

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE
DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE**



المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
Ecole Nationale Polytechnique

Projet de fin d'études

En vue de l'obtention du diplôme d'Ingénieur d'Etat en Génie Chimique

Thème

**APPLICATION DES RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS A LA
PREDICTION DES PROPRIETES PHYSIQUES ET
THERMODYNAMIQUES DES HYDROCARBURES, DE LEURS
MELANGES ET DES FRACTIONS PETROLIERES**

**Présenté par :
Menad CHAMI**

**Dirigé par :
Pr. C.E.CHITOUR
S. FEKRACHE**

**Soutenu devant le jury composé de :
A. AIT KACI, Professeur (USTHB)
C.E CHITOUR, Professeur (ENP)
S. FEKRACHE, Magister en génie chimique (ENP)
H. BENYOUSSEF, Professeur (ENP)
T. AHMED ZAID, Maître de conférence, (ENP)**

**Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur**

**Promotion
Juin 2007**

ENP, 10, Avenue HASSEN BADI ELHARRACH, ALGER.

المخلص

يهدف عملنا هذا إلى تطبيق تقنية شبكة العصبونات الاصطناعية من أجل تقدير الخصائص الفيزيائية و التيرموديناميكية للهيدروكاربونات الخالصة, لمزيجاتها و للمتجزئات البترولية.

و في هذا الصدد اقترحنا نماذج باستعمال عدة فرضيات لغرض التقدير مع نسبة خطأ مطلقة صغيرة.

Résumé

L'objectif de ce modeste travail consiste à appliquer une technique relevant de l'intelligence artificielle à savoir les réseaux de neurones artificiels à la prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs, de leurs mélanges et des fractions pétrolières.

Nous proposons de répondre au besoin exprimé en introduisant des modèles de prédiction utilisant plusieurs types d'approches en prenant en considération les contraintes techniques et physico-chimiques avec une marge d'erreur acceptable.

Mots clés

Propriétés Physiques et Thermodynamiques, Hydrocarbure, Réseaux de Neurones Artificiels.

Abstract

The aim of this work is applying the technical of neural networks to predict the physical and thermodynamical properties of hydrocarbons, their mixtures and oil fractions.

For this, we put forward many models using neural networks based on different approaches of the problem, which consists in the prediction the properties, with a good precision.

Key words

Physical and Thermodynamical Properties, Hydrocarbons, Artificial Neural Networks.

Remerciements

Ce travail de recherche a été réalisé au sein du laboratoire de valorisation des énergies fossiles de l'Ecole Nationale Polytechnique dirigé par le Professeur Chems Eddine CHITOUR.

Je remercie respectueusement le Professeur Chems Eddine CHITOUR, directeur de cette thèse, dont l'encadrement m'était indispensable pour atteindre les objectifs fixés par le sujet de mon projet. Je le remercie vivement pour avoir dirigé ce travail et accepté de m'accueillir au sein de son équipe.

Je remercie Monsieur A. AIT KACI, Professeur à l'université des sciences et des technologies de Bab Ezzouar USTHB, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Je souhaite exprimer toute ma gratitude à Monsieur H. BENYOUSSEF, Professeur à l'Ecole Nationale Polytechnique d'Alger, et Monsieur T. AHMED ZAID, Maître de conférence à l'Ecole Nationale Polytechnique d'Alger. Je les remercie pour l'attention et la considération qu'ils ont accordées à mon travail.

Je tiens aussi à remercier Monsieur Samir FEKRACHE, chercheur au laboratoire, d'avoir été la personne la plus proche de mon travail au quotidien, pour son intuition et ses conseils avisés, auxquels ce projet doit beaucoup.

Enfin, je remercie tout particulièrement ma famille de m'avoir tout le temps soutenu et l'ensemble de mes très chers amis pour leur bonne humeur communicative et leur optimisme.

Je ne pourrai clore cette liste sans adresser mes remerciements les plus sincères à tous les enseignants du département génie chimique de l'Ecole Nationale Polytechnique de m'avoir tout le temps encouragé et pour l'ambiance de travail conviviale qu'ils ont créée.

Dédicaces

Je dédie ce travail

A Mes Merveilleux Parents, à qui je dois ce que je suis aujourd'hui ;

Ma Profonde Sympathie va à toute personne ayant contribué, de près

ou de loin, à la réalisation de ce modeste travail.

Menad

Sommaire

Introduction Générale

Chapitre 1 : Les Propriétés Physiques et Thermodynamiques des Hydrocarbures

Introduction

1.1 Les Propriétés étudiées :

- a. La densité
- b. L'indice de réfraction
- c. La température d'ébullition
- d. La tension superficielle
- e. La viscosité
- f. La masse molaire
- g. L'entropie

I.2 Les méthodes de caractérisation des propriétés des hydrocarbures

- a. Les équations d'états
- b. La loi des états correspondants
- c. Les méthodes empiriques

Conclusion

Chapitre II : Introduction aux Réseaux de Neurones Artificiels

Introduction

II.1 Historique

II.2 Les réseaux de neurones, pourquoi faire ?

II.3 Définitions

- a. Le neurone biologique
- b. Le neurone formel
- c. Structure générale d'un réseau de neurones

II.4 L'apprentissage

- a. Mode supervisé ou non supervisé
- b. Le surapprentissage
- c. La rétropropagation du gradient

II.5 Quelques types de réseaux de neurones

II.6 La parcimonie

II.7 Avantages et inconvénients des réseaux de neurones

Conclusion

Chapitre III : Application des Réseaux de Neurones Artificiels à la Prédiction des Propriétés des Hydrocarbures

Introduction

III.1 La démarche suivie

III.2 Caractéristiques des réseaux établis

III.3 Présentation des résultats de calculs et commentaires

III.3.1 Le corps pur :

- a. La tension superficielle
- b. La viscosité
- c. L'entropie

III.3.2 Les mélanges d'hydrocarbures :

- a. La tension superficielle

III.3.3 Les fractions pétrolières

- a. La tension superficielle
- b. La masse molaire

III.3.4 Commentaires

Conclusion

Conclusion Générale

Annexe :

- Comportement des réseaux de neurones par rapport à la base d'entraînement

Bibliographie

Listes des sigles et abréviations

RNA : Réseau de Neurons Artificiels.

PMC : Perceptron Multi Couches.

T_b : Température d'ébullition.

T_{bv} : Température d'ébullition moyenne volumétrique.

T_r : Température réduite.

d²⁰ : densité à 20°C.

n²⁰ : indice de réfraction à 20°C.

N_c : nombre d'atomes de carbone.

AAD : Déviation absolue moyenne.

AD : Déviation moyenne.

T_s : Tension Superficielle.

μ : Viscosité dynamique.

S_f^{° 298} : Entropie Standard de formation à 298 K.



***INTRODUCTION
GENERALE***

Introduction générale

Le pétrole est le résultat de la transformation en hydrocarbures de matières organiques (plancton et substances humiques déposés sur les plateaux continentaux) sous l'effet de température et pression intenses et l'action de bactéries anaérobies il y'a des millions d'années. Ces hydrocarbures sont associés à des roches sédimentaires situées dans des configurations géologiques appelées *pièges* qui favorisent l'accumulation du pétrole (plis anticlinaux, failles...etc.)

Son aspect est liquide sombre et visqueux, il faut le raffiner pour en tirer différentes coupes qui serviront à des fins diverses.

L'utilisation du pétrole remonte à plusieurs siècles. La bible nous rapporte qu'il a été dit à Noé de calfeutrer sa cruche de bitume. Le pétrole a été aussi exploité durant la civilisation musulmane à Bagdad dès le 10^{ème} siècle.

Après le déclin de la civilisation musulmane, l'Europe a commencé à découvrir le pétrole, c'est ainsi que dès le seizième siècle, le pétrole ou plus exactement le bitume figure en bonne place dans le célèbre ouvrage d'Agricola dans lequel on avait repris pratiquement tout l'état de la connaissance sur l'utilisation du pétrole à savoir imperméabilisation des embarcations, éclairage des maisons et usages médicaux. C'était aussi l'époque de l'exploitation en France du gisement de Pechelbronn.

Au XVII^{ème} siècle, les usages se développèrent aussi dans le nouveau monde en Amérique ; où l'on décrivait des fontaines de bitumes et des sources de gaz naturel en Pennsylvanie.

Ce n'est que dans la première moitié du XIX^{ème} siècle qu'en Europe, l'art de la distillation mis au point par des savants musulmans fût appliqué pour extraire le pétrole lampant que l'on employa pour l'éclairage urbain et ceci dix siècles après l'éclairage des rues de Bagdad...

Vers 1850, la ruée vers l'or noir gagne les Etats-Unis, à Titusville en Pennsylvanie, Samuel Kier (qui devait son nom au kérosène) recueillit sur des nappes d'eau, un liquide noirâtre surnageant. Le succès de l'opération incita des financiers à créer la première société de forage confiée au « colonel Drake ». Celui-ci forait un puits à 23m de profondeur et le pétrole jaillit annonçant ainsi le début de l'activité d'exploitation pétrolière proprement dite.

La production de pétrole se verra augmenter rapidement passant de 0,7 millions de tonnes en 1860 à 1 milliard de tonnes un siècle plus tard. Les nouveaux vecteurs de la civilisation moderne à savoir l'automobile, l'avion et ensuite la pétrochimie dès la fin de la seconde guerre mondiale n'ont pas calmé la boulimie et le pétrole commença progressivement à détrôner le charbon moteur de la révolution industrielle.

De nos jours le pétrole est la source d'énergie primaire numéro 1. Sa consommation croît à un rythme si faramineux que l'épuisement des réserves est quasiment inévitable à brève échéance. Malgré les chocs pétroliers successifs, la consommation de pétrole n'a pas, pour autant, cessé de s'accroître. Elle s'est établie à plus de 75.75 Mb/jour en 2002 et à 84Mb/jour en 2005, ce qui confirme la tendance structurelle du marché mondial en pleine expansion.

Caractérisation des bruts et des fractions pétrolières

Si la composition élémentaire des différents pétroles bruts reste relativement la même, la structure chimique de leurs constituants varie plus largement, ce qui entraîne une grande diversité des produits obtenus par raffinage.

Ces bruts peuvent avoir des propriétés physiques et chimiques très variables d'un gisement à un autre. Toutes ces différences entraînent des conditions de production, de transport, de stockage et de raffinage adaptées à ces caractéristiques et à la gamme de produits qui en dérivent.

La complexité de ces mélanges, à savoir pétrole brut et dérivés, fait que l'analyse qualitative et quantitative de tous les constituants soit une opération assez délicate mais surtout qui revient très chère.

Une connaissance parfaite des propriétés des substances solides ou fluides par ailleurs est nécessaire car elle permet à l'ingénieur de spécifier, dimensionner et contrôler le fonctionnement des différents équipements d'une unité industrielle. L'expérience fournit la majorité de ces propriétés, mais dans certains cas, la manipulation présente un certain nombre de limitations à savoir un protocole complexe, un coût excessif ou bien un temps d'exécution important.

D'autre part, une quantité énorme de données à été accumulée durant des années, mais la complexité même des phénomènes physico-chimiques et le développement rapide de la technologie font que de nos jours, et en particulier dans l'industrie pétrolière où les méthodes prédictives gardent toujours tout leur intérêt, l'ingénieur est souvent appelé à user dans un premier stade estimatif, d'équations et de corrélations empiriques dans le but de répondre au besoin exprimé en approchant, avec une bonne précision, l'ordre de grandeur de la valeur réelle d'une propriété donnée.

Dans ce cadre, l'intelligence artificielle, ayant bénéficié du grand progrès de l'informatique et de l'électronique, a apporté de nouvelles techniques qui constituent de vrais outils d'aide à la décision et de résolution de problème.

Le terme de réseaux de neurones « formels » (ou « artificiels ») fait rêver certains, et fait peur à d'autres. La vérité est que les réseaux de neurones constituent maintenant une technique de traitement de données bien comprise et maîtrisée, qui devrait faire partie de la boîte à outils de tout ingénieur soucieux de tirer le maximum d'informations pertinentes des données dont il dispose : faire des prévisions, élaborer des modèles, contrôler des procédés, etc...

Ce travail, qui a pour principal objectif l'application de la technique des réseaux de neurones artificiels pour la prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs, de leurs mélanges et des fractions pétrolières, reflète un état de maîtrise à un moment précis du développement des techniques empiriques (contribution de groupes, régressions, réseaux de neurones, algorithmes génétiques,...). Il sera donc utile de le placer dans la perspective de l'évolution des méthodes de modélisation et de prédiction au sein du laboratoire de valorisation des énergies fossiles, ces méthodes qui ont fait l'objet de plusieurs projets de recherche depuis de nombreuses années.



**LES PROPRIETES PHYSIQUES &
THERMODYNAMIQUES DES HYDROCARBURES**

Introduction

Le marché est de plus en plus demandeur de produits pétroliers aux caractéristiques précises et de plus en plus sévères : gaz liquéfiés, essences, kérosène, gasoil, fuel, graisses et lubrifiants,...

Initialement les coupes pétrolières issues de la distillation du pétrole brut n'ont pas toutes les propriétés requises, l'essentiel est que les propriétés les plus importantes soient respectées. Pour celles qui ne le sont pas, nous arrivons par des traitements ultérieurs à les ajuster aux normes recommandées en vue de leur commercialisation.

Quand un nouveau gisement de pétrole brut est découvert, nous procédons à une série d'expériences au laboratoire pour déterminer la composition de ce brut ainsi que le rendement en certaines fractions. Ces expériences englobent deux principaux volets :

a. Les essais classiques qui regroupent l'ensemble des mesures des différentes propriétés physiques du pétrole brut en respectant les normes d'analyse spécifiques à chaque essai. Il s'agit principalement de : la densité, la viscosité, le point de congélation, le point d'aniline, la tension superficielle, le point d'écoulement, la teneur en soufre et en sédiments.

b. La distillation fractionnée ; cette opération unitaire est un procédé physique de séparation basée sur la différence des points d'ébullition des hydrocarbures qui se trouvent mélangés. La distillation peut être réalisée à pression atmosphérique ($P = 1 \text{ atm} = 10^5$ Pascals), ou sous vide (quelques dizaines de millimètres de mercure) pour séparer des composés lourds entre eux.

Dans le but de disposer de fractions pétrolières sur lesquelles des essais d'analyse peuvent être réalisés ; le dispositif expérimental utilisé est constitué essentiellement de :

- Un bouilleur équipé d'un chauffage électrique et d'une prise de température et de pression.
- Un ballon contenant la charge brute à distiller.
- Une colonne à garnissage ou à plateaux.
- Un condenseur et un système de reflux.

Tout au long de l'opération, les vapeurs qui s'échappent du ballon sont constituées d'un mélange d'hydrocarbures, les premières fractions recueillies sont riches en constituants volatils tandis que les dernières le sont en produits lourds.

Selon le mode opératoire suivi et les spécifications exigées, nous distinguons différents types de distillations. Les plus répandues sont la distillation TBP et ASTM.

- La distillation ASTM

Dans le but d'obtenir rapidement une image de la composition d'un brut donné, le laboratoire d'analyse effectue généralement une distillation ASTM dont le tracé de la courbe fournit les spécifications de distillation des différents produits pétroliers.

L'appareillage utilisé comporte un ballon pouvant contenir 100 ou 200 ml de brut que nous chauffons à un débit déterminé.

Lorsque la première gouttelette de condensat apparaît à la sortie du condenseur, nous notons la température dans le ballon. Ensuite la température est relevée régulièrement pour des pourcentages volumiques 5, 10, 15, 20, ..., 95% de brut distillé et recueilli dans l'éprouvette.

La courbe de la température en fonction du pourcentage volumique de brut distillé, dite « courbe de distillation ASTM », est beaucoup moins sélective que celle de la distillation TBP.

Les principaux avantages de cette technique restent la simplicité de son mode d'emploi et le temps court qu'elle nécessite.

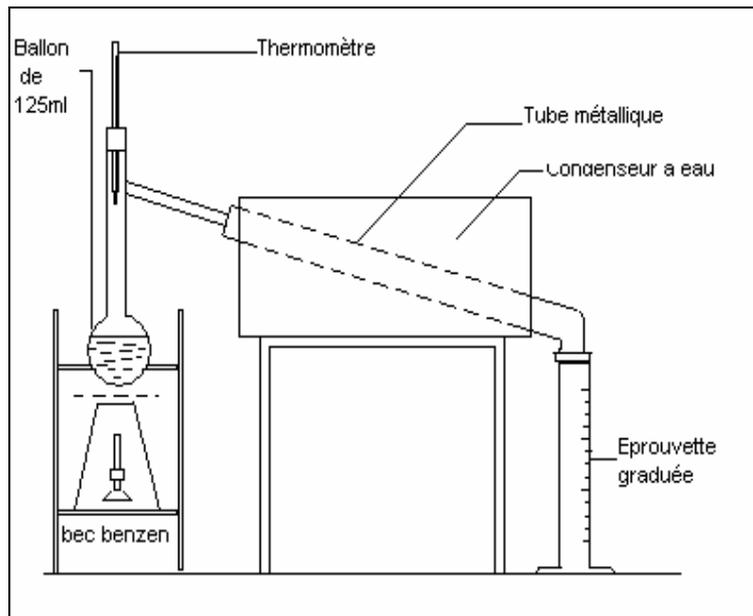


Figure : Schéma de principe de la distillation ASTM, d'après [9].

- Distillation TBP (True Boiling Point)

Cette technique est envisagée lorsque nous devons avoir des informations plus précises sur le brut analysé.

La distillation TBP est réalisée dans un appareillage présentant un nombre important d'étages; c'est à dire un dispositif à très bonne sélectivité. La courbe de distillation TBP est obtenue en portant la température de la vapeur en fonction du pourcentage volumique de brut distillé relevé dans des intervalles réguliers de températures.

I.1 Les Propriétés étudiées

a. La densité

La densité est le rapport du poids d'un certain volume d'échantillon de l'hydrocarbure pris à une température donnée sur le poids du même volume d'eau prise à 4°C dans le cas des liquides. La densité standard est donnée par la relation suivante :

$$d_4^{20} = \frac{\text{Poids d'un volume de produit pris à } 20^\circ\text{C}}{\text{Poids du même volume d'eau pris à } 4^\circ\text{C}} \quad [1]$$

Pour les gaz, nous faisons appel soit à la masse volumique exprimée en Kg/m^3 ou à la densité par rapport à l'air.

