

Université KASDI-MERBAH Ouargla

Faculté des sciences appliquées

Département de Génie des Procédés



Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et technologies.

Filière : Industries pétrochimiques.

Spécialité : Génie du Raffinage.

Présenté par :

- DERGHOUM Nabil
- ARBAOUI Mohammed Nadir

Thème :

Modélisation par QSPR, des températures d'ébullition et de fusion des hydrocarbures issus du raffinage du pétrole dans les coupes de kérosène

Soutenu publiquement le : 06/07/2019

Devant le jury composé de :

Mr. BEN CHEIKH Kamel	MAA	President	UKM Ouargla.
Mr. ATTIA Abbas	MAA	Examineur	UKM Ouargla.
Mr. HADJ SEYD Abdelkader	MCA	Rapporteur	UKM Ouargla.

Année universitaire : 2018/2019

Remerciements

Tout d'abord, merci à Dieu qui

Grâce à lui, ce travail modeste a été accompli.

Cette fin de la présente mémoire d'étude, aujourd'hui ne peut pas être sans

La contribution de tant de personnes est ce que je fais aujourd'hui

C'est un plaisir et un devoir de les remercier.

Cordialement et respectueusement à l'estimé superviseur,

Mr : HADJ SEYD Abdelkader, pour son aide et ses conseils précieux.

Aussi les membres du jury qui nous ont honorés pour avoir accepté le verdict.

*Mes sincères remerciements aux professeurs du département de génie des
procédés.*

Nous voudrions remercier M. MERIBAI Djamel et tous les travailleurs

De RHMD2

*Nous n'oublierions pas M. Alberto qui nous a donné la licence de logiciel
AlvaDesc*

Et toute personne qui a

Contribué au développement de ce travail.



DEDICACES

Je dédie ce fruit de tant d'années d'études :

A ceux qui ont consacré toute leurs vies pour la

Réussite de leurs enfants, mes chers parents ma mère et

Mon père

A mes chers frères : Omar, Khaled, Hamza, Ismail,

Et Abd-Esalem.

A mes très chères sœurs : Meriem, Sabah, Wahiba, Zineb, et Nouara.

A ma famille : Nom de famille DERGHOUM en générale

*A tous mes chers amis : Mehdi, Aymen, Reda, Kader, Bachir,
Chiheb, Housseem, Djihed, Anis, Salim, et Mourad*

*A mon binôme qui a été très coopératif et compréhensif tout le long de
La réalisation de ce travail : Mohammed Nadir*

Et A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

DERGHOUM Nabil





DEDICACES

Je dédie ce fruit de tant d'années d'études :

*A ceux qui ont Consacré toute leurs vies pour la
Réussite de leurs enfants, mes chers parents.*

A mes chers frères : Aymen, Khaled,

A ma famille : Nom de famille ARBAOUI en générale

A tous mes chers amis

*A mon binôme qui a été très coopératif et compréhensif tout le long de
la réalisation de ce travail : Nabil.*

Et A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

ARBAOUI Med-Nadir





Sommaire

Remercîment

Dedicace

Sommaire	I
Liste des tableaux	IV
Liste des figures	V
Abréviations	VIII
Introduction générale	1

Chapitre I : Recherche Bibliographique

I.1. Pétrole brut	2
I.1.1 Définition	2
I.1.2. Origine et formation du pétrole brut	2
I.1.3. Classification des pétroles bruts	2
I.1.3.1. Classification industrielle	2
I.1.3.2. Classification chimique	3
I.1.3.3. Classification économique (technologique)	3
I.1.4. Composition	3
I.2. Le raffinage du pétrole brut	4
I.2.1. Définition	4
I.2.2. Les différentes opérations de raffinage du pétrole brut	4
I.2.2.1. Le dessalage du pétrole brut	4
I.2.2.2. La distillation atmosphérique	5
I.2.2.3. La distillation sous vide	5
I.2.2.4. Amélioration de la qualité des coupes fabrication des bases	5
I.2.2.4.1. Obtention d'essences à haut indice d'octane	5
I.2.2.4.2. Conversion des coupes lourdes en coupes plus légères	6
I.2.2.4.3. Elimination du soufre	6
I.3. Les principales fractions pétrolières	6
I.3.1 Les gaz de pétrole liquéfiés (GPL)	6
I.3.2. Le propane	6
I.3.3. Le butane	7
I.3.4. Les essences	7
I.3.5. Le carburéacteur (kérosène)	7
I.3.6. Le gazole	7
I.4. Principales propriétés des pétroles et des fractions pétrolières	8
I.4.1. Masse moléculaire	8
I.4.2. Densité	8
I.4.3. Viscosité	9
I.4.3.1. Viscosité dynamique	9
I.4.3.2. Viscosité cinématique	9
I.4.4. Le facteur de caractérisation (KU.O.P)	10
I.4.5. La tension de vapeur Reid (T.V.R)	10
I.4.6. La distillation (T.B.P)	11

I.4.7. La distillation (A.S.T.M)	12
I.5. Corrélations et prédiction des propriétés physicochimiques du pétrole	14
I.5.1. Définition	14
I.5.2. Importance de corrélation	14
I.5.3. Type de corrélation	15
I.5.3.1. Type I	15
I.5.3.2. Type II	15
I.5.3.3. Type III	15
I.5.4. Facteur de corrélation (R2)	16
I.5.5. Exemples de quelques corrélations	16

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.1 Présentation de la raffinerie de Hassi Messaoud (RHM2)	17
II.1.1. Historique sur la raffinerie RHM2	17
II.1.2. Principales installations de RHM2	17
II.1.2.1. Section de distillation atmosphérique "Topping" U200	17
II.1.2.2. Section prétraitement du Naphta U300	18
II.1.2.3. Section Reforming catalytique U800	18
II.1.2.4. Section de stockage U900	18
II.1.3. Service contrôle	19
II.1.3.1. Le rôle de ce service	19
II.1.3.2. Laboratoire	20
II.1.3.3. Techniques d'analyses	20
II.1.3.3.1. Mesure de la densité	20
II.1.3.3.2. Tension de vapeur	21
II.1.3.3.3. Point éclair –Luchaire	21
II.1.3.3.4. Distillation ASTM	21
II.1.3.3.5. Salinité	23
II.1.3.3.6. Mesure de Chlore	23
II.1.3.3.7. Mesure de ph	23
II.1.3.3.8 Couleur	23
II.1.3.3.9. L'indice d'octane	23
II.1.4. Les familles d'Hydrocarbures qui existent dans les coupes étudiées	24
II.1.4.1. Fraction kérosène	24
II.2. Les relations structure-propriétés quantitatives "QSPR"	25
II.2.1. -Définition de QSPR	25
II.2.2. Principe de la QSPR	25
II.2.3. - Les méthodes mathématiques utilisés par le model QSPR	25
II.3. Descripteurs moléculaires	26
II.3.1. Définition d'un descripteur	26
II.3.2. Importance des descripteurs	26
II.3.3. Différents types des descripteurs moléculaires	26
II.3.4. - Les descripteurs utilisés	27
II.4. Les prédictions	28

II.4.1. Etapes d'élaboration des prédictions	28
II.4.2. L'objectif de la prédiction	29
II.5. Les étapes de travail	29
II.6. Base des données	30
II.7. Logiciels utilisés	31
II.7.1. Chem office 2008	31
II.7.2. HyperChem 7.5	32
II.7.3. AlvaDesc v.1.0.8	33
II.7.4. Logiciel Minitab	34

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1. Introduction	36
III.2. Elaboration de la base de données	36
III.3. Résultats de régression	37
III.3.1. Pour la température d'ébullition	37
A- Pour tous les composés (1197 composés)	37
B- Pour les composés Aliphatiques (720 composés)	39
C- Pour les composés Cycliques (477 composés)	42
III.3.2. Pour la température de Fusion (T.Fusion)	44
A- Pour tous les composés (696 composés)	44
B- Pour les composés Aliphatiques (430 composés)	47
C- Pour les composés Cycliques (266 composés)	50
III.4. Conclusion	53
Conclusion générale	54
Références Bibliographiques	56
Annexe	58
Résumé	

Liste des tableaux

Tableau		Page
I-1	Quelques exemples de corrélations.	16
II-1	Rendement annuel de l'unité de distillation atmosphérique U200.	18
II-2	Données de la distillation ASTM D86 des fractions pétrolières de RHM2.	23
II-3	Coupes d'hydrocarbures existents dans les fractions pétrolières.	24
II-4	Présentation de composé de différentes dimensions.	27
III-1	Résultats de régression de Té _b pour les 1197 composés.	37
III-2	Résultats d'Analyse de variance de Té _b pour les 1197 composés.	37
III-3	Résultats de régression de Té _b pour les 720 composés.	39
III-4	Résultats d'Analyse de variance de Té _b pour les 720 composés.	39
III-5	Résultats de régression de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	42
III-6	Résultats d'Analyse de variance de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	42
III-7	Résultats de régression de Tf pour les 696 composés.	44
III-8	Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 696 composés.	45
III-9	Résultats de régression de Tf pour les 430 composés.	47
III-10	Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 430 composés.	47
III-11	Résultats de régression de Tf pour les 266 composés Cycliques.	50
III-12	Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 266 composés Cycliques.	50

Liste des tableaux

Liste des figures

Figure		Page
I-1	Processus de raffinage du pétrole brut.	04
I-2	Principaux produits pétroliers, intervalles de température d'ébullition et de nombre d'atomes de carbone.	08
I-3	Bombe de Reid pour la mesure de la (T.V.R) des essences.	11
I-4	Appareil de distillation (T.B.P).	12
I-5	Appareillage de distillation (A.S.T.M).	13
I-6	Courbe de distillation (A.S.T.M).	14
I-7	Diagramme des Différents types de corrélations.	15
II-1	Laboratoire central de RHM2.	19
II-2	Paillasse de laboratoire.	20
II-3	Appareil de mesure de la TVR.	21
II-4	Dispositif de mesure du point éclair.	22
II-5	Diagramme des descripteurs utilisés.	27
II-6	Diagramme de prédiction par QSPR.	28
II-7	Cycle d'optimisation du modèle.	29
II-8	Diagramme des étapes de travail.	30
II-9	Exemple réalisation de la structure de la molécule ((1E) -1-Methylcyclodecene).	31
II-10	Exemple d'un composé ((1E) -1-Butylidene-2-methylcyclohexane) après sa modélisation par l'HyperChem.	32
II-11	Interface du logiciel AlvaDesc.	33
II-12	Liste des descripteurs du composé ((1E) -1-Butylidene-2-methylcyclohexane) calculé par AlvaDesc.	34
II-13	Interface de calcul par Minitab pour générer l'équation de régression.	35
III-1	Familles des hydrocarbures étudiés.	36
III-2	Histogramme des valeurs résiduelles de Té _b pour 1197 composées.	37
III-3	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Té _b pour 1197 composées.	38

Liste des Figures

III-4	: valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té _b pour 1197 composées.	38
III-5	Droite de Henry des valeurs résiduelles de Té _b pour 1197 composées.	38
III-6	Courbe de tendance de Té _b calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 1197 composés.	39
III-7	Histogramme des valeurs résiduelles de Té _b pour 720 composées Aliphatiques.	40
III-8	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Té _b pour 720 composées Aliphatiques.	40
III-9	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té _b pour 720 composées Aliphatiques.	40
III-10	Droite de Henry des valeurs résiduelles de Té _b pour 720 composées Aliphatiques.	41
III-11	Courbe de tendance de Té _b calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour 720 composées Aliphatiques.	41
III-12	Histogramme des valeurs résiduelles de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	42
III-13	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	43
III-14	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	43
III-15	Droite de Henry des valeurs résiduelles de Té _b pour les 477 composés Cycliques.	43
III-16	Courbe de tendance de Té _b calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 477 composés Cycliques.	44
III-17	Histogramme des valeurs résiduelles de T _f pour 696 composées.	45
III-18	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de T _f pour 696 Composées.	45
III-19	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de T _f pour 696 composées.	46
III-20	Droite de Henry des valeurs résiduelles de T _f pour 696 composées.	46
III-21	Courbe de tendance de T _f calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 696 composés.	47

Liste des Figures

III-22	Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour 430 composées Aliphatiques.	48
III-23	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour 430 composées Aliphatiques.	48
III-24	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 430 composées Aliphatiques.	48
III-25	Droite de Henry des valeurs résiduelles de Tf pour 430 composées Aliphatiques.	49
III-26	Courbe de tendance de Tf calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour 430 composées Aliphatiques.	50
III-27	Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour les 266 composés Cycliques.	51
III-28	Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour les 266 composés Cycliques.	51
III-29	Valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour les 266 composés Cycliques.	52
III-30	Droite de Henry des valeurs résiduelles de Tf pour les 266 composés Cycliques.	52
III-31	Courbe de tendance de Tf calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 266 composés Cycliques.	53

Abréviation

Symboles	Définition
AMW	AVERAGE MOLECULAR WEIGHT
ARR	AROMATIC RATIO
ASTM	AMERICAN SOCIETY FOR TESTING MATERIALS
CIS	Centre Industriel Du Sud
Me	MEAN ATOMIC SANDERSON ELECTRONEGATIVITY (SCALED ON CARBON ATOM)
Mp	MEAN ATOMIC POLARIZABILITY (SCALED ON CARBON ATOM)
MRL	Régression linéaire multiple
Ms	MEAN ELECTROPOLOGICAL STATE
Mv	MEAN ATOMIC VAN DER WAALS VOLUME (SCALED ON CARBON ATOM)
MW	MOLECULAR WEIGHT
nAB	NUMBER OF AROMATIC BONDS
nAT	NUMBER OF ATOMS
nB	NUMBER OF BORON ATOMS
nBM	NUMBER OF MULTIPLE BONDS
nBnz	NUMBER OF BENZENES –LIKE RINGS
nBO	NUMBER OF NOM-H BONDS
nBR	NUMBER OF BROMINE ATOMS
nBT	NUMBER OF BONDS
nC	NUMBER OF CARBON ATOMS
nCIC	NUMBER OF RING
nCIR	NUMBER OF CIRCUITS
nCL	NUMBER OF CHLORINE ATOMS
nDB	NUMBER OF DOUBLE BONDS
nF	NUMBER OF FLUORINE ATOMS
nH	NUMBER OF HYDROGEN ATOMS
nHM	NOMBER OF HEAVY ATOMS
nI	NUMBER OF IODINE ATOMS
nN	NUMBER OF NITROGEN ATOMS
nO	NUMBER OF OXYGEN ATOMS
nP	NUMBER OF PHOSPHOROUS 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

Abréviation

nS	NUMBER OF SULFUR ATOMS
nSK	NUMBER OF NON-H ATOMS
nTB	NUMBER OF TRIPLE BONDS
nX	NUMBER OF HALOGEN ATOMS
PCR	Régression En Composantes Principales
PF	Point Final
PI	Point Initial
PLS	Régression Moindre Carre
QSPR	QUANTITATIVE STRUCTURE PROPERTY RELATIONSHIP
RBF	ROTATABLE BOND FRACTION
RBN	NUMBER OF ROTATABLE BONDS
RHMD2	Raffinerie de HASSI MESSOUD 2
SCBO	SUM OF CONVENTIONAL BOND ORDERS
Se	SUM OF ATOMIC SANDERSON ELECTRONEGATIVITIES (SCALED ON CARBON ATOM)
Sp	SUM OF ATOMIC POLARIZABILITIES (SCALED ON CARBON ATOM)
Ss	SUM OF KIER-HALL ELECTROTOPOLOGICAL STATES
Sv	SUM OF ATOMIC VAN DER WAALS VOLUMES (SCALED ON CARBON ATOM)
TBP	TRUE BOILING POINT
Téb	Température d'ébullition
Tf	Température de fusion

Liste des équations

Équation		Page
[I.1]	La masse molaire moyenne du pétrole	8
[I.2]	La densité légale en France	8
[I.3]	La densité d_4^{15}	9
[I.4]	Les 2 systèmes d'unités est simple puisque	9
[I.5]	La viscosité cinématique	10
[I.6]	Le facteur de caractérisation	10



Introduction
Générale

Le pétrole ou l'or noir est l'une des sources énergétiques les plus utilisées dans le monde. Son utilisation rentre dans plusieurs domaines en plus que combustible le pétrole est la matière première des industries pétrochimiques, pharmaceutiques et autres

Le pétrole brut est raffiné en différentes coupes avant d'être exploité. Les coupes pétroliers (gaz légers, essences lourdes et légers, lubrifiants...). Ces coupes sont soutirées de la colonne de distillation du brut en fonction de leurs températures d'ébullition.

Certaines propriétés sont difficilement accessibles par de mesures expérimentales, parfois on fait recours aux corrélations et à créer des modèles permettent d'estimer les propriétés d'intérêt à partir de données expérimentales disponibles. L'avantage de la simulation est double : gain de temps considérable et réduction du nombre d'expérimentations.

Parmi les méthodes de simulation des propriétés physicochimiques, les méthodes QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) sont devenues très utiles à l'heure actuelle dans la prédiction et l'élaboration des modèles mathématiques pour un éventail de propriétés.

Notre travail s'intéresse à étudier la coupe kérosène qui est située dans l'intervalle de température d'ébullition 180° à 230°C et referme les hydrocarbures de C11 à C12, par modélisation des températures d'ébullitions et de fusion des éléments de cette coupe.

Les

Ce travail est un complément aux travaux de A.Kerkouri et A.Kenani initié en 2018 et qui avait pour but d'élaborer des corrélations empiriques de températures d'ébullition et températures de fusion pour la coupe essence C5-C11, leur base de données contenait 113 éléments.

Dans ce mémoire la base de données compilée pour la coupe kérosène contient 1197 hydrocarbures de différentes familles.

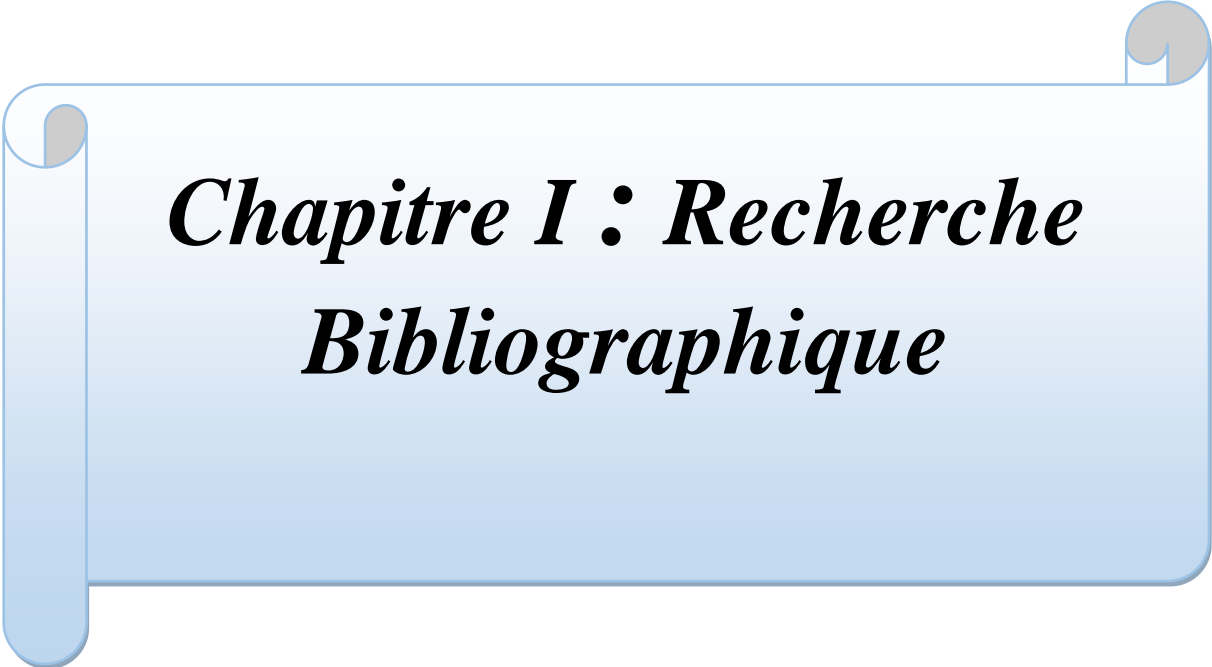
Le mémoire est divisé en trois chapitres

- Le 1^{er} chapitre : contient des notions théoriques sur le raffinage du pétrole brut et les corrélations relatives aux propriétés physicochimiques utilisées.
- Le 2^{ème} chapitre : a été consacré aux matériels et méthodes, il comprend une description succincte de la raffinerie de Hassi Messaoud RHMD2, dans laquelle nous avons effectué un stage pratique de 21 jours au laboratoire de cette unité.

Le chapitre contient aussi détail des méthodes et des logiciels de simulation utilisés.

- Le 3^{ème} chapitre : contient les résultats et discussion ainsi que les recommandations nécessaires afin de valoriser ce travail.

Le travail est terminé par une conclusion.



***Chapitre I : Recherche
Bibliographique***

I.1. Pétrole brut

I.1.1 Définition

Le pétrole vient du mot latin « Petra » pierre et « oléum » huile, soit 'Huile de pierre'. C'est un liquide brun plus ou moins visqueux d'origine naturelle, mélange complexe d'hydrocarbures. Il est considéré comme étant l'un des piliers de l'économie industrielle contemporaine, car il fournit la quasi-totalité des carburants liquides. Le pétrole est aussi souvent appelé « Or noir » en référence à sa couleur et à son coût élevé [1].

D'après le Micro Robert, le Pétrole est défini comme : une huile minérale naturelle (bitume liquide) accumulée en gisements et utilisée comme une source d'énergie, notamment sous forme d'essence [2].

I.1.2. Origine et formation du pétrole brut

Le pétrole, est une roche liquide carbonée, ou huile minérale de couleur variant du vert au brun noir et dégage une odeur caractéristique. C'est parmi les énergies fossiles les plus utilisées dans le monde.

Il s'est formé dans des lagunes peu profondes par décomposition de matières organiques accumulées en milieu anaérobique. Celles-ci se sont transformées en gaz et en liquide plus ou moins visqueux qui est le pétrole ; ces transformations sont très lentes. En raison de sa faible densité, il a tendance à migrer jusqu'à être piégé dans une couche poreuse qui donne alors la roche réservoir, coincée entre deux couches imperméables. C'est là où se trouvent les gisements. [3]

Il existe une grande diversité de pétroles bruts aussi bien du point de vue physique que du point de vue de la composition chimique ce qui entraîne des conditions spécifiques de production, de transport, de stockage et de raffinage selon les pétroles et les produits qui en dérivent, d'où la nécessité d'une connaissance, la plus exacte possible, de leur composition.[4]

I.1.3. Classification des pétroles bruts

A la découverte d'un gisement du pétrole, ce dernier subit une série d'analyse, permettant sa classification. La classification du pétrole est d'une extrême importance car elle nous permet de connaître les méthodes de traitement de ce même pétrole, l'assortiment et les qualités des produits à obtenir [5].

Il est possible de distinguer les différents types de pétrole selon leur densité, leur fluidité, leur teneur en soufre et autres impuretés (vanadium, mercure et sels) et leur teneur différentes classes d'hydrocarbures. Le pétrole est alors paraffinique, naphthénique ou aromatique [6].

Il est aussi possible de les classer parfois selon leur provenance (golfe Persique, mer du Nord, Venezuela, Nigeria), car le pétrole issu de gisements voisins a souvent des propriétés proches.

I.1.3.1. Classification industrielle

Les pétroles sont répartis dans la partie industrielle en : légers, moyens et lourds, déterminés par simple mesure de densité tels que [6] :

Chapitre I : Recherche Bibliographie

- Pétrole léger avec : $d_4^{15} < 0.828$
- Pétrole moyen avec : $0.828 < d_4^{15} < 0.884$
- Pétrole lourd avec : $d_4^{15} > 0.884$

I.1.3.2. Classification chimique

Cette classification divise le pétrole selon la prédominance de l'une des familles d'hydrocarbure, ils peuvent être : [6]

- Paraffiniques
- Naphténiques
- Aromatiques
- Mixtes : Paraffino-aromatiques

I.1.3.3. Classification économique (technologique)

La méthode est basée sur la connaissance de la :

- Teneur potentielle en soufre dans le pétrole et les fractions pétrolières
- Teneur en fractions claires avec PF=350°C.
- Teneur potentielle en fraction d'huiles de base et leurs qualités.
- Teneur en paraffines. [6]

I.1.3.3.a. D'après la teneur en soufre

Les pétroles avec une faible teneur en soufre (inférieure à 0,5% en poids) sont qualifiés de « sweet » ou « doux » ; au-delà, les pétroles sont qualifiés de « Sour » ou « soufrés ». Ceci est important car le soufre est un « polluant-corrosif et poison » que les raffineurs doivent retirer. Ceci a un coût et il diminue donc la valeur du brut [5].

- Classe A : pétrole peu sulfureux % S $\leq 0,5$ %.
- Classe B : pétrole sulfureux $0,5 < \% S < 2$ %.
- Classe C : pétrole très sulfureux % S > 2 %.

I.1.3.3.b. Selon la teneur potentielle en fractions claires PF=350°C

- Teneur élevée PF = 350°C $> 45\%$ (pétrole léger)
- Teneur moyenne entre 30 et 45% (pétrole moyen)
- Teneur faible $< 30\%$ (pétrole lourd). [6]

I.1.4. Composition

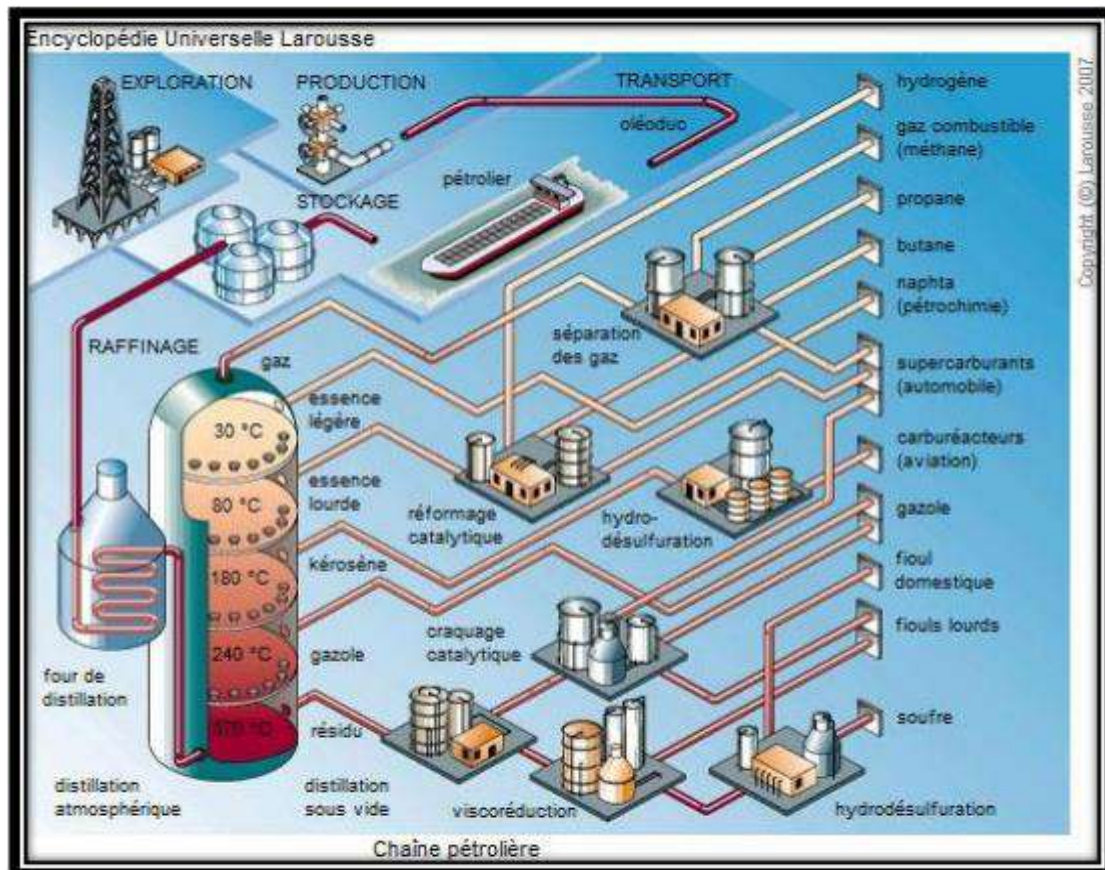
Puisque le pétrole est une matière organique, alors son pourcentage massique en carbone et en hydrogène est dominant, n'empêche que certains éléments métalliques ou non métalliques existent en pourcentage minoritaire tels que : l'azote, l'oxygène, le soufre, le chlore, le calcium, le sodium, le potassium, le silicium, le phosphore, le nickel, le fer ...etc. La composition élémentaire des pétroles bruts se situe dans les limites suivantes :

- Le carbone : 84 - 87% ;
- L'hydrogène : 11 - 14% ;
- L'azote, le soufre, l'oxygène : 0 - 7%. [7]

I.2. Le raffinage du pétrole brut :

I.2.1. Définition

Le raffinage consiste à transformer le pétrole brut en carburants, combustibles, matières premières pour la pétrochimie, ou encore des produits spécifiques tels que les huiles lubrifiantes et les bitumes. Cette transformation est réalisée dans le strict respect des spécifications propres à chaque produit, qui doivent s'adapter sans cesse à l'évolution des marchés et des normes environnementales [8].



