habitants. Elle tient son nom à l'antique ville romano-numide Madaure dont les vestiges se situent à quelques kilomètres.

### 3. Etude géologique

La géologie, dont le nom signifie littéralement « science de la terre », a pour but d'étudier la constitution actuelle du sol, de rechercher les causes qui peuvent modifier cette constitution, celles qui l'ont produite, et de refaire ainsi, sur des documents empruntés au globe lui même, l'histoire de sa formation. Il est évident que la connaissance des matériaux, ou minéraux, qui

entrent dans la composition du sol est nécessaire à tous ceux qui abordent l'étude de la terre ; par conséquent, la minéralogie se trouve à la base même des études géologiques. L'analyse de la carte géologique a permis de définir les caractéristiques minéralogiques des formations argileuses et marneuses, et en particulier de répertorier la présence et la proportion des minéraux gonflants



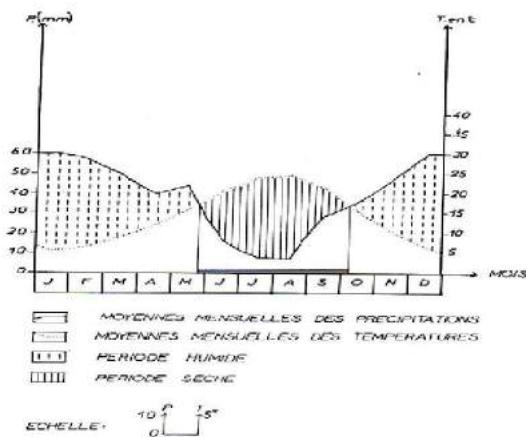
**Fig.1 :** carte géographique de M'daourouch

Il s'agit d'une formation plastique, représentée par un mélange chaotique de marne et d'argile bariolées, avec grès et gypse en moindre quantités, qui renferme de petits fragments de roches carbonatées ou terrigènes d'âge variée, Et quelquefois mêmes des fragments de roches d'origine plutonique. Les argiles et les marnes du diapir de Souk-Ahras sont colorées en tout rougeâtres, ocre et jaune. A de telles altérations ont également été soumis les petits fragments de roches carbonatées enrobées dans la masse argilo-gypseuse , avec transformation de celles-ci en cagneuses. Sur la carte géologique les grands panneaux exotiques de roches carbonatées et terrigènes, Noyés dans la masse gréso-gypseuse, ont été individualisés en tant qu'unités lithologiques indépendantes.

#### 4. Caractéristiques climatiques :

Par suite d'une modification de leur teneur en eau, les terrains superficiels argileux varient de volume, retrait lors d'une période d'assèchement, gonflement lorsqu'il y a apport d'eau. Cette variation de volume est accompagnée d'une modification des caractéristiques mécaniques de ces sols. En période sèche, la tranche la plus superficielle du sol (1 à 2 m de profondeur) est soumise à l'évaporation. Se produit alors un retrait des argiles qui se traduit verticalement par un tassement. La figure ci-dessous montre que la pluviométrie de la zone de M'daourouch est caractérisée par une irrégularité mensuelle et saisonnière, elle est plus importante pendant la période (Octobre -- Mai) que pendant les autres

mois de l'année,



**Fig. 2 :** diagramme pluiothermique

Les précipitations sont concentrées durant les mois d'Hiver qui cumulent une moyenne de 177 mm, soit 38,06 % de précipitation annuelle. La moyenne mensuelle la plus basse est durant le mois de Janvier avec 16.3°C, et la plus haute durant le mois de Juillet avec 33.9 °C.

Les mois humides s'étalent sur quatre mois (Décembre, Janvier, Février, et Mars), avec une pluviométrie cumulée de 227 mm, tandis que les mois secs s'étalent sur une période de Huit mois avec une pluviométrie cumulée de 229 mm. La Figure 2 montre l'existence d'un cycle d'humidification séchage se produisant chaque année avec le déroulement des saisons, une saison pluvieuse et humide et une autre sèche et chaude. Les résultats obtenus montrent que cette région susceptible d'être affectées par les dommages résultant des sols gonflants.

#### 5. Aspect géotechnique :

##### 5.1 Caractéristiques d'identification :

Les échantillons intacts au niveau du site ont été prélevés entre 1m et 6 m de profondeur soumis à des essais d'identification physiques et chimiques. Le tableau suivant présente les valeurs moyennes des paramètres d'identification des sols prélevés

**Tableau. 1 :** Caractéristiques d'identification des sols de M'daourouch

Prof. (m)	Nature apparente de l'échantillon	W	WL	IP	$\gamma_b$	$\gamma_d$	Sr
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	17.4%	51	29	1,83	1.56	65,2%
2.00/2.50	Argile rouge	21.2 %	44	21	2,05	1.69	97,8%
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	20.5 %	49	27	2,01	1.67	91,2%
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaireux	15.0 %	59	33	1,88	1.64	63,6%
5.50/6.00	Argile sableuse	19.6 %	46	22	2,09	1.74	98,8%

## 5.2 Estimation du potentiel de gonflement :

### 5.2.1 Méthode indirecte :

Les méthodes de classification des sols gonflants par méthodes indirectes consistent à établir une corrélation entre le taux de gonflement ou la pression de gonflement et quelques paramètres géotechniques,( Djedid et al) comme les limites d'Atterberg, la teneur en eau et la densité sèche, et rassemblent les facteurs les plus influents sur le gonflement des argiles. Ainsi après avoir déterminé les paramètres géotechniques du sol, l'emploi des formules empiriques permet de connaître rapidement le potentiel de gonflement de ce sol, cette identification se trouve compliquée par l'existence de plusieurs approches qui ne se basent ni sur les mêmes paramètres ni sur le même nombre.Pour les argiles présentées dans cet étude, le potentiel de gonflement est analysé à l'aide des méthodes de Building Research Establishment (BRE), Komornik & David (1969), Seed & al. (1962), Chen (1998), Snethen (1984), Vijayvergiya & Ghazzaly (1973). Les résultats de la classification sont cités dans les tableaux suivants :

**Tableau .2:** Relation entre le gonflement libre et l'indice de plasticité (Seed et al. 1962)

IP	$\epsilon g(%)$	Potentiel de gonflement
0-10	0-1,5	Faible
10-20	1,5-5	Moyen
20-35	5-25	Elevé
>35	>25	Très élevé

**Tableau .3 :** Potentiel de gonflement d'après Snethen (1980)

IP	Potentiel de gonflement
>35	Très élevé
22-35	élevé
18-22	Moyen
<18	Faible

**Tableau .4 :** Potentiel de gonflement (Chen, 1998)

% < 74 $\mu m$	WL (%)	Pression de gonflement (6 ans) MPa	Potentiel de gonflement
>95	>60	10	Très élevé
60-95	40-60	2.5 - 5	Elevé
30-60	30-40	1.5 - 2.5	Moyen
<30	<30	<0.5	Faible

**Tableau .5 :** Classification proposée par Dakshanamurthy et Raman (1973)

WL	Classification
0-20	Non gonflant
20-35	Gonflement faible
35-50	Gonflement moyen
50-70	Gonflement élevé
70-90	Gonflement très élevé
Sup à 90	Gonflement critique

### 5.2.2 Application des différentes approches sur le sol de M'daourouch :

#### a. Selon les limites d'atterberg :

**Tableau .6 :** Classification selon la limite de liquidité

Prof. (m)	Nature apparente de l'échantillon	Limite de liquidité%	Potentiel de gonflement
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	51	Gonflement élevé
2.00/2.50	Argile rouge	44	Gonflement moyen
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	49	Gonflement moyen
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaieux blanchâtres	59	Gonflement élevé
5.50/6.00	Argile sableuse rouge	46	Gonflement moyen

**Tableau .7:** Classification selon l'indice de plasticité

Prof. (m)	Nature apparente de l'échantillon	Indice de plasticité %	Classification
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	29	Gonflement élevé
2.00/2.50	Argile beige à jaunâtre très calcaireuse	21	Gonflement moyen
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	27	Gonflement élevé
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaieux blanchâtres	33	Gonflement élevé
5.50/6.00	Argile sableuse rouge	22	Gonflement moyen

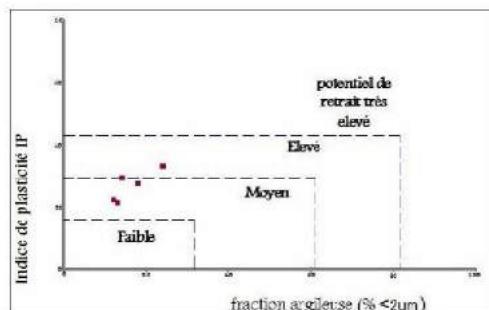
**Tableau .8 :** Classification selon l'indice de consistance

Prof. (m)	Nature apparente de l'échantillon	l'indice de consistance	consistance
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	1	Dure
2.00/2.50	Argile rouge	1.3	Dure
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	1	Dure
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaieux blanchâtres	1.3	Dure
5.50/6.00	Argile sableuse rouge	1.2	Dure

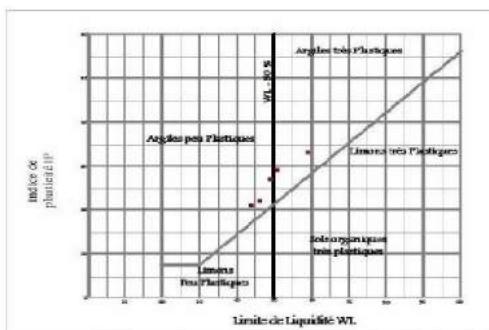
On peut remarquer que :

La limite de liquidité WL, varie entre 44 et 59%, avec un indice de plasticité IP, situé entre 22 et 33 %.

Le diagramme des valeurs ( $W_l$  et  $I_p$ ) localise le sol dans la zone des argiles peu plastiques à très plastiques, d'après le diagramme de Casagrande. On peut déduire que le sol étudié présente un potentiel de gonflement moyen à élevé. L'indice de consistance varie entre 1 et 1.3, caractérise un sol dur. Pour une argile ayant un  $IP > 30$ , on peut déduire que le sol possède un potentiel de gonflement élevé (29 et 33%).



**Fig. 3:** Classification du sol étudié (Building Research Establishment (1980)).



**Fig. 4:** Classification du sol selon diagramme de Casagrande

On constate un bon accord entre ces classifications. Le caractère expansif du sol examiné apparaît clairement à travers l'ensemble des classifications adaptées, donc l'argile de Mdaourouch est caractérisée par un potentiel de gonflement moyen à élevé.

#### b. Selon les approches théoriques :

##### Selon Seed et al (1962) :

$$\varepsilon_g = 21,6 \cdot 10^{-5} (I_p)^{2,44}$$

**Tableau .9 :** Classification selon Seed et al (1962)

Profondeur	Nature apparente de l'échantillon	$Ip(%)$	$\varepsilon g(%)$
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	29	0,79
2.00/2.50	Argile rouge	21	0,36
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	27	0,67
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaieux blanchâtres	33	1,09
5.50/6.00	Argile sableuse rouge	22	0,40

##### Selon Komornik et David (1969) :

$$\varepsilon g = 0,9 + 2,1 IP$$

**Tableau .10 :** Classification Selon Komornik et David (1969)

Profondeur	Nature apparente de l'échantillon	$Ip(%)$	$\varepsilon g(%)$
1.00/2.00	Argile limoneuse brune à noirâtre	29	62
2.00/2.50	Argile rouge	21	45
2.50/3.00	Argile brune légèrement sableuse	27	58
3.00/3.50	Argile rouge avec filets calcaieux blanchâtres	33	70
5.50/6.00	Argile sableuse rouge	22	47

##### Selon la densité sèche et la teneur en eau :

##### Selon Vijayvergyia et Ghazzaly (1973) :

$$\text{Log } \varepsilon g = 0,033 WL - 0,083W + 0,458$$

$$\text{Log } \sigma g = 0,033 WL - 0,083W - 1,967$$

**Tableau .11.a :** Classification Selon Vijayvergyia et Ghazzaly (1973)

Profondeur	W %	WL %	Log( $\varepsilon g$ )	$\varepsilon g$ %	$\sigma g$ (kpa)
1.00/2.00	21.5	51	0,36	2,27	0,0085
2.00/2.50	16.8	44	0,52	3,27	0,0123
2.50/3.00	20.5	49	0,37	2,36	0,0088
3.00/3.50	15.0	59	1,16	14,45	0,054
5.50/6.00	19.6	46	0,35	2,23	0,0083

$$\begin{aligned} \text{Log } (\varepsilon g) &= 0.033 * \text{WL} + 0.0032 * \gamma d - 6.692 \\ \text{Log } (\sigma g) &= 0.033 * \text{WL} + 0.0032 * \gamma d - 5.154 \end{aligned}$$

**Tableau .12.b :Classification Selon Vijayvergiya et Ghazzaly (1973)**

Profondeur	Log ( $\sigma g$ )	Log ( $\varepsilon g$ )	$\sigma g$ (kpa)	$\varepsilon g$
1.00/2.00	2,57	1,04	371,5	10,39
2.00/2.50	1,57	0,04	37,84	1,09
2.50/3.00	1,81	0,27	64,12	1,85
3.00/3.50	2,04	0,50	109,64	3,18
5.50/6.00	1,93	0,39	85,50	2,47