La terminologie anglo-saxonne, utilise Density pour la masse volumique et Specific Gravity pour la densité; définie pour une même température standard, soit 60 °F (Sg 60/60°F), mesure équivalente à environ la densité prise à 15°C.

Un autre concept est utilisé également pour mesurer la densité : le degré API, défini par l'American Petroleum Institut comme étant une fonction hyperbolique de la specific gravity donnée par la relation :

$$^\circ\text{API} = 141,5/\text{SpGr (60/60 }^\circ\text{F)} - 131,5 \quad [1]$$

Excepté pour des calculs qui nécessitent une très grande précision, nous pourrions toujours confondre la specific gravity 60/60°F et la densité à 15°C.

Expérimentalement, la densité est une propriété physique dont la mesure est simple et rapide. Les dispositifs utilisés à cet effet, sont à titre d'exemples, le pycnomètre et l'aréomètre.

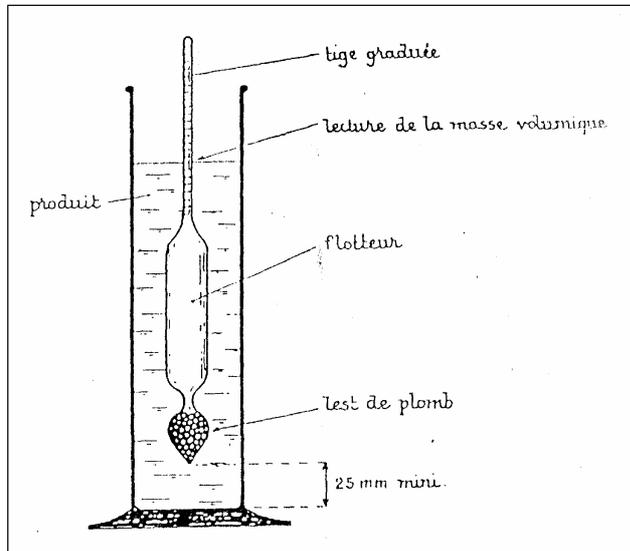


Figure : Principe de la mesure de la densité à l'aide d'un aréomètre, d'après [9].

b. L'indice de réfraction

La réfractométrie est une méthode d'analyse très répandue dans le domaine scientifique se basant essentiellement sur la détermination de l'indice de réfraction de la substance mise en jeu.

La réfraction est régie par la loi de Descartes :

$$n_1/n_2 = \sin i_1/\sin i_2 \quad [1]$$

“L'indice de réfraction “ est une propriété caractéristique d'un milieu transparent donné .Il ne dépend que de la température T et de la longueur d'onde de la raie incidente.

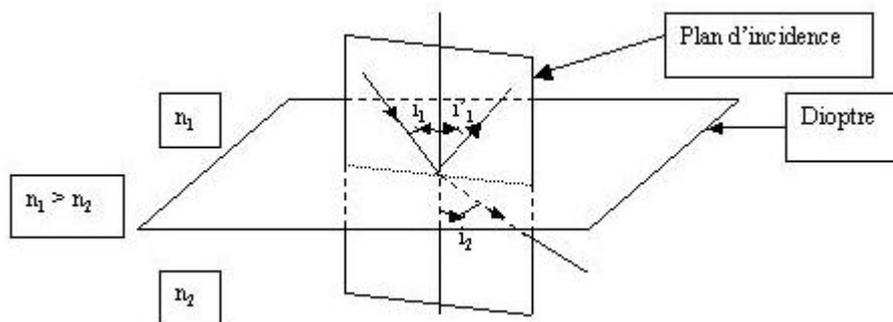


Figure : Principe du phénomène de réfraction, d'après [9].

Généralement, la mesure est faite à 20°C. L'effet de la température est pris en compte par la formule suivante :

$$n^T = n^{20} + 4.10^{-4}*(20 - T) \quad [1]$$

Où :

T : température à la détermination expérimentale de l'indice de réfraction.

Pour le corps pur, l'indice de réfraction est d'autant plus petit que la teneur relative en hydrogène de l'hydrocarbure est plus élevée. Les aromatiques et les oléfines possèdent l'indice de réfraction maximal, les alcanes ont l'indice minimal.

Par exemple : n^{20} (hexane) = 1,3750 ; n^{20} (cyclohexane) = 1,4262 ; n^{20} (benzène) = 1,5012.

Dans les séries analogues, l'indice de réfraction augmente avec la taille de la chaîne.

L'indice de réfraction est une propriété physique que l'on peut facilement déterminer au laboratoire à l'aide d'un réfractomètre, le plus utilisé étant le réfractomètre d'ABBE.

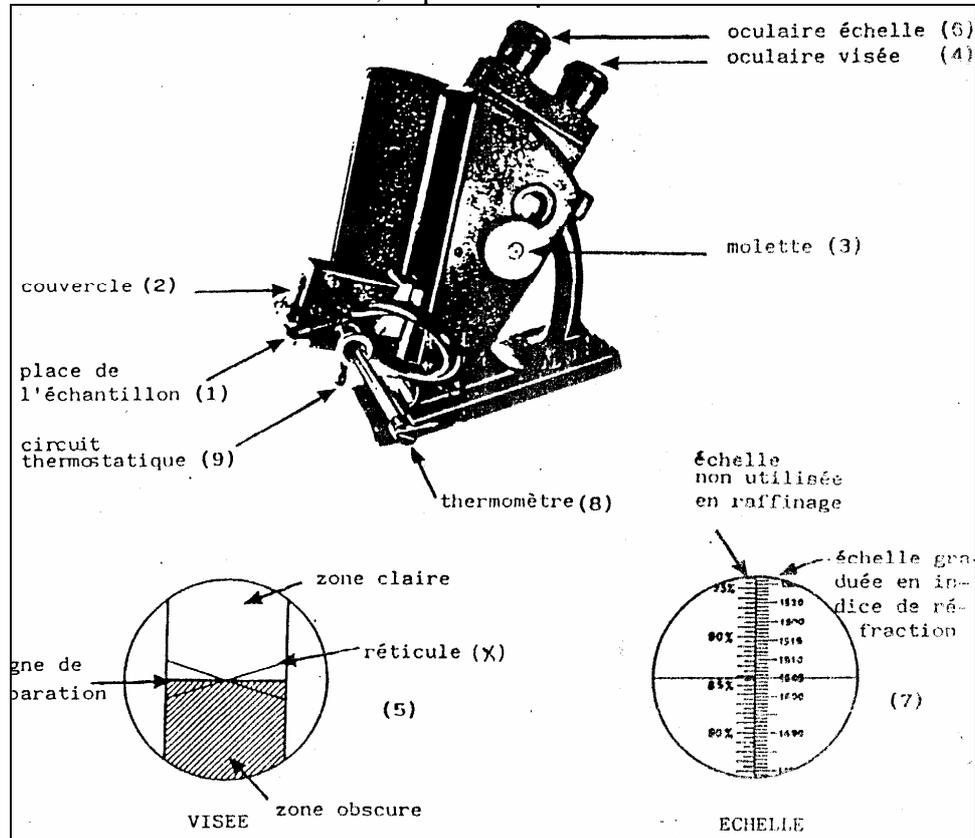


Figure : Réfractomètre à prismes, d'après [9].

c. La température d'ébullition

L'ébullition est le passage de l'état liquide à l'état vapeur à une température et une pression données constantes. Ce phénomène se produit au sein du corps pur liquide à une température caractéristique dite température d'ébullition.

Contrairement aux corps purs, la température d'ébullition d'un mélange n'a pas de signification physique et on parle plutôt d'un intervalle de température correspondant au début et à la fin de l'ébullition du mélange ou bien de température moyenne d'ébullition. Cette dernière est déterminée à partir des courbes de distillation (méthode de balancement des aires) ou sur la base d'hypothèse d'additivité qui s'écrit comme suit :

$$T_{b \text{ moyenne}} = \sum x_i \cdot T_{bi} \quad [1]$$

Où :

x_i : composition molaire, massique ou volumétrique du constituant i dans le mélange.

T_{bi} : Température d'ébullition du constituant i pur.

d. La tension superficielle

La tension superficielle notée T_s représente le travail nécessaire pour augmenter d'une unité la surface d'un liquide sans augmentation du nombre de molécules du système. Ceci se traduit par la formule suivante :

$$T_s = \left(\frac{dG}{dA} \right)_{T,P,n} \quad [1]$$

Où :

dG : énergie libre de surface.

dA : unité de surface.

T : température.

P : pression.

n : population moléculaire du système.

La tension superficielle se mesure en erg/cm^2 (soit dyne/cm). Elle dépend de la nature du liquide. Parmi les liquides courants, l'eau possède la plus grande tension superficielle soit 72,8 dyne/cm . Pour de nombreux liquides organiques, et pour des températures réduites comprises entre 0,45 et 0,65, la tension superficielle est de l'ordre de 20 à 40 dyne/cm .

La tension superficielle est fonction de la température, c'est pour cela qu'il est nécessaire d'indiquer la température à laquelle la mesure a été effectuée. Lorsque la température s'élève, le milieu se dilate, l'énergie reliée à l'agitation thermique des molécules croît et les forces d'interactions intermoléculaires diminuent. Ainsi, la tension superficielle décroît avec l'élévation de la température. En parallèle, la tension superficielle est une fonction croissante de la pression.

Au laboratoire, la tension superficielle est une grandeur qui peut être déterminée par de nombreuses méthodes expérimentales, parmi lesquelles nous citons les méthodes suivantes :

- méthode de la goutte pendante.
- méthode de la bulle.
- méthode stalagmométrique.
- méthode de l'arrachement de l'anneau.

d.2 Estimation de la tension superficielle par les corrélations

Pour la détermination de la tension superficielle, en dehors des méthodes expérimentales, plusieurs corrélations ont été établies pour le corps pur en fonction des propriétés physiques. L'une de ces corrélations est celle de ZIDELKHIER – CHITOUR. Ces deux auteurs proposent une corrélation donnant la tension superficielle en fonction du nombre d'atomes de carbone connaissant la famille chimique à laquelle appartient l'hydrocarbure en question. Cette corrélation s'écrit [1]:

* **Paraffines :**

$$T_s = -0,450661 + 4,43303 * N - 0,2803 * N^2 + 0,00849284 * N^3 - 9,75061 * 10^{-5} * N^4$$

* **Naphténiques**

$$T_s = 26,8048 + 1,51841 * N - 0,0692555 * N^2 + 0,0013369 * N^3 - 8,67053 * 10^{-6} * N^4$$

* **Aromatiques**

$$T_s = 8,23228 + 2,53518 * N - 0,0508118 * N^2 - 0,000228769 * N^3 + 1,34985 * 10^{-5} * N^4$$

Où :

N : nombre d'atomes de carbone.

T_s : tension superficielle en dyne /cm.

e.1 La viscosité

La viscosité (du latin viscum) traduit la capacité intrinsèque d'un fluide à s'écouler, en mécanique des fluides. De ce fait, elle joue un rôle très important dans de nombreux procédés industriels qui mettent en jeu des écoulements de fluides ou du transfert de quantité de mouvement.

Lorsque la viscosité augmente, la capacité du fluide à s'écouler diminue. Étant une fonction de la température, la viscosité tend à diminuer lorsque la température augmente. Par contre, on pourrait croire que la viscosité d'un fluide s'accroît avec sa densité mais ce n'est pas nécessairement le cas.

On classe notamment les huiles mécaniques selon leur viscosité, en fonction des besoins de lubrification du moteur et des températures auxquelles l'huile sera soumise lors du fonctionnement.

e.2 Modélisation

Il existe deux types de viscosité :

La viscosité dynamique μ se mesure en pascal-seconde (Pa.s), cette unité ayant remplacé le poiseuille (Pl) qui a la même valeur. On trouve parfois l'ancienne unité : la poise (Po) ; 1 Pa.s = 10 Po.

Une façon de définir la viscosité dynamique est de considérer deux couches adjacentes d'un fluide notées abcd et a'b'c'd', la couche abcd étant animée d'une vitesse relative à a'b'c'd' notée dv et dirigée suivant x. Sous l'effet de la viscosité, une force tangentielle F s'exerce sur la couche a'b'c'd'. La viscosité dynamique μ est définie par la relation entre la norme de cette force et la vitesse relative dv :

$$F = \mu * S * (dv/dz) \quad [1]$$

S étant la surface de chaque couche, et dz l'épaisseur de fluide séparant les deux couches.

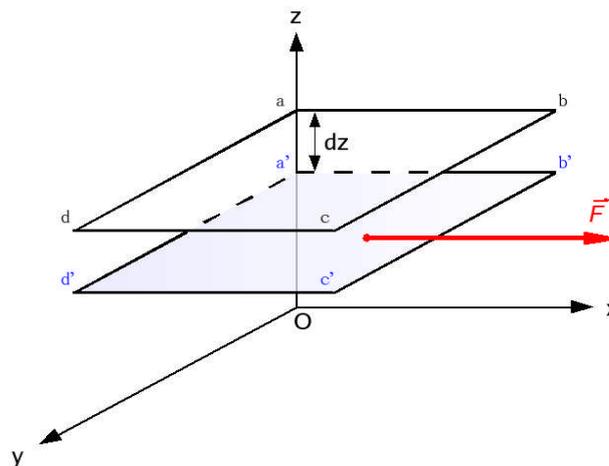


Figure : modélisation de la viscosité, d'après [9].

La viscosité cinématique η qui s'obtient en divisant la viscosité dynamique par la masse volumique ρ mesurées à la même température :

$$\eta = \mu/\rho \quad [1]$$

La viscosité cinématique s'exprime en m^2/s qui une unité très grande. Dans le système CGS, la viscosité cinématique est exprimée en stokes (St) ou en centistokes (cSt). La conversion est immédiate, puisque $1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2/s$ et $1 \text{ cSt} = 1 \text{ mm}^2/s$.

La viscosité cinématique est un paramètre particulièrement important pour apprécier la qualité de pompabilité des fluides et définir le type d'écoulement dans les canalisations.

Expérimentalement, la mesure de la viscosité consiste en la mesure du temps mis par un volume déterminé de prise d'essai contenue dans le réservoir d'un viscosimètre en verre pour s'écouler par un capillaire calibré à une température exactement contrôlée. La viscosité cinématique est calculée à partir du temps nécessaire à l'écoulement au moyen de la formule :

$$\eta \text{ (cSt)} = C \cdot t - B/t \quad [9]$$

t : temps nécessaire à l'écoulement.

C , B : Constantes caractéristiques du viscosimètre déterminées par étalonnage en utilisant des huiles de référence.

Pour ce qui de l'appareillage, il existe plusieurs types de viscosimètres mais ils reposent tous sur le même principe à savoir la mesure du temps d'écoulement.



Hubblehood



Saybolt



Cannon Fenske



Viscosimètre d'ENGLER

Figures : différents types de viscosimètres, d'après [9].

e.3 Estimation de la viscosité par les corrélations

Plusieurs corrélations ont été établies pour l'estimation de la viscosité ainsi que pour tenir compte de la variation de celle-ci en fonction de la température. Parmi ces corrélations, nous citons la corrélation d'Orrick-Erbar [1] qui relie la viscosité à la densité, la température et la masse moléculaire :

$$\ln(\eta/\rho^*M) = A + B/T \quad [1]$$

Avec :

$$A = (-6,95 + 0,21*N) + GC \quad [1]$$

$$B = (275 + 99*N) + CG \quad [1]$$

Où :

η : Viscosité dynamique du liquide en Centipoises.

ρ : Masse volumique. (gr/cm³).

M : Masse moléculaire.

T : température de calcul (K).

N : nombre d'atomes de carbone.

CG : contribution de groupe, valeurs tabulées [1].

Une autre corrélation, celle d'Andrade [1] donne des résultats satisfaisants avec une erreur par rapport à l'expérience avoisinant 5%. Elle s'écrit comme suit :

$$\eta = A * \text{Exp}(B/T) \quad [1]$$

η : Viscosité dynamique en mPa.sec à la température T (K).

A, B : constantes tabulées. [1]

f. La masse molaire

La masse molaire d'une substance est définie comme étant la masse d'une mole de molécules de cette substance. La détermination de la masse molaire serait plus facile si l'on connaît la formule brute de cette substance.

Expérimentalement, on dispose de plusieurs méthodes dites colligatives qui permettent de déterminer la masse molaire par l'analyse des propriétés thermodynamiques des solutions binaires constituées par la substance à étudier en solution (à faible concentration) dans un solvant donné.

Parmi ces méthodes, nous en citons : l'ébulliométrie, la cryoscopie, la tonométrie, l'osmométrie, ...etc.

De nombreuses équations et méthodes graphiques ont été proposées pour l'estimation de la masse molaire des corps purs, des mélanges et des fractions pétrolières permettant ainsi d'approcher avec une bonne précision cette grandeur.

Pour les fractions pétrolières, quelques unes des corrélations les plus utilisées sont proposés ci-après.

* Corrélation Projet ASPEN [1]

Elle a pour avantage de ne faire intervenir que la température d'ébullition :

$$M = \text{Exp}(0,001423 * T_{eb} + 3,6444) \quad [1]$$

Où :

T_{eb} : Température d'ébullition moyenne en °R.

*** Corrélation de l'API [1]**

Cette corrélation donne de faibles erreurs pour une température d'ébullition moyenne inférieure à 800°F.

$$M = 204,38 * T_{eb}^{0,118} * SpGr^{1,88} * \exp(0,00218 * T_{eb}) * \exp(-3,07 * SpGr) \quad [1]$$

Avec :

T_{eb} : température d'ébullition moyenne en °R.

SpGr : specific gravity 60/60°F.

*** Corrélation de Riazi-Daubert [1]**

Elle fait appel à deux grandeurs physiques à savoir la température d'ébullition moyenne et la specific gravity :

$$M = 4,5673 * 10^{-5} * T_{eb}^{2,1962} * SpGr^{-1,0164} \quad [1]$$

T_{eb} : température d'ébullition moyenne en °R.

SpGr : Specific Gravity 60/60°F.

Cette équation reste valable pour des températures d'ébullition moyennes comprises entre 100 et 850°F.

g. L'entropie

Parmi les propriétés thermodynamiques, il existe une propriété dite entropie notée S. elle est fonctionnellement reliée aux coordonnées mesurables caractérisant le système. Pour une transformation réversible, la variation de l'entropie s'écrit comme suit :

$$dS = \delta Q / T \quad [3]$$

Où : δQ est la variation de la chaleur du système et T la température.