(Figure I.1) : Processus de raffinage du pétrole brut. [9]

I.2.2. Les différentes opérations de raffinage du pétrole brut :

Les procédés de fractionnement permettent de séparer un mélange pétrolier en fractions plus simples ou plus étroites. Dans le raffinage, les principaux procédés de séparation sont la distillation atmosphérique du pétrole brut et la distillation sous vide du résidu atmosphérique. [10]

I.2.2.1. Le dessalage du pétrole brut :

Le premier traitement subi par le pétrole brut à son entrée dans la raffinerie est le dessalage qui consiste à éliminer ces contaminants pour réduire la corrosion, le colmatage et l'encrassement des installations et empêcher l'empoisonnement des catalyseurs dans les unités de production. Cette opération est conduite par ajout d'eau au pétrole brut chauffé à 70-90°C pour dissoudre ou fixer à l'eau les sels et les autres impuretés, et comprend la séparation de l'eau à l'aide d'un décanteur soumis à un champ électrique qui favorise la coalescence des gouttes. [11]

I.2.2.2. La distillation atmosphérique :

Le brut est pompé depuis le bac de stockage, dessalé, réchauffé, d'abord par un système d'échangeurs, puis dans un four. Il pénètre dans la colonne de distillation verticale, à des pressions légèrement supérieures à la pression atmosphérique et à une température de l'ordre de 370°C.

Les fractions gazeuses, à cette température, s'élèvent dans la colonne. Un système de refroidissement en tête de colonne va provoquer un échange permanent entre les vapeurs qui montent et les fractions condensées qui descendent. Cet échange permet une bonne séparation des différentes coupes qui sont soutirées de la colonne à différents niveaux en fonction de leurs différentes températures d'ébullition. En tête de colonne sort l'ensemble des gaz et des fractions légères. Une série de petites colonnes assure ensuite la séparation des gaz incondensables (méthane et éthane), du propane, du butane, d'une essence légère utilisable comme naphtha pétrochimique ou comme constituant d'essence auto et d'une essence lourde qui, après transformation, sera pour l'essentiel incorporée dans l'essence auto. Sont soutirés directement de la colonne une coupe kérosène et une coupe gasoil.

Les fractions les plus lourdes du brut qui ne sont pas vaporisées à l'entrée descendent et restent au fond de la colonne et forment un résidu qu'on ne peut plus distiller, même à des températures très élevées. [9]

I.2.2.3. La distillation sous vide :

Le résidu est envoyé dans une seconde colonne de distillation sous vide afin de poursuivre le fractionnement. Cette colonne fonctionne à pression inférieure à la pression atmosphérique, ce qui permet d'abaisser les températures d'ébullition allant de 70 à 350°C. Comme pour la distillation atmosphérique plusieurs fractions sont recueillies à différents niveaux de la colonne. [11]

On récupère en tête de colonne le gazole lourd qui pourra être convertie en produits plus légers et notamment en essence par une opération de craquage catalytique. Le résidu sous vide peut servir de base pour fabrication de fuel lourd ou pour la fabrication des huiles lubrifiantes et des bitumes. [12]

I.2.2.4. Amélioration de la qualité des coupes fabrication des bases :

Le raffinage se déroule en plusieurs étapes unitaires telles que la séparation par distillation en plusieurs coupes, l'amélioration de la qualité de certaines fractions, la transformation des coupes les plus lourdes (conversion par coupure de liaisons C-C) en produits plus légers valorisables et enfin la préparation des produits finaux effectuée par l'optimisation des mélanges. [8]

I.2.2.4.1. Obtention d'essences à haut indice d'octane :

Reformage catalytique :

- Il permet de transformer les n-paraffines et les naphènes de l'essence lourde en aromatiques.

Isomérisation des paraffines :

Elle consiste à transformer les n-paraffines de l'essence légère en iso paraffines.

Alkylation :

Il s'agit d'une réaction d'une oléfine sur un hydrocarbure paraffinique ou aromatique. [13]

I.2.2.4.2. Conversion des coupes lourdes en coupes plus légères :

- Craquage catalytique :

Le procédé de craquage catalytique permet de transformer les distillats sous vide

(C20-C50) en différentes coupes plus légères comme :

- Une coupe du gaz (C3-C4) : très riche en oléfines ;
- Une coupe d'essence : riche en oléfines et en aromatiques ;
- Une coupe de gasoil : de très mauvaise qualité utilisée généralement comme fluxant des fuels lourds. La réaction de craquage est favorisée à haute température et basse pression en présence d'un catalyseur acide. [13]
- La viscoréduction :

La viscoréduction est également un procédé de craquage le plus simple puisqu'il fonctionne sans catalyseur [9]. Elle permet en fait de transformer une faible fraction du résidu ; atmosphérique ou sous vide ; en produits type gaz, essence et gazole. Ces produits sont de mauvaise qualité car riche en oléfines donc instables. [12]

I.2.2.4.3. Elimination du soufre :

- Hydrodésulfuration :

L'élimination du soufre repose sur le traitement catalytique des coupes pétrolières soufrées en présence d' H_2 provenant du reformage catalytique. Le soufre est alors éliminé sous forme d' H_2S gazeux qui est séparé de la coupe pétrolière, met en œuvre un catalyseur métallique constitué de CoMo, NiMo ou NiW déposé sur l'alumine. [13]

I.3. Les principales fractions pétrolières

Les carburants et les combustibles constituent environ 80 % des produits issus du traitement du pétrole dans les raffineries. Le reste est constitué par des produits spécifiques tels que les lubrifiants, solvants, matières premières pour la pétrochimie, etc. Les carburants et les combustibles peuvent être classés en fonction de leurs masses moléculaires ou leurs points d'ébullition. En allant des faibles aux fortes valeurs on distingue les catégories suivantes. [14]

I.3.1 Les gaz de pétrole liquéfiés (GPL)

Les gaz de pétrole liquéfiés sont des mélanges d'hydrocarbures comprenant essentiellement du propane et du butane. [14]

I.3.2. Le propane

Le propane commercial doit être constitué de 90 % au moins de propane et propène. Sa masse volumique doit être égale ou supérieure à 0,502 kg /l à 15 °C et il doit avoir un point d'ébullition final inférieur ou égal à - 15 °C. [14]

I.3.3. Le butane

Le butane doit être composé principalement de butane et butène et contenir moins de 19 % en volume de propane et de propène ; il doit avoir une masse volumique égale ou supérieure à 0,559 kg / l à 15 °C. Le point final d'ébullition du butane commercial doit être égal ou inférieur à 1 °C et sa pression de vapeur relative à 50 °C inférieure à 6,9 bars. [14]

I.3.4. Les essences

On distingue actuellement trois types principaux d'essences-carburants : l'essence ordinaire, le supercarburant et le supercarburant sans plomb. La production des essences, à la fois en quantité suffisante pour satisfaire les besoins du marché et en qualité conforme aux normes, est depuis longtemps le problème principal auquel l'industrie du raffinage doit faire face. [14]

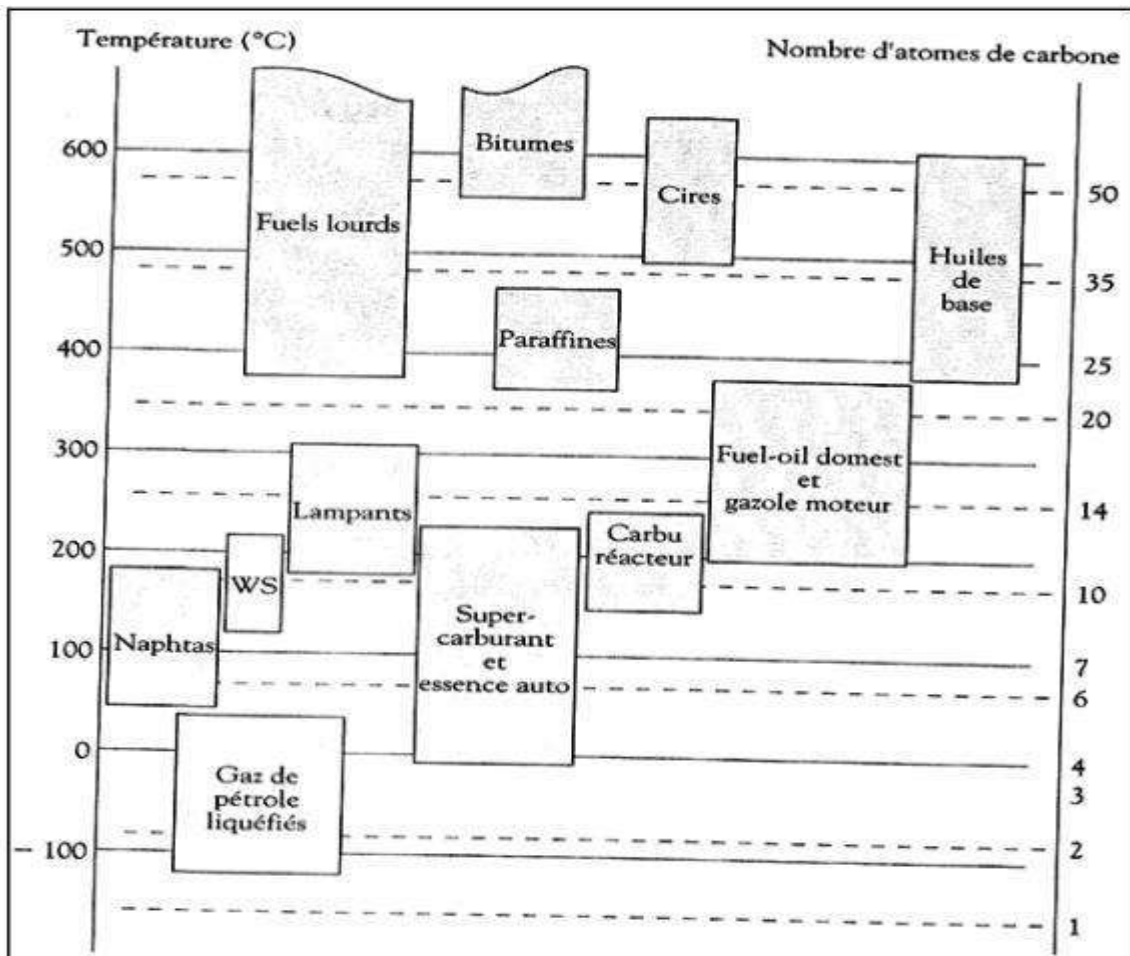
I.3.5. Le carburéacteur (kérosène)

Le carburéacteur est un carburant destiné à l'alimentation des brûleurs des turboréacteurs d'avion. Ces carburéacteurs sont caractérisés par la courbe de distillation, le point de congélation et la teneur en aromatiques. Le carburéacteur destiné à l'aviation civile correspond sur le plan de la distillation, à peu près à l'ancienne coupe dite de "pétrole lampant" distillant entre 200 et 280°C ce qui permet d'avoir un point éclair supérieur à 38 °C. Le point de congélation maximal doit être de - 50 °C et la teneur en aromatiques inférieure ou égale à 20 %. [14]

I.3.6. Le gazole

Le gazole correspond à une fraction dont les limites de distillation sont 190 et 360 °C, 65 % au moins de cette fraction devant distiller avant 250 °C. Une caractéristique importante est le point d'écoulement ou de congélation qui doit être inférieur à - 18 °C en saison froide et pour le reste de l'année inférieur à - 7 °C ; cette condition est nécessaire pour permettre le fonctionnement normal des moteurs.

Un indice de performance adapté au cas du moteur Diesel, rendant compte de l'adaptation du carburant au fonctionnement de ce type de moteur, est l'indice de cétane. [14]



(Figure I.2) : Principaux produits pétroliers, intervalles de température d'ébullition et de nombre d'atomes de carbone. [15]

I.4. Principales propriétés des pétroles et des fractions pétrolières :

I.4.1. Masse moléculaire :

C'est l'une des caractéristiques physico-chimiques essentielles du pétrole et de ses fractions. Le pétrole étant un mélange complexe d'hydrocarbures, Soit (n) le nombre total des constituants chimiques du pétrole ou de la fraction pétrolière ; et soient x_i et M_i respectivement, la fraction molaire et la masse molaire de chaque constituant ; la masse molaire moyenne du pétrole ou de la fraction pétrolière est donnée par la relation simple :

$$M_{\text{mélange}} = \sum_{i=1}^n x_i M_i \quad [I.1]$$

I.4.2. Densité :

Dans l'industrie pétrolière, on utilise la densité relative, comme étant le rapport du poids d'un certain volume d'échantillon à une température T au poids du même volume d'eau à une température standard. Le choix de l'état standard à 4°C permet l'identification des chiffres qui mesurent la densité et la masse volumique. La densité légale en France se mesure à 20°C et à pour symbole :

$$d_4^{20} = \frac{\text{poids d'un volume de produit à } 20^\circ}{\text{poids du même volume d'eau à } 4^\circ} \quad [I.2]$$

Chapitre I : Recherche Bibliographie

Dans les pays anglo-saxons, la mesure de la densité se rapporte à celle de la spécifique gravité par hydromètre, ou celle par pycnomètre. Il faut souligner l'inversion du sens des mots spécifique gravité et densité qui signifient respectivement densité et masse volumique.

La spécifique gravité est définie pour deux températures standard identiques, soit 60°F (environ 15°C) et a pour symbole : sp.gr ou sp.gr.60 /60 ou encore SG. Ainsi il Ya une relation qui relie la SG60/60 à la densité d_4^{15} . Voir la relation suivante :

$$d_4^{15} = 0,99904 \text{ Sp.gr}60/60^{\circ}\text{F} \quad [\text{I.3}]$$

I.4.3. Viscosité :

La viscosité est généralement définie comme étant la caractéristique de la résistance à l'écoulement d'un fluide ; elle intervient dans tous les phénomènes liés à l'écoulement des fluides :

- Pertes de charge dans les tuyauteries.
- Écoulement dans les vannes, les soupapes et tous les types de restrictions.
- Pompage.
- Filtration – décantation.

La viscosité est d'autant plus grande que la résistance à l'écoulement est élevée et, en raison des différentes méthodes de mesure utilisées pour la déterminer, on distingue deux types de viscosité : **la viscosité dynamique** et **la viscosité cinématique**.

I.4.3.1. Viscosité dynamique :

La viscosité dynamique notée μ (Mû), appelée encore viscosité absolue, c'est l'effet de la traduction des interactions moléculaires au sein d'un fluide en mouvement. Traditionnellement, la viscosité dynamique était exprimée en poises (P) ou en centpoises (cP). Elle est maintenant mesurée dans le système international d'unités en pascal-seconde (Pa.s). En pratique, la correspondance entre les 2 systèmes d'unités est simple puisque le centpoise correspond exactement à la milli pascal seconde (mPa.s).

$$1 \text{ cP} = 1 \text{ mPa.s} = 0,001 \text{ Pa.s} \quad [\text{I.4}]$$

La viscosité dynamique μ des liquides peut être mesurée par exemple à l'aide de viscosimètres rotatifs dont le principe de fonctionnement repose sur la mesure du couple résistant lié à la mise en rotation d'un mobile tournant au sein de l'échantillon à analyser. [16]

I.4.3.2. Viscosité cinématique

La viscosité cinématique notée ν , c'est le rapport de la viscosité dynamique par la masse volumique d'un fluide. D'utilisation courante pour les liquides, elle prend en compte la masse volumique ρ du fluide à la même température. Cette dernière intervient chaque fois que l'on détermine une viscosité en mesurant un temps d'écoulement sous charge, c'est-à-dire le temps mis par un liquide pour s'écouler à travers un orifice sous l'action de son propre poids. On conçoit en effet que le temps obtenu dépend non seulement de la viscosité propre du liquide mais aussi de sa densité. [16]

Chapitre I : Recherche Bibliographie

La viscosité cinématique est obtenue à partir de la viscosité dynamique par la formule suivante :

$$\text{Viscosité cinématique} = \frac{\text{viscosité dynamique } \mu}{\text{masse volumique } \rho} \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} \quad [I.5]$$

I.4.4. Le facteur de caractérisation ($K_{U.O.P}$) :

Les chercheurs Nelson Watson et Murphy de la société : (U.O.P) United Oil Products a proposé une formule simple pour caractériser les différentes familles des hydrocarbures en calculant un facteur ($K_{U.O.P}$) dit facteur de caractérisation qui permet la classification des bruts selon le critère (P.O.N.A). [7]

$$K_{U.O.P} = \frac{\sqrt[3]{T^{\circ}(R)}}{Sp.Gr(60^{\circ}F/60^{\circ}F)} \quad [I.6]$$

$T^{\circ}(R)$ est la température d'ébullition du brut en degré Rankine.

Exemples :

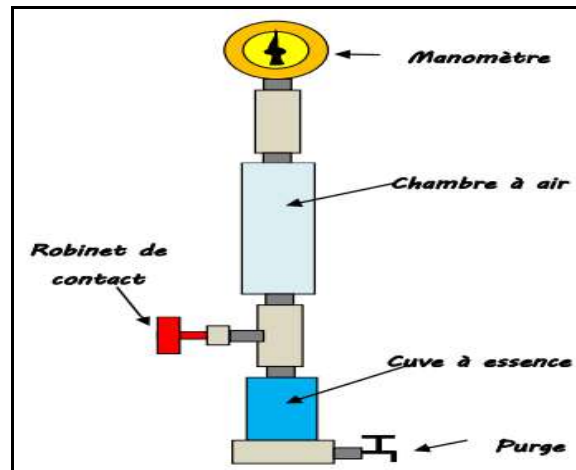
- $K_{U.O.P} = 13$ le pétrole contient des hydrocarbures paraffiniques normaux et iso.
- $K_{U.O.P} = 12$ le pétrole contient des hydrocarbures mixtes ou le cycle et la chaîne sont équivalents.
- $K_{U.O.P} = 11$ le pétrole contient des hydrocarbures naphthéniques purs ou aromatiques peu substitués.
- $K_{U.O.P} = 10$ le pétrole contient des hydrocarbures aromatiques purs.

I.4.5. La tension de vapeur Reid (T.V.R)

La tension de vapeur d'un hydrocarbure pur mesure la tendance des molécules à s'échapper de la phase liquide pour construire une phase vapeur en équilibre avec la phase liquide ; la tension de vapeur est une fonction de la température. La tension de vapeur Reid (T.V.R) mesure la teneur en fractions légères dans l'essence et caractérise sa volatilité et les pertes au cours du transport et du stockage ; elle est mesurée en bar ou en kg/cm². (1bar=0,981kg/cm²).

La (TVR) est la pression développée par une essence placée à (37,8°C) dans un appareil clos appelé bombe de Reid. On remplit la cuve d'essence et on la met en contact avec la chambre à air ; on agite l'ensemble et on place la bombe de Reid dans un bain Marie à ; lorsque l'équilibre est atteint on lit la pression indiquée par le manomètre ; cette valeur correspond à la (TVR) de l'essence emprisonnée. (Fig.I.3).

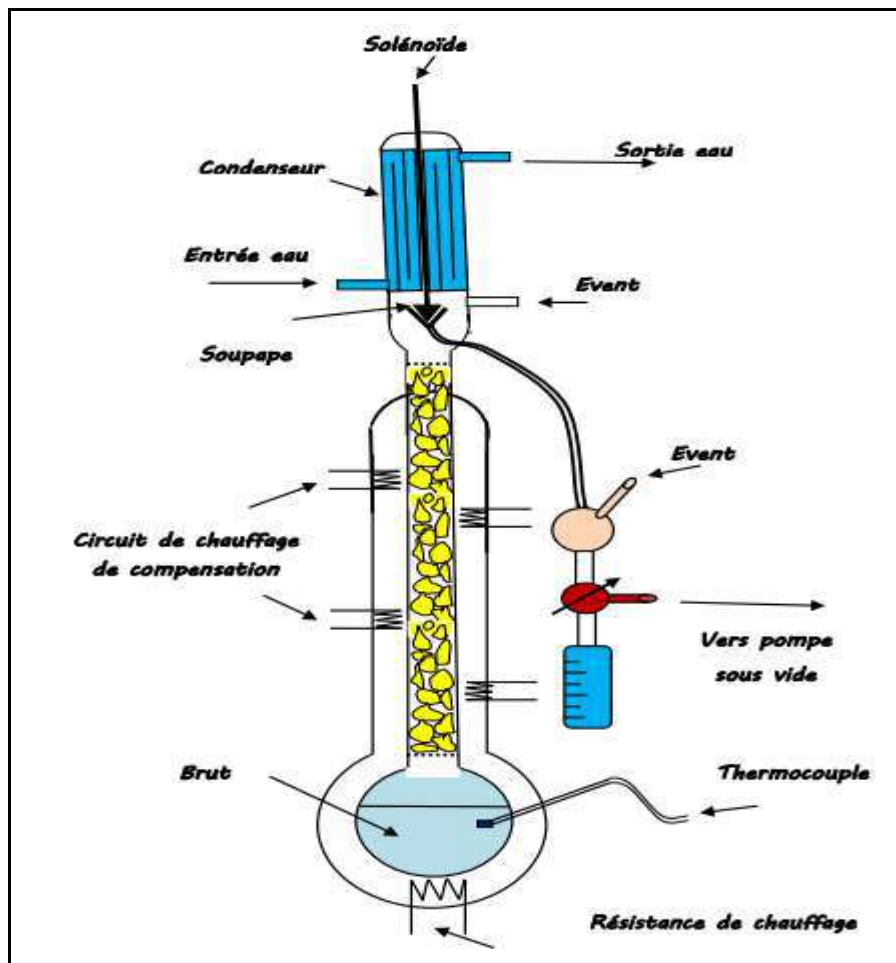
Pour des raisons sécuritaires de transport et de stockage, la valeur de la (T.V.R) est limitée par 650 g/cm² en été et 800 g/cm² en hiver. [7]



(Figure.I.3) Bombe de Reid pour la mesure de la (TVR) des essences [7]

I.4.6. La distillation (TBP) :

C'est une distillation fractionnée qui a pour but de déterminer la teneur en essence, Kérosène, gasoil et en fractions lubrifiantes (huile, graisse) dans le pétrole brut. La courbe issue de cette distillation $T=f$ (%Volume de distillat) est dite courbe T.B.P (true boiling point), cette courbe est utilisée dans les calculs des colonnes de traitement et de distillation et leur planification. La distillation (TBP) est utilisée au laboratoire dans un appareil (LPRN-1) ; cette colonne est équivalente à une colonne à garnissage de 10 plateaux théoriques et d'un taux de reflux égal à 5. Au début de la distillation (TBP) on recueille les gaz dissous qui ne se condensent pas puis on les analyse par chromatographie. La distillation atmosphérique est poussée jusqu'à 400°C en notant chaque fois la température initiale et finale de chaque fraction. Après 400°C on effectue une distillation sous vide du résidu atmosphérique à des pressions plus basse (5-100 mmHg). Si le résidu sous vide est encore important ($\geq 30\%$), on effectue une autre distillation sous vide entre 3 à 5 mmHg dans un autre appareil équivalent à 2 étages théoriques, enfin on mesure le volume du résidu restant. (Fig.I.4). La courbe représentative : Température = f (Pourcentage du distillat) issue de cette distillation est dite courbe de distillation (TBP). Cette courbe permet de savoir et de connaître le pourcentage des fractions importantes (essence, kérosène et gasoil) dans le pétrole brut. [7]



(Figure I.4) Appareil de distillation (TBP).[7]

I.4.7. La distillation (ASTM) :

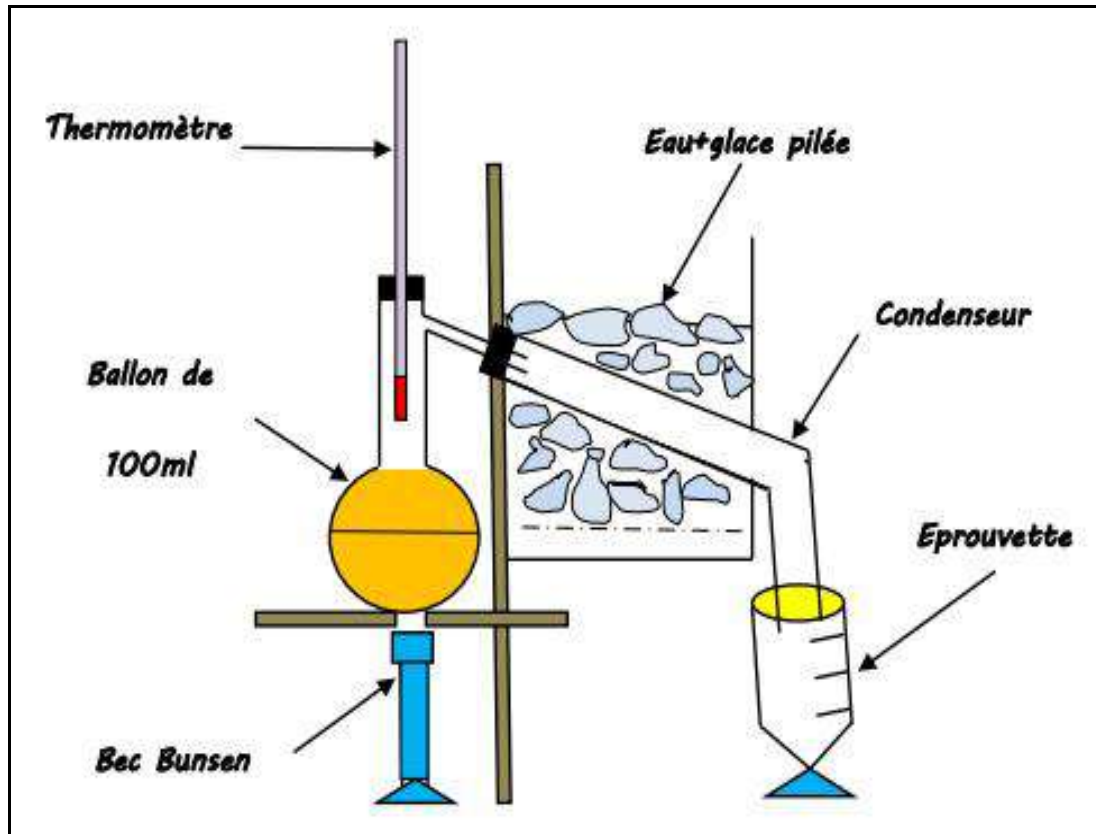
La distillation (ASTM) = (American Society of Testing Materials) est utilisée pour les fractions pétrolières (Essence, Kérosène, Gasoil, Fuel). L'appareil comporte un ballon de 100ml qui est chauffé par un bec Bunsen ou par une résistance électrique, les vapeurs de la fraction sont condensées par un mélange d'eau et de la glace puis recueillies dans une éprouvette graduée. (Fig.I.5). Au début on note la température d'apparition de la première goutte du condensat, cette température set le point initial de la distillation, ensuite les températures sont relevées lorsque 5, 10, 20, ..., 90 et 95% du produit sont distillés.

Enfin la température maximale enregistrée avant son décroissement est appelée le point final de la distillation. On mesure le volume du résidu restant dans le ballon. Le bilan de matière sera :

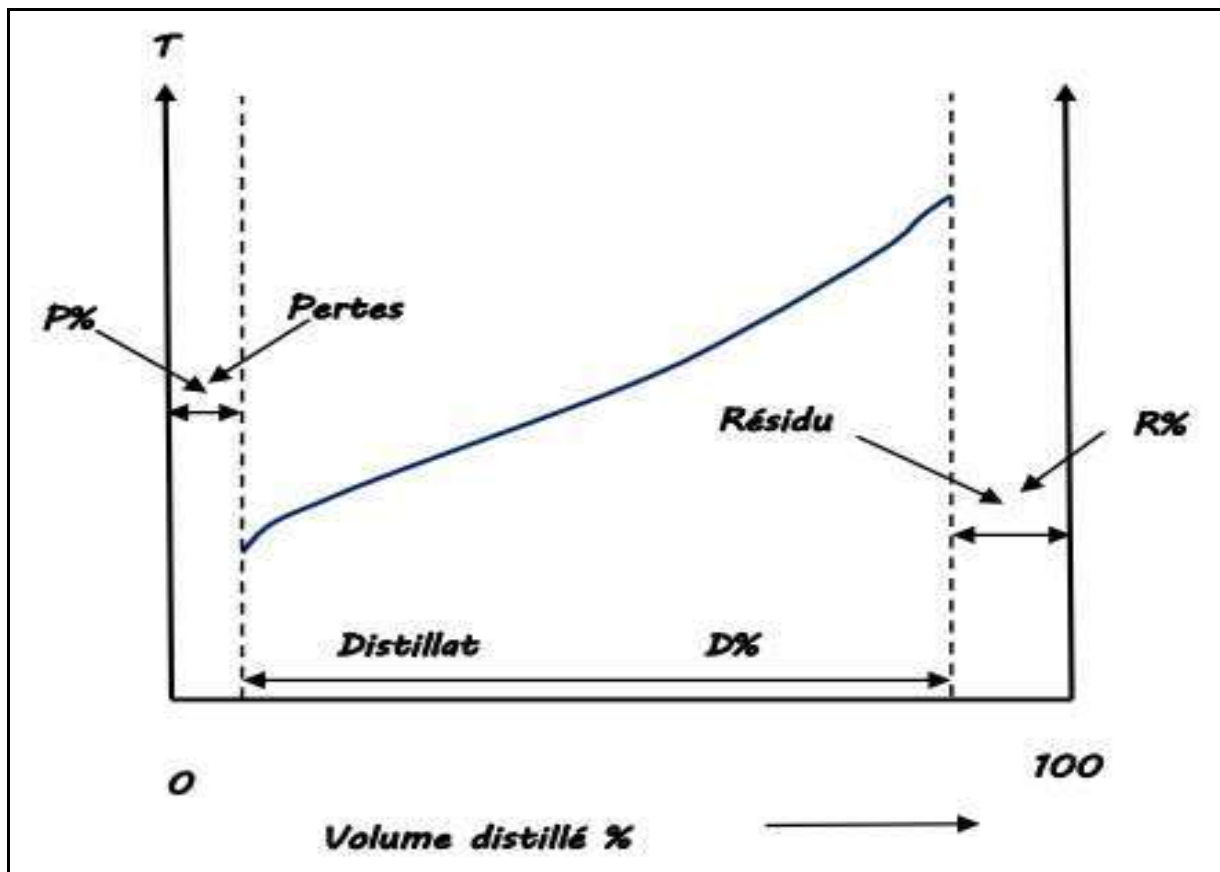
$$\% \text{ Distillat} + \% \text{ Résidu} + \% \text{ Pertes} = 100 \%$$

Chapitre I : Recherche Bibliographique

En connaissant les pourcentages de distillat et du résidu on déduit le pourcentage des pertes qui correspond aux fractions très légères qui ne sont pas condensées, ce pourcentage (P %) est placé au début de l'axe des pourcentages distillés d'où tous les pourcentages de distillat sont majorés de (P %). La courbe : Température = f (% total du distillat) issue de cette distillation est dite courbe de distillation (A.S.T.M). La différence entre la température finale et initiale, permet de comparer les qualités des produits distillés. (Fig.I.6).[7]



(Figure I.5) Appareillage de distillation (A.S.T.M).[7]



(Figure I.6) Courbe de distillation (A.S.T.M).[7]

I.5. Corrélations et prédiction des propriétés physicochimiques du pétrole et des fractions pétrolières

Certaines propriétés sont difficilement accessibles par de mesures expérimentales, parfois on fait recours aux corrélations et à créer des modèles permettent d'estimer les propriétés d'intérêt à partir de données expérimentales disponibles. L'avantage de la simulation est double : gain de temps considérable et réduction du nombre d'expérimentations.