**Selon Komornik et David (1969) :**

$$\lg (\sigma g) = 0,0208 wL + 0,000665 \gamma d - 0,0269 w - 2,132$$

**Tableau .13 :Classification Selon Komornik et David (1969)**

Profondeur	$\gamma d$ (Kn/m <sup>3</sup> )	W (%)	WI (%)	$\sigma g$ (Kpa)
1.00/2.00	1.89	21.5%	51	0,40
2.00/2.50	1.65	16.8 %	44	0,27
2.50/3.00	1.67	20.5 %	49	0,28
3.00/3.50	1.64	15.0 %	59	0,61
5.50/6.00	1.74	19.6 %	46	0,28

Les valeurs du potentiel de gonflement des argiles de M'daourouch sont très variables et montrent dans l'ensemble un caractère très différent comme l'indique les tableaux précédent. Pour comprendre le comportement mécanique de ces sols, et affirmer ou non les variations de comportements mis en évidence entre les différents approches théoriques, des essais à l'oedomètre ont été réalisés

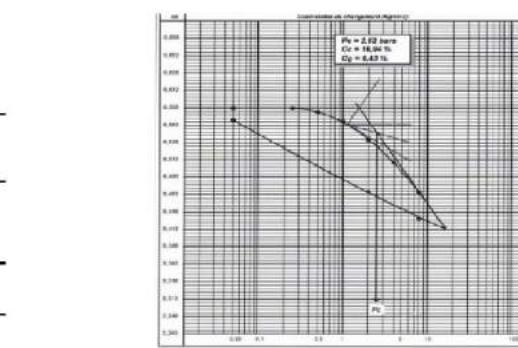
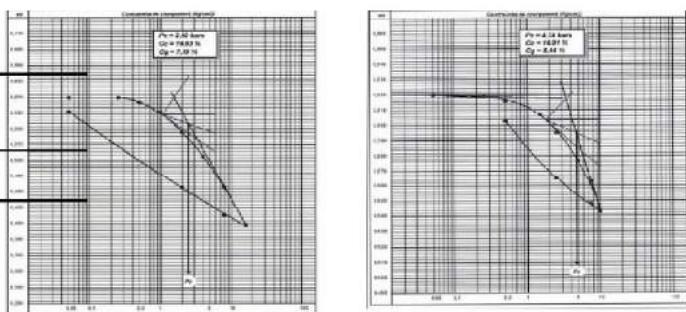
### 5.2.3 Méthode directe :

#### Selon l'essai de compressibilité:

Les résultats d'un essai de compressibilité à l'oedomètre ont été effectués pour pouvoir déterminer les déformations sous les contraintes appliquées, on a trouvé :

**Tableau .14 : Application sur sol de M'daourouch**

profondeur	Pc (Bar)	Cg(%)	Potentiel de gonflement
1,00-2,00	2,50	7,55	Sol gonflant cg élevé
2,00-2,50	2,52	6,43	Sol gonflant cg élevé
3,00-3,50	4,74	5,44	Sol gonflant cg élevé
3,50-5,00	2,44	6,87	Sol gonflant cg élevé



**Fig. 5 : Courbes oedométriques des échantillons de l'argile**

les valeurs de la pression de pré consolidation (Pc bar) varie avec la variation de la profondeur, 5 bars entre 3,00 m et 3,50m et 3 bars entre (1m-2,5m) et (3m-5m).

la valeur du coefficient de compressibilité (Cc %) subit à son tour des variations avec la profondeur, à une hauteur de 1,00-2,00m il est de 19, 9 %, et 17.9 % pour une hauteur de 3,50-4,00m de profondeur, traduisant un sol moyen compressible.

avec une hauteur de 2m , l'indice de gonflement est élevé (Cg =7,55%), et il diminue avec l'augmentation de la profondeur.

Les résultats d'essai oédémétrique, montrent un sol consistant, sur consolidé, moyennement compressible et gonflant.

Les variations de ces paramètres, semblent confirmer l'hétérogénéité du terrain.

## 6. Conclusion

Le nombre élevé d'approches disponibles dans la littérature pour l'identification des sols gonflants ne rend pas la tâche facile aux praticiens. L'application de ces approches au même site

fournirait des indications contradictoires comme il a été montré dans ce travail. C'est pourquoi la formulation dans un cadre approprié comme les directives techniques d'une démarche unifiée pour identifier ce genre de sols serait d'une grande utilité pour les praticiens. Si une telle démarche est adoptée, elle n'éliminera pas totalement les désordres mais unifiera le langage des praticiens et réduira les litiges.

### Référence :

- [1] Bekkouche, A., Djedid A., Aissa Mamoune, S.M., Zoubir, A., (2003) " Esquisse de la carte géotechnique du groupement Tlemcen-Mansourah-Chetouane ", Implication de la géotechnique dans le développement Marrakech, Maroc.
- [2] Bultel, F.,(2001) " Prise en compte du gonflement des terrains pour le dimensionnement des revêtements des tunnels ", Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [3] Building Research Establishment, (1980) Low-rise buildings on shrinkable clay soils: Part 1. BRE Digest 240, HMSO, London.
- [4] Djedid, A., Bekkouche ,A., Aissa Mamoune ,S.M. ( 2001 ) " Identification et prévision du gonflement de quelques sols de la région de Tlemcen (Algérie) ", Bulletin des laboratoires des Pontset Chaussées, N°233, pp.67-75.
- [5] Hachichi A., Bourouiba ,S., Benaissa ,A.,( 2002 ) " Etude de la stabilisation des sols gonflants de la région d'Oran ", 11ème Journée d'études sur les sols gonflants, Université Aboubekr Belkaid, Tlemcen (Algérie), pp.83-91.
- [6]Khemissa, M., Mekki, L.,(2005)"Détermination des paramètres de gonflement des argiles expansives de M'sila ", 2ième Journée d'études sur les sols gonflants, Université Aboubekr, Tlemcen ,(Algérie), pp. 19-27.
- [7]Komornik, A. et David, D, (1969), " Prediction of swelling pressure of clays", Journal of the Soil Mechanics and Foundation Division, vol. 95, nSM1, pp. 209-225.
- [8]Lamara, M., Merah ,A.,(2002) " Analyse d'un cas pathologique de gonflement de sol ", 11ème Journée d'études sur les sols gonflants, Université Aboubekr, Tlemcen (Algérie), pp.101-108.
- [9]Seed, H.B., Woodward, R.J. & de Lundgren ,R, (1962) " Prediction of swelling potential for compacted clays", Soil Mech and Found Div. ASCE, 88:107-131.
- [10]Snethen ,D.R , (1980) , "Expansive Soil in Highway Subgrades", Report FHWA-TS-80-236.
- [11]Vijayvergiya, V.N et Ghzzaly, O.I, ( 1973) , " Prediction of swelling potential for natural clays", Proceedings of the 3rd International Conference on Expansive Soils, vol. 1, Haifa, pp. 227-236.



## REVUE ALGERIENNE DES SCIENCES-A-

Sciences de la Nature et de la Vie

Sciences techniques

ISSN : 2661-7064

<http://univ-eltarf.dz/fr/>



### Traitement et épuration de l'eau potable au niveau de la station de Cheffia (Daira, Bouhadjar)

OTMANE RACHEDI Khadidja \*, BELAID Soraya, ZOUICHE Aida.

Université El-Tarf, Faculté des sciences et de la technologie, BP 73, El-Tarf, Algérie, 3600.

#### Informations

#### Résumé

**Mots clés :**

Potabilité

Turbidité

Épuration

**\*Correspondance :**

k\_bouharis@yahoo.fr

Reçu le jj/mm/aa,

Révisé jj/mm/aa,

Accepté le jj/mm/aa.

Une technique de traitement de l'eau de barrage de Chaffia au niveau de la station de la Daira de bouhadjar (Wilaya d'El-Traf) a été suivie pour satisfaire les besoins en eau potable. Nous nous sommes basées sur l'importance de traitement de l'eau potable, des qualités requises pour qu'on puisse qualifier qu'une eau est potable ainsi que l'identification de la qualité générale de l'eau brute de barrage de Cheffia. La station de traitement de Bouhadjar a pour but de traiter l'eau de barrage de Chaffia ce dernier n'est pas potable sur trois critères : la couleur, la turbidité et les bactéries dissous. Tous les résultats obtenus, répondent aux normes de potabilité appliquées dans notre pays et ce fait, nous pouvons dire que l'eau distribuée aux citoyens de la région de Bouhadjar est potable et exempte de tous germes.

#### 1. Introduction

Une eau potable est une eau qu'elle peut être bue, cuite ou utilisée à des fins domestiques et industrielles sans danger pour la santé. Afin de définir précisément une eau potable, des normes ont été établies qui fixent notamment les teneurs limites à ne pas dépasser pour un certain nombre de substances nocives et susceptibles d'être présentes dans l'eau, il doit obligatoirement respecter les seuils réglementaires de différents paramètres, divisés en différents groupes tel que les qualités organoleptiques (odeur, couleur, saveur), les éléments microbiologiques (virus, bactéries), les substances indésirables (nitrate, fluor), toxiques (chrome, plomb) et les pesticides ainsi que la composition naturelle de l'eau (pH, taux de calcium,...).

Les insuffisances existantes dans la protection des eaux face aux nombreuses pollutions peuvent contribuer à la dégradation de la qualité de ces eaux et à l'augmentation de certains micropolluants minéraux et surtout organiques indésirables dans les eaux destinées à la consommation [1].

Actuellement, la coagulation-flocculation peut être considérée comme un procédé efficace pour l'élimination de divers polluants minéraux et organiques des eaux naturelles. Lorsqu'il s'agit de la matière organique, son élimination s'avère souvent complexe du fait de la variabilité des structures chimiques et des dimensions des composés. Ainsi, les macromolécules de type humique peuvent être éliminées des eaux avec de bons rendements [2]. Cependant, cela nécessite d'adopter des conditions opératoires qui ne sont pas toujours compatibles avec les exigences relatives à la qualité des eaux à distribuer. Les conditions optimales de coagulation-

flocculation des substances humiques correspondent en effet à des pH acides et des dosages importants en coagulant [3]. Par ailleurs, ce procédé génère des résultats limités pour les composés organiques de faibles dimensions, à l'état dissous dans l'eau [4 - 5]. La station de traitement de Bouhadjar située dans la wilaya d'El - Tarf rentrant dans le cadre de la politique de gestion et d'assainissement des eaux sous couvert d'une société économique appelée la SPA-SEATA (société d'épuration d'assainissement El - Tarf-Annaba) assure une série de traitement physico-chimique de l'eau potable provenant barrage de Cheffia qui alimente les communes de Bouhadjar, Ain El karma, Oued-Zitoune, Hammam Beni Saleh et Zitouna. Ce traitement est appuyé par un suivi effectué dans des laboratoires agréés. L'objectif de notre travail s'agit de suivre le traitement et l'évaluation de son efficacité en s'appuyant d'une part sur des analyses physico-chimiques et des analyses bactériologiques et d'autre part sur la comparaison des résultats obtenus notamment pour l'eau traitée aux normes algériennes concernant l'eau potable de consommation. Il faut préciser que notre présente étude se base sur la partie électrochimique qui est réalisée avant, pendant et après le traitement et regroupe la mesure de la température, du PH, de la turbidité, de la conductivité, de la TDS de la salinité et du chlore. L'eau potable au niveau de la station utilise le procédé de traitement physico-chimique à partir de 5 étapes : la préchloration, la coagulation et flocculation, la décantation, la filtration et la désinfection.

## 2. Matériaux et méthodes

### 2.1-Jar-test

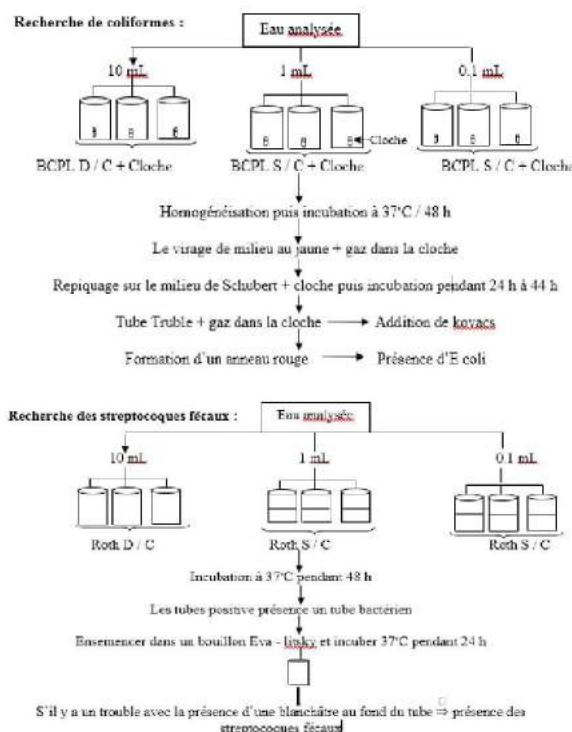
Ce test effectué au laboratoire à l'aide d'un flocculateur pour déterminer les taux de traitement à appliquer à l'eau brute, pour obtenir le meilleur fonctionnement de la station.