En thermochimie, la variation d'entropie accompagnant une réaction chimique ΔS°_T s'exprime à l'aide de la loi de Hess :

$$\Delta S^\circ_T (\text{réaction}) = \sum n_i * S^\circ_{T,i} \text{ produits} - \sum n_j * S^\circ_{T,j} \text{ réactifs} \quad [3]$$

Où S°_i désigne l'entropie de formation du corps i (en Kj/k.mol).

Dans la mesure où l'entropie d'une substance mesure son degré de désordre, les valeurs de ΔS°_T réaction peuvent être testées qualitativement en observant s'il y a eu des transitions de phase entre phases condensées et état gazeux, s'il y a eu variation du nombre de moles à l'état gazeux, etc.

I.2 Méthodes de caractérisation des hydrocarbures

Indépendamment de l'expérience ou du raisonnement thermodynamique, une propriété peut être déterminée par diverses méthodes d'estimations, les unes plus précises que les autres. Nous présenterons dans ce qui suit les différentes méthodes de caractérisation des hydrocarbures.

a. Les équations d'état

L'intérêt d'une équation d'état est de permettre la prédiction du comportement volumétrique des fluides ainsi que l'évolution des fonctions thermodynamiques en fonction de la température et la pression. Une équation d'état est donc une relation entre les variables de pression, volume, température et composition, de forme générale :

$$f(P, V, T, X_i) = 0 \quad [3]$$

La plus simple des équations d'état étant l'équation des gaz parfaits $PV = nRT$ dont la précision est d'autant meilleure que la pression est faible. Dans le cas des fluides réels, où les forces d'interactions entre les molécules ne sont plus négligeables, de nombreuses équations d'état ont été proposées dans le but d'améliorer la représentation de ces fluides. Parmi ces équations, nous en citons les équations cubiques de Van Der Waals (1873), Redlich-Kwong (1949) et Soave-Redlich-Kwong (1972).

Des équations plus complexes dites non cubiques ont été proposées en faisant intervenir un nombre plus important de paramètres (exp. l'équation du viriel).

b. La loi des états correspondants

La loi des états correspondants, qui constitue une simplification du problème de prédiction des propriétés thermodynamiques et volumétriques des hydrocarbures, stipule que les propriétés des hydrocarbures sont reliées aux paramètres critiques de la même manière pour tous les composants, autrement dit, la fonction aux variables réduites est indépendante de la nature de la substance, soit :

$$f(V_r, P_r, T_r) = 0 \quad [3]$$

Où :

P_r : Pression réduite.

V_r : Volume réduit.

T_r : Température réduite.

Sur cette base, de nombreuses corrélations ont été développées pour le corps purs et leurs mélanges.

c. Les méthodes empiriques

Ce sont des méthodes qui permettent de caractériser les hydrocarbures à partir de données expérimentales et ce sans forcément nécessiter un fondement théorique. Parmi ces méthodes, il existe la méthode de contributions de groupes où chaque liaison, atome ou groupements d'atomes constitutifs d'une molécule donnée apporte sa propre contribution aux propriétés macroscopiques.

Toujours dans le concept de l'empirisme, et avec l'émergence de nouvelles techniques informatiques, les chercheurs ont fait appel à des méthodes se basant sur l'intelligence artificielle telles que les algorithmes génétiques et les réseaux de neurones. Ces méthodes permettent la prédiction des propriétés des hydrocarbures connaissant quelques propriétés facilement accessibles par l'expérience.

Conclusion

Ce chapitre a été dédié à la présentation d'abord des propriétés physiques de base qui seront utilisées comme entrées principales des réseaux de neurones à savoir la densité, l'indice de réfraction et la température d'ébullition. Ensuite nous avons abordé les propriétés étudiées à savoir la tension superficielle, la viscosité, l'entropie et la masse molaire.

Dans une deuxième partie, nous avons introduit les différentes méthodes de caractérisation des hydrocarbures dont entre autre la technique des réseaux de neurones qui fera l'objet du chapitre suivant.



**INTRODUCTION AUX RESEAUX
DE NEURONES ARTIFICIELS**

Introduction

Les réseaux de neurones formels sont à l'origine une tentative de modélisation mathématique du cerveau humain. Les premiers travaux datent de 1943 et sont l'oeuvre de *Mac Culloch et Pitts*. Ils présentèrent un modèle assez simple pour les neurones et explorèrent les possibilités de ce modèle.

L'idée principale des réseaux de neurones est la suivante : « Soit une unité simple, un *neurone*, qui est capable de réaliser quelques calculs élémentaires. On relie ensuite entre elles un nombre important de ces unités et on détermine la puissance de calcul du *réseau* ainsi obtenu.

Deux visions s'affrontent donc, d'un côté les tenants de la modélisation biologique qui veulent respecter un certain nombre de contraintes liées à la nature du cerveau, de l'autre les tenants de la puissance de calcul qui s'intéressent au modèle en lui-même, sans aucun lien avec la réalité biologique.

II.1 Historique

Comme nous l'avons évoqué plus haut, les réseaux de neurones sont construits sur un paradigme biologique, celui du neurone formel (au même titre que les algorithmes génétiques le sont sur la sélection naturelle). Ces types de métaphores biologiques sont devenus courants avec les idées modernes ayant accompagné le développement des techniques de traitement de l'information.

Les neurologues Warren Sturgis McCulloch et Walter Pitts menèrent les premiers travaux sur les réseaux de neurones et constituèrent un modèle simplifié du neurone biologique communément appelé « neurone formel ». Ils montrèrent également théoriquement que des réseaux de neurones formels simples peuvent réaliser des fonctions arithmétiques et logiques complexes.

Cependant, les travaux de Mc Culloch et Pitts n'ont pas donné d'indication sur une méthode de détermination des paramètres du modèle de résolution en fonction des informations communiquées au réseau. Il fallait donc trouver un mécanisme qui permettait de les calculer à partir des grandeurs que l'on pouvait acquérir du problème. Cette question au cœur des réflexions sur l'apprentissage a connu un début de réponse grâce aux travaux du physiologiste américain Donald Hebb sur l'apprentissage en 1949 décrits dans son ouvrage *The Organization of Behaviour*. Hebb a proposé une règle simple qui permet de modifier la valeur des paramètres en fonction de l'activité des unités. Cette règle aujourd'hui connue sous le nom de « règle de Hebb » est presque partout présente dans les modèles actuels, même les plus sophistiqués.

À partir de cet article, d'autres travaux marquèrent également le domaine des réseaux de neurones artificiels, comme ceux de Franck Rosenblatt en 1957 ayant initié le modèle du perceptron.

En 1969, un coup grave fut porté à la communauté scientifique gravitant autour des réseaux de neurones : Marvin Lee Minsky et Seymour Papert publièrent un ouvrage mettant en exergue quelques limitations théoriques du Perceptron, notamment l'impossibilité de traiter des problèmes non linéaires. Paraissant alors une impasse, la recherche sur les réseaux de neurones perdit une grande partie de ses financements publics, et le secteur industriel s'en détourna aussi.

En 1982, John Joseph Hopfield, physicien reconnu, donna un nouveau souffle au neuronal en publiant un article introduisant un nouveau modèle de réseau de neurones. Cet article eût du succès pour plusieurs raisons, dont la principale était de teinter la théorie des réseaux de neurones de la rigueur propre aux physiciens. Le neuronal redevint un sujet d'étude

acceptable, bien que le modèle de Hopfield souffrait toujours des principales limitations des modèles des années 1960, notamment l'impossibilité de traiter les problèmes non-linéaires. Quelques années après, une nouvelle génération de réseaux de neurones survient, capables de traiter avec succès des phénomènes non-linéaires : le *perceptron multicouches* PMC. Proposé pour la première fois par Werbos, le Perceptron Multi-Couches apparaît en 1986 introduit par Rumelhart.

Les réseaux de neurones ont par la suite connu un essor considérable, et ont fait partie des premiers systèmes à bénéficier de l'éclairage de la théorie de la régularisation statistique introduite par Vladimir Vapnik en Union Soviétique et popularisée en occident depuis la chute du mur. Cette théorie, l'une des plus importantes du domaine des statistiques, permet d'anticiper, d'étudier et de réguler les phénomènes liés au sur-apprentissage offrant ainsi au réseau de meilleures performances.

II.2 Les réseaux de neurones, pourquoi faire ?

Lors de l'émergence d'une nouvelle technique, l'ingénieur se demande naturellement en quoi elle peut lui être utile. Grâce à leur capacité de généralisation, les réseaux de neurones sont généralement utilisés dans des problèmes de nature statistiques et perceptives, telles que la classification, l'évaluation (prédiction) ou la reconnaissance de formes.

Dans la pratique, les réseaux de neurones sont utilisés, par exemple:

- Pour la classification d'espèces animales en biologie par catégorie étant donnée une analyse ADN.
- Pour la reconnaissance optique de caractères (OCR), notamment par les banques pour vérifier le montant des chèques, par La Poste pour trier le courrier en fonction du code postal, etc. ; ou bien encore pour le déplacement automatisé de robots mobiles autonomes.
- L'approximation avec une bonne précision d'une fonction d'expression analytique inconnue ou bien connue mais très complexe à partir de quelques évaluations de cette fonction.

II.3 Définitions

a. Le neurone biologique

Les modèles de réseaux de neurones artificiels sont, à l'origine, une imitation et une formalisation du fonctionnement du cerveau. Il contient, chez l'homme, environ 10 milliards de neurones, et chacun est connecté à environ 10.000 autres neurones, on voit ainsi sa complexité étonnante. Les connexions permettent le transfert d'informations sous forme d'impulsions électriques entre les neurones.

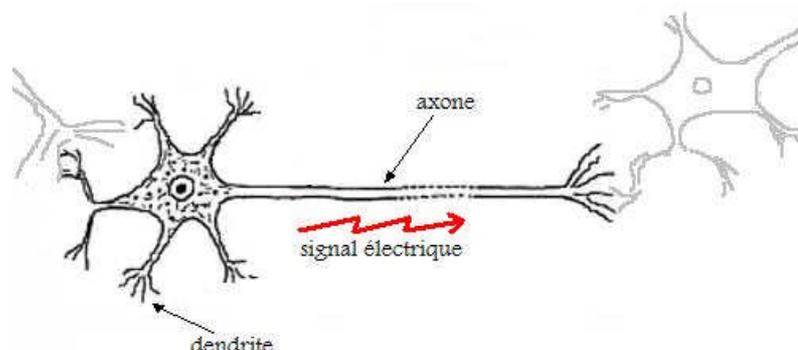


Figure : Le neurone biologique, d'après [14].

Un neurone reçoit des impulsions de ses voisins par l'intermédiaire des "dendrites". Si la somme des signaux dépasse un certain *seuil*, il renvoie un signal vers d'autres neurones, par l'intermédiaire de son "axone". Ce mécanisme complexifie la façon dont les informations sont transmises: un neurone ne se borne pas à faire passer l'information, il la filtre. Pour résumer, un neurone peut être schématisé ainsi: il fait la somme de toutes les informations qu'il reçoit et il émet un signal à condition que la somme soit suffisamment élevée.

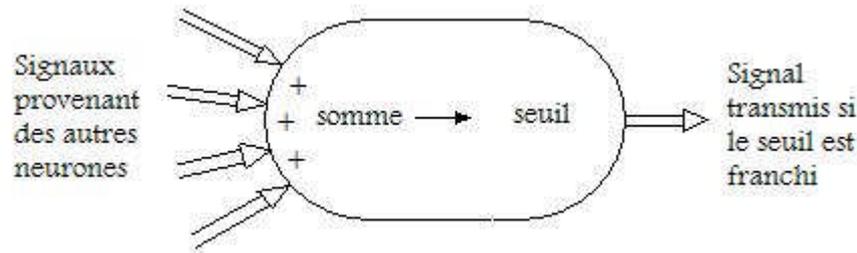


Figure : Schéma simplifié d'un neurone biologique, d'après [14].

Si l'on ramène la contribution d'un neurone au cerveau tout entier, on se rend compte que chacun effectue un travail très simple par rapport au résultat obtenu. En effet, les neurones réalisent des opérations basiques, et pourtant, lorsque l'on en met 10 milliards ensemble, on peut créer une entité pensante ! Cependant, cela n'est pas suffisant: un cerveau ne peut rien faire s'il n'a pas de quoi apprendre. Il a besoin donc d'informations venant de l'extérieur. C'est pour cela qu'il est relié aux différents organes du corps.

Grâce à ces informations il est capable de faire son apprentissage: lorsqu'une action a provoqué une douleur, il doit changer l'organisation des neurones afin de ne pas répéter le même événement.

L'objectif des réseaux de neurones artificiels est donc de modéliser le fonctionnement des neurones biologiques, mais aussi de permettre un apprentissage.

b. Le neurone mathématique (formel)

Nous venons de voir que les neurones ont un fonctionnement assez simple et facilement applicable en mathématiques: il faut faire une sommation des informations qui lui sont fournies, puis appliquer un seuil à cette somme.

Pour schématiser cela, on admettra que les *entrées* (les informations que le neurone reçoit) ne peuvent valoir que 0 ou 1. Cela correspond aux signaux électriques fournis par les neurones voisins.

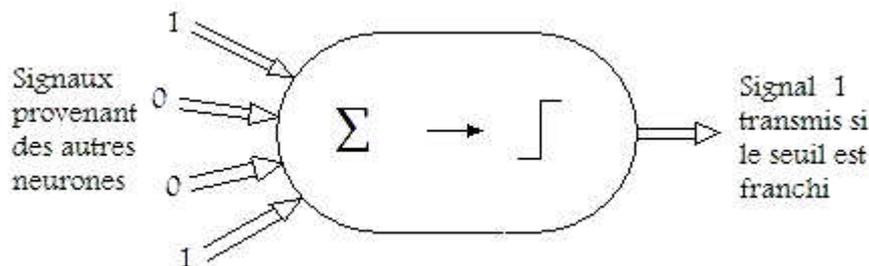


Figure : Principe de fonctionnement d'un neurone formel, d'après [14].

Pour expliciter le principe de fonctionnement illustré ci-haut, soit donc un neurone formel. Il reçoit des neurones en amont un certain nombre de valeurs via ses connexions synaptiques, et il produit une certaine valeur en utilisant une fonction de combinaison. Cette fonction peut donc être formalisée comme étant une fonction vecteur à scalaire dont le mode de calcul varie selon l'architecture du réseau :

- Les réseaux de type MLP (Multi-Layer Perceptron) calculent une combinaison linéaire des entrées, c'est-à-dire que la fonction de combinaison renvoie le produit scalaire entre le vecteur des entrées et le vecteur des poids synaptiques.
- Les réseaux de type RBF (Radial Basis Function) calculent la distance entre les entrées, c'est-à-dire que la fonction de combinaison renvoie la norme euclidienne du vecteur issu de la différence vectorielle entre les vecteurs d'entrées.

Une fois la combinaison des entrées faite, la fonction d'activation (ou fonction de seuillage, ou encore fonction de transfert) sert à introduire une non linéarité dans le fonctionnement du neurone.

Les fonctions de seuillage présentent généralement trois intervalles :

- en dessous du seuil, le neurone est non actif (souvent dans ce cas, sa sortie vaut 0 ou -1) ;
- aux alentours du seuil, une phase de transition ;
- au-dessus du seuil, le neurone est actif (souvent dans ce cas, sa sortie vaut 1).

Des exemples classiques de fonctions d'activation sont :

- La fonction exponentielle.
- La fonction tangente hyperbolique (sigmoïde).
- La fonction de Heaviside.

Ce calcul de l'activation effectué, le neurone propage son nouvel état interne sur son axone. Dans un modèle simple, la fonction neuronale est simplement une fonction de seuillage : elle vaut 1 si la somme pondérée dépasse un certain seuil ; 0 sinon. Dans un modèle plus riche, le neurone fonctionne avec des nombres réels (souvent compris dans l'intervalle $[0,1]$ ou $[-1,1]$). En réalité, les signaux utilisés ne sont pas exactement binaires (0 ou 1): on assouplit la définition précédente en autorisant que ces signaux soient des nombres réels. De plus, la fonction seuil n'est pas aussi abrupte. On utilise plutôt une sigmoïde qui a une pente plus douce.

En résumé, un neurone formel est donc une fonction algébrique non linéaire, paramétrée, à valeurs bornées. Les paramètres de cette fonction f sont attachés aux entrées du neurone : la sortie du neurone est une fonction non linéaire d'une combinaison des entrées $\{x_j\}$ pondérées par les paramètres $\{w_j\}$, qui sont alors souvent désignés sous le nom de poids ou de poids synaptiques en raison de l'inspiration biologique des réseaux de neurones. Conformément à l'usage (également inspiré de la biologie), cette combinaison linéaire sera appelée potentiel. Ce potentiel v le plus fréquemment utilisé est la somme pondérée, à laquelle s'ajoute un terme constant dit biais :

$$V_i = \sum w_j * x_j + b_i$$

i : le $i^{\text{ème}}$ neurone.

j : la $j^{\text{ème}}$ l'entrée.

La fonction f représentant la sortie du neurone serait donc l'image du potentiel par l'une des fonctions d'activation ; la fonction sigmoïde (ou tangente hyperbolique) étant la plus utilisée, nous aurons l'expression suivante pour la sortie du réseau :

$$Y = \text{th}(V)$$

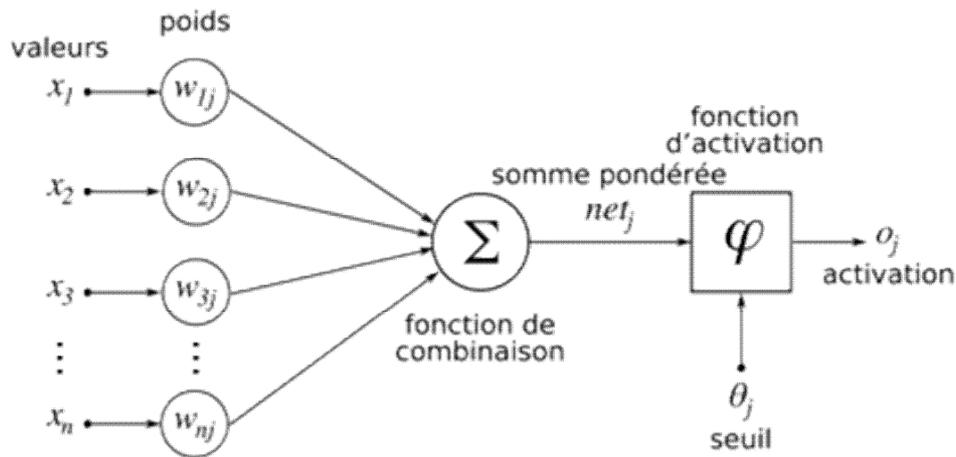


Figure : Structure d'un neurone artificiel, d'après [14].