I.5.1. Définition

La corrélation est un moyen statistique qui permet de comparer les valeurs de deux séries statistiques et déterminer à quel point ces deux séries sont liées entre elles. Alors C'est une équation mathématique statistique qui interprète un phénomène physique ou chimique et qui peut servir comme un modèle, prêt pour l'application. [17]

I.5.2. 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. [18]

Autrement dit corrélation veut dire fiabilité, certaine et rapidité.

I.5.3. Type de corrélation

I.5.3.1. Type I :

a. Corrélation positive : On dit corrélation positive si les valeurs de deux Variables changeant dans le même sens.

b. Corrélation négative : la corrélation est dite corrélation négative lorsque les valeurs des variables changent en fonction de la direction opposée.

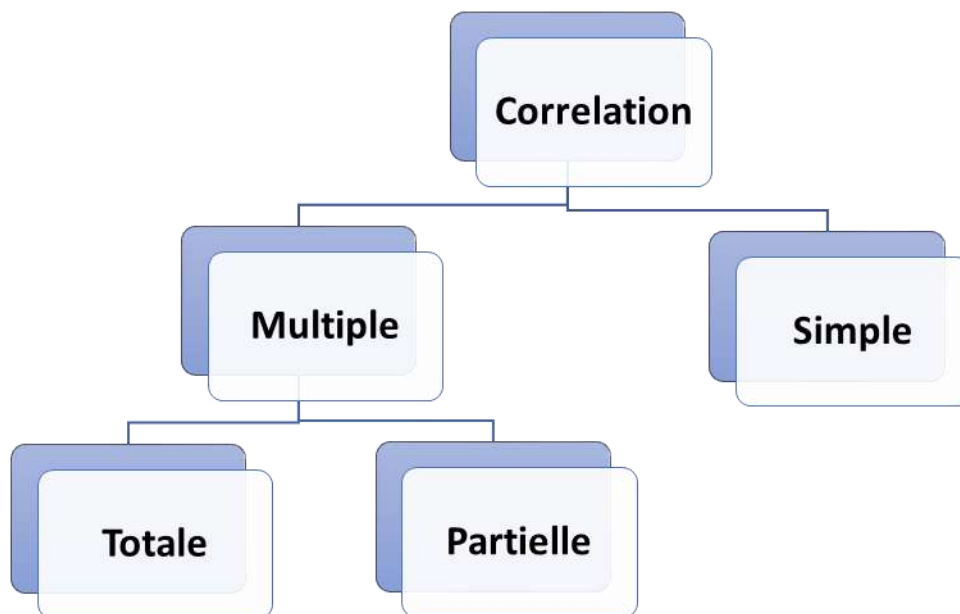
I.5.3.2. Type II :

a. Corrélation simple : Sous le problème de corrélation simple, seules deux variables sont étudiées.

b. Corrélation multiple : sous corrélation multiple, trois variables ou plus de trois sont étudiées.

2.1. Corrélation partielle : l'analyse reconnaît plus de deux variables mais ne considère que deux variables en maintenant l'autre constante.

2.2. Corrélation totale : est basée sur toutes les variables pertinentes, ce qui n'est normalement pas réalisable. [19]



(Figure.I.7) Diagramme des Différents types de corrélations.

I.5.3.3. Type III :

1. Corrélation linéaire : la corrélation est dite linéaire lorsque l'ampleur du changement d'une variable tend à présenter un rapport constant avec l'ampleur du changement de l'autre. Le graphique des variables ayant une relation linéaire formera une ligne droite.

2. Corrélation non linéaire : La corrélation serait non linéaire si l'ampleur du changement dans une variable ne correspond pas à un rapport constant avec l'ampleur du changement dans l'autre variable.

Chapitre I : Recherche Bibliographique

I.5.4. 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.

R^2 ajusté : le coefficient de détermination ajusté du modèle. Le R^2 ajusté peut-être négatif si le R^2 est voisin de zéro. Ce coefficient n'est affiché que si la constante du modèle n'est pas fixée par l'utilisateur.[18]

I.5.5. Exemples de quelques corrélations

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 corrélations et la date de son élaboration.

Tableau (I.1) : Quelques exemples de corrélations. [18]

Sources	Correlation	Input data	Range of applicability	Equations
Winn (1955)	$\ln(T_c) = -0.58779 + 4.2609(T_b^{0.08615})(SG^{0.04614})$	T_b, SG	NA	(9)
	$P_c = 10^5 \left[6.148341 \times 10^7 (T_b^{-2.3177})(SG^{2.4853}) \right]$	T_b, SG	NA	(10)
	$M = 2.70579 \times 10^{-5} (T_b^{2.4966})(SG^{-1.174})$	T_b, SG	NA	(11)
Riazi and Daubert (1980)	$T_c = 35.9413 \left[\exp(-6.9 \times 10^{-4} T_b - 1.4442(SG) + 4.91 \times 10^{-4} (T_b, SG)) \right] T_b^{0.7293} SG^{1.2771}$	T_b, SG	$M > 280 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	(12)
	$P_c = 10^5 \left\{ 6.9575 \left[\exp(-1.35 \times 10^{-2} T_b - 0.3129(SG) + 9.174 \times 10^{-3} (T_b, SG)) \right] T_b^{0.6791} SG^{-0.6807} \right\}$	T_b, SG	$M > 280 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	(13)
	$M = 42.965 \left[\exp(2.097 \times 10^{-4} T_b - 7.78712(SG) + 2.08476 \times 10^{-3} (T_b, SG)) \right] T_b^{1.26007} SG^{4.98308}$	T_b, SG	70-700 $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$ 300-850 K	(14)

Kessler 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	$T_b > 923 \text{ K}$ 70-700 $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	(15)
	$\ln(P_c) = 10^5 \left[\begin{aligned} & 5.689 - \frac{0.0566}{SG} - \left(0.43639 + \frac{4.1216}{SG} + \frac{0.21343}{(SG)^2} \right) 0.001(T_b) \\ & + \left(0.47579 + \frac{1.182}{SG} + \frac{0.15302}{(SG)^2} \right) \times 10^{-6} (T_b)^2 \\ & - \left(2.4505 + \frac{9.9099}{(SG)^2} \right) \times 10^{-10} (T_b)^3 \end{aligned} \right]$	T_b, SG	$T_b > 923 \text{ K}$ 70-700 $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	(16)
	$M = -12272.6 + 9486.4(SG) + \left(8.3741 - \frac{5.9917}{SG} \right) T_b$ $+ \left[1 - 0.77084(SG) - 0.02058(SG)^2 \right] \left(0.7465 - \frac{222.466}{T_b} \right) \frac{10^7}{T_b}$ $+ \left[1 - 0.80882(SG) - 0.02226(SG)^2 \right] \left(0.3228 - \frac{17.335}{T_b} \right) \frac{10^{12}}{(T_b)^3}$	T_b, SG	$T_b < 750 \text{ K}$	(17)



Chapitre II :
Matériels et méthodes

II.1 Présentation de la raffinerie de Hassi Messaoud (RHM2)

II.1.1. Historique sur la raffinerie RHM2

Suite à la découverte du pétrole dans le sud Algérien en Septembre 1959, des sociétés pétrolières internationales ont décidé de construire une raffinerie à cotée des puits.

Il s'agit d'une importante installation du complexe industriel sud, située à quatre kilomètres au sud-est de la ville de Hassi-Messaoud, son montage a été réalisé par ENGTP (Entreprise Nationale des Grands Travaux Pétroliers), elle est conçue et étudiée pour traiter le brut de Hassi-Messaoud Sud avec une capacité de traitement annuelle de 1 070 000 t/an de brut provenant de l'unité de traitement pour le transformer en produits finis commerciaux : gasoil, kérosène, essence normale, essence super. L'étude de la Raffinerie RHM2 a été confiée en 1976 par : [20]

- ALTEC (Société Algérienne d'Engineering).
- H.E France (Hydrocarbon Engineering).

Date de mise en service :

- Distillation atmosphérique : Mai 1979.
- Reforming Catalytique : Octobre 1979.

II.1.2. Principales installations de RHM2 :

Elle est utilisée essentiellement pour la production de l'ensemble des carburants, elle comporte plusieurs unités : [20]

- Unité de distillation atmosphérique U200 ;
- Unité de Pré traitement du naphta (Hydrodésulfuration) U300 ;
- Unité de reforming catalytique U800 ;
- Unité de stockage U900 ;
- Laboratoire ;
- Atelier de maintenance des machines ;
- Utilités et pomperies d'expédition.

II.1.2.1. Section de distillation atmosphérique "Topping" U200

Le but de l'unité Topping est l'obtention des carburants liquides tels que le butane, l'essence, le naphta, le kérosène et le gas-oil en vue de satisfaire les besoins du marché national. [20]

Chapitre II : Matériels et méthodes

Les produits soutirés sont :

- Résidu ou brut réduit ;
- Gas-oil ;
- Reflux circulant ;
- Kérosène ;
- Naphta ;
- Gazoline + gaz.

Le rendement du Topping s'établi comme suit (design) :

Tableau (II.1) : Rendement annuel de l'unité de distillation atmosphérique U200. [20]

Coupes	% poids	Tonnes/an	Densité
Légers	3,79	40 600	
Gazoline	9,01	96 500	0,6680
Naphta	19,28	206 400	0,7440
Kérosène	20,71	221 700	0,8020
Gas-oil	21,56	230 800	0,8700
Résidu	25,65	274 600	
Totale	100%	1070 600	

II.1.2.2. Section prétraitement du Naphta U300

La capacité annuelle de la section prétraitement de naphta (actuel) est de : 118 260 tonnes.

Le prétraitement du naphta est un procédé d'hydrorafinage dont l'objectif est de réduire au maximum, dans les fractions pétrolières, les impuretés qui risquent de nuire à la transformation catalytique, ou de créer, lors de l'utilisation des produits finis, des problèmes de corrosion ou d'encrassement des équipements utilisés. [20]

II.1.2.3. Section Reforming catalytique U800

La capacité annuelle de production de la section reforming (actuel) est de : 84 000 tonnes de réformât.

Le but du reforming catalytique est de transformer les hydrocarbures à bas nombre d'octanes en hydrocarbures à nombre d'octanes élevés. [20]

II.1.2.4. Section de stockage U900

Le nombre des réservoirs installés pour satisfaire à cette opération est de seize **16 bacs**.

Chapitre II : Matériels et méthodes

Il s'agit uniquement du stockage des produits de la raffinerie, la charge de brut d'alimentation provient directement du centre (CIS) sans être stockée. [20]

II.1.3. Service contrôle

II.1.3.1. Le rôle de ce service :

Il est chargé du suivi quotidien de la production des différents dérivés pétroliers en qualité d'analyses et du respect des spécificités des normes internationales de production, afin de lui délivrer un certificat de conformité avant sa commercialisation.

La fourniture aux complexes des résultats de contrôles des produits échantillonnés et d'analyses divers.

Le contrôle de la qualité des produits et l'intervention pour l'amélioration ainsi que l'étude de l'impact de modification de spécifications.

La rédaction des rapports techniques liés à l'activité du laboratoire.

Le respect des conditions de sécurité et de stockage des produits inflammables, toxiques et dangereux.

Le maintien en état de fonctionnement des équipements de laboratoire et le suivi des nouveaux produits (additifs, inhibiteurs, dés émulsifiants, ...).

Le contrôle des propriétés est réalisé par des essais normalisés qui sont des méthodes de mesure et dont le mode opératoire a été normalisé par les grands organismes de normalisation.



Figure (II.1) : Laboratoire central de RHM2.

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.1.3.2. Laboratoire

Le laboratoire est un milieu de travail muni de différents dispositifs et matériels conçu pour l'analyse des hydrocarbures. Ainsi que les produits utilitaires (eau, huiles...), afin de contrôler leurs qualités.

Les analyses effectuées au laboratoire sont importantes car elles permettent de maintenir une exploitation stable et de garantir des produits finis qui rependent aux spécifications techniques et commerciales. Toutes les analyses au laboratoire font l'objet de normes et procédures. Il appartient au personnel de laboratoire de connaître et de maîtriser parfaitement ces normes et procédures. [20]

II.1.3.3. Techniques d'analyses :

II.1.3.3.1. Mesure de la densité :

La densité d'un produit est le rapport entre la masse volumique de ce dernier et la masse volumique de l'eau à une température de 4°C.

La densité est basée sur l'utilisation d'un hydromètre en verre, la mesure de densité est effectuée à température ambiante puis elle est corrigée à 15°C. [20]

➤ **Matériels et produits :**

- Une éprouvette de 250 ml
- Un densimètre (ou hydromètre qui diffère d'un produit à l'autre)
- Thermomètre

➤ **Manipulation :**

- Remplir l'éprouvette avec le produit
- Introduire l'aéromètre adéquat
- Introduire un thermomètre
- Noter la valeur de la densité et la température correspondante
- Convertir la valeur à 15°C en utilisant les tables de correction

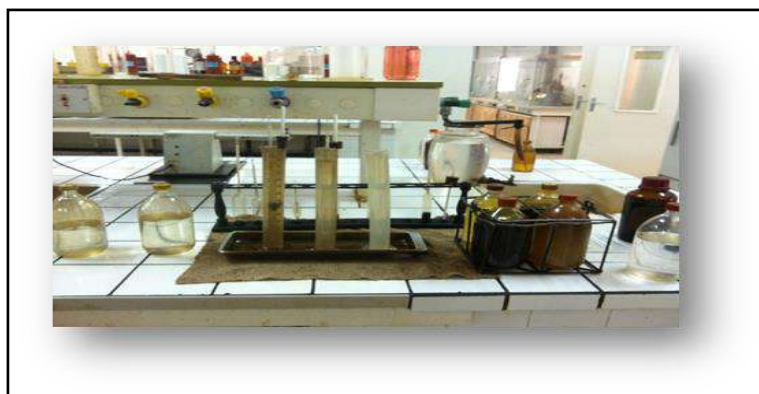


Figure (II.2) Paillasse de laboratoire

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.1.3.3.2. Tension de vapeur :

La pression ou tension de vapeur est la pression développée par les vapeurs d'un produit pétrolier contenu dans une bombe normalisée à la température de 37,8°C. [20]

➤ *Appareillage :*

Représenter ci-après, il est composé de :

- Lecture de TVR
- Chambre à air (volume= 4V)
- Chambre à essence (volume V)
- Bain marie à T= 37,8
- Bain thermostat.



Figure (II.3) Appareil de mesure de la TVR

Manipulation :

- Remplir la petite chambre inférieure avec le produit.
- Relier la chambre à air et la chambre à essence et les fermer
- Agiter en exerçant une pression sur l'appareil.
- Plonger l'appareil dans le bain thermostat et ouvrir le robinet pointeau pour permettre au manomètre de mesurer la pression due aux vapeurs émis par l'échantillon.

II.1.3.3.3. Point éclair –Luchaire : Cette méthode permet de mesurer le point d'éclair des lubrifiants et des huiles combustibles suivant une normalisation française, elle s'adresse plus particulièrement aux fuels domestiques et aux fuels lourds. [20]

II.1.3.3.4. Distillation ASTM :

Cet essai normalisé s'applique à tous les principaux produits pétroliers sauf aux gaz de pétrole liquéfiés et aux bitumes fluxés. [20]

Chapitre II : Matériels et méthodes

➤ Matériels et produits :

- Ballon à fond rond de 125cm³
- Plaque support.
- Grille.
- Source de chaleur.
- Thermomètre.
- Eprouvette graduée.
- Pierre ponce.
- Condenseur à eau dont lequel passe un serpentín contenant les vapeurs de produit à distiller.



Figure (II.4) Dispositif de mesure du point éclair

- Remarques :

L'eau froide a pour rôle de condenser les vapeurs de produit de la distillation pour le gasoil.

Pour le gas-oil on n'utilise pas de l'eau froide car c'est un produit lourd.

➤ Mode opératoire :

- Verser 100 ml de produit (kérosène, reformat, gasoil, naphta et gazoline) dans le ballon contenant de la pierre ponce.
- Fermer le ballon avec un bouchon dont lequel est fixé le thermomètre.
- Allumer la source de chaleur.
- Observer la première goutte et noter sa température.
- Noter la température pour des pourcentages déterminés et celle de point final.

Remarques :

- Température de point initial (PI) correspond à l'apparition de la première goutte de liquide.
- Température de point final (PF) correspond à la température maximale relevée au cours de l'essai.
- Si le produit devient plus léger la température de distillation baisse.
- Si le produit devient plus lourd les températures de distillation augmentent.

Chapitre II : Matériels et méthodes

Tableau (II.2) : Données de la distillation ASTM D86 des fractions pétrolières de RHM2.
[20]

Fraction	Température d'ébullition (°C) a % vol										
	PI	5	10	20	30	50	70	80	90	95	PF
Gazoline	39	46	49	54	58	63	70	76	83	94	104
Naphta	150	159	165	169	172	178	186	192	199	205	214
Kérosène	150	159	165	169	172	178	186	192	199	205	214
Gasoil	161	179	188	209	226	254	289	314	352	372	378

II.1.3.3.5. Salinité :

Une analyse volumétrique qui consiste à déterminer la concentration de NaCl dans l'eau, ainsi la prévention de la corrosion.

II.1.3.3.6. Mesure de Chlore :

Il consiste à titrer l'eau à l'aide de nitrate d'argent AgNO_3 pour mesurer la salinité puis calculé la quantité de chlore.

II.1.3.3.7. Mesure de ph :

Le pH est le potentiel hydrogène d'une solution aqueuse «eau», la mesure de pH est effectuée directement à l'aide d'un appareil spécifique appelé pH mètre.

II.1.3.3.8 Couleur :

La détermination de la couleur des gazoles est réalisée par le colorimètre. Cette couleur caractérise la qualité d'utilisation des gazoles.

II.1.3.3.9. L'indice d'octane :

L'indice d'octane est une propriété essentielle de la carburante auto. Elle caractérise l'aptitude du carburant à brûler correctement dans un moteur à allumage commandé, autrement dit si le % volumique d'isooctane dans le mélange de normale-heptane et d'isooctane.

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.1.4. Les familles d'Hydrocarbures qui existent dans les coupes étudiées (C_{11} à C_{12}) :

Les coupes des hydrocarbures (de C_{11} à C_{12}) contiennent les fractions pétrolières représentées dans le tableau suivant :

Tableau (II.3) : Coupes d'hydrocarbures existant dans les fractions pétrolières.

Fractions pétroliers	Coupes d'hydrocarbures présents dans ces fractions.	Températures auxquelles les fractions sont recueillies
Kérosène	Hydrocarbures de C_{11} à C_{12} Carburant utilisé dans les réacteurs d'avions.	180°C-230°C
Gas-oils légers et fuels légers.	Hydrocarbures de C_{13} à C_{17} Utilisés comme carburant des moteurs diesel et comme combustible dans les chaudières domestiques	230°C à 305°C
Fuels lourds et lubrifiants légers (huiles)	Hydrocarbures de C_{18} à C_{25} . Les fuels lourds sont après traitement, utilisés comme carburant dans les gros moteurs diesel lents et très puissants (bateaux) ou comme combustibles (centrales thermiques ou fours de cimenteries)	305°C à 405°C

Dans notre travail on a utilisé les coupes d'hydrocarbures de C_{11} à C_{12} qui appartiennent à la fraction pétrolière de kérosène.

II.1.4.1. Fraction kérosène :

Le kérosène est un carburant utilisé dans l'aviation pour alimenter les turboréacteurs et les turbopropulseurs. Il porte également le nom de « **jet fuel** » ou de « **carburacteur** ». Sa viscosité est plus importante que celles du fioul et de l'essence, mais il lubrifie mieux les pièces mécaniques.

Le kérosène est issu du raffinage du pétrole. Il se compose d'alcanes ayant des formules brutes de la forme C_nH_{2n+2} , allant de $C_{10}H_{22}$ à $C_{14}H_{30}$.

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

II.2.1. -Définition de QSPR

La QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) 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 : [21]

- 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.

II.2.2. Principe de la 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 :

$$\text{Propriété} = f(\text{Descripteurs})$$

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'outils 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. [22]

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)

II.3. Descripteurs moléculaires :

II.3.1. Définition d'un descripteur

Afin d'exploiter au maximum les informations contenues dans les structures moléculaires, celles-ci sont traduites en une série de grandeurs qui quantifient leurs caractéristiques physico-chimiques et structurales. Ces grandeurs sont appelées descripteurs.

Les descripteurs moléculaires réalisent un codage de l'information chimique en un vecteur de réels. Tout simplement, un descripteur moléculaire est une représentation mathématique d'une molécule, qui contient à la fois des informations sur la structure, et donc, implicitement ou explicitement, sur ses propriétés physico-chimiques.

II.3.2. Importance des descripteurs :

Les descripteurs moléculaires jouent un rôle fondamental en chimie, sciences pharmaceutiques, la protection de l'environnement, recherche de la santé et contrôle de qualité, être obtenu quand les molécules sont transformées dans une représentation moléculaire qui autorise quelque traitement mathématique. Les descripteurs moléculaires sont très importants pour :

- Indiquent la description de la configuration de la molécule à étudier.
- Décrivent tous les paramètres descriptifs de la molécule. Les descripteurs moléculaires sont utilisés pour, une connaissance de statistiques, chimio métriques, et les principes des approches QSAR/QSPR sont nécessaires en plus de la connaissance spécifique du problème [23].

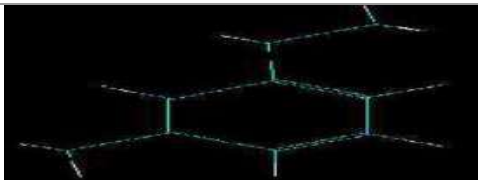

II.3.3. Différents types des descripteurs moléculaires :

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** : Contiennent des nombres 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** : Contiennent 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 rentrent les indices topologiques.
- **Les descripteurs 3-D** : Contiennent 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. [24]

Chapitre II : Matériels et méthodes

Tableau (II.4) : Présentation de composé de différentes dimensions :

Structure	Présentation de la molécule	Descripteurs
1D	$C_{11}H_{24}$	<ul style="list-style-type: none">- Nombre d'atomes de carbone- Masse moléculaire
2D		<ul style="list-style-type: none">- Nombre d'anneaux- Nombre de liens- Nombre de benzène
3D		<ul style="list-style-type: none">- Surface moléculaire

II.3.4. - Les descripteurs utilisés :

Les descripteurs utilisés dans cette étude sont calculés avec **AlvaDesc**, et sont divisés en deux groupes logiques représentés sur le diagramme ci-dessous :

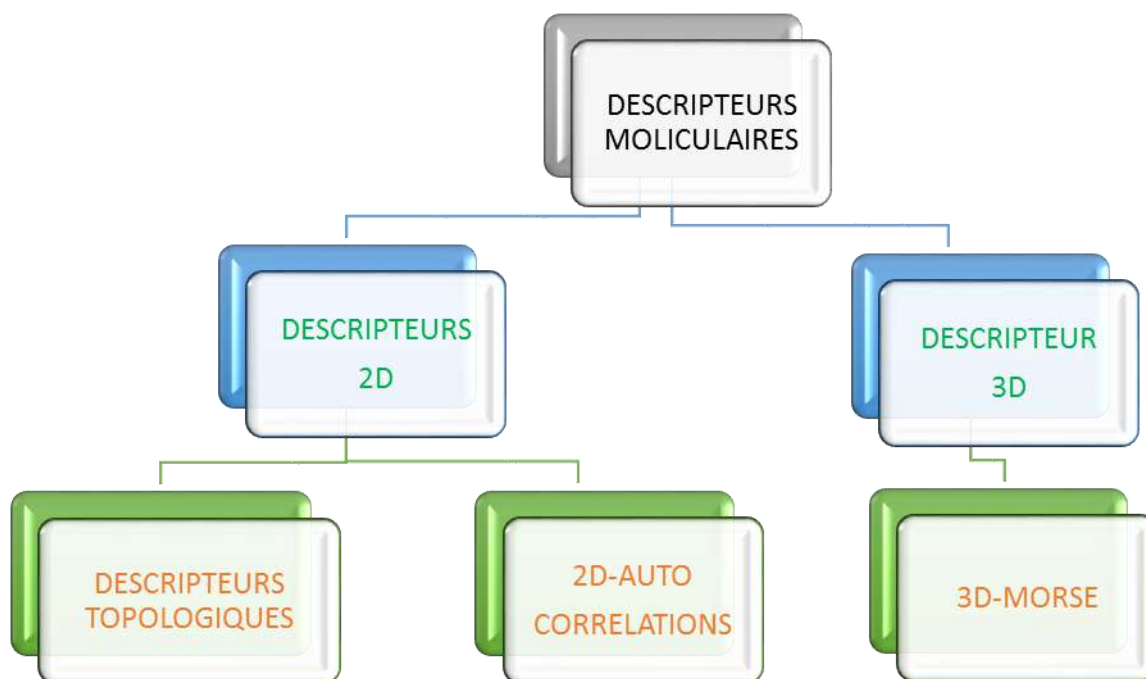


Figure (II.5) : Diagramme des descripteurs utilisés

II.4. Les prédictions :

II.4.1. Etapes d'élaboration des prédictions :

Les premiers essais de modélisation QSPR développés par Wiener reliant le point d'ébullition, le point de fusion, le point d'éclair et la 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.

Dans ce mémoire, 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 que nous illustrons sur le diagramme suivant :

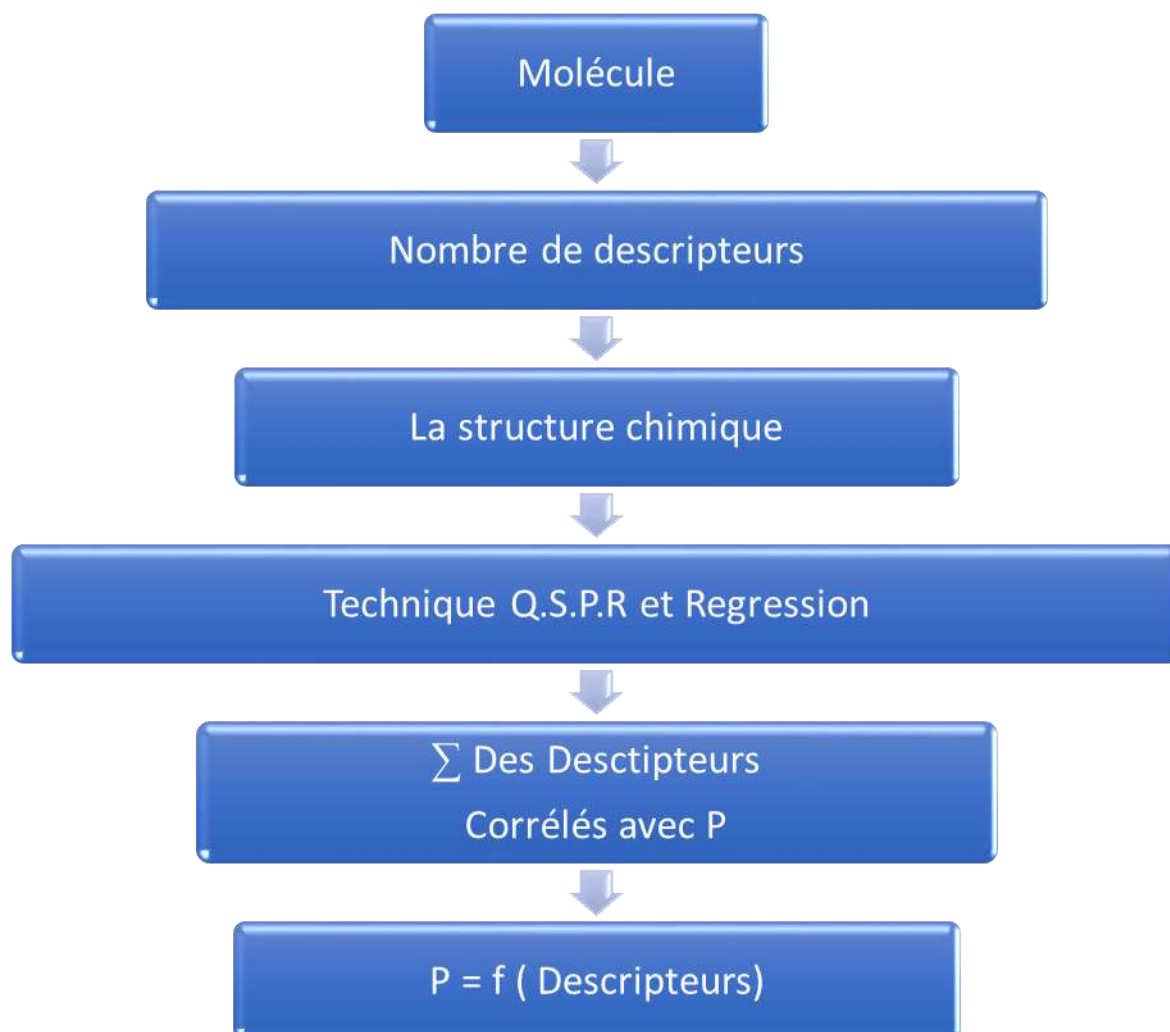


Figure (II.6) : Diagramme de prédiction par QSPR.