### 2.2- Analyse physico chimique :

Ces analyses seront réalisées au niveau du laboratoire d'analyse physico-chimique de la station de l'ADE. Les principaux paramètres physico-chimiques à analyser sont: La Turbidité, la Conductivité, la Salinité, le Taux des sels dissous (TDS), le PH et la Température (T) en °C qui sera affichée par le pH- mètre.

### 2.3-Analyse bactériologique

Dans cette analyse on cherche deux types de bactéries qui sont les coliformes totaux et fécaux et les streptocoques fécaux. Le mode opératoire est illustré dans la figure. 1 :



**Fig.1 :** Mode opératoire de l'analyse bactériologique (Institut pasteur d'Algérie 2008).

### 2.4-Test de Chlore

#### Le Principe du test de chlore

Pour l'évaluation du chlore on utilise un comparimètre ou comparateur de la DPD. Le DPD (N-Diéthyl-paraphénolé Diamine) sous forme de comprimé ou de capsule, permet de déterminer les trois formes de chlore : Chlore libre ( $DPD_1$ ), chlore combiné ( $DPD_{2-3}$ ) et chlore total ( $DPD_4$ )

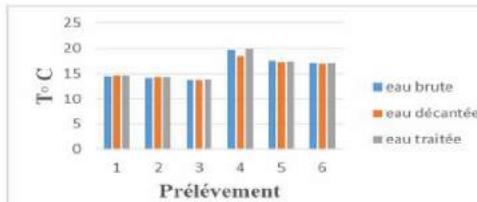
## 3. Résultats et discussion

### 3. 1-Mesure de la température

D'après nos résultats la température mesurée varie entre 13.9 et 20°C pour l'eau traitée ; 13.7 et 18.5°C pour l'eau décantée ; 13.8 et 19.6°C pour l'eau brute.

**Tableau. 1 :** Résultats de mesure de la température

Mois	Prélèvement	Paramètre de température °C		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	14.5	14.6	14.6
	2	14.2	14.3	14.3
Février	3	13.8	13.7	13.9
	4	19.6	18.5	20
Avril	5	17.6	17.3	17.5
	6	17.2	17	17.1



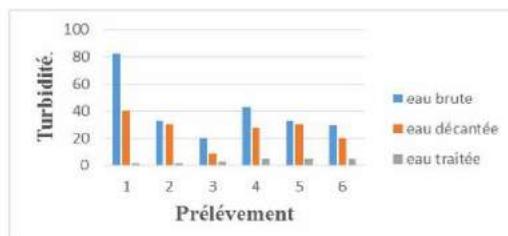
**Fig.2 :** Variation de la température des trois eaux analysées.

### 3. 2-Mesure de la turbidité

D'après les résultats obtenus nous constatons que la turbidité de l'eau traitée est dans les normes (inférieur ou égale à 5).

**Tableau. 2 :** Résultats de mesure de la Turbidité

Mois	Prélèvement	Paramètre Turbidité		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	82	40.7	1.7
	2	33.0	30.0	1.42
Février	3	19.85	8.6	2.7
	4	43.1	28	5
Avril	5	32.5	30.0	5
	6	29.6	20.3	4.9



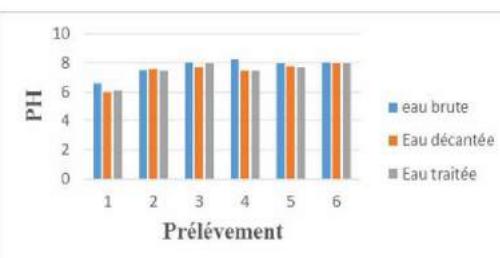
**Fig.3 :** Variation de la turbidité des trois eaux analysées.

### 3. 3-Mesure de PH

Ces résultats montrent que les valeurs de pH de l'eau traitée restent dans les normes (6.5 à 8.5).

**Tableau. 3 :** Résultats de mesure du pH

Mois	Prélèvement	Paramètre PH		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	6.63	5.96	6.05
	2	7.52	7.59	7.42
Février	3	8.03	7.74	7.99
	4	8.23	7.43	7.46
Avril	5	8.00	7.75	7.70
	6	8.01	7.99	7.95



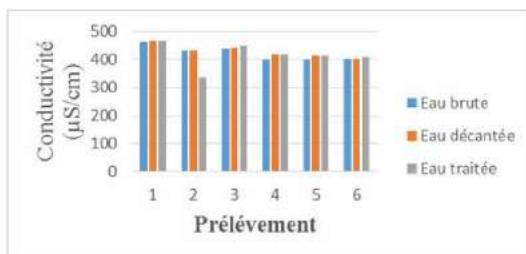
**Fig.4 :** Variation du pH des trois eaux analysées.

### 3.4-Mesure de la conductivité électrique

Les résultats obtenus indiquent une augmentation de la conductivité électrique en allant de l'eau brute vers l'eau traitée. Cela est dû à la présence de sels provenant des réactifs chimiques additionnés lors du traitement.

**Tableau. 4 :** Résultats de mesure de la conductivité

Mois	Prélèvement	Paramètre conductivité		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	463	465	466
	2	432	434	336
Février	3	439	442	450
	4	401	420	420
Avril	5	401	417	418
	6	403	404	409



**Fig.5 :** Variation de la conductivité électrique des trois eaux analysées.

### 3.5-Mesure de la salinité

D'après les résultats obtenus, on observe une valeur de 0.2 g/l pour tous les échantillons des trois eaux.

**Tableau. 5 :** Résultats de mesure de la salinité.

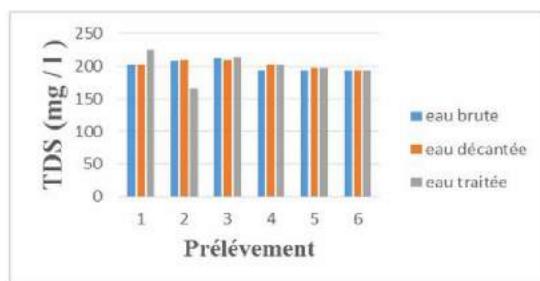
Mois	Prélèvement	Paramètre salinité		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	0.2	0.2	0.2
	2	0.2	0.2	0.2
Février	3	0.2	0.2	0.2
	4	0.2	0.2	0.2
Avril	5	0.2	0.2	0.2
	6	0.2	0.2	0.2

### 3.6-Mesure de la TDS

D'après les résultats, on observe que le TDS enregistre ses grandes valeurs dans les eaux traitées. Cela s'explique par l'addition dans l'eau des sels provenant des produits chimiques de traitement (sulfate d'alumine, polymère et hypochlorite de sodium).

**Tableau. 6 :** Résultats de mesure du TDS

Mois	Prélèvement	Paramètre TDS		
		Eau brute	Eau décantée	Eau traitée
janvier	1	202	203	225
	2	208	210	166.1
Février	3	212	209	214
	4	193.1	202	202
Avril	5	193.8	198.3	198.4
	6	194.1	193.2	193.3



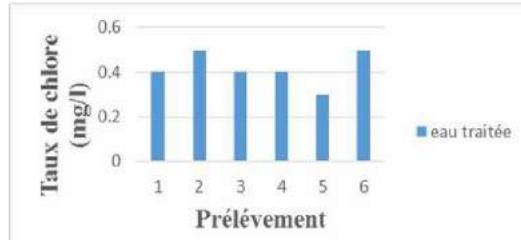
**Fig.6 :** Variation du TDS des trois eaux analysées.

### 3.7- Test de chlore

Les résultats enregistrés montrent des valeurs entre 0.3 et 0.5 mg/l

**Tableau. 7 :** Taux de chlore résiduel libre dans l'eau traitée.

Eaux traitée	
Prélèvement	Taux de chlore (mg/l)
1	0.4
2	0.5
3	0.4
4	0.4
5	0.3
6	0.5



**Fig.7 :** Variation du taux de chlore de l'eau traitée.

### 3.8 - Résultats des analyses bactériologiques

L'analyse bactériologique montre la présence de coliformes totaux dans l'eau brute, cela n'est pas le cas pour l'eau traitée où on observe une absence totale de ces microorganismes ce qui reflète une chloration suffisante.

D'autre part, on remarque l'absence totale des coliformes fécaux dans toutes les eaux (brutes, décantées et traitées) indiquant ainsi l'absence de toute contamination fécale.

**Tableau. 8 :** Résultats des analyses bactériologiques (SEATA, 2010).

Les trois eaux de station de Bouhadjar.	CT (G/100 ml)	CF (G/100 ml)
Eau Brute	08	00
Eaux Décanté	00	00
Eau traitée	00	00
Eau Brute	20	00
Eau décantée	00	00
Eau traitée	00	00

#### 4. Conclusion

L'objectif de notre travail c'était de suivre la technique de traitement de l'eau de barrage de Cheffia au niveau de la station de la Daira de bouhadjar (Wilaya d'El-Traf) pour satisfaire les besoins en eau potable. Nous nous sommes basées sur l'importance de traitement de l'eau potable, des qualités requises pour qu'on puisse qualifier qu'une eau est potable ainsi que l'identification de la qualité générale de l'eau brute de barrage de Cheffia.

La station de traitement de Bouhadjara a pour but de potabiliser l'eau de barrage de Cheffia selon les trois critères : la couleur, la turbidité et les bactéries dissous.

A la lumière des résultats obtenus, nous pouvons indiquer que tous les résultats obtenus précédemment, répondent aux normes de potabilité appliquées dans notre pays et ce fait, nous pouvons dire que l'eau distribuée aux citoyens de la région de Bouhadjara est potable et exempte de tous germes

#### Référence :

- [1] Achour, S. (2001) Incidence des procédés de chloration, de flocculation et d'adsorption sur l'évolution de composés organiques et minéraux des eaux naturelles.
- [2] Achour, S., Guesbaya, N. (2005) Coagulation-flocculation par le sulfate d'aluminium de composés organiques phénoliques et de substances humiques. Larhyss Journal, 4: 153-168.
- [3] Legube, B., Xiong, F., Croue, J.P., Dore, M. (1990) Étude sur les acides fulviques extraits d'eaux superficielles françaises. Rev. Sci. Eau, 3: 399-424.
- [4] Rezeg, A., Achour, S. (2005) Elimination d'acides organiques aromatiques par coagulation-flocculation au sulfate d'aluminium. Larhyss Journal, 4 : 141-152.
- [5] Hecini, L., Achour, S. (2008) Elimination des composés organiques phénoliques par coagulation-flocculation au sulfate d'aluminium. Larhyss Journal, 7: 47-57.



## Toward a Combined Approach for Requirements Engineering of SaaS

Farida Kherissi

Université Badji Mokhtar , Faculté de Sciences de l'Ingénierat, Laboratoire LISCO, B.P N°12, Annaba, Algérie, 23000.

---

### Informations

#### Mots clés :

SaaS  
VORD  
I\*  
Combining  
Requirements

**\*Correspondance :**  
[farida.kherissi@univ-annaba.dz](mailto:farida.kherissi@univ-annaba.dz)

Reçu le jj/mm/aa, Révisé  
jj/mm/aa, Accepté  
lejj/mm/aa.

---

### Résumé

The Software as a service (or SaaS) is a way of delivering applications over the Internet-as a service. Despite its increasing acceptance within the industry, many important questions remain unanswered. Issues related to the best software architectures decisions for cloud-based systems are faced with the question of appropriate techniques applying at early phase like requirements engineering. Requirements Engineering (RE) is one of the core Software Engineering activities. The Requirements elicitation is very important and non-trivial task in the Requirements Engineering activities. The paper highlights problems in Service oriented Requirements Engineering (SoRE), and presents guidelines toward a hybrid approach for eliciting requirements based on VORD viewpoints RE method and i\* model of the GoRE.

### 1. Introduction

Cloud computing is an emerging paradigm in which information technology resources are provided over the internet as a service to users. Software-as-a-Service (SaaS) is offered by cloud, which can be delivered in a composite form, consisting of a set of application and data components, that works together to deliver higher-level functional software. Software as a Service (SaaS) is a cloud computing service model in which applications are delivered to customers as a service. Instead of developing and maintaining a version of application code for each individual tenant, SaaS application serves thousands of tenants with one single application instance [35]. The main principle is offering computing, storage and software as a service. SOA (Service Oriented Architecture) is an architectural paradigm that has recently become one of the preferred choices for designing and developing systems that are characterized by coarse-grained services and service consumers [35]. One of the key motivating factors behind the adoption of this paradigm is the capacity to deliver flexible ICT (information and communication technologies) solutions, which have the ability to respond quickly and prove cost-effective to changing business or consumer requirements.

Service oriented software engineering (SOSE) advocates software reuse while aiming to achieve

better alignment of software solutions to business requirements. Service orientation has evolved from Object Oriented Analysis and Design (OOAD) and Component Based Software Development (CBSD), the major difference being that reusable artefacts are in the form of services rather than objects or packaged components [36].