Voilà ce qu'est un neurone en mathématiques. Il faut maintenant en assembler plusieurs pour construire un réseau.

c. Structure générale d'un réseau de neurones

Un réseau de neurones (on parle parfois aussi de *réseau neuromimétique*) est donc constitué d'un très grand nombre de ces petites unités de traitement identiques appelées neurones artificiels. Elles étaient électroniques dans les premières implémentations (perceptrons de *Rosenblatt*); on les simule le plus souvent sur ordinateur aujourd'hui pour des questions de coût et de commodité.

Comme les neurones formels sont interconnectés entre eux, leur niveau d'interconnexion définit des couches. Nous distinguons une couche d'entrée contenant un ensemble de neurones qui vont recevoir les informations primitives, puis après un certain nombre de couches intermédiaires dites couches cachées, une couche de sortie qui contient les neurones finaux qui vont transmettre les informations traitées par la totalité du réseau.

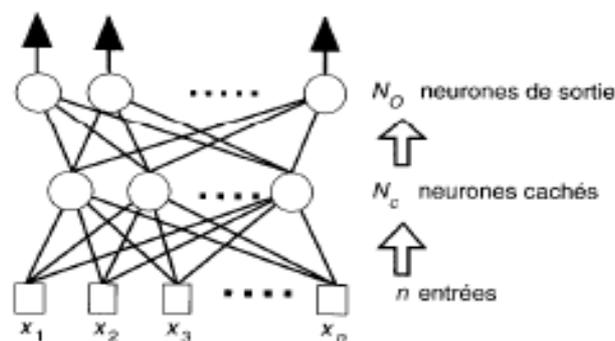
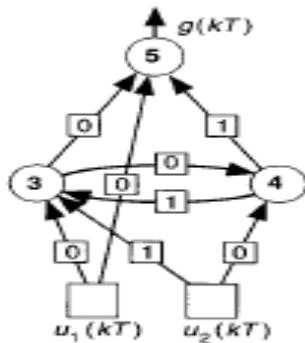


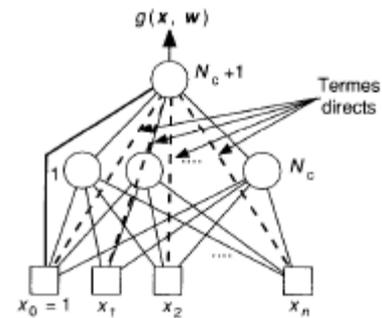
Figure : Architecture d'un réseau de neurones artificiels, d'après [7].

De cette structure générale dérivent plusieurs architectures de réseaux. La différence majeure porte sur la possibilité d'avoir des boucles dans le réseau (cycle ou circuit), ce qui permet au système d'avoir accès au passé. On parle ainsi de réseaux bouclés.

Par ailleurs, cette sorte de récurrence peut ne pas exister et les informations se propagent de la couche n vers la couche $n+1$ à chaque itération ou encore on peut avoir des groupements de cellules n'ayant aucune interaction ce qui permet de faire transiter un certain de flot de données au sein du réseau. On parle dans ce cas de réseaux non bouclés.



Réseau bouclé



Réseau non bouclé

Figures : différentes architectures de réseaux de neurones, d'après [7].

III.4 L'apprentissage

On appelle apprentissage des réseaux de neurones la procédure qui consiste à estimer les paramètres des neurones du réseau à savoir les poids W_j et les biais b_i , afin que celui-ci remplisse au mieux la tâche qui lui est affectée.

De ce fait, si on se donne une fonction vectorielle, on peut tenter de faire apprendre cette fonction par un RNA et ce en ajustant les paramètres de ce réseau.

La large majorité des réseaux de neurones possède un algorithme « d'entraînement » qui consiste à modifier les poids synaptiques en fonction d'un jeu de données présentées en entrée du réseau. Le but de cet entraînement est de permettre au réseau de neurones « d'apprendre » à partir des exemples. Si l'entraînement est correctement réalisé, le réseau est capable de fournir des réponses en sortie très proches des valeurs d'origines du jeu de données d'entraînement.

Mais tout l'intérêt des réseaux de neurones réside dans leur capacité à généraliser à partir du jeu de test. La vision topologique d'un apprentissage correspond à la détermination de l'hypersurface sur \mathbb{R}^n où \mathbb{R} est l'ensemble des réels, et n le nombre d'entrées du réseau.

a. Mode supervisé ou non supervisé

Un apprentissage est dit supervisé lorsque l'on force le réseau à converger vers un état final précis, en même temps qu'on lui présente un motif. On peut donc affecter à un tel réseau la tâche qui consiste à réaliser une fonction algébrique non linéaire ; celle-ci peut être :

- connue analytiquement : le réseau réalise alors une tâche d'approximation de fonction ;
- inconnue analytiquement, mais pour laquelle on dispose de valeurs, en nombre fini, qui sont entachées de bruit si ces valeurs résultent de mesures effectuées sur un processus physique, chimique, économique, biologique, etc. : le réseau réalise alors une tâche de modélisation statique.

C'est essentiellement pour ce dernier type d'applications que sont mis en oeuvre les réseaux de neurones à apprentissage supervisé.

À l'inverse, lors d'un apprentissage non supervisé, le réseau est laissé libre de converger vers n'importe quel état final même en lui présentant un motif.

b. Surapprentissage

Il arrive qu'à faire apprendre un réseau de neurones toujours sur le même échantillon, celui-ci devienne inapte à reconnaître autre chose que les éléments présents dans l'échantillon.

On parle alors de surapprentissage : le réseau est devenu trop spécialisé et ne *généralise* plus correctement.

Pour les modèles de RNA d'évaluation, le mode d'entraînement est supervisé. La démarche classique pour l'apprentissage supervisé consiste à se donner un ensemble d'exemples, c'est à dire un ensemble fini de couple de vecteurs (x_i, y_i) . Dans un tel couple, x_i désigne l'entrée du réseau et y_i la sortie désirée pour cette entrée. On écrit alors la fonction calculée par le réseau sous une forme paramétrique : $f(x, w)$ désigne la sortie du réseau quand on lui présente en entrée le vecteur x et qu'il utilise les poids synaptiques contenus dans le vecteur w . On se donne enfin une distance sur l'espace vectoriel de sortie, c'est à dire un moyen de mesurer l'erreur commise en un point par le réseau. Si cette distance est notée d , on cherche alors à trouver la valeur de w qui minimise la somme de l'erreur totale commise par le réseau, c'est à dire la somme des distances entre les sorties obtenues et les sorties désirées. Cette erreur est une fonction de w et on peut donc utiliser les techniques classiques d'optimisation de fonction pour trouver son minimum.

c. La rétro-propagation du gradient

Les algorithmes d'optimisation de fonction efficaces utilisent en général la différentielle de la fonction considérée (c'est à dire son gradient). Quand les fonctions de transfert utilisées dans les neurones sont différentiables, et quand la fonction distance est aussi différentiable, l'erreur commise par un PMC est une fonction différentiable des coefficients synaptiques du réseau. L'algorithme de rétro-propagation permet justement de calculer le gradient de cette erreur de façon efficace : le nombre d'opérations (multiplications et additions) à faire est en effet proportionnel au nombre de connexions du réseau, comme dans le cas du calcul de la sortie de celui-ci. Cet algorithme rend ainsi possible l'apprentissage d'un PMC.

L'algorithme de rétro-propagation du gradient est l'un des algorithmes les plus utilisés. La démarche consiste à rétropropager l'erreur commise par un neurone à ses synapses et aux neurones qui y sont reliés et à la corriger selon l'importance des éléments qui ont justement participé à la réalisation de cette erreur : les poids synaptiques qui contribuent à engendrer une erreur importante se verront modifiés de manière plus significative que les poids qui ont engendré une erreur marginale.

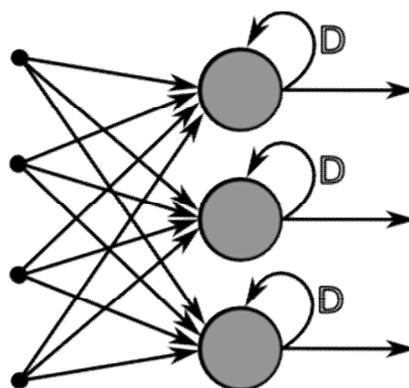


Figure : Le principe de la rétro-propagation du gradient, d'après [8].

III.5 Quelques types de réseaux de neurones

Nous donnons dans ce qui suit une classification générale des réseaux de neurones en séparant les réseaux 'feed back' et les réseaux 'feed forward'.

II.5.1 Les réseaux feed forward

a. Les Perceptrons

Le Perceptron mono couche

C'est historiquement le premier RNA. C'est un réseau simple, puisqu'il ne se compose que d'une couche d'entrée et d'une couche de sortie. Il peut être utilisé pour la reconnaissance de formes, faire de la classification et résoudre des opérations logiques simples. Sa principale limitation est qu'il ne peut résoudre que des problèmes linéaires. Il suit généralement un apprentissage supervisé.

Le Perceptron Multi Couches PMC

C'est une extension du précédent, avec une ou plusieurs couches cachées entre l'entrée et la sortie. Chaque neurone dans une couche est connecté à tous les neurones de la couche précédente et de la couche suivante (excepté pour les couches d'entrée et de sortie) et il n'y a pas de connexions entre les neurones d'une même couche. Les fonctions d'activation utilisées dans ce type de RNA sont sigmoïdales. Il peut résoudre des problèmes non linéaires et logiques plus compliqués. Il suit aussi un apprentissage supervisé.

b. Les réseaux à fonction radiale RBF

On les nomme aussi RBF (pour Radial Basic Function). L'architecture est la même que pour les PMC cependant, les fonctions de base utilisées sont gaussiennes. Les RBF, comme les PMC, sont employés pour des problèmes de classification et d'approximations de fonctions.

II.5.2 Les réseaux feed back

a. Les cartes autorganisatrices de Kohonen

Ce type de réseau, appelé aussi SOM (Self Organized Maps) est un réseau à apprentissage non supervisé qui établit une carte discrète. Il est composé d'une couche d'entrée et d'une couche compétitive où chaque neurone de cette couche est connecté à toutes les entrées. La structuration topologique de la carte provient d'une mesure de distance définie sur les neurones du réseau qui traduit une notion de voisinage du neurone.

b. Les réseaux d'Hopfield

Ce sont des réseaux récurrents, entièrement connectés à mode d'apprentissage non supervisé. Chaque neurone est connecté à chaque autre neurone et il n'y a aucune différenciation entre les neurones d'entrée et de sortie. La principale application des réseaux d'Hopfield est la résolution de problèmes d'optimisation.

c. Les ART

Les ART (Adaptative Resonance Theorie) sont des réseaux à apprentissage par compétition supervisé ou non. Dans ce type d'architecture, les vecteurs de poids ne seront

adaptés que si l'entrée fournie est suffisamment proche d'un prototype déjà connu par le réseau. On parle ainsi de résonance.

II.6 La parcimonie

La propriété fondamentale des réseaux de neurones non bouclés à apprentissage supervisé est l'approximation parcimonieuse qui s'énonce comme suit :

« Toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée uniformément, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables, par un réseau de neurones comportant une couche de neurones cachés en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation, et un neurone de sortie linéaire ». [HORNİK et al. 1989]

Cette propriété fait des réseaux de neurones non bouclés à apprentissage supervisé des approximateurs universels.

II.7 Avantages et inconvénients des réseaux de neurones

Les points forts des RNA sont :

- Une capacité d'approcher n'importe quelle dépendance fonctionnelle. Le réseau modélise lui-même sans avoir besoin d'informations sur le système autres que les entrées et les sorties.
- Une certaine résistance au bruit ou au manque de fiabilité des données.
- Large gamme de problèmes traités : logique, valeurs réelles, classification,...
- Comportement moins mauvais en cas de faible nombre de données.
- Un outil simple, puissant et rapide.

Par ailleurs, les RNA ne dispensent pas de bien connaître leurs problèmes, de définir les classes avec pertinences, de ne pas oublier une variable importante et surtout un RNA est une boîte noire qui n'explique pas ses décisions et dont des interprétations physiques relatives au phénomène étudié ne peuvent être tirées.

Conclusion

A partir d'un modèle simple des neurones biologiques, on a construit un modèle plus complexe, celui des Perceptrons Multi Couches PMC. Ces outils permettent de calculer des fonctions vectorielles, adaptables à un ensemble d'exemples par le biais d'algorithmes d'optimisation utilisant la technique de la rétro-propagation. De cette façon, on peut espérer faire apprendre une fonction complexe à un PMC simple, contenant assez peu de neurones. On obtiendra ainsi une modélisation analytique compacte d'une fonction décrite expérimentalement.



**APPLICATION DES RESEAUX DE NEURONES
A LA PREDICTION DES PROPRIETES
DES HYDROCARBURES**

III.1 Démarche suivie

Afin de mettre au point les modèles RNA, nous avons adopté la démarche suivante :

1^{ère} étape : définition des objectifs

Cette étape s'est limitée à la définition des propriétés physiques dont nous voulons modéliser la prédiction. Pour pallier aux insuffisances des méthodes déjà existantes et dans le but de compléter des travaux de recherche en cours de réalisation au sein du laboratoire, nous nous sommes intéressés à établir de nouveaux modèles RNA pour la prédiction de quelques propriétés physiques et thermodynamiques à savoir la tension superficielle, la viscosité, l'entropie et la masse molaire.

2^{ème} étape : collecte de données

Cette étape a consisté en la collecte de données relatives aux propriétés physiques des hydrocarbures purs appartenant aux différentes familles chimiques.

L'opportunité nous a été offerte de consulter la base de données du TRC, développée par The Thermodynamic Research Center de l'université de Houston, Texas.

Cette base de donnée a été ensuite traitée et divisée en deux classes :

- la première classe concerne les hydrocarbures non cycliques (non ring group). Elle comprend : les normales paraffines, les iso-paraffines et les oléfines.
- la deuxième classe concerne les hydrocarbures cycliques (ring group). Elle englobe les naphthènes et les aromatiques.

Une partie majeure de cette base de données sera destinée à l'apprentissage du RNA (base d'entraînement) tandis que l'autre partie (environ 10%) va servir à valider le RNA établi (base de test).

3^{ème} étape : définition des entrées-sortie des modèles

Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre précédant, afin qu'un réseau de neurones artificiels remplisse sa tâche avec fiabilité, les entrées de celui-ci doivent être judicieusement choisies. On parle ainsi d'entrées pertinentes ou encore discriminantes. C'est-à-dire qu'elles discriminent entre les différents éléments constituant les vecteurs d'entrée.

Pour le corps pur, les entrées ne sont autres que les groupements structuraux des hydrocarbures auxquels nous avons rajouté la température d'ébullition, étant une propriété largement disponible dans les différentes bases de données et afin de remédier au problème de différenciation entre les isomères.

Pour ce qui est de la première classe, les entrées considérées sont les suivantes :

Tb, Nc

-CH₃, -CH₂- : caractéristiques des n-paraffines.

-CH<, >C< : caractéristiques des iso-paraffines.

=CH₂, =CH-, =C<, =C= : caractéristiques des oléfines.

Pour la seconde classe, les entrées sont :

Tb, Nc.

-CH₃, -CH₂-, -CH<, >C<, =CH₂, =CH-, =C< : caractéristiques de la structure cyclique et de la chaîne latérale.

Pour les mélanges, les entrées principales du réseau sont : la densité d^{20} et l'indice de réfraction n^{20} , celles-ci étant des propriétés discriminantes et facilement accessibles par

l'expérience. De même pour les fractions pétrolières auxquelles nous avons rajouté la température d'ébullition moyenne volumétrique T_{bv} .

Les sorties des réseaux sont donc, comme nous l'avons signalé précédemment, la tension superficielle T_s à 20°C, la viscosité dynamique à 100°F et 210°F, l'entropie S_f^{298} et la masse molaire.

4^{ème} étape : Etablissement des RNA

Après avoir traité la base de données et formulées les entrées-sortie de chaque réseau, nous avons procédé à la programmation sous environnement MATLAB 6.5 afin de déterminer la structure optimale pour chaque cas étudié.

La construction de chaque réseau passe d'abord par l'optimisation, par incrémentation, du nombre de neurones cachés que comporterait la couche cachée du RNA.

III.2 Caractéristiques des réseaux établis

Le tableau suivant résume l'ensemble des caractéristiques des réseaux établis à savoir l'architecture, l'algorithme d'apprentissage et les fonctions de bases.

Tableau : caractéristiques des réseaux établis.

Caractéristique	Choix
Architecture	PMC
Nombre de couches cachées	1
Nombre de neurones cachés	Optimisé
Nombre de neurones de sortie	1
Algorithme d'entraînement	Levenberg – Marquardt (trainlm)
Fonction d'activation	Tansig
Fonction de sortie	Purelin
Fonction de performance	MSE

III.3 Présentation des résultats de simulation

Dans le paragraphe suivant, nous allons présenter les résultats obtenus lors de simulation par RNA pour le corps pur, les mélanges et les fractions pétrolières. Afin de rendre compte de l'ordre de la précision des RNA établis pour la prédiction des différentes propriétés, un premier test a été effectué sur les hydrocarbures extraits de la banque de données. Ensuite, une comparaison avec les différentes corrélations recommandées dans la littérature et règles de mélanges a été envisagée afin d'avoir une idée sur les performances de nos RNA par rapport aux autres méthodes de prédiction déjà existantes.