II.4.2. 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-7)** ci-dessous

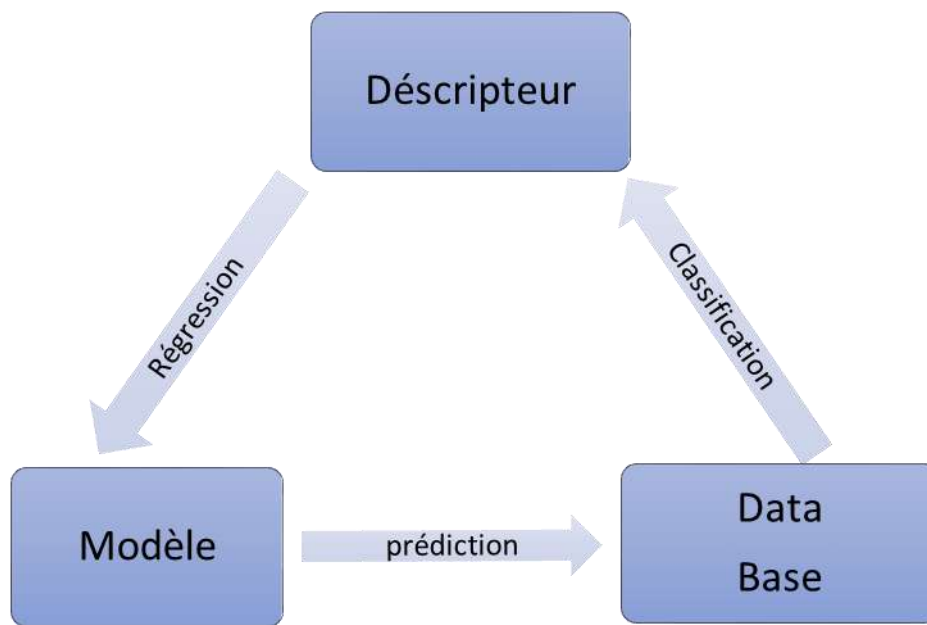


Figure (II.7) Cycle d'optimisation du modèle.

II.5. Les étapes de travail : (Diagramme de travail)

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

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

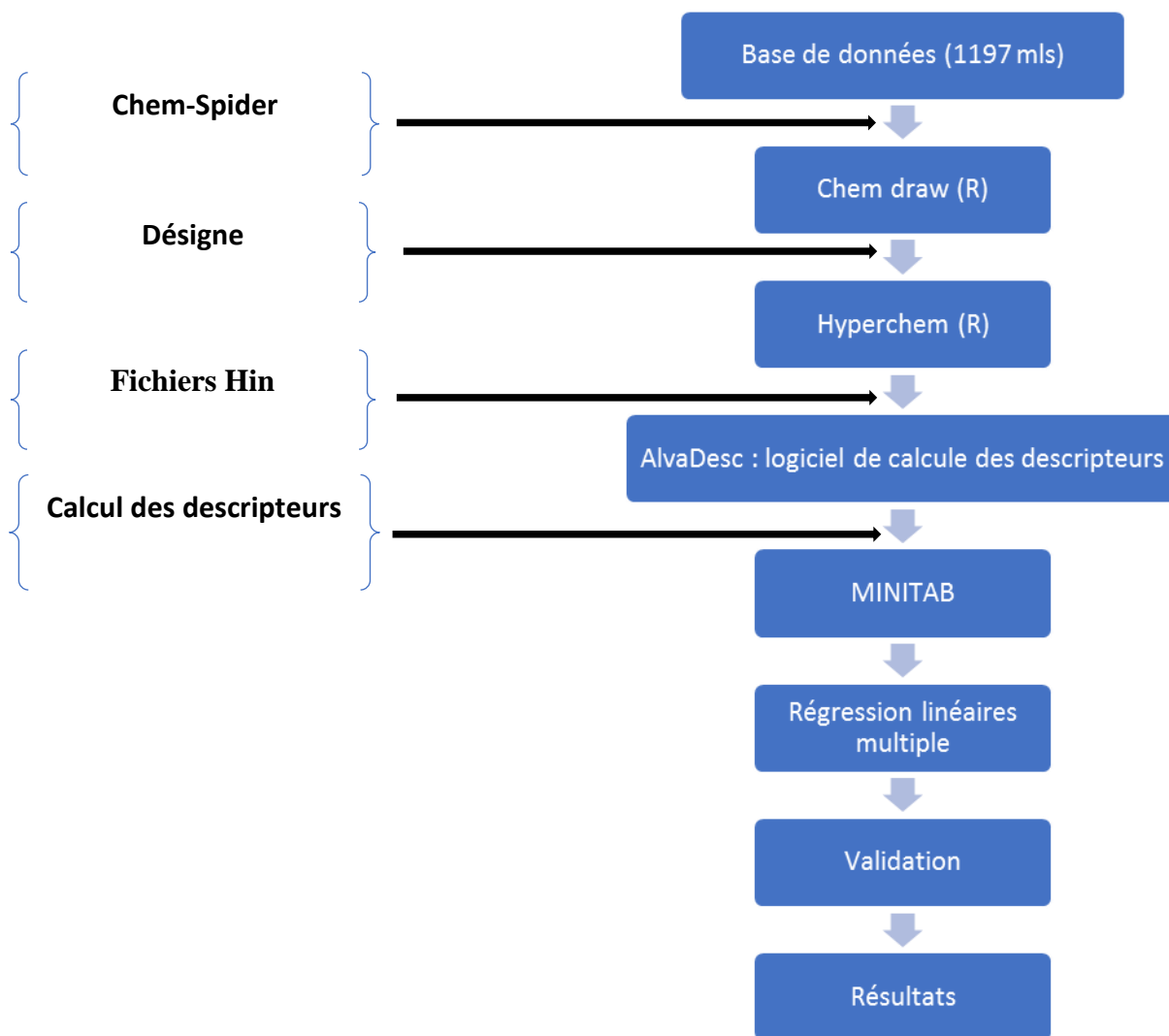


Figure (II-8) : Diagramme des étapes de travail.

II.6. Base des données :

- **Source** : la base de données utilisée dans ce travail a été collectée à travers l'internet des trois sites web, qui sont des bases très fiables et contiennent la totalité des produits chimiques avec leurs caractéristiques et leurs propriétés.
- <http://www.chemspider.com>
- <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>
- <https://www.lookchem.com>

Notre base contient 1197 hydrocarbures de C_{11} à C_{12} .

(Voir l'Annex qu'il contient échantillant de 200 composée).

Chapitre II : Matériels et méthodes

- **La nature des composées** : ces composées sont de nature chimique, organique homogène (de la classe des hydrocarbures).
- **Les familles chimiques** : dans cette base de données on trouve plusieurs familles chimiques comme (Paraffine, Oléfine, Naphtène, Aromatique).

II.7. Logiciels utilisés :

II.7.1. 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.

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. [25]

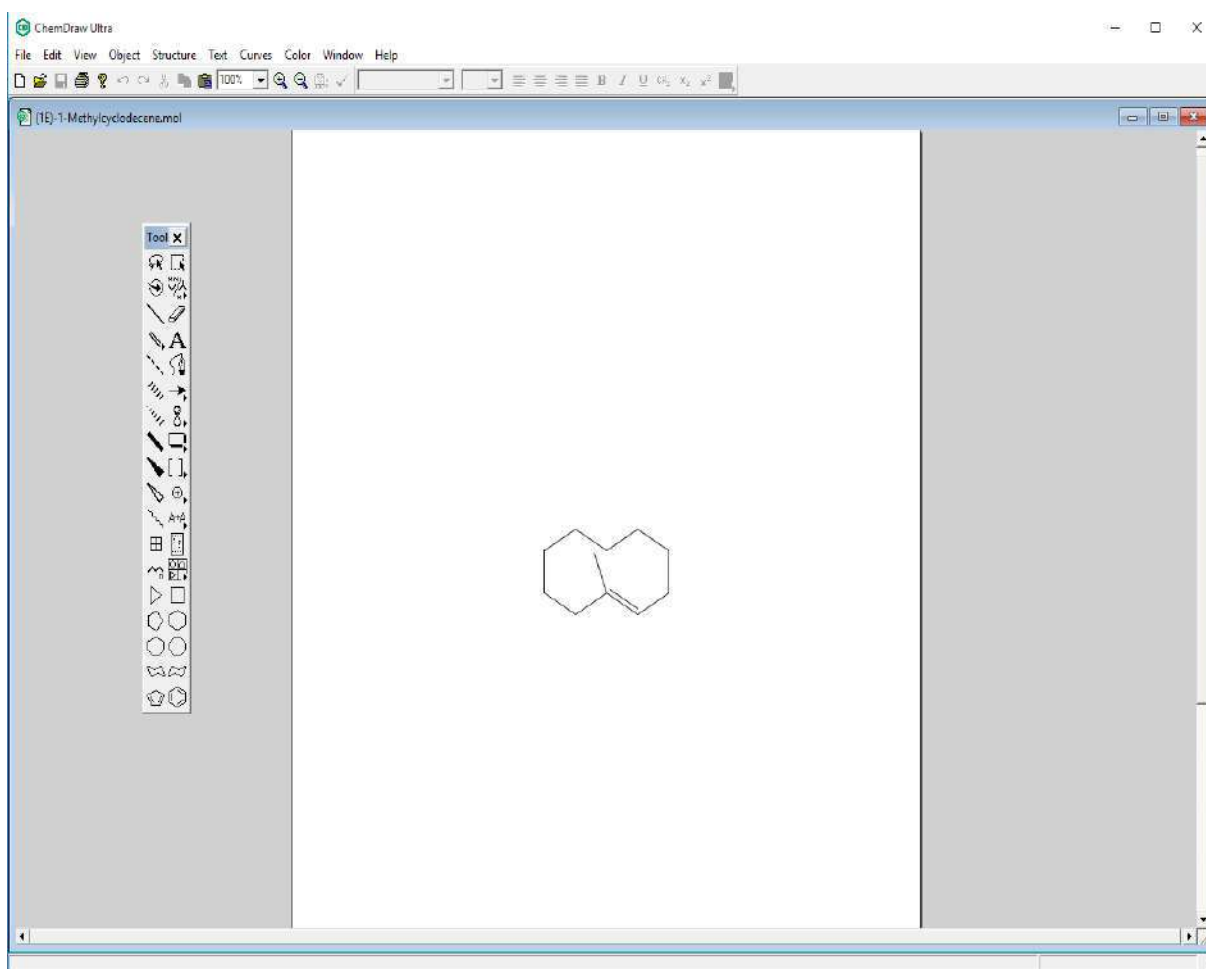


Figure (II.9) : Exemple réalisation de la structure de la molécule ((1E) -1-Methylcyclodecene).

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.7.2. HyperChem 7.5 :

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.

HyperChem est le logiciel qui 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. [26]

On a utilisé l'Hyperchem dans cette étude pour construire et optimiser les molécules d'une fraction pétrolière (Kérosène de C_{11} à C_{12}) chaque molécule est enregistrée comme un fichier nommé "Hin" après l'optimisation. Nous avons utilisé la méthode semi empirique MM+ pour l'optimisation. On a 1197 molécules donc on obtient 1197 fichiers Hin, ensuite on va calculer les descripteurs moléculaires à partir de ce fichier par logiciel **AlvaDesc** pour chaque molécule.

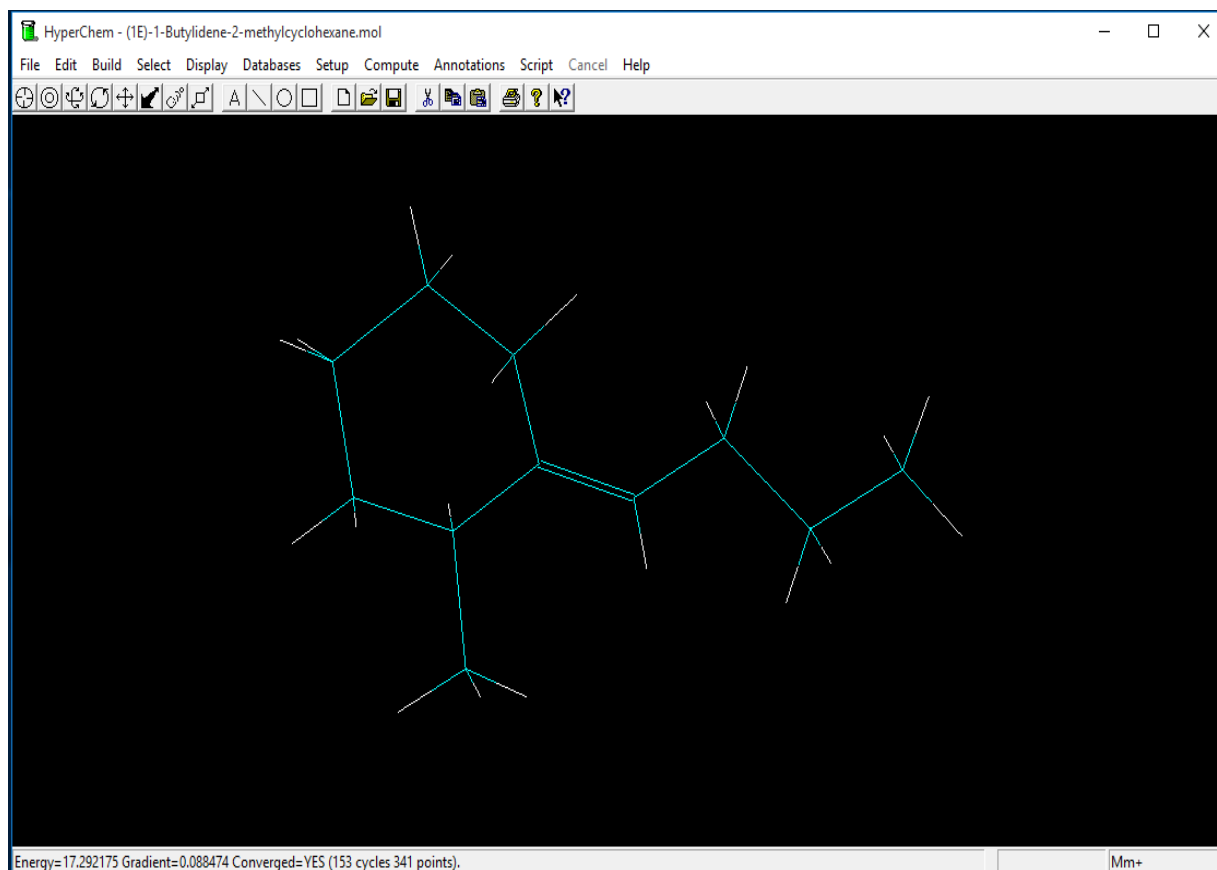


Figure (II.10) : Exemple d'un composé ((1E) -1-Butylidene-2-methylcyclohexane) après sa modélisation par l'HyperChem

Chapitre II : Matériels et méthodes

II.7.3. AlvaDesc v.1.0.8 :

AlvaDesc est l'outil de nouvelle génération pour le calcul des descripteurs moléculaires et des empreintes moléculaires. Il calcule une collection complète de plus de 5000 descripteurs moléculaires (descripteurs moléculaires 0D, 1D, 2D, 3D). Il peut également calculer à la fois l'empreinte MACCS166 et une version personnalisable d'empreinte moléculaire hachée (empreinte de connectivité étendue et empreinte de chemin). [27]

AlvaDesc fournit différents outils pour effectuer une première exploration de votre jeu de données moléculaires : [27]

- Vérification de la structure des molécules à l'aide des services PubChem.
- Visualisation et filtrage de la structure d'une molécule.
- Analyse en composantes principales (ACP) et analyse de corrélation.

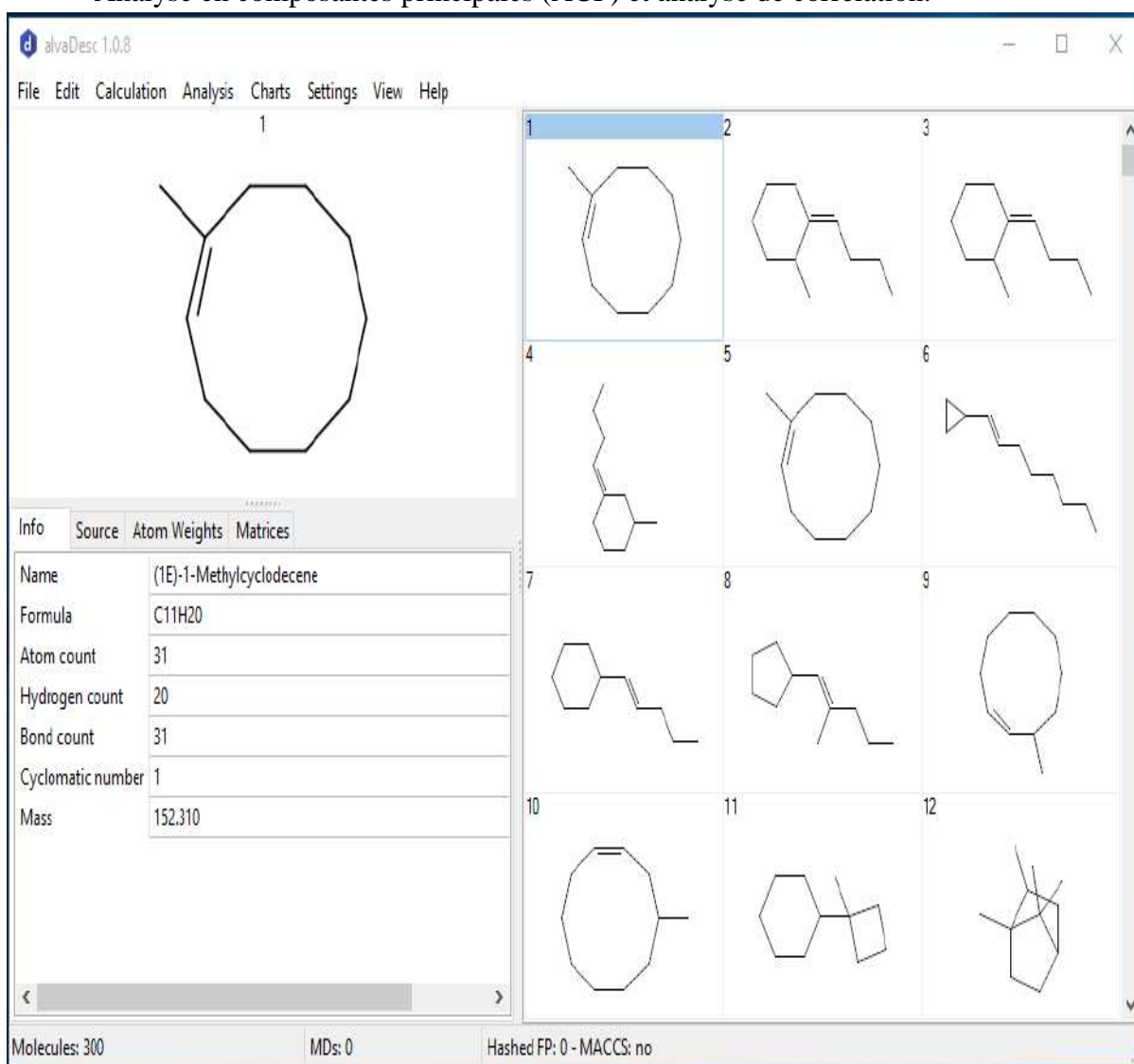


Figure (II.11) : Interface du logiciel AlvaDesc.

Chapitre II : Matériels et méthodes

No.	Nom	Mean	Std.dev.	Maximum	Minimum	Not zero	Missing	Description	Block	Sub-Block
1	MW	150.316	0.00000	150.316	150.316	1	0	molecular weight	Constitutional indices	Basic descriptors
2	AMW	4.913	0.00000	4.913	-4.913	1	0	average molecular weight	Constitutional indices	Basic descriptors
3	Se	16.268	0.00000	16.268	-16.268	1	0	sum of atomic van der Waals volumes (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
4	Se	29.836	0.00000	29.836	-29.836	1	0	sum of atomic Sanderson electronegativities (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
5	Sp	18.614	0.00000	18.614	-18.614	1	0	sum of atomic polarizabilities (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
6	Si	35.152	0.00000	35.152	-35.152	1	0	sum of first ionization potentials (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
7	Mv	0.525	0.00000	0.525	-0.525	1	0	mean atomic van der Waals volume (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
8	Me	0.962	0.00000	0.962	-0.962	1	0	mean atomic Sanderson electronegativity (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
9	Mp	0.600	0.00000	0.600	-0.600	1	0	mean atomic polarizability (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
10	Mi	1.134	0.00000	1.134	-1.134	1	0	mean first ionization potential (scaled on Carbon atom)	Constitutional indices	Basic descriptors
11	GD	0.200	0.00000	0.200	0.200	1	0	graph density	Constitutional indices	Basic descriptors
12	nAT	31.000	0.00000	31	31	1	0	number of atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
13	nSK	11.000	0.00000	11	11	1	0	number of non-H atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
14	nTA	2.000	0.00000	2	2	1	0	number of terminal atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
15	nBT	31.000	0.00000	31	31	1	0	number of bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
16	nBO	11.000	0.00000	11	11	1	0	number of non-H bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
17	nBM	1.000	0.00000	1	1	1	0	number of multiple bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
18	SCBO	12.000	0.00000	12.000	-12.000	1	0	sum of conventional bond orders (H-depleted)	Constitutional indices	Basic descriptors
19	RSN	2.000	0.00000	2	2	1	0	number of rotatable bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
20	RF	0.065	0.00000	0.065	0.065	1	0	rotatable bond fraction	Constitutional indices	Basic descriptors
21	nDB	1.000	0.00000	1	1	1	0	number of double bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
22	nTB	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of triple bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
23	nAR	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of aromatic bonds	Constitutional indices	Basic descriptors
24	nH	20.000	0.00000	20	20	1	0	number of Hydrogen atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
25	nC	11.000	0.00000	11	11	1	0	number of Carbon atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
26	nN	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Nitrogen atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
27	nO	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Oxygen atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
28	nP	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Phosphorus atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
29	nS	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Sulfur atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
30	nF	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Fluorine atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
31	nCL	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Chlorine atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
32	nBR	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Bromine atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
33	ni	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Iodine atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
34	nB	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of Boron atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
35	nFM	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of heavy atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
36	nHd	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of heteroatoms	Constitutional indices	Basic descriptors
37	nX	0.000	0.00000	0	0	0	0	number of halogen atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
38	H%	64.516	0.00000	64.516	64.516	1	0	percentage of H atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
39	C%	35.484	0.00000	35.484	35.484	1	0	percentage of C atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
40	N%	0.000	0.00000	0.000	0.000	0	0	percentage of N atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
41	O%	0.000	0.00000	0.000	0.000	0	0	percentage of O atoms	Constitutional indices	Basic descriptors
42	X%	0.000	0.00000	0.000	0.000	0	0	percentage of halogen atoms	Constitutional indices	Basic descriptors

Figure (II.12) Liste des descripteurs du composé ((1E) -1-Butylidene-2-méthylcyclohexane) calculé par AlvaDesc.

II.7.4. Logiciel Minitab

C'est un logiciel de statistique qui nous permet de générer les équations de régressions entre les variables étudiées. Ce logiciel a été choisi du moment qu'il nous offre les avantages suivants :

- Minitab c'est un logiciel très fiable et très stable.
- Il permet de réorganiser nos données et de les structurer afin de faciliter leur analyse.
- Avec Minitab l'analyse en composantes principales et l'analyse des correspondances deviennent faciles, de même que la régression linéaire (simple ou multiple).
- Minitab 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 nous permettre de tester des hypothèses.
- Minitab permet d'évaluer la qualité de nos données, et de déterminer les erreurs de calcul (écarts + résidus), ce que nous aide d'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.

Chapitre II : Matériels et méthodes

Applications

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

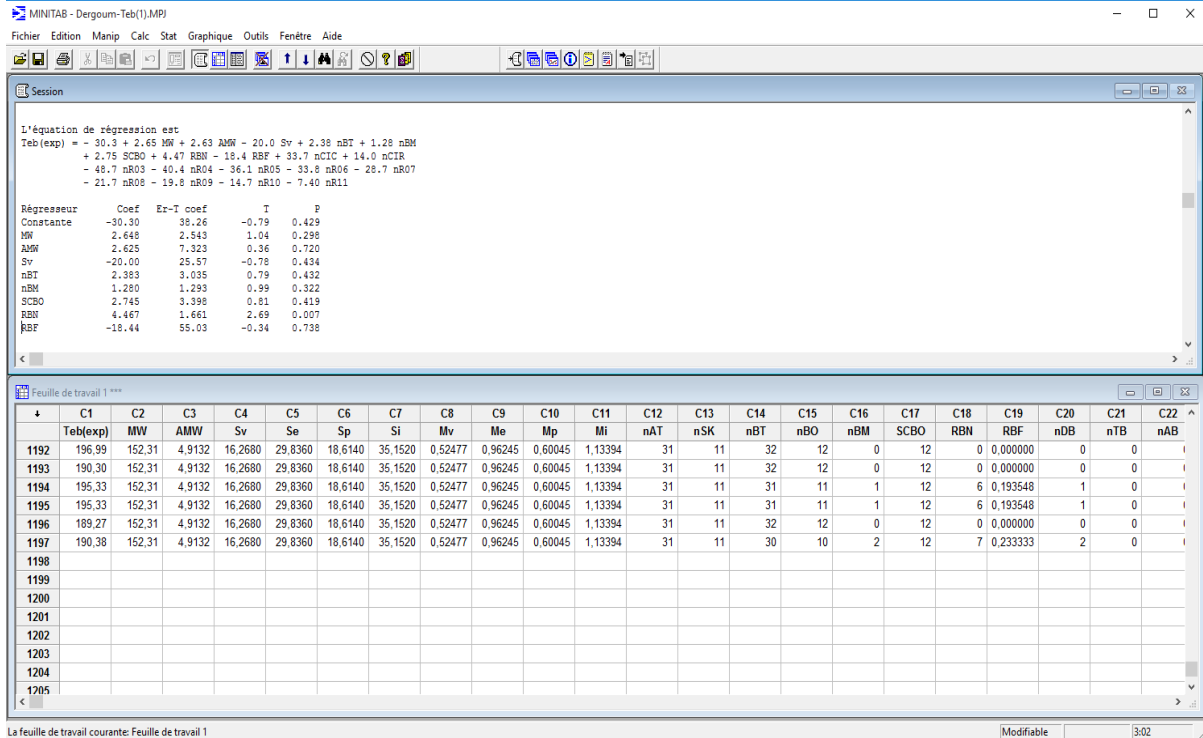


Figure (II-13) : Interface de calcul par Minitab pour générer l'équation de régression.



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 1197 molécules d'hydrocarbures réparties en deux familles (cycliques et Aliphatiques).

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 des tableaux et des figures.

III.2. Elaboration de la base de données

Une base de données de 1197 molécules a été élaborée (voir le tableau en annexe), constituant la fraction Kérosène de C_{11} à C_{12} , 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 Aliphatique et 40% de nature cycliques, comme le montre la figure III-1 ci-dessous.