Requirements Engineering (RE) is accepted as one of the most crucial stages in software design and development as it addresses the critical problem of designing the right software for the customer. Traditionally RE was considered to be a sequential process that starts with requirements elicitation, and proceeds to modeling, analysis, specification, agreement, along with evolution and management [14].

In SOA, *Service oriented Requirements Engineering* (SoRE) shares some activities with traditional Requirements Engineering but its focus is on the identification of services and workflows used to modeling applications (developed in a SOA framework and running in a SOA framework) and on their reuse. SoRE is different from traditional RE process in various aspects. The difference between traditional and SoRE activities is essentially in performing the service and workflow discovery [37], identifying the service requirements specified in service level agreements (SLA), identifying and

specifying the dynamic requirements that may vary at runtime.

The service-oriented systems are analogous to a federation; i. e., a system consists of several constituents, which remain independent in internal and sometimes even in external matters. The constituents are under control of different stakeholders, which can have quite different goals. There are at least three paradigm related roles: service consumer, service infrastructure owner, and service owner. The goals of service consumer are aligned with the business goals. The goals of infrastructure owners are related to the development and maintenance of a service system infrastructure. The goals of service owner concern the realisation of capabilities [37].

Cloud computing brings numerous challenges in this area since the traditional methods need to be adapted and new RE methods [37], including the requirements modelling, has to be investigated. More specifically, the success of adopting the new paradigm highly depends on the degree to which requirements are correctly understood by both service providers and consumers. Conventional RE approaches are not always well adapted to the service-oriented paradigm where the consumer is not always available for the traditional interview and observation-based requirements elicitation process or even the consumer does not have any requirements yet and will discover them once using the service. The service provider has to create requirements in order to attract consumers and to compete in the market. Besides, even if the requirements or wishes exist, very often they are fuzzy and volatile and the service provider has to take into consideration their evolution and management process. Therefore, the need for approaches enabling the elicitation of service consumer's wishes, needs and requirements becomes more and more pressing [34], [35], [36], [37]. We think that the elicitation process is a challenging task in SoRE, because of both: a very few works at early RE phase are proposed and its crucial importance in the development process.

It is widely accepted that a multi-perspective approach to requirements engineering can, potentially, lead to requirements specifications which are more likely to satisfy the needs of a diverse set of system stakeholders [2], [3], [8], [37]. The viewpoints approach recognizes that all requirements cannot be discovered by considering system from a single perspective; it is essential to collect requirements from different classes of system end-users and other stakeholders, to collect information of different types - about the application domain, system environment and system development. The viewpoint based approach to requirements engineering has been approved in traditional software systems development context. A viewpoint is an

encapsulation of partial information about a system's requirements. Information from different viewpoints must be integrated to form the final system specification [2]. Two different kinds of viewpoint have been proposed: Viewpoints associated with system stakeholders, and Viewpoints associated with organisational and domain knowledge [2]. PREview viewpoints are flexible, generic entities which can be used in different ways and in different application domains. VORD [43] is a pragmatic adaptation of the use of viewpoints for requirements engineering that does not propose any particular types of viewpoint or notation.

## 2. Requirements Engineering

The term "Requirements Engineering" appears to have been used for the first time By Hagelstein in [1]. All projects begin with a statement of requirements. Requirements are descriptions of how a software product should perform. A requirement typically refers to some aspect of a new or enhanced product or service [13].

The requirements engineering process involves a clear understanding of the requirements of the intended system. This includes the services required of the system, the system users, its environment and associated constraints. This process involves the capture, analysis and resolution of many ideas, perspectives and relationships at varying levels of detail [8].

Requirements engineering refers to all life-cycle activities related to requirements. This primarily includes gathering, documenting and managing requirements (Figure 1.). With the growing awareness of the significance of requirements in the software process, requirements engineering increasingly becomes an area of focus in software engineering research. Common requirements engineering activities are elicitation, interpretation and structuring (analysis and documentation), negotiation, verification and validation, change management and requirements tracing (Figure 1).

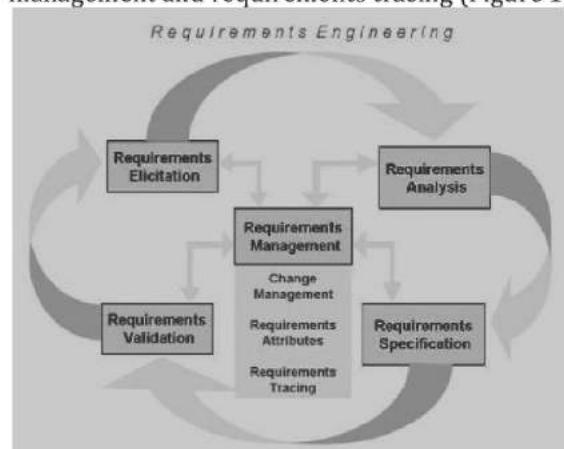


Figure 1. Requirements Engineering Activities

The literature offers several approaches to requirements engineering. Each of them focuses on specific activities of the requirements engineering process, as :

- The scenario-based approach [11]
- The GORE (Goal Oriented Requirements Engineering) [ 19]
- Aspect-oriented requirements engineering approach [16]
- Problem Frames approach [10] .
- ...etc.

## 2.1 Requirements Elicitation

Quality of the software are contingent to requirement elicitation, requirement analysis and requirement management [42]. Defining requirements for software is a process that involves a wide range of human, technical and methodological skills, combining rigor and creativity. An effective requirements study significantly reduces the cost of development and maintenance of an application and increases its quality [12], [13].

Requirements elicitation is the process of seeking, uncovering, acquiring, and elaborating requirements for computer based systems. It is generally understood that requirements are elicited rather than just captured or collected. This implies there are discovery, emergence, and development elements to the elicitation process. Requirements elicitation focuses on the collection of requirements from different stakeholders. Collecting software requirements activity is considered by various levels of users as difficult, time consuming, and inefficient. Abilities of communication services within the intended organization going to conduct software requirements elicitation has a major role to play in this context and it affects considerably consequent activities, tasks, and processes [31]. People's opinions differ completely and significantly during this activity due to naturally existing flavors between individuals. Knowledge for systems must be derived from expert sources and elicitation of right knowledge can take several years and cost huge amount of money [42] especially in case of expert systems or knowledge-based systems. The software requirements process, represents one of the most critical phases of the software development lifecycle [31]. The main objective of the elicitation techniques is to support the maximum level of stakeholders' collaboration, cooperation, and contribution. We give the most important elicitation techniques cited in [31]: - **RESCUE** creativity techniques that are human-intensive requirements generation.

**-Search-based technique:** an approach intends to reduce RE problems, like requirements selection

and prioritization, to search problems, and then apply multi-objective search-based techniques to lead the search of an optimum.

**-POSE:** a quality-oriented tool for requirements elicitation. Its function is to facilitate the elicitation of quality requirements through interactive simulation of the system which is going to-be maintained or developed.

**-Spearmint:** provides capabilities for classifying and representing process models in an application environment that is web based where its power rests in the Electronic Process Guide generator (EPG) tool to create process specifications and it provides direct support for the process engineer. Spearmint directly impacts efforts for documentation of processes in process improvement.

**-Joint Application Development (JAD):** brings users and technical professionals together and is designed mainly to discover end user's functional requirements (FR) in software development. JAD gathers a broad range of stakeholders together in highly structured and focused meetings to gather information and specify requirements. The focus of JAD is a structured workshop known as the JAD Session, in which all stakeholders design a system.

## 2.2 Requirements Engineering Based Viewpoints

### 2.2.1 Viewpoint Approach

A viewpoint can be informally defined as an angle from which a domain can be observed [31].The use of viewpoints in the requirements engineering activities is well known [29], [18]. This approach recognizes that all requirements cannot be discovered by considering system from a single perspective; it is essential to collect requirements from different classes of system end-users and other stakeholders, to collect information of different types – about the application domain, system environment and system development. There are a number of different models of viewpoints. We consider a viewpoint to be a role performed by a stakeholder when examining a system. The viewpoint based approach to requirements engineering has been approved in traditional software systems development context [18]. The goals of service owner concern the realization of capabilities. In the viewpoint-based methods which have been developed, two different kinds of viewpoint have been proposed:

1. Viewpoints associated with system stakeholders. A system stakeholder is anyone who is, directly or indirectly, affected by the existence of a system ( end-users of a system, managers of organization, other human and computer-based systems in an organization,

external entities who have some kind of interest in the system and engineers involved in the design, development and maintenance of the system.

- Viewpoints associated with organizational and domain knowledge which constrains the system requirements. The constraints may be physical (e.g., network performance), organizational (e.g., incompatible hardware used in different divisions of a company), human (e.g., average operator error rate) or may reflect local, national or international laws, regulations and standards. This type of viewpoint cannot be associated with a single class of stakeholder but includes information collected from many different sources (people, documents, other systems, etc.). The viewpoints have many advantages:

- They explicitly recognize of the diversity of the sources of requirements
- They provide a mechanism for organization and structuring diverse information
- They provide a means for requirements sources or stakeholders to identify and check their contribution to the requirements.

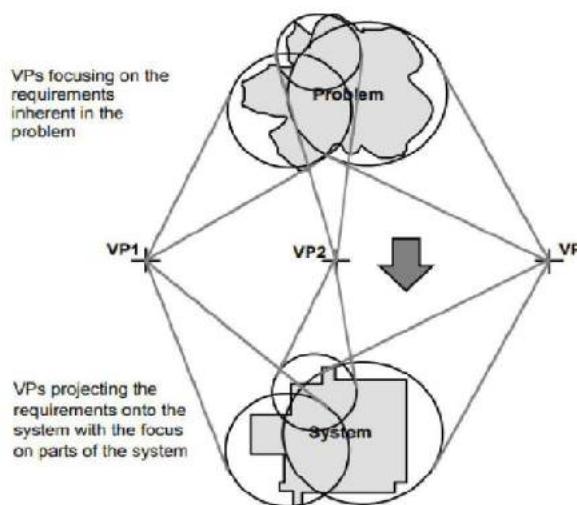


Figure 2. Viewpoints on a problem

### 2.2.2 VORD Method

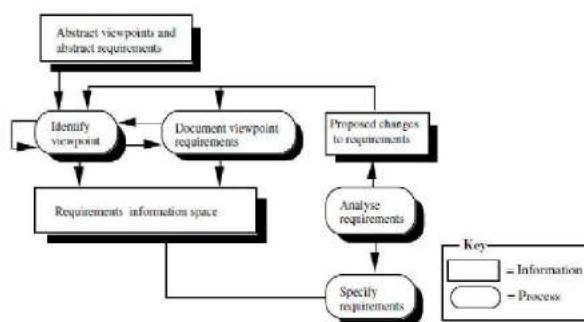


Figure 3. The Vord Process Model

The viewpoint VORD encapsulates a set of attributes that help define and structure specifications. Briefly, a viewpoint template includes the following components: Identifier, Label, Type, Attributes, Requirements, Event scenarios (Figure 4).. The VORD method is useful in the detection of user needs, and also in identifying services that the user expects the system.

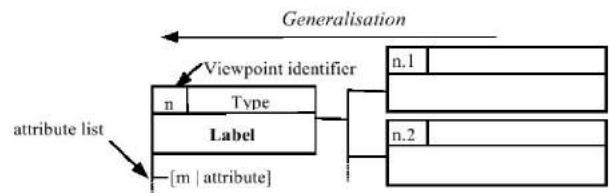


Figure 4. Viewpoints Notation

VORD viewpoints fall into two classes:

**Direct viewpoints.** These correspond directly to clients in that they receive services from the system and send control information and data to the system. They are either system operators/users or other systems which are interfaced to the system being developed.

**Indirect viewpoints.** Indirect viewpoints have an 'interest' in some or all the services which are delivered by the system but do not interact directly with it. They may generate requirements which constrain the services delivered to direct viewpoints.

### 2.3. The Goal Oriented Requirements Engineering

**2.3.1 Goal Oriented Requirements Engineering**  
Goal-Oriented Requirement Engineering (GORE) is a subarea of Requirement Engineering (RE), which addresses using of goals for eliciting, elaborating, structuring, specifying, analyzing, negotiating, documenting, and modifying requirements [23]. Goal-oriented requirements engineering (GORE) [19], [23] is concerned with the use of goals. Goals express intention and capture the reason of the system to be built. In general, each high-level goal can be considered to belong to one of the following comprehensive categories: enterprise goals (reflecting general policy,

strategy and tactics), problem-solving goals and innovative goals [19]. Goals also vary in type, ranging from representations of functional properties the system must offer to non-functional concerns related to quality of service [19].

### 2.3.2. The I\* Method

The I\* [19] approach provides a description of work organisation in terms of dependency relationships among actors. This approach acknowledges the fact

that actors have freedom of action, within the social (inter-actor) constraints, called strategic dependencies.