III.3.1 Application au corps pur

a. La tension superficielle

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	Tension superficielle Ts 20°C [dyne/cm]
Famille	Non Ring Group
Nombre de neurones cachés	5
Erreur min %	0,000
Erreur max %	1,829
Erreur moyenne %	0,2660

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	Ts20°C (donnée) [dyne/cm]	Ts20°C (RNA) [dyne/cm]	AAD %
cis-2-pentene	C5H10	17,347	17,571	1,275
hexane	C6H14	18,466	18,501	0,187
2,4-dimethylhexane	C8H18	20,066	19,984	0,411
2,3,4-trimethylpentane	C8H18	21,153	21,01	0,673
3-methyloctane	C9H20	22,439	22,57	0,583
tridecane	C13H28	26,041	26,051	0,037
eicosane	C20H42	28,966	28,941	0,089
			AD %	0,465

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	Tension superficielle Ts 20°C [dyne/cm]
Famille	Ring Group
Nombre de neurones cachés	3
Erreur min %	0,000
Erreur max %	2,737
Erreur moyenne %	0,776

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	Ts 20° (donnée) [dyne/cm]	Ts 20°C (RNA) [dyne/cm]	AAD %
cis-1,3-dimethylcyclohexane	C8H16	22,868	24,190	5,464
ethylcyclohexane	C8H16	25,242	25,166	0,299
1,trans-2dimethylcyclopentane	C7H14	24,044	22,609	5,966
			AD %	3,910

b. La viscosité $\mu 100^{\circ}\text{F}$

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	La viscosité $\mu 100^{\circ}\text{F}$ [cp]
Famille	Non Ring Group
Nombre de neurones cachés	4
Erreur min %	0,0004
Erreur max %	0,5377
Erreur moyenne %	0,0206

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	$\mu 100^{\circ}\text{F}$ [cp] (donnée)	$\mu 100^{\circ}\text{F}$ [cp] (RNA)	AAD %
1-octene	C8H16	0,390	0,392	0,51085
1-undecene	C11H22	0,798	0,797	0,01777
1-tetradecene	C14H28	1,454	1,464	0,67524
heptadecane	C17H36	2,475	2,467	0,29974
			AD %	0,37590

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	La viscosité $\mu 100^{\circ}\text{F}$ [cp]
Famille	Ring Group
Nombre de neurones cachés	6
Erreur min %	0,0000
Erreur max %	1,6735
Erreur moyenne %	0,1588

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	$\mu 100^{\circ}\text{F}$ (donnée) [cp]	$\mu 100^{\circ}\text{F}$ (RNA) [cp]	AAD %
n-propylbenzene	C9H12	0,676	0,67	0,88769
hexylbenzene	C12H18	1,237	1,2348	0,17692
decylbenzene	C16H26	2,566	2,5661	0,00263
dodecylcyclohexane	C18H36	4,588	4,5963	0,18020
			AD %	0,31180

c. La viscosité $\mu_{210^\circ\text{F}}$ [cp]

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	La viscosité $\mu_{210^\circ\text{F}}$ [cp]
Famille	Non Ring Group
Nombre de neurones cachés	6
Erreur min %	0,0000
Erreur max %	0,2295
Erreur moyenne %	0,0346

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	$\mu_{210^\circ\text{F}}$ (donnée) [cp]	$\mu_{210^\circ\text{F}}$ (RNA) [cp]	AAD %
1-octene	C8H16	0,236	0,23237	1,53680
1-undecene	C11H22	0,403	0,40092	0,51688
1-tetradecene	C14H28	0,638	0,64186	0,60196
heptadecane	C17H36	0,946	0,94638	0,04053
			AD %	0,67404

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	La viscosité $\mu_{210^\circ\text{F}}$ [cp]
Famille	Ring Group
Nombre de neurones cachés	5
Erreur min %	0,0000
Erreur max %	1,7399
Erreur moyenne %	0,2160

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	$\mu_{100^\circ\text{F}}$ donnée) [cp]	$\mu_{100^\circ\text{F}}$ (RNA) [cp]	AAD %
n-propylbenzene	C9H12	0,369	0,36575	0,8799
dodecylcyclohexane	C18H36	0,585	0,59009	0,8621
ethylbenzene	C8H10	0,992	0,99263	0,0630
n-nonylbenzene	C15H24	1,397	1,4041	0,5025
			AD %	0,5770

d. L'entropie S°_{298} [kJ/K.mol]

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	L'entropie S°_{298} [kJ/K.mol]
Famille	Non Ring Group
Nombre de neurones cachés	4
Erreur min %	0,0000
Erreur max %	3,9014
Erreur moyenne %	0,835

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	S°_{298} [kJ/K.mol] (donnée)	S°_{298} [kJ/K.mol] (RNA)	AAD %
2,3-dimethyl-2-butene	C6H12	0,3627	0,37242	2,6089
cis-3-hexene	C6H12	0,3797	0,38169	0,5211
2,2-dimethylpentane	C7H16	0,3927	0,39623	0,8911
2,3,3-trimethylpentane	C8H18	0,42714	0,4228	1,0151
2,4-dimethylhexane	C8H18	0,44773	0,44726	0,1044
2,3,3-trimethylhexane	C9H20	0,4613	0,46265	0,2911
2,2,5,5-tetramethylhexane	C10H22	0,4701	0,47336	0,6894
2,6-dimethylheptane	C9H20	0,4816	0,49138	1,99
2,3,4,5-tetramethyl- hexane	C10H22	0,4915	0,48534	1,2536
hexane, 3-ethyl-3,4-dimethyl-	C10H22	0,4955	0,50218	1,3307
2,4,4-trimethylheptane	C10H22	0,5027	0,50327	0,1141
2-methyl-3-(1-methylethyl)- hexane	C10H22	0,5081	0,51947	2,1883
			AD%	1,0831

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	L'entropie S°_{298} [kJ/K.mol]
Famille	Ring Group
Nombre de neurones cachés	7
Erreur min %	0,0000
Erreur max %	2,8329
Erreur moyenne %	0,532

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Formule	S_{298}° [kJ/K.mol] (donnée)	S_{298}° [kJ/K.mol] (RNA)	AAD %
1,3-dimethylbenzene	C8H10	0,35865	0,35539	0,9096
cis-1,3-dimethylcyclohexane	C8H16	0,3713	0,37556	1,1342
1-ethyl-4-methylbenzene	C9H12	0,39763	0,40328	1,4018
2-isopropyltoluene	C10H14	0,4224	0,41619	1,469
4-ethyl-m-xylene	C10H14	0,4367	0,43153	1,1831
n-hexylcyclopentane	C11H22	0,532	0,52347	1,6025
decylbenzene	C16H26	0,67541	0,66883	0,9740
			AD%	1,2391

Comparaison et commentaires

Globalement, les résultats obtenus par simulation sur les différents réseaux établis sont très satisfaisants et ce pour les trois propriétés étudiées avec une erreur moyenne qui n'excède pas 0,80 % sur l'ensemble des bases d'entraînement et 1,25% sur les bases de test.

Il est à souligner aussi que les valeurs simulées de la tension superficielle pour les hydrocarbures naphténiques et aromatiques (ring group) sont d'une précision moins bonne que celles des autres RNA. Ceci peut être dû à la non disponibilité de données en nombre suffisant pour assurer l'entraînement du réseau, ce qui n'a pas permis un bon apprentissage de ce dernier.

Dans ce qui suit, une comparaison de nos résultats avec d'autres corrélations est présentée.

Tableau : Comparaison des RNA avec d'autres corrélations.

Tension superficielle Ts 20°C [dyne/cm]	Méthodes	AD%	
		non ring	ring
	RNA	0,465	3,90
	Corrélation de ZidelKheir-Chitour	3,026	10,575
Viscosité dynamique (cp)	Méthodes	MAD %	
	RNA	1,739	
	Equation d'Orrick - Erbar	15	
	Corrélation d'Andrade	5	

De cette comparaison des différentes méthodes, les RNA appliqués au corps pur selon la première approche simulent les résultats expérimentaux avec la plus faible marge d'erreur et ce pour les deux propriétés tension superficielle et viscosité, ce qui fait que la méthode RNA proposée offre de meilleures performances que les autres corrélations.

Afin de mieux illustrer cette bonne correspondance entre les données expérimentales (data) et les résultats obtenus par simulation (sim), nous proposons de présenter les figures suivantes affichées par le Logiciel MATLAB à la fin de chaque entraînement.

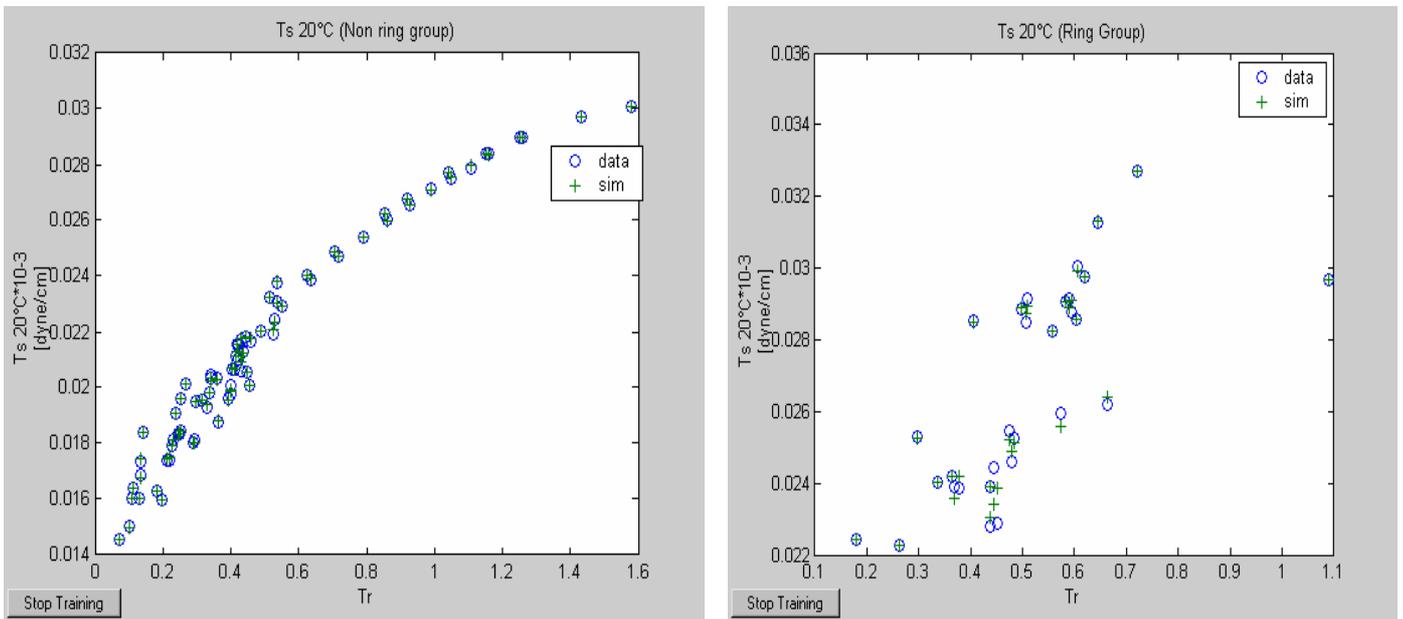
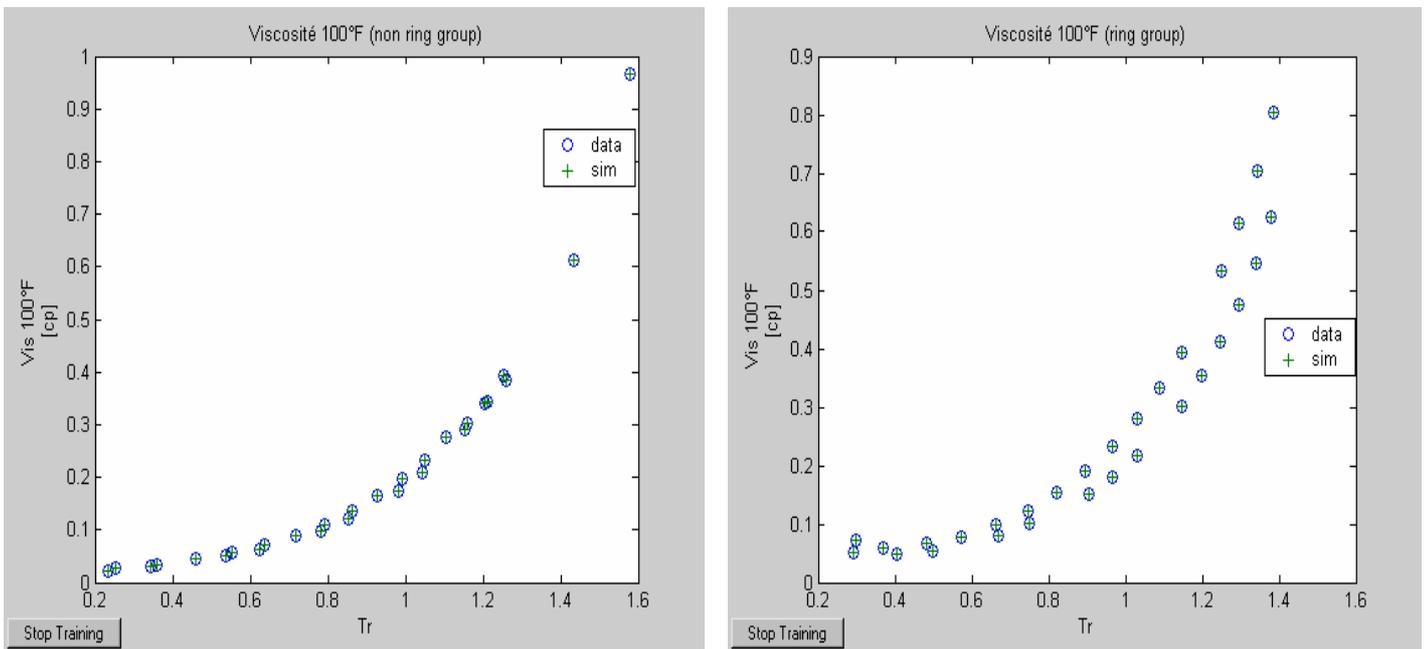
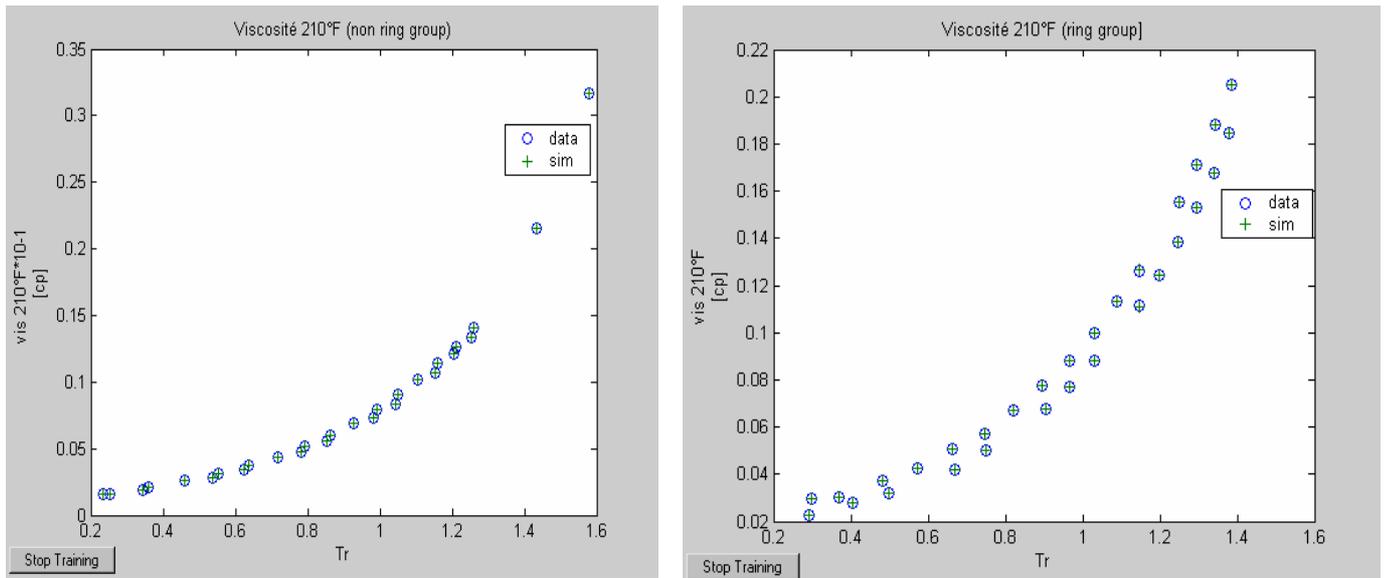


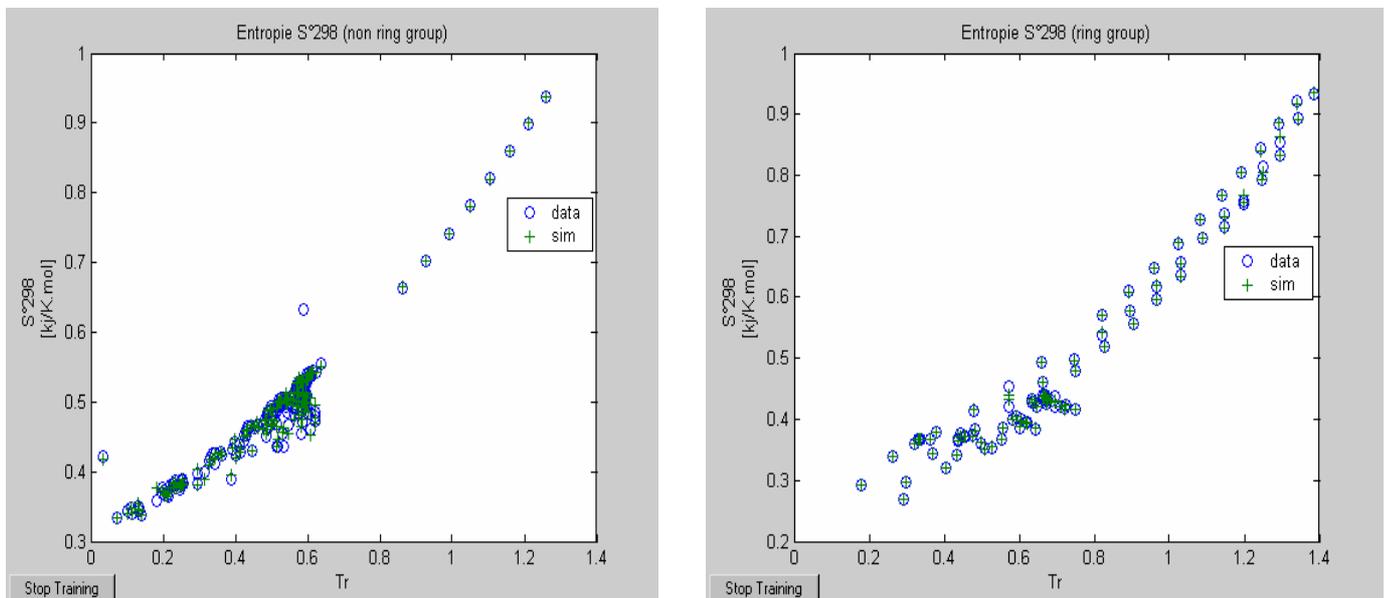
Figure : Variation de la tension superficielle en fonction de la température d'ébullition réduite T_r .



