

M0012/04B

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Ecole Nationale Polytechnique

Département de Génie Chimique

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

MEMOIRE DE MAGISTER

Présenté par : Melle AZIZA HACHEMAOUI

Application des réseaux de neurones Artificiels dans la prédiction
des propriétés des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières

Membres de jury :

Mme F. SOUABI

M^r C. E. CHITOUR

M^r H. BENYOUSEF

Mme F. MEFTI

M^r HILOUL

M^{elle} N. SKANDER

Maître de conférence

Professeur

Maître de conférence

Chargé de cours

Maître de conférence

Invité

Rapporteur

Rapporteur

Président

Examineur

Examineur

Ingénieur Analyses (CRD)

Année 2003-2004

العنوان : تطبيق الشبكات العصبية الاصطناعية في تعيين الخصائص الفيزيائية للمواد النفطية الخالصة والاجزاء البترولية.

ملخص :
تعتبر معرفة الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد النفطية ضرورية وتتطلب الاستعانة بمختلف تقنيات تعيين الخصائص. وبما انه وفي اغلب الأحيان تستعمل تقنيات طويلة وتتطلب أجهزة باهضة, فقد عوضت بمناهج حسابية. وفي هذا الموضوع, نقتراح إدخال تقنية حسابية جديدة من اجل تعيين خصائص المواد النفطية, مبنية على أساس الشبكات العصبية. فقد كانت هذه الأخيرة تشكل منذ وجودها محاولة لتجسيد خصائص العقل البشري بغرض الاستفادة منه.

الكلمات المفتاحية : الشبكات العصبية, تعيين الخصائص, المواد النفطية الخالصة, الأجزاء البترولية.

Titre: Application des Réseaux de Neurones Artificiels dans la prédiction des propriétés physiques des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières

Résumé :

La connaissance des propriétés physico-chimiques du pétrole et de ces dérivés nécessaire et fait appel à différentes techniques de caractérisation. Cependant, dans la majeure partie des cas, les méthodes utilisées sont longues et nécessitent un matériel coûteux. C'est pourquoi les techniques permettant la détermination de ces propriétés sont très souvent remplacées par des approches empiriques.

Dans un tel contexte, nous proposons une nouvelle approche empirique pour la prédiction des propriétés des hydrocarbures, basée sur les Réseaux de Neurones Artificiels. Ces derniers constituent, lors de leur création, une tentative visant à mimer le cerveau biologique dans son fondement afin de bénéficier de ses caractéristiques très intéressantes.

Mots clés : Réseaux de neurones artificiels, prédiction des propriétés, hydrocarbures pure, fractions pétrolières.

Title: Application of Artificial Neural Networks in prediction of physicals properties of pure hydrocarbons and petroleum fractions

Abstract:

The knowledge of the physical and chemical properties of oil and its derivatives by some set of experimental techniques becomes necessary. However, in most cases, the methods used are lengthy and rely on costly hardware. This is why the classical techniques allowing the determination of these properties are replaced by empirical approaches.

The aim of our study is to propose a new empirical approach based Artificial Neural Networks for the prediction of hydrocarbons properties. Neural networks, constituted, at first, a tentative aiming to mimic the biologic brain in order to benefit of its very interesting features.

Keywords: Artificial neural networks, properties predictions, pure hydrocarbons, petroleum fractions.



Remerciements

Je tiens à remercier Madame SOUABI et Monsieur le Professeur CHITOUR pour m'avoir dirigée, ainsi que pour leurs nombreuses discussions et conseils très utiles qu'ils n'ont cessé de me prodiguer tout au long de ce travail.

Je tiens à témoigner ma profonde gratitude à Monsieur BENYOUSSEF pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Mes remerciements s'adressent également à Messieurs ILLOUL et AHMED ZAID, et à Mesdames MEFTI et SKANDER d'avoir examiné ce travail.

Enfin, je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Terme	Signification
bi	Biais du neurone i
Cp	Chaleur spécifique standard à pression constante.
d ₂₀	Densité à 20°C.
dc	Densité critique
ECN	Nombre de carbone équivalent.
est	Valeur estimée par réseaux de neurones
FP	Fraction pétrolière.
Gf	Energie libre standard de formation
Hv	Chaleur latente de vaporisation.
Hf	Enthalpie standard de formation.
lit	Valeur rapportée de littérature
M	Masse molaire.
N	Nombre d'atome de carbone.
n ₂₀	Indice de réfraction à 20°C.
Kuop	Facteur de caractérisation.
P	Pression
Pa	Point d'aniline.
Pc	Pression critique.
R	Constante des gaz parfait.
RNA	Réseaux de neurones artificiels
S	Entropie standard
Spgr	Spécific-gravity à 60°F/60°C.
T	Température
T _{mav}	Température moyenne d'ébullition
Teb	Température d'ébullition.
Tr	Température réduite
Tebr	Température d'ébullition réduite
Tc	Température critique.
Ts	Tension superficielle.
V	Volume
Vc	Volume critique.
Vm	Volume molaire.
ω	Facteur acentrique
Wij	Poids des connexions entre le neurone i et j.
X _A	Fraction massique des aromatiques dans la fraction pétrolière.
X _N	Fraction massique des naphènes dans la fraction pétrolière.
X _P	Fraction des paraffines dans la fraction pétrolières.
Zc	Facteur de compressibilité critique.
μ	Viscosité cinématique.
Δ _T	Contribution des différents groupes constituant la molécule pour Tc.
Δ _p	Contribution des différents groupes constituant la molécule pour Pc.
Δ _v	Contribution des différents groupes constituant la molécule pour Vc
Δ _{Teb}	Contribution des différents groupes constituant la molécule pour Teb.
N _A	Nombre d'atome dans la molécule.

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

SOMMAIRE

	Page
Introduction générale	1
Chapitre I Caractérisation expérimentale des hydrocarbures	3
I.1 Composition du pétrole brut et les fractions pétrolières	3
I.2 Essais préliminaires sur le pétrole brut	4
I.3 Distillation analytique du pétrole brut	5
I.4 Analyse élémentaire des coupes pétrolières	6
Chapitre II Revue bibliographique des méthodes de prédiction des propriétés des hydrocarbures	
II.1 Méthodes à fondement thermodynamique	7
II.1.1 Les équations d'états	7
II.1.2 Loi des états correspondants	9
II.2 Méthodes empiriques	11
II.2.1 Corrélations propriétés-structure : méthodes de contribution de groupes	11
II.2.2 Corrélations basées sur des grandeurs facilement accessibles par expérience	11
Chapitre III Introduction aux Réseaux de Neurones Artificiels	
III.1 Le neurone biologique	13
III.2 Le neurone formel	14
III.3. Les réseaux de neurones	15
III.4 Quelques célèbres réseaux	18
III.5 Algorithme de retro propagation	19
III.6 Introduction à la méthodologie de conception d'un modèle de réseau de neurone	21
III.7 Exemples de domaine d'applications des réseaux neurones	23
Chapitre IV Application du modèle de Perceptron multicouches dans la prédiction des propriétés des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières	
IV.1 Prédiction des propriétés des hydrocarbures purs à partir de leur structure moléculaire	24
IV.2.1 Résultats et interprétation	25
IV.3 Prédiction des propriétés des fractions pétrolières	39
IV.3.1 Résultats et interprétation	39
Conclusion	63
Bibliographie	64
Annexe 1 : Propriétés des hydrocarbures purs	
Annexe 2 : Propriétés des fractions pétrolières	
Annexe 3 : Poids de connexion des réseaux retenus	

Le pétrole est une huile minérale, de couleur marron foncé ou noire et d'odeur caractéristique. C'est un mélange d'hydrocarbures, depuis les plus légers jusqu'aux plus lourds en C₄₀ et plus (huiles, vaselines, paraffines,...). Ces propriétés (densité, point d'ébullition, point d'éclair etc.) sont très variables de même que sa teneur en chaque composant pur.

L'origine du pétrole est vraisemblablement organique et marine. Une accumulation de minuscules organismes végétaux et animaux s'est produite au fond des océans, mêlée à des sédiments, boues et sables, provenant de l'écorce terrestre. Ce mélange se serait peu à peu transformé en hydrocarbures liquides ou gazeux, sous l'action combinée de la pression, de la température, de "catalyseurs" et de certaines bactéries anaérobies.

Les pétroles bruts se trouvent dans des gisements souterrains décelés par différentes techniques de prospection et sont récupérés par le forage de puits pour servir de matière première aux industries de raffinage et de la pétrochimie. Le raffinage a pour fonction de transformer des pétroles bruts d'origines diverses en un ensemble de produits pétroliers répondant à des spécifications précises, dans des proportions correspondant aussi bien que possible à la demande du marché.

Le pétrole est devenu une arme politique, comme l'ont démontré les deux chocs pétroliers des années 1970. L'offre et la demande de pétrole, son prix, les solutions de remplacement et les économies d'énergie sont des questions constamment débattues. Les taxes qui frappent la production du brut et la vente des produits pétroliers participent de façons importantes au budget des Etats. A titre d'exemple, la taxe intérieure sur les produits pétroliers est la troisième ressource fiscale de la France.

Si, pendant près de 5000 ans, la production et la consommation du pétrole étaient dérisoires, depuis la moitié du siècle dernier et dans la foulée des grandes inventions, l'utilisation du pétrole et de ses dérivés prit dès le départ un essor extraordinaire. Non seulement parce qu'il représente un potentiel d'énergie, mais de plus, les hydrocarbures qui le composent permettent en outre la fabrication de produits à forte valeur ajoutée, comme les lubrifiants, les matières plastiques, les détergents, les caoutchoucs synthétiques...

L'ingénieur en génie des procédés a souvent recours à l'utilisation des propriétés physico-chimiques du pétrole brut et des fractions pétrolières pour leurs mises en œuvre dans l'industrie chimique et en particulier lors du dimensionnement des équipements des unités de fabrication ou encore dans la simulation des procédés ou de leur optimisation.

De plus, la recherche du rendement et de la performance maximale ne se conçoit plus sans la connaissance approfondie des propriétés des produits pétroliers que l'on veut utiliser.

L'expérience fournit la majorité de ces propriétés, mais dans la plupart des cas, elle présente un certain nombre de limitations du fait de sa complexité, du coût élevé et du temps de manipulation souvent important.

De nos jours, dans la perspective d'un éventuel tarissement des ressources et de la venue de la mondialisation, les investisseurs (pour cause de rentabilité à moindre coût) revoient à la baisse le financement de la recherche dans le domaine pétrolier ce qui a pour effet l'apparition de nouvelles méthodes dites prédictives qui permettent de gagner en temps et en argent.

Dans la présente étude, nous proposons une nouvelle méthode de prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières, basée sur les Réseaux de Neurons Artificiels (RNA). Ces derniers constituent, lors de leur création, une tentative visant à mimer le cerveau biologique dans son fondement afin de bénéficier de ses caractéristiques très intéressantes.

Notre travail consiste à :

- Acquérir une base de donnée sur les propriétés physiques des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières.
- Développer des réseaux de neurones pour la prédiction de quelques propriétés des hydrocarbures purs à partir de leur structure moléculaire.
- Développer des réseaux de neurones pour la prédiction de quelques propriétés des fractions pétrolières à partir d'autres propriétés telles que l'indice de réfraction, la densité et la masse moléculaire des fractions pétrolières.

Une présentation des résultats estimés par réseau de neurones ainsi que leur confrontation avec les données de la littérature est effectuée pour rendre compte de la fiabilité de cette nouvelle approche.

1.1 Composition du pétrole brut et des fractions pétrolières

Le pétrole brut et les fractions pétrolières qui en sont issues sont essentiellement composés de molécules résultant de la combinaison d'atomes de carbone tétravalents et d'atomes d'hydrogène monovalents, appelés hydrocarbures.

Les différents types d'hydrocarbures coexistants dans les pétroles bruts sont les suivants :

1.1.1 Les hydrocarbures saturés

- **Les alcanes :**

Les alcanes, ou hydrocarbures paraffiniques sont des corps gazeux, liquides ou solides. Les composés gazeux comportent dans leur chaîne 1 à 4 atomes de carbone, et entrent dans la composition des gaz associés et naturels. Les composés renfermant entre 5 et 15 atomes de carbone sont des liquides. A partir de l'hexadécane $C_{16}H_{34}$, les alcanes normaux sont des solides qui, à la température ordinaire, peuvent se trouver dans le pétrole brut et dans les fractions pétrolières à haut point d'ébullition, à l'état dissous ou cristallin. Parmi les alcanes du pétrole, on trouve les isomères normaux ou molécules à chaînes dentées et les isomères ramifiés (iso-paraffines).

- **Les cyclo - alcanes :**

Ce sont des hydrocarbures cycliques saturés de formule générale C_nH_{2n} , simples ou substitués par des chaînes d'alcane dont plusieurs portent des groupements méthyle. Le nombre de cycle dans la molécule permet de classer ces hydrocarbures en trois classes : les monocycles, les bicycles et les tricycles. Ils sont plus réactifs que les paraffines, ils donnent lieu à des réactions de substitution et d'addition sur le cycle dans certaines conditions. Les pétroles en contiennent entre 25 et 75% (massique) et sont présents dans toutes fractions à partir de C_5 .

1.1.2 Les hydrocarbures insaturés

Ils ont une formule générale C_nH_{2n} . Lorsqu'ils sont en chaîne ouverte, les oléfines, appelées aussi alcènes, ayant plus d'une double liaison, sont désignés par le terme de polyène. Ces hydrocarbures ne sont pas présents dans le pétrole brut et le gaz naturel. Ils sont formés dans les procédés de raffinage de certaines coupes pétrolières tels que le craquage des coupes moyennes ou lourdes.

La présence de cette double liaison les rend aptes à s'associer facilement à des halogènes pour donner des produits d'addition. Ces substances sont de très grande importance, car ce sont les produits intermédiaires de première génération et qui donnent le point de départ de la synthèse pétrochimique et de la chimie organique de base.

1.1.3 Les hydrocarbures aromatiques

Ce sont des composés contenant au moins un noyau benzénique dans la molécule. En règle générale, les hydrocarbures aromatiques sont moins abondants dans le pétrole que les alcanes et les cyclo-alcanes.

Cette classe d'hydrocarbures est représentée dans les pétroles par le benzène et ses homologues. Du fait des liaisons double, ces hydrocarbures réagissent facilement avec l'acide sulfurique, le chlore et les mélanges oxydants. Ils forment aussi bien des produits d'addition

que de substitution. Leurs teneurs varient considérablement suivant les pétroles ; la moyenne étant de 10 à 20 % (massique). Leur séparation des autres familles est souvent difficile du fait que leurs points d'ébullition sont très voisins.

1.1.4 Les hydrocarbures mixtes

Des cycles peuvent se substituer sur les chaînes paraffiniques ou inversement. Les propriétés de la molécule mixte seront fonction de l'importance relative des noyaux et des chaînes de la structure, ainsi, par exemple, le toluène ou le méthyle benzène est considéré comme un hydrocarbure aromatique car la chaîne méthyle substituée est courte, par contre si l'on substitue un noyau benzénique sur la chaîne droite à 26 atomes de carbone ou de phénylène hexacosane, la molécule résultante aura un caractère paraffinique. Ces composés se distribueront régulièrement entre les composés des paraffines et des naphthènes, ou paraffines et aromatiques.

1.1.5 Les composés hétéro-atomiques

Certains pétroles bruts, en particulier ceux du Proche-Orient, contiennent des composés hétéro-atomiques (soufre, oxygéné et azote). La teneur en ces éléments est fonction de l'âge et de l'origine du pétrole.

- **Les composés oxygénés :**

Les composés oxygénés constituent rarement plus 10 % de la masse totale des pétroles bruts. Ce sont des acides, phénols, cétones et esters, et rarement anhydres et dérivés furaniques.

- **Les composés sulfurés :**

Le pétrole de la plupart des réserves mondiales actuelles est sulfureux, ou très sulfureux. On peut rencontrer des mercaptans, des sulfures, des désulfures et sulfures de thiénole, thiophènes et des structures cycliques diverses.

- **Les composés azotés :**

Les composés azotés sont contenus dans les pétroles avec des quantités très faibles, si on les compare aux composés oxygénés ou sulfurés. On considère deux groupes de produits azotés totaux et les produits non basiques. Les composés basiques isolés sont la pyridine, la quinoléine et l'isoquinoline.