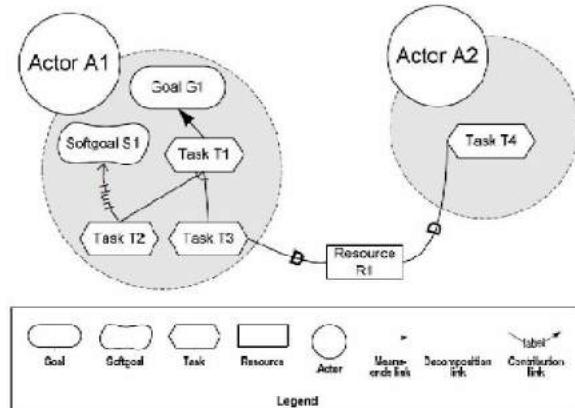


Figure 5. Example of a Goal Model Illustrating its Basic Concepts

### 3. Requirements Engineering in SOA Systems

The early SoRE approaches were derived from the initial phases of traditional software development methodologies, and the later ones are original, taking into account the specific characteristics of service-oriented systems [37].

A systematic literature review process identified a result that shows that most publications have been published in conferences (86%), followed by journals (14%). Despite the count of selected studies is not statistically significant, the authors suspected that most part of publication is in conferences because the approaches are not mature enough, maybe because the research area is still recent [33].

The proposed in recent years can be partitioned into two groups: the first group refers to slightly revised traditional approaches, and the second one includes innovative approaches [3, 4, 15, 16, 17, 22, 23, 26, 28, 29, 31, 32, 33].

While the offer of RE approaches for software and information systems development is quite rich, the perspective of service-oriented development and service engineering is rather neglected, especially from the service provider's point of view [23]. In [21] a method to analyze requirements is proposed. It can inform users of potential errors in requirements by detecting the correctness of requirements, which is driven by users' personalized operations on goal models, and customize personalized processes to satisfy users' requirements by reusing domain processes. The personalized processes are the basis for Web service discovery and composition. J. Ralyté introduce in [23] a framework to support RE for service engineering.

In [18], authors focused on RE phase of SOSE and proposed a SORE framework. Xiang et al. have proposed Service Requirement Elicitation Mechanism (SREM), which is based on Service Requirements Modeling Ontology (SRMO), which has taken basic concepts from agent-oriented modeling framework i\* (i star) [42]. Value based software development concepts are used in Value Gap Model for eliciting requirements for service components [42].

### 4. The Advantages of Using a Combining of VORD and I\*

Where viewpoints are used to support requirements elicitation, they are clearly outside of the system being specified and are, primarily, the sources of the system requirements. At this stage, only informal descriptions and models of the system are likely to be available [43]. The GoRE (Goal oriented Requirements Engineering) methods provide a range of techniques for goal identification, offers a set of heuristics [44] for elicitation of requirements through the decomposition of goals, enabling alternatives...etc; on the other hand, VORD is an approach leading to viewpoint-oriented requirements engineering geared specifically to integration, lacking a more systematic mechanism to direct the process of elicitation requirements. Although, we think that a hybrid approach using i\* to model viewpoints extracted from stakeholders is an important issue in SoRE for many reasons:

1. The VORD method is a subjective approach and do not use a graphical model, so we can complete the requirement analyze VORD with a mapping to a goal diagram.
2. According to Sommerville and Sawyer in [6], some of the disadvantages of using viewpoints are inflexible viewpoint models, fixed notations for requirements, limited support for requirements evolution, and limited support for requirements negotiation.
3. The evolution/change of elicited requirements can easily modelled using alternatives with AND/OR links in a goal diagram, that's not possible in viewpoints approaches.
4. The most important motivation is trying to gain advantages of both VORD and i\* in one hand, and dealing with a complete approach for requirements engineering SaaS.

### 5. Conclusion

Service-oriented systems engineering in-the-small can be considered as an integral part software engineering with the question of appropriate techniques applying at early phase like requirements engineering.

RE for Service Oriented Software Development can involve activities of traditional process like modeling, specification, and analysis but the way in which these activities are carried out is different.

The Service oriented Requirements Engineering (SoRE) is more complex than traditional RE, having new specific problems, as human involvement in software development, problems of alignment of requirements and services, ...etc. Although, Requirements elicitation involves activities that are intensely communicative.

To our best knowledge, there is no a systematic approach or work for eliciting activities in SoRE . In this paper, we present a review of two traditional RE approaches : Viewpoints and i\*. We think a of combining of them is an important issue for SoRE.

## References

- [1] Hagelstein J.(1988) Declarative Approach to Information Systems Requirements,in Knowledge-Based Systems, 4.
- [2] G. Kotonya and I.Sommerville.( 1992) Viewpoints for requirements definition, I. Snftware Eng.,7: 375-387.
- [3] A. Finkelstein, J. Kramer, B. Nuseibeh, L. Finkelstein, and M. Goedicke(1992) Viewpoints: A framework for integrating multiple perspectives in system development, fnt J. Snffnwe Eng. Knowl. Eng, 2:31-58.
- [4] Nuseibeh, B., J. Kramer, and A. Finkelstein(1994) A Framework for Expressing the Relationships Between Multiple Views in Requirements Specification, Transaction on Software Engineering, 20(10): 760-773.
- [5] Gerald Kotonya and Ian Sommeiville(1996) Requirements engineering with viewpoints, Software Engineering Journal
- [6] I Ian Sommerville and Pete Sawyer(1997), Viewpoints: principles, problems and a practical approach to requirements engineering, Annals of Software Engineering 3 :101-130.
- [7] Colette Rolland, Carine Souveyet et Camille Ben Achour, Guiding Goal Modeling Using Scenarios. IEEE Trans. Softw. Eng., vol. 24, pages 1055–1071, December 1998.
- [8] I. Sommerville, P. Sawyer, and S. Viller(1998) Viewpoints for requirements elicitation: a practical approach, 74–81.
- [9] ROLLAND C, PRAKASH N and BENJAMEN A (1999) A Multi-Model View of Process Modelling, Requirements Engineering Journal, 169-187.
- [10] A. Cockburn (2001) Writing Effective Use Cases, Addison Wesley, New York.
- [11] Michael Jackson (2001) Problem frames : analyzing and structuring software development problems. Addison-Wesley Longman Publishing Co.,Inc, Boston, MA, USA.
- [12] Alistair Sutcliffe (2003) Scenario-Based Requirements Engineering. In Proceedings of the 11th IEEE International Conference on Requirements Engineering, Washington, DC, USA,IEEE Computer Society.
- [13] Lau D., Mylopoulos J.(2004) Designing web services with Tropos. In: Proceedings of the IEEE International Conference on Web Services
- [14] [ICWS'04], 6-9 June, San Diego, California, USA, IEEE Computer Society., 306-315.
- [15] A. Aurum and C. Wohlin, editors (2005) Engineering and Managing Software Requirements. Springer Verlag, Berlin Germany.,
- [16] Loucopoulos, P.(2005) Engineering and Managing Software Requirements. Springer, Heidelberg.
- [17] Papazoglou M. P., van den Heuvel W.-J.(2006) Service-oriented design and development methodology. International Journal of Web Engineering and Technology, 2(4):412-442.
- [18] Decker, Björn, et al. (2007), Wiki-Based Stakeholder Participation in Requirements Engineering, IEEE SOFTWARE , Fraunhofer Institute for Experimental Software Engineering.
- [19] Aais Rashid et Ruzanna Chitchyan.(2008) Aspect-oriented requirements engineering : a roadmap. In Proceedings of the 13th international workshop on Early Aspects, EA '08, pages 35–41, New York, NY, USA, ACM.
- [20] Report Working Conference on Requirements Engineering. Paech, Barbara, Heymans, Patrick and Persson, Anne. Montpellier : ACM SIGSOFT Software Engineering Notes, 2008 . Requirements Engineering Foundation for Software Quality (REFSQ'08). pp. Volume 33, Number 5, Page 22-26.
- [21] J. Wang, K. Q. He, P. Gong, C.Wang, R. Peng and B. Li (2008) RGPS: A Unified Requirements Meta-Modeling Frame for Networked Software, Proceedings of Third International Workshop on Advances and Applications of Problem Frames (JWAAPP 2008) at 30th International Conference on Software Engineering (ICSE 2008), pp. 29-35.
- [22] Crabtree, Carlton, Seaman, Carolyn and Norcio, Anthony. (2009) Exploring Language in Software Process Elicitation: A Grounded Theory Approach. : IEEE Computer Society, Proceedings of the 2009 Third International Symposium on Empirical Software Engineering and Measurement (ESEM '09).
- [23] Sommerville, Ian.(2009) Software Engineering. s.l. Pearson.
- [24] Axel van Lamsweerde(2009) Requirements Engineering : From System Goals to UML Models to Software Specifications, Wiley.
- [25] Lewis, Grace; Smith, Dennis; & Kontogiannis, Kostas.(2010) A Research Agenda for Service-Oriented Architecture (SOA): Maintenance and Evolution of Service-Oriented Systems. CMU/SEI-2010-TN-003. Software Engineering Institute, Carnegie Mellon University.
- [26] H. Chen and K. He(2011) A method for service-oriented personalized requirements analysis, Journal of Software Engineering and Applications, 4(1):59-68.
- [27] Verlaine B., Jureta I., Faulkner S.( 2011) Towards conceptual foundations of requirements engineering for services. In: Proceedings of the 5th IEEE International Conference on Research Challenges in Information Science [RCIS], 19-21 May, Gosier, Guadeloupe, France. IEEE Computer Society.,1-11.
- [28] Ralyte J.(2012) Viewpoints and issues in requirements engineering for services. In: Bai X., Belli F., Bertino E., Chang C. K., Elci A., Seceleanu C., Xie H., Zulkernine M. (eds.) Proceedings of the 36th Annual IEEE Computer Software and

- Applications Conference Workshops [COMPSAC], Izmir, Turkey. IEEE Computer Society. 341-346.
- [28] Atefah Khoseravi(2012), Requirement Engineering in Service-Oriented Architecture, International Conference on Networks and Information (ICNI 2012) IPCSIT vol. 57 (2012) © IACSIT Press, Singapore DOI: 10.7763/IPCSIT.2012.V57.19
- [29] Soo Ling Lim, and Anthony Finkelstein(2012) StakeRare: Using Social Networks and Collaborative Filtering for LargeScale Requirements Elicitation, IEEE transations on software.
- [30] Davis, A. 2013, Just enough requirements management: where software development meets marketing, Addison-Wesley.
- [31] Qasem Nijem (2013), Software Requirements Elicitation Tools for Service Oriented Architecture: Comparative Analysis, International Journal of Computing Academic Research (IJCAR) ISSN 2305-9184 Volume 2, Number 3, pp. 99-112 © MEACSE Publications
- [32] A. Felfernig, G. Ninaus, H. Grabner, F. Reinfrank, L. Weninger, D. Pagano, and W. Maalej(2013) An overview of recommender systems in requirements engineering, in Managing Requirements Knowledge Book, pp. 315–332, Berlin Heidelberg, Springer.
- [33] N. Hariri, C. Castro-Herrera, J. Cleland-Huang, and B. Mobasher(2014), Chapter 17: Recommendation systems in requirements discovery, in Recommendation Systems in Software Engineering, M. P. Robillard, W. Maalej, R. J. Walker, and T. Zimmermann, Eds. Springer.
- [34] Lupeikiene, A., Caplinskas, A. (2014). Requirements engineering for service-oriented enterprise systems: quality requirements negotiation. In: Haav, H.-M., Kalja, A., Robal, T. (Eds.), Databases and Information Systems VIII. Frontiers in Artificial Intelligence and Applications, Vol. 270. IOS Press, Amsterdam, pp. 27–40.
- [35] A. Shahin, A.(2014) Variability Modeling for Customizable SaaS Applications, International Journal of Computer Science and Information Technology, 6(5): 39-49.
- [36] Muneera Bano(2015), Alignment of requirement engineering, PhD thesis, University of Technology, Sydney.
- [37] Lupeikiene, A., Caplinskas, A. (n.d.) From needs to requirements specification in service-oriented systems engineering. Accessed 26 March 2018. [http://www.mii.lt/paslaugu\\_internetas/rodikliai/1veikla/1.2p.pdf](http://www.mii.lt/paslaugu_internetas/rodikliai/1veikla/1.2p.pdf)
- [38] Wanderley F., Souza E., Goulão M., Araujo J., Cysneiros G., Misra A. (2017) Requirements Engineering for Cloud Systems: A Mapping Study Design. In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2017. ICCSA 2017. Lecture Notes in Computer Science, vol 10409. Springer, Cham.
- [39] Lupeikiene, A., Caplinskas, A. (n.d.) From needs to requirements specification in service-oriented systems engineering. Accessed March 2018. [http://www.mii.lt/paslaugu\\_internetas/rodikliai/1veikla/1.2p.pdf](http://www.mii.lt/paslaugu_internetas/rodikliai/1veikla/1.2p.pdf)
- [40] LNCS Homepage, <http://www.springer.com/lncs>, last accessed 2016/11/21.
- [41] W.T.Tsai , Z. Jin, P. Wang, B. Wu.(2007) Requirement Engineering in Service-Oriented System Engineering. Proceedings of the IEEE International Conference on e-Business Engineering, p.661-668, October 24-26.
- [42] S Asghar, M Umar(2010) Requirement engineering challenges in development of software applications and selection of customer-off-the-shelf (COTS) components - International Journal of Software Engineering.
- [43] G. Kotonya and I. Sommerville(1998) Requirements engineering : Process and techniques. John Wiley and Son, Great Britain.
- [44] Gil Regev, Alain Wegmann(2005) Where do Goals Come from: the Underlying Principles of Goal-Oriented Requirements Engineering, in : 13th IEEE International Requirements Engineering Conference (RE'05), Paris, France.



