

**UNIVERSITE KASDI MERBAH – OUARGLA -
FACULTE DES SCIENCES Appliquée
Département de Génie des Procédés**



Mémoire

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et techniques

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie de raffinage

Présenté par :

Mr. KENANI L'aziz

Mr. KARKOURI Aissa

Thème

**APPROCHES EXPERIMENTALES ET CORRELATIONS
SUR QUELQUES PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUE
D'UNE FRACTION PETROLIERE (ESSENCE)**

Le: /06/2018

Devant le jury composé de:

.....présidente

.....Examineur

..... Examineur

Mr: HADJ SEYD AbdelkaderEncadreur

Année Universitaire 2017/2018

**UNIVERSITE KASDI MERBAH – OUARGLA -
FACULTE DES SCIENCES Appliquée
Département de Génie des Procédés**



Mémoire

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et techniques

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie de raffinage

Présenté par :

Mr. KENANI L'aziz

Mr. KARKOURI Aissa

Thème

**APPROCHES EXPERIMENTALES ET CORRELATIONS
SUR QUELQUES PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUE
D'UNE FRACTION PETROLIERE (ESSENCE)**

Le: /06/2018

Devant le jury composé de:

.....présidente

.....Examineur

..... Examineur

Mr: HADJ SEYD AbdelkaderEncadreur

Année Universitaire 2017/2018



c'est avec un réel plaisir et un grand enthousiasme que nous nous livrons à la rédaction de cette page. Bien plus que le point final de manuscrit scientifique, cet exercice de style constitue, en effet, l'opportunité de nous accorder une réflexion sur une période relatant quelques mois de vie très riches en événements .

Tout d'abord, nous tenons à remercier Dieu notre créateur qui nous a donné la force pour réussir dans notre travail.

Ainsi, nous tenons à remercier chaleureusement et spécialement :

M^r : Hadj essaid Abdelkader notre promoteur pour avoir accepté de prendre en charge l'encadrement de notre recherche.

Nous exprimons bien entendu nos remerciements les plus sincères aux membres de jury ainsi que le président de jury pour avoir accepté d'examiner notre travail.

Nous remercions tout l'ensemble du corps enseignant de la Faculté des sciences appliquées, qui ont contribué à notre formation , en particulier les enseignants du Département Genie des procédés .

En fin nous remercions tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Aziz/Aissa



DEDICACES

Je dédie ce travail à :

*A celle qui a inséré le goût de la vie et le sens de la
Responsabilité....merci MERE.*

*A celui qui a été toujours la source d'inscription
et de couragemerci PERE.*

A mes frères et sœurs et tout mes amis que j'ai connu dans ma vie .

A tous ceux qui sèment le bonheur dans mon chemin.

KARKOURI AISSA





DEDICACES

Je dédie ce travail à :

*A celle qui a inséré le goût de la vie et le sens de la
Responsabilité....merci MERE.*

*A celui qui a été toujours la source d'inscription
et de couragemerci PERE.*

*A mes frères et sœurs et tout mes amis et surtout AISSA KARKOURI
que j'ai connu dans ma vie .*

A tous ceux qui sèment le bonheur dans mon chemin.

KENNANI L'AZIZ



Résumé

الفيزيوكيميائية بالبنية	(QSPR)	رياضية	تطوير	يهدف هذا
البنزين	نسبتها 25	الهيدروكربونات	كيميائية	الهيكالية
% 30	ينتمون	113	.	
% 60 :	20 % حلقية.	20 % أروماتية	خطية	الهيدروكربونات الأليفاتية
ارتباطية تجريبية	الطوبولوجية	الإنصهار	الغليان	بتكهن قيم
الأليفاتية	كبيرة	الغليان	الإحصائية	بينت
جميع	بعين	% 97	% 99	الغير حلقية، بحيث
				(113)
	جميعها (113) فيما يخص	الألفاتية	67	تنتهقر
			% 62	الانصهار
	الإنصهار، QSPR	الغليان،	ارتباطية،	هيدروكربونات :

Résumé :

Notre étude, consiste à développer des modèles mathématiques basée sur des équations QSPR liants les propriétés physicochimiques à la structure moléculaire pour des molécules appartenant à la famille des hydrocarbures de la coupe des essences du pétrole brut qui représente de 25 à 30% de cette coupe. 113 composés ont été répertoriés, de différents types : dont 60% de type aliphatique linéaires et ramifiés, 20% aromatiques et 20% de nature cycliques, Des corrélations empiriques exprimant la température d'ébullition et la température de fusion ont été élaborées en fonction des descripteurs topologiques.

l'analyse statistiques montre une très bonne validité du modèle de prédiction de Teb pour les hydrocarbures aliphatiques non cycliques, le coefficient de régression est ($R^2=99\%$), le modèle est encore valide mais d'une manière moins faible lorsqu'il s'agit des 113 composés constituant la base de données de la coupe d'essence ($R^2=97\%$) .

Les statistiques montrent une inadéquation des modèles prédits en ce qui concerne la température de fusion que ce soit pour tous les hydrocarbures de la coupe d'essence ou ceux de la famille des hydrocarbures aliphatiques, leurs R^2 sont 67 et 62% respectivement .

Mots clé : Modèle, QSPR, Hydrocarbures, corrélation, température d'ébullition, température de fusion.

Sommaire

Sommaire

Remerciements.....	-
Dédicaces	-
Résumé	-
Sommaire.....	-
Listes des figures.....	-
Liste des tableaux.....	-
Liste d'abréviation	-
Introduction générale.....	1
Chapitre I : Généralités sur le pétrole brut et le raffinage	
I .1.Introduction	3
I.2. Pétrole brut.....	3
I.3. Distillation TBP.....	3
I.3.1.Définition	3
I.3.2.Fractions pétrolières	3
I.4.Produits énergétiques	4
I.5. Produits non énergétiques	4
I.6.Fraction essence.....	4
I.7.Quelques propriétés physicochimiques de l'essence	5
I.7.1.Température d'ébullition.....	5
I.7.2.Température de fusion.....	5
I.7.3.Densité	5
I.7.4.Viscosité	5
I.8. Raffinage	5
I.8.1.Définition	5
I.8.2-les étapes de raffinage.....	5
a) Séparation.....	5
b) Transformation (conversion)	6
c) Epuration (amélioration)	6
d) mélange.....	6
I.9.Généralités sur les corrélions	6

10Sommaire

I.9.1.Définition	6
I.9.2.l'importance de corrélation.....	6
I.9.3. facteur de corrélation (R^2).....	6
I.10.Techniques de régression	7
I.10.1.Différents types de régression	7
a-La régression Linéaire Simple (RLS)	7
b-Régression linéaire multiple (MLR).....	7
I.10.2. formes graphiques de régression	9
a- droite de Henry.....	9
b- Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées.....	9
c -Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre.....	10
d- Histogramme des valeurs résiduelles	11
I.11.Quelques exemples de corrélation	12
I.12. Conclusion	13

Chapitre II : Méthodologie

II.1.Introduction.....	14
II.2. Les relations structure-propriétés quantitatifs "QSPR".....	14
II .2.1.Définition de QSPR	14
II.2.2. Principe de QSPR	14
II.2.3. Les méthodes mathématiques utilisés par le model QSP.....	15
II.2.4.Les types d'apprentissages d'un modèle QSPR	16
II.2.5.Techniques d'apprentissages utilisés on.....	16
II.3.Descripteurs moléculaires.....	17
II.3.1.Définition d'un descripteur.....	17
II.3.2.L'importance d'un descripteur.....	17
II.3.3.Choix d'un descripteur.....	17
II.3.4.Choix de nombre de descripteur.....	18
II.3.5. Classement de ces descripteurs moléculaires.....	19
II.3.6.Calcul des descripteurs moléculaires.....	19
II.3.7. Types de descripteurs moléculaires.....	19
II.3.8.Blocs des descripteurs.....	20
II.4..Diagramme montre les étapes de prédiction.....	21

11 Sommaire

II.5.L'objectif de la prédiction.....	22
II.6.Les étapes de travail: (Diagramme de travail).....	23
II.7.Base des données.....	24
II.7.1.Les caractéristiques et les propriétés de cette base de données.....	24
II.7.2.Préparation de base des données.....	24
II.7.2.1.Rappel.....	24
II.7.2.2.Chem office 2008.....	25
II.7.2.3.HYPER CHEM.....	25
II.7.2.4.DRAGON.....	27
II.7.2.5.MINITAB.....	28
II.8.Conclusion.....	29

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1.Introduction.....	30
III.2. Elaboration de la base de données	30
III.3.Résultats de regression.....	31
III.3.1.pour la température d'ébullition.....	31
a.Pour tous les composés 113 composés.....	31
a.1.L'équation de régression.....	31
a.2.Analyse de variance	31
a.3.Représentation graphique.....	31
b.Pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés).....	33
b.1.L'équation de régress.....	33
b.2.Analyse de varia.....	33
b.3.Représentation graphique.....	33
III-3-2 : pour la température de fusion.....	35
a. Pour tous les composés 113 composés.....	35
a.1.L'équation de régression.....	35
a.2.Analyse de variance.....	35
a.3.Représentation graphique.....	35
b. Pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés).....	36
b.1.L'équation de régression.....	36
b.2.Analyse de variance.....	37

12Sommaire

b.3.Représentation graphique.....	37
III.4.Conclusion.....	38
Conclusion générale.....	39
Bibliographie.....	-
Annexe.....	-

Liste des tableaux

14Liste des Tableaux

Liste des tableaux :

Numéro	Titre	pages
I-1-	Corrélations élaborées	12
II-1-	déférents types d'apprentissages	16
II-2-	Présentation de composé de différentes dimensions	20
III -1-	Résultats des régressions de Té _b Pour tous les composés 113 composés	31
III -2-	Résultats des régressions de Té _b Pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés)	33
III-3-	Résultats des régressions de Tf Pour tous les composés 113 composés	35
III -4-	Résultats des régressions de Tf Pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés)	36

Liste des tableaux

16Liste des figures

Liste des figures :

Numéro	Titre	Pages
I-1-	Représentation graphique de la régression multi-linéaire pour deux variables indépendantes x_1 et x_2 et une variable dépendante Y	8
I-2-	Représentation graphique de la droite de Henry	9
I-3-	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées	10
I-4-	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre	11
I-5-	Histogramme des valeurs résiduelles	11
II-1-	principe de la méthode QSPR	15
II-2-	Diagramme des descripteurs utilisés	18
II-3-	Montre La Représentation des blocs des descripteurs moléculaires	21
II-4-	Diagramme de prédiction par QSPR	22
II-5-	montre le cycle d'optimisation du modèle	22
II-6-	Diagramme de notre travail.	23
II-7-	exemple réalisation de la structure de la molécule p-xylène.	25
II-8-	exemple d'un composé (4-méthyle-pentene après son modélisation par hyperchem	26
II-9-	image de logiciel DRAGON	27
II-10-	représente les descripteurs après calcul	27
II-11-	de calcul par MINITAB pour trouver l'équation de régression	29
III-1-	Familles des hydrocarbures étudiés	30
III-2-	Histogramme des valeurs résiduelles de Té _b pour 113 composées	31
III-3-	valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Té _b pour 113 composées	31
III-4-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té _b pour 113 composées	32

17Liste des figures

III-5-	droite de henry des valeurs résiduelles de $T_{éb}$ pour 113 composées	32
III-6-	Courbe de tendance de T_{eb} calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 113 composés	32
III-7-	Histogramme des valeurs résiduelles de $T_{éb}$ pour 68 composées (ramifié et linéaire)	33
III-8-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de $T_{éb}$ pour 68 composées (ramifié et linéaire)	33
III-9-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de $T_{éb}$ pour 68 composées (ramifié et linéaire)	34
III-10-	droite de henry des valeurs résiduelles de $T_{éb}$ 68 composées (ramifié et linéaire)	34
III-11-	Courbe de tendance de T_{eb} calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les composés linéaires et ramifiés	34
III-12-	Histogramme des valeurs résiduelles de T_f pour 113 composées	35
III-13-	valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de T_f pour 113 composées	35
III-14-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de T_f pour 113 composées	36
III-15-	droite de henry des valeurs résiduelles de T_f pour 113 composées	36
III-16-	Histogramme des valeurs résiduelles de T_f pour 68 composées (ramifié et linéaire)	37
III-17-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de T_f pour 68 composées (ramifié et linéaire)	37
III-18-	valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de T_f pour 68 composées (ramifié et linéaire)	37
III-19-	droite de henry des valeurs résiduelles de T_f 68 composées (ramifié et linéaire)	37


Abréviation

19Abréviation

symboles	définition
T _{éb}	Température d'ébullition
T _f	Température de fusion
T _C	Température critique
P _C	Pression critique
ASTM	American Society for Testing Materials
TBP	True Boiling Point
QSPR	Quantitative structure property Relationship
MW	Molecular Weight
AMW	Average Molecular Weight
S _v	Sum of atomic van der waals volumes (scaled on carbon atom)
S _e	Sum of atomic sanderson electronegativities (scaled on carbon atom)
S _p	Sum of atomic polarizabilities(scaled on carbon atom)
S _s	Sum of kier-hall electrotopological states
M _v	mean atomic van der waals volume(scaled on carbon atom)
M _e	mean atomic sanderson electronegativity (scaled on carbon atom)
M _p	mean atomic polarizability (scaled on carbon atom)
M _s	mean electropological state
n _{AT}	number of atoms
n _{SK}	number of non-H atoms
T _{éb}	Température d'ébullition
n _{BT}	Number of bonds
n _{BO}	Number of nom-H bonds
n _{BM}	Number of multiple bonds
SCBO	Sumof conventional bond orders
ARR	Aromatic ratio
n _{CIC}	Number of ring
n _{CIR}	Number of circuits
RBN	Number of rotatable bonds
RBF	Rotatable bond fraction

20Abréviation

nDB	Number of double bonds
nTB	Number of triple bonds
nAB	Number of aromatic bonds
nH	Number of Hydrogen atoms
nC	Number of Carbon atoms
nN	Number of Nitrogen atoms
nO	Number of Oxygen atoms
nP	Number of phosphorous atoms
nS	Number of Sulfur atoms
nF	Number of fluorine atoms
nCL	Number of chlorine atoms
nBR	Number of Bromine atoms
nI	Number of Iodine atoms
nB	Number of Boron atoms
nHM	Number of heavy atoms
nX	Number of halogen atoms
nR03	Number of 3-membred rings
nR04	Number of 4-membred rings
nR05	Number of 5-membred rings
nR06	Number of 6-membred rings
nR07	Number of 7-membred rings
nR08	Number of 8-membred rings
nR09	Number of 9-membred rings
nR10	Number of 10-membred rings
nR11	Number of 11-membred rings
nR12	Number of 12-membred rings
nBnz	Number of benzene –like rings



***Introduction
générale***

Introduction générale

L'une des plus grandes conquêtes de l'humanité, et de tous les temps est le feu qui provient des causes naturelles, exerçait une fascination quasi magique sur les populations primitives. La curiosité a poussé l'homme à chercher les sources naturelles du feu dans le pétrole et le gaz naturel sont concernés [1].

Le mot pétrole est tiré du mot latin « petroleum » qui signifie : « huile de pierre », c'est une huile minérale naturelle combustible de couleur très foncée douée d'une odeur caractéristique plus ou moins prononcée et d'une densité de 0,8 à 0,95. Il est formé d'hydrocarbures constitués d'un nombre différent d'atomes de carbone et d'hydrogène et donc de molécules de taille et de structure différente, ce qui détermine leur état physique, solide, liquide et gazeux. Donc le pétrole est un mélange de ces divers types d'hydrocarbures, et ses qualités varient considérablement selon la prédominance des uns ou des autres produits qui le composent [2] ,

Après le prétraitement du pétrole brut (dessablage, dessalage, élimination partielle de l'eau ... etc. on le met dans une colonne de distillation (distillation TBP) et on aura les fractions telle que : Gaz combustible, Propane, Butane, Essences (légère, lourde), Kérosène, Gasoils (léger, moyen, lourd) et un Résidu.

Pour étudier chaque fraction, nous devons faire appel à la distillation ASTM, comme dans notre cas on se base sur la fraction essence qui est de l'ordre de 25 à 30% de la composition totale du pétrole brut et comme aussi la fraction la plus demandée en pétrochimie.

Notre étude, consiste à développer d'un modèle mathématique basé sur les données expérimentales disponibles et en fonction de quelques propriétés liées à la structure moléculaire des composés étudiés appelées descripteurs moléculaires, permettant ainsi d'estimer et de corréler certaines propriétés physico-chimiques telles que : température d'ébullition, température de fusion et points critiques (température critique, pression critique), densité etc. de ces composés. Nous avons accentué notre étude sur la prédiction des paramètres physico-chimiques les plus représentatifs des fractions pétrolières : température d'ébullition et température de fusion.