Figures : variation de la viscosité 100°F en fonction de la température d'ébullition réduite T_r .



Figures : variation de la viscosité 210°F en fonction de la température d'ébullition réduite Tr .



Figures : variation de l'entropie S°_{298} en fonction de la température d'ébullition réduite Tr .

L'analyse de ces graphes montrent une certaine monotonie des propriétés étudiées ainsi qu'une bonne concordance entre les valeurs expérimentaux et celles simulées par RNA où l'ensemble des points forment un groupe compact.

Pour la tension superficielle, cas des hydrocarbures naphéniques et aromatiques, le graphe correspondant illustre la dispersion des points utilisés pour l'apprentissage du réseau et par conséquent l'approche était d'une précision moins bonne que celles enregistrées dans les autres cas.

III.3.2 Application aux mélanges

a. La tension superficielle

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	Ts 20°C [dyne/cm]
Famille	Mélanges
Nombre de neurones cachés	5
Erreur min %	0,0168
Erreur max %	5,5591
Erreur moyenne %	1,3747

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Mélange	d_{exp}^{20}	n_{exp}^{20}	Ts 20°C [dyne/cm] (expérience)	Ts 20°C [dyne/cm] (RNA)	AAD %
M22	0,7313	1,411	22,709	23,278	2,4446
M23	0,7871	1,4494	25,361	25,199	0,64122
M16	0,8751	1,5029	29,622	30,858	4,0067
				AD%	2,3642

Commentaires et comparaison

Les résultats obtenus pour le RNA sont jugés acceptables avec une erreur moyenne par rapport à l'expérience de l'ordre de 2% et une erreur maximale ne dépassant pas 5,6%.

Un point fort de ce modèle est qu'il présente un aspect très pratique du fait qu'il ne fait appel qu'à deux propriétés facilement accessibles par l'expérience à savoir la densité et l'indice de réfraction pour calculer la sortie qui est la tension superficielle. Le graphe suivant illustre l'approche des différents points expérimentaux par le RNA.

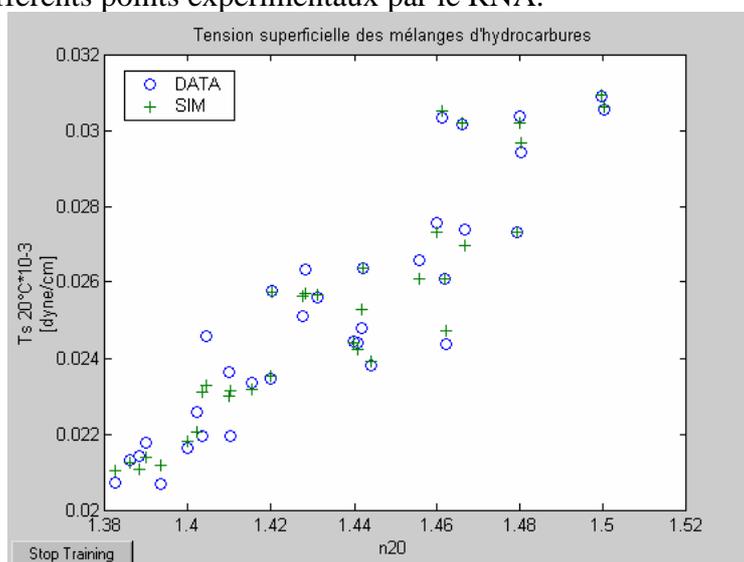


Figure : évolution de la tension superficielle des mélanges en fonction de l'indice de réfraction.

Pour la comparaison des performances du RNA établi pour la prédiction de la tension superficielle des mélanges d'hydrocarbures, nous avons envisagé d'appliquer les différentes règles de mélanges : arithmétique, géométrique, cubique, logarithmique et harmonique connaissant les compositions massiques, molaires et volumiques des différents constituants.

La déviation moyenne a été ensuite calculée pour chaque méthode et les résultats sont présentés dans le tableau suivant :

Tableau : Ecart enregistrés pour les différentes méthodes de calcul.

Méthode / AAD %		Massique (%)	Molaire (%)	Volumique (%)
Règles des mélanges	Moyenne arithmétique	7,02	6,73	6,34
	Moyenne géométrique	6,73	6,46	6,09
	Moyenne cubique	6,64	6,37	6,01
	Moyenne logarithmique	6,45	6,19	5,85
	Moyenne harmonique	5,93	5,66	5,40
RNA (d^{20}, n^{20})		2,36		

L'analyse des écarts moyens enregistrés pour les différentes méthodes montre bien que la tension superficielle n'est pas une propriété additive où toutes les règles de mélanges donnent un même ordre de déviation moyenne.

Par ailleurs, le RNA (d^{20} , n^{20}) offre de meilleurs résultats avec moins de données à fournir, c'est-à-dire sans nécessiter la connaissance de la composition du mélange ni la tension superficielle pour chaque constituant.

III.3.3 Application aux fractions pétrolières

a. la tension superficielle

Le problème auquel nous avons été confronté lors de l'application aux fractions pétrolières du RNA (d^{20} , n^{20}) établi à partir de données expérimentales relatives à des mélanges binaires était la non disponibilité d'une banque de données expérimentales afin que la généralisation soit validée de façon correcte.

La seule donnée expérimentale dont nous disposions était celle de la fraction n°4 du brut d'El-Agreb à laquelle nous avons appliqué la méthode et le résultat obtenu est présenté dans le tableau suivant :

Tableau : Application du RNA des mélanges aux fractions pétrolières.

	d^{20}	n^{20}	Ts 20°C exp [dyne/cm]	Ts 20°C RNA [dyne/cm]	AAD%
Fraction n°4 Brut El-Agreb	0,703	1,4032	21,10	22,0319	4,229

Le calcul de la tension superficielle T_s 20°C de la fraction renvoie une déviation moyenne de l'ordre de 4%, valeur qui appartient toujours à l'intervalle de fiabilité du réseau RNA (d^{20} , n^{20}).

Par ailleurs, l'utilisation d'un seul exemple d'origine expérimentale pour valider l'application de notre réseau aux fractions pétrolières reste une démarche très peu correcte.

b. La masse molaire

Pour ce qui de la masse molaire, l'établissement du RNA a été précédé d'une collecte de données relatives à des fractions pétrolières. Cette base de données se compose de :

Fractions G1-G21 : fractions légères issues de la distillation du brut de Guellala.

Fractions GL1-GL3 : fractions légères larges issues de la distillation du brut de Guellala.

Fractions A1-A21 : fractions légères issues de la distillation du brut d'EL-Agreb.

Fractions AL1-AL3 : fractions légères larges issues de la distillation du brut d'EL-Agreb.

Les paramètres du réseau et les résultats obtenus sur la base de test sont présentés dans les tableaux suivants.

Tableau : paramètres du réseau établi.

Propriété simulée	MM [gr/mole]
Famille	Fractions pétrolières légères Tbv <200°C
Nombre de neurones cachés	5
Erreur min %	0,0208
Erreur max %	1,2701
Erreur moyenne %	0,40

Tableau : résultats obtenus sur la base de test.

Nom	Fraction	Tbv [K]	d20	n20	MMexp [Kgr/mol]	Y [gr/mol]	AAD%
A2	65-70	340,5	0,6800	1,3925	84,42	84,848	0,50388
A7	90-95	365,5	0,7067	1,4049	96,53	95,077	1,5049
A10	105-110	380,5	0,7282	1,4176	104,53	104,78	0,23773
A13	125-130	400,5	0,7413	1,4237	113,74	113,65	0,080412
A19	150-155	425,5	0,7595	1,4328	125,36	125,26	0,075935
						AD %	0,4805714

Tableau : Comparaison avec d'autres corrélations.

Masse molaire [gr/mole]	Méthodes	AD%	MAD%
	RNA	0,4805	1,5049
	Projet Aspen	6,3007	13,5739
	Corrélation API	12,2310	21,6104
	Corrélation Riazi-Daubert	4,8014	15,7908

Commentaires

Les résultats obtenus pour le RNA se basant sur le deuxième type d'approche sont très satisfaisants suite à une déviation moyenne par rapport à l'expérience inférieure à 1% et une erreur maximale ne dépassant pas 1,5%.

De plus, la comparaison de notre modèle aux autres méthodes recommandées dans la littérature montre que les écarts relatifs au RNA (Tbv, d^{20} , n^{20}) sont nettement inférieurs à ceux enregistrés par les autres corrélations.

Le graphe suivant illustre l'approche des différents points expérimentaux par le RNA (Tbv, d^{20} , n^{20}).

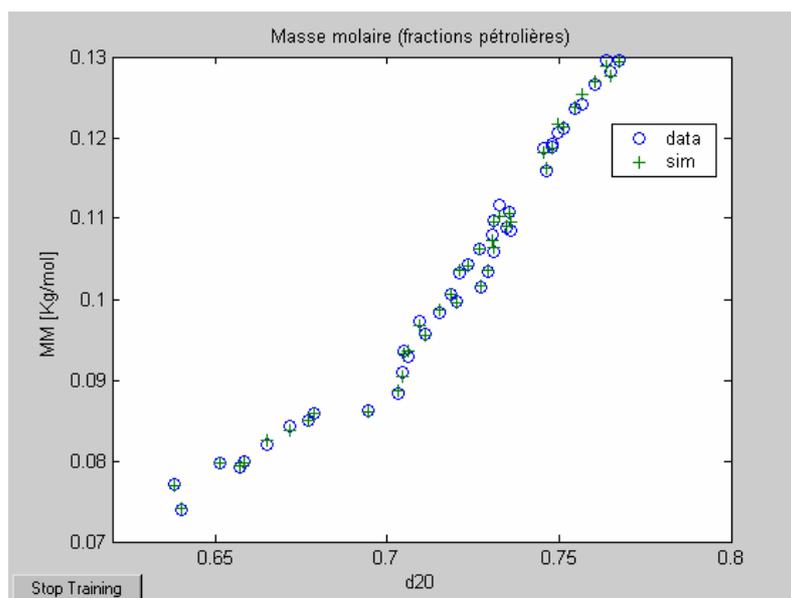


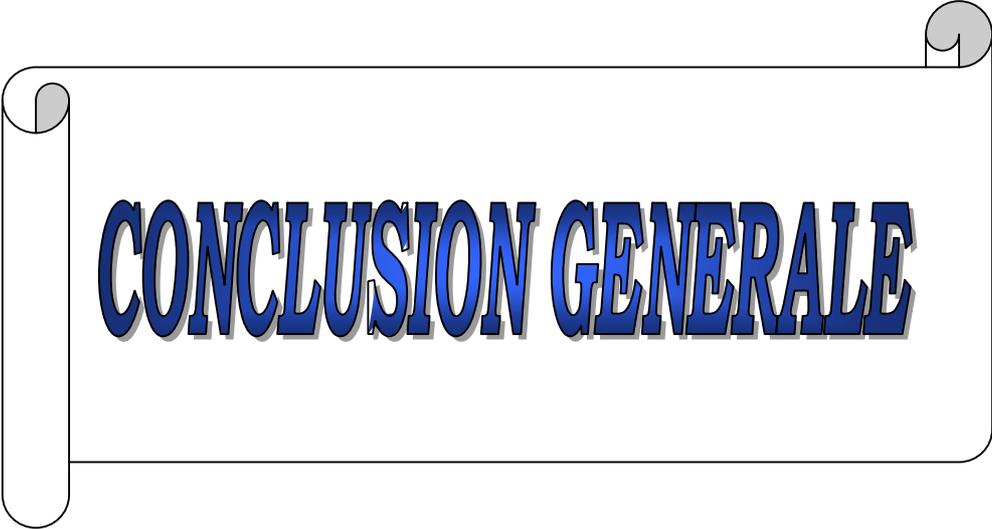
Figure : évolution de la masse molaire des fractions pétrolières légères en fonction de la densité d^{20} .

Conclusion

L'objectif de ce chapitre était l'application de la technique des réseaux de neurones à la prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques en question à savoir la tension superficielle, la viscosité, l'entropie et la masse molaire et ce selon une démarche en trois temps partant du corps pur jusqu'aux fractions pétrolières en passant par les mélanges.

Après avoir défini les différentes caractéristiques des réseaux de neurones artificiels, nous avons procédé à l'optimisation de l'architecture de ces derniers par incrémentation. La pertinence des entrées a fait ses preuves et les résultats donnés par simulation des différents réseaux de neurones établis sont jugés très satisfaisants en terme de précision pour le corps pur. Pour ce qui est des mélanges, les écarts enregistrés sont acceptables mais la généralisation pour les fractions pétrolières était peu correcte du fait d'un manque de données d'origine expérimentale pour valider une telle démarche.

Pour les fractions pétrolières, la prédiction de la masse molaire a été effectuée avec une très bonne précision, ce qui nous permet d'affirmer que l'introduction des entrées principales (T_{bv} , n^{20} , d^{20}) a permis une meilleure discrimination des données par le réseau.



CONCLUSION GENERALE

Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à la prédiction de quelques propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs, de leurs mélanges et des fractions pétrolières.

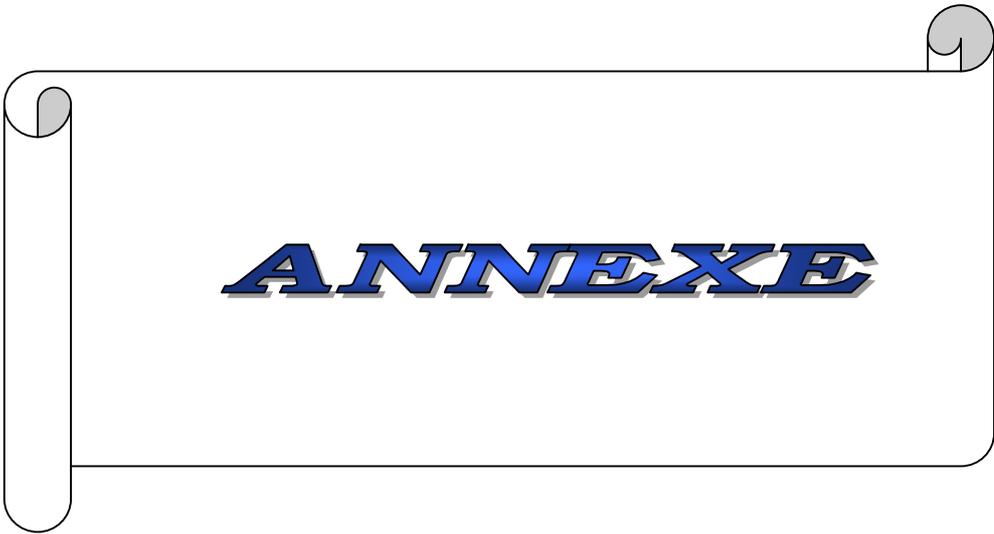
Le premier chapitre a été dédié à la présentation des différentes propriétés auxquelles la modélisation fait appel comme paramètres d'entrée ou de sortie ainsi que des corrélations recommandées dans la littérature utilisées pour la comparaison de nos modèles.

Dans le deuxième chapitre, traitant la technique de modélisation employée, nous avons introduit des généralités sur les réseaux de neurones artificiels dont le succès aujourd'hui est dû non pas au paradigme neurobiologique mais à leur contribution, de plus en plus fréquemment, à la simplification de l'étude des problèmes et ce en proposant des outils précieux pour en construire des modèles, simples, pratiques et très utiles assurant une approche avec une assez bonne précision.

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté les résultats obtenus par simulation des différents réseaux de neurones établis à la base de plusieurs approches du problème. Ces résultats sont jugés satisfaisants pour toutes les propriétés étudiées où les écarts absolus obtenus sont faibles comparativement à l'expérience et aux corrélations recommandées dans la littérature. D'autre part, ces réseaux présentent le grand avantage de ne faire appel qu'à des propriétés facilement accessibles par l'expérience comme entrées sans que le calcul fasse intervenir un nombre important d'hypothèses simplificatrices.

Le problème majeur auquel nous avons été confronté lors de la réalisation de ce travail était la non disponibilité de données expérimentales en nombre suffisant pour l'établissement des modèles neuronaux dans le cas des mélanges et des fractions pétrolières. De ce fait, la précision des résultats obtenus peut être améliorée davantage et ce en se basant sur des plans d'expériences neuronaux adaptés à chaque réseau et générés à partir d'essais expérimentaux.

Enfin, il est à noter que le réseau de neurones ne fournit pas de règle exploitable par un humain. Le réseau reste une boîte noire qui renvoie une réponse quand nous lui présentons une donnée sans pour autant donner de justification facile à lire sur la façon dont celle-ci est obtenue. Donc il n'est toujours pas évident de tirer à partir d'un réseau de neurones artificiels une interprétation physique du phénomène en question ou du problème à modéliser.



Présentation des résultats de simulation
Propriété : la tension superficielle Ts 20°C [dyne/cm]
Famille : non ring group.