## Passage de la langue naturelle à une requête SPARQL

Chemam Chaouki<sup>a,\*</sup>, Touati Zineb<sup>a</sup>, Zarzour Hafed<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Département d'Informatique – Université Chadli Bendjedid El-Tarf, BP 73, (36000) – Algérie.

<sup>b</sup>Universités Mohammed-Chérif Messaadia,souk ahras,Algérie .

<b>Informations</b>	<b>Résumé</b>
<b>Mots clés :</b>	Avec la quantité croissante de données sémantiques disponibles sur le Web, il existe un fort besoin de systèmes permettant aux utilisateurs Web courants d'accéder à ce corpus de connaissances. Les systèmes de réponse aux questions ont particulièrement retenu l'attention, car ils permettent aux utilisateurs d'exprimer des besoins d'informations arbitrairement complexes de manière simple et intuitive. Le principal défi consiste à traduire les besoins d'information des utilisateurs sous une forme telle qu'ils puissent être évalués à l'aide de techniques standard de traitement et d'inférence de requêtes sur le Web sémantique. Au cours des dernières années, une série d'approches ont été développées pour relever ce défi, montrant des avancées significatives vers la réponse aux questions de langage naturel par rapport à de grands ensembles hétérogènes de données structurées. Cependant, seuls quelques systèmes traitent encore le fait que les données structurées disponibles de nos jours sont réparties entre une grande collection d'ensembles de données interconnectés et que les réponses aux questions ne peuvent souvent être fournies que si les informations provenant de plusieurs sources sont combinées. En outre, de nombreuses informations ne sont toujours disponibles que sous forme textuelle, à la fois sur le Web et sous forme d'étiquettes et de résumés dans des sources de données liées. [1]
<b>*Correspondance :</b>	
Che_chaouki@yahoo.fr	

### 1. Introduction

Une tâche difficile dans la réponse aux questions en langage naturel (Q / A pour faire court) sur le graphe de connaissances RDF est de savoir comment combler l'écart entre les questions de langage naturel non structurées (NLQ) et les données RDF structurées en graphe (G). L'un des outils effectives est le «modèle», qui est souvent utilisé dans de nombreux systèmes RDF Q / A existants. Cependant, peu d'entre eux étudient comment générer automatiquement des modèles. À notre connaissance, nous sommes les premiers à proposer une approche de jointure pour la génération de modèles. Étant donné une charge de travail D de requêtes SPARQL et un ensemble N de questions en langage naturel, l'objectif est de trouver des paires q, n, pour q ∈ D ∧ n ∈ N, où la requête

SPARQL q est la meilleure correspondance pour la question n en langage naturel n. Ces paires fournissent des conseils prometteurs pour la génération automatique de modèles. En raison de l'ambiguïté des langues naturelles, nous modélisons le problème ci-dessus comme une tâche de jointure de graphe incertaine. Nous proposons plusieurs techniques d'élagage structurel et probabiliste pour accélérer l'assemblage. Des expériences approfondies sur des ensembles de données de référence RDF Q / A réels confirment à la fois l'efficacité et l'efficacité de notre approche. [2] Récemment, les graphiques des connaissances ont attiré beaucoup d'attention à la fois dans le milieu universitaire et dans l'industrie. Le cadre de description des ressources (RDF) étant la norme de facto d'un graphe de connaissances, nous nous concentrerons sur le référentiel RDF dans cet

article. Un problème clé est de savoir comment accéder aux graphiques de connaissances et obtenir rapidement les informations souhaitées. Bien que SPARQL soit un langage de requête structurel sur les graphiques RDF, il n'est pas pratique pour les utilisateurs non professionnels d'interroger les graphiques RDF à l'aide de SPARQL, en raison de la complexité de la syntaxe SPARQL et du schéma RDF. Nous illustrons un exemple de requête SPARQL sur DBpedia comme suit.

```
SELECT ?person
```

```
WHERE { ?person rdf:type Artist.
```

```
?person graduatedFrom Harvard University.}
```

## 2. Motivation

Pour masquer la complexité de la syntaxe SPARQL, les systèmes de questions / réponses (Q / A) RDF fournissent une interface facile à utiliser pour les utilisateurs, ce qui a attiré une grande attention dans les deux NLP (traitement du langage naturel) et les communautés DB (base de données). Une tâche difficile consiste à traduire les questions en langage naturel (NLQ) en requêtes structurelles, telles que SPARQL, sur un grand graphe de connaissances G. L'un des outils effectives est le «modèle», qui est utilisé dans de nombreux systèmes RDF Q / A existants. Un système typique est EVI (<http://www.evi.com/>, officiellement True Knowledge), qui a enregistré plus d'un million d'utilisateurs dans les quatre mois suivant son lancement en janvier 2012. EVI a été acquis par Amazon en octobre 2012 et fait maintenant partie du groupe d'entreprises Amazon. EVI vise à répondre directement aux questions posées en texte simple en anglais sur la base de connaissances. Il utilise une approche basée sur un modèle pour répondre aux questions en langage naturel, où un modèle décrit comment transformer une classe de questions en langage naturel en requêtes structurelles correctes. Cependant, EVI doit définir manuellement les modèles de traduction. Il est clair que la qualité des modèles détermine la qualité de la réponse. Le défi est de savoir comment générer automatiquement un grand nombre de modèles de haute qualité. Peu d'ouvrages antérieurs étudient cette question, mais tous doivent définir manuellement les modèles .De toute

évidence, il est coûteux de définir manuellement ces modèles, en particulier pour les systèmes Q / A en domaine ouvert sur des graphiques de connaissances RDF à grande échelle. Dans ce document, nous étudions comment générer automatiquement des modèles. [1]

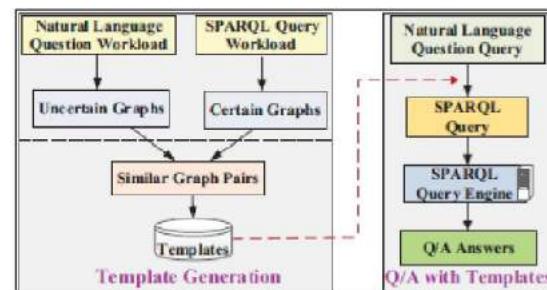


Figure 1 : Cadre pour Q / A RDF basé sur un modèle. [1]

**La figure 1** présente le cadre de RDF Q / A à l'aide de modèles. Il se compose de deux tâches: comment générer des modèles et comment utiliser ces modèles dans RDF Q / A. Pour résoudre le premier problème (objet de cet article), nous proposons une approche basée sur la charge de travail des requêtes pour la génération automatique de modèles. Plus précisément, les entrées pour la tâche de génération de modèle sont deux charges de travail de requête, L'un est un ensemble D de requêtes SPARQL sur le référentiel RDF (tel que DBpedia workload1). L'autre est un ensemble N de questions en langage naturel, qui peuvent être collectées à partir de certains sites de questions-réponses (Q&A) axés sur la communauté (tels que Yahoo Answers) ou de la charge de travail des requêtes des moteurs de recherche (telles que WebQuestions2). **L'ensemble du processus se déroule en trois étapes comme suit.**

**Étape 1.** Génération de graphique incertaine. Selon la méthode de, les questions en langage naturel peuvent être interprétées dans des graphes de requêtes sémantiques. En raison de l'ambiguïté de l'interprétation, nous modélisons le graphe de requête sémantique comme un graphe incertain, c'est-à-dire que chaque sommet / arête a plusieurs étiquettes possibles avec différentes probabilités. Ici, les étiquettes sont incertaines en raison de l'ambiguïté sémantique. Par exemple, considérons la question «quel acteur américain est marié à

Michael Jordan né dans une ville de New York» dans la figure 2.

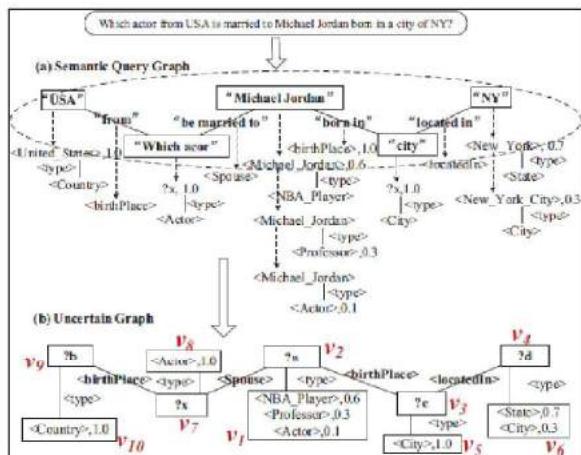


Figure 2 : Génération de graphique incertaine. [1]

Il y a trois personnes nommées «Michael Jordan» dans le graphique DBpedia RDF, c'est-à-dire une star de la NBA, un professeur et un acteur, chacun étant associé à une probabilité. «NY» a également deux correspondances possibles, à savoir l'état et la ville. Par conséquent, nous pouvons obtenir un graphe incertain contenant des nœuds avec plusieurs étiquettes, chacune associée à une probabilité.

**Étape 2.** Recherche de paires de graphiques similaires. Le but est de trouver certaines paires  $q, g$ , pour  $q \in D \wedge g \in U$ , où  $D$  correspond aux requêtes SPARQL et  $U$  sont les graphiques incertains dérivés des questions en langage naturel<sup>3</sup>. Ici, nous utilisons la distance d'édition du graphique, qui est largement utilisé pour mesurer la similitude des graphes, pour calculer la similitude entre  $q$  et  $g$ .

**Étape 3.** Génération de modèles avec des paires de graphiques similaires. Étant donné une paire retournée  $q, g$ , basée sur le mappage entre  $q$  et  $g$  (le mappage est trouvé lors du calcul de la distance d'édition du graphe à l'étape 2), nous pouvons construire les modèles. Afin de générer des modèles, le problème clé est de savoir comment trouver les paires de graphiques similaires efficacement (c'est-à-dire l'étape 2). C'est l'objet de cet article. Nous proposons une nouvelle approche, à savoir, Similarity Join sur des graphiques incertains, notée SimJ. Plus précisément, nous proposons une série de bornes effectives pour améliorer les

performances. Compte tenu des modèles générés, une question en langage naturel est traduite en une requête SPARQL à l'aide des modèles générés lors de la première tâche. Ensuite, la requête SPARQL est recherchée sur les graphiques de connaissances. Les systèmes existants, tels que **Jena**, **RDF-3x**, **Virtuoso4** et **gstore**, peuvent être utilisés pour terminer la recherche. L'ensemble des traitements se déroule en deux étapes comme suit.

**Traitements hors ligne:** Pour activer le traitement en ligne d'extraction de relations sémantiques, un dictionnaire des relations RDF et de leurs paraphrases en langage naturel est automatiquement construit à l'avance. Par exemple, le directeur de relation peut être exprimé comme «dirigé par» ou «un film par». Nous suivons une approche d'analyse de dépendance simple basée sur trois points comme décrit dans [3]. Pour chaque triplet sujet-prédicat-objet ( $s, p, o$ ) dans l'ensemble de données, ces phrases dans la codification de la confiance  $s$  et  $o$  sont récupérées. Ensuite, les phrases sont analysées par l'analyseur de dépendance, et les chemins les plus courts entre  $s$  et  $o$  sont sélectionnés comme paraphrases de la relation  $p$ . Un autre défi est l'ambiguïté du langage naturel. Une seule phrase dans la question peut souvent trouver plus d'un mappage dans le graphique RDF. Pour y faire face, nous introduisons les fragments RDF, qui sont des sous-graphes RDF semblables à des étoiles qui découvrent le voisinage de chaque relation, entité ou classe sémantique. Ensuite, nous pouvons à peu près savoir comment un certain élément sémantique est connecté dans le graphique à l'intérieur d'un seuil de longueur de pas. Les fragments RDF ont un bon pouvoir de filtrage et de désambiguisation pour ces mappages inappropriés, tout en ayant des consommations d'espace acceptables dans de nombreuses entités de ce même type, qui partagent les mêmes fragments. Les fragments RDF peuvent être indexés par une liste inversée.

**Traitements en ligne:** Au cours de l'étape en ligne, la question d'entrée  $qNL$  est introduite dans le pipeline en quatre étapes suivant: Premièrement,  $qNL$  est analysé dans un arbre de dépendance  $tNL$ . Deuxièmement, les phrases en  $qNL$  qui mentionnent toute relation sémantique sont reconnues en  $tNL$  avec l'aide du

dictionnaire de paraphrase. Les phrases pour les entités et les classes sont ces arguments syntaxiques en tNL associés aux phrases de relation. Nous unifions également les phrases qui se réfèrent au même élément par une analyse de coréférence. Troisièmement, ces phrases sont mappées aux fragments RDF pour trouver leurs correspondances d'éléments sémantiques dans le graphique RDF G. Les variables sont introduites par le focus de la question, les phrases d'entité sans correspondance et les fragments RDF des classes sémantiques qui sont des variables à contrainte de type. Enfin, les fragments RDF sont joints à l'ordinateur sous-graphique raisonnable du graphique G, en vérifiant leur compatibilité en fonction de l'arbre de dépendance tNL. Les résultats sont classés selon le score de similitude et de cohérence sémantique, conduisant au SPARQL cible.