2 Introduction Général

Pour déterminer les propriétés du pétrole (essence) par voie expérimentale est souvent difficile est généralement mal connu c'est pour cela on les estime par des corrélations empiriques trop spécifiques, il était donc nécessaire de développer une méthode simple générale, et prévisionnelle.

Notre mémoire est divisé en trois chapitres, le premier chapitre a été consacré sur des généralités sur le pétrole brut tel que ses fractions, ses propriétés physicochimiques et aussi quelque notions sur le raffinage et ses étapes et comme notre étude est basée essentiellement sur les corrélations et régressions, on a parlé aussi sur ces dernières et leur importance dans l'estimation des propriétés physicochimiques des fractions du pétrole brut ainsi que les différentes techniques de régressions et leurs différents types, finalement on a mentionné quelques corrélations qui ont été prises comme modèle pour la prédiction des propriétés physicochimiques dans le domaine de la pétrochimie.

Le deuxième chapitre est consacré sur l'importance de la modélisation, notamment celles utilisant les relations structures – propriété physicochimique (QSPR) et les différents logiciels utilisés pour cette modélisation tel que ChemDraw, HyperChem, Dragon et le Minitab etc.

Donc c'est la partie expérimentale qui contient les différentes méthodes et relations de prédiction des propriétés physiques des hydrocarbures constituant la fraction essence du pétrole, notamment celle des températures d'ébullition et températures de fusion.

Autrement dit, ce chapitre parle de la méthodologie de notre travail ainsi qu'une explication sur les démarches que nous avons suivi pour aboutir à nos corrélations (choix de la coupe utilisée essences) et les différents constituant de cette coupe (PONA), dessin de ces structures en 2D par le logiciel ChemDraw, optimisation de ces structures par le logiciel HyperChem et calcul les descripteurs topologiques des molécules en utilisant le logiciel Dragon et enfin l'élaboration des régressions multi - linéaires à l'aide de logiciel Minitab.

Le dernier chapitre c'est le 3ème chapitre qui est consacré sur le traitement et la discussion des résultats et enfin l'élaboration de nos modèles mathématiques.

Le mémoire est achevé par une conclusion générale suivi de quelques recommandations jugées nécessaires pour améliorer nos résultats.

Chapitre I :
Généralités sur le pétrole
brut et le raffinage

I.1.Introduction

Depuis l'existence de l'humanité, l'être humain n'a cessé de chercher les sources d'énergies jusqu'à ce jour. L'Or Noir reste, la source la plus merveilleuse et la plus énergétique dans tout les temps c'est pour cela les savants s'intéressent sur la composition et les fractions de ce magique produit, Qu'il les stimule à développer des méthodes et des relations pour faciliter leur recherche et parmi ces méthodes on cite les corrélations et modélisations.

I.2. Pétrole brut :

C'est un fluide constitué principalement des hydrocarbures et contient également des composés organique soufrés, oxygénés et azotés ...la matière organique ainsi produite se dépose au fond des mers et des lacs et est incorporé ou sédiment. Ce fluide reste le meilleur au point de vu énergétique ainsi que les produits issus de celui-ci après le raffinage.

I.3. Distillation TBP « True Boiling Point » (point d'ébullition exact)

I.3.1.Définition : cette méthode correspond à une technique de laboratoire utilisant une colonne de distillation équivaut environ de 15 à 18 plateaux théoriques avec un taux de reflux de 5/25, pouvant traiter une charge de 0.5à30litres. Elle s'applique aux pétroles bruts stabilisés mais peut s'étendre à un mélange pétrolier quelconque sauf les gaz de pétroles liquéfiés, les naphtas très légers et les fractions ayant un point initial d'ébullition au-dessus de 400°C, [3]

I.3.2.Fractions pétrolières :

Après la distillation TBP on aura les fractions suivantes :

- Le gaz combustible ou fuel gaz est consommé dans des différents fours de la raffinerie.
- Les coupes propane et butane sont soit commercialisés soit pour les usages domestiques, soit sous formes GPL carburant.

- L'essence légère est utilisée comme base « carburant » et constitue la matière première de la pétrochimie.
- L'essence lourde présente la charge de reformage catalytique.
- Kérosène est destiné à la fabrication des carburateurs.
- Gas-oils sont des carburants pour moteur diesel et de fuel domestique.
- Les distillats peuvent recevoir des utilisations multiples selon le type de la vocation de la raffinerie.
- Le résidu sous vide est affecté après dé-asphaltages, à la fabrication de fuel lourd, des huiles de bases et des bitumes.

I.4.Produits énergétiques

Dans ce domaine nous trouvons deux types de produits : carburants et combustibles.

- Les carburants : sont des composés chimiques, liquides ou gazeux, dont la combustion en présence d'air permet le fonctionnement des moteurs thermiques : à essence, diesel, réacteurs d'avion.
- Les combustibles : le mot combustible est réservé aux produits utilisés pour la production d'énergie thermique dans les, chaudières les fours, les centrales...etc. [4]

I.5. Produits non énergétiques

Les produits pétroliers non énergétiques sont extrêmement divers, tant du point de vue de leur nature et aspect physique que de celui de leur domaine d'application. Leur consommation s'accroît d'année en année.

I.6.Fraction essence :

C'est un liquide inflammable, utilisé comme carburant dans les moteurs à combustion interne. C'est un carburant pour moteur à allumage commandé (moteur essence) c'est un mélange des hydrocarbures, auxquels peuvent être ajoutés des additifs pour carburant. De nombreux types d'essence sont fabriqués et mis sur le marché. On y trouve en moyenne :

- 20% à 30% d'alcane, hydrocarbures saturés
- 5% de cycloalcanes, hydrocarbures saturés cyclique.
- 30 % à 45% d'alcène, hydrocarbures insaturés

- 30 % à 45% des hydrocarbures aromatiques, insaturé de la famille de benzène, etc.

I.7. Quelques propriétés physicochimiques de l'essence

Dans notre travail on a opté pour quelques propriétés physicochimiques dans les valeurs doivent être connues et aussi par mesure de sécurité, car notre produit c'est une fraction issues de pétrole (essence) c'est –a dire c'est un produit qui est conçu être stock et transporté.

I.7.1. Température d'ébullition : On n'appelle point d'ébullition d'un corps les conditions de température et de pression qui doivent être réunies pour qu'il passe rapidement de l'état liquide à l'état gazeux (il bout). Et pour chaque composé correspond à son point de bulle

I.7.2. Température de fusion : La température de fusion d'un corps représente la température a une pression donnée, à laquelle un élément pur ou un composé chimique fond c'est-a dire passe de l'état solide à l'état liquide.

I.7.3. Densité : C'est le rapport du poids d'un certain volume du corps considère à la température « T » de l'essai au poids du même volume du corps de référence à une température standard (habituellement celle de l'eau à 4°C).

I.7.4. Viscosité : c'est la résistance interne qui se pose à l'écoulement d'un fluide et qui est provoqué par les frottements des molécules qui glissent les unes contres les autres.

I.8. Raffinage

I.8.1. Définition : le raffinage c'est un ensemble d'opérations et de traitements (mécaniques ou chimiques) qui permet d'améliorer les caractéristiques d'un produit et de fabriquer, a partir d'un produit brut, produit commercial.

I.8.2-les étapes de raffinage

Il existe quatre étapes de raffinage.

a) Séparation : c'est la première opération de raffinage qui se base sur la température d'ébullition de chaque fraction.

b) Transformation (conversion) : la conversion consiste à transformer les molécules lourdes en molécules plus légères, sous l'effet d'un catalyseur et sous très haute température (500°C)

c) Epuration (amélioration) : c'est l'élimination des impuretés qui sont présent dans les coupes afin de produire un produit conforme aux normes de la consommation et de l'environnement en vigueur.

d) Mélange : c'est mélangé deux ou plusieurs produits afin d'avoir un produit final conforme aux spécifications de consommation par exemple essence normale ou super.

I.9.Généralités sur les corrélions

I.9.1.Définition : c'est une équation mathématique statistique qui interprète un phénomène physique ou chimique et qui peut servir comme un modèle, prêt pour l'application.

I.9.2.importance de corrélation

Les corrélations sont devenues l'une des méthodes les plus importantes et les plus utilisées dans différents domaines tel que le domaine de la pharmacie, le domaine de la biologie et le domaine de la chimie en général, mais évidemment après avoir s'assuré de la fiabilité et la crédibilité de ses résultats et cela par comparaison avec les résultats obtenus par voie expérimentale, donc les corrélations peuvent devenir des équations empiriques là où on estime comme certaines.

Autrement dit corrélation veut dire fiabilité, certaine et rapidité.

I.9.3. facteur de corrélation (R^2)

C'est un coefficient, dont la valeur est comprise entre 0 et 1, n'est affiché que si la constante du modèle n'est pas fixée par l'utilisateur.

Le R^2 s'interprète comme la proportion de la variabilité de la variable dépendante expliquée par le modèle. Plus le R^2 est proche de 1, le modèle est meilleur. L'inconvénient du R^2 est qu'il ne prend pas en compte le nombre de variables utilisées pour ajuster le modèle.

R² ajusté : le coefficient de détermination ajusté du modèle. Le R² ajusté peut être négatif si le R² est voisin de zéro. Ce coefficient n'est affiché que si la constante du modèle n'est pas fixée par l'utilisateur.

I.10. Techniques de régression

Depuis 1964, l'année de l'approche présente, QSPR est née grâce à la contribution de groupe, et dernières années est utilisé les descripteurs moléculaires. La plupart des modèles ont été construits QSPR en utilisant une technique de régression multi-variée. L'analyse de régression établit une corrélation entre une variable dépendante représentant la propriété chimique et plusieurs variables indépendantes, qui sont, les descripteurs (prédicteurs). Cette corrélation est plus souvent exprimée sous la forme d'une régression linéaire ou non linéaire [5]

I.10.1. Différents types de régression

a- régression Linéaire Simple (RLS)

La Régression Linéaire Simple (RLS) est un modèle particulier de régression dans lequel :

- Il n'y a qu'une seule variable explicative (numérique).
- Le modèle est linéaire dans la variable dans les paramètres.

Comme toutes les techniques prédictives, elle a deux objectifs :

- Construire un modèle dont les paramètres soient interprétables par le praticien en termes de propriétés.
- Utiliser le modèle pour faire des prédictions.

b- Régression linéaire multiple (MLR)

La régression multi - linéaire (MLR) est la méthode la plus simple et la plus communément employée pour le développement de modèles prédictifs [6] Elle repose sur l'hypothèse qu'il existe une relation linéaire entre une variable dépendante y (ici, la propriété physico-chimique) et une série de n variables indépendantes x_i (ici, les descripteurs moléculaires). L'objectif est d'obtenir une équation de la forme suivante:

$$y = a_0 + a_1 \cdot x_1 + a_2 \cdot x_2 + \dots + a_n \cdot x_n \quad (\mathbf{I})$$

Où **a_i** sont les coefficients de la régression.

La Figure I.1 donne une représentation graphique de la méthode pour deux variables dépendantes. Il s'agit en fait de définir le plan au plus proche de tous les points de l'espace (au sens des moindres carrés). Pour n variables, il s'agira d'un hyperplan d'ordre n.

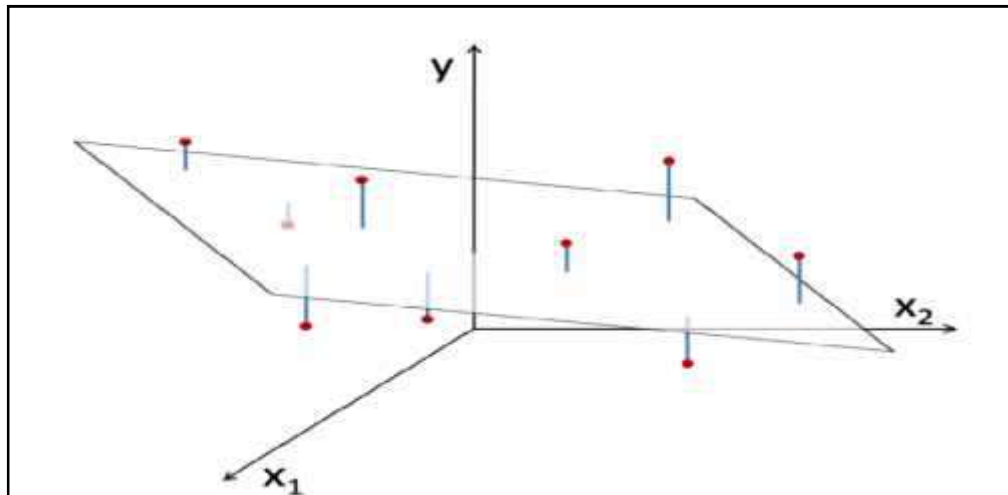


Figure I.1- Représentation graphique de la régression multi - linéaire pour deux variables indépendantes x_1 et x_2 et une variable dépendante y

La détermination de l'équation (II.1) se fait alors à partir d'une base de données d'un échantillon pour laquelle à la fois les variables dépendantes et la variable indépendante sont connues. Il s'agit donc de considérer un système de p équations.

$$y_1 = a_0 + a_1 \cdot x_{1,1} + a_2 x_{2,1} + \dots + a_n x_{n,1} + \epsilon_1$$

$$y_2 = a_0 + a_1 x_{1,2} + a_2 x_{2,2} + \dots + a_n x_{n,2} + \epsilon_2$$

.....

$$y_p = a_0 + a_1 x_{1,p} + a_2 x_{2,p} + \dots + a_n x_{n,p} + \epsilon_p$$

Où les résidus ϵ_i représentent l'erreur du modèle, constituée par l'incertitude sur la variable dépendante y_i d'une part, sur les variables indépendantes x_i d'autre part, mais aussi par les informations contenues dans les variables indépendantes mais non exprimées via les variables dépendantes.

Ce système d'équations peut être écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{n,1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1,p} & \cdots & x_{n,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_p \end{pmatrix}$$

Soit de manière condensée : $\mathbf{Y} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} + \boldsymbol{\varepsilon}$

I.10.2. formes graphiques de régression

a- droite de Henry

C'est une méthode graphique pour ajuster une distribution gaussienne à celle d'une série d'observation (d'une variable numérique continue) .en cas d'ajustement, elle permet de lire rapidement la moyenne et l'écart type d'une telle distribution. [6]

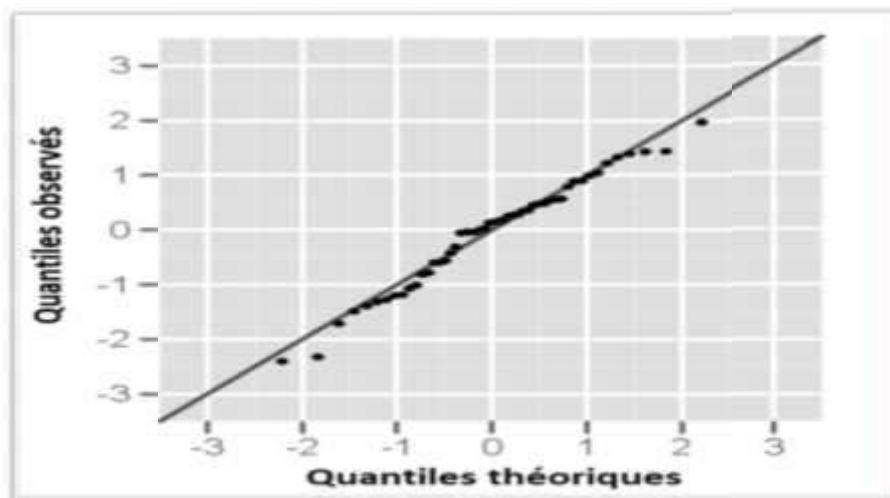


Figure I-2- Représentation graphique de la droite de Henry

Cette droite porte le nom de polytechnicien J.P.P Henry (1848-1907) qui l'a mise en application dans les années 1880.

b- Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées

Le diagramme des valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées affiche les valeurs résiduelles sur l'axe des y et les valeurs ajustées sur l'axe des x. On utilise le diagramme des valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées pour vérifier l'hypothèse selon laquelle les

valeurs résiduelles suivent une loi normale et ont une variance constante. Dans l'idéal, les points doivent être répartis aléatoirement des deux côtés de 0, sans schéma reconnaissable

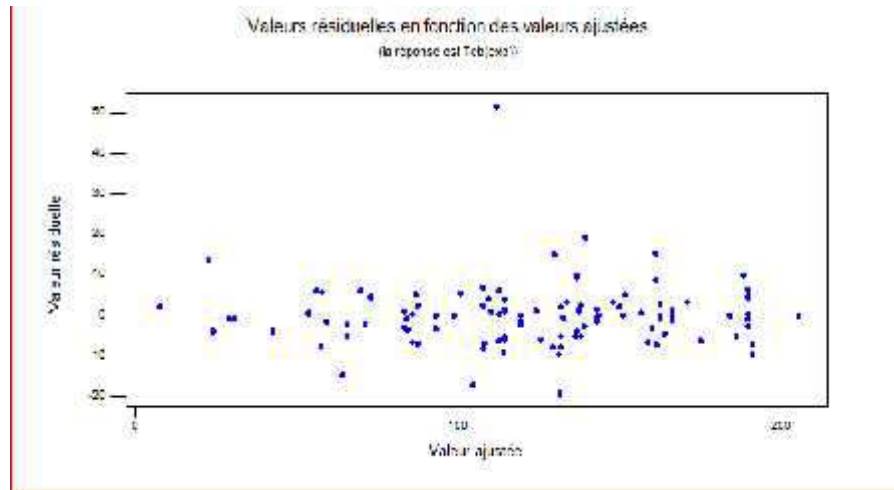


Figure I-3- Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées

c - Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre

Le diagramme des valeurs résiduelles en fonction de l'ordre affiche les valeurs résiduelles dans l'ordre dans lequel les données ont été collectées. Utilisez le diagramme des valeurs résiduelles en fonction de l'ordre pour vérifier l'hypothèse selon laquelle les valeurs résiduelles sont indépendantes les unes par rapport aux autres. Les valeurs résiduelles indépendantes ne présentent aucune tendance ou schéma lorsqu'elles sont affichées dans un ordre chronologique. La présence de schémas dans les points peut indiquer que les valeurs résiduelles qui sont proches les unes des autres peuvent être corrélées, et ne sont donc pas indépendantes. Idéalement, les valeurs résiduelles du graphique doivent être réparties de façon aléatoire autour de la ligne centrale.