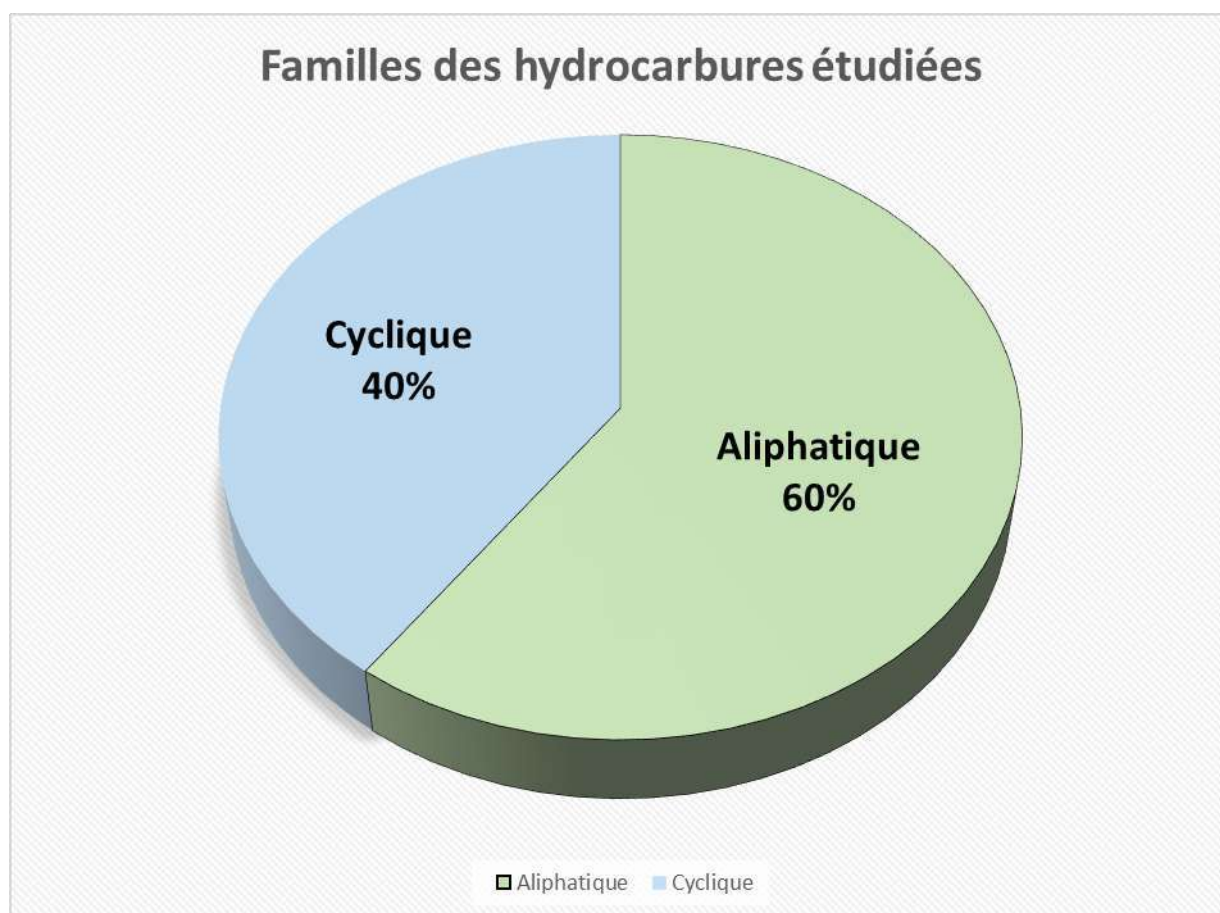


Figure (III.1) : Familles des hydrocarbures étudiés

Chapitre III : Résultats et discussion

III.3. Résultats de régression :

III.3.1. Pour la température d'ébullition :

Après analyse statistique par Minitab on obtient les résultats suivants :

Pour tous les composés (1197 composés)

1/ Tableau (III.1) Résultats de régression de T_{eb} pour tous les 1197 composés

L'équation de régression	$T_{eb}(exp) = - 41.5 + 2.16 MW + 4.43 AMW - 16.0 Sv + 2.42 nBT + 1.49 nBM + 3.63 SCBO + 4.67 RBN - 27.2 RBF + 32.3 nCIC + 14.6 nCIR - 47.9 nR03 - 40.5 nR04 - 36.7 nR05 - 33.2 nR06 - 28.3 nR07 - 21.1 nR08 - 19.3 nR09 - 14.7 nR10 - 7.08 nR11$
S	7.211
R ²	75.0%
R ² (Ajust)	74.6%

2/ Analyse de variance

Tableau (III.2) Résultats d'Analyse de variance de T_{eb} pour les 1197 composés

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	19	183461.6	9655.9	185.67	0.000
Erreur réside	1177	61210.0	52		
Total	1196	244671.7			

3/ Représentation graphique :

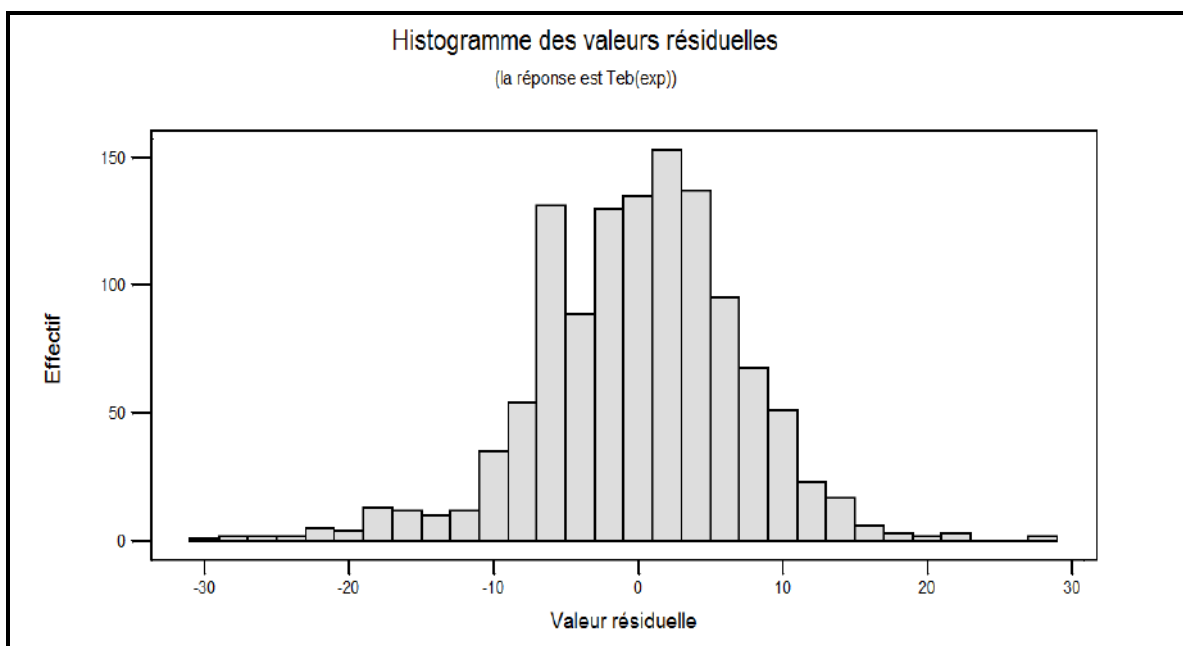


Figure (III.2) : Histogramme des valeurs résiduelles de T_{eb} pour 1197 composées

Chapitre III : Résultats et discussion

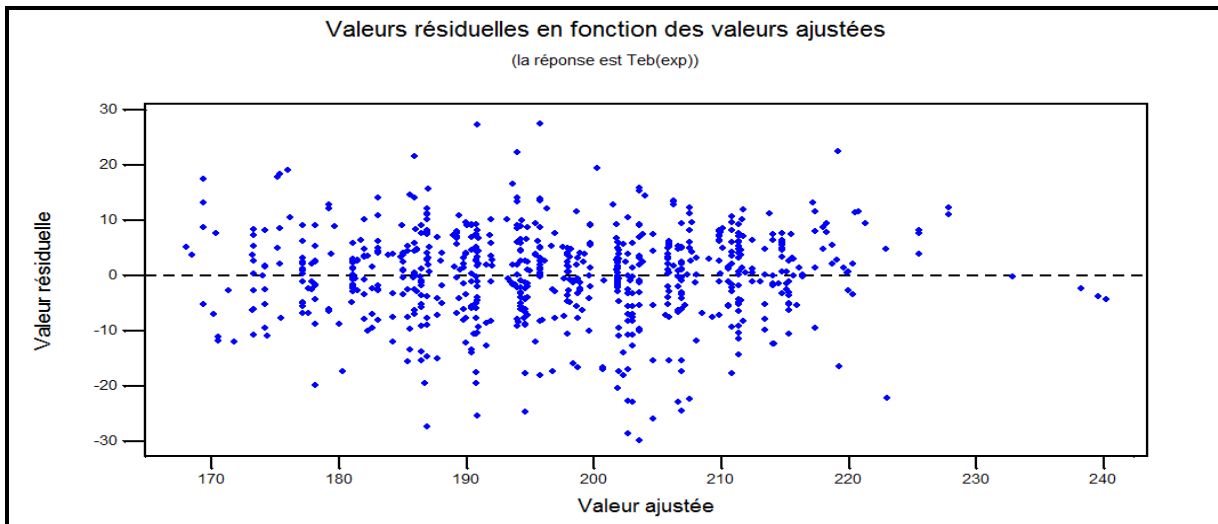


Figure (III.3) : Valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Teb pour 1197 composées

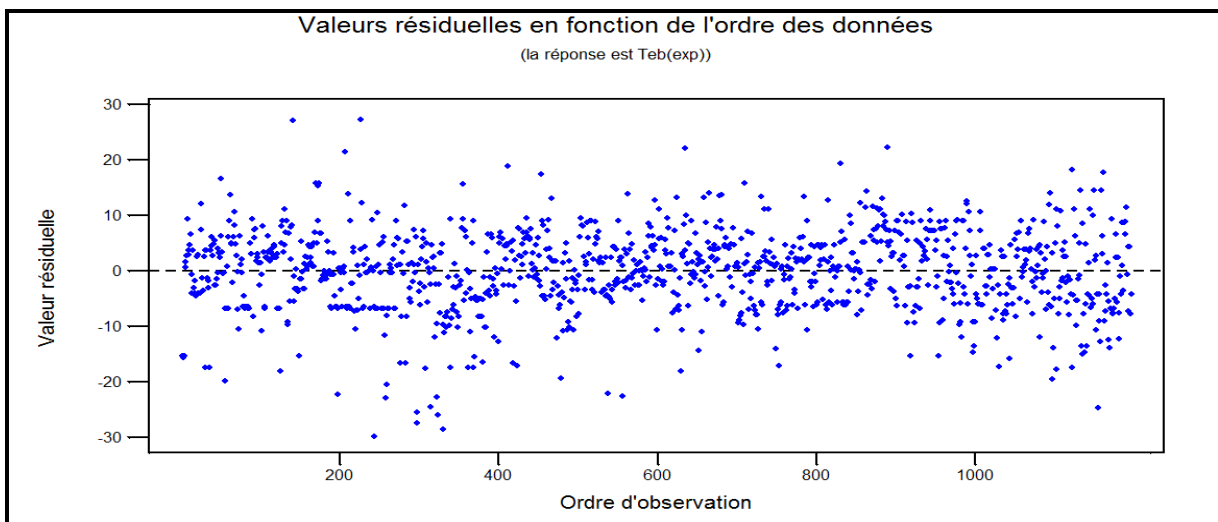


Figure (III.4) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Teb pour 1197 composées

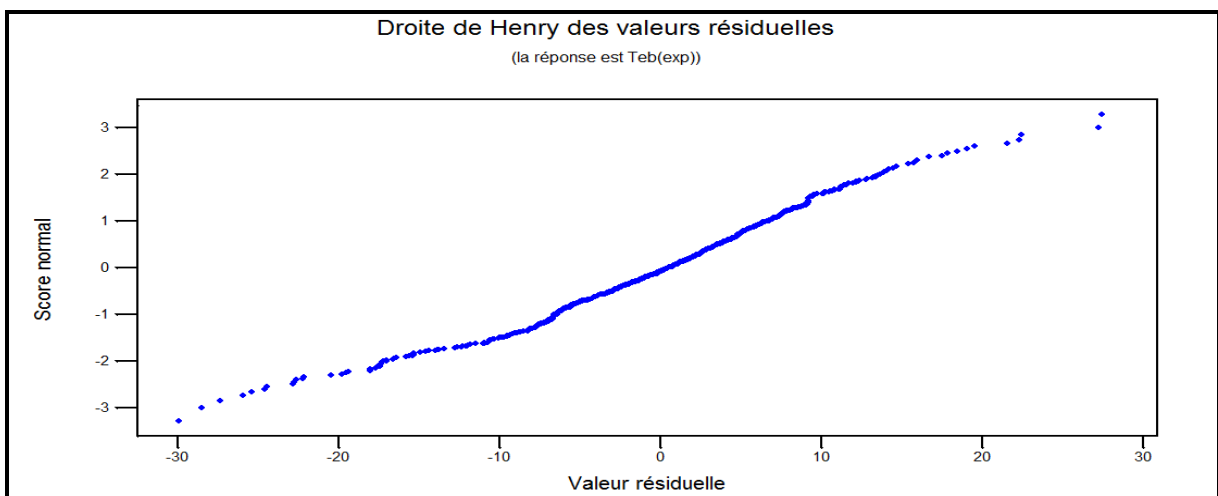


Figure (III.5) : droite de henry des valeurs résiduelles de Teb pour 1197 composées

Chapitre III : Résultats et discussion

L'équation de la régression des valeurs prédites de Téb par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,7501x + 49,584$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,7498$. La figure (III.6) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

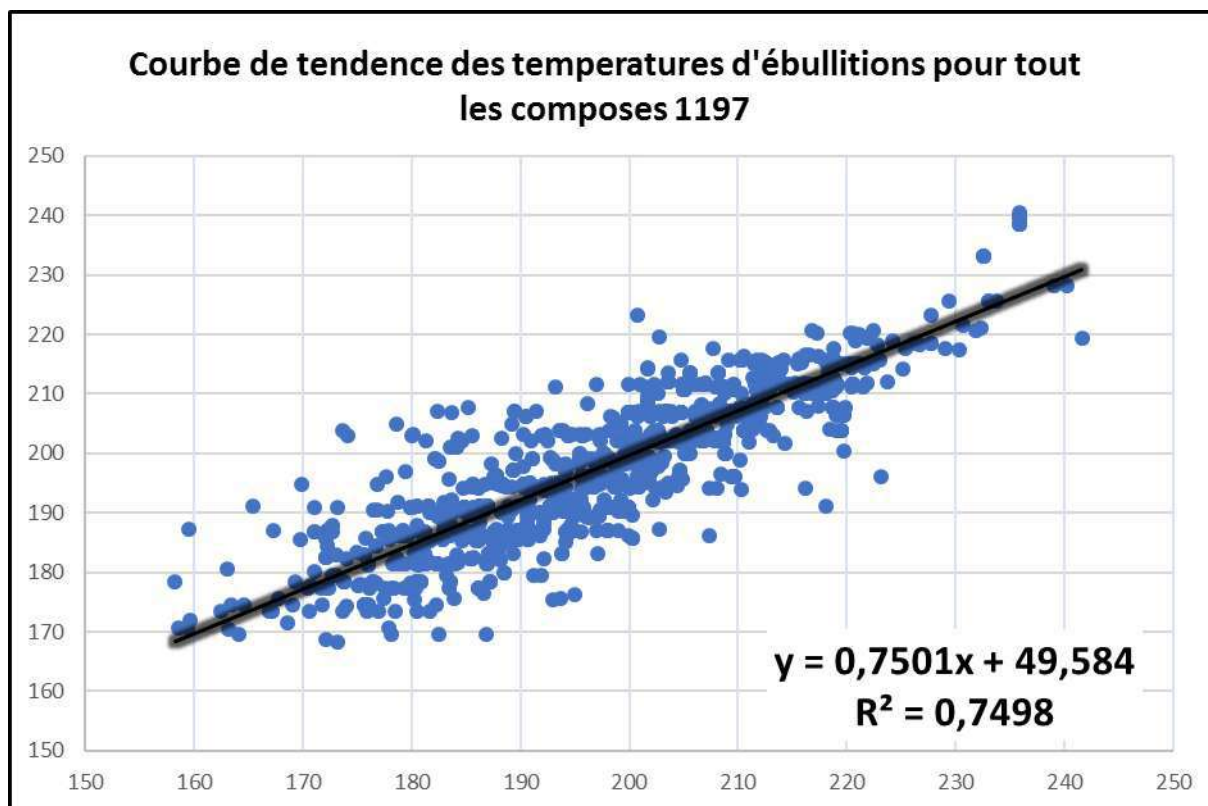


Figure (III-6) : Courbe de tendance de Téb calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 1197 composés

Pour les composés Aliphatiques (720 composés)

1/ Tableau (III.3) Résultats de régression de Téb pour les 720 composés

L'équation de régression	$Teb(exp) = - 743995 + 2,42 MW - 76402 AMW - 14,7 Sv + 1834709 Mv + 306691 Me - 760106 Mp + 280318 Mi - 0,70 nBT + 3,78 nBM + 14,0 RBN - 359 RBF + 13,9 nCIC - 6,34 nR05 + 8,3 nR08$
S	6.792
R^2	72.8%
R^2 (Ajust)	72.2%

2/ Analyse de variance

Tableau (III.4) Résultats d'Analyse de variance de Téb pour les 720 composés

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	14	86965.4	6211.8	134.65	0.000
Erreur réside	705	32524.4	46.1		
Total	719	119489.8			

3/ Représentation graphique :

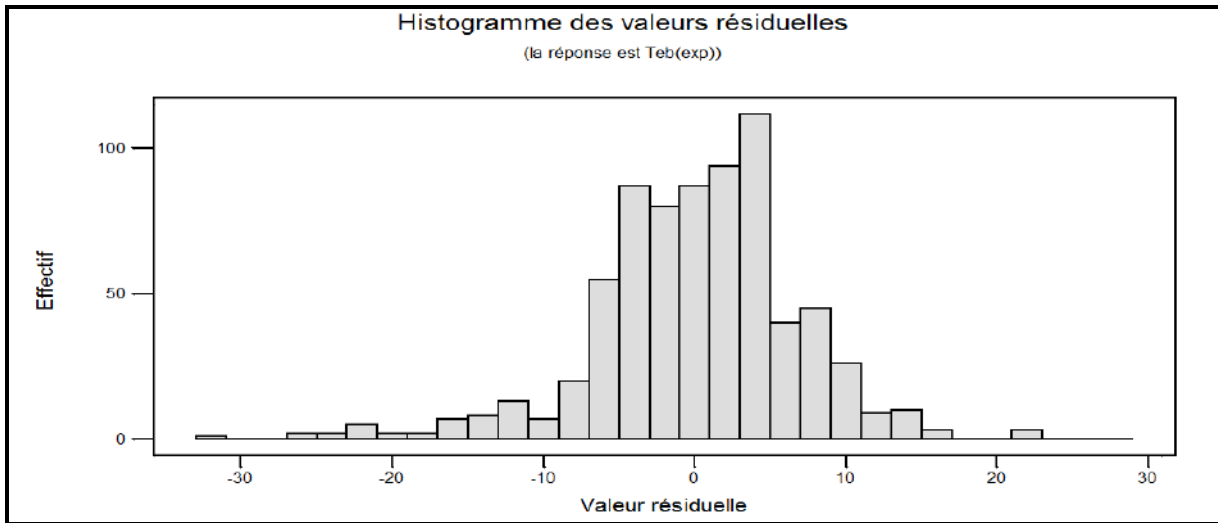


Figure (III.7) : Histogramme des valeurs résiduelles de Téb pour 720 composées Aliphatiques.

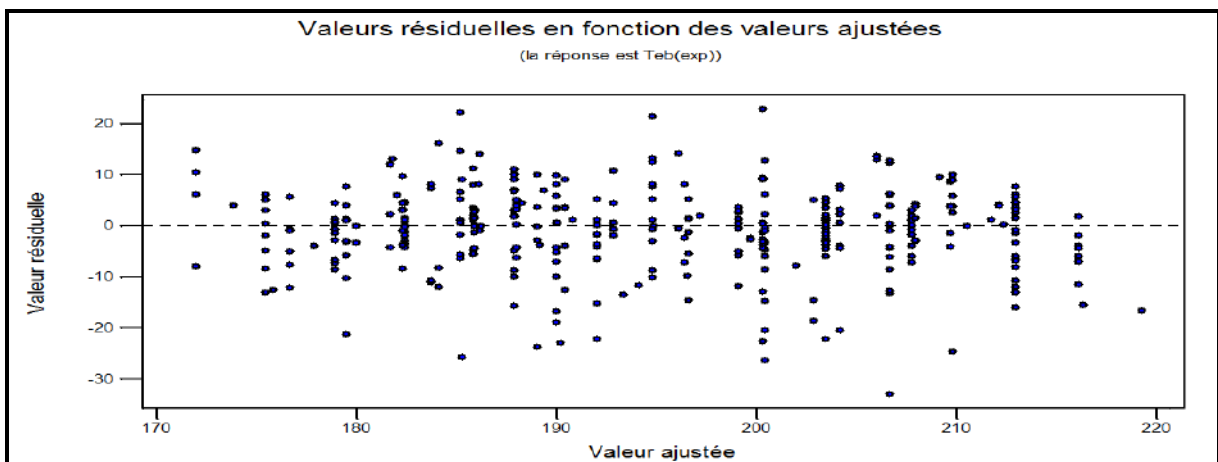
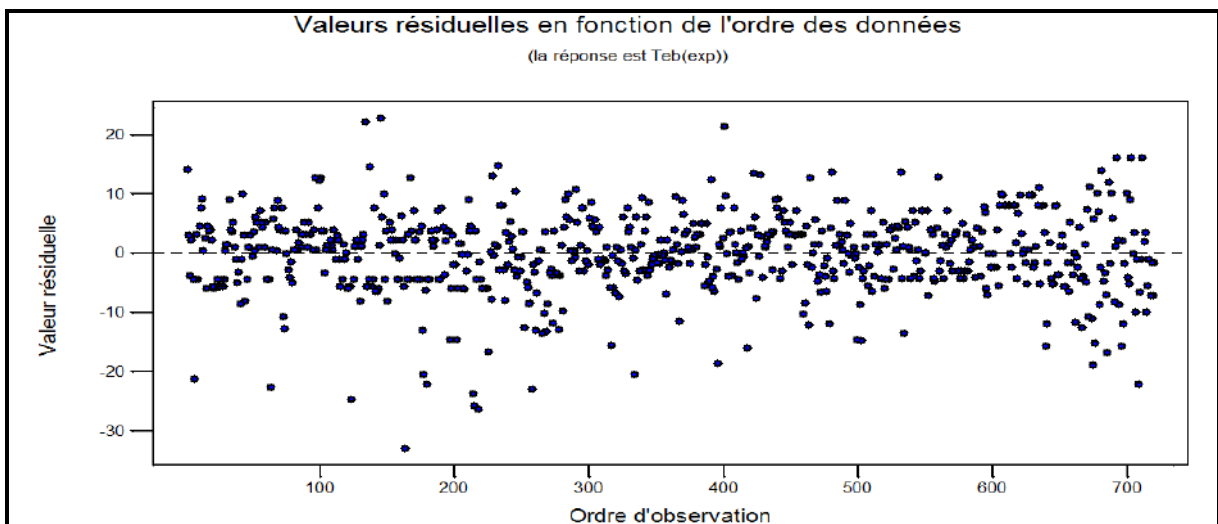


Figure (III.8) : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Téb pour 720 composées Aliphatiques.



Chapitre III : Résultats et discussion

Figure (III.9) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Té_b pour 720 composées Aliphatiques.

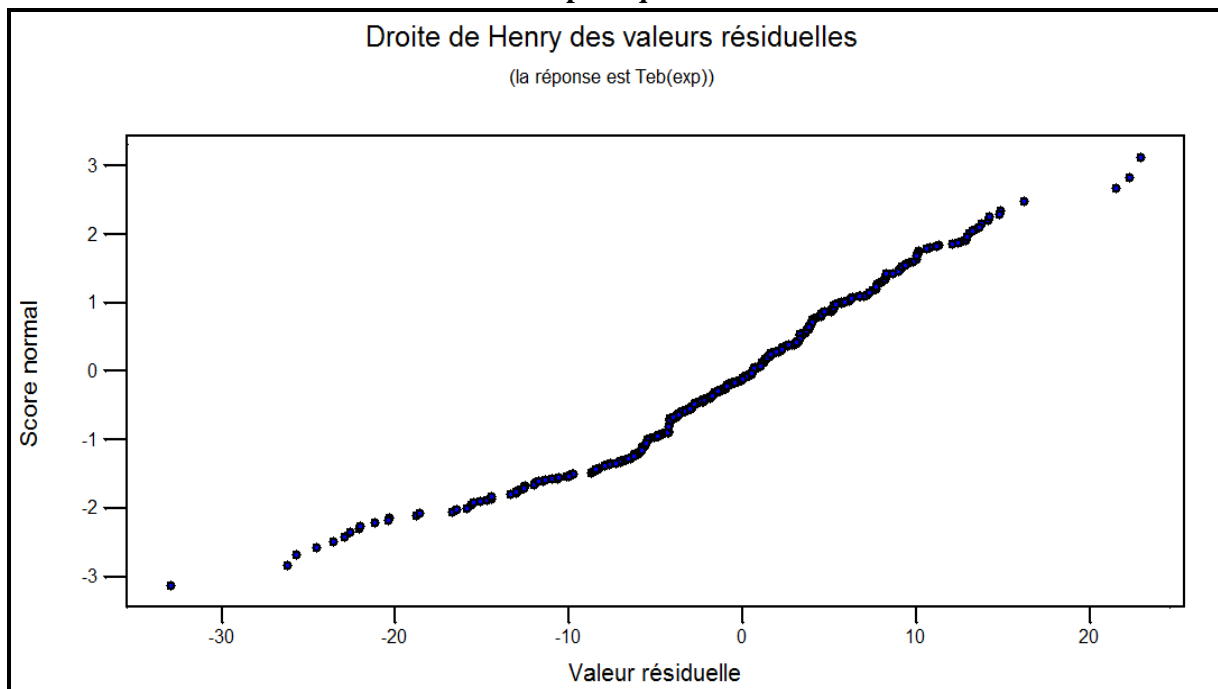


Figure (III.10) : Droite de Henry des valeurs résiduelles de Té_b pour 720 composées Aliphatiques.

L'équation de la régression des valeurs prédites de Té_b par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,7236x + 52,197$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,7278$. La figure (III.11) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

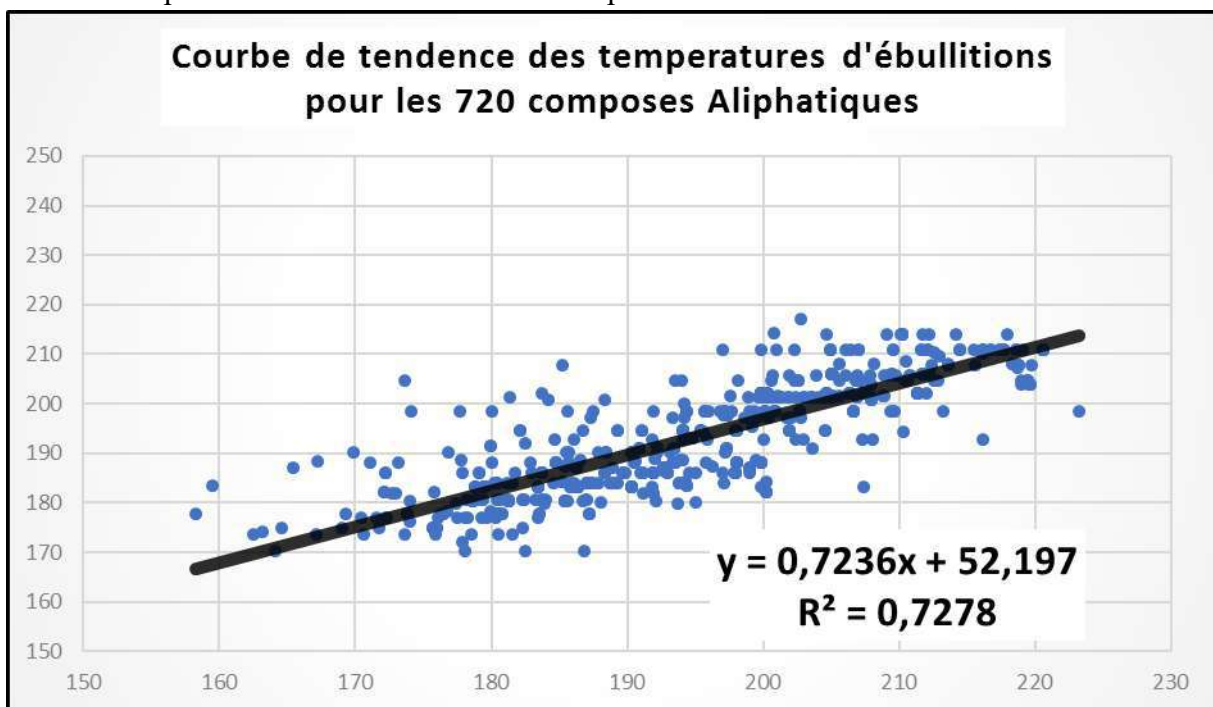


Figure (III.11) : Courbe de tendance de Té_b calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour 720 composées Aliphatiques.

Chapitre III : Résultats et discussion

Pour les composés Cycliques (477 composés)

1/ Tableau (III.5) Résultats de régression de Téb pour les 477 composés Cycliques

L'équation de régression	$Teb(exp) = - 6108546 + 4,34 MW - 34305 AMW - 46,3 Sv - 2081 Mv + 6523104 Me + 9,2 nBT - 0,58 nBM + 4,90 RBN + 12 RBF + 32,2 nCIC + 13,7 nCIR - 54,3 nR03 - 43,7 nR04 - 39,4 nR05 - 35,6 nR06 - 30,2 nR07 - 23,6 nR08 - 19,4 nR09 - 13,6 nR10 - 6,65 nR11$
S	7.092
R ²	80.9%
R ² (Ajust)	80.1%

2/ Analyse de variance

Tableau (III.6) Résultats d'Analyse de variance de Téb pour les 477 composés Cycliques

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	20	97096.9	4854.8	96.53	0.000
Erreur réside	456	22932.7	50.3		
Total	476	120029.6			

3/ Représentation graphique :

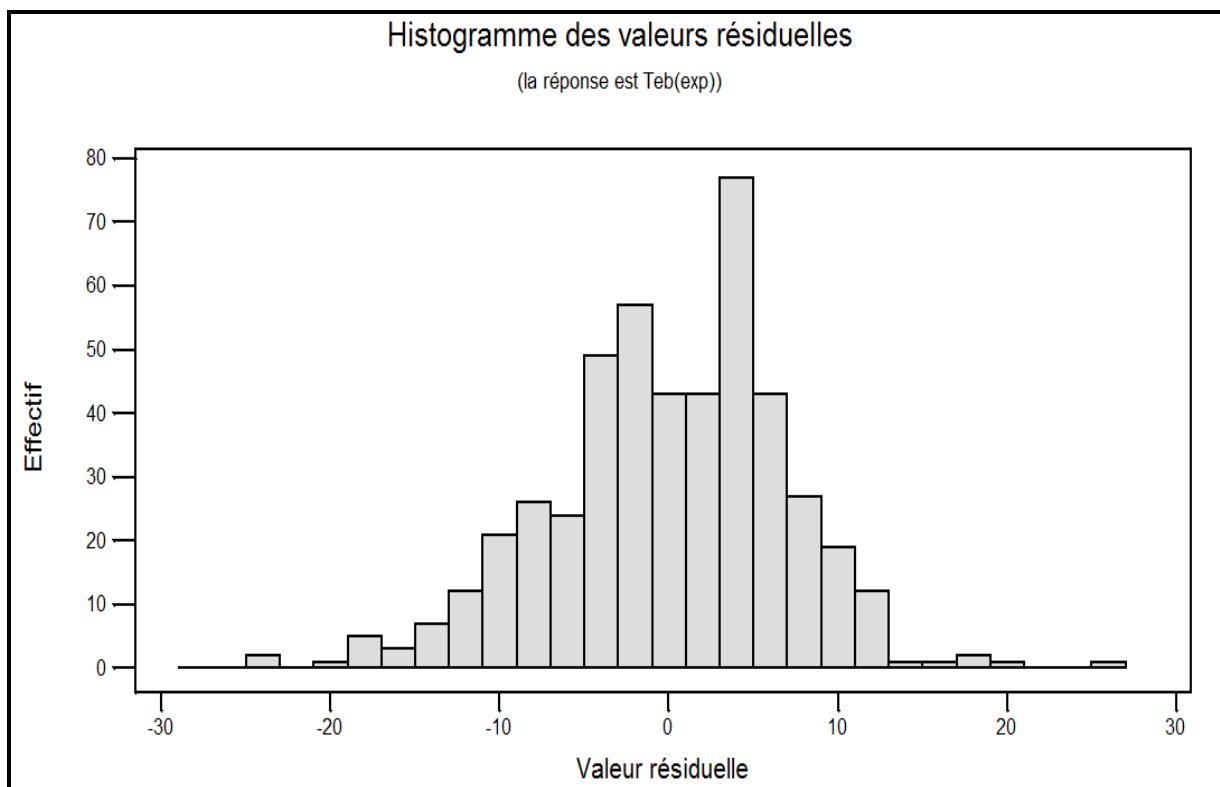


Figure (III.12) : Histogramme des valeurs résiduelles de Téb pour les 477 composés Cycliques.