### 3. Linked data (web de données) :

Le Web des données (linked data, en anglais) est une initiative du W3C (Consortium World Wide Web) visant à favoriser la publication de données structurées sur le Web, non pas sous la forme de silos de données isolés les uns des autres, mais en les reliant entre elles pour constituer un réseau global d'informations.

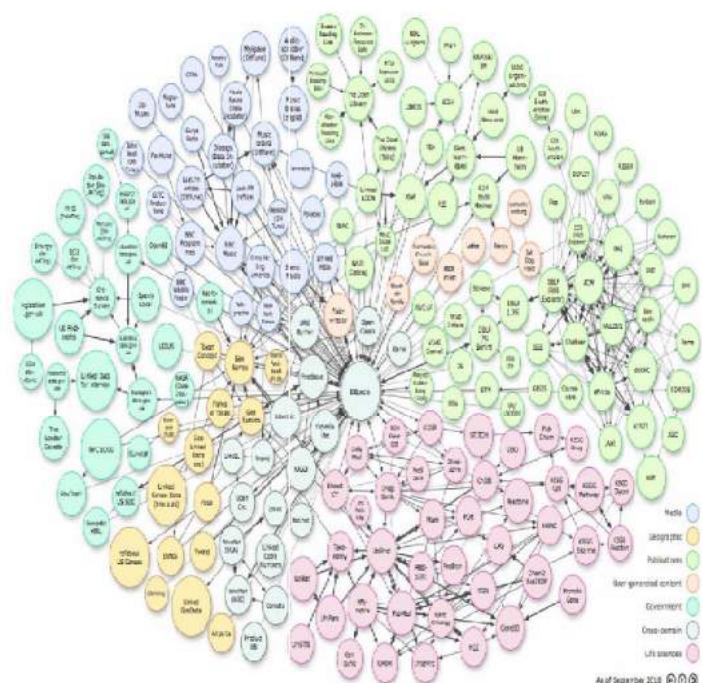
Il s'appuie sur les standards du Web, tels que HTTP et URI - mais plutôt qu'utiliser ces standards uniquement pour faciliter la navigation par les êtres humains, le Web des données les étend pour partager l'information également entre machines. Cela permet d'interroger automatiquement les données, quels que soient leurs lieux de stockage, et sans avoir à les dupliquer.

Tim Berners-Lee, directeur du W3C, a inventé et défini le terme Linked Data ou Données liées et son synonyme Web of data au sein d'un ouvrage portant sur l'avenir du Web sémantique. En France, le terme Web des données est de plus en plus utilisé par la communauté des professionnels du domaine.

Pour les bibliothèques, il est nécessaire de participer au web des données afin de gagner en visibilité et afin de rendre ces données exploitables dans d'autres contextes. Le web des données permet ainsi de décloisonner les données des catalogues, afin qu'elles soient plus accessibles aux usagers et ceux en devenir. Il permet entre autres de relier des données d'archives, de musées ou des biographies à des textes présents dans le catalogue, offrant ainsi au chercheur une information plus complète.

Tim Berners-Lee a défini quatre piliers pour soutenir l'initiative « Web des données » :

1. utiliser des adresses URI uniques pour identifier les choses.
  2. utiliser des adresses URI HTTP qui existent sur le Web (des URL, donc). Une Erreur HTTP 404 indique simplement que l'adresse URI utilisée n'est pas documentée explicitement.
  3. fournir à travers l'adresse URI des renseignements exploitables, lisibles par les humains et par les machines, en s'appuyant sur des formats ouverts comme RDF ou SparQL. Par exemple en utilisant le mécanisme de redirection HTTP (code 302) et la variable User-Agent contenue dans les en-têtes des requêtes HTTP, un serveur peut afficher une page en XML ou RDF pour une machine ou une page HTML pour le navigateur d'une personne.
  4. ailler l'adresse URI initiale en lui associant des adresses URI externes et ce pour améliorer la découverte d'autres informations sur le Web.



**Figure 3 : Représentation de DBpedia en 2010.**

#### 4. Algorithme de passage de la langue naturelle à une requête SPARQL :

**Algorithm 1.** Integrating Adj2ER into existing QA systems

Input: A natural language question  $Q$

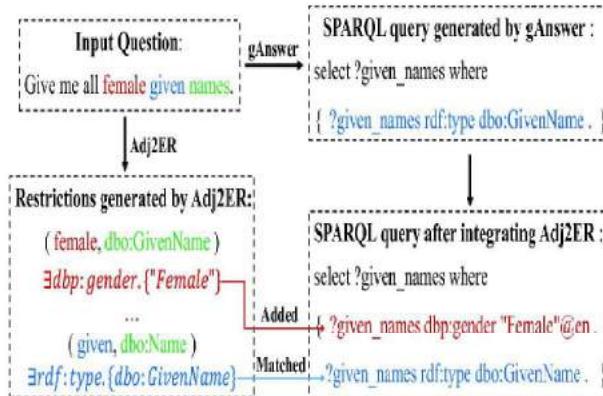
Output: A SPARQL query for the input question  $Q$

```

1: procedure GENERATESPARQL( $Q$ )
2:    $S := \text{ExistingQASystem.GENERATESPARQL}(Q)$ ;
3:   for all  $(adj, C)$  pair in  $Q$  do
4:     Restrictions := Adj2ER( $adj, C$ );
5:     if  $S$  contains a  $restriction \in \text{Restrictions}$  then continue;
6:      $S' := S$ ;
7:     Remove all restrictions in  $S'$  which have semantic similarity  $\geq 0.6$  with  $adj$ 
8:     for all  $restriction \in \text{Restrictions}$  do
9:        $S^* := \text{Resulting SPARQL for adding } restriction \text{ to } S'$ ;
10:      if  $S^*$  is a non-empty query then  $S := S^*$ ; break;
11:   return  $S$ ;

```

Stratégie d'intégration. Nous avons intégré notre approche de cartographie adjective dans deux systèmes d'assurance qualité de pointe, à savoir gAnswer et WDAqua. Qui se sont classés respectivement premier et deuxième du défi QALD-9. La procédure pour intégrer Adj2ER en eux est présentée dans l'algorithme 1. Un exemple d'intégration d'Adj2ER dans les systèmes d'assurance qualité existants. [4]



	70 QALD questions			50 YA questions			Overall F1
	P	R	F1	P	R	F1	
gAnswer	30.49%	55.30%	29.75%	16.56%	36.26%	13.97%	23.18%
gAnswer + Adj2ER	<b>44.03%</b>	<b>62.25%</b>	<b>43.02%</b>	37.32%	<b>56.59%</b>	38.50%	<b>41.18%</b>
WDAqua	21.10%	26.64%	17.79%	23.53%	28.10%	22.04%	19.56%
WDAqua + Adj2ER	33.28%	43.86%	32.05%	<b>42.70%</b>	44.88%	<b>40.99%</b>	35.77%

#### 5. Conclusion :

Dans cet article, nous proposons un cadre basé sur des données graphiques pour répondre aux questions en langage naturel sur les graphiques RDF. Différent à partir des travaux existants, nous permettons l'ambiguïté phrases et structure dans la phase de compréhension des questions. Nous poussons la désambiguïsation dans l'évaluation des requêtes étape. Sur la base des résultats des requêtes sur les graphiques RDF, nous peut résoudre efficacement le problème d'ambiguïté. En d'autres termes, nous combinons la désambiguïsation et l'évaluation des requêtes dans un processus uniforme. Par conséquent, le graphique axé sur les données le cadre améliore non seulement la précision mais aussi les vitesses toutes les performances du système RDF Q / A.

#### References :

- [1] Weiguo Zheng, Lei Zou, Xiang Lian and al, How to Build Templates for RDF Question/Answering—An Uncertain Graph Similarity Join Approach
- [2] Camille Pradel, Ollivier Haemmerlé, Nathalie Hernandez, Passage de la langue naturelle à une requête SPARQL dans le système SWIP
- [3] N. Nakashole, G. Weikum, and F. M. Suchanek. Patty: A taxonomy of relational patterns with semantic types. In EMNLP-CoNLL, pages 1135–1145, 2012.
- [4] J Ding et al : The Semantic Web – ISWC 2019: 18th International Semantic Web ..., Partie 1, Page 176, 2019.



## Recommendation approach of educational resources in a frequent subnet

Gasmi Sara<sup>a</sup>, Bouhadada Tahar<sup>a</sup>, Benmachiche Abdelmadjid<sup>b</sup>.

<sup>a</sup> Département d'informatique, Université Badji Mokhtar - Annaba, Algérie.

<sup>b</sup> Université Chadli Bendjedid -El Tarf

<b>Informations</b>	<b>Résumé</b>
<b>Mots clés :</b>	Recommendation systems or recommender systems (RS) are subset of information used to anticipate the "assessment" or "preference" that a user would transmit to an item. The main idea of recommender system is to build relationship between the articles, users and make the decision to select the most appropriate articles to a specific user. There are three main ways that recommender systems produce a list of recommendations for a user content based, Collaborative, and hybrid filtering. Data mining is one of the important analysis techniques used in RS to predict user interest in information, products and services among the vast amount of available items. The data mining techniques that are most commonly used in RS : classification, clustering and association rule discovery. The objective of our work is to propose a model to customize educational resources based on connections between users in frequent networks. This model makes it possible to calculate the similarity between a user and his friends of the same frequent subnet.
<b>*Correspondance :</b> <a href="mailto:Gasmisara23@gmail.com">Gasmisara23@gmail.com</a>	
Reçu le, Révisé le, Accepté le	

### 1. Introduction

The multitude of resources, relationships and interactions present in social media can lead users to suffer from information overload. The development of the Social Web has created a need for new techniques to help users find what they are looking for. These techniques are called Recommendation Systems (RS). The recommendation system recommends and suggests elements to the user taking into account their purpose, their behavior and their preferences [1]. There are three main ways that recommender systems produce a list of recommendations for a user content based, Collaborative, and hybrid filtering [2]. In content-based filtering, the model uses the specifications of an item to recommend additional items with similar properties [3]. Collaborative filtering operates by collecting user comments as reviews of items of a given domain and exploiting the evaluation behavior similarities between users to determine how to recommend an item. CF uses the opinions of users similar to the active user [4]. Majority of current research involves employing a hybrid approach, which combines methods from both types of recommender systems.

There are many websites that use the RS to recommend data or items to customers like Netflix, Rotten Tomatoes, MovieLens, IMDB, Amazon, eBay, Google News and social networking sites like Facebook, Twitter, Google+, LinkedIn, Instagram, etc. to recommend friends or followers.

Data mining is one of the important analysis techniques used in RS to predict user interest in information, products and services among the vast amount of available items. The data mining techniques that are most commonly used in RS : classification, clustering and association rule discovery [5]. Data mining is defined as the process of discovering patterns in data.

The process must be automatic or (more usually), semiautomatic. Data mining is the analysis of data and the use of software techniques for finding patterns and regularities in sets of data. Data mining provides a number of algorithms to obtain profiles of users based on historical data, which are used to predict the preferences of new users that are : Decision tree, Kmeans, SVM, Bayesian Networks.

The objective of our work is to propose an approach to customize educational resources based on connections between users in frequent

networks. We rely on two principles in our work , the first principle states that similar individuals tend to refer to or connect to the same resources. This principle is used in conventional recommendation systems. These are primarily based on user ratings similar to a given user in order to predict their preferences. The second principle indicates that users who are socially connected are likely to share the same interests. So users of a system can be easily influenced by their friends and thus be interested in their activities.

This paper is organized as : section 2 presents recommender systems techniques widely used today Contentbased recommendations, Collaborative recommendations, and Hybrid Approaches,we also discuss advantages and disadvantage of recommender systems .Section 3 presents data mining methods used in recommender, Section 4 presents our model of recommendation system and finally, Section 5 concludes our discussion.

## 2. Recommender systems techniques

The recommendation system (RS) obtains information about the user using different methods and sources to predict the user's needs and recommend items based on the results of that analysis process [5].

According to Venkatesan et al [6] «Recommender system can be considered as a decision supportive framework that facilitates strategies and conventions to the service users for obtaining optimal recommendations towards availing the resources or services on the basis of the personalization or preferences of the user of concerned »

Fig.1 illustrates the general concept of the recommendation system while matching the user profile with that of other users, and recommends the difference between these items [7].

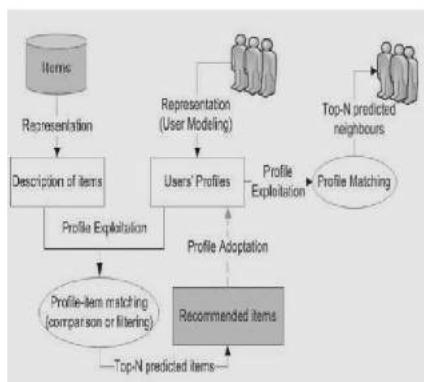


Fig.1. General Concept of Recommender Systems [7].