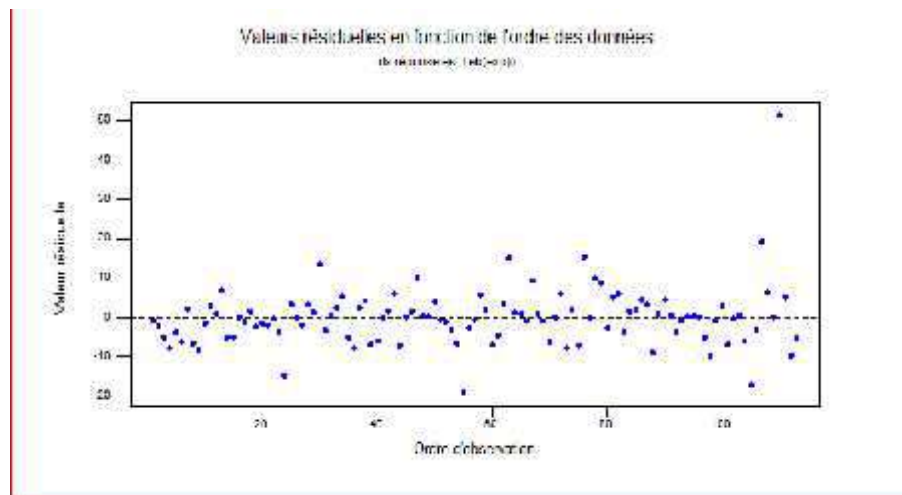


Figure I-4- Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre

d- Histogramme des valeurs résiduelles

Le diagramme des valeurs résiduelles en fonction des variables affiche les valeurs résiduelles en fonction d'une autre variable. La variable peut déjà être présente dans votre modèle. Il se peut aussi que la variable ne soit pas dans le modèle, mais que vous la soupçonniez d'avoir un effet sur la réponse.

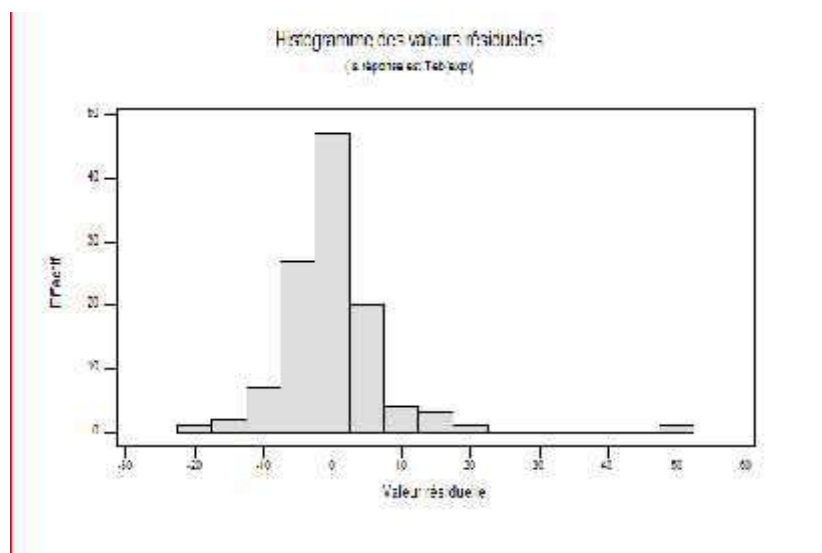


Figure I-5- Histogramme des valeurs résiduelles

I.11. Quelques exemples de corrélation

On trouve pas mal de corrélations qui sont aujourd’hui l’une des modèles qui sont appliquées dans différents domaines, le tableau ci-dessous montre quelques corrélation et la date de son élaboration.

Tableau I.1. : Quelques exemples de corrélations

Sources	Correlation	Input data	Range of applicability	Equations
Winn (1955)	$\ln(T_c) = -0.58779 + 4.2009 \left(T_b^{0.08615} \right) \left(SG^{0.04614} \right)$	T_b, SG	NA	1
	$P_c = 10^5 \left[6.148341 \times 10^7 \left(T_b^{-2.3177} \right) \left(SG^{2.4853} \right) \right]$	T_b, SG	NA	2
	$M = 2.70579 \times 10^{-5} \left(T_b^{2.4966} \right) \left(SG^{-1.174} \right)$	T_b, SG	NA	3
Riazi and Daubert (1980)	$T_c = 35.9413 \left[\exp \left(-6.9 \times 10^{-4} T_b - 1.4442(SG) + 4.91 \times 10^{-4} \left(T_b, SG \right) \right) \right] T_b^{0.7293} SG^{1.2771}$	T_b, SG	$M > 280 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	4
	$P_c = 10^5 \left\{ 6.9575 \left[\exp \left(-1.35 \times 10^{-2} T_b - 0.3129(SG) + 9.174 \times 10^{-3} \left(T_b, SG \right) \right) \right] T_b^{0.6791} SG^{-0.6807} \right\}$	T_b, SG	$M > 280 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	5
	$M = 42.965 \left[\exp \left(2.097 \times 10^{-4} T_b - 7.78712(SG) + 2.08476 \times 10^{-3} \left(T_b, SG \right) \right) \right] T_b^{1.26007} SG^{4.98308}$	T_b, SG	$70\text{-}700 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$ $300\text{-}850 \text{ K}$	6
Kesler and Lee (1976)	$T_c = 189.8 + 450.6(SG) + [0.4244 + 0.1174(SG)]T_b + \frac{[0.1441 - 1.0069(SG)]10^5}{T_b}$	T_b, SG	$T_b > 923 \text{ K}$ $70\text{-}700 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	7
	$\ln(P_c) = 10^5 \left[\begin{aligned} & \left(5.689 - \frac{0.0566}{SG} - \left(0.43639 + \frac{4.1216}{SG} + \frac{0.21343}{(SG)^2} \right) 0.001(T_b) \right) \\ & + \left(0.47579 + \frac{1.182}{SG} + \frac{0.15302}{(SG)^2} \right) \times 10^{-6} (T_b)^2 \\ & - \left(2.4505 + \frac{9.9099}{(SG)^2} \right) \times 10^{-10} (T_b)^3 \end{aligned} \right]$	T_b, SG	$T_b > 923 \text{ K}$ $70\text{-}700 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	8
	$M = -12272.6 + 9486.4(SG) + \left(8.3741 - \frac{5.9917}{SG} \right) T_b + \left[1 - 0.77084(SG) - 0.02058(SG)^2 \right] \left(0.7465 - \frac{222.466}{T_b} \right) \frac{10^7}{T_b} + \left[1 - 0.86882(SG) - 0.02226(SG)^2 \right] \left(0.3228 - \frac{17.535}{T_b} \right) \frac{10^{12}}{(T_b)^3}$	T_b, SG	$T_b < 750 \text{ K}$	9

I.12. Conclusion

Dans ce chapitre on a cité quelques exemples de corrélations qui sont élaborés par des chercheurs et sont devenus finalement des modèles incontestablement applicables dans différents domaines.

Chapitre II :

Méthodologie

II.1. Introduction

Les relations quantitatives structure-propriété (QSPR) sont de plus en plus utilisées, du fait de la croissance des moyens de calculs. Dans les dernières années, l'utilisation des méthodes QSPR n'a cessé de progresser. Elle est même devenue indispensable en chimie pharmaceutique et pour la conception de médicaments. Leur développement dans une gamme plus large d'applications leur ouvre d'ailleurs de grandes perspectives (ex : solubilité, points d'ébullition, température de fusion températures critiques, densité . . . etc.). Il s'agit de présenter ici le principe des modèles QSPR ainsi que ceux des différents outils employés pour leur mise en place et leur évaluation: bases de données expérimentales, descripteurs, outils d'analyse de données [6].

II.2. Les relations structure-propriétés quantitatives "QSPR"

II .2.1.Définition de QSPR

Le **QSPR** (**Quantitative Structure-Property Relationships**) est le procédé par lequel des liens quantitatifs sont établis entre la structure moléculaire d'un ensemble de composés avec une propriété physico-chimique. Les grandes phases de développement d'un modèle QSPR peuvent être décrites comme suit :

- Choisir des descripteurs adaptés au problème structure-propriété.
- Exploiter les valeurs des descripteurs comme variables, afin de définir une relation qui les corrèle à la propriété en question, à l'aide de machines d'apprentissage. C'est la fouille de données.

Établir des critères de performance et de validation qui aideront au choix des meilleurs modèles pour le problème posé et estimer des incertitudes de prédiction [7].

II.2.2. Principe de QSPR :

Le principe des méthodes QSPR est, comme leur nom l'indique, de mettre en place une relation mathématique reliant de manière quantitative des propriétés moléculaires aussi bien électroniques que géométriques, appelées descripteurs, avec une observable macroscopique (activité biologique, toxicité, propriété physico-chimique, etc.), pour une série de composés chimiques similaires à l'aide de méthodes d'analyses de données. Aussi la forme générale de modèle est: **Propriété = f(Descripteurs)** (II.1) L'objectif d'une telle méthode est

donc d'analyser les données structurales afin de détecter les facteurs déterminants pour la propriété mesurée. Pour ce faire, différents types d'outil peuvent être employés : régressions multilinéaires (MLR), régressions aux moindres carrés partiels (PLS), arbres de décision, réseaux de neurones, algorithmes génétiques. Une fois cette relation mise en place et validée sur un jeu validation, elle peut alors être employée pour la prédiction de la propriété de nouvelles molécules, pour lesquelles la valeur expérimentale n'est pas disponible, voire pour des molécules encore non synthétisées. De tels modèles peuvent également, dans certains cas, être utilisés pour mieux appréhender les phénomènes moléculaires mis en jeu dans la propriété d'intérêt [8].

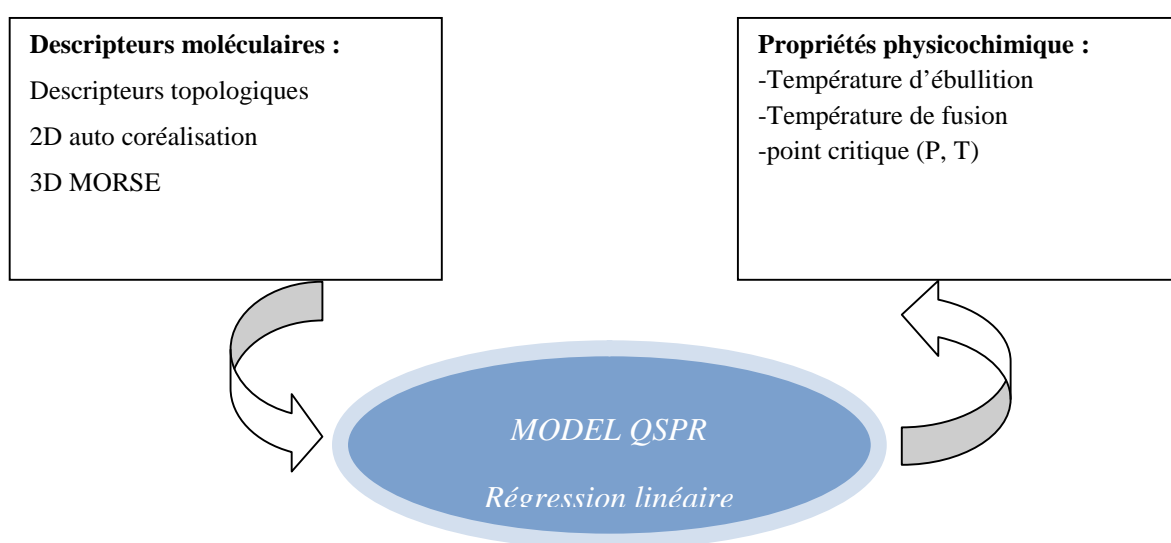


Figure II-1-: principe de la méthode QSPR

II.2.3. Les méthodes mathématiques utilisés par le model QSPR

- Régression linéaire
- Régression linéaire multiple (MRL)
- Régression en composantes principales(PCR)
- Régression moindre carré (PLS)

La Régression Linéaire Simple (SRL) est un modèle particulier de régression dans lequel :

- Il n'y a qu'une seule variable explicative (numérique).
- Le modèle est linéaire dans la variable dans les paramètres.

Comme toutes les techniques prédictives, elle a deux objectifs :

- Construire un modèle dont les paramètres soient interprétables par le praticien en termes de propriétés.
- Utiliser le modèle pour faire des prédictions

Dans notre travail on a opté pour la régression linéaire simple car elle est sans aucun doute la méthode statistique la plus utilisée. On distingue habituellement la régression simple (une seule variable explicative) de la régression multiple (plusieurs variables explicatives) bien que le cadre conceptuel et les méthodes de calculs soient identiques [9]

II.2.4. Les types d'apprentissages d'un modèle QSPR [10]

Les techniques d'apprentissage ont été développées en informatique ces 15 dernières années. Il y a deux types d'apprentissages :

- Non-supervisé: les propriétés ne sont pas utilisés (seul les descripteurs).

Ce type utilisé pour Grouper de composé chimique.

- Supervisé: établi une relation entre données entrées / input data (composés chimiques)

Et données produites output data (propriétés).

II.2.5. Techniques d'apprentissages utilisés en chimie

On a plusieurs techniques, le tableau suivant illustre les plus utilisées:

Tableau II-1 : différents types d'apprentissages

Non-supervisé	supervisé
Réseau De Kohonen	Arbres de décision
analyse de composant principal	RL, RLM, SPL, PCR
Outils de Similarité	Machines de vecteur de soutien
Grouper	Algorithmes génétiques

II.3.Descripteurs moléculaires

II.3.1.Définition d'un descripteur :

Un descripteur est un paramètre numérique propre à une structure chimique donnée, également c'est 'un résultat d'un procédé mathématique ou d'une certaine expérience normalisée. Ces descripteurs représentent un moyen de corréler une structure chimique et une valeur de propriété physico-chimique ou biologique. Les descripteurs sont finalement des intermédiaires numériques se substituant à la molécule elle-même [11]

Ces descripteurs peuvent être utilisés pour évaluer l'influence de la structure moléculaire ou les relations propriétés-structure, aussi pour l'analyse de symétrie et la projection des bases de données des molécules [12]

II.3.2.L'importance d'un descripteur :

- Nous indiquent la description de la configuration (constitutionnelle, topologique, géométrique, électrostatique) de la molécule à étudier.
- Nous décrivent tous les paramètres descriptifs de la molécule.

II.3.3.Choix d'un descripteur :

Pour avoir le bons choix de descripteurs moléculaires on doit respecter les points suivants :

- Les descripteurs doivent avoir une relation directe, et une description suffisante à la structure moléculaire des composés chimiques à étudier.
- Les descripteurs doivent avoir des liens avec les propriétés chimiques et physiques et l'activité des composés chimiques.
- La simplicité des descripteurs.
- La représentation descriptive de la totalité de la structure moléculaire des composés.
- La diversité (variétés) de ces descripteurs.
- la sélection exacte et la distinction entre les descripteurs décisifs (principaux), et d'écarts (secondaires).
- La simplicité et l'efficacité de ces descripteurs, puisque la complexité provoque une perturbation sur les résultats d'estimation [13]

- Il n'est pas nécessaire d'avoir des relations parfaites, entre les variables (descripteurs) prédictives, Parce qu'elles causent des difficultés sur la régression linéaire (confusion parfaite d'effets et perturbation dans l'interprétation des résultats) [14]

II.3.4.Choix de nombre de descripteur :

- L'estimation des propriétés nécessite certain nombre de descripteurs moléculaires (certains blocs).
- Le choix des descripteurs convenables est très important.