1.2 Essais préliminaires sur le pétrole brut

Les principales propriétés des pétroles bruts obtenues par différentes méthodes analytiques sont la densité, l'indice de réfraction, le point d'écoulement, la viscosité, la tension superficielle, le point d'aniline, la tension de vapeur, la teneur en soufre et la teneur en eau, sédiments et sels. Ces grandeurs, pour lesquelles il existe de méthodes d'essais normalisées, sont nécessaires pour interpréter les processus chimiques et pour apprécier l'efficacité des traitements lors du raffinage. Elles sont aussi déterminantes pour éviter, en amont, les incidents qui pourraient parfois se révéler très sérieux.

I.3 Distillation analytique du pétrole brut

La connaissance de la composition d'un pétrole brut est indispensable pour déterminer les conditions optimales de raffinage et les meilleures températures pour pratiquer les coupes (gaz liquéfiés, essences, kérosènes, gasoils,.....). Ainsi, une distillation de ces mélanges complexes donnera des mélanges d'hydrocarbures (de nature voisine et de même utilisation) séparés en produits légers et lourds et permettra leur classement, non pas par le poids mais par la volatilité.

Les courbes de distillation donnent les rendements en différentes coupes en fonction de l'intervalle de distillation choisi et permettent au raffineur de fixer les conditions opératoires de soutirage de l'unité de distillation en fonction des produits souhaités (essence légère, essence lourde, kérosène, gasoil...). Nous distinguons plusieurs opérations de distillations susceptibles d'apporter une contribution importante à la connaissance des pétroles :

- **Distillation ASTM (American Society for Testing Materials):**

Elle consiste en un appareil simple composé d'un ballon dans lequel on chauffe une prise d'échantillon de 100ml. Les vapeurs formées sont refroidies et condensées dans un tube baignant dans de la glace puis récupérées dans une éprouvette graduée. Les températures initiales, finales ainsi que celles correspondant à tous les 10% distillés sont notées. Cette méthode normalisée (ASTM D 86 et NF M 07-002) est moins sélective que les autres modes de distillation mais présente l'avantage d'être plus rapide et permet d'obtenir les caractéristiques distillatoires de chaque brut à traiter.

- **Distillation TPB (True Boiling Point):**

La distillation TBP correspond à une technique de laboratoire permettant de donner une image plus exacte de la composition d'un pétrole brut, par la mesure de la 'température d'ébullition' des constituants qui le composent. Cette méthode présente une haute sélectivité de séparation, puisqu'elle décompose le pétrole en une cinquantaine de coupes ayant un intervalle de distillation très étroit. Ceci va nous permettre de les considérer comme des hydrocarbures purs fictifs, dont le point d'ébullition sera égal à la moyenne arithmétique des températures initial (T_i) et finale (T_f) de distillation :

$$T_{mav} = \frac{(T_i + T_f)}{2}$$

Généralement, on opère soit en fixant l'intervalle de distillation à 5°C, soit en prenant des fractions de pourcentage en volume, selon la quantité initiale distillée, ceci dans le but de disposer d'une fraction de volume suffisante pour procéder aux essais normalisés.

- **Distillation simulée par chromatographie gazeuse :**

L'analyse des pétroles par CPG (chromatographie en phase gazeuse) est une méthode de séparation dans laquelle les hydrocarbures se partagent entre une phase stationnaire constituée par un solvant et une phase mobile gazeuse, désignée sous le nom de gaz vecteur. La séparation se fait soit le long d'une colonne analytique remplie de longueur de l'ordre de quelques mètres et de diamètre intérieur de 2,5 à 4mm, soit en utilisant une colonne capillaire de quelques dizaines de mètres et de 0.1 à 0.5mm de diamètre.

I.4 Analyses élémentaires des coupes pétrolières

Les différentes techniques de fractionnement mises en jeu dans la caractérisation des pétroles sont généralement suivies par des analyses pour définir la qualité de chaque fraction issue de la distillation. Ces analyses s'imposent en vue d'une valorisation complète des pétroles bruts.

En effet, le pétrole brut est utilisé pour élaborer des produits dont la préparation s'effectue avec des bases caractérisées à la fois par un intervalle de distillation et par des spécifications imposées par les exigences des différentes utilisations de ces produits (combustion, mise en œuvre et protection de l'environnement) et définies par le biais de mesures conventionnelles normalisées.

Depuis le milieu des années cinquante, de nombreuses études ont été menées dans le but de proposer des méthodes pour la prédiction des paramètres physiques et thermodynamiques des hydrocarbures et de leurs mélanges. Ces travaux visent à minimiser le temps d'accès à ces paramètres et éviter autant que possible les manipulations lentes et fastidieuses.

II.1 Méthodes à fondement thermodynamique

II.1.1 Les équations d'état

L'intérêt d'une équation d'état est de permettre de prévoir avec une assez bonne précision le comportement volumétrique des fluides, l'évolution des fonctions thermodynamiques avec la température et la pression ainsi que les équilibres de phases. Une équation d'état est une relation entre les variables de pression, volume, température et composition, de forme générale :

$$f(P, T, V, X_i, \dots) = 0$$

La plus simple des équations d'état est représentée par l'équation des gaz parfaits $PV=NRT$, cette équation représente une approximation d'autant meilleure que la pression est faible. Dans le cas des fluides réels, de nombreuses équations d'état ont été proposées visant à améliorer la représentation de ces fluides pour lesquels les forces d'interactions entre molécules ne sont plus négligeables. Parmi les équations d'état qui existent, les équations d'états cubiques sont très largement utilisées dans les modèles de simulation, en production et dans le traitement des hydrocarbures de gisements.

Les équations d'état cubiques se présentent sous la forme d'une série en volume de puissance un, deux et trois :

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + uV + wb^2}$$

u et w sont des constantes qui dépendent de l'équation d'état. Les paramètres a et b s'expriment en fonction des coordonnées critique.

Avec :

$$a = \Omega_a \cdot \frac{(RT_c)^2}{p_c} \alpha$$

$$\alpha = [1 + m (1 - Tr)^{0.5}]$$

$$b = \Omega_b \cdot \frac{RT_c}{p_c}$$

Ω_a et Ω_b dépendent de l'équation d'état et m une fonction du facteur acentrique.

Tableau II.1 Paramètres de quelques équations d'état cubiques.

Equations d'état	u	w	Ω_a	m
Van Der Waals (1873)	0	0	27/64	0
Redlich-Kwong (1949)	1	0	0.42748	0
Soave-Redlich	1	0	0.42748	$0.48+1.574 \omega -0.76. \omega^2$
Peng-Robinson (1976)	2	-1	0.45724	$0.37464+1.5422\omega- \omega^2$

Des équations plus complexes que les équations précédentes, faisant intervenir un nombre plus important de paramètres, ont été proposées pour des situations particulières. Ces équations dites équations d'état non cubiques présentent l'inconvénient d'être en général d'ordre supérieur à trois et de conduire, de ce fait, à des calculs plus fastidieux. Parmi elles, nous pouvons citer les équations d'état du Viriel, Benedict, Webb et Rubin BWR (1951) ou encore de Beattie- Bridgeman (1928) etc....

Les équations d'état présentées précédemment peuvent être étendues aux mélanges en utilisant des règles de mélanges permettant de relier les paramètres des équations d'état appliquées aux mélanges à ceux des corps purs. Dans le cas des équations d'état cubiques, les règles de mélanges usuelles sont les suivantes lorsque la composition est définie en fractions molaires X_i :

$$b = \sum b_i . X_i \quad a = \sum \sum X_i X_j \sqrt{a_i . a_j (1 - k_{ij})}$$

Les termes k_{ij} sont des termes correctifs appelés coefficients d'interaction, caractéristiques du binaire ij considéré. L'introduction de ce terme est nécessaire lorsque les constituants i et j sont formés par des molécules très dissemblables, soit par leur volume molaire, soit par leur nature chimique.

Une façon d'étendre les équations d'état aux mélanges, consiste à considérer les paramètres pseudo-critiques. Cette procédure est généralement appliquée dans le cas des mélanges complexes dont la composition n'est pas connue, telles que les fractions pétrolières.

A partir des équations d'état, il est possible de calculer les fonctions thermodynamiques telles que l'enthalpie, l'entropie ou l'énergie libre pour des conditions du gaz parfait. En effet, connaissant l'équation d'état, il est possible d'intégrer les expressions donnant l'enthalpie et l'entropie molaires, soient :

$$H = H^o + \int_0^p [V - T(\frac{\partial V}{\partial T})] . dP$$

$$S = S^o + \int_0^p [\frac{R}{P} - (\frac{\partial V}{\partial T})] . dP - R \ln \frac{P}{P^o}$$

H^0 représente l'enthalpie d'une mole de gaz parfait qui n'est fonction que de la température et S^0 l'entropie d'une mole de gaz parfait à la température T et à la pression de référence P^0 (habituellement $P^0 = 10$ Pascale).

L'application des équations d'état aux hydrocarbures lourds est une opération délicate, due principalement aux propriétés critiques et au facteur acentrique de ces hydrocarbures qui sont difficilement accessibles expérimentalement.

II.1.2 Loi des états correspondants

La loi des états correspondants constitue un élément de simplification dans la prévision des propriétés thermodynamiques des fluides réels. Cette loi affirme que les propriétés dépendantes des forces intermoléculaires sont reliées aux paramètres critiques de la même manière pour tous les composés ; autrement dit, la fonction reliant les propriétés réduites est indépendante de la nature de la substance, soit :

$$f(T_r, P_r, V_r) = 0$$

Les termes T_r , P_r et V_r représentent respectivement les température, pression et volume réduits.

Sur la base de cette loi, de nombreuses corrélations ont été développées pour l'estimation des propriétés thermodynamiques et volumétriques des corps purs et des mélanges de corps purs.

La première application de la loi des états correspondants consiste dans la corrélation des données P-V-T, en exprimant le facteur de compressibilité Z comme fonction des paramètres réduits P_r et T_r . Cette corrélation a été traduite sous forme de diagrammes généralisés.

Cependant, il a été démontré que cette loi à deux paramètres ne s'applique que pour les molécules non polaires, c'est le cas par exemple des molécules sphériques telles que le méthane, l'azote et l'argon, etc.

C'est ainsi, qu'il a été proposé d'introduire un troisième paramètre pour représenter l'ensemble des fluides, en plus de la pression et de la température réduite.

Parmi les corrélations à 3 paramètres, les plus connues sont celles utilisant, soit le facteur de compressibilité critique, soit le facteur acentrique comme troisième paramètre.

- **Corrélations fondées sur le facteur de compressibilité critique :**

L'application de cette loi à 3 paramètres aux données P-V-T des fluides réels implique l'existence d'une fonction unique $Z = f(T_r, P_r, Z_c)$ pour représenter chaque classe de composés ayant même facteur de compressibilité critique.

Lydersen Greenkom et Hougen (1955) ont développé des tables donnant les valeurs de Z en fonction de P_r et T_r pour différentes valeurs de Z_c .

- **Corrélations fondées sur le facteur acentrique :**

Le second paramètre utilisé dans la nouvelle formulation de la loi des états correspondants est le facteur acentrique ω défini par Pitzer (1955) pour exprimer la non sphéricité des molécules :

$$\omega = -\log pr^s - 1 \quad \text{à} \quad Tr = 0.7$$

Pr^s est la pression de saturation réduite et tr la température réduite.

Appliquée au facteur de compressibilité Z , la loi des états correspondants exprime Z comme une fonction linéaire du facteur acentrique :

$$Z = Z^{(0)} + \omega Z^{(1)}$$

$Z^{(0)}$ est un terme relatif au fluide simple obéissant à la loi des états correspondants à deux paramètres et $Z^{(1)}$ un terme correctif tenant compte des déviations par rapport à cette dernière loi, dues à la forme et à la dimension des molécules.

Les applications fructueuses de cette loi aux propriétés P-V-T des fluides réels a encouragé le développement de corrélations similaires pour d'autres propriétés qui dépendent des forces intermoléculaires. Ainsi, Curl et Pitzer (1958) ont développé des corrélations sous la forme :

$$L = L^{(0)} + w L^{(1)}$$

L est une propriété thermodynamique donnée, tels que l'enthalpie résiduelle et l'entropie résiduelle ou encore le coefficient de fugacité.

Sur la base de cette corrélation, Lee et Kesler (1975) ont traduit les valeurs des termes $L^{(0)}$ et $L^{(1)}$ sous forme tabulée et sous forme graphique pour différentes valeurs de la température et pression réduites. Ces tables et diagrammes de maniement aisé, concernent différentes propriétés.

Ces auteurs ont proposé une nouvelle formulation de l'équation de Pitzer qui consiste à calculer la valeur L d'une propriété thermodynamique exprimée en fonction des coordonnées réduites, pour un fluide dont le facteur acentrique est ω , à partir des valeurs respectives $L^{(0)}$ et $L^{(1)}$ de cette propriété pour un fluide simple tel que $\omega = 0$ et pour un fluide de référence (n-octane) tel que $\omega = \omega^{(r)}$ en posant :

$$L = L^{(0)} + \frac{\omega}{\omega^{(r)}} (L^{(1)} - L^{(0)})$$

Dans le cas du facteur de compressibilité Z , l'équation précédente prend la forme suivante:

$$Z = Z^{(0)} + \frac{\omega}{\omega^{(r)}} (Z^{(1)} - Z^{(0)})$$

Les termes $Z^{(0)}$ et $Z^{(1)}$ s'expriment en fonction des coordonnées réduites en choisissant une équation d'état.

En appliquant cette méthode à l'équation de Benedict-Webb-Rubin (BWR), Lee et Kesler (1975) ont développé une équation d'état modifiée dans laquelle les paramètres numériques qui interviennent dans l'équation d'état sont exprimés en fonction des coordonnées réduites.

Il faut rappeler que l'on ne dispose pas toujours des paramètres (coordonnées critique) nécessaires, soit qu'ils n'aient pas été mesurés, soit qu'ils se situent dans une zone de

température ou la molécule se dissocie. Il faut alors les prédire, à l'aide des méthodes empiriques.

II.2 Méthodes empiriques

Depuis plusieurs années, plusieurs corrélations empiriques ont été proposées par différents travaux pour estimer les propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures. Ces méthodes empiriques sont basées essentiellement sur l'expérience où l'on essaie de caractériser les hydrocarbures à partir d'autres propriétés.

II.2.1 Corrélations propriétés- structure: méthode de contribution de groupes

Par leur principe même, ces méthodes ont pour objectif de rapporter les propriétés des corps à leur structure moléculaire. Leurs formes sont assez variées, et dépendent des types de groupements et d'environnement choisis pour évaluer les contributions qui sont généralement additives.

La précision de ces méthodes dépend fortement des données expérimentales des propriétés des corps purs utilisées pour déterminer les valeurs des contributions de groupes.

Nous citons ci-après quelques corrélations relatives aux calculs de T_c , P_c , V_c et T_{eb} [64]:

Propriétés	Corrélations	Auteurs
T_c	$T_c = T_{eb} [0.584 + 0.965 \sum \Delta_T - (\sum \Delta_T)^2]^{-1}$	Joback
	$T_c = T_{eb} [0.567 + \sum \Delta_T - (\sum \Delta_T)^2]^{-1}$	Lydersen
P_c	$P_c = (0.113 + 0.0032 N_A - \sum \Delta_p)^{-2}$	Joback
	$P_c = M (\sum \Delta_p + 0.34)^{-2}$	Lydersen
V_c	$V_c = 17.5 + \sum \Delta_v$	Joback
	$V_c = 40 + \sum \Delta_v$	Lydersen
T_{eb}	$T_{eb} = 198 + \sum \Delta_{T_{eb}}$	Joback

II.2.2 Corrélations basées sur des grandeurs facilement accessibles par expérience

L'étude bibliographique a permis de compiler un grand nombre de corrélations pour le calcul des propriétés des corps purs et de mélanges complexes dont la composition n'est pas connue, telles que les fractions pétrolières.

Nous citons ci-après quelques corrélations pour le calcul des propriétés critiques des fractions pétrolières nécessitant la connaissance expérimentale de quelque grandeurs facilement accessibles expérimentalement par exemple : la température moyenne d'ébullition, la densité standard et la masse moléculaire [66].

III.1 Le neurone biologique

Le neurone est l'unité fonctionnelle de base du système nerveux. D'une espèce à une autre, il peut présenter des différences d'ordre fonctionnels ou anatomiques, cependant divers points communs subsistent, et sont à la base de la cellule nerveuse.

Le neurone est une cellule constituée principalement de trois parties : dendrites, soma et l'axone.