Chapitre III : Résultats et discussion

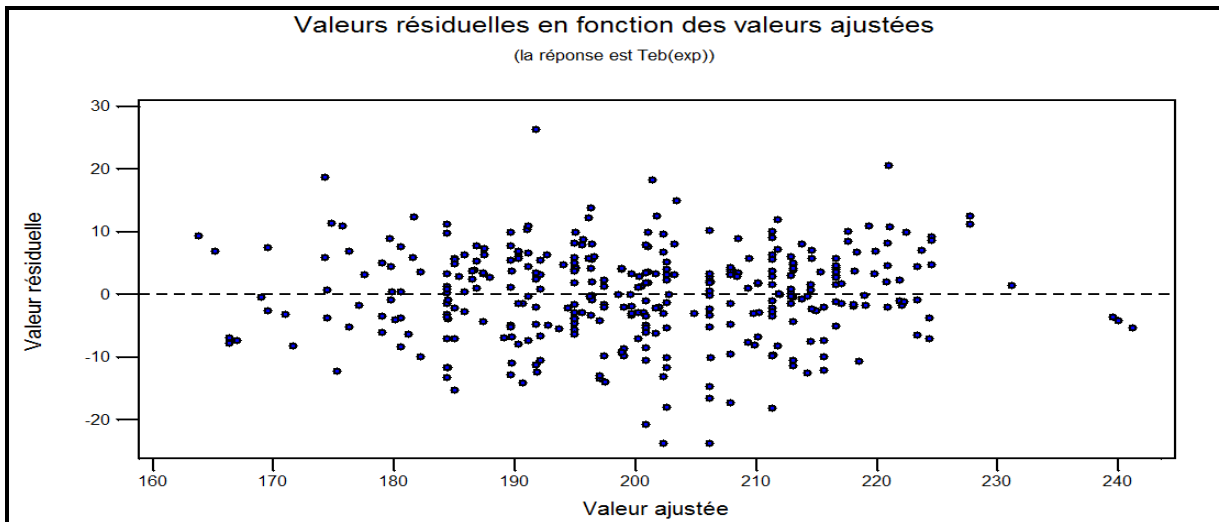


Figure (III.13) : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Teb pour les 477 composés Cycliques.

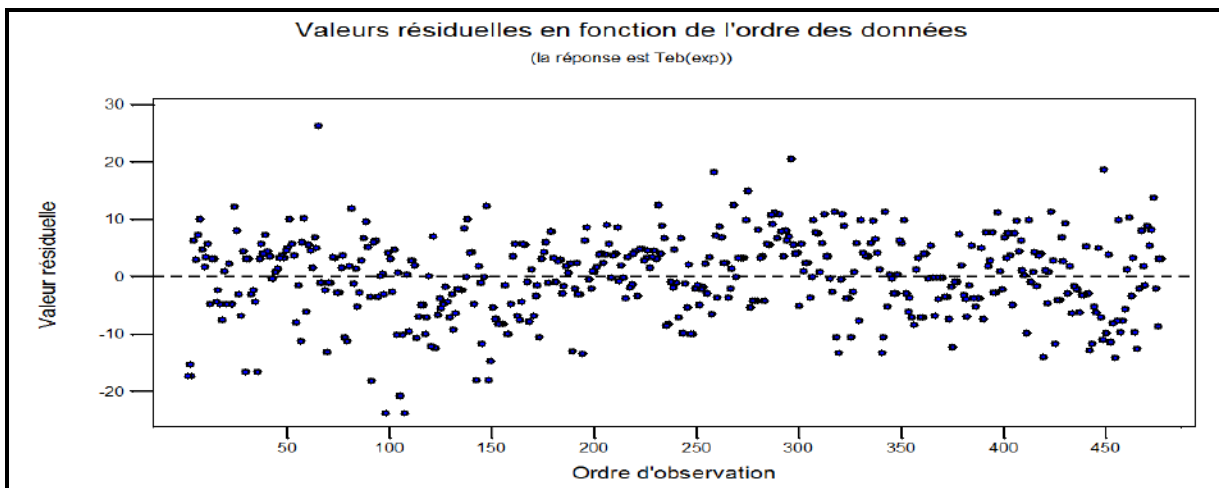


Figure (III.14) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Teb pour les 477 composés Cycliques.

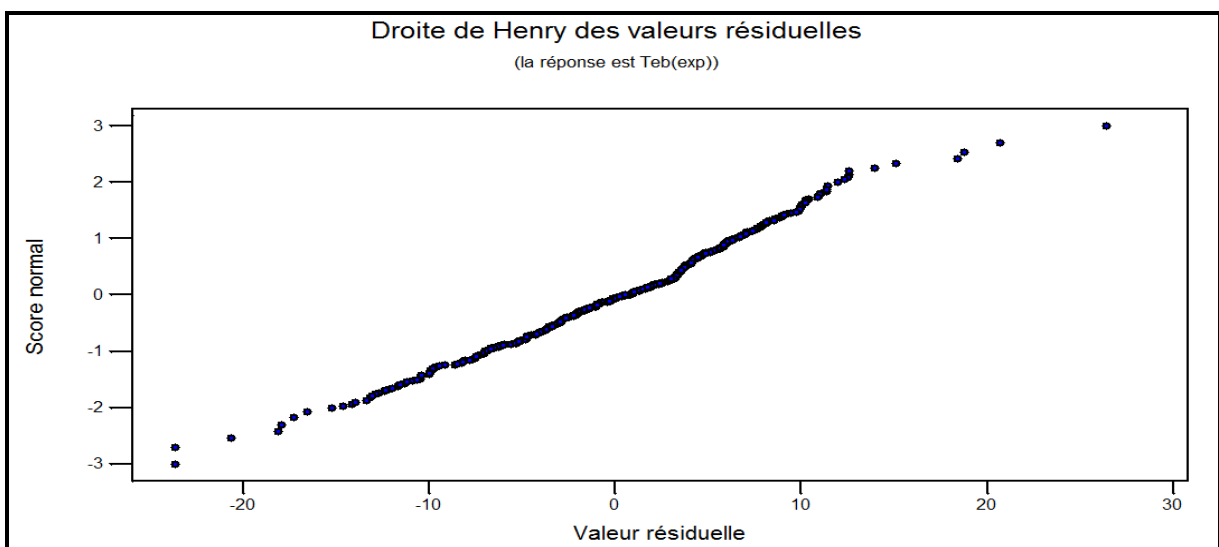


Figure (III.15) : Droite de Henry des valeurs résiduelles de Teb pour les 477 composés Cycliques.

Chapitre III : Résultats et discussion

L'équation de la régression des valeurs prédites de Téb par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,8118x + 37,543$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,8081$. La figure (III.16) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

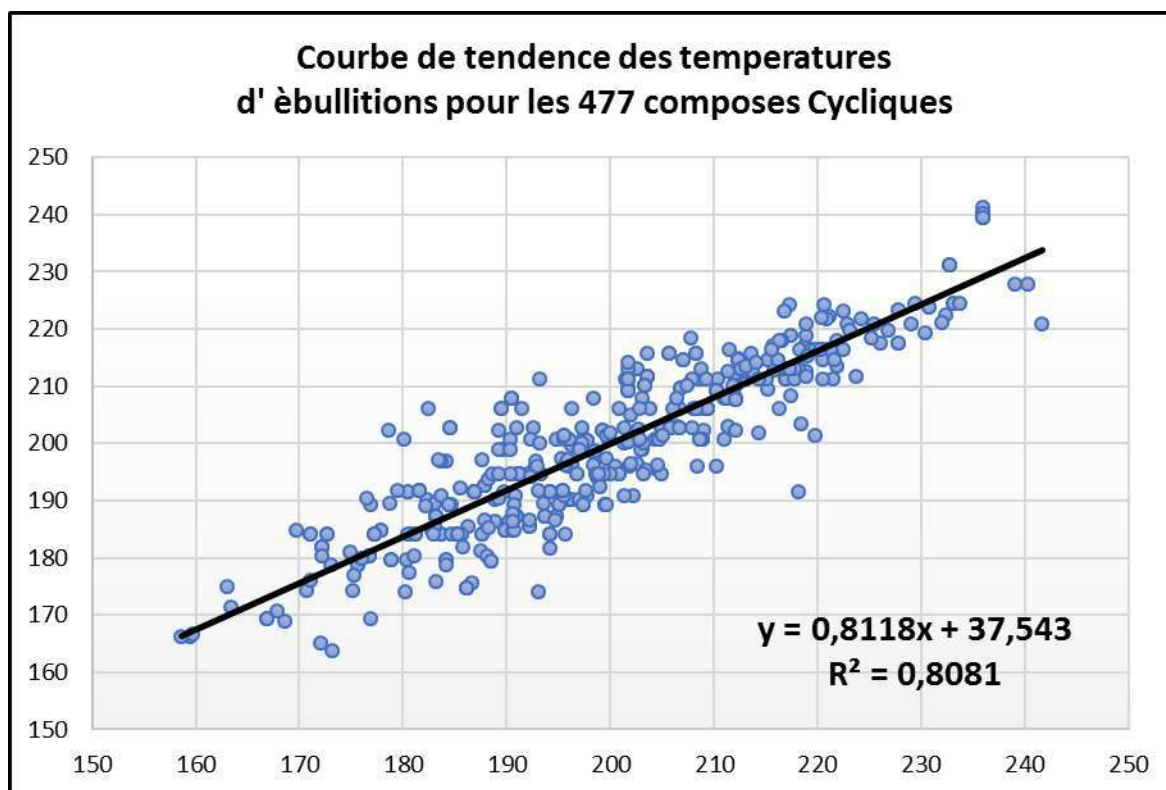


Figure (III.16) : Courbe de tendance de Téb calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 477 composés Cycliques

III.3.2. Pour la température de Fusion (Tf) :

Après analyse statistique par Minitab on obtient les résultats suivants :

Pour tous les composés (696 composés)

1/ Tableau (III.7) Résultats de régression de Tf pour les 696 composés

L'équation de régression	$Tf(\text{exp}) = 377995 + 20,1 \text{ MW} + 315 \text{ AMW} - 213 \text{ Sv} + 26601 \text{ Mv} - 408944 \text{ Me} + 16,2 \text{ nBT} - 18,9 \text{ nBM} + 8,57 \text{ RBN} - 200 \text{ RBF} - 5,90 \text{ nCIR} - 11,9 \text{ nR03} - 10,1 \text{ nR04} - 10,1 \text{ nR05} - 7,94 \text{ nR06} - 6,19 \text{ nR07} - 5,52 \text{ nR08} + 4,34 \text{ nR09} - 2,06 \text{ nR10} - 1,85 \text{ nR11}$
S	7.881
R^2	68.9%
R^2 (Ajust)	68.0%

Chapitre III : Résultats et discussion

2/ Analyse de variance

Tableau (III.8) Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 696 composés

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	19	92967.3	4893.0	78.78	0.000
Erreur réside	676	41984.5	62.1		
Total	695	134951.7			

3/ Représentation graphique :

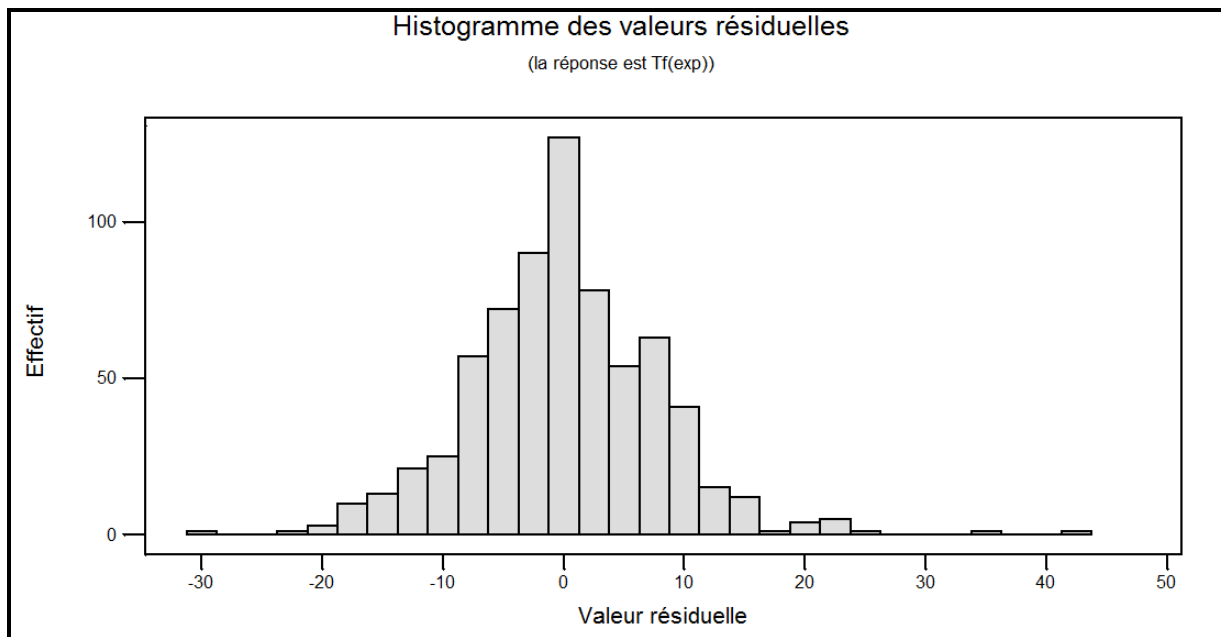


Figure (III.17) : Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour 696 composées

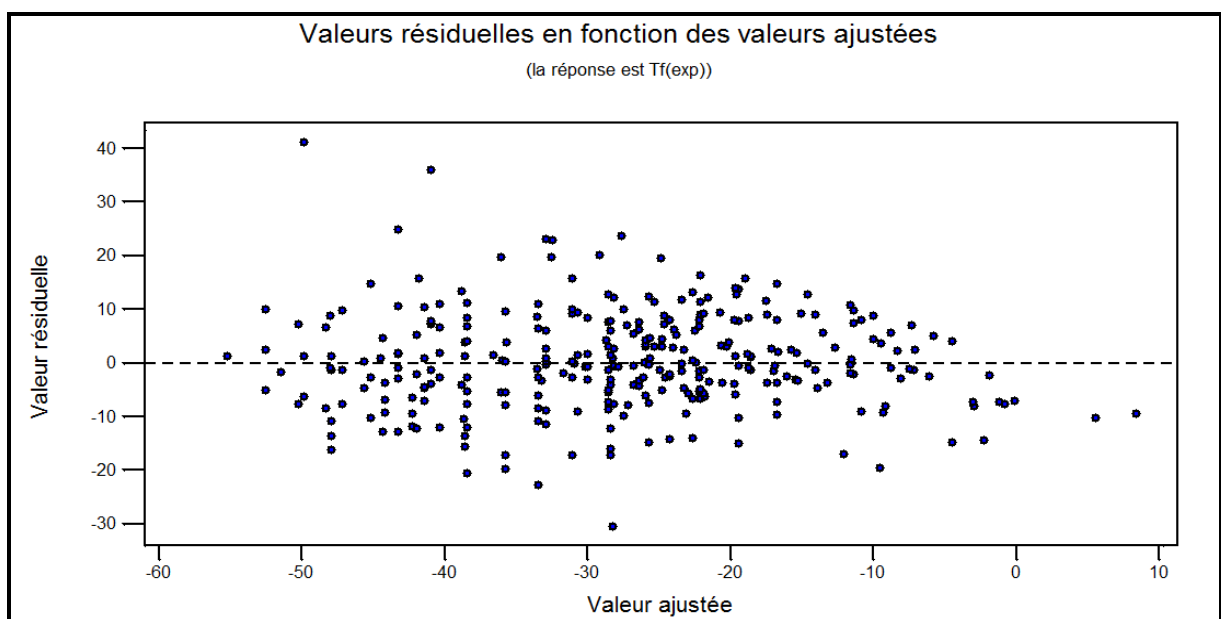


Figure (III.18) : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour 696 composées

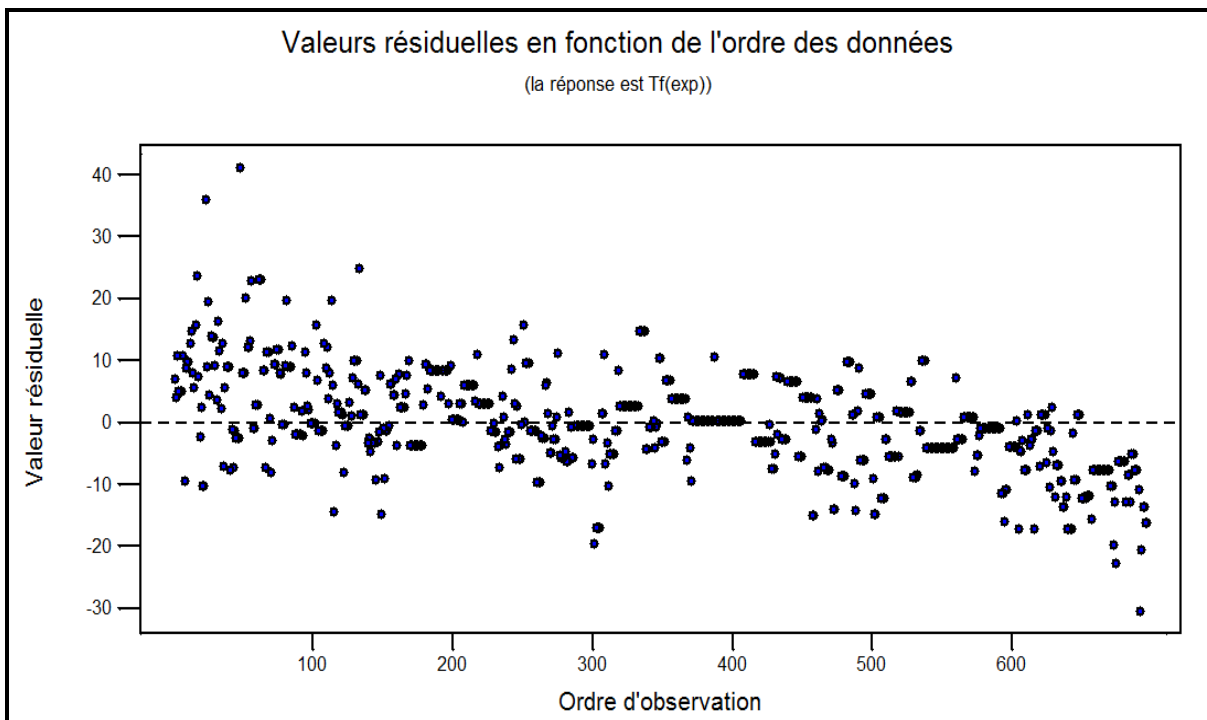


Figure (III.19) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 696 composées

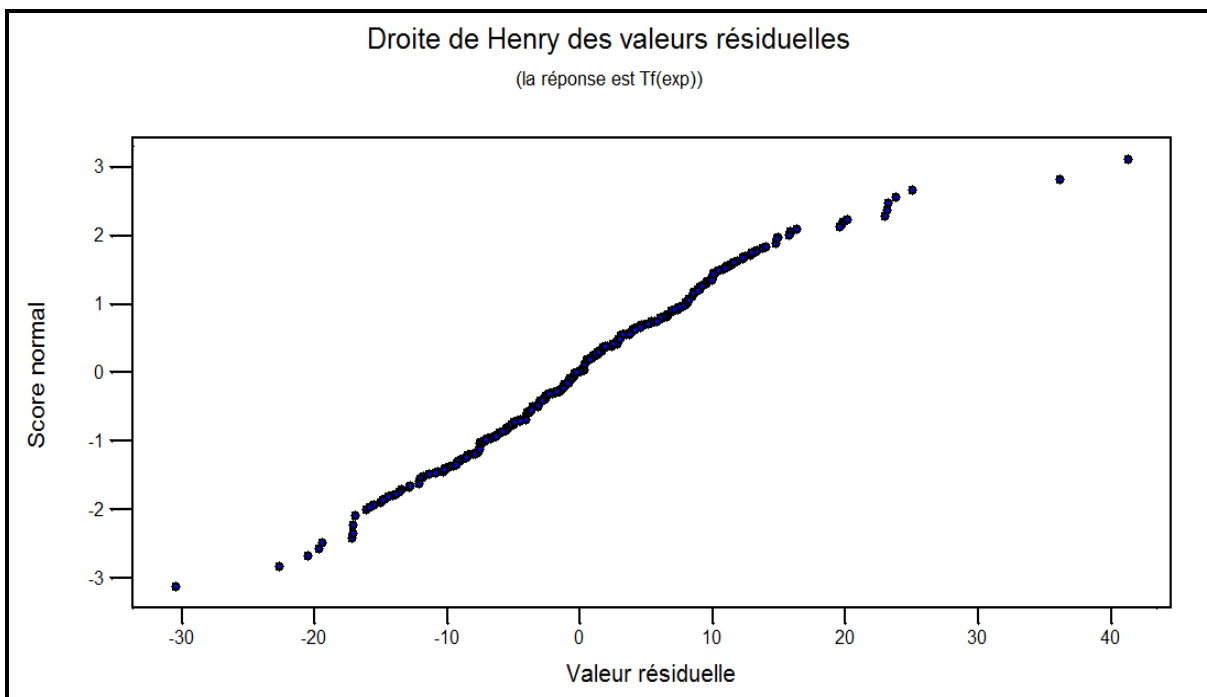


Figure (III.20) : droite de henry des valeurs résiduelles de Tf pour 696 composées

L'équation de la régression des valeurs prédites de Tf par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,6892x + 1,7104$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,687$. La figure (III.21) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

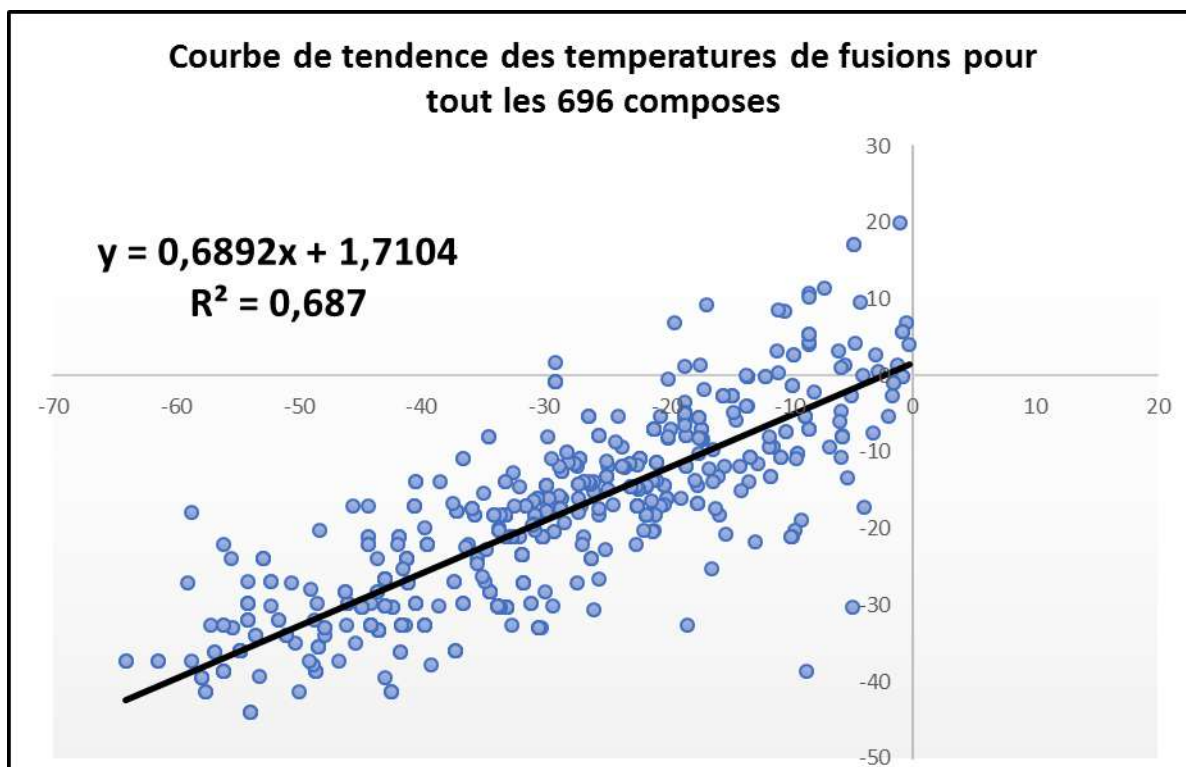


Figure (III.21) : Courbe de tendance de Tf calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 696 composés

Pour les composés Aliphatiques (430 composés)

1/ Tableau (III.9) Résultats de régression de Tf pour les 430 composés

L'équation de régression	$Tf(\text{exp}) = 210091 + 14,0 \text{ MW} + 12530 \text{ AMW} - 123 \text{ Sv} - 173275 \text{ Mv} - 187867 \text{ Me} - 1,60 \text{ nBT} - 19,7 \text{ nBM} + 8,96 \text{ RBN} - 201 \text{ RBF} - 4,93 \text{ nR05}$
S	7.744
R ²	56.0%
R ² (Ajust)	54.9%

2/ Analyse de variance

Tableau (III.10) Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 430 composés

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	10	31949.6	3195.0	53.28	0.000
Erreur réside	419	251226.2	60.0		
Total	429	57075.7			

Chapitre III : Résultats et discussion

3/ Représentation graphique :

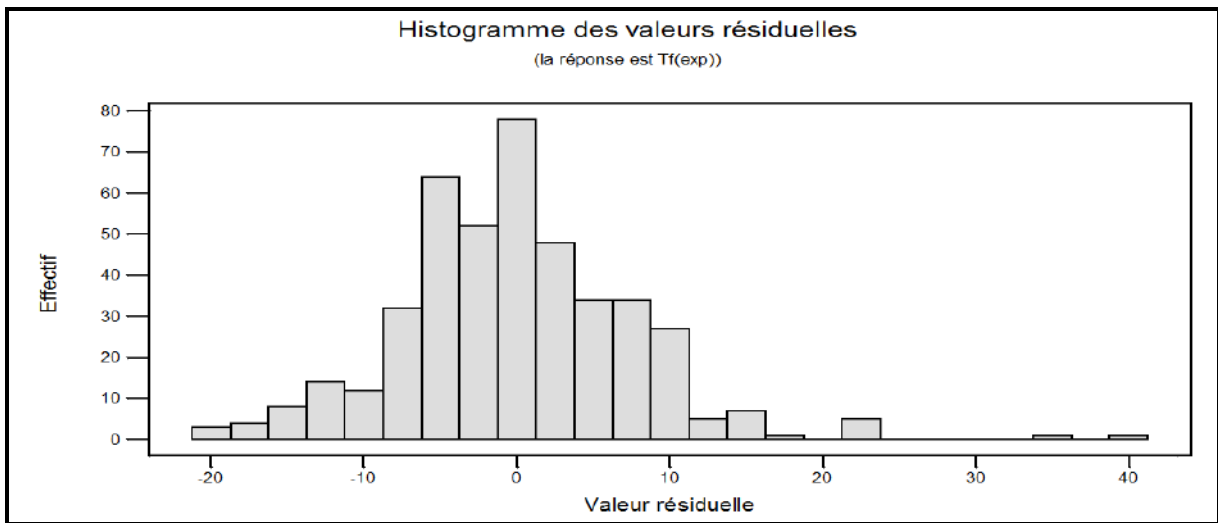


Figure (III.22) : Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour 430 composées Aliphatiques.

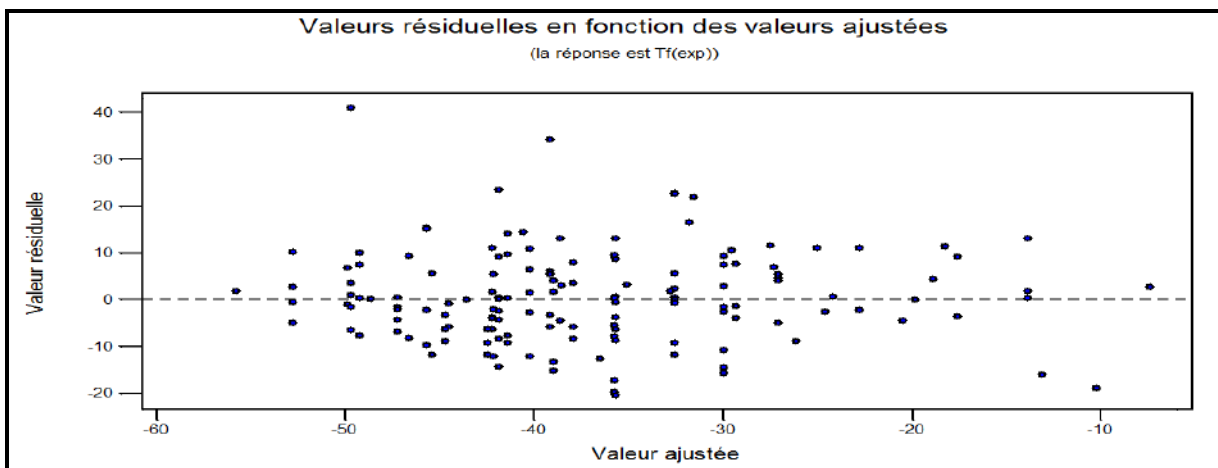


Figure (III.23) : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour 430 composées Aliphatiques.