Les descripteurs utilisé dans cette étude sont calculés avec DRAGON, et sont divisées en deux groupes logiques qui représentée au-dessous sur un diagramme :

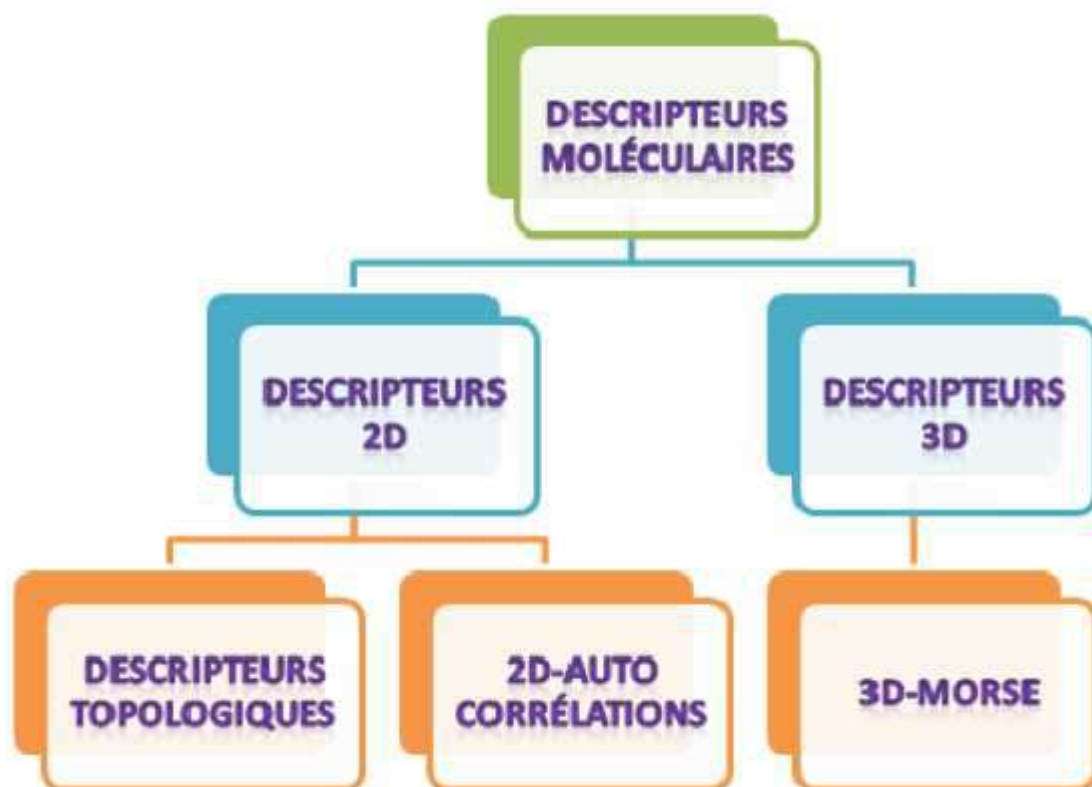


Figure II-2: Diagramme des descripteurs utilisés

A partir le diagramme précédent on choisi deux block des descripteurs moléculaires, descripteurs topologiques et descripteurs 2D

II.3.5. Classement de ces descripteurs moléculaires

Le classement de ces descripteurs moléculaires doit être suivant l'importance et l'efficacité (le pouvoir descriptive), la qualité de l'information sur la propriété à estimer. (Les descripteurs moléculaires décisifs et d'autres écarts).

II.3.6. Calcul des descripteurs moléculaires

Afin d'exploiter au maximum les informations contenues dans les structures moléculaires, celles-ci sont traduites en une série de grandeurs (en général scalaires) qui quantifient leurs caractéristiques physico-chimiques et structurelles.

II.3.7. Types de descripteurs moléculaires :

Il existe quatre types de descripteurs moléculaires 0-D, 1D, 2D, 3D

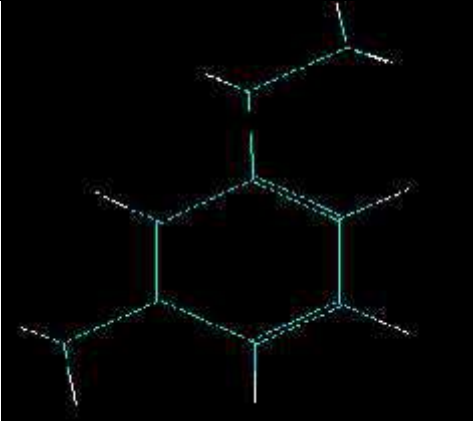
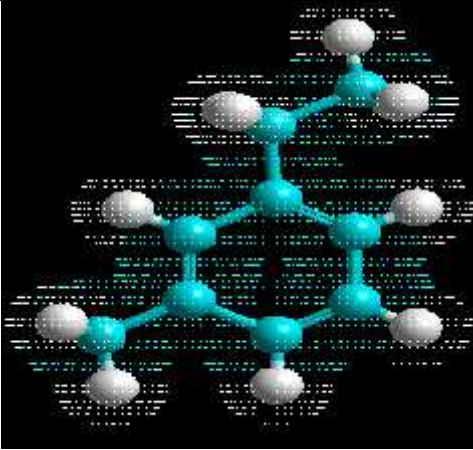
Les descripteurs 0-D : sont calculés à partir de la formule brute de la molécule.

Les descripteurs 1-D : Contient des nombre d'atomes, des groupements fonctionnels, des propriétés des molécules, et les charges. Ils sont calculés à partir de la formule brute de la molécule et ils représentent des propriétés très générales, comme le poids moléculaire, nombre d'atomes, etc.

Les descripteurs 2-D : Contient des descripteurs simples et autres dérivés des algorithmes appliqués à une représentation topologique. Ils sont obtenus à partir de la structure 2D constitutionnels, fragmente aux ou les propriétés physico-chimiques (donneur de liaison H, accepteur de liaison H, cation, anion, etc.) De la molécule. Dans cette catégorie rentre les indices topologiques.

Les descripteurs 3-D : Contient des descripteurs moléculaires dérivés d'une représentation géométrique. Ils sont calculés à partir la structure 3D de la molécule. Ils peuvent être quantiques, de surfaces moléculaires ou de volume moléculaire [15]

Tableau II-2-Présentation de composé de différentes dimensions :

Structure	Présentation of the molécule	Descriptors
1D	C₉H₁₂	Number of carbon atoms Molecular weight
2D		Number of rings Number of bonds Number of benzène
3D		Molecular surface

II.3.8.Blocs des descripteurs :

Les descripteurs moléculaires calculés par DRAGON sont divisés en 20 blocs logiques. Ces descripteurs moléculaires sont représentés dans la figure suivante :

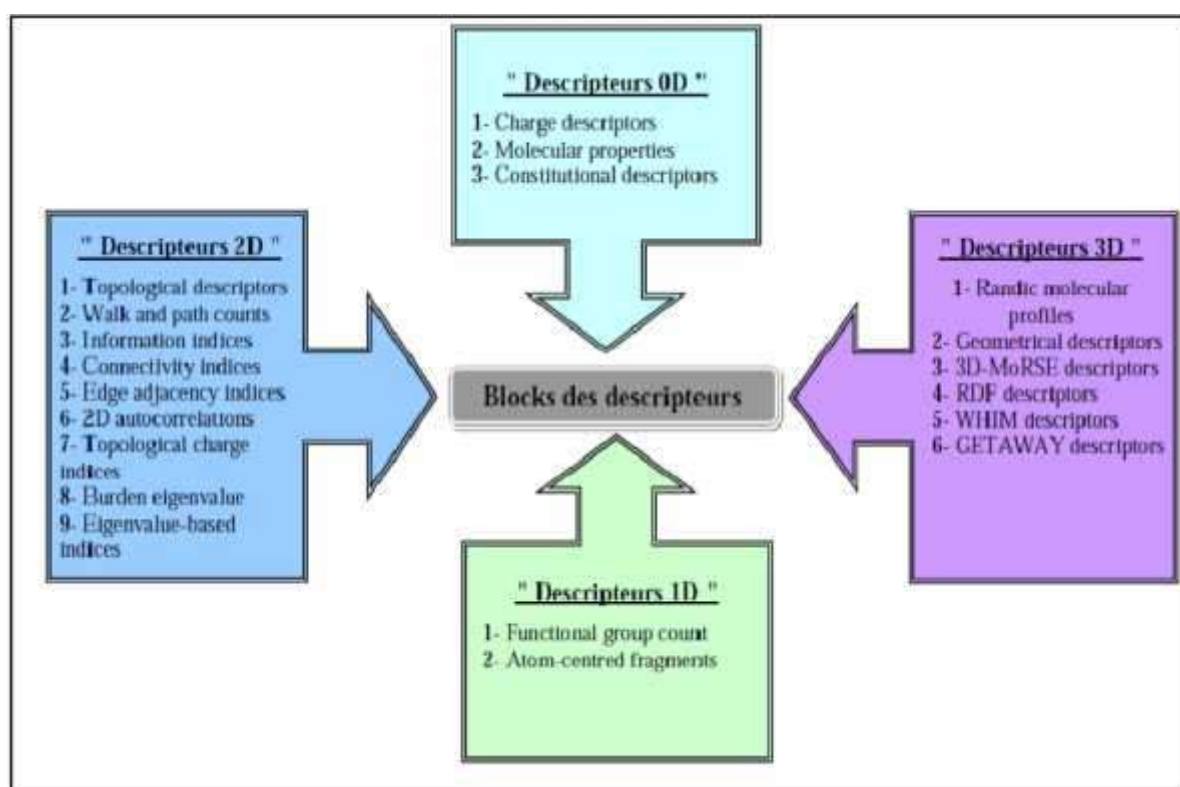


Figure II-3- Représentation des blocs des descripteurs moléculaires

II.4. Etapes d'élaboration des prédictions :

Les premiers essais de modélisation QSPR développés par Wiener reliant point d'ébullition, point de fusion, point d'éclair et structure moléculaire. Depuis, l'essor de nouvelles techniques de modélisation par apprentissage, linéaires d'abord, puis non linéaires, ont permis la mise en place de nombreuses méthodes ; elles reposent pour la plupart sur la recherche d'une relation entre un ensemble de nombres réels, descripteurs de la molécule, et que l'on souhaite prédire. Nous montrerons tout d'abord comment les molécules peuvent être représentées par des vecteurs de réels, et comment ces descripteurs sont sélectionnés. Nous introduirons ensuite les outils de modélisation les plus utilisés, c'est-à-dire la régression linéaire et la régression non linéaire à l'aide de logiciels MINITAB, qui sont fondés sur le calcul de descripteurs. La prédiction des propriétés s'effectue par plusieurs étapes intéressantes illustrant dans le diagramme suivant:

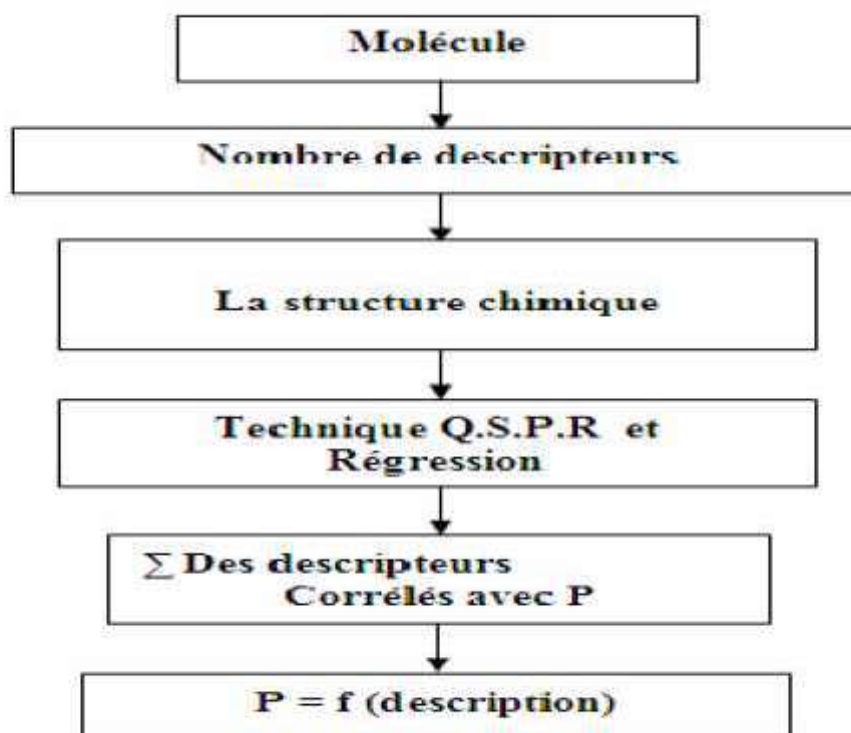


Figure II-4-Diagramme de prédiction par QSPR.

II.5.L'objectif de la prédiction

L'objectif principal est d'établir un modèle de prédiction de propriété en se basant sur la structure moléculaire et plus précisément les descripteurs moléculaires. Ce modèle permet, en suite la classification des composées subi à la prédiction.

Le cycle de prédiction est représenté dans la figure (II-6) ci-dessous

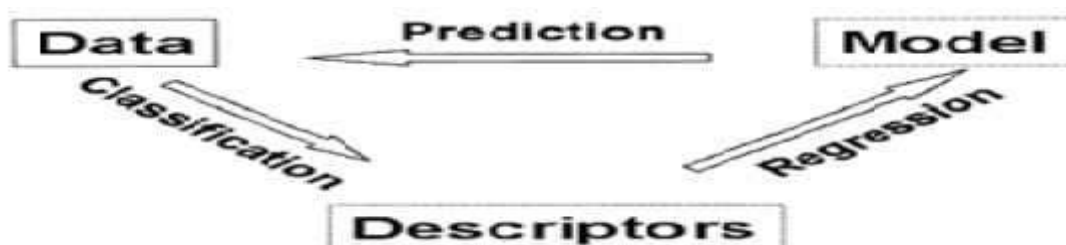


Figure II-5-montre le cycle d'optimisation du modèle.

II.6. Les étapes de travail: (Diagramme de travail)

Le diagramme ci-dessous montre les étapes que nous avons suivies pour élaborer notre corrélation.

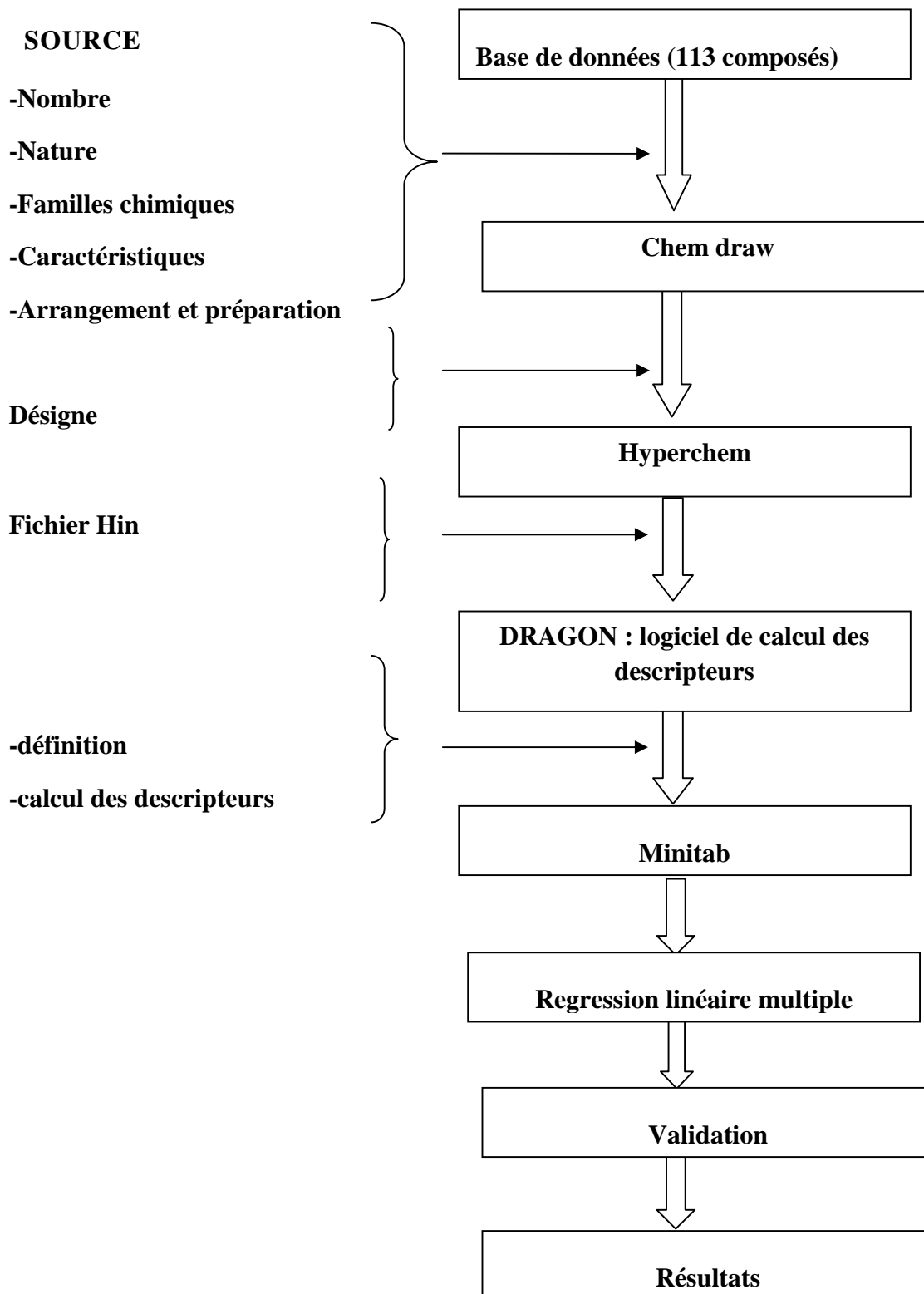


Figure II-6-Diagramme de notre travail.