Tableau : résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Nc	Y [dyne/cm]	AAD %
2,3-dimethyl-2-butene	C6H12	6	20,154	9,38E-10
3-methyl-1-butene	C5H10	5	14,542	3,15E-09
2-methylbutane	C5H12	5	15,019	0,094901
4-methyl-1-pentene	C6H12	6	16,006	0,035755
1-pentene	C5H10	5	16,019	0,013553
pentane	C5H12	5	15,992	0,23963
2,2-dimethylbutane	C6H14	6	16,284	0,050339
2-methyl-1-butene	C5H10	5	16,398	3,22E-08
trans-2-pentene	C5H10	5	16,849	5,54E-08
2,3-dimethylbutane	C6H14	6	17,441	0,33969
2-methylpentane	C6H14	6	17,429	0,2253
2-methyl-1-pentene	C6H12	6	17,942	3,64E-07
2,2-dimethylpentane	C7H16	7	18,073	0,31673
3-methylpentane	C6H14	6	18,202	0,4107
2,4-dimethylpentane	C7H16	7	17,978	0,83638
trans-2-hexene	C6H12	6	18,323	2,03E-07
2-methyl-2-pentene	C6H12	6	18,335	7,16E-10
2-methyl-2-butene	C5H10	5	18,371	7,27E-10
1-hexene	C6H12	6	18,431	0,0034319
2,2,4-trimethylpentane	C8H18	8	18,795	0,076803
2-ethyl-1-butene	C6H12	6	19,067	3,64E-07
2-methylhexane	C7H16	7	19,351	0,37625
2,2,3-trimethylbutane	C7H16	7	19,492	1,14E-08
3,3-dimethylpentane	C7H16	7	19,527	0,2331
2,2-dimethylhexane	C8H18	8	19,573	0,20387
cis-2-hexene	C6H12	6	19,622	2,37E-07
2,5-dimethylhexane	C8H18	8	19,914	0,83911
3-methylhexane	C7H16	7	19,831	0,1268
2,3-dimethylpentane	C7H16	7	19,888	0,40342
2,2,5-trimethylhexane	C9H20	9	20,058	0,16297
1-heptène	C7H14	7	20,307	0,12477
heptane	C7H16	7	20,344	0,10155
3-ethylpentane	C7H16	7	20,256	0,87881
2,2,4,4-tetramethylpentane	C9H20	9	20,526	0,050876
2-methylheptane	C8H18	8	20,95	1,5389
3,3-dimethylhexane	C8H18	8	20,694	0,25522
2,2,3-trimethylpentane	C8H18	8	20,663	0,060811
2,3-dimethylhexane	C8H18	8	21,29	1,3223
4-methylheptane	C8H18	8	20,966	0,22833
3-methylheptane	C8H18	8	21,298	0,16246
2-methyl-3-ethylpentane	C8H18	8	21,299	1,1078
2,3,3-trimethylpentane	C8H18	8	21,512	0,29532
3-ethylhexane	C8H18	8	21,193	1,8294

Nom	Formule	Nc	Y [dyne/cm]	AAD %
octane	C8H18	8	21,753	0,53787
3,4-dimethylhexane	C8H18	8	21,728	0,13918
1-octene	C8H16	8	21,814	0,03737
2-methyloctane	C9H20	9	22,297	1,5848
2,2,3,4-tetramethylpentane	C9H20	9	22,04	9,03E-08
4-methyloctane	C9H20	9	22,054	1,7117
nonane	C9H20	9	22,889	0,098139
1-nonene	C9H18	9	23,048	0,056248
2,2,3,3-tetramethylpentane	C9H20	9	23,3	0,17417
3,3-diethylpentane	C9H20	9	23,79	0,074897
decane	C10H22	10	23,853	0,11441
1-decene	C10H20	10	24,057	0,14778
undecane	C11H24	11	24,69	0,0756
1-undecene	C11H22	11	24,901	0,097102
dodecane	C12H26	12	25,426	0,072546
1-dodecene	C12H24	12	25,614	0,039652
1-tridecene	C13H26	13	26,228	0,091342
tetradecane	C14H30	14	26,596	0,11791
1-tetradecene	C14H28	14	26,77	0,029123
pentadecane	C15H32	15	27,087	0,15872
hexadecane	C16H34	16	27,532	0,031812
1-hexadecene	C16H32	16	27,69	0,0048583
heptadecane	C17H36	17	27,947	0,25444
1-octadecene	C18H36	18	28,39	0,0286
octadecane	C18H38	18	28,319	0,28935
nonadecane	C19H40	19	28,662	0,0050994
1-eicosene	C20H40	20	28,993	0,04569
	C24H50	24	29,741	0,12808
	C28H58	28	30,076	0,060016
AD %			0,266	

Présentation des résultats de simulation

Propriété : la tension superficielle Ts 20°C [dyne/cm]

Famille : ring group.

Tableau : Résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Nc	Y [dyne/cm]	AAD%
methylcyclopentane	C6H12	6	22,371	0,50684
cyclopentane	C5H10	5	22,566	0,65041
1,trans-4-dimethylcyclohexane	C8H16	8	23,439	2,7372
cis-1,3-dimethylcyclohexane	C8H16	8	24,171	1,356
1,trans-2-dimethylcyclohexane	C8H16	8	23,886	0,077952
1,1-dimethylcyclohexane	C8H16	8	23,893	2,68E-06
methylcyclohexane	C7H14	7	23,445	1,9375
1,cis-2-dimethylcyclopentane	C7H14	7	23,854	1,3314
1,cis-4-dimethylcyclohexane	C8H16	8	24,344	0,61122
1,trans-3-dimethylcyclohexane	C8H16	8	23,788	2,7115
n-propylcyclopentane	C8H16	8	24,977	1,5091
cyclohexane	C6H12	6	24,928	1,3926
1,cis-2-dimethylcyclohexane	C8H16	8	25,49	0,072638
cycloheptane	C7H14	7	25,733	0,15529
n-propylcyclohexane	C9H18	9	25,831	0,4892
n-butylcyclohexane	C10H20	10	26,218	0,070661
isopropylbenzene	C9H12	9	28,048	0,70149
1,4-dimethylbenzene	C8H10	8	28,58	0,28786
Toluène	C7H8	7	28,886	1,2166
1,3,5-trimethylbenzene	C9H12	9	28,754	0,63941
1-ethyl-4-methylbenzene	C9H12	9	29,139	1,2418
ethylbenzene	C8H10	8	28,878	0,079271
n-propylbenzene	C9H12	9	29,076	0,10922
1-ethyl-3-methylbenzene	C9H12	9	29,042	0,30806
1,3-dimethylbenzene	C8H10	8	28,746	1,4326
decylcyclohexane	C16H32	16	29,669	0,00026384
1,2,4-trimethylbenzene	C9H12	9	29,782	0,15104
1-ethyl-2-methylbenzene	C9H12	9	29,65	1,268
1,2,3-trimethylbenzene	C9H12	9	31,344	0,17476
1,2,4,5-tetramethylbenzene	C10H14	10	32,67	0,06238
			AD %	0,77607562

Présentation des résultats de simulation
Propriété: la viscosité $\mu_{100^\circ\text{F}}$ [cp].
Famille : non ring group.

Tableau : Résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Ncarbone	Y [cp]	AAD%
1-hexene	C6H12	6	0,223	2,03E-07
hexane	C6H14	6	0,26601	0,0040624
1-heptène	C7H14	7	0,30004	0,013929
heptane	C7H16	7	0,34783	0,047986
octane	C8H18	8	0,44548	0,10727
1-nonene	C9H18	9	0,50267	0,065537
nonane	C9H20	9	0,56756	0,076815
1-decene	C10H20	10	0,63649	0,07624
decane	C10H22	10	0,71793	0,009141
undecane	C11H24	11	0,89629	0,031815
1-dodecene	C12H24	12	0,98845	0,056085
dodecane	C12H26	12	1,109	0,0019755
1-tridecene	C13H26	13	1,2095	0,040128
tridecane	C13H28	13	1,3548	0,013515
tetradecane	C14H30	14	1,6451	0,0081001
1-pentadecene	C15H30	15	1,7528	0,014149
pentadecane	C15H32	15	1,97	0,0017038
1-hexadecene	C16H32	16	2,0941	0,0064604
hexadecane	C16H34	16	2,339	8,14E-11
1-heptadecene	C17H34	17	2,76	0,00025504
1-octadecene	C18H36	18	2,913	0,00074719
octadecane	C18H38	18	3,035	0,00055457
1-nonadecene	C19H38	19	3,399	0,00017417
nonadecane	C19H40	19	3,437	0,00044884
1-eicosene	C20H40	20	3,935	5,45E-10
eicosane	C20H42	20	3,856	0,00014612
	C24H50	24	6,124	2,89E-11
	C28H58	28	9,651	1,40E-11
			AD %	0,0206

Présentation des résultats de simulation

Propriété : la viscosité $\mu_{100^\circ\text{F}}$.

Famille : ring group.

Tableau : Résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Nc	Y [cp]	AAD%
Toluène	C7H8	7	0,478	2,14E-06
benzène	C6H6	6	0,509	2,93E-05
ethylbenzene	C8H10	8	0,54989	0,020324
methylcyclohexane	C7H14	7	0,57916	0,02809
ethylcyclohexane	C8H16	8	0,65929	1,0185
cyclohexane	C6H12	6	0,728	0,00010394
n-propylcyclohexane	C9H18	9	0.79226	1,6735
n-butylbenzene	C10H14	10	0.80466	0,081838
n-butylcyclohexane	C10H20	10	0,97797	0,41215
n-pentylbenzene	C11H16	11	1,0057	0,026583
n-pentylcyclohexane	C11H22	11	1,2255	0,36705
heptylbenzene	C13H20	13	1,5013	0,11036
n-hexylcyclohexane	C12H24	12	1,5381	0,18622
octylbenzene	C14H22	14	1,8078	0,011562
n-heptylcyclohexane	C13H26	13	1,9035	0,28777
n-nonylbenzene	C15H24	15	2,1637	0,12308
octylcyclohexane	C14H28	14	2,3224	0,060787
n-nonylcyclohexane	C15H30	15	2,7931	0,069675
benzene, undecyl-	C17H28	17	3,0208	0,0080652
decylcyclohexane	C16H32	16	3,3337	0,0083715
dodecylbenzene	C18H30	18	3,5334	0,017666
undecylcyclohexane	C17H34	17	3,931	0,00060367
tridecylbenzene	C19H32	19	4,1054	0,062338
tetradecylbenzene	C20H34	20	4,7429	0,083185
tridecylcyclohexane	C19H38	19	5,3352	0,0044803
benzene, pentadecyl-	C21H36	21	5,453	0,036587
tetradecylcyclohexane	C20H40	20	6,1536	0,022975
benzene, hexadecyl-	C22H38	22	6,2564	0,0063966
pentadecylcyclohexane	C21H42	21	7,053	0,027831
hexadecylcyclohexane	C22H44	22	8,0393	0,0092285
			MAD %	0,159

Présentation des résultats de simulation**Propriété : la viscosité $\mu_{210^{\circ}\text{F}}$ [cp].****Famille : non ring group****Tableau : Résultats de calculs sur la base d'entraînement.**

Nom	Formule	Nc	Y [cp]	AAD%
1-hexene	C6H12	6	0,15999	0,0050019
hexane	C6H14	6	0,16201	0,0092384
1-heptène	C7H14	7	0,19002	0,010614
heptane	C7H16	7	0,20996	0,017174
octane	C8H18	8	0,25699	0,0031515
1-nonene	C9H18	9	0,28396	0,013546
nonane	C9H20	9	0,31014	0,04372
1-decene	C10H20	10	0,34004	0,010302
decane	C10H22	10	0,37081	0,050824
undecane	C11H24	11	0,43914	0,03198
1-dodecene	C12H24	12	0,47198	0,0044
dodecane	C12H26	12	0,51552	0,093378
1-tridecene	C13H26	13	0,55402	0,0031426
tridecane	C13H28	13	0,60038	0,22948
tetradecane	C14H30	14	0,69347	0,22006
1-pentadecene	C15H30	15	0,73299	0,001503
pentadecane	C15H32	15	0,79414	0,017262
1-hexadecene	C16H32	16	0,83501	6,60E-04
hexadecane	C16H34	16	0,9018	0,088582
1-heptadecene	C17H34	17	1,016	0,00045504
1-octadecene	C18H36	18	1,074	0,00080252
octadecane	C18H38	18	1,1372	0,066334
1-nonadecene	C19H38	19	1,21	0,0010238
nonadecane	C19H40	19	1,2665	0,038952
1-eicosene	C20H40	20	1,339	0,00034539
eicosane	C20H42	20	1,4069	7,05E-03
	C24H50	24	2,151	1,20E-05
	C28H58	28	3,17	4,61E-06
			AD %	0,03460723

Présentation des résultats de simulation
 Propriété étudiée : L'entropie S_f° [kJ/K.mol]
 Famille : Ring group.

Tableau : résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
3-methyl-1-butene	C5H10	5	0,33409	0,027893
2-methyl-2-butene	C5H10	5	0,3387	7,89E-07
2-methyl-1-butene	C5H10	5	0,33985	0,072348
trans-2-pentene	C5H10	5	0,34372	0,15014
2-methylbutane	C5H12	5	0,34335	0,11496
1-pentene	C5H10	5	0,34767	0,1647
cis-2-pentene	C5H10	5	0,34367	1,0845
pentane	C5H12	5	0,34949	0,021292
2,2-dimethylbutane	C6H14	6	0,3594	0,27861
trans-4-methyl-2-pentene	C6H12	6	0,37024	1,469
2,3-dimethyl-1-butene	C6H12	6	0,36566	0,0096216
2,3-dimethylbutane	C6H14	6	0,36477	0,31915
4-methyl-1-pentene	C6H12	6	0,37206	1,1442
4-methyl-cis-2-pentene	C6H12	6	0,36982	0,9687
trans-3-hexene	C6H12	6	0,38153	1,7381
2-ethyl-1-butene	C6H12	6	0,38037	0,96446
3-methyl-1-pentene	C6H12	6	0,3722	1,477
2-methyl-2-pentene	C6H12	6	0,37918	0,18063
cis-3-methyl-2-pentene	C6H12	6	0,37931	0,2144
trans-2-hexene	C6H12	6	0,38133	0,16509
2-methylpentane	C6H14	6	0,3812	0,057427
trans-3-methyl-2-pentene	C6H12	6	0,38001	0,49756
2-methyl-1-pentene	C6H12	6	0,37881	0,92013
3-methylpentane	C6H14	6	0,38281	0,04846
2,2,3-trimethylbutane	C7H16	7	0,38419	0,20597
1-hexene	C6H12	6	0,38873	0,61173
cis-2-hexene	C6H12	6	0,38107	1,4523
hexane	C6H14	6	0,39013	0,32854
2,2,3,3-tetramethylbutane	C8H18	8	0,39143	0,49629
2,4-dimethylpentane	C7H16	7	0,40195	1,2272
3,3-dimethylpentane	C7H16	7	0,39584	0,62189
3-ethylpentane	C7H16	7	0,41674	1,2324
2,3-dimethylpentane	C7H16	7	0,40757	1,7453
2-methylhexane	C7H16	7	0,41604	1,072
2,2-dimethylpropane	C5H12	5	0,42226	0,010267
2,2,4-trimethylpentane	C8H18	8	0,42383	0,17511
2,2,3-trimethylpentane	C8H18	8	0,42299	0,24063
1-heptène	C7H14	7	0,42681	0,28293

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
3-methylhexane	C7H16	7	0,41642	2,3257
heptane	C7H16	7	0,42913	0,24065
2,3,4-trimethylpentane	C8H18	8	0,4293	0,18019
2,2,4,4-tetramethylpentane	C9H20	9	0,43222	0,35299
2,2-dimethylhexane	C8H18	8	0,43576	0,67825
2,2,3,3-tetramethylpentane	C9H20	9	0,42774	2,0979
2,3,3,4-tetramethylpentane	C9H20	9	0,44991	2,8701
3,3-dimethylhexane	C8H18	8	0,43504	0,76327
2,5-dimethylhexane	C8H18	8	0,44701	1,0184
2-methyl-3-ethylpentane	C8H18	8	0,45125	1,6326
2,2,3,4-tetramethylpentane	C9H20	9	0,4497	0,35552
3,4-dimethylhexane	C8H18	8	0,45218	0,10546
2,3-dimethylhexane	C8H18	8	0,45123	0,18928
3-ethyl-2,3-dimethylpentane	C9H20	9	0,46146	1,4206
pentane, 2,2,3,4,4-pentamethyl-	C10H22	10	0,45752	0,54972
4-methylheptane	C8H18	8	0,45734	0,038628
3-ethylhexane	C8H18	8	0,45734	0,1394
2-methylheptane	C8H18	8	0,45734	0,51545
pentane, 2,2,3,3,4-pentamethyl-	C10H22	10	0,4558	0,87655
2,2-dimethyl-3-ethylpentane	C9H20	9	0,46298	0,40635
2,2,3-trimethylhexane	C9H20	9	0,46299	0,30125
2,2,5-trimethylhexane	C9H20	9	0,4629	0,23852
1-octene	C8H16	8	0,46469	0,031487
3-methylheptane	C8H18	8	0,45734	1,8072
4,4-dimethylheptane	C9H20	9	0,47439	1,5793
octane	C8H18	8	0,46748	0,027077
2,2,4-trimethylhexane	C9H20	9	0,46298	1,0186
3,3,4-trimethylhexane	C9H20	9	0,46029	1,6092
3-methyl-3-ethylhexane	C9H20	9	0,4698	0,36187
2,4,4-trimethylhexane	C9H20	9	0,46307	1,1727
hexane, 2,2,3,3-tetramethyl-	C10H22	10	0,4678	0,66182
3-ethyl-2,4-dimethylpentane	C9H20	9	0,47201	0,17257
2,2-dimethylheptane	C9H20	9	0,47503	0,65866
pentane, 3-ethyl-2,2,3-trimethyl-	C10H22	10	0,46493	1,5428
hexane, 3,3,4,4-tetramethyl-	C10H22	10	0,46476	1,6219
2,3,5-trimethylhexane	C9H20	9	0,4665	1,7374
2,3,4-trimethylhexane	C9H20	9	0,47404	0,70961