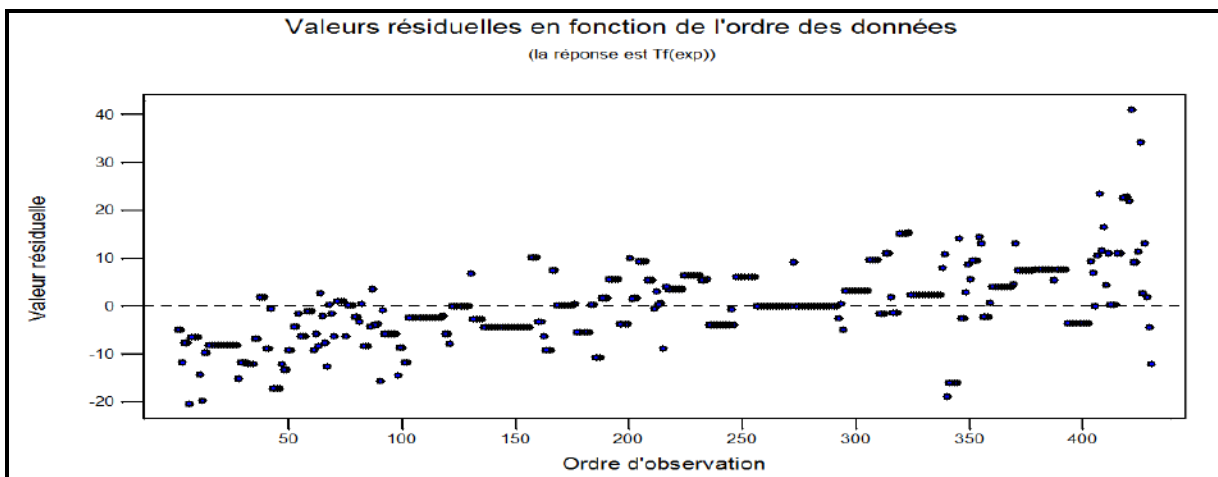


Figure (III.24) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour 430 composées Aliphatiques.

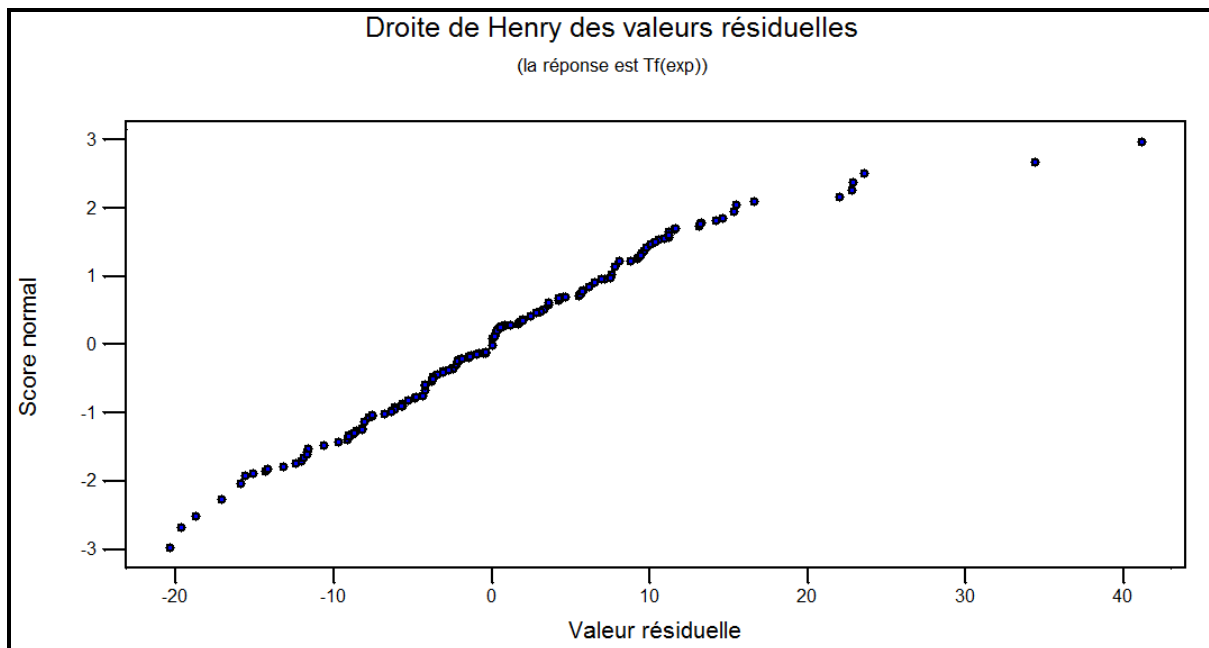


Figure (III.25) : Droite de Henry des valeurs résiduelles de Tf pour 430 composés Aliphatiques.

L'équation de la régression des valeurs prédites de Tf par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,5635x - 6,1323$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,5577$. La figure (III.26) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

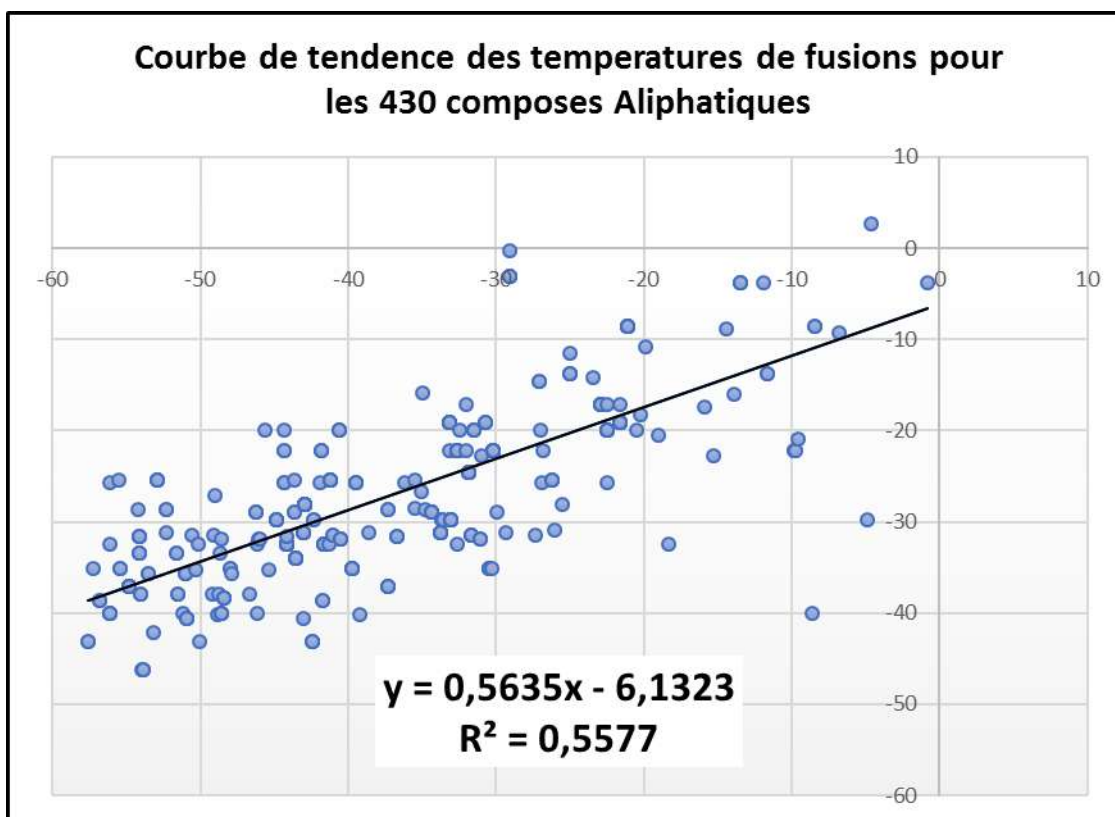


Figure (III.26) : Courbe de tendance de Tf calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour 430 composés Aliphatiques.

Chapitre III : Résultats et discussion

Pour les composés Cycliques (266 composés)

1/ Tableau (III.11) Résultats de régression de Tf pour les 266 composés Cycliques

L'équation de régression	$Tf(\text{exp}) = 928 + 25,9 \text{ MW} - 217 \text{ AMW} - 264 \text{ Sv} + 14,8 \text{ nBT} + 7,07 \text{ RBN} - 194 \text{ RBF} - 2,64 \text{ nCIR} - 2,06 \text{ nR03} - 2,60 \text{ nR04} - 2,57 \text{ nR05} - 2,89 \text{ nR06} - 0,05 \text{ nR07} - 0,26 \text{ nR08} + 8,35 \text{ nR09} + 1,38 \text{ nR10} + 0,52 \text{ nR11}$
S	7.181
R ²	54.9 %
R ² (ajust)	52.0 %

2/ Analyse de variance

Tableau (III.12) Résultats d'Analyse de variance de Tf pour les 266 composés Cycliques

Source	DL	SC	CM	F	P
Régression	16	15631.05	976.94	18.95	0.000
Erreur réside	249	12838.97	51.56		
Total	265	28470.02			

3/ Représentation graphique :

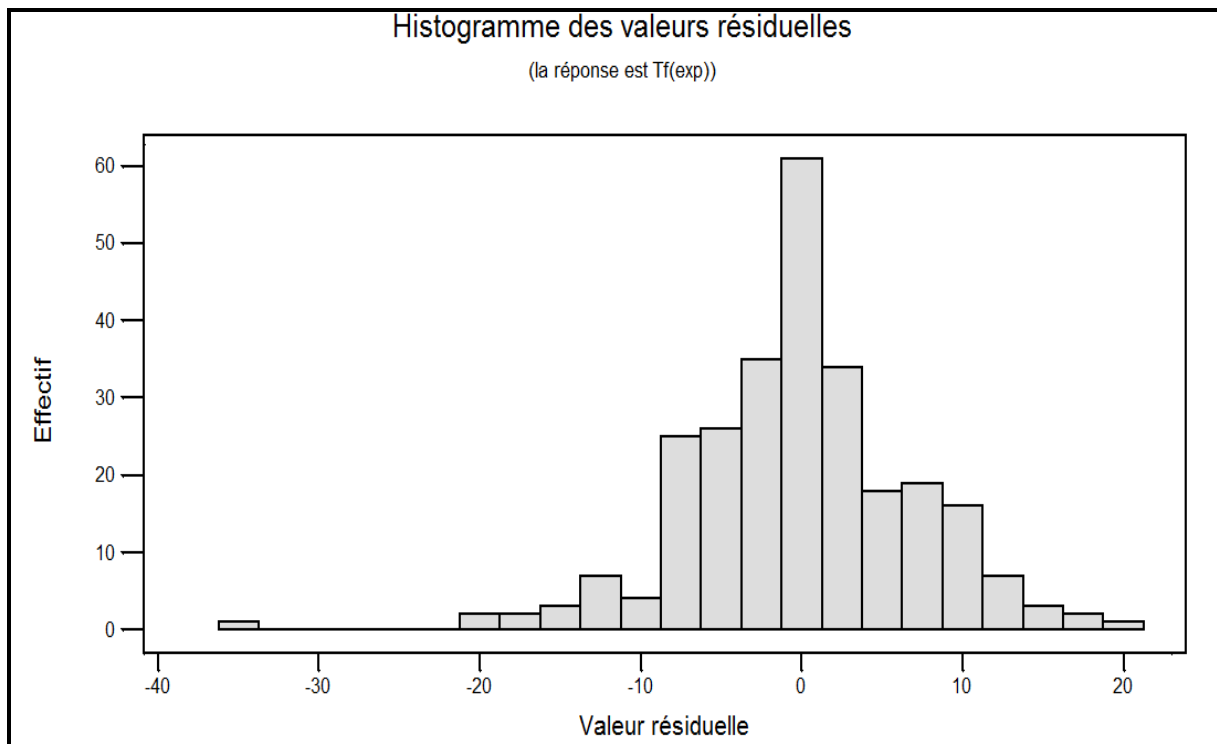


Figure (III.27) : Histogramme des valeurs résiduelles de Tf pour les 266 composés Cycliques.

Chapitre III : Résultats et discussion

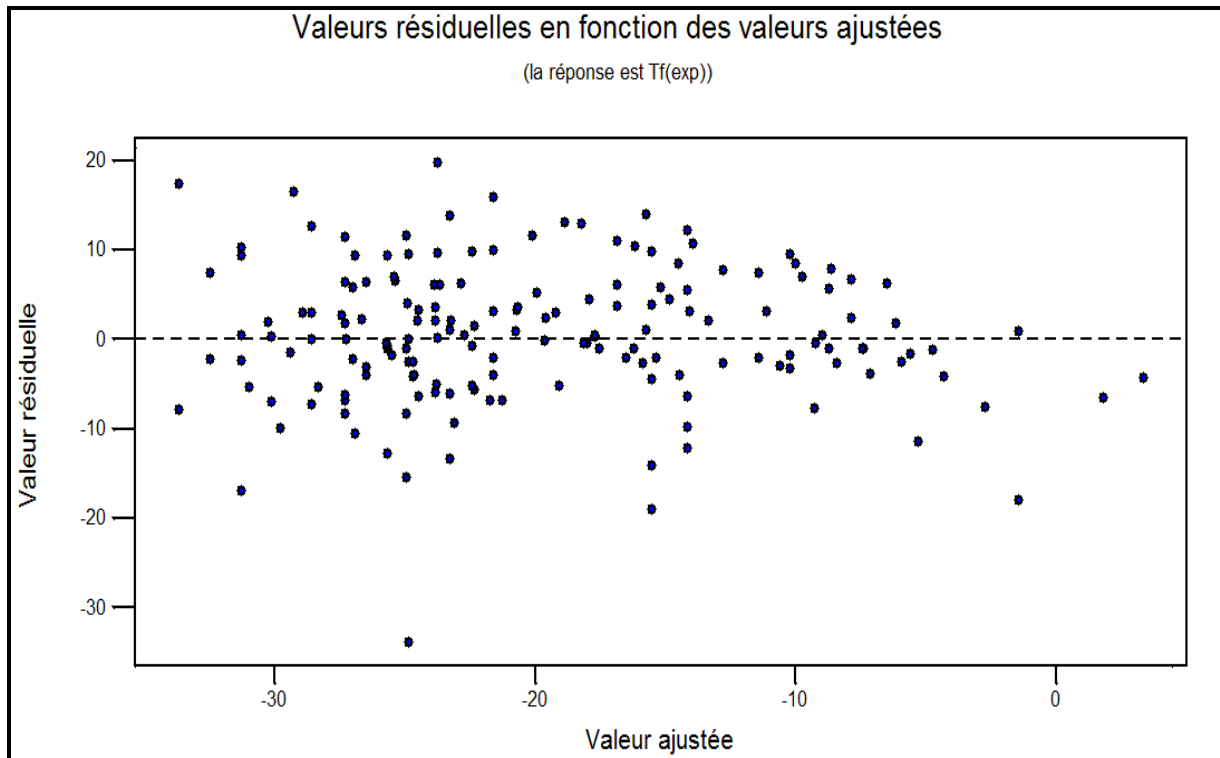


Figure (III.28) : valeurs résiduelles en fonction des valeurs ajustées de Tf pour les 266 composés Cycliques.

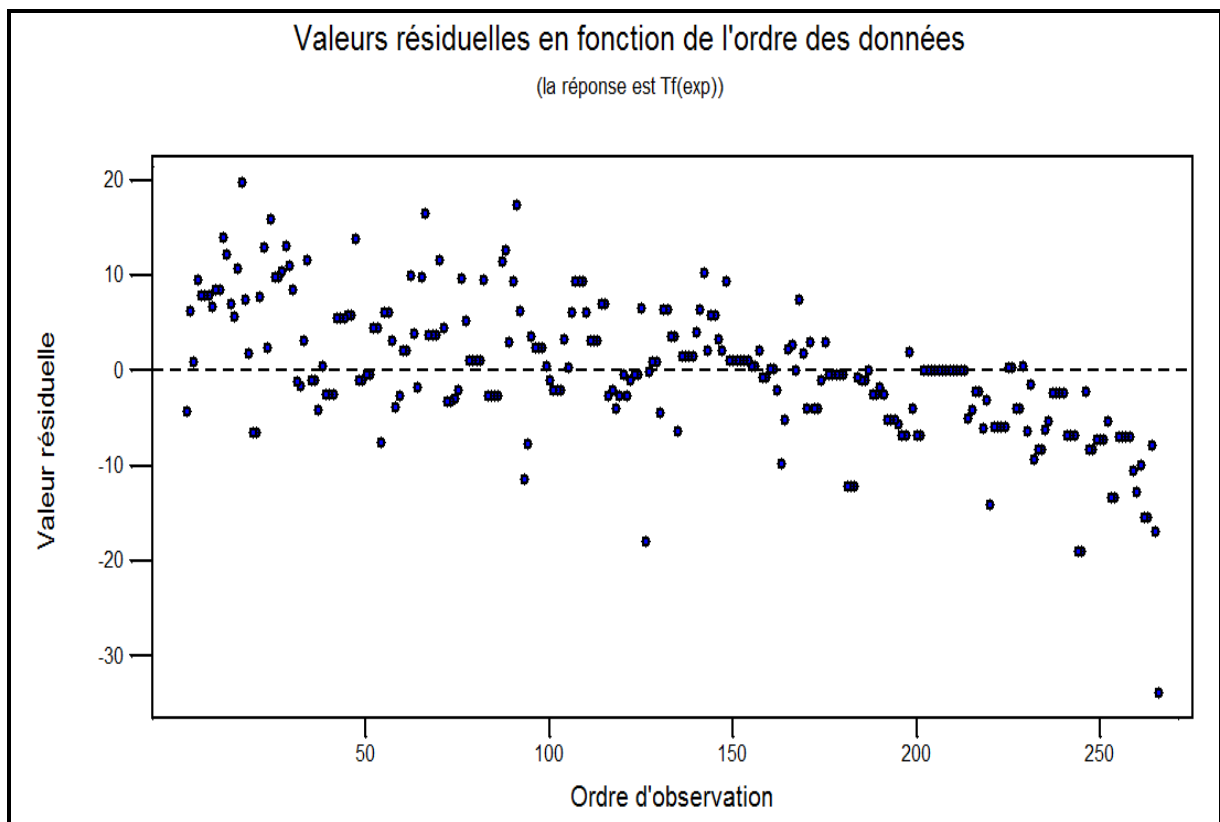


Figure (III.29) : valeurs résiduelles en fonction de l'ordre des données de Tf pour les 266 composés Cycliques.

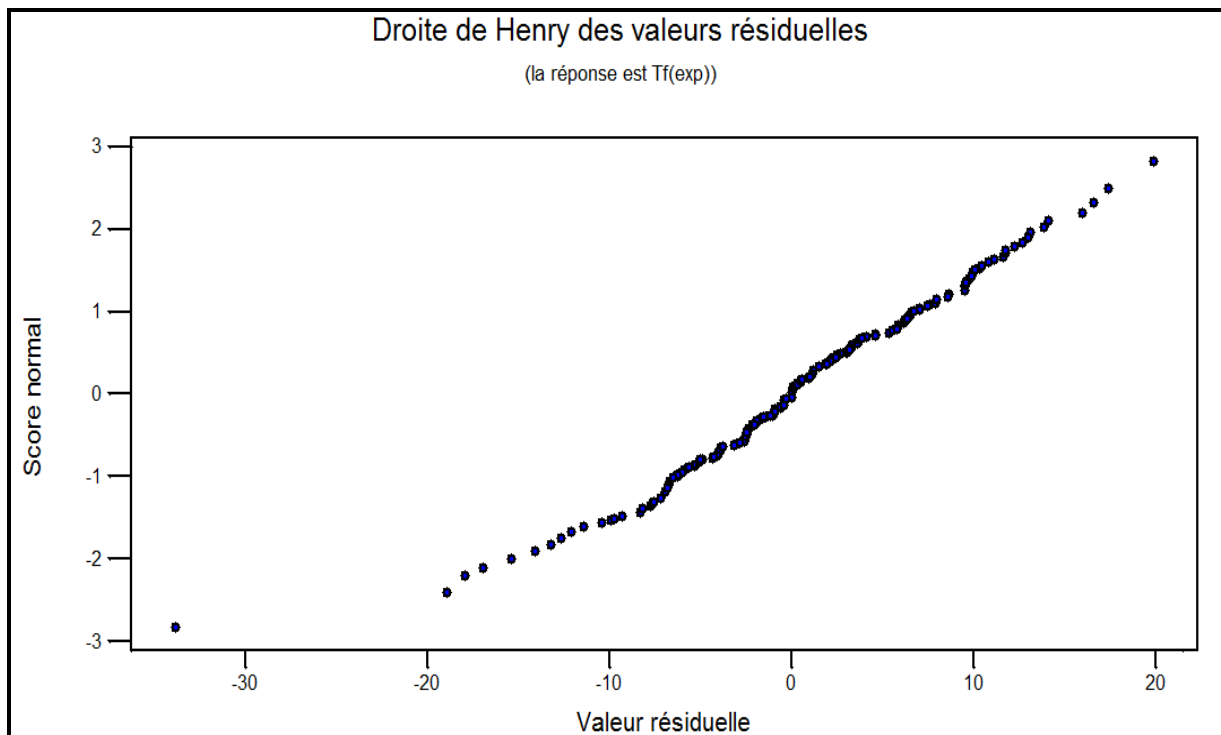


Figure (III.30) : Droite de Henry des valeurs résiduelles de Tf pour les 266 composés Cycliques.

L'équation de la régression des valeurs prédites de Tf par rapport aux valeurs expérimentales a une tendance linéaire de forme : $y = 0,5384x - 16,496$, son coefficient de régression est $R^2 = 0,548$. La figure (III.31) représente les valeurs des températures d'ébullition prédites en fonction des valeurs expérimentales.

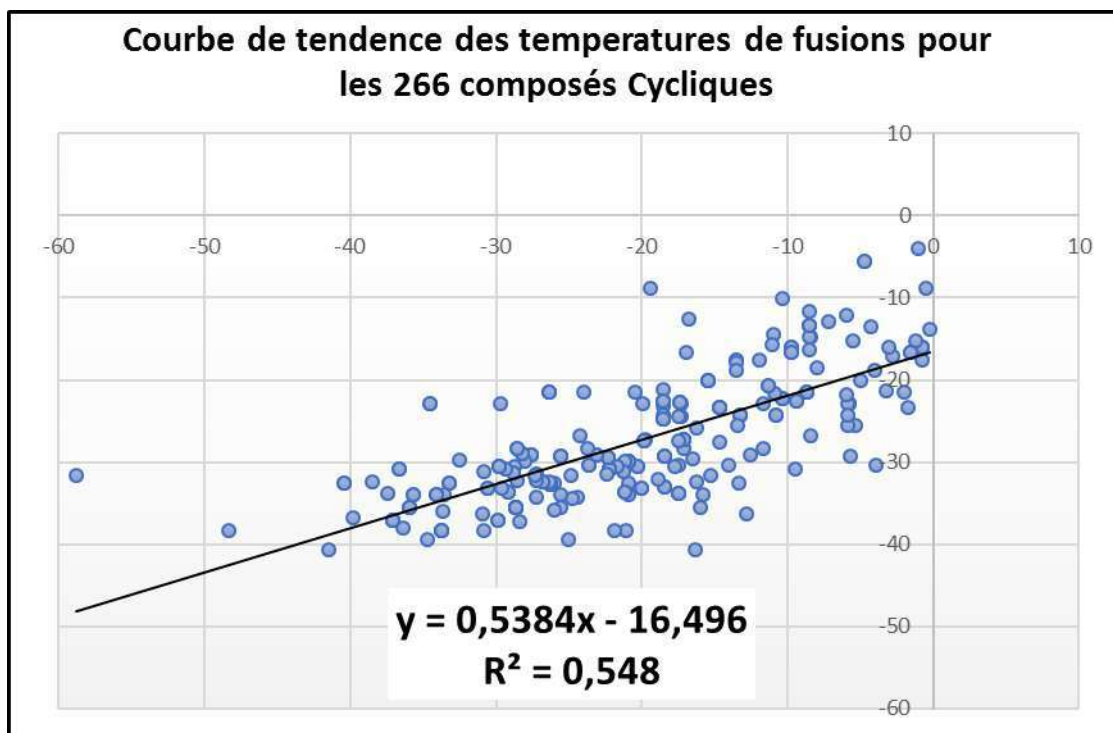


Figure (III.31) : Courbe de tendance de Tf calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour les 266 composés Cycliques.

III.4. Conclusion

Les résultats de prédiction des températures d'ébullition et de fusion pour la coupe de C_{11} à C_{12} dont les constituants qui peuvent aller jusqu'à 1197 hydrocarbures de toutes familles (aliphatiques, cycliques, aromatiques ...), montrent que les T_{eb} sont bien simulées avec un coefficient de corrélation de l'ordre de 80%.

En comparant nos résultats à ceux trouvés par A. Kerkouri et al. (2018), on remarque que les résultats de ces derniers sont plus prédictifs pour la propriété T_{eb} de cette coupe par rapport à nos résultats.

La baisse dans la valeur de notre coefficient de corrélation revient d'une part à la base de données des auteurs qui est relativement petite (113 composés) par rapport à la nôtre (1197 composés), d'autre part, les coupes ne sont pas les mêmes, la coupe étudiée par les dits auteurs concernait les essences légères de C_5 à C_{11} et leurs $R^2=97\%$. Il en est de même lorsqu'on a séparé l'étude pour les composés aliphatiques ou cycliques.

En ce qui concerne la propriété physique T_{fusion} , contrairement aux températures d'ébullition, on remarque que nos résultats sont relativement proches des résultats des auteurs sus cités. En effet les coefficients de corrélation oscillent dans l'ordre de 60% dans les deux études. Il en est de même pour les résultats des hydrocarbures aliphatiques et cycliques.



***Conclusion
Générale***

Conclusion Générale

Dans ce travail nous avons réussi à développer des modèles d'équations ayant pour but de prédire les températures d'ébullition et de fusion de la coupe de kérosène (C_{11} - C_{12}).

La base d'hydrocarbure compilée contient 1197 éléments répartie en 720 hydrocarbures Aliphatiques et, 477 hydrocarbures Cycliques. Elle contient toutes les informations concernant les hydrocarbures étudiés, notamment, le nom, la formule, le poids moléculaire, les températures d'ébullition et de fusion expérimentales et prédites par nos relations QSPR élaborées.

Les modèles développés simulent avec une grande approche les températures d'ébullition et de fusion, du moment que les coefficients de corrélation sont de l'ordre de (0.75 pour les températures d'ébullition, et 0.68 pour les températures de fusion), et cela pour la base de données entière (1197 composés).

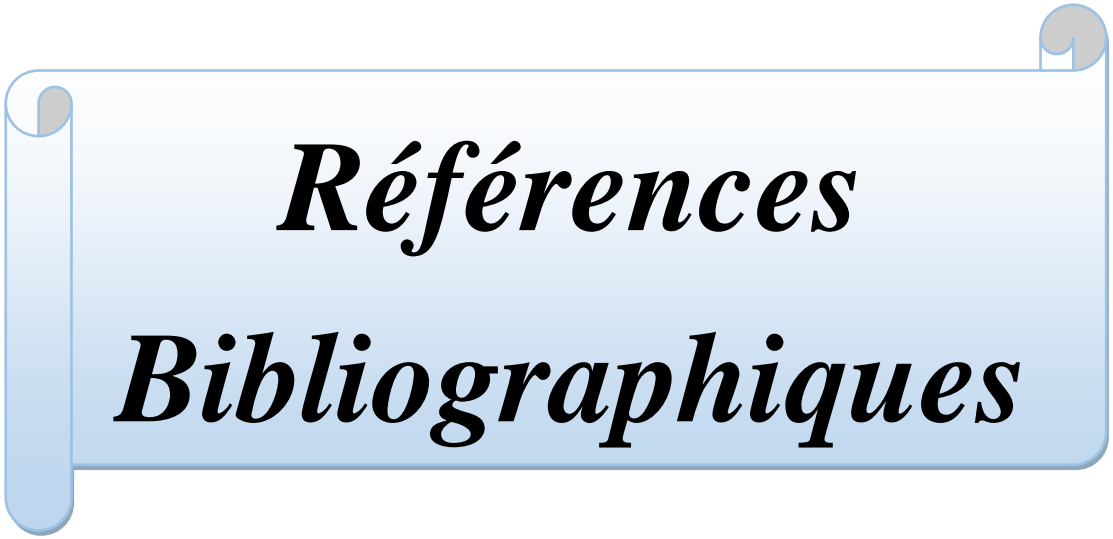
Le coefficient de corrélation a recouru un accru pour les composées Cycliques ($R^2=0.80$ pour 477 composés).

Nos relations donnent de très bons résultats pour la simulation des températures d'ébullition pour ce type de composés.

Mais les corrélations en ce qui concerne les températures de fusion sont moyens, ils sont de l'ordre de 0.5, cela est dû aux rapprochements des températures d'ébullition expérimentales de la coupe étudiée d'une part, mais, d'une autre part, les grandes différences en ce qui est des points de fusion qui fluctuaient entre -64° et -0.26°C , a atténué probablement la valeur des coefficients de corrélation.

D'après cette étude, on conclut que la prédiction des paramètres physicochimiques par QSPR (Quantitative Structure - Property Relationship) pourrait être très utile dans le domaine du raffinage du pétrole et dans l'industrie pétrochimique, surtout pour les paramètres qui sont difficilement accessibles.

Cette étude servira comme base de données pour les chercheurs dans le domaine du raffinage et facilitera la recherche des paramètres physico-chimiques (température d'ébullition, température de fusion), ainsi que la détermination expérimentale de ceux-ci notamment pour les hydrocarbures non connus.