Le diagramme précédant illustré les étapes de travail et les techniques utilisé dans la procédure de prédiction des propriétés étudiés (point d'ébullition, point de fusion et le point d'éclair).

II.7.Base des données

- **source** : la base de données utilisée dans ce travail a été collectée à travers l'internet et aussi dans le mémoire de université Oued promotion 2014 spécialité chimie organique et analytique.
- **La nature des composées** : ces composées sont de nature chimique, organique homogène (carbures hydrogènes).
- **Les familles chimiques** : dans cette base de données on trouve plusieurs familles chimiques comme (Paraffine, Oléfine, Naphtène, Aromatique).

II.7.1.Les caractéristiques et les propriétés de cette base de données sont

Notre base de données est composée principalement de quatre familles qui sont :

- **Les paraffines** : se sont des composés linéaires saturés qui comportent une formule chimique brute C_nH_{2n+2}
- **Les oléfines** : se sont des composés linéaires insaturés qui comportent une formule chimique brute C_nH_{2n}
- **Les naphène** : se sont des composés cycliques saturés qui comportent une formule chimique brute C_nH_{2n}
- **Les aromatique** : sont des composés cycliques insaturés

II.7.2.Préparation de base des données

II.7.2.1.Rappel :

Les méthodes instrumentales d'analyse sont devenues essentielles à l'étude des phénomènes scientifiques et jouent un rôle prépondérant dans la résolution de problèmes en sciences chimiques. Il est donc important d'obtenir une meilleure compréhension de la capacité de ces instruments et une compréhension de base de leurs principes de fonctionnement [16].

II .7.2.2. Chem office 2008

Chem Draw fournit aux chimistes avec un ensemble d'outils riche, faciles à utiliser pour créer des publications prêtes, dessins scientifiquement significatifs de molécules et de réactions [17].

Essayant de concevoir et dessiner de nouvelles molécules en utilisant les différents outils disponibles dans Chem Draw, et de les visualiser, et plus important encore, les enregistrer dans différents formats. Chem Draw est très pratique pour les réactions d'écriture à l'aide de produits chimiques.

Vous devriez être en mesure de réaliser des structures dans différents formats disponibles [18]

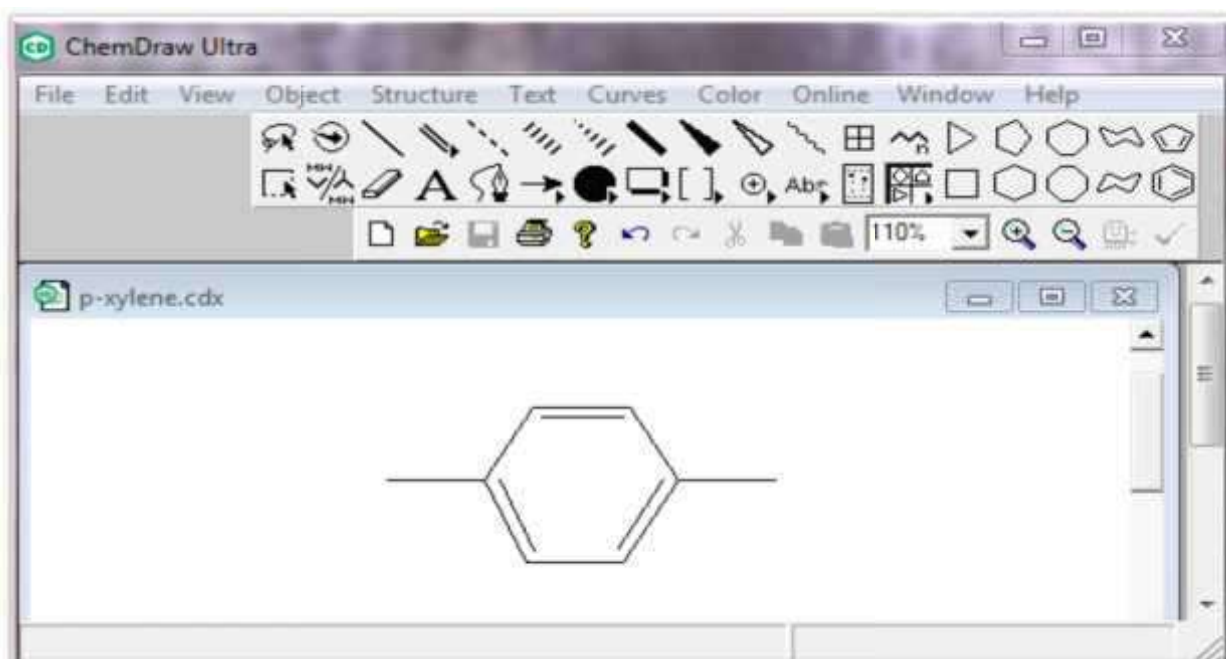


Figure II-7: exemple réalisation de la structure de la molécule p-xylène.

II.7.2.3.HYPER CHEM :

HyperChem rassemble dans une même interface un ensemble d'outils dédiés à la modélisation moléculaire, qui est connu pour sa qualité, flexibilité, et facilité d'usage.

➤ **Fonctionnalité:**

HyperChem est le logiciel qui vous permet de faire réellement de la modélisation il possède plus de méthodes de calculs (mécanique moléculaire, semi empirique et ab- initio). Comme il optimise les structures moléculaires, et aussi stabilise la forme de la structure de chaque molécule ou minimisation de l'énergie (la géométrie d'optimisation). Les deux mécanismes moléculaires et les méthodes semi-empiriques sont disponibles. Minimisation de l'énergie modifie la géométrie ou la forme d'une molécule d'abaisser l'énergie potentielle de la molécule et pour donner une conformation plus stable et pour enfin calculer plus de propriétés.

Hyperchem est utilisé dans cette étude pour construire et optimiser les molécules d'une fraction pétrolière (essences de C_5 à C_{10}) chaque molécule est enregistrée comme un fichier nommé "Hin" après l'optimisation. Nous avons utilisés la méthode semi empirique MM+ pour l'optimisation. On a 113 molécules donc on obtient 113 fichiers Hin, en suite en va calculer les descripteurs moléculaires à partir de ce fichier par logiciel DRAGON pour chaque molécule [19].

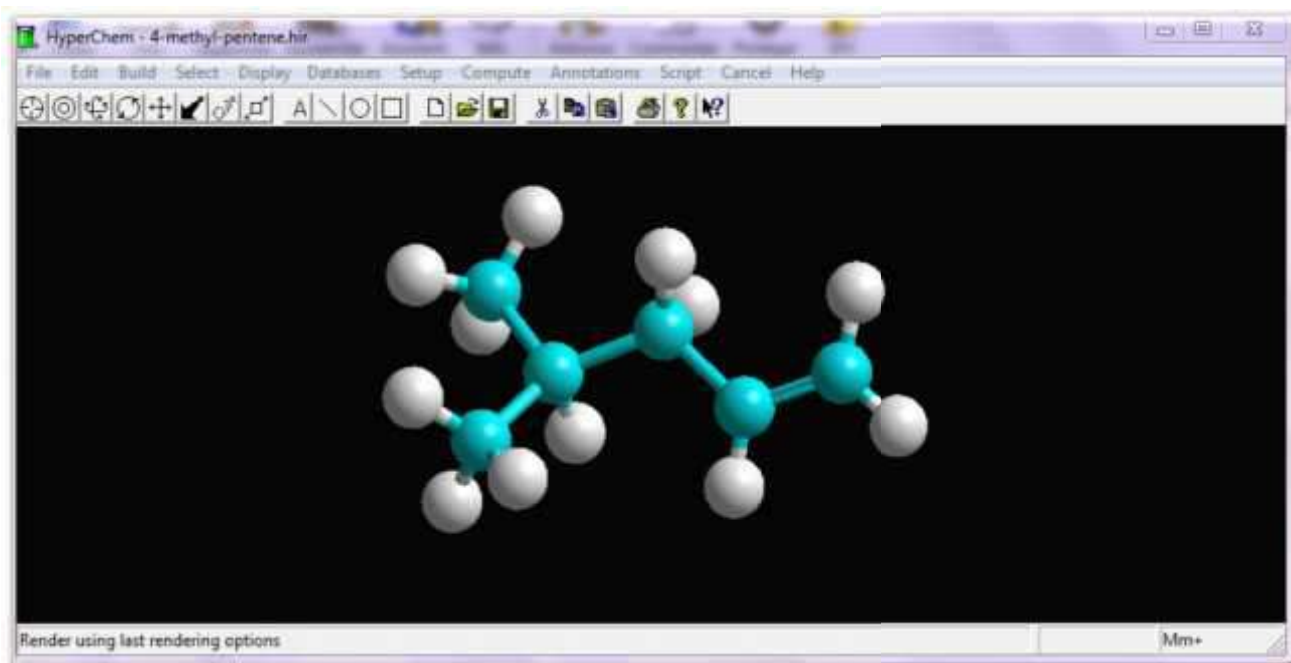


Figure II-8: exemple d'un composé (4-méthyle-pentene) après son modélisation par hyperchem.

II.7.2.4.DRAGON

DRAGON: c'est une application pour le calcul des descripteurs moléculaires. Ces descripteurs peuvent être utilisés pour évaluer l'influence de la structure moléculaire ou les relations propriétés-structure, aussi pour l'analyse de symétrie et la projection des bases de données des molécules [20].

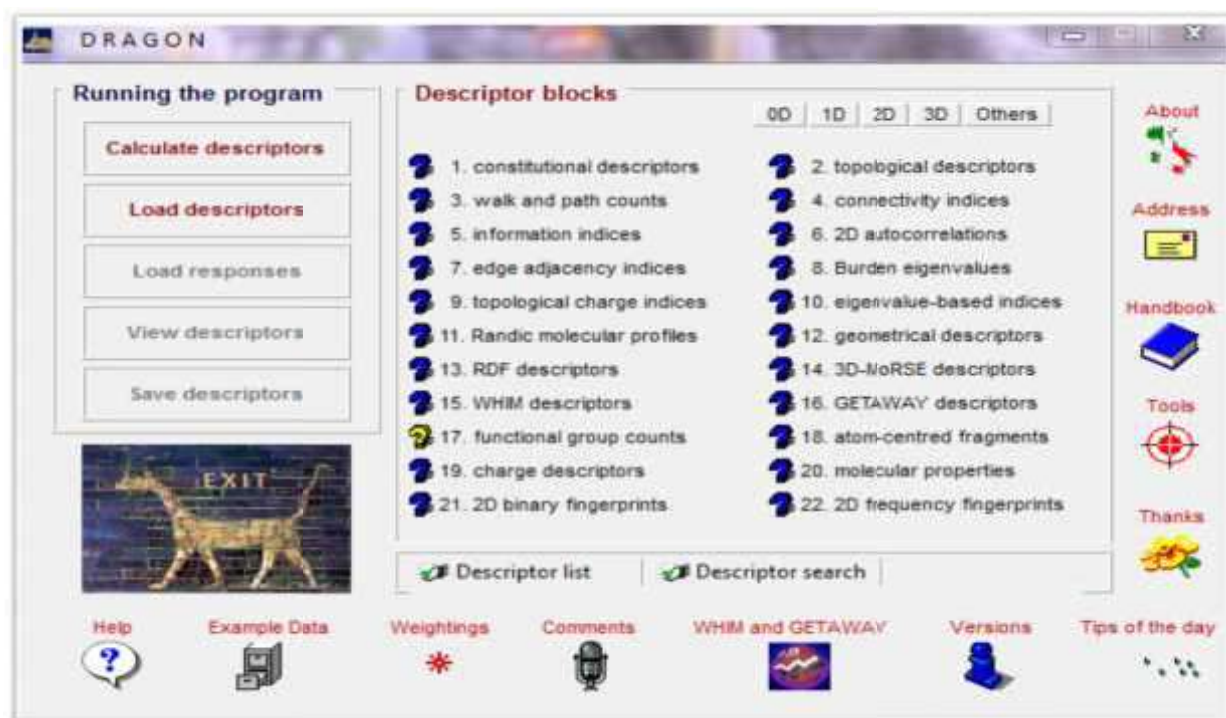


Figure II-9: image de logiciel DRAGON

The screenshot shows a window titled 'View descriptor values for...' with a dropdown menu set to 'constitutional descriptors' and a field for 'alssa0'. Below this is a table with 16 rows of descriptor data. The table has columns for ID, Symbol, Value, and Meaning. At the bottom of the window, there is a 'QUIT' button and the text 'Milano Chemometrics'.

ID	Symbol	Value	Meaning
1	MW	134.240	molecular weight
2	AMW	5.590	average molecular weight
3	Sv	14.180	sum of atomic van der Waals volumes (scaled on Carbon atom)
4	Se	23.190	sum of atomic Sanderson electronegativities (scaled on Carbon atom)
5	Sp	15.330	sum of atomic polarizabilities (scaled on Carbon atom)
6	Se	18.330	sum of Kier-Hall electrotopological states
7	Mv	0.590	mean atomic van der Waals volume (scaled on Carbon atom)
8	Me	0.970	mean atomic Sanderson electronegativity (scaled on Carbon atom)
9	Mp	0.640	mean atomic polarizability (scaled on Carbon atom)
10	Ms	1.830	mean electrotopological state
11	nAT	24	number of atoms
12	nSK	10	number of non-H atoms
13	nBT	24	number of bonds
14	nBO	10	number of non-H bonds
15	nBM	6	number of multiple bonds
16	SCBO	13	sum of conventional bond orders (H-depleted)

Figure II-10-représente les descripteurs après calcul

II.7.2.5.MINITAB

C'est un logiciel de statistique qui permet de trouver les équations de régressions entre les variables étudiées. On choisit ce logiciel lorsqu'il contient plusieurs caractéristiques :

- MINITAB c'est un logiciel très fiable et très stable.
- nous permet de réorganiser nos données et de les structurer afin de faciliter leur analyse.
- Avec MINITAB l'analyse en composantes principales (ACP) et l'analyse des correspondances (AFC) deviennent faciles, de même que la régression linéaire (simple ou multiple),
- Nous donne accès à un grand nombre de tests. Les résultats des tests comprennent une interprétation explicite.
- Il offre une large variété de tests statistiques pour que nous permette de tester des hypothèses.
- nous permet d'évaluer la qualité de nos données, et détermine les erreurs de calcul (écarts + résidus), ce qui nous aide à améliorer notre travail.
- Les résultats des essais incluent une première conclusion de niveau pour soulager notre interprétation.
- Il inclut quelques outils qui facilitent la visualisation des données.

Applications

Marketing quantitatif, Analyse d'enquêtes, Analyse sensorielle , Analyse de portefeuille, Modélisation de risques , Analyse de données de survie, Recherche géologique , Ecologie, Expérimentations , Psychométrie, Chémométrie, Contrôle de qualité, Enseignement .