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
pentane, 3-ethyl-2,3,4-trimethyl-	C10H22	10	0,48943	2,2948
3,3-dimethylheptane	C9H20	9	0,47412	0,94531
4-ethyl-2-methylhexane	C9H20	9	0,4906	2,2624
hexane, 2,2,4,4-tetramethyl-	C10H22	10	0,46961	2,554
3,3-diethylhexane	C10H22	10	0,50188	3,9014
pentane, 2,4-dimethyl-3-(1-methylethyl)-	C10H22	10	0,48676	0,8341
hexane, 2,3,3,4-tetramethyl-	C10H22	10	0,48998	1,4051
hexane, 2,2,3,5-tetramethyl-	C10H22	10	0,48949	1,0401
2,4-dimethylheptane	C9H20	9	0,49016	1,1449
pentane, 3,3-diethyl-2-methyl-	C10H22	10	0,50041	2,9197
3-ethyl-4-methylhexane	C9H20	9	0,49307	1,3325
3-ethyl-2-methylhexane	C9H20	9	0,49263	1,1835
3,5-dimethylheptane	C9H20	9	0,4916	0,79368
hexane, 2,3,3,5-tetramethyl-	C10H22	10	0,48966	0,39592
pentane, 3-ethyl-2,2,4-trimethyl-	C10H22	10	0,48986	0,3559
2,3-dimethylheptane	C9H20	9	0,49298	0,12405
hexane, 2,2,3,4-tetramethyl-	C10H22	10	0,49007	0,76024
2,5-dimethylheptane	C9H20	9	0,49175	0,43685
hexane, 2,2,4,5-tetramethyl-	C10H22	10	0,48953	0,97453
hexane, 2,3,4,4-tetramethyl-	C10H22	10	0,49011	0,91641
3,4-dimethylheptane	C9H20	9	0,49307	0,37108
hexane, 3-ethyl-2,3-dimethyl-	C10H22	10	0,50186	1,3874
4-ethylheptane	C9H20	9	0,49748	0,47919
3-ethylheptane	C9H20	9	0,49726	0,04905
hexane, 4-ethyl-2,4-dimethyl-	C10H22	10	0,50236	0,92859
hexane, 4-ethyl-2,2-dimethyl-	C10H22	10	0,50312	0,95886
2-methyloctane	C9H20	9	0,49724	0,33417
2,2,6-trimethylheptane	C10H22	10	0,50323	0,74192
2,4,6-trimethylheptane	C10H22	10	0,50074	0,051377
2,2,3-trimethylheptane	C10H22	10	0,50287	0,35229
2,3,3-trimethylheptane	C10H22	10	0,50248	0,21572
3,4,4-trimethylheptane	C10H22	10	0,50236	0,092545
heptane, 4-ethyl-4-methyl-	C10H22	10	0,51179	1,8352
4-methyloctane	C9H20	9	0,49735	1,0964
hexane, 3-ethyl-2,2-dimethyl-	C10H22	10	0,50305	0,16846

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
hexane, 4-ethyl-3,3-dimethyl-	C10H22	10	0,50203	0,51252
3-methyloctane	C9H20	9	0,4971	1,5492
2,2,4-trimethylheptane	C10H22	10	0,50321	0,31619
1-nonene	C9H18	9	0,50304	0,37046
3,3,4-trimethylheptane	C10H22	10	0,50222	0,63314
nonane	C9H20	9	0,5061	0,086779
hexane, 4-ethyl-2,3-dimethyl-	C10H22	10	0,51599	1,8009
2,2,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,50327	0,70058
3-ethyl-3-methylheptane	C10H22	10	0,50271	1,1321
2,5,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,50325	1,0835
hexane, 3-ethyl-2,5-dimethyl-	C10H22	10	0,50915	0,029733
hexane, 3,4-diethyl-	C10H22	10	0,52467	2,8348
octane, 2,2-dimethyl-	C10H22	10	0,51436	0,61342
octane, 4,4-dimethyl-	C10H22	10	0,51421	0,23492
3,3,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,50308	2,0719
2,3,4-trimethylheptane	C10H22	10	0,51509	0,11461
3,4,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,5171	0,46417
2,4,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,51184	1,0676
octane, 3,3-dimethyl-	C10H22	10	0,51019	1,4724
4-isopropylheptane	C10H22	10	0,53336	2,8415
2,3,5-trimethylheptane	C10H22	10	0,51575	0,78449
2,3,6-trimethylheptane	C10H22	10	0,5113	1,6818
octane, 2,7-dimethyl-	C10H22	10	0,53366	2,4091
heptane, 4-ethyl-2-methyl-	C10H22	10	0,53225	1,9079
heptane, 4-propyl-	C10H22	10	0,53794	2,7219
heptane, 3-ethyl-4-methyl-	C10H22	10	0,52507	0,22354
2,4-dimethyloctane	C10H22	10	0,53211	1,5067
heptane, 3-ethyl-5-methyl-	C10H22	10	0,53311	1,4834
heptane, 5-ethyl-2-methyl-	C10H22	10	0,5336	1,4806
heptane, 3-ethyl-2-methyl-	C10H22	10	0,5333	1,3121
octane, 4,5-dimethyl-	C10H22	10	0,52841	0,34276
heptane, 4-ethyl-3-methyl-	C10H22	10	0,52827	0,23212
octane, 3,5-dimethyl-	C10H22	10	0,53351	0,62125
octane, 2,5-dimethyl-	C10H22	10	0,53322	0,39711
octane, 2,3-dimethyl-	C10H22	10	0,52469	1,3054
octane, 3,6-dimethyl-	C10H22	10	0,53363	0,080666
octane, 3,4-dimethyl-	C10H22	10	0,52475	1,9918
5-methylnonane	C10H22	10	0,53719	0,11004
octane, 3-ethyl-	C10H22	10	0,53693	0,042152
2-methylnonane	C10H22	10	0,53681	0,24512

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
octane, 4-ethyl-	C10H22	10	0,53742	0,57223
nonane, 4-methyl-	C10H22	10	0,53708	0,9158
1-decene	C10H20	10	0,54193	0,25206
3-methylnonane	C10H22	10	0,53663	1,3729
decane	C10H22	10	0,54517	1,7651
tridecane	C13H28	13	0,66414	0,090441
tetradecane	C14H30	14	0,70393	0,16214
pentadecane	C15H32	15	0,74355	0,20288
hexadecane	C16H34	16	0,78286	0,20078
heptadecane	C17H36	17	0,82169	0,14016
octadecane	C18H38	18	0,85985	0,0066944
nonadecane	C19H40	19	0,89701	0,22652
eicosane	C20H42	20	0,93844	0,016065
			AD %	0,85

Présentation des résultats de simulation

Propriété : l'entropie S^{298} [kJ/K.mol]

Famille : ring group.

Tableau : résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
benzène	C6H6	6	0,2693	0,0011565
cyclopentane	C5H10	5	0,29299	0,0021801
cyclohexane	C6H12	6	0,29754	0,012125
Toluène	C7H8	7	0,32109	0,032451
methylcyclopentane	C6H12	6	0,33952	0,11223
cycloheptane	C7H14	7	0,34222	0,031563
methylcyclohexane	C7H14	7	0,34735	1,1361
1,4-dimethylbenzene	C8H10	8	0,35297	0,17963
1,2-dimethylbenzene	C8H10	8	0,35325	0,19622
1,1-dimethylcyclopentane	C7H14	7	0,3596	5,97E-05
ethylbenzene	C8H10	8	0,36019	0,12196
1,1-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,365	4,58E-07
1,cis-2-dimethylcyclopentane	C7H14	7	0,36671	0,13956
1,trans-4-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,36477	0,41879
cyclooctane	C8H16	8	0,36679	0,017078
1,trans-2-dimethylcyclopentane	C7H14	7	0,36779	0,2702
1,cis-3-dimethylcyclopentane	C7H14	7	0,36725	0,12155
1,trans-3-dimethylcyclopentane	C7H14	7	0,36552	0,54229
1,cis-4-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,3764	1,4601
1,trans-2-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,37543	1,0991
1,cis-2-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,37075	0,98554
1,trans-3-dimethylcyclohexane	C8H16	8	0,37126	1,1953
Ethylcyclopentane	C7H14	7	0,37621	0,52861
ethylcyclohexane	C8H16	8	0,39197	2,2881
1,2,3-trimethylbenzene	C9H12	9	0,38483	0,025344
1,3,5-trimethylbenzene	C9H12	9	0,38548	0,061999
isopropylbenzene	C9H12	9	0,38617	0,015181
1,2,4-trimethylbenzene	C9H12	9	0,3957	0,022879
tert-butylbenzene	C10H14	10	0,396	0,00013886
n-propylbenzene	C9H12	9	0,40032	0,01734
1-ethyl-3-methylbenzene	C9H12	9	0,40218	0,43651
1,2,3,4-tetramethylbenzene	C10H14	10	0,41881	0,52814
1,2,4,5-tetramethylbenzene	C10H14	10	0,41831	0,069895
p-isopropyltoluene	C10H14	10	0,42044	0,062578

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
3-ethyl-o-xylene	C10H14	10	0,41688	1,0117
1-ethyl-2,6-dimethylbenzene	C10H14	10	0,42947	1,9488
1,2,3,5-tetramethylbenzene	C10H14	10	0,42074	0,44265
5-ethyl-m-xylene	C10H14	10	0,4272	0,23417
3-isopropyltoluene	C10H14	10	0,42742	0,075274
sec-butylbenzene	C10H14	10	0,42619	0,35429
p-propyltoluene	C10H14	10	0,43477	0,98139
2-ethyl-p-xylene	C10H14	10	0,43163	0,26216
o-propyltoluene	C10H14	10	0,42935	0,66376
p-diethylbenzene	C10H14	10	0,43373	0,12153
isobutylbenzene	C10H14	10	0,43521	0,32408
o-diethylbenzene	C10H14	10	0,43465	0,056387
4-ethyl-o-xylene	C10H14	10	0,43031	1,4852
m-propyltoluene	C10H14	10	0,43723	0,074662
m-diethylbenzene	C10H14	10	0,43761	0,45419
n-butylbenzene	C10H14	10	0,44266	0,62523
n-butylcyclopentane	C9H18	9	0,4414	2,8329
n-butylcyclohexane	C10H20	10	0,46758	1,6431
n-pentylbenzene	C11H16	11	0,474	1,0926
pentylcyclopentane	C10H20	10	0,48341	1,9837
n-pentylcyclohexane	C11H22	11	0,49774	0,33278
hexylbenzene	C12H18	12	0,51987	0,27681
n-hexylcyclohexane	C12H24	12	0,54323	0,81495
heptylbenzene	C13H20	13	0,55878	0,19861
n-heptylcyclopentane	C12H24	12	0,56629	0,83159
n-heptylcyclohexane	C13H26	13	0,5778	0,086221
octylbenzene	C14H22	14	0,60219	0,87488
octylcyclopentane	C13H26	13	0,61012	0,0031352
octylcyclohexane	C14H28	14	0,61535	0,3812
n-nonylbenzene	C15H24	15	0,6304	0,91303
n-nonylcyclopentane	C14H28	14	0,6523	0,49131
n-nonylcyclohexane	C15H30	15	0,65068	1,0027
n-decylcyclopentane	C15H30	15	0,69334	0,74204
decylcyclohexane	C16H32	16	0,69608	0,089577
benzene, undecyl-	C17H28	17	0,71246	0,30831
undecylcyclopentane	C16H32	16	0,7309	0,50644
undecylcyclohexane	C17H34	17	0,73392	0,29648
dodecylbenzene	C18H30	18	0,75541	0,19973
dodecylcyclohexane	C18H36	18	0,77074	1,7053
dodecylcyclopentane	C17H34	17	0,76828	0,2711
tridecylbenzene	C19H32	19	0,7966	0,43298
cyclopentane, tridecyl-	C18H36	18	0,803	0,2867
tridecylcyclohexane	C19H38	19	0,8069	1,0039
tetradecylbenzene	C20H34	20	0,83019	0,2651

Nom	Formule	Nc	Y [kJ/K.mol]	AAD %
cyclopentane, tetradecyl-	C19H38	19	0,83761	0,79867
tetradecylcyclohexane	C20H40	20	0,86125	0,78392
cyclopentane, pentadecyl-	C20H40	20	0,88028	0,34334
pentadecylcyclohexane	C21H42	21	0,89458	0,076299
hexadecylcyclopentane	C21H42	21	0,91409	0,90911
hexadecylcyclohexane	C22H44	22	0,94036	0,74029
			AD %	0,53209451

Présentation des résultats de simulation
Propriété : la tension superficielle T_s 20°C [dyne/cm].
Famille : les mélanges binaires.

Tableau : résultats de calculs sur la base d'entraînement.

Mélange N°	d^{20}_{exp}	Y [dyne/cm]	AAD %
M5	0,6804	21,177	2,395
M3	0,6656	21,052	1,6352
M1	0,6721	21,257	0,35336
M7	0,6727	21,073	1,5737
M6	0,6958	21,803	0,78965
M2	0,679	21,402	1,7632
M20	0,7238	23,143	5,1874
M26	0,7143	23,121	5,0428
M13	0,7011	22,047	2,3545
M21	0,7412	23,161	0,83241
M9	0,7547	23,516	0,29247
M28	0,7208	22,995	2,7818
M24	0,7678	23,895	0,34385
M31	0,8204	24,735	1,4354
M11	0,7652	24,242	0,62905
M37	0,7503	24,421	0,040736
M8	0,7181	23,278	5,5591
M29	0,7795	25,295	1,991
M34	0,765	25,642	2,0584
M4	0,7593	25,67	0,24365
M33	0,7387	25,726	0,20936
M25	0,8169	26,095	0,021667
M35	0,7669	25,695	2,5172
M18	0,7942	26,374	0,054215
M36	0,7957	26,087	1,9025
M12	0,8336	27,312	0,016843
M19	0,8269	26,959	1,5854
M39	0,8134	27,33	0,82006
M40	0,842	29,653	0,84053
M41	0,816	30,18	0,044263
M38	0,8083	30,505	0,5901
M17	0,8442	30,182	0,57171
M15	0,8684	30,599	0,20409
M30	0,8714	30,922	0,062577
		AD %	1,37479974

Présentation des résultats de simulation

Propriété étudiée : Masse molaire.

Famille : les fractions pétrolières légères Tbv < 200°C.

Tableau : résultats de calculs sur la base d'entraînement.

	Fraction (°C)	teb °K	Y [gr/mol]	AAD%
G1	16,6-65	313,8	74,166	0,35853
A1	17,5-65	314,25	76,862	0,33614
AL1	C5-80	325,67	79,423	0,24289
GL1	C5-80	327,11	79,675	0,056743
G2	65-70	340,5	79,709	0,22734
G3	70-75	345,5	82,51	0,64234
G4	75-80	350,5	83,721	0,73985
G6	85-90	360,5	85,065	0,14644
G5	80-85	355,5	85,948	0,1493
A3	70-75	345,5	86,096	0,13194
A4	75-80	350,5	88,695	0,47927
A5	80-85	355,5	90,514	0,57007
GL3	C5-165	364,33	93,585	0,79606
A6	85-90	360,5	93,242	0,41652
G7	90-95	365,5	95,446	0,20359
AL3	C5-165	368,47	96,795	0,4698
G8	95-100	370,5	98,733	0,37798
A8	95-100	370,5	99,481	0,32117
G9	100-105	375,5	100,54	0,020755
A9	100-105	375,5	101,75	0,24752
G10	105-110	380,5	103,58	0,26498
GL2	80-160	378,52	103,56	0,059825
G11	110-115	385,5	104,05	0,27766
G13	120-125	395,5	106,45	0,48857
G12	115-120	390,5	106,23	0,06419
A11	110-115	385,5	107,31	0,64767
AL2	80-165	392,57	109,64	1,0733
G3	125-130	400,5	109,11	0,24828
A4	115-120	390,5	109,56	0,15611
G5	130-135	405,5	110,65	0,12443
A6	120-125	395,5	110,28	1,2701
A8	130-135	405,5	116,15	0,22215
G9	135-140	410,5	118,15	0,38746
A10	135-140	410,5	118,69	0,1985
G11	140-145	415,5	118,76	0,36867
A12	140-145	415,5	121,67	0,85574
G13	145-150	420,5	121,28	0,11011
A14	145-150	420,5	123,75	0,10941
G15	150-155	425,5	125,39	1,0665
G17	155-160	430,5	126,86	0,22798
A18	155-160	430,5	127,63	0,46681
G19	160-165	435,5	128,81	0,60772
A20	160-165	435,5	129,3	0,22362
			AD %	0,40085237

Références Bibliographiques

- [1] C.E.CHITOUR, « Raffinage : les propriétés physiques des hydrocarbures et des fractions pétrolières », Edition OPU, tome 1, Alger 1999.
- [2] C.E.CHITOUR, « Raffinage : thermodynamique des fluides réels », Edition OPU, tome 2, Alger 1998.
- [3] C.E.CHITOUR, « Raffinage : les propriétés thermiques », Edition OPU, tome 3, Alger 1999.
- [4] C.E.CHITOUR, « Corrélation sur le pétrole brut et les fractions pétrolières », Edition OPU, tome 2, Alger 1983.
- [5] J.VIDAL, « Thermodynamique : méthodes appliquées au raffinage et au génie chimique », Publication de l'institut français du pétrole IFP, Edition Technip, tome 1, 1974.
- [6] P.WHUITIER, « Le pétrole : raffinage et génie chimique », tome 1, Edition Technip 1972.
- [7] G.DREFUS, J.M.MARTINEZ, M.SAMUELEIDES et collaborateurs, « Réseaux de neurones, méthodologie et applications », 2^{ème} édition, Edition Eyrolles, 2004.
- [8] BEGHADADI Hadj Ali, SENOUCI Mohamed, « Réseaux de neurones, théorie et pratique », Office des publications universitaires OPU, 2005.
- [9] Manuel de travaux pratiques, « raffinage et thermodynamique du pétrole, essais normalisés », département génie chimique, Ecole Nationale Polytechnique ENP, 2006.
- [10] S.FEKRACHE, « Détermination des propriétés des hydrocarbures par la méthode de contribution de groupes couplée aux réseaux de neurones artificiels », Thèse de Magister, sous la direction de Pr.C.E.Chitour, Ecole Nationale polytechnique ENP, 2006.
- [11] N.SKANDER, « Contribution à la détermination des propriétés physiques des mélanges d'hydrocarbures et des fractions pétrolières par des méthodes de contribution de groupes », Thèse de Magister, sous la direction de Pr.C.E.Chitour, Ecole Nationale Polytechnique ENP, 1997.
- [12] D.E.LAMOURI, « Contribution à la détermination des propriétés physiques des fractions pétrolières par réseaux de neurones artificiels », Projet de fin d'études, proposé et dirigé par Dr.F.Souahi et Pr.C.E.Chitour, Ecole Nationale Polytechnique ENP, 2003.
- [13] S.GORI, « Caractérisation des fractions pétrolières par différentes approches utilisant l'intelligence artificielle », Projet de fin d'études, proposé et dirigé par Dr.F.Souahi, Ecole Nationale Polytechnique ENP, 2004.
- [14] Articles « les réseaux de neurones », « le neurone », Encyclopédie libre Wikipédia, site web : www.wikipedia.com
- [15] M. MOKHTARI, « MATLAB 5.2 & 5.3 et SIMULINK 2 & 3 pour étudiants et ingénieurs », Edition Springer, 2000.