The RS are generally classified into three filtering methods to provide personalized recommendations to users; the most popular ones are collaborative filtering (CF), content-based filtering and hybrid filtering.

### 2.1 Collaborative filtering

Collaborative filtering operates by collecting and analysing a large amount of information about user behaviors, activities, or preferences, and exploiting the evaluation similarities between users to determine how to recommend an item [8].

### 2.2 Content based filtering

Content-based filtering (CBF) uses only the preferences of the active user. It tries to recommend items by correlating content with the user profile. The user's profile is compared to the characteristics of the content of the article for which the user has already made the evaluation [9].

### 2.3 Hybrid filtering

Recent research has demonstrated that a hybrid approach, which combines methods from both types of recommender systems could be more effective in some cases. These methods can also be used to avoid cold start and sparsity problems [5].

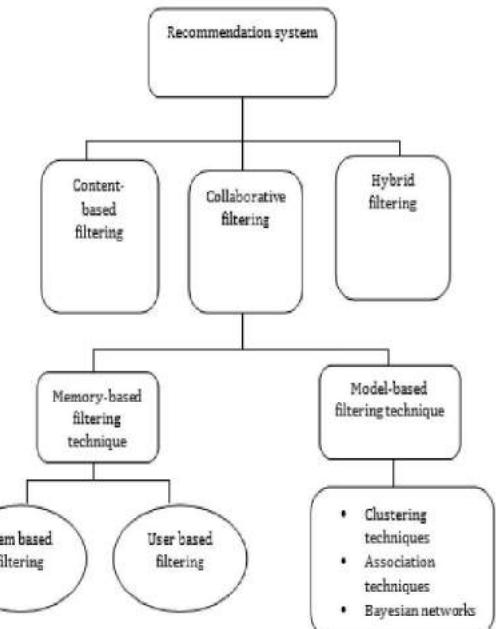


Fig.4. Recommendation technique

In this section we will discuss advantages and disadvantage of recommender systems techniques shown in table 1

TABLE 1. List advantages and disadvantages of recommender systems

Techniques	Advantages	Disadvantages
Content-Based Filtering	Frustrate any cold start and sparsity problem.	Unable to notice users interest.
Collaborative Filtering	The quality of articles can be easily evaluated. Recommend items to users outside their preferences.	Problem how to recommend items (Cold start problem)
Hybrid Approaches	Overcomes the difficulties of content based filtering and collaborative filtering.	Suffer from the cold start and sparsity problem.

### 3. Data mining methods used with a recommender system

The vast growth of information on the Internet and the number of visitors on websites add major challenges for recommendation systems. Recommendation systems uses Knowledge Discovery in Database techniques and prediction algorithms to predict user interest in information , products and services among the vast amount of available items. Data mining is also known as Knowledge Discovery in Database refers to finding or "mining" knowledge from large amounts of data. Data mining techniques are used to operate on large volumes of data to discover hidden patterns and relationships helpful in decision making.[10].

This study presents various methods used in data mining and recommender systems [8] :

- Outlier detection: the extreme values that detach from the rest of the data are called outliers.
- Cluster analysis: Clusters is a collection of similar data objectsThe goal of this analysis is to segment unstructured data. To this end, algorithms are used to search for similarities in the structures of large data sets, in order to identify new clusters.
- Classification : While cluster analysis focuses on identifying new groups, classification involves the use of predefined classes. They are assigned using the corresponding characteristics of the dataset.
- Association analysis :This technique aims to extract the relationships between attributes and items that can be formulated as inference rules.
- Regression analysis: This technique used to create models to find the

dependency of variables through various independent variables.

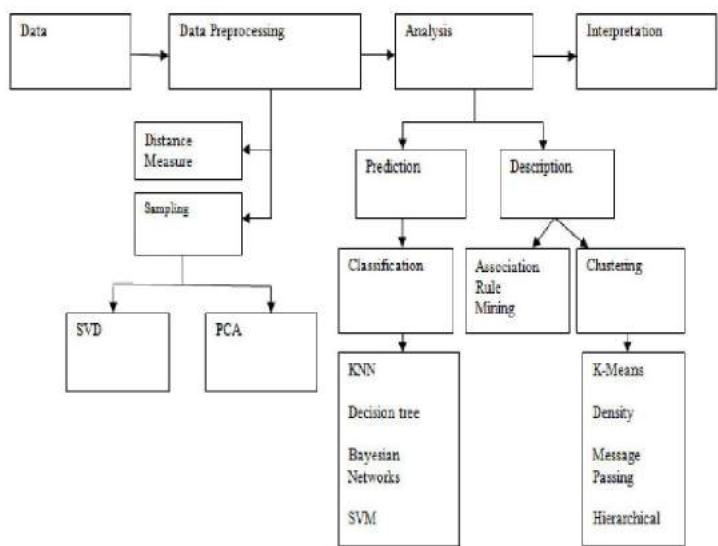


Fig.5.Data mining methods with recommender systems.

### 4. The proposed approach

In the proposed model, the algorithm AGM(Apriori-based Graph Mining) [9] [10] aims to discover all the frequent subnets, in other words the patterns reporting support greater than a threshold minimum support. Indeed, the most widespread definition of a "pattern" in the context of networks is that of the "subgraph" [11]. The process of extracting frequent patterns takes place in two stages.

- A step of generating the candidate subgraphs, which is based on the frequent subgraphs of size n to generate the candidates of size n + 1.
- An evaluation phase which evaluates the frequency of each candidate using the isomorphism property in the graphs. This system builds a set of graph where the nodes represent the learners and the edges represent the relations of friendship between the users.

The system generates lists of recommended resources for a given user based on user characteristics, resources and the links between them. These lists are customized for each user in the subnet.

Each user is described with a set of information that characterizes them such as his interests, his habits, his actions, his preferences expressed in the form of evaluations as well as his relations with other users. The recommendation process follows the following steps:

- 1) Choose a frequent subnetwork.

- 2) Select users related to the active user in the frequent subnet by a friendship link.
- 3) Calculate the degree of similarity between the active user and his friends.
- 4) Present to the learner a list of educational resources that have been liked by similar learners.
- 5) ) Repeat these points for each subnet.

End if ] end function..

## 4.2 Similarity

Collaborative filtering uses several measures in order to evaluate the similarities of assessments between users. Among these measures we can mention: the correlation coefficient of Pearson .

In the recommendation systems this coefficient is used to measure the dependence between two vectors of resource evaluations belonging to two users.

The Pearson correlation coefficient represents the correlation between two users  $ua$  and  $ub$ .  $Ia$  and  $Ib$  represent all the resources noted by  $ua$  and  $ub$ .  $v(ua)$  denotes the average of notes of  $ua$  and  $v(ua; i)$  indicates the note of  $ua$  on item  $i$ .  $Ic$  denotes the co-noted items (noted in common) between the active user  $ua$  and the user  $ub$  [12].

user  $ua$  and the user  $ub$  [12].

$\text{corrP}(ua, ub)$

$$= \frac{\sum_{i \in Ic} (v(ua, i) - v(ua)) (v(ub, i) - v(ub))}{\sqrt{\sum_{i \in Ic} (v(ua, i) - v(ua))^2} \sqrt{\sum_{i \in Ic} (v(ub, i) - v(ub))^2}}$$

According to Anand and Mobasher [13] when the correlation is 1, it means that the users  $ua$  and  $ub$  are strongly correlated. Now, if the correlation is -1, it means that  $ua$  and  $ub$  have totally opposite evaluations. When this correlation is 0, no relationship exists between the two users [12].

## 5. Conclusion

Recommender system apply various techniques to predict user interest on information. Recommender systems have different types of filtering such as (Collaborative, content-based, and hybrid) to make an effective recommendation engine. This paper presented our approach of recommendation system , this system generates lists of recommended resources for a given user in frequent subnetwork , We also introduce various data mining techniques used in recommender system, Data mining is one of the important analysis techniques used in RS to predict user interest in information, products and services among the vast amount of available items. We also discuss advantages and disadvantages of recommender systems.

## Référence

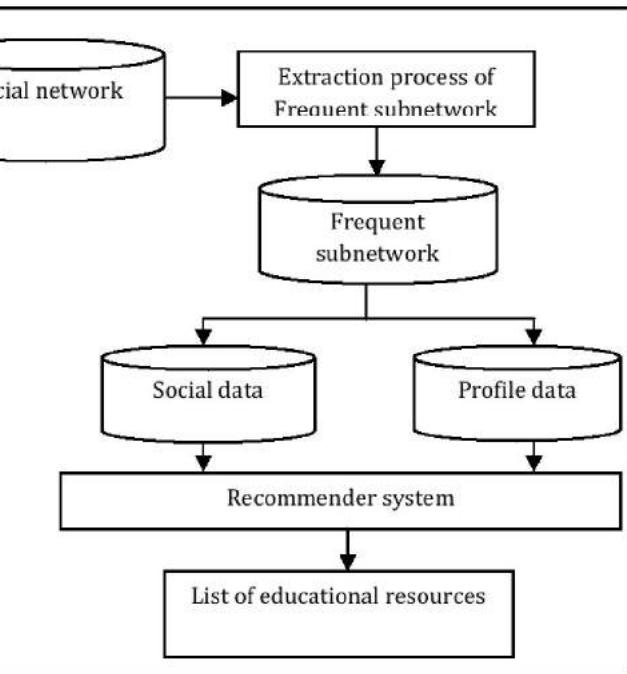


Fig.6. The proposed approach of recommender system

### 4.1 Algorithm Apriori

```

Function apriori(  $S^k$ , D, min_sup )
D – Graph Database
 $S^k$  – frequent subgraphs of size ' $k$ '
min_sup – minimum support value
 $L_{k+1}$  - t lois graphs whose size is ' $k+1$ ' [
     $S^{k+1} \leftarrow$  NULL;
    For all  $g_i < S^k$ 
        for all  $g_j < S^k$ 
            [
                 $L_{k+1} \leftarrow$  form as many as graphs
                possible by combining  $g_i$  and  $g_j$  : the size of
                the
                    resultant graph is
                    ' $k+1$ ' ]
            ]
        For all
         $g_u < L_{k+1}$ 
        [ If [ (  $g_u$  is frequent in D) AND
        ( $g_u \notin S^{k+1}$ ) ] Then
             $S^{k+1} \leftarrow S^{k+1} \cup g_u;$ 
        End if ]
        If [  $S^{k+1} \neq$  NULL ]
    Then apriori( $S^{k+1}$ , D, min_sup);
  
```

- [1] Pu, P., Chen, L., Hu, R .(2012). Evaluating recommender systems from the user's perspective : survey of the state of the art. User modeling and User-Adapted Interaction 22, 317-355.

- [2] Lalita, S., Anju, G.( 2013) . A Survey of Recommendation System: Research Challenges. International Journal of Engineering Trends and Technology(IJETT), vol 4(5), pp.1989-1992 .
- [3] Hussien,M., Helmy,M., Hasan,M.( 2019). Recommender Systems Challenges and Solutions Survey. International Conference on Innovative Trends in Computer Engineering(ITCE'2019).
- [4] Ricci, F., Rokach, L., & Shapira, B . (2011). Introduction to recommender systems handbook. In Recommender systems handbook(pp. 1-35)..
- [5] Priyanga , P.,Nadira ,A.. Banu Kamal. (2017). Methods of Mining the Data from Big Data and Social Networks Based on Recommender System. International Journal of Advanced Networking & Applications (IJANA), vol 8(5), pp.55-60.
- [6] Venkatesana , T., Ramkumarb , T., and Saravananc, K. ( 2017). Mining Big Data: Towards a Machine Learning Framework Based on Collaborative Filtering.
- [7] Shah ,K., Zafar ,A., and Irfan U . (2016) .Recommender Systems : Issues, Challenges, and Research Opportunities. Information Science and Applications (ICISA), pp. 1179-1189..
- [8] Priyanga , P., Nadira ,P., Banu Kl .( 2017) . Methods of Mining the Data from Big Data and Social Networks Based on Recommender System. International Journal of Advanced Networking & Applications (IJANA), vol 8(5), pp.55-60 .
- [9] Aarti ,S . (2014).Application of Data Mining – A Survey Paper, International Journal of Computer Science and Information technologies , Vol. 5 (2).
- [10] Agrawal,R.,Srikant,R. (1994). Fast Algorithms for Mining Association Rules in Large Databases. In Proceedings of the 20th International Conference on Very Large Data Bases, pages 487–499.
- [11] ] Inokuchi,A., Washio,T., Motoda,H.(2000). An Apriori-Based Algorithm for Mining Frequent Substructures from Graph Data. In 4th European Conference on Principles of Data Mining .
- [12] Cheng,H., Yan,X., Han,J. (2010). ) Mining Graph Patterns. Managing and Mining Graph Data, pages 365-392. . (Cité en pages 26 et 110).
- [13] Esslimani, I. (2010). Vers une approche comportementale de recommandation : apport de l'analyse des usages dans le processus de personnalisation. Thèse de doctorat en informatique. Université de Nancy 2, France.