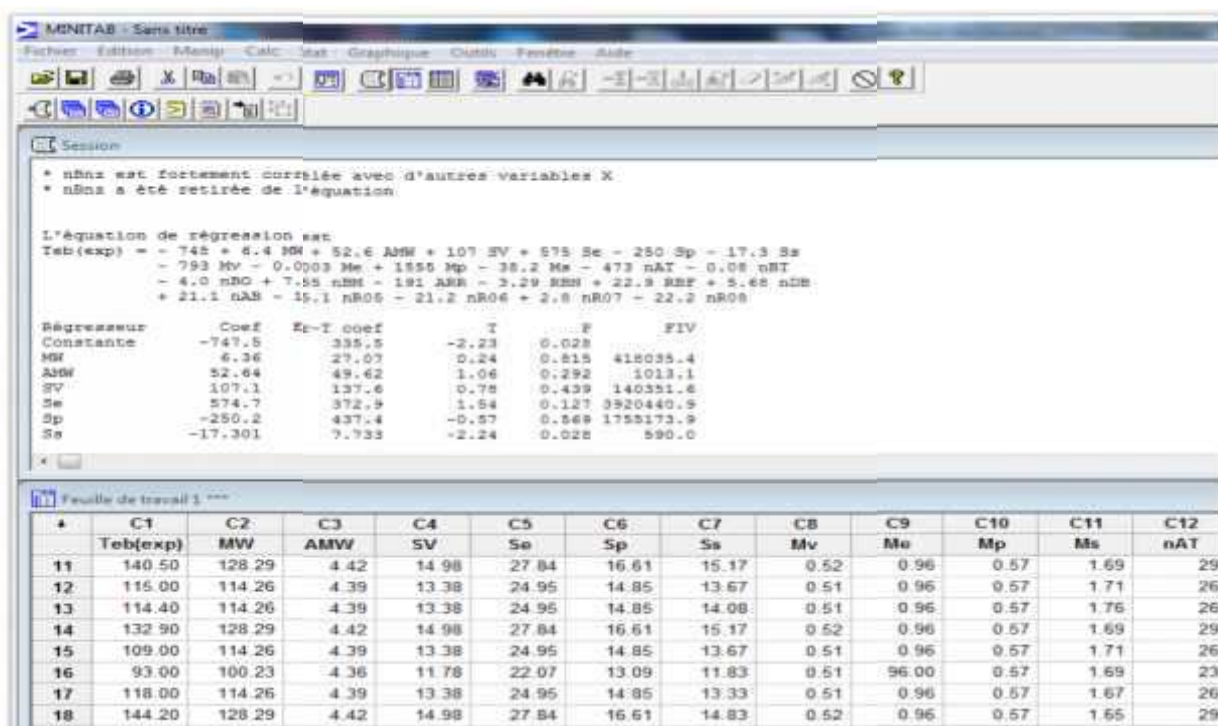


Figure II-11:calcul par MINITAB pour trouver l'équation de régression

II.8.Conclusion

Avant la pénétration dans la réalisation de notre travail, il est nécessaire de préparer les outils d'exécution qui sont:

- Présenté les étapes de modélisation et les techniques qui sont utilisés dans notre travail.
- l'arrangement de la base de données, qui contient 113 composés de la fraction essence de différentes familles chimiques. (PONA)
- Les descripteurs moléculaires qui sont distribués sur 3 blocs et calculés à l'aide de Dragon.
- Le logiciel MINITAB pour la modélisation (régression étape par étape +validation).

À partir des logiciels suscités des modèles QSPR peuvent être élaborés reliant certaines propriétés physicochimiques aux descripteurs topologiques des molécules étudiées.

Autrement dit élaboré des équations linéaires reliant ses propriétés qui permettent d'estimer des valeurs des propriétés très proches des valeurs expérimentales.

Chapitre III :
Résultats et discussion

III.1.Introduction

Dans les chapitres précédents, on a parlé sur la conception des méthodes prédictives et leur impotence dans le calcul de propriétés physico-chimiques, on a détaillé la méthodologie de développement de la méthode « QSPR » par l'utilisation des outils comme la régression. Cette analyse se devise en analyse statistique simple, analyse des résidus et validation du modèle pour **113** molécules d'hydrocarbures réparties en trois familles (cycliques, aromatiques, ramifiés et linéaires). Dans ce chapitre on va présenter les résultats de régression obtenus après étude statistiques et validation par le logiciel MINITAB. Les résultats sont présentés sous formes de tableaux et de figures.

III.2.Elaboration de la base de données

Une base de données de 113 molécules a été élaborée (voir le tableau en annexe), constituant la fraction essence de C5 à C11, celle-ci contient le nom, formule brute, formule développée et certaines propriétés physicochimiques en particulier : températures d'ébullition et de fusion expérimentales, à partir de sources sûres et fiables. Cette base de données est répartie en 60% d'hydrocarbures linéaires et ramifiés, 20% aromatiques et 20% de nature cycliques, comme le montre la figure III-1 ci-dessous.

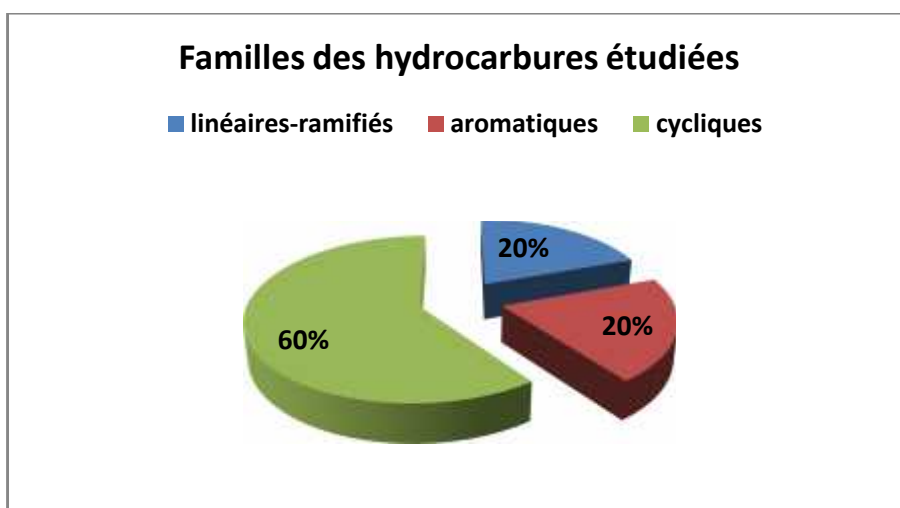


Figure III-1 : Familles des hydrocarbures étudiés

III.3.Résultats de régression :

III.3.1.: pour la température d'ébullition : après analyse statistique par Minitab on obtient les résultats suivants :

a) Pour tous les composés (113 composés)

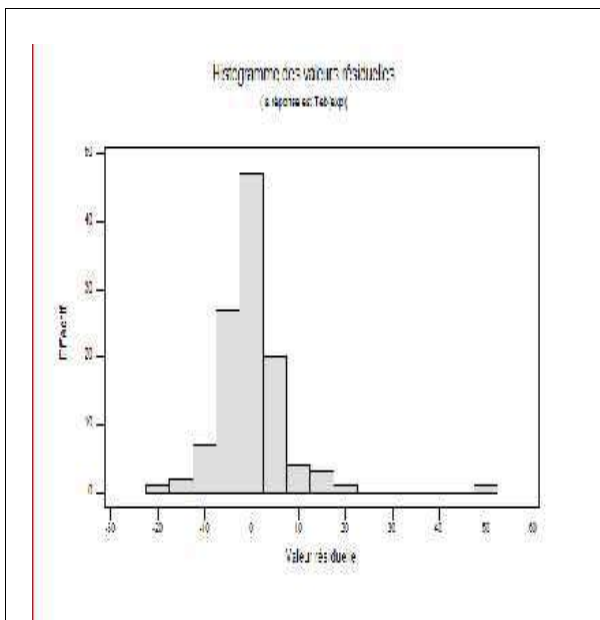
Tableau III -1- Résultats de régression de Téb pour les 113 composés

a.1.L'équation de régression est :		
$Teb = - 748 + 6.4 MW + 52.6 AMW + 107 SV + 575 Se - 250 Sp - 17.3 Ss - 793 Mv - 0.0003 Me + 1555 Mp - 38.2 Ms - 473 nAT - 0.08 nBT - 4.0 nBO + 7.55 nBM - 191 ARR - 3.29 RBN + 22.9 RBF + 5.68 nDB + 21.1 nAB - 15.1 nR05 - 21.2 nR06 + 2.8 nR07 - 22.2 nR08$		
S = 8.677	R-carré = 96.9%	R-carré (ajust) = 96.1%

a.2.Analyse de variance

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	23	209865.4	9124.6	121.18	0.000
Erreur résid	89	6701.5	75.3		
Total	112	216566.9			

a.3.Représentation graphique :



FigureIII-2 : Histogramme des valeurs résiduelles de Téb pour 113 composés

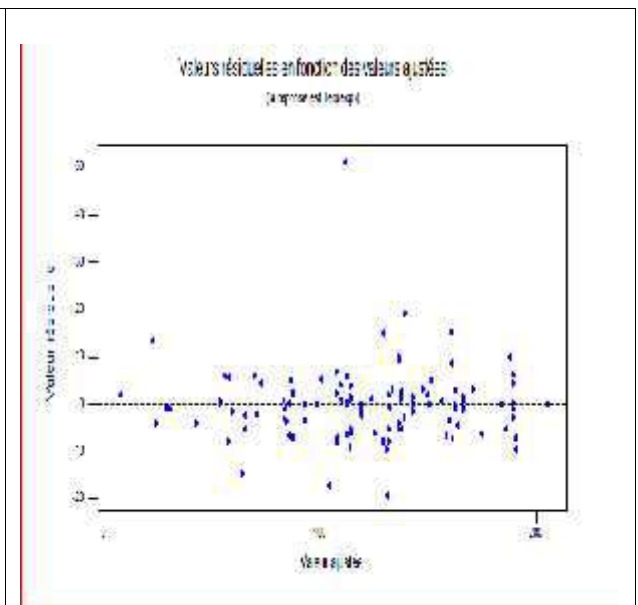


Figure III-3:valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Téb pour 113 composés

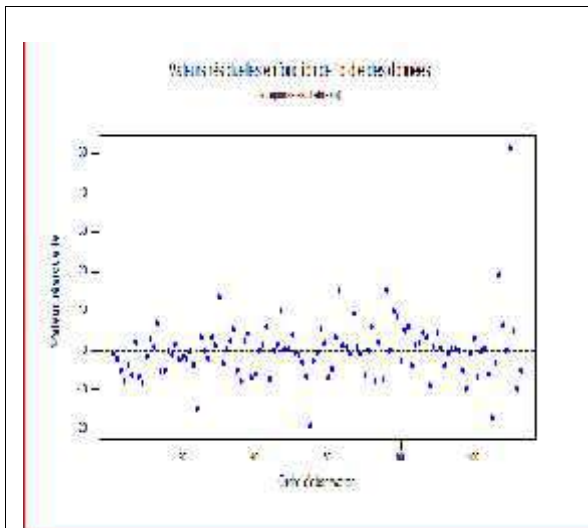
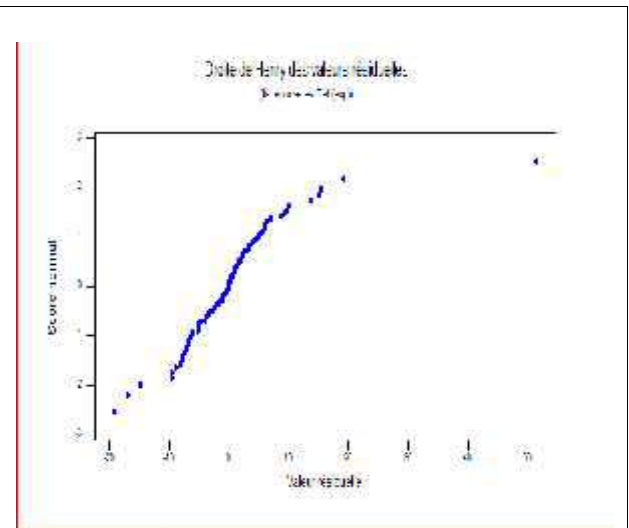


Figure III-4 :valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Téb pour 113 composés



FigureIII-5 :droite de henry des valeurs résiduelles de Téb pour 113 composés

L'équation de la régression des valeurs prédites de Téb par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0.9656x - 5.3708$, son coefficient de régression est $R^2 = 0.9684$. La figure III-6 représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

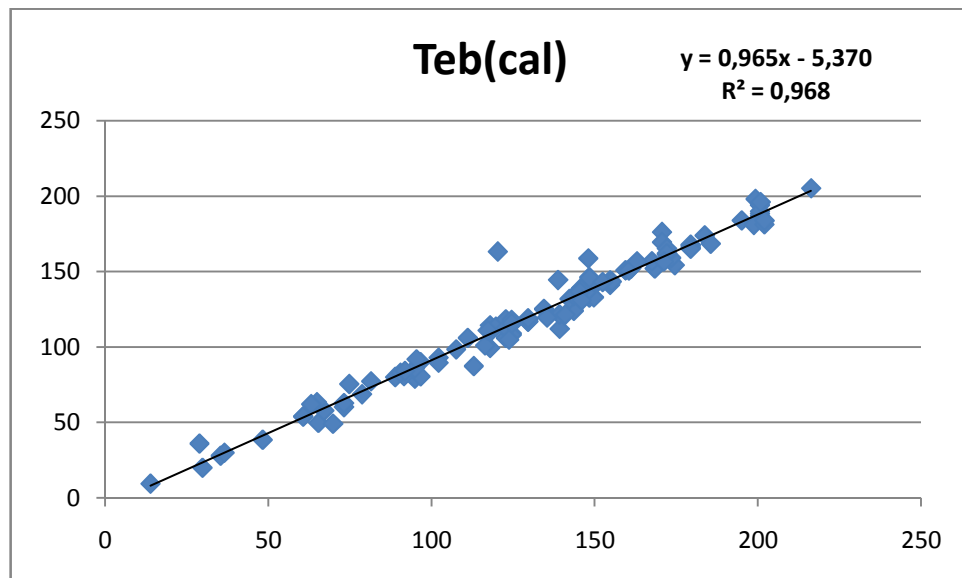


Figure III-6 : Courbe de tendance de Téb calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 113 composés

b) Pour les hydrocarbures de type linéaires et ramifiés (68 composés) :

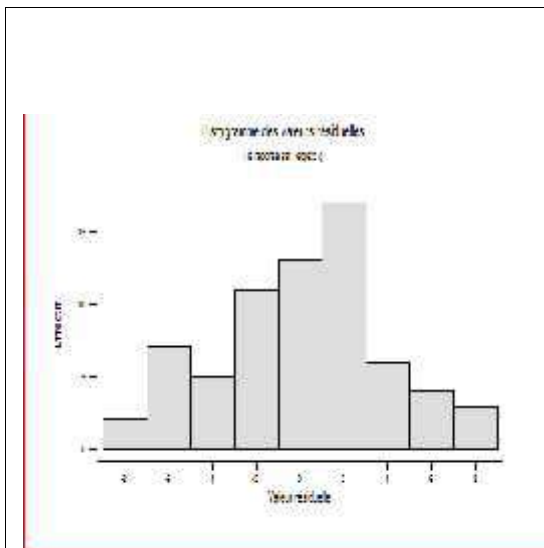
Tableau III -2- Résultats de régression de Téb Pour les HC linéaires et ramifiés (68 composés)

<p>b.1.L'équation de régression est</p> <p>Teb = 1301 - 176 MW + 165 AMW + 2904 SV + 3141 Se - 372 Sp + 7.27 Ss - 3384 Mv + 0.0019 Me - 100 Mp - 162 Ms - 3522 nAT - 0.016 nBT + 1.34 RBN + 5.61 RBF</p>		
S = 4.187	R-carré = 99.1%	R-carré (ajust) = 98.9%

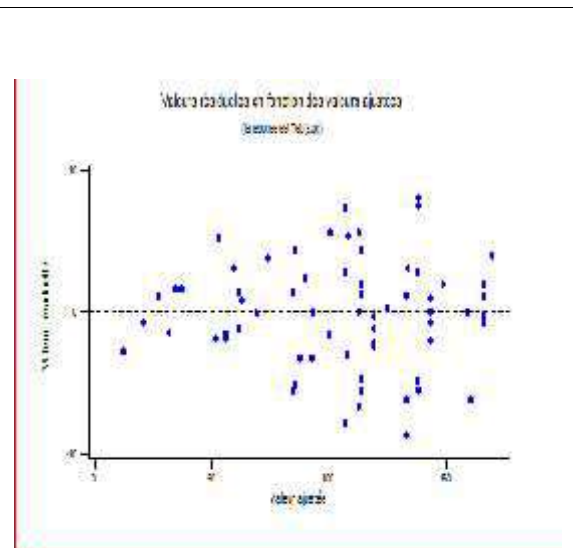
b.2.Analyse de variance

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	14	105178.4	7512.7	428.53	0.000
Erreur résid	53	929.2	17.5		
Total	67	106107.6			

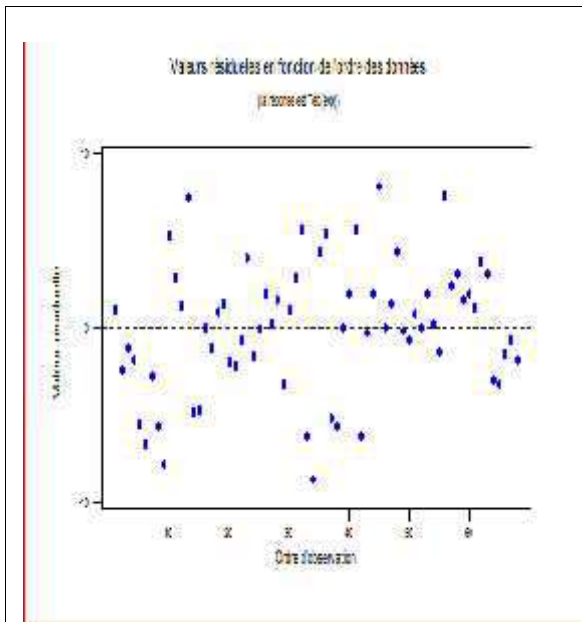
b.3.Représentation graphique :



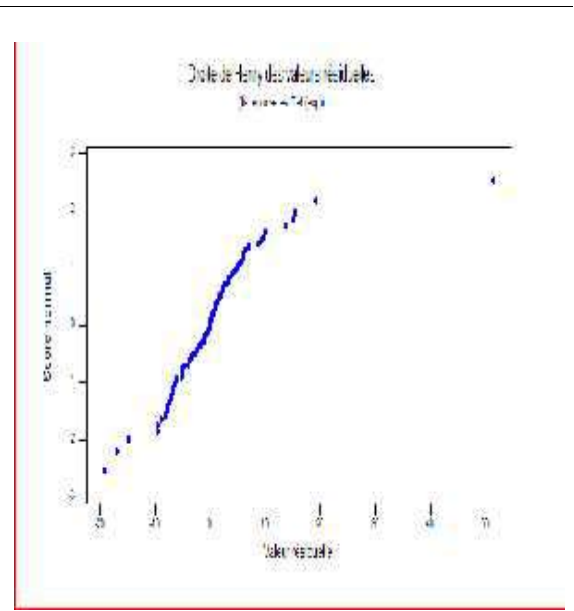
FigureIII-7 : Histogramme des valeurs résiduelles de Téb pour 68 composées (ramifié et linéaire)



FigureIII-8 : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Téb pour 68 composées (ramifié et linéaire)



FigureIII-9 :valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té b pour 68 composés (ramifié et linéaire)



FigureIII-10 :droite de Henry des valeurs résiduelles de Té b 68 composés (ramifié et linéaire)

L'équation de la régression des valeurs prédites de Teb par rapport aux valeurs expérimentales pour les hydrocarbures de type linéaires et ramifiés, a une tendance linéaire de forme : $y = 1.1374x + 15.032$, son coefficient de régression est $R^2 = 0.9906$. La figure III-11 représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales pour les HC linéaires et ramifiés, la valeur élevée du coefficient de régression indique la validité de notre modèle.