- **Les dendrites :**

Cette partie qui présente une sorte de ramification appelée arbre dendritique, collecte les signaux venant d'autres cellules ou de l'extérieur. La réception des signaux en provenance des autres neurones, se fait par des points de contacts appelés synapses (certaines cellule peuvent compter jusqu'à 100.000 synapses). Ces signaux, qui ne sont que des impulsions électriques, sont par la suite acheminés vers le corps cellulaire (le soma).

- **Le soma :**

L'arbre dendritique fait converger vers le soma des influx nerveux venus d'une très large étendue autour du neurone. Le soma, outre son rôle concernant le métabolisme de la cellule, recueille et concentre les informations et en fait une sommation dite 'spatio-temporelle'. Si le potentiel somatique dépasse un certain seuil, il y a émission d'un potentiel d'action appelé 'spike', qui correspond à une oscillation électrique très brève (1ms).

- **L'axone :**

Le signal traité et transmis vers l'extérieur, le long de l'axone et repartit sur les synapses des neurones cibles grâce à l'arborisation terminale que possède l'axone.

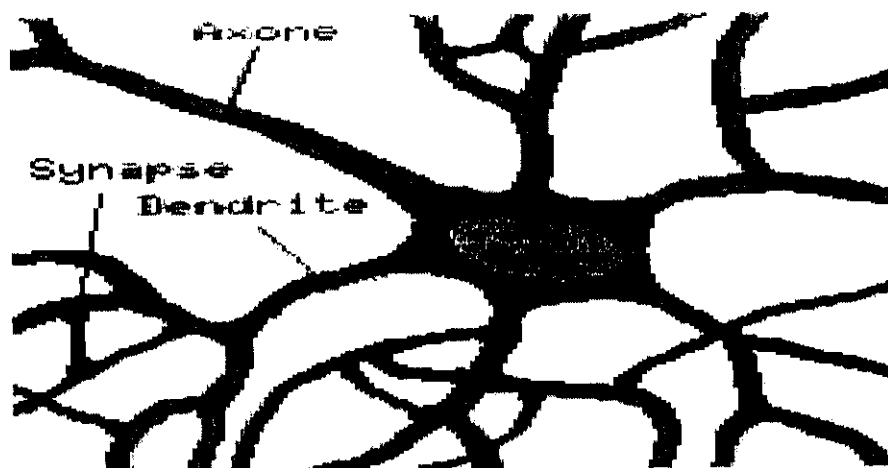


Figure III.1 Le neurone biologique.

En effet, l'arrivée d'un potentiel d'action à l'extrémité d'un axone entraîne le passage d'une plus ou moins grande quantité de neurotransmetteurs dans l'intervalle synaptique.

Ces neurotransmetteurs dépolarisent alors la membrane post-synaptique d'une dendrite ou les hyper-polarisent dans le cas des synaptiques inhibiteurs. Ils permettent alors un passage pondéré de l'influx nerveux.

III.2 Le neurone formel

Un neurone formel ou artificiel est un opérateur mathématique très simple. Un neurone possède des entrées qui peuvent être les sorties d'autres neurones, ou des entrées de signaux extérieurs, et une sortie. La valeur de la sortie résulte du calcul de la somme des entrées, pondérées par des coefficients (dits poids de connexions ou poids synaptiques) et du calcul d'une fonction non linéaire (dite fonction d'activation) de cette somme pondérée.

L'état du neurone, appelé aussi activité, est défini comme la somme pondérée de ses entrées. Son schéma de fonctionnement est donné en figure III-2. Un neurone se caractérise par trois concepts : son état, ses connexions avec d'autres neurones et sa fonction d'activation.

Nous utiliserons par la suite les notations suivantes.

S_i : l'état du neurone i .

f_i : fonction d'activation associée au neurone i .

W_{ij} : poids de la connexion entre les neurones j et i .

W_{i0} : poids de la connexion entre le neurone biais (+1) et les neurones i .

Ainsi, le neurone i recevant les informations de p neurones effectue l'opération suivante :

$$S_i = f_i \left(\sum_{j=1}^p W_{ij} S_j - W_{i0} \right)$$

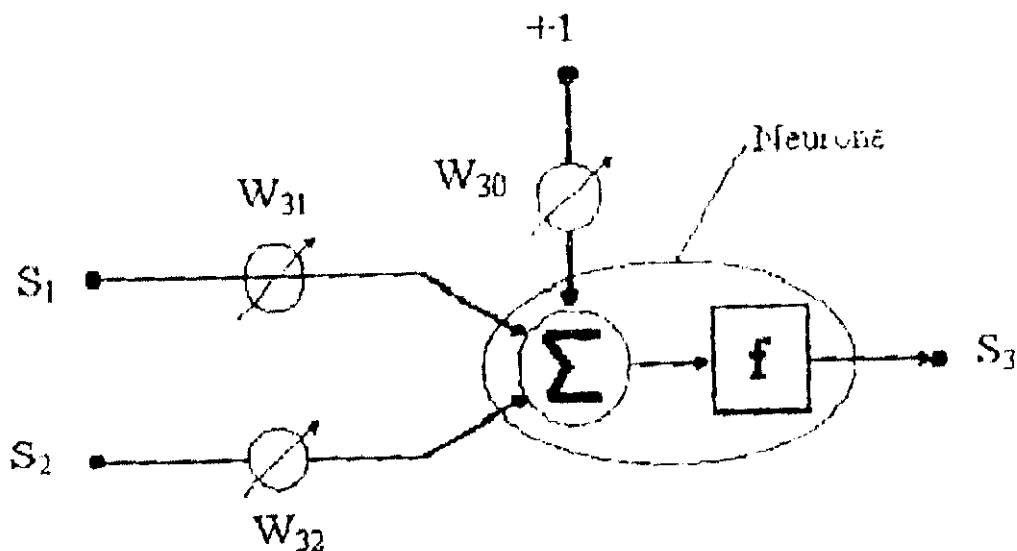


Figure III.2 Schéma de fonctionnement d'un neurone formel

Pour le PMC (Perceptron multicouches), on utilise le plus souvent les fonctions d'activations suivantes :

- **La fonction identité :**

$$f(X) = X$$

Les neurones dont la fonction d'activation est linéaire sont appelés neurones linéaires.

- **La fonction sigmoïde :**

$$f(X) = A \frac{\exp(Kx) - 1}{\exp(Kx) + 1} = A \tanh\left(\frac{K}{2} x\right)$$

C'est la plus utilisée car elle introduit de la non linéarité, mais c'est aussi une fonction continue, différentiable et bornée. La fonction sigmoïde a des asymptotes horizontales en $-\infty$ et $+\infty$. Elles permettent d'éviter que des valeurs trop grandes ne se propagent dans le réseau. La fonction d'activation peut également être une gaussienne, un échelon, etc....

Le paramètre A régule la valeur de saturation, le paramètre K sert à réguler la valeur de la pente en tous points hors saturation.

L'utilisation des fonctions d'activation non linéaires permet l'obtention de modèles statistiques non linéaires. Les réseaux multicouches qui utilisent comme fonction d'activation les sigmoïdes, sont appelés réseaux multicouches quasi linéaires.

III.3 Les réseaux de neurones

L'intérêt des neurones réside dans les propriétés qui résultent dans leur association en réseaux, c'est à dire de la composition des fonctions non linéaires réalisées par chacun des neurones.

Par définition, un réseau de neurones est un assemblage d'éléments, d'unités ou de nœuds processeurs pour lequel un sous-groupe fait un traitement indépendant et passe le résultat à un deuxième sous-groupe. Les habilités de traitement du réseau sont stockées dans les forces (ou poids) de connexion inter-unités qui est obtenu par un processus d'adaptation ou d'apprentissage.

III.3.1 Architecture des réseaux de neurones

On trouve trois types de réseaux de neurones à architectures différentes :

- **Réseaux statiques (réseaux non bouclé) :**

Ce type de réseaux peut être utilisé pour la classification ou l'approximation des fonctions complexes non linéaires. Il est généralement organisé en couches, chaque neurone d'une couche reçoit de l'information des neurones de la couche précédente ou simplement de l'extérieur pour les neurones de la couche d'entrée et il et il n'y a pas de feed-back d'information. Un réseau non bouclé est régi par une (ou plusieurs) équation(s) algébrique(s).

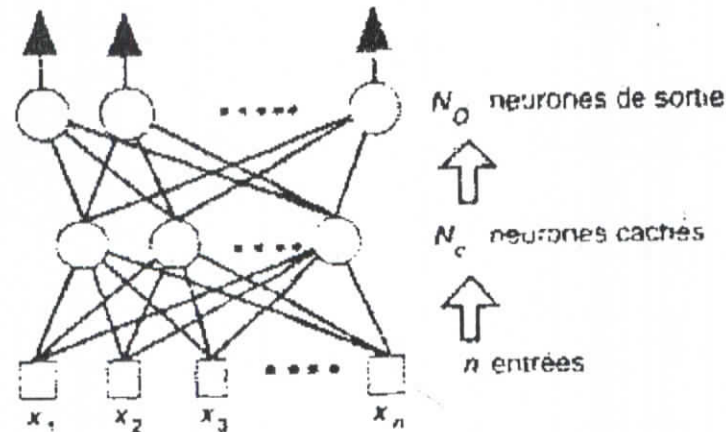


Figure III.3 Réseau statique à n entrée, une couche de n_c neurone cachés et n_o neurones de sortie.

- **Réseaux dynamiques (réseaux bouclés) :**

Ce genre de réseaux a été utilisé au début pour les problèmes de classification ou de mémorisation mais actuellement il est utilisé pour l'identification des systèmes dynamiques il est caractérisé par un feed-back entre les neurones qui rend le système dynamique. Un réseau bouclé est régi par une (ou plusieurs) équation(s) différentielles.

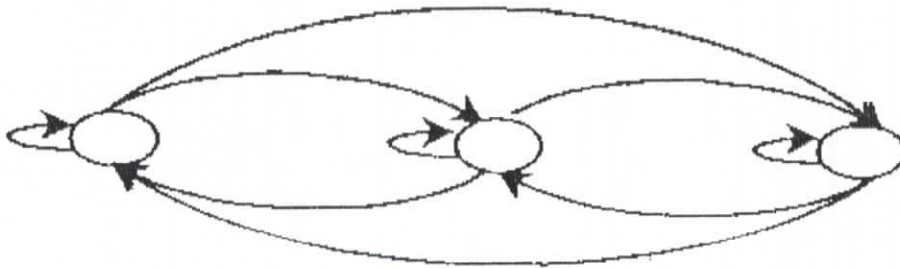


Figure III.4 Réseau dynamique

- **Réseaux à architecture évolutive et réseaux auto organisés :**

Les réseaux auto organisés sont des réseaux de neurones qui changent leur structure pendant l'utilisation. Ainsi les neurones se regroupent topologiquement suivant la présentation des exemples issus de l'entrée. Ces réseaux sont généralement des dérivées des modèles de Kohonen. Les réseaux sont dits évolutifs au vu de leur méthode d'apprentissage, c'est la dimension du réseau qui change pendant l'entraînement, ainsi le nombre de neurones augmente ou diminue. La structure n'est cependant pas bouleversée par ce changement.

III.3.2 Apprentissage des réseaux de neurones

On entend par apprentissage des réseaux de neurones, la procédure qui consiste à estimer les paramètres (les poids de connexion) des neurones du réseau, afin que celui-ci remplisse au mieux la tâche qui lui est affectée. Ce travail d'apprentissage en effet, est réalisé à l'aide d'algorithmes appropriés. L'expérience ainsi acquise est accumulée et est mémorisée dans ces poids de connexions.

Durant l'apprentissage, le réseau a la possibilité de trouver la relation qui existe entre les différentes entrées qu'on lui fait apprendre. De ce fait, il deviendra donc capable de généraliser sur des exemples qu'il n'a pas appris. Cette notion de généralisation est très importante, car les données réelles du problème sont très souvent bruitées.

- **Apprentissage supervisé :**

Le but de l'apprentissage supervisé est d'inculquer un comportement de référence au réseau. On suppose alors qu'à chaque patron d'entrée I^t est associée une sortie désirée D^t . Un patron est présenté au neurone d'entrée, la réponse des neurones de sortie est alors comparée aux valeurs désirées, ceci détermine l'erreur du réseau E^t pour le patron donné.

Il s'agit alors de répartir cette erreur à chaque poids du réseau en fonction de la part qu'il a joué dans la production de l'erreur. On procède alors à une modification des poids qui vise à réduire l'erreur ainsi calculée.

En pratique, on procède par une série d'approximations successives, où l'ensemble des patrons est présenté plusieurs fois au réseau et où les poids synaptiques sont modifiés de façon à améliorer graduellement le comportement global du réseau.

En général, pour cet apprentissage, on utilise la méthode du gradient (descente de gradient).

Les réseaux de neurones à apprentissage supervisé bénéficient de la propriété d'approximation parcimonieuse d'une fonction de régression inconnue.

- **Apprentissage non supervisé :**

La règle d'apprentissage n'est pas fonction du comportement de sortie du réseau, mais plutôt du comportement local des neurones. Ceci simplifie considérablement le problème du choix des poids synaptiques mais rend plus ténu l'association entre l'apprentissage et un comportement globale. Les réseaux à apprentissage non supervisé les plus étudiés et plus utilisés sont les 'cartes auto-organisatrices' ou 'cartes de Kohonen'.

- **Apprentissage par renforcement :**

Ce type d'apprentissage est moins 'classique' que les deux premiers qui sont les principaux. Il y a d'une part en commun avec l'apprentissage supervisé, la présence d'un critère qui juge l'évolution de l'apprentissage, et d'autre part, il ne nécessite que des entrées sans définir les sorties désirées comme dans l'apprentissage non supervisé. Dans ce type d'apprentissage, le réseau rajuste ses poids synaptiques suivant un critère de performance.

III.4 Quelques célèbres réseaux

- **Perceptron :**

C'est un des premiers réseaux de neurones, conçus en 1958 par Rosenblatt. Il est linéaire et monocouche, inspiré du système visuel. La première couche (d'entrée) représente la rétine, les neurones de la couche suivante sont les cellules d'association et la couche finale les cellules de décision.

Les sorties des neurones ne peuvent prendre que deux états (-1 et 1 ou 0 et 1). La règle de modification des poids utilisée est la règle de Widrow-Hoff : si la sortie (celle d'une cellule de décision donc) est égale à la sortie désirée, le poids de la connexion entre ce neurone et le neurone d'association qui lui est connecté n'est pas modifié. Dans le cas contraire les poids sont modifiés en fonction de l'entrée.

En 1969, Papert et Minsky (un des pères des systèmes experts) démontrent les limites du perceptron classique, incapable, par exemple de simuler la fonction ou exclusif.

- **Le Perceptron multicouches (PMC) :**

Les PMC sont une amélioration du perceptron comprenant une ou plusieurs couches intermédiaires dites couches cachées. Ils utilisent, pour modifier leurs poids, un algorithme de rétropropagation du gradient, qui est une généralisation de la règle de Widrow-Hoff.

Le PMC a une structure bien particulière : ses neurones sont organisés en couches successives, chaque neurone d'une couche reçoit des signaux de la couche précédente et transmet le résultat à la suivante, si elle existe. Les neurones d'une même couche ne sont pas interconnectés. Un neurone ne peut donc envoyer son résultat qu'au neurone situé dans une couche postérieure à la sienne. L'orientation du réseau est fixée par le sens, unique, de propagation de l'information, de la couche d'entrée vers la couche de sortie. Pour les réseaux considérés, les notions de couches d'entrée et de sortie sont donc systématiques. Ces dernières constituent l'interface du réseau avec l'extérieur. La couche d'entrée reçoit les signaux (ou variables) d'entrée et la couche de sortie fournit le résultats. Enfin, les neurones des autres couches (couches cachées) n'ont aucun lien avec l'extérieur et sont appelés neurones cachés.

Par convention, les neurones d'entrée ont toujours une fonction d'activation 'identité', laissant passer l'information sans la modifier. En ce qui concerne le neurone de sortie, on peut lui associer une fonction d'activation linéaire ou non, dérivable ou non, suivant la nature du problème à résoudre. En ce qui concerne la fonction d'activation associée aux neurones cachés, on utilise dans le cadre de ce travail une fonction d'activation de la famille des sigmoïdes.

Le perceptron multicouches décrit dans la figure III.4 comporte P unités en entrée, recevant respectivement p variables $\{X_1, X_2, \dots, X_p\}$ et une seule unité de sortie qui produit la variable Y .