***Références
Bibliographiques***

Références bibliographiques

- [01] M. Diaby. Compréhension des mécanismes de formation de dépôts en fond de première gorge de piston de moteurs Diesel. Chemical Sciences. Ecole Polytechnique X, 2009. English. <Pastel-00005625>
- [02] Y. Jullien, « Synthèse de dérivés phosphosoufres potentiellement biodégradables : formulation d'un lubrifiant à base d'huile de colza », 1998
- [03] Durousset, M., Le marché du pétrole. Paris: Collection HISTEGE, (1999).
- [04] WAUQUIER, J, P., Le raffinage du pétrole, produits pétroliers, schémas de fabrication.
- [05] J. WEISSMANN, 'Carburants et combustibles pour moteurs à combustion interne', édition Technip Paris, 1970.
- [06] HADJARAB. D, Cours de raffinage 4^{ème} année
- [07] SELLAMI.H, Cours de raffinage et pétrochimie, UKMOuargla, page 9
- [08] D. UZIO." catalyse a raffinage ". Division catalyse - Société Chimique de France, pp.1-2. 2011.
- [09] J.-M. STELLMAN. "Encyclopédie de sécurité et de santé au travail". Vol 3, pp. 78.9-78.12. International Labour Organisation, 2002.
- [10] Mridul Gautam, Karthik Chitoor, Murali Durbha, Jerry C. Summers. Effect of diesel soot contaminated oil on engine wear – investigation of novel oil formulation. Elsevier.
- [11] R. PERRIN, J.-P. SCHARFF. "Chimie industrielle : cours 2e et 3e cycle école D'ingénieurs ", pp. 63-66. Éditions Dunod, 2002.
- [12] J.-P. FAVENNEC (1998). " Le Raffinage du pétrole : Exploitation et gestion de la raffinerie". Tome 5, pp. 55-126. Éditions OPHRYS, 1998.
- [13] É. TECQUÉ, C. TRAVERS. "pétrole". BE 8520 Techniques de l'ingénieur, pp.1-16.2010.
- [14] R. PERRIN J.P. SCHARFF. Chimie industrielle, Raffinage de pétrole, 1995.
- [15] J.P. WAUQUIER. Pétrole brut, produits pétroliers, schéma de fabrication, tome 1, EDTechnip 1994.
- [16] Pierre Wuithier (1972), Raffinage et génie chimique Tome1, édition technip.Paris, Page.39—65.
- [17] Heuzard. Rémi, Université Francas International, correlations mathématiques et rapport entre prospection et production pétroliers, Hong Kong, Mars 2013.
- [18] KARKOURI. A, génie de raffinage, approche experimentales et correlations sur quelque proprietes physicochimique d'essence, 2018
- [19] Ricco. Rakotomalala, Analyse de correlation Étude des dépendances - Variables quantitatives, Université Lumière Lyon 2, 2017.
- [20] Sonatrach divisions de production HMD 2007 présentation de raffinerie de RHMD2
- [21] Hansch C. (1969), a quantitative approach to biochemical structure activity relationships. Accounts of chemical research, 2, 232-239.
- [22] R. Leardi, (2001), Chemometr. 15, 559-569.
- [23] AI ACCESS, 91940, Les Ulis, Franonce.
- [24] REGADI D., Développement de modèle QSPR pour la prédiction des propriétés physique des quelques composés. 2013,17-18

Références bibliographiques

- [25] Allen M. P., Tildesley D.J., Computer stimulation of liquids. Oxford. 1987
- [26] [http: \\internet\www.chemcad.com.htm](http://internet/www.chemcad.com.htm), consulté le 18/05/2019
- [27] https://chm.kode-solutions.net/products_alvadesc.php , consulté le 18/05/2019



Annexes

Annexes

N°	Composé	MW	Teb(exp)	Teb(corr)	Tf(exp)	Tf(corr)
1	(1,2-Dimethylbutyl)cyclohexane	168,36	190,5	206,1784	-36,6	-10,8268
2	(1,2-Dimethylpropyl)cyclohexane	154,33	169,71	185,5931	-48,31	-20,246
3	(1,3-Dimethylbutyl)cyclohexane	168,36	190,5	206,1784	-36,6	-10,8268
4	(1E)-1-(2,2-Dimethylpropylidene)-2-(2-methyl-2-propanyl)cyclopropane	166,34	193,7	192,2797	/	-12,0148
5	(1E)-1-(2-Methyl-2-propanyl)cyclooctene	166,34	215,8	215,3508	/	-8,32238
6	(1E)-1-(3-Methyl-2-butanylidene)-2-(2-methyl-2-propanyl)cyclopropane	166,34	194,8	192,2797	/	-12,0148
7	(1E)-1,2-Dimethylcyclodecene	166,34	227,7	218,422	/	-7,54998
8	(1E)-1-Methylcycloundecene	166,34	229,35	225,722	-10,3	-7,33998
9	(1-Methylcyclopentyl)cyclohexane	166,34	218,7	215,9663	/	8,52582
10	(1R,2R)-1,2-Dibutylcyclopropane	154,33	190,9	186,3428	/	-14,1684
11	(1R,2R)-1-Butyl-2-methylcyclohexane	154,33	196	189,5055	/	-17,7366
12	(1R,2R)-1-Methyl-2-pentylcyclopentane	154,33	186,91	191,1179	-28,65	-17,3872
13	(1r,2R,3S,4r,5R,6S)-1,2,3,4,5,6-Hexamethylbicyclo[2.2.0]hexane	166,34	180,6	181,322	/	-10,33
14	(1R,2R,4R)-2-Isobutyl-1,4-dimethylcyclohexane	168,36	205,8	202,2195	/	-13,8414
15	(1R,2S)-1,2-Dibutylcyclopropane	154,33	183,14	186,3428	-26,23	-14,1684
16	(1R,2S)-1,2-Diethylcyclooctane	168,36	212,31	214,3195	-20,88	-11,4214
17	(1R,2S)-1-Butyl-2-ethylcyclopentane	154,33	186,91	191,1179	-28,65	-17,3872
18	(1R,2S)-1-Hexyl-2-methylcyclopentane	168,36	206,96	211,7962	-17,16	-6,95797
19	(1R,2S)-1-Methyl-2-(4-methylpentyl)cyclopentane	168,36	210,2	207,8373	/	-9,97237
20	(1R,2S)-1-Methyl-2-pentylcyclopentane	154,33	186,91	191,1179	-28,65	-17,3872
21	(1R,2S,4S,5R)-1,2-Diethyl-4,5-dimethylcyclohexane	168,36	204,9	202,2195	/	-13,8414
22	(1R,3R)-1-Methyl-3-pentylcyclopentane	154,33	186,91	191,1179	-28,65	-17,3872
23	(1R,3S)-1-Methyl-3-pentylcyclopentane	154,33	186,91	191,1179	-28,65	-17,3872
24	(1R,6S,7r)-7-Butyl-7-methylbicyclo[4.1.0]heptane	166,34	208,4	196,5549	/	0,34722
25	(1S)-1-Hexyl-2-isopropylidencyclopropane	166,34	211,3	204,0661	/	-3,95178
26	(1S,2R)-1-(Cyclopropylmethyl)-2-pentylcyclopropane	166,34	206,7	208,1877	-4,75	17,04422
27	(1S,2R)-1-Ethyl-2-heptylcyclopropane	168,36	203,35	207,114	-14,69	-2,72897
28	(1S,2R,4R)-1-Isopropyl-2,4-dimethylcyclohexane	154,33	184,1	181,6806	/	-22,7554
29	(1S,2R,4R)-1-Isopropyl-4-methyl-2-vinylcyclohexane	166,34	189,45	207,1797	-34,53	-8,05478
30	(1S,2R,4R)-2-Isobutyl-1,4-dimethylcyclohexane	168,36	205,8	202,2195	/	-13,8414
31	(1S,2R,4S)-2-Isobutyl-1,4-dimethylcyclohexane	168,36	205,8	202,2195	/	-13,8414
32	(1S,2S)-1-(3-Cyclopropylpropyl)-2-propylcyclopropane	166,34	206,7	208,1877	-4,75	17,04422
33	(1S,2S)-1,2-Diethylcyclooctane	168,36	212,31	214,3195	-20,88	-11,4214

Annexes

34	(1S,2S)-1-Ethyl-2-hexylcyclopropane	154,33	183,14	186,3428	-26,23	-14,1684
35	(1S,2S,4R)-1-Isopropyl-4-methyl-2-vinylcyclohexane	166,34	189,45	207,1797	-34,53	-8,05478
36	(1S,2S,4R)-2-Isobutyl-1,4-dimethylcyclohexane	168,36	205,8	202,2195	/	-13,8414
37	(1S,2S,5S)-6,6-Dimethyl-2-propylbicyclo[3.1.1]heptane	166,34	201,8	195,8106	/	-2,45858
38	(1S,3S)-1,3-Diisopropylcyclohexane	168,36	206,6	202,2195	/	-13,8414
39	(1Z)-1-(3-Methyl-2-butanylidene)-2-(2-methyl-2-propanyl)cyclopropane	166,34	194,8	192,2797	/	-12,0148
40	(1Z)-1-Butylcyclooctene	166,34	227,8	223,2085	/	-2,94698
41	(1Z)-1-Hexen-1-ylcyclohexane	166,34	220,25	215,0373	-15,46	-2,67938
42	(1Z)-3-(2-Methyl-2-propanyl)cyclooctene	166,34	212,5	215,3508	/	-8,32238
43	(1Z)-4-(2-Methyl-2-propanyl)cyclooctene	166,34	212,5	215,3508	/	-8,32238
44	(1Z)-5-(2-Methyl-2-propanyl)cyclooctene	166,34	213,7	215,3508	/	-8,32238
45	(1Z)-Cyclododecen	166,34	232,63	233,122	-17,36	-5,48998
46	(2,2,5-Trimethylhexyl)cyclopropane	168,36	203	199,1962	/	-8,75797
47	(2,3-Dimethylbutyl)cyclopentane	154,33	190,2	187,2055	/	-19,8966
48	(2E)-2-Butylidene-1,1-dimethylcyclohexane	166,34	209,4	207,1797	/	-8,05478
49	(2E)-2-Hexen-1-ylcyclohexane	166,34	221,2	215,0373	/	-2,67938
50	(2E)-2-Hexene - (2Z)-2-hexene (1_1)	168,36	210,3	193,917	/	-65,4796
51	(2E)-3-Isopropyl-2-octene	154,33	185,4	182,2432	/	-34,9248
52	(2E)-3-Methyl-2-pentene - (2Z)-3-methyl-2-pentene (1_1)	168,36	185,4	186,0594	/	-70,855
53	(2E)-3-Methyl-2-undecene	168,36	206,4	206,9117	-30,17	-21,1402
54	(2E)-4-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
55	(2E)-5-Ethyl-6,6-dimethyl-2-heptene	154,33	158,25	178,3482	-49,17	-37,2448
56	(2E)-6-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
57	(2E)-8-Methyl-2-undecene	168,36	207,4	206,9117	/	-21,1402
58	(2E)-9-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
65	(2E,10E)-2,10-Dodecadiene	166,34	217,64	211,709	-22,45	-17,1242
60	(2E,4E)-2,4-Dodecadiene	166,34	220,6	211,709	-20,5	-17,1242
59	(2E,4E)-2,4-Dodecadiene	166,34	217,64	211,709	-22,45	-17,1242
61	(2E,4E)-3-Isopropyl-4,6-dimethyl-2,4-heptadiene	166,34	209,6	196,0593	/	-27,1618
62	(2E,4R,5S,6E)-3,4,5,6-Tetramethyl-2,6-octadiene	166,34	200,8	196,0593	/	-27,1618
63	(2E,5E)-5-Propyl-2,5-nonadiene	166,34	212,4	207,7966	-30,96	-19,6336
64	(2E,6E)-4,4,8-Trimethyl-2,6-nonadiene	166,34	197,6	199,9717	/	-24,6524
66	(2-Ethylbutyl)cyclohexane	168,36	218,1	210,1373	/	-7,81237
67	(2-Ethylbutylidene)cyclohexane	166,34	221,5	211,1085	/	-5,36698
68	(2-Methyl-2-propanyl)cyclooctane	168,36	215,1	210,3606	/	-14,4358
69	(2-Methyl-2-propen-1-yl)cyclooctane	166,34	221,8	219,2797	/	-5,63478
70	(2-Methylbutyl)cyclohexane	154,33	182,35	189,5055	-37,12	-17,7366
71	(2-Methylcyclopentyl)cyclohexane	166,34	215,59	215,9663	-10,95	8,52582
72	(2-Methylpentyl)cyclopentane	154,33	180,45	191,1179	-35,91	-17,3872
73	(2Z)-1-Ethyl-2-pentylidenecyclopentane	166,34	218,8	212,7373	/	-4,83938
74	(2Z)-2-Dodecene	168,36	211,72	210,856	-21,64	-18,2844

Annexes

75	(2Z)-2-Undecen	154,33	191,89	190,0332	-33,06	-30,2848
76	(2Z)-3-Methyl-2-undecene	168,36	206,4	206,9117	-30,17	-21,1402
77	(2Z)-4-Methyl-2-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
78	(2Z)-4-Vinyl-2-decene	166,34	207	211,709	/	-17,1242
79	(2Z)-6-Methyl-2-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
80	(2Z)-6-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
81	(2Z)-7-Methyl-2-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
82	(2Z)-8-Methyl-2-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
83	(2Z)-8-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
84	(2Z)-9-Methyl-2-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
85	(2Z)-9-Methyl-2-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
86	(2Z,4R,5S,6Z)-3,4,5,6-Tetramethyl-2,6-octadiene	166,34	200,8	196,0593	/	-27,1618
87	(2Z,5E)-2,5-Dodecadiene	166,34	214,5	211,709	/	-17,1242
88	(2Z,5Z)-2,5-Dodecadiene	166,34	214,5	211,709	/	-17,1242
89	(3,3-Dimethylbutylidene)cyclohexane	166,34	216,3	207,1797	/	-8,05478
90	(3E)-1,1-Dimethyl-3-(2-methylpropylidene)cyclohexane	166,34	194,73	203,2508	-10,74	-10,7424
91	(3E)-1-Methyl-3-pentylidenecyclohexane	166,34	216,93	211,1085	-8,71	-5,36698
92	(3E)-2,2,3,4,5,5-Hexamethyl-3-hexene	168,36	194,4	187,1903	-48,42	-35,4188
93	(3E)-2,2,3,5,5-Pentamethyl-3-hexene	154,33	177,9	170,5582	/	-41,8848
94	(3E)-2,2,3,6,6-Pentamethyl-3-heptene	168,36	192,7	191,1346	-39,73	-32,563
95	(3E)-2,2,3-Trimethyl-3-nonene	168,36	201,9	199,0232	-34,82	-26,8516
96	(3E)-2,2,3-Trimethyl-3-octene	154,33	180,5	178,3482	/	-37,2448
97	(3E)-2,2,4,5-Tetramethyl-3-heptene	154,33	175,7	174,4532	-57,89	-39,5648
98	(3E)-2,2,6,6-Tetramethyl-3-heptene	154,33	171,7	174,4532	-43	-39,5648
99	(3E)-2,2,6,6-Tetramethyl-5-methylene-3-heptene	166,34	197,2	196,0593	-41,07	-27,1618
100	(3E)-2,2-Dimethyl-3-decene	168,36	191,91	202,9674	-26,21	-23,996
101	(3E)-2,2-Dimethyl-3-nonene	154,33	181,3	182,2432	/	-34,9248
102	(3E)-2,3,4,5,6-Pentamethyl-3-heptene	168,36	199	191,1346	/	-32,563
103	(3E)-2,4-Dimethyl-3-nonene	154,33	185,4	182,2432	/	-34,9248
104	(3E)-2-Methyl-1,3-undecadiene	166,34	204,93	211,709	-31,48	-17,1242
105	(3E)-2-Methyl-3-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
106	(3E)-3,5,7-Trimethyl-3-octene	154,33	180,5	178,3482	-64,08	-37,2448
107	(3E)-3,5,7-Trimethyl-3-octene	154,33	180,5	178,3482	/	-37,2448
108	(3E)-3-Ethyl-2-methyl-3-octene	154,33	185,4	182,2432	/	-34,9248
109	(3E)-3-Hexen-1-ylcyclohexane	166,34	221,2	215,0373	/	-2,67938
110	(3E)-3-Hexene - (3Z)-3-hexene (1_1)	168,36	195,6	193,917	/	-65,4796
111	(3E)-3-Isopropyl-2,2,5-trimethyl-3-hexene	168,36	192,7	191,1346	/	-32,563
112	(3E)-4,5-Diethyl-3,5-octadiene	166,34	207,09	203,8841	-39,49	-22,143
113	(3E)-4,5-Diethyl-3-octene	168,36	206,6	202,9674	-41,17	-23,996
114	(3E)-4-Ethyl-2,2-dimethyl-3-octene	168,36	201,9	199,0232	/	-26,8516
115	(3E)-4-Ethyl-6,6-dimethyl-3-heptene	154,33	180,5	178,3482	/	-37,2448
116	(3E)-4-Methyl-3-undecene	168,36	211,4	206,9117	-30,17	-21,1402
117	(3E)-4-Propyl-3-octene	154,33	190,3	186,1382	/	-32,6048

Annexes

118	(3E)-5-Ethyl-3,5,6-trimethyl-3-heptene	168,36	197,3	195,0789	/	-29,7074
119	(3E)-5-Ethyl-3,5-dimethyl-3-heptene	154,33	180,5	178,3482	/	-37,2448
120	(3E)-5-Ethyl-3,5-dimethyl-3-octene	168,36	201,9	199,0232	/	-26,8516
121	(3E)-6-Methyl-3-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
122	(3E)-7-Methyl-3-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
123	(3E)-9-Methyl-3-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
124	(3E,5E)-2,2,7,7-Tetramethyl-3,5-octadiene	166,34	177,68	196,0593	-31,7	-27,1618
125	(3E,5E)-2,2,7,7-Tetramethyl-3,5-octadiene	166,34	200,9	196,0593	/	-27,1618
126	(3E,5E)-2-Methyl-3,5-undecadiene	166,34	215,6	207,7966	/	-19,6336
127	(3E,5E)-3,5-Dodecadiene	166,34	220,6	211,709	/	-17,1242
128	(3E,5E)-4,5-Diethyl-3,5-octadiene	166,34	207,09	203,8841	-39,49	-22,143
129	(3E,5E)-4-Ethyl-3,5-decadiene	166,34	218,7	207,7966	/	-19,6336
130	(3E,5S)-2,5-Dimethyl-3-nonene	154,33	186,79	182,2432	-45,39	-34,9248
131	(3E,5Z)-2,2-Dimethyl-3,5-decadiene	166,34	210,6	203,8841	/	-22,143
132	(3E,5Z)-3,5-Dodecadiene	166,34	220,6	211,709	/	-17,1242
133	(3E,6E)-dodeca-3,6-diene	166,34	202,3	211,709	-44,36	-17,1242
134	(3E,7E)-2,9-Dimethyl-3,7-decadiene	166,34	193,97	203,8841	-44,36	-22,143
135	(3E,7E)-3,8-Dimethyl-3,7-decadiene	166,34	210,5	203,8841	/	-22,143
136	(3E,7Z)-3,7-Dimethyl-3,7-decadiene	178,35	210,5	216,2453	/	-9,32239
137	(3-Methyl-2-methylenebutyl)cyclohexane	166,34	213	211,1085	/	-5,36698
138	(3-Methylbutyl)cyclohexane	154,33	197,2	189,5055	-37,12	-17,7366
139	(3-Methylpentyl)cyclohexane	168,36	218,1	210,1373	-25,57	-7,81237
140	(3-Methylpentyl)cyclopentane	154,33	218,1	191,1179	-25,57	-17,3872
141	(3R)-3-Ethyl-1-decene	168,36	205,1	210,856	-33,18	-18,2844
142	(3R)-3-Ethyl-3,7-dimethyl-1,6-octadiene	166,34	202,6	203,8841	-36,15	-22,143
143	(3R,5R)-1,3-Dimethyl-5-(2-methyl-2-propanyl)cyclohexene	166,34	199,8	203,2508	/	-10,7424
144	(3R,5R)-3-Ethyl-2,5-dimethylheptane	156,35	177,5	177,4081	/	-38,7012
145	(3R,5S)-1,3-Dimethyl-5-(2-methyl-2-propanyl)cyclohexene	166,34	199,8	203,2508	/	-10,7424
146	(3R,6S)-3,6-Diisopropylcyclohexene	166,34	203,8	207,1797	/	-8,05478
147	(3R,7S)-3,5,7-Trimethylnonane	170,38	194,2	198,1774	-44,16	-29,806
148	(3S)-1,1,3-Trimethyl-3-(2-methyl-2-propen-1-yl)cyclopentane	166,34	189,2	204,8797	-9,41	-10,2148
149	(3S)-2,2,3,7-Tetramethyl-4-octene	168,36	193,4	195,0789	/	-29,7074
150	(3S,4E)-2,2,3,7-Tetramethyl-4-octene	168,36	193,4	195,0789	/	-29,7074
151	(3S,4E)-2,3,7-Trimethyl-4-octene	154,33	183,5	178,3482	/	-37,2448
152	(3S,4R)-3,4-Dimethyl-1-nonene	154,33	185,8	186,1382	-46,14	-32,6048
153	(3S,5R)-1,3-Dimethyl-5-(2-methyl-2-propanyl)cyclohexene	166,34	199,8	203,2508	/	-10,7424
154	(3S,5S)-1,3-Dimethyl-5-(2-methyl-2-propanyl)cyclohexene	166,34	199,8	203,2508	/	-10,7424
155	(3Z)-1,1-Dimethyl-3-(2-methylpropylidene)cyclohexane	166,34	204,3	203,2508	-10,74	-10,7424
156	(3Z)-1,3-Dodecadiene	166,34	218	215,6214	/	-14,6148
157	(3Z)-2-Methyl-3-decene	154,33	186,2	186,1382	-44,18	-32,6048
158	(3Z)-2-Methyl-3-undecene	168,36	207,4	206,9117	-32,6	-21,1402

Annexes

159	(3Z)-3-Butylidene-1,1-dimethylcyclohexane	166,34	209,4	207,1797	/	-8,05478
160	(3Z)-3-Ethylidene-1-decene	166,34	216,2	211,709	/	-17,1242
161	(3Z)-3-Methyl-3-decene	154,33	190,3	186,1382	/	-32,6048
162	(3Z)-3-Undecen	154,33	191,2	190,0332	-33,06	-30,2848
163	(3Z)-4-Ethyl-6,6-dimethyl-3-heptene	154,33	180,5	178,3482	/	-37,2448
164	(3Z)-4-Propyl-3-octene	154,33	190,3	186,1382	-41,67	-32,6048
165	(3Z)-7-Methyl-3-undecene	168,36	207,4	206,9117	-32,6	-21,1402
166	(3Z)-9-Methyl-3-undecene	168,36	207,4	206,9117	-32,6	-21,1402
167	(3Z,5E)-2,2,7,7-Tetramethyl-3,5-octadiene	166,34	200,9	196,0593	-31,7	-27,1618
168	(3Z,5E)-2,2-Dimethyl-3,5-decadiene	166,34	210,6	203,8841	/	-22,143
169	(3Z,5E)-4,5-Diethyl-3,5-octadiene	166,34	219,5	203,8841	-39,49	-22,143
170	(3Z,5Z)-2,2,7,7-Tetramethyl-3,5-octadiene	166,34	200,9	196,0593	-31,7	-27,1618
171	(3Z,5Z)-3,5-Dodecadiene	166,34	220,6	211,709	/	-17,1242
172	(3Z,5Z)-3,6-Dimethyl-3,5-decadiene	166,34	219	203,8841	/	-22,143
173	(3Z,5Z)-4,5-Diethyl-3,5-octadiene	166,34	219,5	203,8841	/	-22,143
174	(3Z,7Z)-3,7-Dimethyl-3,7-decadiene	166,34	210,5	203,8841	/	-22,143
175	(3Z,7Z)-4,7-Dimethyl-3,7-decadiene	166,34	210,5	203,8841	/	-22,143
176	(3Z,9Z)-3,9-Dodecadiene	166,34	209,6	211,709	/	-17,1242
177	(4E)-2,2,3,7-Tetramethyl-4-octene	168,36	193,4	195,0789	-48,54	-29,7074
178	(4E)-2,2,6-Trimethyl-4-nonene	168,36	198	199,0232	/	-26,8516
179	(4E)-2,2,7,7-Tetramethyl-4-octene	168,36	193,4	195,0789	-31,05	-29,7074
180	(4E)-2,2-Dimethyl-4-decene	168,36	202,7	202,9674	-26,21	-23,996
181	(4E)-2,3,3-Trimethyl-4-nonene	168,36	198	199,0232	-37,33	-26,8516
182	(4E)-2,3,6,7-Tetramethyl-4-octene	168,36	193,4	195,0789	-46,04	-29,7074
183	(4E)-2,3,7-Trimethyl-4-octene	154,33	183,5	178,3482	-46,7	-37,2448
184	(4E)-2,3-Dimethyl-4-nonene	154,33	181,3	182,2432	/	-34,9248
185	(4E)-2,4-Dimethyl-4-nonene	154,33	185,4	182,2432	/	-34,9248
186	(4E)-2,8-Dimethyl-4-decene	168,36	202,7	202,9674	/	-23,996
187	(4E)-2,8-Dimethyl-4-nonene	154,33	181,3	182,2432	/	-34,9248
188	(4E)-2-Methyl-4-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
189	(4E)-2-Methyl-4-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
190	(4E)-3,6,7-Trimethyl-4-nonene	168,36	198,1	199,0232	/	-26,8516
191	(4E)-3,7-Dimethyl-4-nonene	154,33	181,3	182,2432	/	-34,9248
192	(4E)-3,7-Dimethyl-6-methylene-4-nonene	166,34	206,8	203,8841	/	-22,143
193	(4E)-3-Methyl-1,4-undecadiene	166,34	207	211,709	/	-17,1242
194	(4E)-3-Methyl-4-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
195	(4E)-3-Methyl-4-decene	154,33	179,51	186,1382	-44,18	-32,6048
196	(4E)-3-methyl-4-propyl-octa-1,4-diene	166,34	185,2	207,7966	/	-19,6336
197	(4E)-3-Methyl-4-undecene	168,36	199,88	206,9117	-32,6	-21,1402
198	(4E)-4-Methyl-4-decene	154,33	186,33	186,1382	-41,67	-32,6048
199	(4E)-4-Methyl-4-decene	154,33	186,33	186,1382	-41,67	-32,6048
200	(4E)-4-Methyl-4-undecene	168,36	206,4	206,9117	-30,17	-21,1402

ملخص

في السنوات الأخيرة، استمر استخدام أساليب الكمية الهيكلية (QSPR) في النمو وأصبحت تستخدم أكثر وأكثر، وذلك بسبب تطور موارد الحوسبة. لقد أصبحت هذه العلاقات لا غنى عنها في العديد من المجالات، مثل: البيولوجيا، والكيمياء الصيدلانية لتصميم الأدوية، والتكهن ببعض الخواص الفيزيائية والكيميائية البيولوجية.

يتم التركيز في هذا العمل على تطوير نموذج رياضي يتكهن بدرجات حرارة الغليان وذوبان مركبات الكسر البترولي التي تستخدم على نطاق واسع في مجال التكرير. تعتمد النماذج على العلاقات الهيكلية - الخواص الفيزيائية الكيميائية (QSPR) وفقاً لبعض الخصائص المتعلقة بالتركيب الجزيئي لهذه المركبات (الواصفات) لهذا الغرض، تم تطوير قاعدة بيانات تحتوي على 1197 مادة هيدروكربونية وتم إنشاء واصفاتها باستخدام برنامج "AlvaDesc" تم ربط الانحدارات متعددة الخطوط بواسطة برنامج MINITAB وتم تطوير النماذج. كان عامل الارتباط 0.8 بالنسبة لدرجة حرارة الغليان و 0.5 بالنسبة لدرجة حرارة الانصهار.

الكلمات المفتاحية: قطع الكيروسين، QSPR، درجة حرارة الغليان، درجة حرارة الانصهار، التكهن، النموذج الرياضي.

Résumé

Dans les dernières années, l'utilisation des méthodes quantitatives structure-propriété (QSPR) n'a cessé de progresser et elles deviennent de plus en plus utilisées, du fait du développement et la croissance des moyens de calculs. Ces relations sont même devenues indispensables dans plusieurs domaines, telle que : biologie, chimie pharmaceutique pour la conception de médicaments et prédire certaines propriétés physicochimiques ou biologiques.

Le but de ce travail est accentué sur le développement d'un modèle mathématique qui prédit les températures d'ébullition et de fusion des composés de la fraction pétrolière Kérosène qui est très utilisée dans le domaine de raffinage, Les modèles sont basés sur les relations structure-propriétés physicochimique (QSPR) en fonction de quelques propriétés liées à la structure moléculaire de ces composés (descripteurs). A cet effet, une base de données de 1197 hydrocarbures a été élaborée et leurs descripteurs ont été établis en utilisant le logiciel "AlvaDesc". Les régressions multilinéaires ont été corrélées par le logiciel MINITAB et les modèles ont été élaborés. Les facteurs de corrélation sont de l'ordre de 0.8 pour la température d'ébullition et 0.5 pour la température de fusion.

Mots clés : coupe kérosène, QSPR, température d'ébullition, Température de fusion, prédiction, modèle mathématique.

Abstract

In recent years, the use of quantitative structure-property methods (QSPR) has continued to grow and they are becoming more and more used, due to the development and growth of computing resources. These relationships have even become indispensable in several fields, such as: biology, pharmaceutical chemistry for drug design and predicting certain physicochemical or biological properties. The purpose of this work is emphasized on the development of a mathematical model that predicts the boiling and melting temperatures of the compounds of the petroleum fraction Kerosene which is widely used in the refining field. The models are based on structure relationships - physicochemical properties (QSPR) according to some properties related to the molecular structure of these compounds (descriptors). For this purpose, a database of 1197 hydrocarbons have been developed and their descriptors have been established using the "AlvaDesc" software. The multilinear regressions were correlated by the MINITAB software and the models were developed. The correlation factors are of the order of 0.8 for the boiling temperature and 0.5 for the melting temperature.

Key words: kerosene cut, QSPR, boiling temperature, melting temperature, prediction, mathematical model.