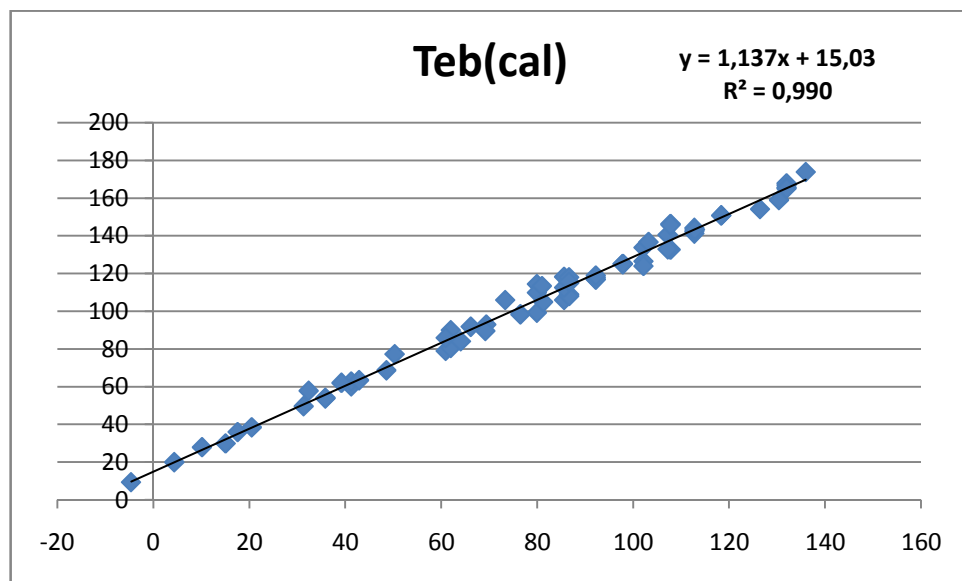


Figure III-11 : Courbe de tendance de Teb calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les composés linéaires et ramifiés

III.3.2: pour la température de fusion : après analyse statistique par Minitab on obtient les résultats suivants :

a) Pour tous les composés (113 composés)

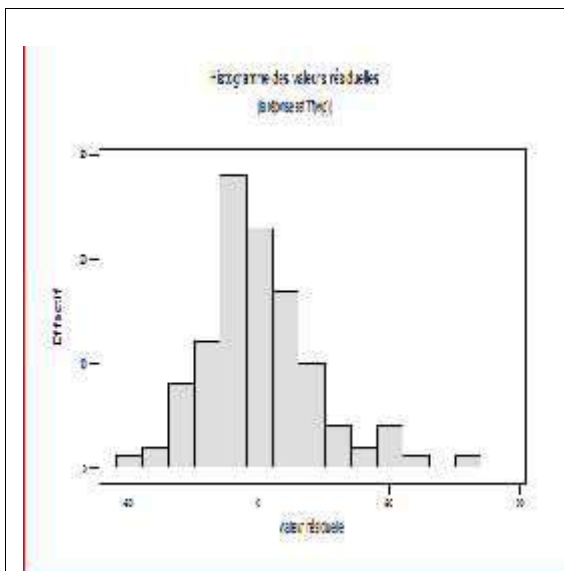
Tableau III 3-- Résultats de régression de Tf pour les 113 composés

a.1.L'équation de régression est		
$Tf = 127 - 53.9 MW + 36 AMW + 877 SV + 2299 Se - 70 Sp - 24.4 Ss - 386 Mv - 0.035 Me - 473 Mp - 35.0 Ms - 2347 nAT + 1.63 nBT - 61.4 nBO + 24.3 nBM + 102 ARR - 7.49 RBN - 51.3 RBF + 12.3 nDB - 18.5 nAB + 24.9 nR05 + 39.2 nR06 + 81.3 nR07 + 32.7 nR08$		
S = 23.80	R-carré = 67.6%	R-carré (ajust) = 59.2%

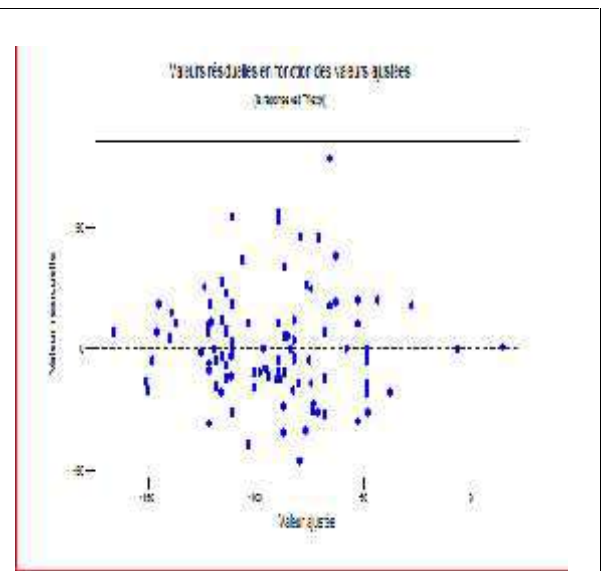
a.2.Analyse de variance

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	23	105148.6	4571.7	8.07	0.000
Erreur résid	89	50419.6	566.5		
Total	112	155568.2			

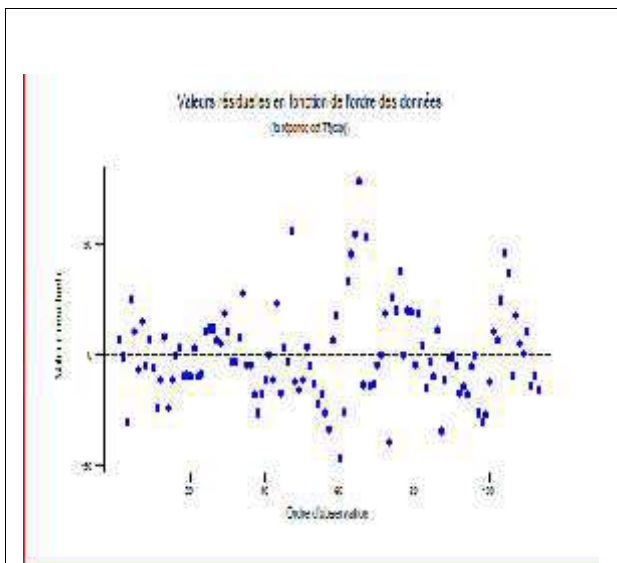
a.3.Représentation graphique :



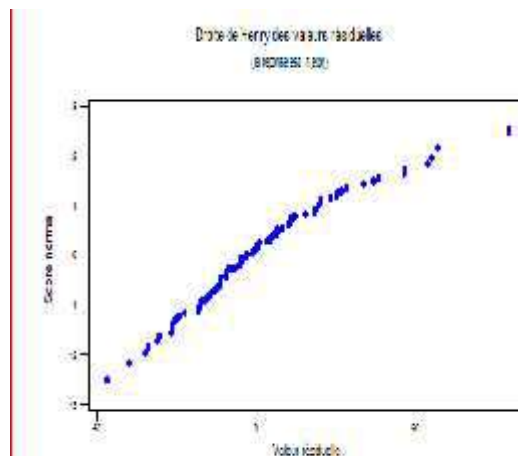
FigureIII-12 : Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour 113 composés



FigureIII-13 : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour 113 composés



FigureIII-14 : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 113 composés



FigureIII-15 : droite de Henry des valeurs résiduelles de Tf pour 113 composés

L'équation de la régression des valeurs prédites de la température de fusion Tf par rapport aux valeurs expérimentales pour les 113 hydrocarbures de la base de donnée, a une tendance linéaire de forme : $y = 1.0111x + 7.1635$, son coefficient de régression est $R^2 = 0.6744$. La figure III-13 représente les valeurs des températures de fusion prédites en fonction des valeurs expérimentales pour les 113 hydrocarbures, on remarque que le coefficient de régression est faible par rapport à celui déterminé pour la température d'ébullition.

b) Pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés) :

Tableau III -4- Résultats de régression de Tf pour les familles linéaires et ramifiés (68 composés) :

<p>b.1.L'équation de régression est :</p> <p>Tf(exp) = 4499 - 235 MW - 91 AMW + 4812 SV + 6165 Se - 1372 Sp + 3.7 Ss- 4891 Mv - 0.028 Me - 2632 Mp - 96 Ms - 6582 nAT + 2.43 nBT+ 5.55 RBN - 74.9 RBF</p>		
S = 18.55	R-carré = 62.7%	R-carré (ajust) = 52.8%

b.2. Analyse de variance

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	14	30585.1	2184.6	6.35	0.000
Erreur résid	53	18230.8	344.0		
Erreur pure	28	3585.9	128.1		
Total	67	48815.9			

b.3. Représentation graphique :

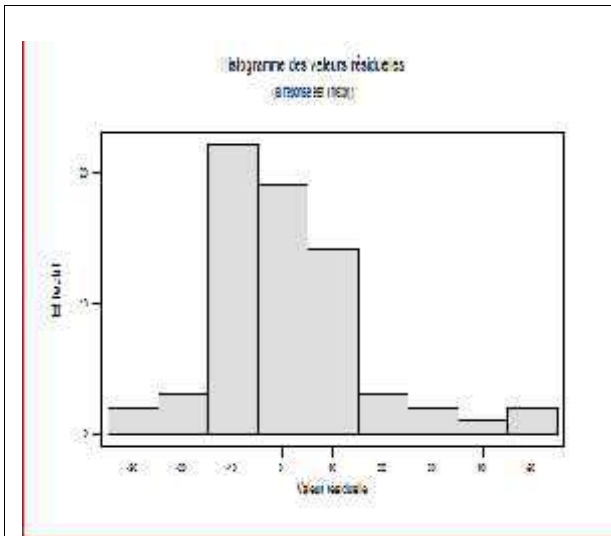


Figure III-16 Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour 68 composées (ramifié et linéaire)

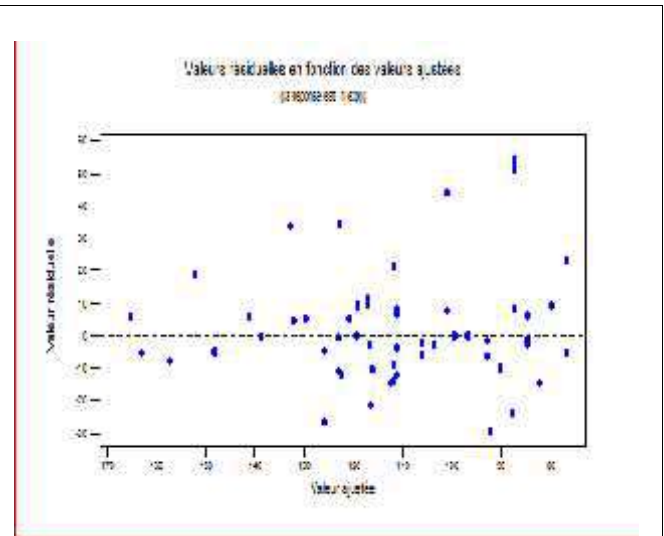


Figure III-17 :valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 68 composées (ramifié et linéaire)

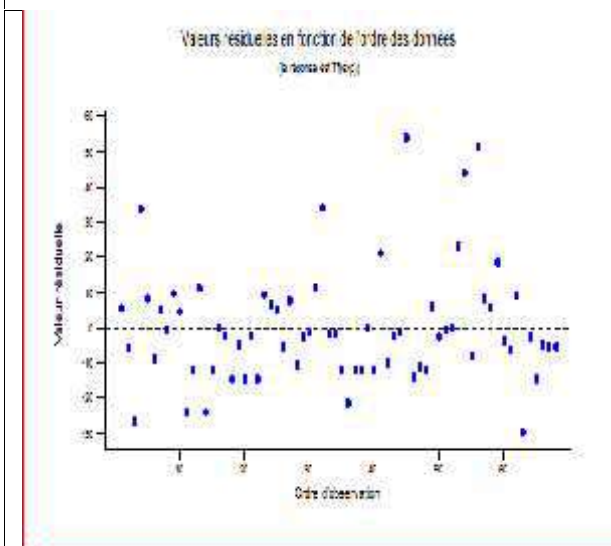


Figure III-18 : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 68 composées (ramifié et linéaire)

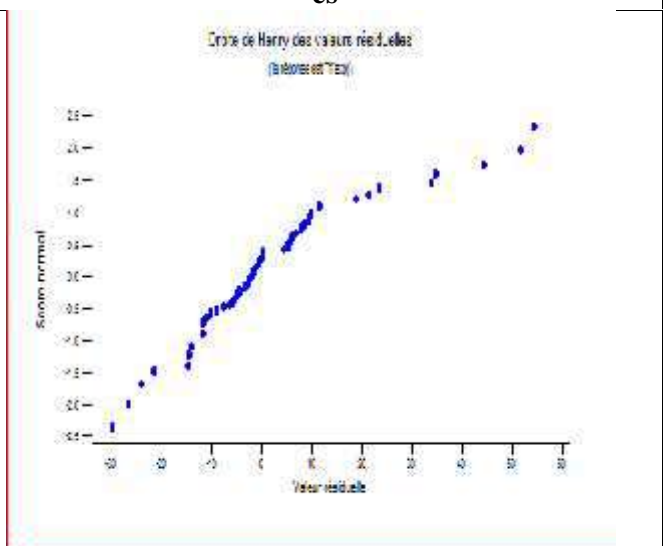


Figure III-19 :droite de henry des valeurs résiduelles de Tf 68 composées (ramifié et linéaire)

Pour la température de fusion, l'équation de la régression des valeurs prédites de Tf par rapport aux valeurs expérimentales pour les hydrocarbures de type linéaires et ramifiés est de la forme : $y = 0.9013x - 23.917$, son coefficient de régression est $R^2 = 0.6254$. La figure III-17 représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales pour les HC linéaires et ramifiés, la valeur élevée du coefficient de régression indique est plus faible par rapport à celui déterminé pour Teb.

III.4.Conclusion

Dans ce chapitre nous avons élaboré les modèles QSPR qui prédisent les températures d'ébullition et de fusion par les régressions multilinéaires pour les hydrocarbures constituant la coupe essence C5 à C11, pour toute la base de données puis pour les hydrocarbures de type aliphatique non cyclique (linéaire et ramifiés), l'analyse statistique montre une très bonne validité du modèle de prédiction de Teb pour ces composés ($R^2=99\%$), le modèle est encore valide mais d'une manière moins faible lorsqu'il s'agit de tous les composés constituant la base de données ($R^2=97\%$). Les statistiques montrent une inadéquation des modèles prédits en ce qui concerne la température de fusion que ce soit pour tous les hydrocarbures de la coupe d'essence ou ceux de la famille des hydrocarbures aliphatiques, leurs R^2 sont 67 et 62% respectivement.