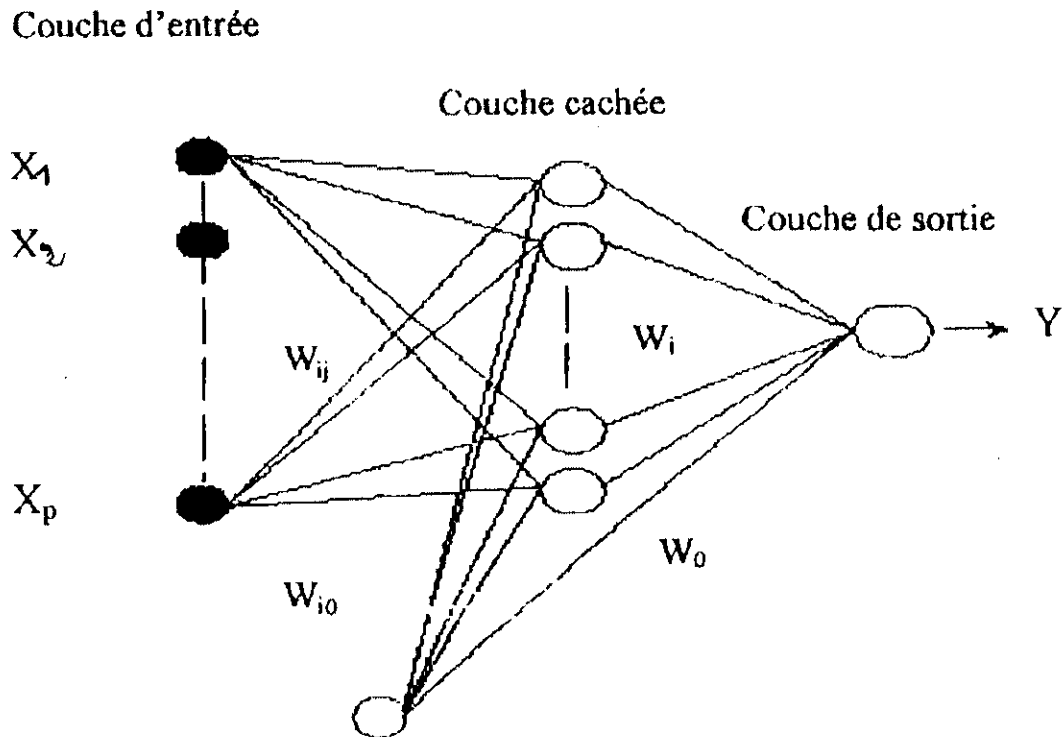


Figure III.4 Architecture d'un PMC à une couche cachée (n neurones cachés) avec p neurones d'entrée et q ($q=1$) neurones de sortie.

- **Les réseaux de Hopfield :**

Un réseau de Hopfield réalise une mémoire adressable par son contenu. Il s'agit d'un réseau constitué de neurones de McCulloch et Pitts (à deux états, -1 et 1 ou 0 et 1), dont la loi d'apprentissage est la règle de Hebb (1949), qui veut qu'une synapse améliore son activité si et seulement si l'activité de ses deux neurones est corrélée (C'est à dire que le poids W_{ij} d'une connexion entre un neurone i et un neurone j augmente quand les deux neurones sont activés au même temps).

- **Les réseaux de Kohonen :**

Contrairement aux réseaux de Hopfield où les neurones sont modélisés de la façon la plus simple possible, on recherche ici un modèle de neurone plus proche de la réalité. Ces réseaux sont inspirés des observations biologiques du fonctionnement des systèmes nerveux de perception des mammifères.

III.5 Algorithme de rétro propagation

L'algorithme de rétro propagation de l'erreur dans les PMC reste le plus utilisé. Il a été découvert par Werbo en 1974, en 1986 Rumelhart, Hinton et Williams ont développé

l'algorithme de Back-propagation en se basant sur les règles de Windrows-Hopf sur les RNA multicouches.

• **Résumé de l'algorithme :**

Soit un réseau à n neurones en entrée, m en sortie, p le nombre de couches cachées, et n_k le nombre de neurones de la couche cachée numéro k. μ étant le pas du gradient.

1. initialiser tous les poids W_{ij} aléatoirement.
2. présenter au réseau une forme (X_1, \dots, X_n) et sa sortie désirée (Y_1, \dots, Y_m) .
3. calculer les sorties des neurones des couches cachées (O_j) et de la couche de sortie (S_j) par :

Première couche cachée :

$$O_j^1(k) = f \left[\sum_{i=1}^n W_{ji}(k) \cdot x_i(k) \right]$$

Deuxième couche cachée:

$$O_j^2(k) = f \left[\sum_{i=1}^{n_1} W_{ji}(k) \cdot O_i^1(k) \right]$$

Etc....

Couche de sortie :

$$S_j(k) = f \left[\sum_{i=1}^{n_p} W_{ji}(k) \cdot O_i^p(k) \right]$$

4. modifier les poids des connexions récursivement par :

$$W_{ji}(k+1) = W_{ji}(k) - \mu \cdot d_j(k) \cdot O_i(k)$$

Avec :

$$d_j(k) = (S_i(k) - Y_i(k)) \cdot f' \left[\sum_{i=1}^{n_p} W_{ji}(k) \cdot O_i^p(k) \right]$$

Pour la couche de sortie.

$$d_j(k) = \sum_{i=1}^{m+1} d_i(k) \cdot W_{ji}(k) \cdot f' \left[\sum_{i=1}^{n_k} W_{ji}(k) \cdot O_i^{n_k}(k) \right]$$

Pour la couche cachée numéro k

5. refaire les étapes 2 à 4 jusqu'à atteindre l'erreur désirée.

Pour améliorer l'algorithme de Back-propagation, un terme d'inertie appelé momentum a été introduit dans la connexion des poids en tenant compte de la connexion précédente. Cette approche consiste à minimiser le critère :

$$E(n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma^{n-i} \| y_i - \hat{y}_i \|^2 \text{ avec } \gamma < 1 ; (\text{momentum})$$

Ce critère est la somme des erreurs quadratiques pondérées exponentiellement. La règle d'adaptation avec momentum est la suivante :

$$\Delta w_{jk}(n) = \gamma \cdot w(n) - a \delta(n) x_k(n)$$

$$w_{jk}(n+1) = w_{jk}(n) + \Delta w_{jk}(n)$$

Avec γ la constante de momentum ($0 < \gamma < 1$).

III.6 Introduction à la méthodologie de conception d'un modèle de réseaux de neurones (modèle statique)

La conception d'un modèle de réseau de neurones comprend plusieurs étapes :

1. Sélection des entrées les plus pertinentes du modèle (composantes du vecteur X qui apparaît dans $g(X, W)$) :

Cette première étape consiste à déterminer les entrées les plus pertinentes, c'est-à-dire les grandeurs qui ont une influence significative sur le phénomène que l'on cherche à modéliser.

$g(X, W)$: le modèle dont le vecteur des variables est X et le vecteur des paramètres (poids de connexion) est W .

- **Normalisation des variables :**

Il est important de noter qu'avant tout apprentissage, il est indispensable de normaliser et de centrer toutes les variables (entrées et sorties). En effet, si les variables ont des grandeurs très différentes, celles qui sont 'petites' n'ont pas d'influence sur l'apprentissage. En pratique, il est donc recommandé pour chaque vecteur ξ_i de calculer la moyenne et l'écart type μ_i de ses composantes, et d'effectuer le changement de variable $\xi'_i = (\xi_i - \mu_i) / \sigma_i$, au tout autre changement de variable ayant un effet analogue : c'est-à-dire de faire en sorte que la moyenne de chaque variable soit voisine de zéro, et son écart type de l'ordre d'une unité.

2. Sélection de modèle :

Le choix du modèle doit permettre de trouver un modèle qui a la complexité suffisante pour rendre compte de la relation déterministe entre les facteurs sélectionnés et la sortie du processus, mais qui n'est pas trop complexe, de sorte qu'il ne s'ajuste pas au bruit présent dans les données d'apprentissage. Si le réseau de neurones possède un nombre de paramètres excessif, en raison d'un nombre excessif de neurones cachés, sa sortie peut passer avec une très grande précision par tous les points d'apprentissage, mais fournir des résultats dépourvus de signification entre ces points (sur-ajustement); s'il possède un nombre de paramètres trop restreint, le modèle n'est pas suffisamment riche pour rendre compte de la complexité de la fonction de régression inconnue (Sous-ajustement). Il faut donc, non seulement que la fonction réalisée par le réseau de neurone passe 'le plus près possible', au sens des moindres carrés, des points utilisés pour l'apprentissage, mais également qu'il soit capable de généraliser de manière satisfaisante.

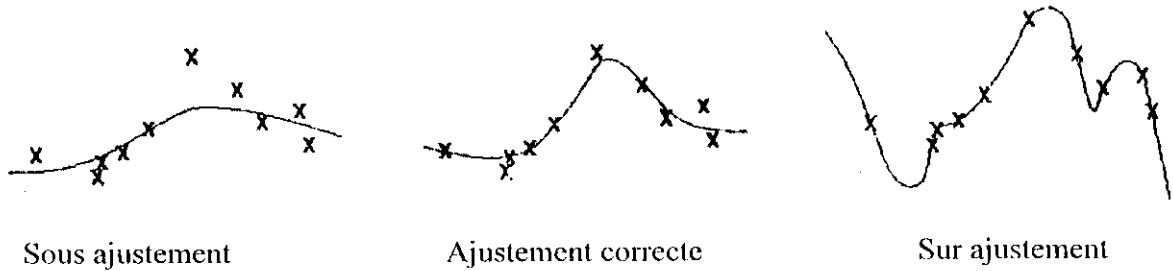


Figure III.5 Phénomène de Sous ajustement et de sur ajustement

3. Evaluation de l'erreur de généralisation :

Cette étape consiste à estimer l'erreur sur la base de test (données qui ne sont pas utilisées dans la base d'apprentissage) pour évaluer la capacité de généralisation du réseau.

4. Estimation des paramètres du modèle :

Pour une famille donnée de fonctions, il faut déterminer les paramètres composantes du vecteur W : à cet effet, on minimise une fonction de coût représentative des différences entre les valeurs mesurées et celle calculées par le modèle :

$$J(W) = \sum_{k=1}^n (Y_p^k - g(X_k, W))^2$$

Avec :

Y_p^k est la k-ième mesure de la sortie et X^k est la k-ième mesure du vecteur des entrées.

J est la fonction de coût des moindres carrés, qui est la somme sur tous les éléments de l'ensemble d'apprentissage, des carrés des résidus.

5. Sélection du meilleur modèle :

Si ce modèle n'est pas satisfaisant, on choisit une famille de fonctions plus complexe (on augmente le nombre de neurones cachés) et on revient à la seconde étape de la tâche précédente.

III.7 Exemples de domaines d'applications des réseaux neuromimétiques

Se trouvant à l'intersection de différents domaines (informatique, électronique, science cognitive, neurobiologie et même philosophie), l'étude des réseaux de neurones est une voie prometteuse de l'Intelligence Artificielle, qui a des applications dans de nombreux domaines :

- Industrie: contrôle qualité, diagnostic de panne, corrélations entre les données fournies par différents capteurs, analyse de signature ou d'écriture manuscrite...
- Finance: prévision et modélisation du marché (cours de monnaies...), sélection d'investissements, attribution de crédits.
- Télécommunications et informatique: analyse du signal, élimination du bruit, reconnaissance de formes (bruits, images, paroles), compression de données.
- Environnement : évaluation des risques, analyse chimique, prévisions et modélisation météorologiques, gestion des ressources.

Notre travail a été réalisé sous environnement Matlab 5.3. Ce dernier est un logiciel de calcul très puissant, possédant des sous-routines conçues pour créer, entraîner et simuler des réseaux de neurones.

Pour le développement des réseaux de neurones nous avons utilisé les sous-routines suivantes :

- Newff : permet de créer le réseau de type feedforward avec rétro propagation de gradient.
- Trainlm : sous-routine d'entraînement qui se base sur l'algorithme de 'Lavenberg-Marquardt'.
- Tansig (tangente sigmoïde) : fonction d'activation des neurones cachés.
- Purlin (fonction linéaire) : fonction d'activation des neurones de sorties.

Le pourcentage d'écart est calculé comme suit :

$$\%d'écart = \left| \frac{val\ lit - val\ est}{val\ lit} \right| * 100$$

Avec :

Val lit : valeur rapportée de la littérature.

Val est : valeur estimée par le modèle de réseau de neurones.

Remarque:

Avant l'apprentissage, on a procédé à la normalisation de chaque vecteur (entré et cible). Ce traitement des données est effectué à l'aide des fonctions suivantes : Prestd, Poststd, Trastd.

- Prestd : fonction de normalisation du vecteur entré et de vecteur cible.
- Poststd : fonction inverse de la fonction Prestd, utilisée pour convertir les données en leurs unités standard.
- Trastd : fonction de normalisation de nouveau vecteur entré du réseau établi (réseau déjà entraîné avec les données normalisées avec la fonction Prestd).

IV.1 Prédiction des propriétés des hydrocarbures purs à partir de leur structure moléculaire

Les valeurs des propriétés des hydrocarbures constituant la base d'apprentissage et la base de test sont rapportées par les banques de données suivantes : Reid et al [57], TRC (Thermodynamique Recherche Caner), API (Technical Data Book of Petroleum Refining) et Daubert T. E et Al [18].

Les valeurs des propriétés de certains composés qui ne figurent pas dans les banques de données ont été estimées par des corrélations appropriées (voir Annexe1).

Les réseaux établis sont entraînés pour 250 hydrocarbures (25 alcynes de C₂-C₂₅, 54 oléfines de C₂-C₂₅, 22 paraffines de C₂-C₂₅, 46 naphthènes de C₃-C₂₅, 65 iso paraffines de C₅-C₂₅, 38 aromatiques de C₈-C₂₅) et testés avec 20 hydrocarbures non utilisés dans la phase d'apprentissage.

Une fois la base de données est acquise, nous avons procédé au développement de la structure moléculaire de chaque hydrocarbure, et à l'évaluation du nombre de chaque groupement cité dans le tableau ci-après.

Tableau IV.1 Groupes fonctionnels correspondants à la matrice entrée.

No	Groupes fonctionnels
1	-CH ₃
2	>CH ₂
3	>CH-
4	>C<
5	=CH ₂
6	=CH-
7	-C<
8	=C=
9	≡CH-
10	≡C-
11	-CH ₂ (cycle)
12	>CH- (cycle)
13	>C< (cycle)
14	-CH (cycle)
15	=C< (cycle)

Développement des réseaux de neurones :

Après plusieurs essais, les réseaux de neurones proposés sont des réseaux à trois couches :

- Une couche d'entrée, composée de 15 neurones correspondant aux 15 groupements fonctionnels donnés en tableau IV.1.
- Une seule couche cachée, composée de quatre neurones ;
- Une couche de sortie, composée des neurones correspondants aux propriétés qu'on veut prédire.

IV.1.1 Résultats et interprétation

Nous présentons dans les tableaux ci-après le comportement de la base de test (20 hydrocarbures purs) par rapport au réseau pour chacune des propriétés étudiées.