Conclusion générale

Conclusion général

Conclusion Général

Notre étude, consiste à développer des modèles mathématiques basée sur des équations QSPR liants les propriétés physicochimiques d'une molécule donnée à sa structure moléculaire. Nous avons pris la coupe de l'essence du pétrole brut qui représente de 25 à 30% de cette coupe. 113 composés de la famille des hydrocarbures ont été répertoriés, de différents types : dont 60% de type aliphatique linéaires et ramifiés, 20% aromatiques et 20% de nature cycliques, après études de la stabilité de ces molécules à l'aide du logiciel Hyperchem, et calcul des descripteurs moléculaires par le logiciel Dragon, les équations de corrélations de la température d'ébullition et de fusion ont été élaborées par le logiciel de statistique Minitab.

L'analyse statistiques montre une très bonne validité du modèle de prédiction de T_{eb} pour les hydrocarbures aliphatiques non cycliques, le coefficient de régression est ($R^2=99\%$), le modèle est encore valide mais d'une manière moins faible lorsqu'il s'agit des 113 composés constituant la base de données de la coupe d'essence ($R^2=97\%$).

Les statistiques montrent une inadéquation des modèles prédits en ce qui concerne la température de fusion que ce soit pour tous les hydrocarbures de la coupe d'essence ou ceux de la famille des hydrocarbures aliphatiques, leurs R^2 sont 67 et 62% respectivement.

***Références
bibliographiques***

Références bibliographiques

Références bibliographiques


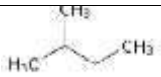


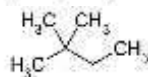

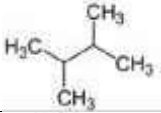

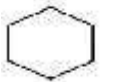


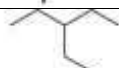
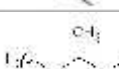

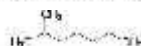

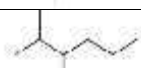
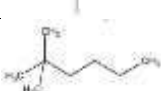


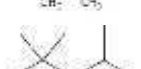
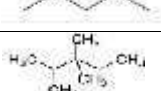
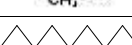
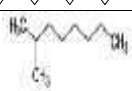
- 01 **J.P.WANQUIER**:pétrole, brut produit pétroliere;shéma de fabrication.Edition technique 1994.
- 02 Dictionnaire du pétrole ,Paris France 1980.Edition SCM92081collectin ISBN2-201-133-19.
- 03 BOOK of ASTM and TBP standards part(17) décembre 1968
- 04 **Moletta R.** (2002), *Gestion des problèmes environnementaux dans les industries agroalimentaires*, Lavoisier, Tec&Doc, Paris.
- 05 **Lejeune M .**, Statistiques . la théorie et ses applications. Springer-Verlag, Paris, 2004.
- 06 www.Support.minitab.com
- 07 **Guillaume F.**, Développement de Modèles QSPR pour la Prédiction desPropriétés d'Explosibilité des Composes Nitroaromatiques. 2010,59-60.
- 08 **Denise Y., Yoram C., Gabriela E., Alex A., Francesc G. J.**, Chem. Inf. ComputSci.2002-42,163,183
- 09 **GHAOUES SOUHEILA.** (2011). Evaluation de la qualité physico-chimique et organoleptique de cinq marques de laits reconstitués partiellement écrémés commercialisés dans l'est Algérien 2010/2011, Mémoire de Magister Université Hadj Lakhdar Batna. p50.
- 10 **Fabiana A. de L. R., Marcia M. C. Ferreira.**, QSPR models of boiling point, octanol–water partition coefficient and retention time index of polycyclic aromatic hydrocarbons. J. M. Structure (Theochem) .2003 ,663, 109–126.
- 11 IUPAC., Pure and Applied Chemistry. 2002 ,74, 1823–1830.
- 12 **Neely.**, Partition Coefficients to Measure Bioconcentration Potential of Organic Chemicals in Fish. Environ. Sci. Technol. 1974, 8, 1113-1115.
- 13 **SOUYEI B.**, contribution à la prédiction de coefficient de partage Octanol/eau par la technique QSPR. 2007, 64 -68.
- 14 **Chessel D., Thioulouse J., Dray S.**, Co-inertia Analysis and the Linking of Ecological Tables. Ecology. 2003, 84 ,3078-3089.
- 15 **REGADI D.**, Développement de modèle QSPR pour la prédiction des propriétés physique des quelques composés . 2013,17-18

Références bibliographiques






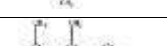
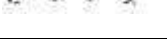

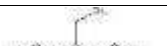
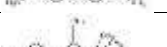


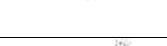






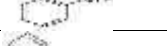




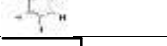
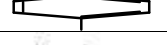
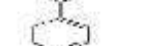
- 16 **Hossein A .**,Instrumental Analysis and Forensic Chemistry.29-08-2013.
- 17 Searching scientific literature directly with Chem Draw v14 Chemistry World .
29 July 2014.
- 18 **Allen M. P., Tildesley D.J.**, Computer stimulation of liquids .Oxford . 1987.
- 19 [http: \\internet\www.chemcad.com.htm](http://internet/www.chemcad.com.htm).
- 20 **Afnor.**, Qualité de l'air-Mesurage de l'odeur d'un effluent gazeux.
Méthodes supraliminaires, NF X 43-103.

Annexe

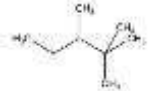
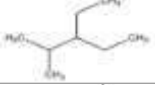
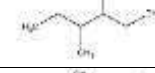
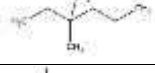
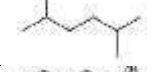
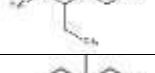
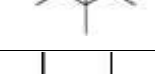

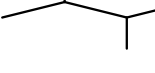
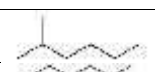
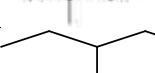
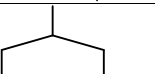
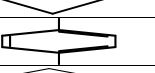
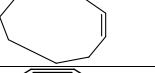
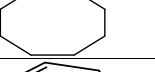

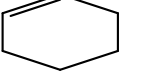
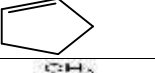

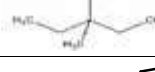
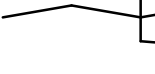

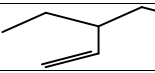

Annexe

N°	Composé	Formule brute	Téb(°C)	Tf(°C)	Mw(g/mol)	Formule Simplifiée
1	n-pentane	C ₅ H ₁₂	36.06	-129	72.1488	
2	2-méthylbutane	C ₅ H ₁₂	28	-159.9	72.1488	
3	2.2-Diméthylpropane	C ₅ H ₁₂	9.5	-16.6	72.1488	
4	n-Hexane	C ₆ H ₁₄	68.73	-95.3	86.1754	
5	2.2-Diméthylbutane	C ₆ H ₁₄	49.73	-98	86.1754	
6	2-méthylpentane	C ₆ H ₁₄	60.26	-153	86.1754	
7	2.3-Diméthylbutane	C ₆ H ₁₄	57.9	-128.8	86.1754	
8	Cyclopentane	C ₅ H ₁₀	49.2	-93.9	72.1488	
9	Cyclohexane	C ₆ H ₁₂	80.75	6.47	84.1595	
10	n-heptane	C ₇ H ₁₆	98.42	-91	100.2019	
11	2.2-Diméthylpentane	C ₇ H ₁₆	79	-123	100.2019	
12	3-éthylpentane	C ₇ H ₁₆	93	-118.75	100.2019	
13	3-méthylpentane	C ₆ H ₁₄	62.9	-162.8	86.1754	
14	n-octane	C ₈ H ₁₈	125.1	-57.1	114.23	
15	2-Méthylheptane	C ₈ H ₁₈	116.8	-112	114.23	
16	3-méthylheptane	C ₈ H ₁₈	118	-122	114.23	
17	2.3-diméthylhexane	C ₈ H ₁₈	115	-110	114.23	
18	2.2-diméthylhexane	C ₈ H ₁₈	106	-121	114.23	
19	4-méthylheptane	C ₈ H ₁₈	117	-121	114.23	
20	2.4-diméthylhexane	C ₈ H ₁₈	109	-123.23	114.23	
21	2.2.4-triméthylpentane	C ₈ H ₁₈	99.30	-107.38	114.23	
22	2.3.3-triméthylpentane	C ₈ H ₁₈	114.4	-102	114.23	
23	n-nonane	C ₉ H ₂₀	150.81	-51	128.26	
24	2-méthyloctane	C ₉ H ₂₀	143.28	-80.4	128.26	

Annexe

25	3-méthyl-octane	C_9H_{20}	144.2	-108	128.26	
26	4-méthyl-octane	C_9H_{20}	142.4	-113	128.26	
27	2,2-diméthylheptane	C_9H_{20}	132.7	-113	128.26	
28	2,3-diméthylheptane	C_9H_{20}	140.5	-116	128.26	
29	2,4-diméthylheptane	C_9H_{20}	132.9	-111.96	128.26	
30	3,3-diéthylpentane	C_9H_{20}	146.3	-33.1	128.26	
31	4-éthylheptane	C_9H_{20}	141.2	-96.96	128.26	
32	2,2,3-triméthylhexane	C_9H_{20}	133.6	-96.96	128.26	
33	Decane	$C_{10}H_{22}$	173.8	-30.5	142.29	
34	3-méthyl-nonane	$C_{10}H_{22}$	167.8	-84.86	142.29	
35	2-méthyl-nonane	$C_{10}H_{22}$	166.85	-71.65	142.29	
36	5-méthyl-nonane	$C_{10}H_{22}$	165.1	-86.8	142.29	
37	4-méthyl-nonane	$C_{10}H_{22}$	165.7	-101.62	142.29	
38	Toluène	C_7H_8	111	-95	92.14	
39	Pentene	C_5H_{10}	30	-165.2	70.14	
40	p-xylene	C_8H_{10}	138.35	13.2	106.17	
41	o-xylene	C_8H_{10}	144.4	-24	106.17	
42	n-propylbenzene	C_9H_{12}	159	-99.6	120.20	
43	Hexene	C_6H_{12}	63.48	-139.76		
44	Heptene	C_7H_{14}	94	-119	98.19	
45	Ethylbenzene	C_8H_{10}	136	-95	106.17	
46	Benzène	C_6H_6	80.1	5.5	78.111	
47	4-éthyltoluène	C_9H_{12}	162	-96	120.20	
48	Cumène	C_9H_{12}	152	-96	120.20	
49	2,2,4-triméthylhexane	C_9H_{20}	126.5	-120	128.26	
50	2,2,5-triméthylhexane	C_9H_{20}	124	-106	128.26	
51	2,2,3,3-tetraméthylbutane	C_8H_{18}	106	98	114.23	
52	2,3,4-triméthylpentane	C_8H_{18}	113.4	-109.7	114.23	



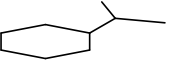
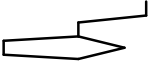

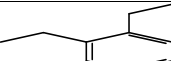






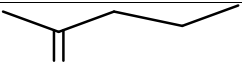
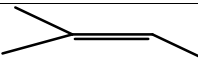


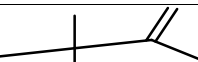
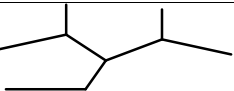
Annexe

53	2.2.3-triméthylpentane	C_8H_{18}	109.85	-100.7	114.23	
54	3-éthyl-2-méthylpentane	C_8H_{18}	115.65	-123.23	114.23	
55	3.4-diméthylhexane	C_8H_{18}	118	-123.23	114.23	
56	3.3-diméthylhexane	C_8H_{18}	112.66	-123.23	114.23	
57	2.5-diméthylhexane	C_8H_{18}	108.1	-93	114.23	
58	3-ethylhexane	C_8H_{18}	119	-123.23	114.23	
59	3.3-diméthylpentane	C_7H_{16}	86	-135	100.2019	
60	2.4-diméthylpentane	C_7H_{16}	80.51	-120	100.2019	
61	2.3-diméthylpentane	C_7H_{16}	90	-135	100.2019	
62	2-méthylhexane	C_7H_{16}	89.6	-119	100.2019	
63	3-méthylhexane	C_7H_{16}	91.6	-119.4	100.2019	
64	3-méthylpentane	C_6H_{14}	62.9	-162.8	86.18	
65	méthylcyclohexane	C_7H_{14}	101	-126.3	98.19	
66	p-xylene	C_8H_{10}	138.35	12.85	106.05	
67	cyclononène	C_9H_{16}	106	-80.14	124.23	
68	cyclooctène	C_8H_{14}	148	-16	110.20	
69	cycloheptène	C_7H_{12}	112	-9.95	96.17	
70	cyclohexène	C_6H_{10}	82.98	-103.5	82.143	
71	cyclopentène	C_5H_8	44	-135	68.11	
72	m-xylene	C_8H_{10}	139	-48	106.16	
73	3-éthyl-3-méthylpentane	C_8H_{18}	118.28	-91	114.23	
74	3.3-diéthylpentane	C_9H_{20}	146.3	-33.1	128.26	
75	2.4.4-triméthyl-2-pentène	C_8H_{16}	104.91	-106.31	112.24	
76	3-éthyl-1-pentène	C_7H_{14}	84.11	-127.48	98.21	

Annexe

77	3-éthyl-o-xylene	$C_{10}H_{14}$	193.69	-49.51	134.24	
78	3-méthyl-1-pentene	C_6H_{12}	54.18	-152.95	84.18	
79	3-méthyl-1-butene	C_5H_{10}	20.05	-168.48	70.15	
80	4-éthyl-m-xylene	$C_{10}H_{14}$	188.4	-62.88	134.24	
81	4-éthyl-o-xylene	$C_{10}H_{14}$	189.78	-66.93	134.24	
82	4-méthyl-pentene	C_6H_{12}	53.86	-153.64	84.18	
83	5-éthyl-m-xylene	$C_{10}H_{14}$	183.78	-84.33	134.24	
84	butylcyclohexane	$C_{10}H_{20}$	180.85	-74.73	140.3	
85	m-diéthylbenzene	$C_{10}H_{14}$	181.13	-83.89	134.24	
86	m-ethyltoluene	C_9H_{12}	161.33	-95.54	120.21	
87	o-éthyltoluene	C_9H_{12}	165.18	-80.8	120.21	
88	p-diéthylbenzene	$C_{10}H_{14}$	183.78	-42.82	134.24	
89	p-ethyltoluene	C_9H_{12}	162	-62.32	120.21	
90	propylcyclohexane	C_9H_{18}	156.74	-49.9	126.27	
91	1.1-diméthylcyclohexane	C_8H_{16}	119.55	-33.49	112.24	
92	1.1-diméthylcyclopentane	C_7H_{14}	87.35	-69.79	98.21	
93	butylcyclopentane	C_9H_{18}	156.6	-107.97	126.27	
94	cyclononane	C_9H_{18}	158.65	-9.95	98.21	
95	cycloheptane	C_7H_{14}	172.22	-80.9	126.27	

Annexe

96	cyclooctane	C_8H_{16}	150.69	14.83	112.24	
97	éthyl-cyclopentane	C_7H_{14}	163.18	-93.6	98.21	
98	isopropylcyclohexane	C_9H_{18}	156.76	-89.39	126.27	
99	isopropylcyclopentane	C_8H_{16}	121.38	-111.36	112.24	
100	propylcyclopentane	C_8H_{16}	130.96	-33.21	112.24	
101	1,2-diéthylbenzene	$C_{10}H_{14}$	183.45	-25.36	134.24	
102	1,2,3-triméthylbenzene	C_9H_{12}	176.12	-6.75	120.21	
103	1,2,3,4-tétraméthylbenzene	$C_{10}H_{14}$	205.04	-23.69	134.24	
104	1,2,3,5-tétraméthylbenzene	$C_{10}H_{14}$	198	-43.82	134.24	
105	1,2,4-triméthylbenzene	C_9H_{12}	169.38	-53.53	120.21	
106	2-éthyl-p-xylène	$C_{10}H_{14}$	186.83	-102.87	134.24	
107	2-méthyl-1-hexène	C_7H_{14}	19.84	-135.73	98.21	
108	2-méthyl-1-pentène	C_6H_{12}	62.1	-133.76	84.18	
109	2-méthyl-2-butène	C_5H_{10}	38.55	-114.95	70.15	
110	2-méthyl-3-éthylpentane	C_8H_{16}	115.61	-99.57	114.25	
111	2,2-diméthyl-3-éthylpentane	C_9H_{18}	133.84	-109.85	128.29	
112	2,3,3-triméthylbutène	C_7H_{14}	77.3	-122.36	56.76	
113	2,4-diméthyl-3-éthylpentane	C_9H_{18}	136.72	-89.39	121.38	

Annexe