Tableau IV.2 Résultats obtenus pour l'énergie standard libre Gf (kcal/mol) et l'enthalpie standard de formation Hf (kcal/mol).

hydrocarbures	Gf (lit)	Gf (est)	écart (%)	Hf (lit)	Hf (est)	écart (%)
1-3butadiene	36.01	38.62	7.25	26.33	28.03	6.44
1butene3yne	73.13	69.5	4.96	72.8	67.89	6.74
isobutane	-5.00	-3.14	37.20	-32.15	-31.44	2.2
cyclopentene	26.48	22.08	16.62	7.87	11.86	50.9
benzene	30.99	30.21	2.52	19.82	20.27	2.25
1-héxene	20.94	21.25	1.48	-9.96	-9.77	1.91
3-3diméthylbutene	23.46	18.71	20.25	-10.31	-11.61	12.61
toluène	29.23	29.26	0.10	11.95	11.97	0.19
1-hyptyne	54.18	54.24	0.11	24.47	25.44	3.97
styrène	51.10	52.47	2.68	35.22	34.7	1.48
2-2-3-3tertaméthylbutane	0.58	0.74	27.59	-60.26	-54.46	9.63
cis, propenylbenzene	51.84	56.45	8.89	30.3	38.34	26.53
alpha méthyle styrène	49.88	52.12	4.49	28.15	27.78	1.33
cumène	32.74	32.03	2.17	0.94	1.3	38.02
naphtalène	53.44	55.31	3.50	36.08	37.23	3.19
1-cyclopentylpentane	16.68	14.19	14.93	-45.62	-46.17	1.21
1-méthyl naphtalène	51.71	54.37	5.14	27.77	28.97	4.31
biphenyl	67.00	66.25	1.13	43.52	41.32	5.05
hexyl benzène	38.55	38.99	1.14	-13.17	-13.07	0.74
nonadecane	26.04	26.96	3.53	-104	-105.42	1.36
moyenne			8.28			9

Tableau IV.3 Résultats obtenus pour l'entropie standard S (j/mol.K) et chaleur spécifique standard Cp (cal/mol.K).

hydrocarbures	S (lit)	S (est)	écart (%)	Cp (lit)	Cp (est)	écart (%)
1-3butadiene	278.47	290.03	4.15	25.2	17.83	29.25
1butene3yne	272.47	278.86	2.34	19.34	22.50	27.73
isobutane	294.355	280.36	4.75	23.14	21.61	6.63
cyclopentene	289.38	257.26	11.1	17.95	11.50	35.93
benzene	268.94	275.96	2.61	19.52	20.14	3.18
1-héxene	384.64	380.53	1.07	31.63	30.53	3.47
3-3diméthylbutene	330.7	373.50	12.94	30.23	30.58	1.16
toluène	319.44	315.1	1.36	24.8	25.55	3.02
1-hyptyne	407.29	409.15	0.46	36.11	32.97	8.7
styrène	344.766	346.47	0.49	29.18	31.97	9.56
2-2-3-3tertaméthylbutane	388.99	432.70	11.24	46.03	46.25	0.48
propenylbenzene	379.96	353.27	7.02	31	35.65	2.74
alpha méthyle styrène	383.3	382.09	0.32	34.7	29.35	15.4
cumène	388.19	392.28	1.05	36.26	35.93	0.92
naphtalène	337.33	351.71	4.26	31.95	33.82	5.84
1-cyclopentylpentane	494.7	477.66	3.44	47.89	39.45	17.63
1-méthyl naphtalène	387.88	390.68	0.72	37.23	38.78	4.17
biphenyl	426.97	402.82	5.66	39.05	37.92	2.88
hexyl benzène	517.9	517.88	0	52.84	52.33	0.97
nonadecane	895.19	888.51	0.75	105.26	105.55	0.27
moyenne			3.79			9

Tableau IV.4 Résultats obtenus pour la chaleur latente de vaporisation Hv (kcal/mol) et volume molaire Vm (cm³/mol).

hydrocarbures	Hv (lit)	Hv (est)	écart (%)	Vm (lit)	Vm (est)	écart (%)
1-3butadiene	5.38	5.17	3.79	64.58	70.23	8.74
1butene3yne	5.45	5.46	0.15	59.06	64.57	9.32
isobutane	5.05	5.12	1.44	75.81	77.21	1.85
cyclopentene	6.46	6.43	0.43	71.25	71.34	0.13
benzene	7.27	7.00	3.76	88.87	85.45	3.85
1-héxene	6.78	6.59	2.8	125.01	105.17	15.87
3-3diméthylbutene	5.85	6.31	7.95	99.65	101.82	2.17
toluène	7.96	7.87	1.16	105.16	97.86	6.94
1-hyptyne	7.95	7.58	4.76	113.5	108.76	4.18
styrène	9.26	8.37	9.62	108.4	110.11	1.58
2-2-3-3tertaméthylbutane	7.37	7.49	1.65	135.55	128.16	5.45
cis, propenylbenzene	9.21	8.98	2.44	120.72	125.28	3.78
alpha méthyl styrène	9.17	9.18	0.11	121.31	123.12	1.50
cumène	8.87	9.02	1.66	125.28	125.87	0.47
naphtalène	10.42	10.10	3.03	119.83	121.33	1.25
1-cyclopentylpentane	9.55	9.42	1.41	157.59	157.63	0.03
1-méthyl naphtalène	10.94	10.79	1.4	135.61	135.30	0.23
biphenyl	12	11.14	7.13	147.4	141.88	3.74
hexyl benzène	10.75	10.74	0.1	189.24	177.58	6.16
nonadecane	12.78	13.07	2.3	341.9	328.45	3.93
Moyenne			2.85			4.06

Tableau IV.5 Résultats obtenus pour la Température d'ébullition Teb (K) et la température critique Tc (K).

hydrocarbures	Teb (lit)	Teb (est)	écart (%)	Tc (lit)	Tc (est)	écart (%)
1-3butadiene	268.73	265.5	1.20	425.1	423.3	0.42
1butene3yne	278.1	279.8	0.61	455	454.5	0.11
isobutane	261.35	259.8	0.59	408.15	410	0.45
cyclopentene	317.39	309.2	2.58	506	492.3	2.71
benzene	353.21	334.1	5.41	562.16	559	0.56
1-héxene	336.63	338.4	0.53	504.03	507.3	0.65
3-3diméthylbutene	314.4	324.2	3.12	490	492.9	0.59
toluène	383.7	375.6	2.11	591.72	575	2.83
1-hyptyne	373.1	375.3	0.59	547.2	559.8	2.30
styrène	418.41	406.3	2.89	617.1	613.6	0.57
2-2-3-3tertaméthylbutane	379.44	379.1	0.09	567.8	557.1	1.88
propenylbenzene	443.2	475.3	7.24	664.6	716	7.73
alpha méthyle styrène	438.5	445.3	1.55	654	663.5	1.45
cumène	426.3	427.6	0.30	631.1	633.1	0.32
naphtalènes	491.1	478.9	2.48	747.8	715.6	4.31
1-cyclopentylpentane	453.6	454.4	0.18	643.8	648.1	0.67
1-méthyl naphtalène	517.8	507.8	1.93	772	748.1	3.10
biphenyl	528.2	525.6	0.49	780	769.8	1.31
hexyl benzène	499.3	494.6	0.94	697.5	696.1	0.20
nonadecane	603.6	602.2	0.23	756	756.1	0.01
moyenne			1.75			1.61

Tableau IV.6 Résultats obtenus pour la pression critique Pc (bar) et le volume critique Vc (cm³/mol).

hydrocarbures	Pc (lit)	Pc (est)	écart (%)	Vc (lit)	Vc (est)	écart (%)
1-3butadiene	43.3	42.1	2.77	220.8	234.8	6.34
1butene3yne	49.6	50.1	1.01	202	201.6	0.20
isobutane	36.4	39.1	7.42	259	253.5	2.12
cyclopentene	47.6	52.3	9.87	243.5	241.5	0.82
benzene	48.9	48.2	1.43	257.8	271.2	5.20
1-héxene	31.6	31.7	0.32	361.9	363	0.30
3-3diméthylbutene	32.5	33.5	3.08	340	329.4	3.12
toluène	41.09	41	0.22	316	327	3.48
1-hyptyne	32.1	32.6	1.56	387	387.1	0.03
styrène	36.9	38.1	3.25	369.7	367.1	0.70
2-2-3-3tertaméthylbutane	28.7	27.7	3.48	461.8	424.1	8.16
cis-propenylbenzene	34.6	39.9	15.32	411.5	392.8	4.54
alpha méthyle styrène	34	34.6	1.76	413.5	415	0.36
cumène	32	33.3	4.06	427	426.6	0.09
naphtalène	40.4	39.2	2.97	408.5	420.6	2.96
1-cyclopentylpentane	25.1	25.1	0.00	536.5	544.7	1.53
1-méthyl naphtalène	34.9	34.1	2.29	462	474.7	2.75
biphenyl	40	34.5	13.75	502	503.5	0.30
hexyl benzène	23.8	24	0.84	620	613.5	1.05
nonadecane	11.15	11.3	1.35	1100	1114.4	1.31
moyenne			3.84			2.27

Tableau IV.7 Résultat obtenue pour la densité critique dc (g/cm³) et le facteur acentrique au réseau pour dc (g/cm³) et ω .

hydrocarbures	dc (lit)	dc (est)	écart (%)	ω (lit)	ω (est)	écart (%)
1-3butadiene	0.245	0.2381	2.82	0.195	0.1777	1.49
1butene3yne	0.2678	0.2533	5.41	0.092	0.1317	26.96
isobutane	0.2244	0.2283	1.74	0.183	0.2076	2.84
cyclopentene	0.2797	0.2803	0.21	0.206	0.0765	6.5
benzene	0.303	0.2798	7.66	0.212	0.1494	4.15
1-héxene	0.2326	0.2378	2.24	0.285	0.2748	2.18
3-3diméthylbutene	0.2475	0.2474	0.04	0.156	0.2127	42.05
toluène	0.2916	0.2778	4.73	0.263	0.2368	4.33
1-hyptyne	0.2485	0.2493	0.32	0.293	0.2751	1.33
styrène	0.2817	0.2803	0.50	0.257	0.2603	7.2
2-2-3-3tertaméthylbutane	0.2474	0.2584	4.45	0.251	0.2583	1.39
propenylbenzene	0.2872	0.2971	3.45	0.316	0.2273	1.74
alpha méthyle styrène	0.2858	0.2818	1.40	0.331	0.2937	10.6
cumène	0.2815	0.2802	0.46	0.326	0.2962	3.1
naphtalène	0.314	0.2958	5.80	0.313	0.2744	11.92
1-cyclopentylpentane	0.2615	0.2597	0.69	0.398	0.3627	0.15
1-méthyl naphtalène	0.308	0.2991	2.89	0.31	0.389	35.77
biphenyl	0.3072	0.2996	2.47	0.372	0.3527	14.73
hexyl benzène	0.2617	0.265	1.26	0.48	0.4636	1.56
nonadecane	0.2441	0.2434	0.29	0.8463	0.8803	5.7
moyenne			2.44			9.29

Chapitre IV Application du modèle Perceptron multicouches dans la prédiction des propriétés des hydrocarbures pur et des fractions pétrolières

Tableau IV.8 Résultat obtenu pour la tension superficielle T_s (dyne/cm) et le facteur de compressibilité critique Z_c .

hydrocarbures	T_s (lit)	T_s (est)	écart (%)	Z_c (lit)	Z_c (est)	écart (%)
1-3butadiene	13.62	14.34	5.29	0.267	0.2787	4.38
1butene3yne	16.83	17.92	6.48	0.26	0.278	6.92
isobutane	10.48	10.06	4.01	0.278	0.2758	0.79
cyclopentene	22.4	26.15	16.74	0.275	0.276	0.36
benzene	28.18	27.83	1.24	0.271	0.2698	0.44
1-héxene	17.9	18.74	4.69	0.262	0.272	3.82
3-3diméthylbutene	15.39	16.5	7.21	0.27	0.2689	0.41
toluène	28.44	28.13	1.09	0.264	0.2621	0.72
1-hyptyne	23.53	22.26	5.40	0.273	0.2677	1.94
styrène	32.08	28.82	10.16	0.28	0.2561	8.54
2-2-3-tertaméthylbutane	20.68	18.95	8.37	0.28	0.2565	8.39
propenylbenzene	31.27	31.81	1.73	0.258	0.2613	1.28
alpha méthyle styrène	30.38	29.5	2.90	0.26	0.253	2.69
cumène	28.2	29.46	4.47	0.261	0.2603	0.27
naphtalène	39.85	33.34	16.34	0.239	0.283	18.41
1-cyclopentylpentane	26.67	25.89	2.92	0.25	0.2516	0.64
1-méthyl naphtalène	38.47	34.61	10.03	0.234	0.2653	13.38
biphenyl	46.23	34.54	25.29	0.31	0.2701	12.87
hexyl benzène	29.67	29.02	2.19	0.239	0.2585	8.16
nonadecane	28.17	27.55	2.20	0.184	0.1922	4.46
moyenne			6.94			4.94

Tableau IV.9 Résultat obtenu pour la spécific-gravity $Spgr$ et l'indice de réfraction n_{20} .

hydrocarbures	$Spgr$ (lit)	$Spgr$ (est)	écart (%)	n (lit)	n (est)	écart (%)
1-3butadiene	0.627	0.6602	5.3	1.5155	0.981	35.27
1butene3yne	0.7	0.7232	3.31	1.5419	1.4255	7.55
isobutane	0.553	0.5358	3.11	1.001214	0.9731	2.81
cyclopentene	0.772	0.8606	11.48	1.42246	1.441	1.30
benzene	0.884	0.9372	6.02	1.50111	1.4585	2.84
1-héxene	0.678	0.6971	2.82	1.38788	1.3911	0.23
3-3diméthylbutene	0.658	0.6679	1.5	1.3762	1.4117	2.58
toluène	0.872	0.8655	0.75	1.49694	1.4836	0.89
1-hyptyne	0.732	0.7468	2.02	1.4087	1.4136	0.35
styrène	0.911	0.9144	0.37	1.54682	1.4956	3.31
2-2-3-tertaméthylbutane	0.882	0.7019	20.42	1.3404	1.417	5.71
propenylbenzene	0.911	0.9186	0.83	1.543	1.5152	1.80
alpha méthyle styrène	0.895	0.8933	0.19	1.5098	1.4985	0.75
cumène	0.866	0.8533	1.47	1.49145	1.4932	0.12
naphtalène	1.178	1.1034	6.33	1.60311	1.5431	3.74
1-cyclopentylpentane	0.795	0.7791	2	1.4356	1.4425	0.48
1-méthyl naphtalène	1.02379	0.9414	8.05	1.6127	1.5472	4.06
biphenyl	1.069	1.0712	0.21	1.59461	1.5516	2.70
hexyl benzène	0.862	0.867	0.58	1.4868	1.4907	0.26
nonadecane	0.79	0.7925	0.32	1.4408	1.4402	0.04
moyenne			3.85			3.84

La confrontation des résultats estimés par réseau de neurone et les données de la littérature (base de test) est représentée sur les figures ci-dessous pour rendre compte de la fiabilité de cette nouvelle approche pour chacune des propriétés étudiées.

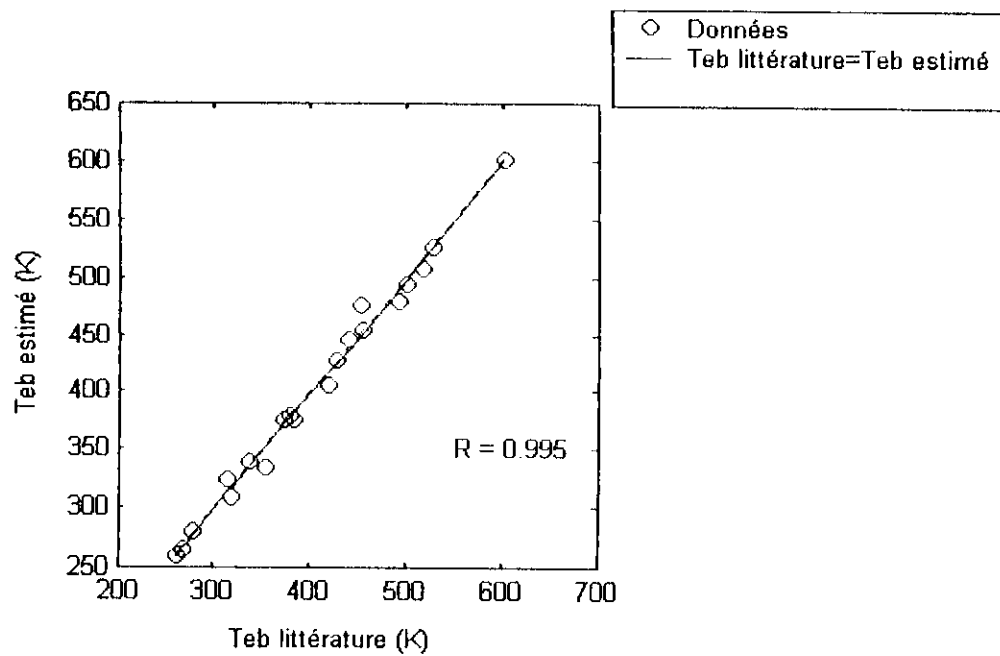


Figure.IV.1 Comparaison de Teb estimé et Teb littérature (base de test).

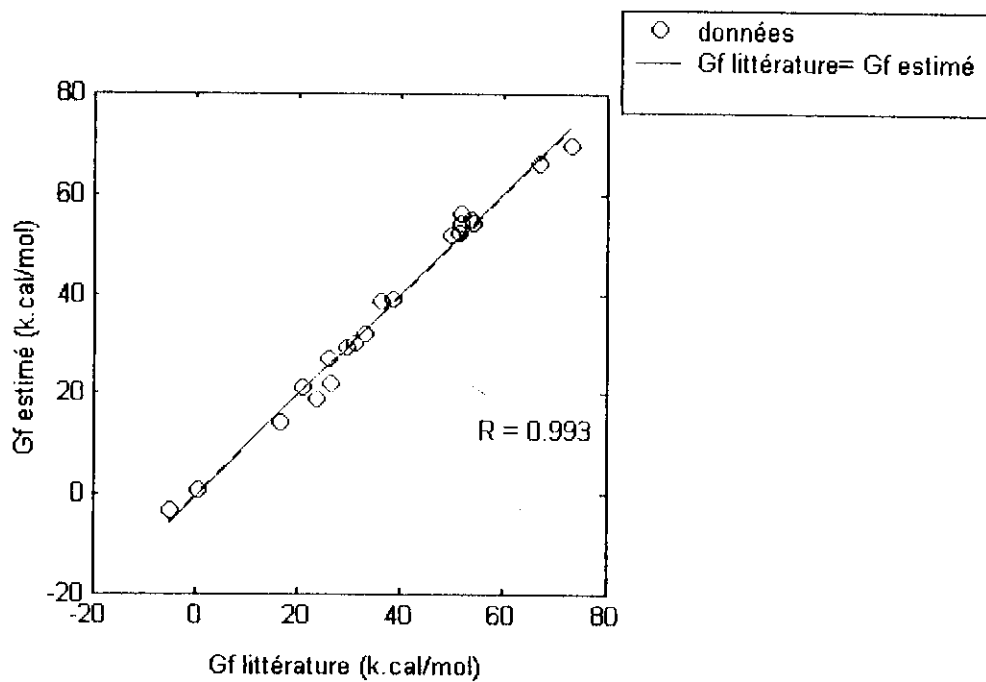


Figure.IV.2 Comparaison de Gf estimé et Gf littérature (base de test).

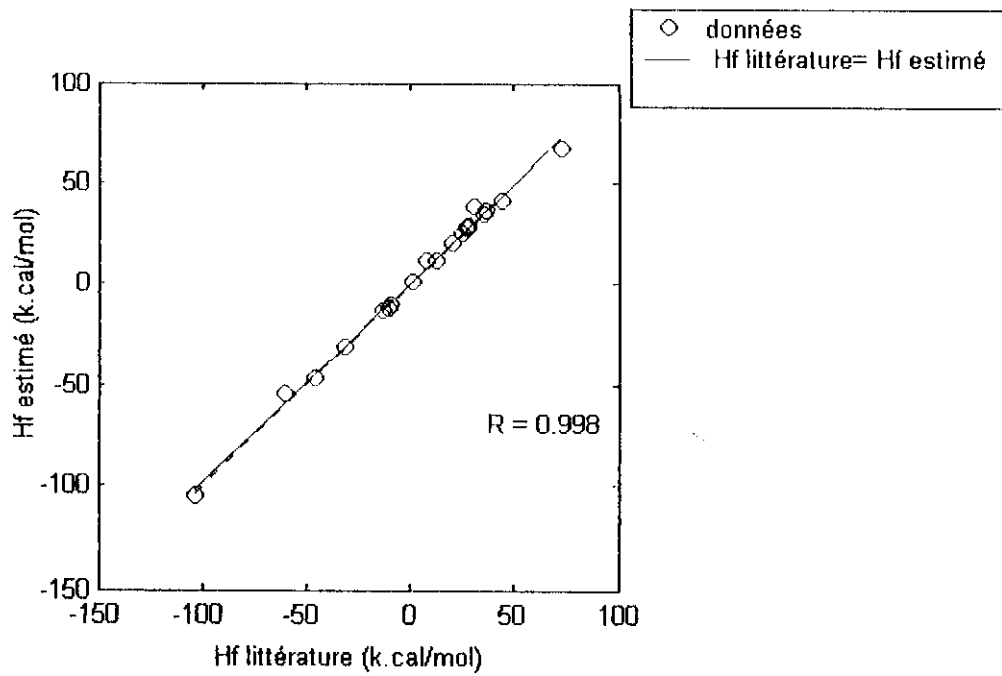


Figure.IV.3 Comparaison de Hf estimé et Hf littérature (base de test).

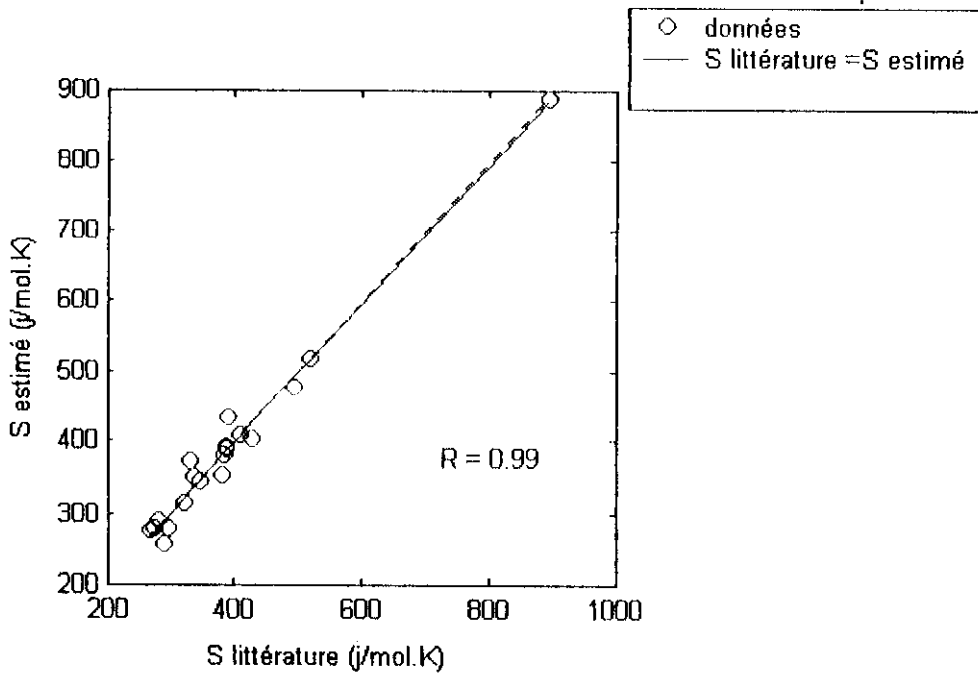


Figure.IV.4 Comparaison de S estimé et S littérature (base de test).

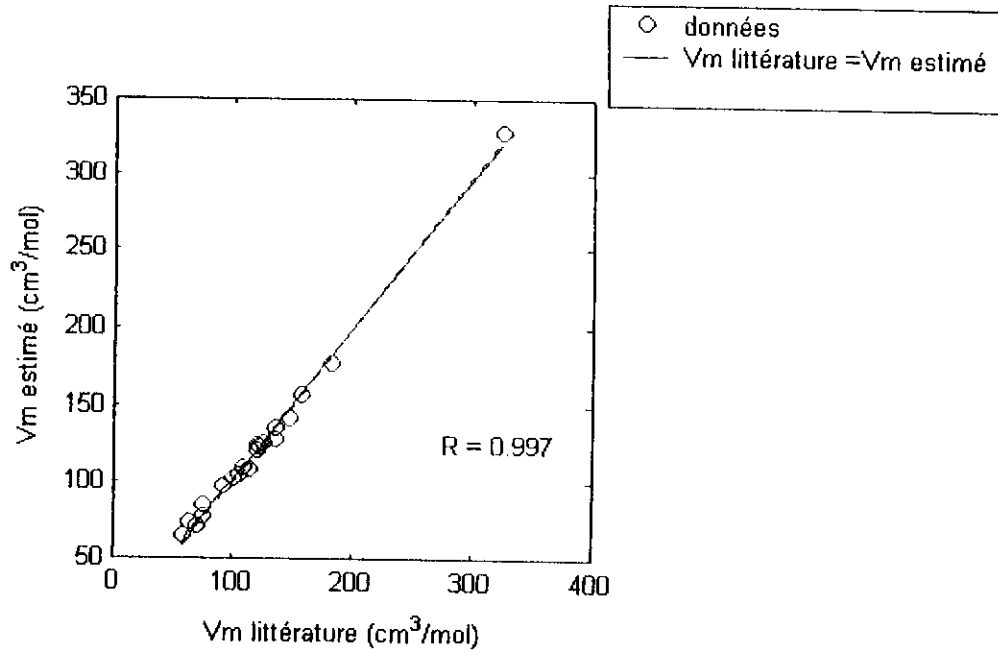


Figure.IV.5 Comparaison de V_m estimé et V_m littérature (base de test).

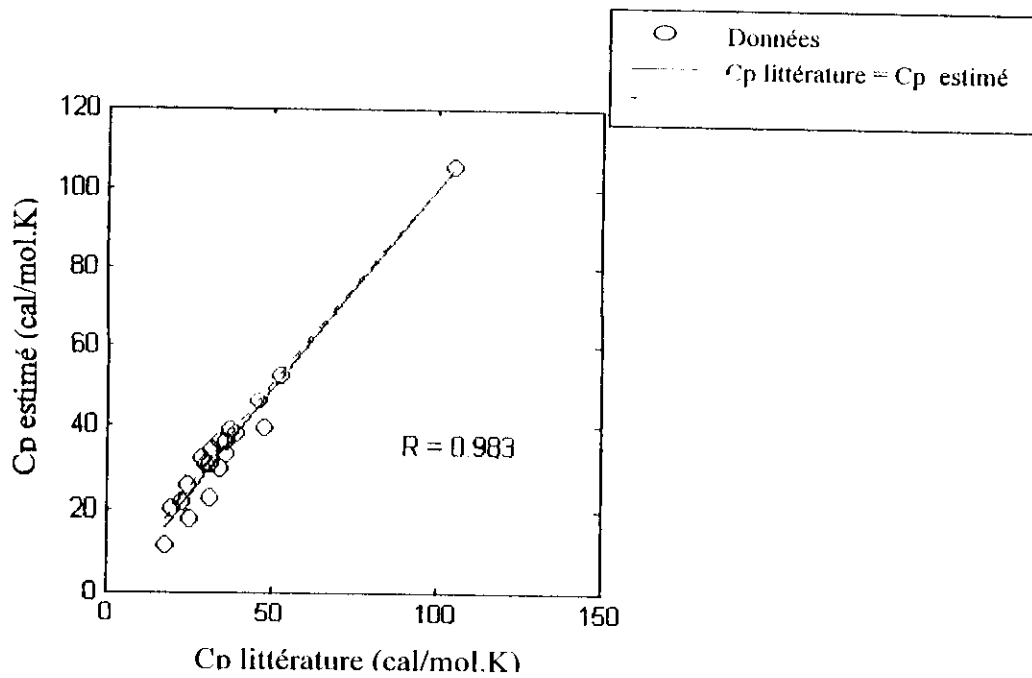


Figure.IV.6 Comparaison de C_p estimé et C_p littérature (base de test).

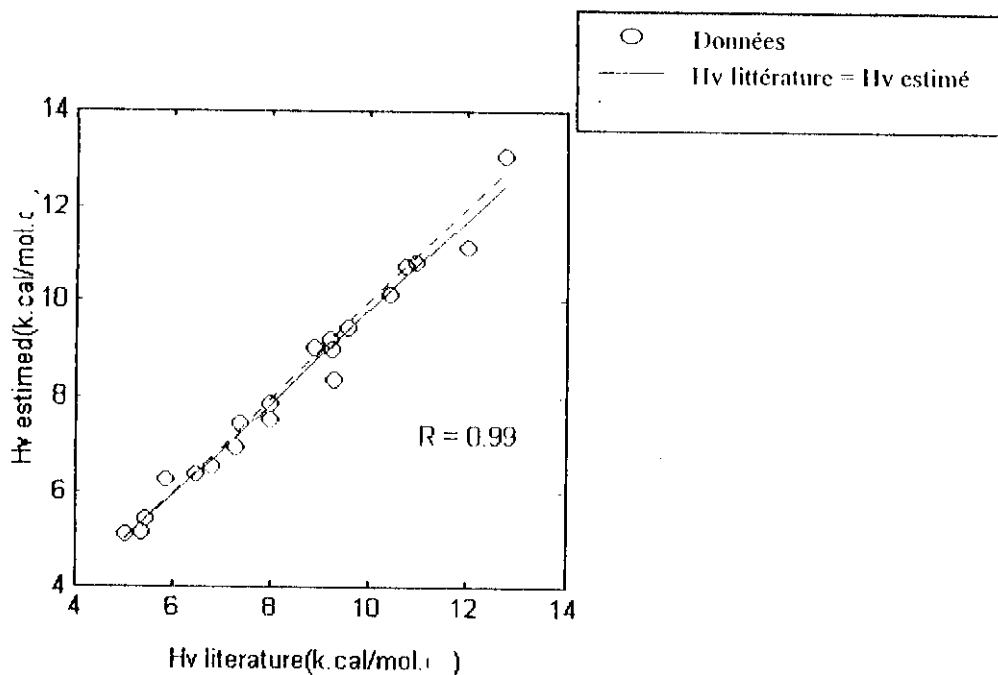


Figure.IV.5 Comparaison de Hv estimé et Hv littérature (base de test).

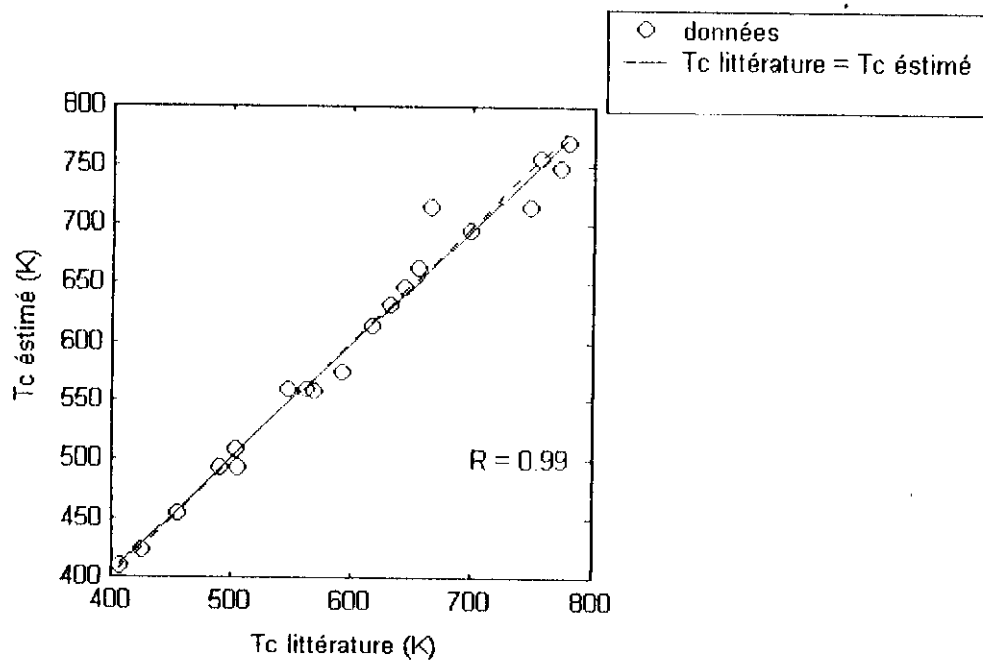


Figure.IV.8 Comparaison de Tc estimé et Tc littérature (base de test).

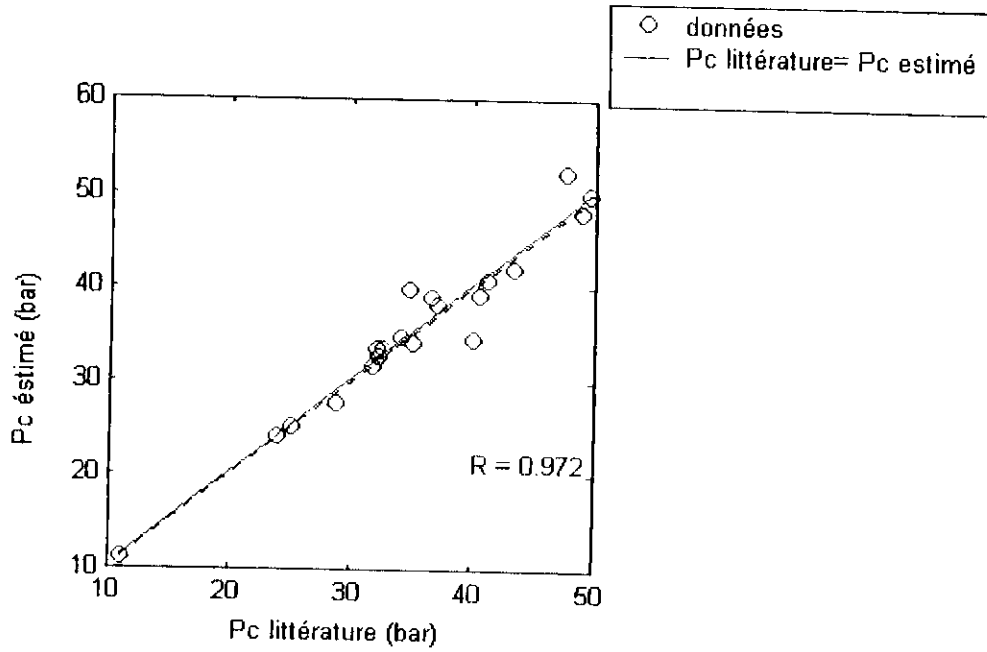


Figure.IV.9 Comparaison de Pc estimé et Pc littérature (base de test).

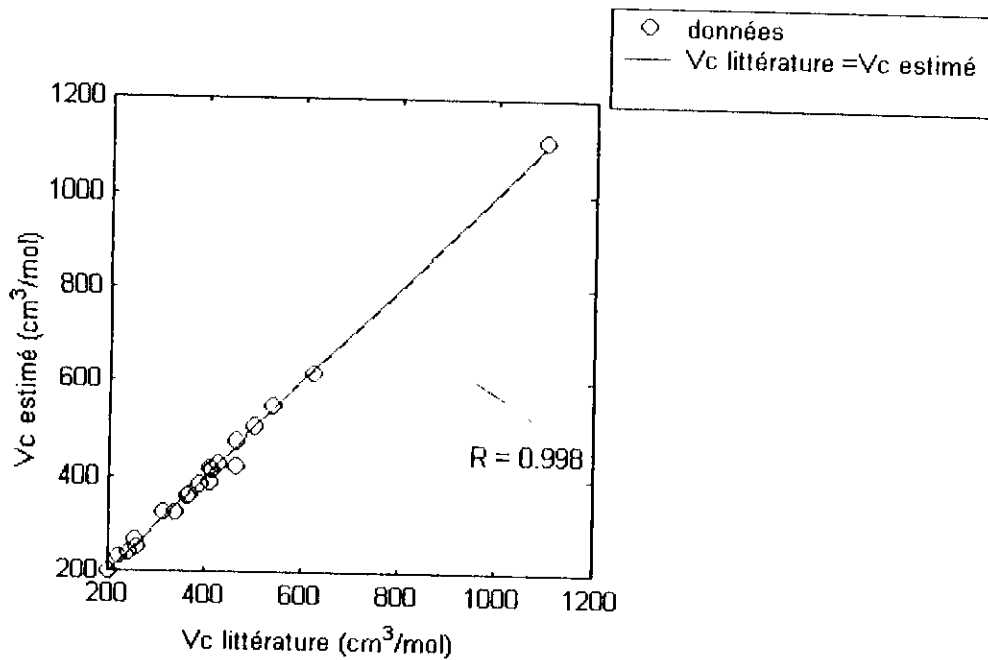


Figure.IV.10 Comparaison de Vc estimé et Vc littérature (base de test).

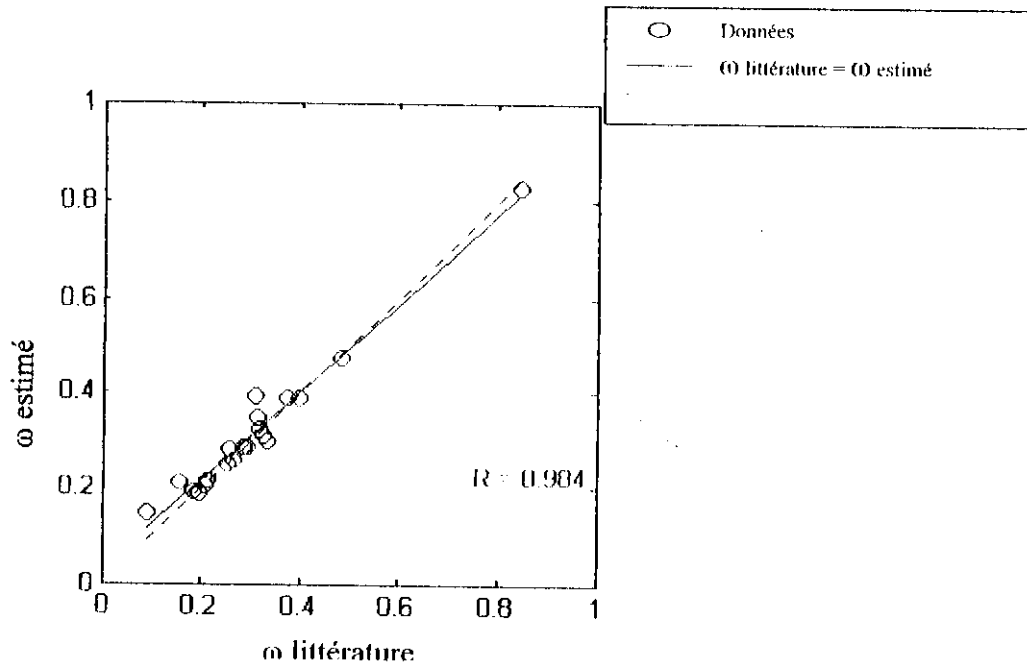


Figure.IV.11 Comparaison de ω estimé et ω littérature (base de test).

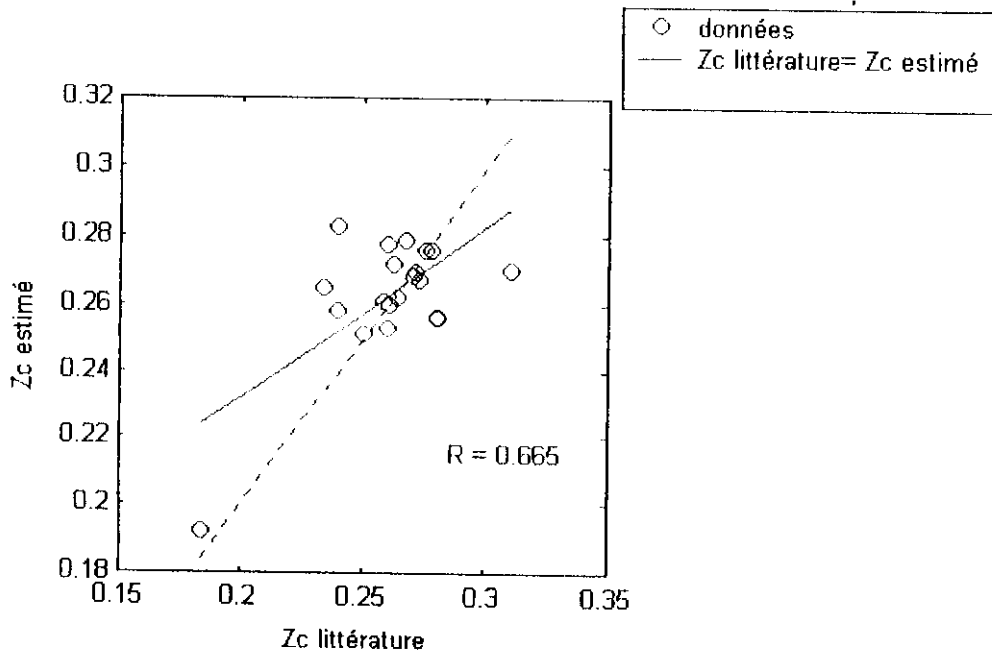


Figure.IV.12 Comparaison de Z_c estimé et Z_c littérature (base de test).

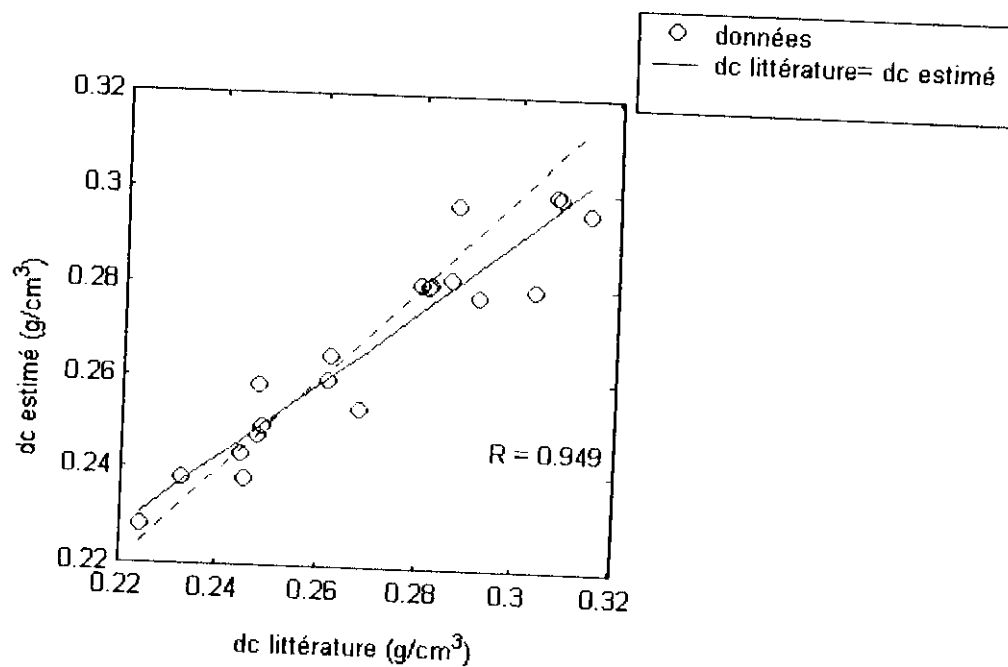


Figure.IV.13 Comparaison de dc estimé et dc littérature (base de test).

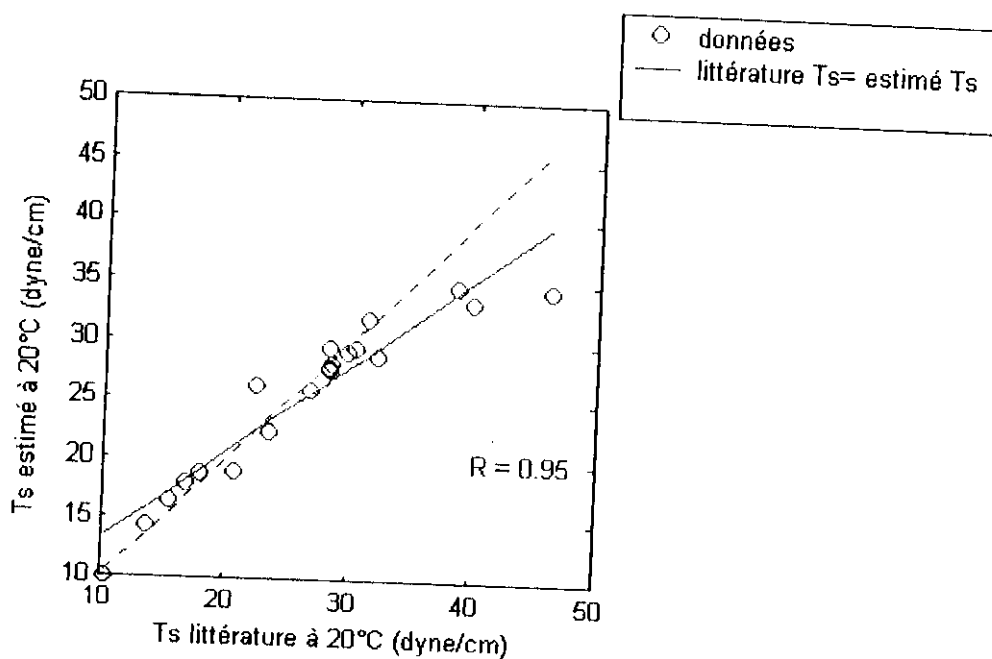


Figure.IV.14 Comparaison de Ts estimé et Ts littérature (base de test).

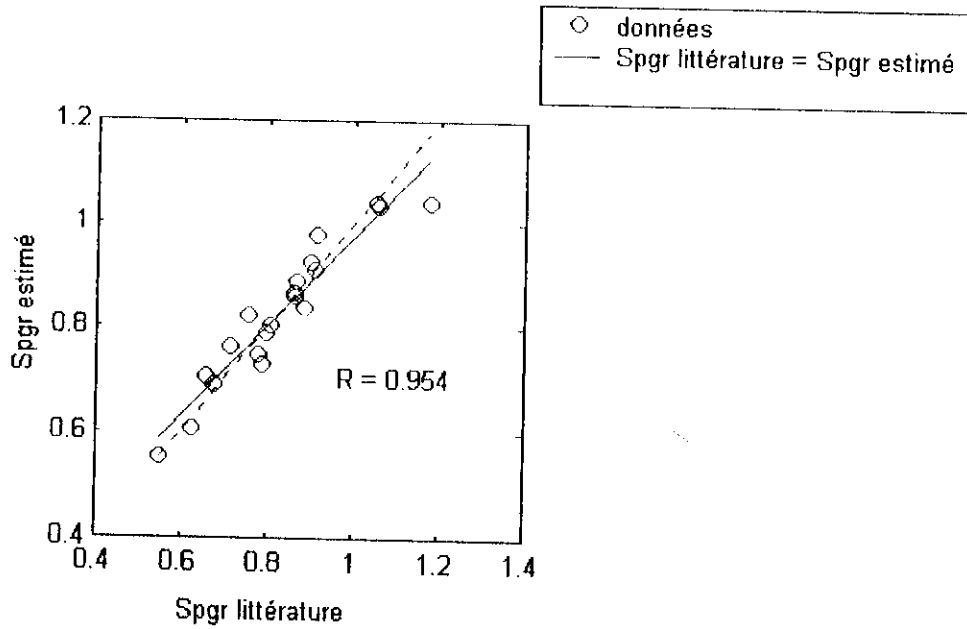


Figure.IV.15. : Comparaison de spgr estimé et spgr littérature (base de test).

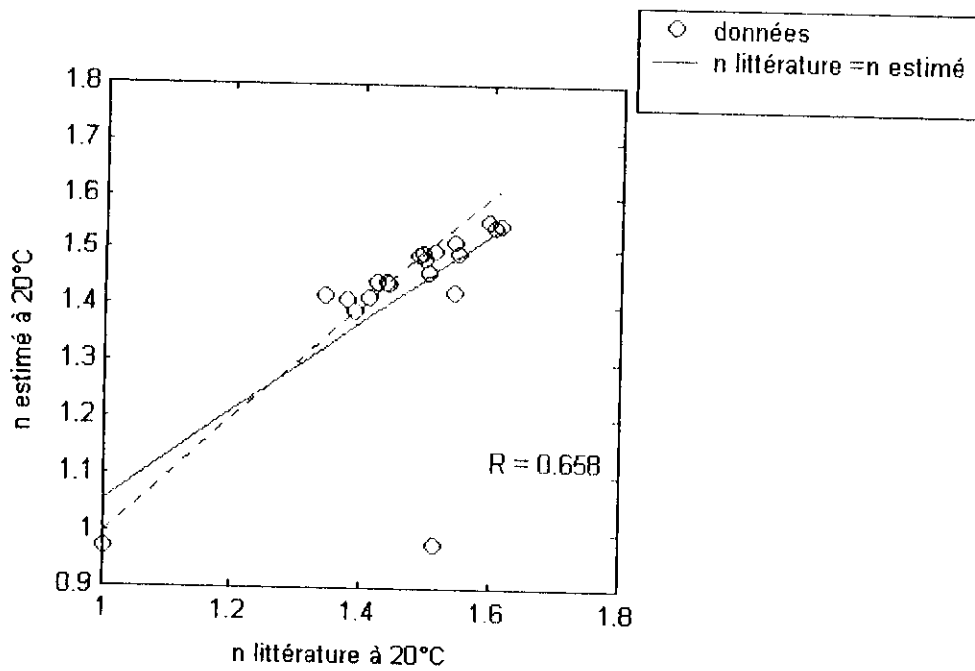


Figure.IV.16 Comparaison de n estimé et n littérature (base de test).

Tableau. IV.10 Comparaison des prédictions Tc, Pc, Vc, Teb, G, Hf, S et Cp (base de test).

Méthodes	Propriétés	Ecart moyen
Réseau de neurones	Tc	1.61
Joback		0.74
Réseau de neurones	Pc	3.84
Joback		3.43
Réseau de neurones	Vc	2.27
Joback		1.56
Réseau de neurones	Teb	1.75
Joback		2.81
Réseau de neurones	Gf	8.29
Tan et Truong		2.98
Réseau de neurones	Hf	9.00
Tan et Trong		7.93
Réseau de neurone	S	3.79
Tan et Trong		0.72
Réseau de neurone	Cp	9.00
Tan et Trong		3.09

La comparaison des performances du réseau développé dans cette étude avec la littérature (base de test) est montrée sur les figures précédentes :

On constate généralement un alignement parfait des résultats simulés par le réseau autour de la ligne de 45° (ligne rouge) ce qui est confirmé par des coefficients de corrélation (R) proche de l'unité, sauf dans le cas des propriétés suivante : n, spgr, Zc ou on note une certaine dispersion des données autour de la ligne rouge. Cela probablement est du, soit que ces deux dernières ne peuvent pas être modélisées par le modèle, soit au bruit important existant dans les données relatives à ces deux propriétés.

La comparaison des résultats estimés par réseau de neurone et les résultats calculés par contribution de groupes conventionnels (Joback et Tran-Truong) pour quelques propriétés a permis de conclure de la fiabilité du modèle et de son pouvoir prédictif. Cependant la différence importante constatée dans le cas des propriétés thermodynamiques peut être expliquée par l'utilisation d'un environnement (groupements) différent.

Les poids des connexions W_{ij} (l'indice i pour la couche considérée et j pour la couche précédente), ainsi que les biais des différents neurones des réseaux retenus pour le calcul des différentes propriétés sont donnés en Annexe3 (tableau 1 à 5).

IV.2 Prédiction des propriétés des fractions pétrolières

L'accomplissement de cette étude a nécessité le recueil de données expérimentales concernant quelques propriétés physiques des fractions pétrolières (d , T_{eb} , n , M , $spgr$). Celles qui ne sont pas disponibles ont été, quant à elle, estimées par des corrélations basées sur la connaissance du nombre d'atome de carbone équivalent (ECN).

La base de données est constituée de 280 fractions pétrolières issues de divers pétroles : données disponibles au sein du Laboratoire de Valorisation des Energies Fossiles ou ce sont recueillies à partir des publications scientifiques. 224 (80%) fractions allant de 35°C à 524°C sont réservées pour l'apprentissage et 56 fractions (20%) dont la température varie 54°C à 502.78°C constituent la base de test (Annexe 2).

Développement des réseaux de neurones :

Après plusieurs essais, Les réseaux de neurones proposés sont des réseaux à trois couches :

- une couche d'entrée, composée de trois neurones correspondant à la densité à 20°C, à l'indice de réfraction à 20°C et à la masse moléculaire.
- une couche cachée, composée de 5 neurones.
- une couche de sortie, composée des neurones correspondant aux propriétés qu'on veut prédire.

Tableau IV.11 L'intervalle des données utilisées pour l'entraînement des réseaux (vecteur d'entrée).

Densité (d_{20})	0.616-0.924
Indice de réfraction (n_{20})	1.361-1.509
Masse moléculaire (M)	73-571

IV.2.1 Résultats et interprétation

Nous présentons dans les tableaux ci-après le comportement de la base de test (56 fractions) par rapport au réseau pour chacune des propriétés étudiées.

Tableau IV.12 Résultats obtenus pour la chaleur spécifique standard Cp (j/mol.K).

N° FR	Cp (lit)	Cp (est)	écart (%)	N° FR	Cp (lit)	Cp (est)	écart (%)
1	172.2579	172.2996	0.02	29	303.5836	305.6021	0.66
2	175.2087	178.9355	2.13	30	308.7185	309.8678	0.37
3	180.9384	179.1546	0.99	31	325.2692	327.2146	0.6
4	183.0326	192.9641	5.43	32	325.5644	319.2538	1.94
5	192.7023	197.669	2.58	33	328.0298	318.323	2.96
6	197.7457	203.2698	2.79	34	340.0414	347.9473	2.32
7	201.245	214.9006	6.79	35	366.8219	363.068	1.02
8	204.6755	201.5812	1.51	36	321.8663	335.3863	4.2
9	208.3089	204.8091	1.68	37	403.2459	417.3155	3.49
10	211.725	216.1326	2.08	38	352.8004	392.5281	11.26
11	214.5006	220.6315	2.86	39	445.6342	469.6607	5.39
12	215.9322	216.9653	0.48	40	473.4187	486.7105	2.81
13	220.3888	223.9741	1.63	41	509.6194	478.3805	6.13
14	220.4911	225.076	2.08	42	516.1545	582.4285	12.84
15	223.704	217.4276	2.81	43	562.1571	600.2816	6.78
16	224.0872	224.8273	0.33	44	591.1758	601.953	1.82
17	231.7383	233.6508	0.83	45	589.7758	613.7141	4.06
18	234.343	236.6827	1	46	585.408	576.1832	1.58
19	236.7495	238.2554	0.64	47	626.8064	635.7664	1.43
20	241.9202	238.4623	1.43	48	624.4883	660.0321	5.69
21	251.6788	252.0124	0.13	49	685.7756	607.5097	11.41
22	255.2527	253.7782	0.58	50	702.0462	665.7422	5.17
23	259.404	264.549	1.98	51	707.9323	697.5636	1.46
24	261.6696	253.7291	3.03	52	750.5078	732.3919	2.41
25	264.5616	260.9473	1.37	53	777.4711	771.8211	0.73
26	267.301	265.7117	0.59	54	796.6771	787.8676	1.11
27	272.7566	272.4972	0.1	55	902.4715	900.8343	0.18
28	277.2747	282.2713	1.8	56	1042.4622	940.9761	9.74
moyenne							2.84

Tableau IV.13 Résultats obtenus pour l'enthalpie standard de formation Hf (k.j/mol).

N° FR	Hf (lit)	Hf (est)	écart (%)	N° FR	Hf (lit)	Hf (est)	écart (%)
1	-118.8716	-118.9061	0.03	29	-227.3471	-229.0144	0.73
2	-121.3091	-124.3874	2.54	30	-231.5885	-232.5379	0.41
3	-126.0418	-124.5684	1.17	31	-245.2595	-246.8664	0.66
4	-127.7716	-135.975	6.42	32	-245.5033	-240.2908	2.12
5	-135.7588	-139.8613	3.02	33	-247.5398	-239.5219	3.24
6	-139.9246	-144.4876	3.26	34	-257.4614	-263.9916	2.54
7	-142.8151	-154.0947	7.9	35	-279.5821	-276.4814	1.11
8	-145.6487	-143.0928	1.75	36	-242.4487	-253.6163	4.61
9	-148.6499	-145.7591	1.94	37	-309.6685	-321.29	3.75
10	-151.4716	-155.1123	2.4	38	-268.0004	-300.8156	12.24
11	-153.7643	-158.8284	3.29	39	-344.6814	-364.5273	5.76
12	-154.9468	-155.8002	0.55	40	-367.6314	-378.6105	2.99
13	-158.6279	-161.5894	1.87	41	-397.5333	-371.7299	6.49
14	-158.7124	-162.4996	2.39	42	-402.9313	-457.6739	13.59
15	-161.3663	-156.182	3.21	43	-440.9297	-472.4206	7.14
16	-161.6828	-162.2942	0.38	44	-464.8992	-473.8012	1.91
17	-168.0027	-169.5824	0.94	45	-463.7428	-483.5159	4.26
18	-170.1542	-172.0868	1.14	46	-460.1349	-452.5152	1.66
19	-172.1419	-173.3858	0.72	47	-494.3302	-501.7312	1.5
20	-176.4129	-173.5567	1.62	48	-492.4154	-521.7747	5.96
21	-184.4736	-184.7491	0.15	49	-543.0389	-478.3911	11.9
22	-187.4256	-186.2077	0.65	50	-556.4785	-526.4913	5.39
23	-190.8546	-195.1044	2.23	51	-561.3405	-552.7759	1.53
24	-192.726	-186.1671	3.4	52	-596.5079	-581.5441	2.51
25	-195.1148	-192.1294	1.53	53	-618.7797	-614.1127	0.75
26	-197.3775	-196.0648	0.67	54	-634.6439	-627.3673	1.15
27	-201.8839	-201.6696	0.11	55	-722.0304	-720.6781	0.19
28	-205.6159	-209.7431	2.01	56	-837.6631	-753.8353	10.01
moyenne							3.1

Tableau IV.14 Résultats obtenus par la chaleur latente de vaporisation Hv (cal/g).

N° FR	Hv (lit)	Hv (est)	écart (%)	N° FR	Hv (lit)	Hv (est)	écart (%)
1	82.834	83.6168	0.95	29	62.3901	62.4598	0.11
2	82.1458	82.0525	0.11	30	61.8605	61.8188	0.07
3	80.8553	80.2114	0.8	31	60.2376	60.4451	0.34
4	80.398	78.2596	2.66	32	60.2097	61.022	1.35
5	78.3789	77.3522	1.31	33	59.9786	60.8476	1.45
6	77.3821	76.4058	1.26	34	58.8881	58.6019	0.49
7	76.7116	74.0881	3.42	35	56.6488	57.2503	1.06
8	76.0702	76.8655	1.05	36	60.5612	59.6932	1.43
9	75.4074	76.1965	1.05	37	53.963	53.2224	1.37
10	74.7992	74.0287	1.03	38	57.79	54.8192	5.14
11	74.3153	73.2118	1.48	39	51.2565	50.004	2.44
12	74.0692	73.8868	0.25	40	49.6811	48.7543	1.87
13	73.3178	72.7117	0.83	41	47.8234	49.4154	3.33
14	73.3009	72.5282	1.05	42	47.5089	44.616	6.09
15	72.773	73.7801	1.38	43	45.4516	43.853	3.52
16	72.7107	72.5431	0.23	44	44.2787	43.7778	1.13
17	71.4993	71.2114	0.4	45	44.3333	43.4759	1.93
18	71.1	70.7709	0.46	46	44.5049	44.909	0.91
19	70.7367	70.5412	0.28	47	42.9513	42.7061	0.57
20	69.9738	70.4173	0.63	48	43.0342	41.9561	2.51
21	68.5963	68.654	0.08	49	40.9857	43.626	6.44
22	68.1111	68.3975	0.42	50	40.4874	41.8088	3.26
23	67.5596	67.0387	0.77	51	40.3114	40.9465	1.58
24	67.264	68.2405	1.45	52	39.1008	39.8659	1.96
25	66.8921	67.4021	0.76	53	38.3861	38.688	0.79
26	66.5451	66.6576	0.17	54	37.8994	38.3493	1.19
27	65.8693	65.7843	0.13	55	35.5042	35.5744	0.2
28	65.3244	64.9058	0.64	56	32.917	34.3213	4.27
moyenne							1.46

Tableau IV.15 Résultats obtenus pour la température d'ébullition T_{eb} (K).

N° FR	Teb (lit)	Teb (est)	écart (%)	N° FR	Teb (lit)	Teb (cst)	écart (%)
1	327.59	325.5065	0.64	29	463.15	465.2448	0.45
2	331.15	333.1852	0.61	30	469.15	472.652	0.75
3	338.15	339.6056	0.43	31	479.26	480.7236	0.31
4	340.65	351.7972	3.27	32	480.37	478.3721	0.42
5	352.15	357.049	1.39	33	485.65	482.0762	0.74
6	358.15	363.199	1.41	34	490.65	495.6956	1.03
7	364.26	379.4215	4.16	35	510.65	509.4933	0.23
8	366.15	361.2718	1.33	36	518.26	520.0611	0.35
9	370.15	365.2887	1.31	37	535.65	545.1524	1.77
10	374.15	377.9657	1.02	38	538.15	533.5746	0.85
11	378.15	384.3362	1.64	39	560.15	573.297	2.35
12	379.15	379.461	0.08	40	578.82	595.9856	2.97
13	383.65	386.5324	0.75	41	598.15	584.116	2.35
14	385.15	387.5333	0.62	42	610.12	626.1503	2.63
15	387.15	380.5313	1.71	43	618.15	633.2174	2.44
16	389.15	388.4763	0.17	44	630.82	653.9268	3.66
17	395.65	396.7983	0.29	45	639.38	645.4949	0.96
18	398.15	399.5858	0.36	46	647.21	627.0592	3.11
19	400.73	401.452	0.18	47	653.82	654.3004	0.07
20	406.15	403.5443	0.64	48	661.93	666.9278	0.76
21	415.65	415.3045	0.08	49	668.15	637.267	4.62
22	419.26	417.6255	0.39	50	677.36	673.995	0.5
23	423.71	428.0339	1.02	51	686.3	684.494	0.26
24	426.15	420.1807	1.4	52	690.03	691.2945	0.18
25	428.65	426.0281	0.61	53	700.32	700.8298	0.07
26	432.04	432.8977	0.2	54	706.67	708.1663	0.21
27	438.15	440.2164	0.47	55	751.47	747.6853	0.5
28	440.65	445.5803	1.12	56	775.93	751.5824	3.14
moyenne							1.16

Tableau IV.16 Résultat obtenu pour le facteur de caractérisation Kuop.

N° FR	Kuop (lit)	Kuop (est)	écart (%)	N° FR	Kuop (lit)	Kuop (est)	écart (%)
1	12.7447	12.8046	0.47	29	11.8006	11.8029	0.02
2	12.6789	12.6651	0.11	30	11.7916	11.7909	0.01
3	12.5653	12.5507	0.12	31	11.7662	11.7764	0.09
4	12.528	12.3941	1.07	32	11.7658	11.7813	0.13
5	12.3801	12.3346	0.37	33	11.7625	11.7772	0.12
6	12.3161	12.2718	0.36	34	11.7479	11.7565	0.07
7	12.2762	12.1326	1.17	35	11.724	11.7437	0.17
8	12.2402	12.2911	0.42	36	11.7709	11.7637	0.06
9	12.2051	12.2517	0.38	37	11.7076	11.7248	0.15
10	12.1746	12.1456	0.24	38	11.7351	11.7296	0.05
11	12.1515	12.0998	0.43	39	11.7093	11.7292	0.17
12	12.1401	12.1342	0.05	40	11.7216	11.7484	0.23
13	12.1069	12.0864	0.17	41	11.7496	11.7359	0.12
14	12.1062	12.0802	0.21	42	11.756	11.8058	0.42
15	12.0841	12.1261	0.35	43	11.8116	11.8331	0.18
16	12.0816	12.0736	0.07	44	11.855	11.8854	0.26
17	12.035	12.0262	0.07	45	11.8528	11.8528	0
18	12.0206	12.0117	0.07	46	11.8459	11.8015	0.37
19	12.008	12.0022	0.05	7	11.9157	11.8884	0.23
20	11.9827	11.9914	0.07	48	11.9116	11.956	0.37
21	11.941	11.9407	0	49	12.0296	11.8406	1.57
22	11.9274	11.9316	0.04	50	12.0631	11.9824	0.67
23	11.9125	11.8951	0.15	51	12.0754	12.0583	0.14
24	11.9049	11.9218	0.14	52	12.1657	12.1332	0.27
25	11.8954	11.9016	0.05	53	12.2234	12.2379	0.12
26	11.8869	11.8799	0.06	54	12.2642	12.2468	0.14
27	11.8709	11.8594	0.1	55	12.4726	12.4465	0.21
28	11.8586	11.8453	0.11	56	12.6523	12.5617	0.72
moyenne							0.25

Chapitre IV Application du modèle Perceptron multicouches dans la prédiction des propriétés des hydrocarbures pur et des fractions pétrolières

Tableau IV.17 Résultat obtenu pour le point d'aniline Pa (K).

N° FR	Pa (lit)	Pa (est)	écart (%)	N° FR	Pa (lit)	Pa (est)	écart (%)
1	324.7867	325.1797	0.12	29	333.6202	333.9787	0.11
2	324.9676	325.4483	0.15	30	333.9928	334.415	0.13
3	325.3216	325.48	0.05	31	335.2053	335.5786	0.11
4	325.4519	326.1415	0.21	32	335.2271	335.0599	0.05
5	326.0596	326.3798	0.1	33	335.4092	335.1613	0.07
6	326.3803	326.6252	0.08	34	336.3019	337.1257	0.24
7	326.6043	327.2043	0.18	35	338.3228	338.2826	0.01
8	326.8251	326.4505	0.11	36	334.9546	335.588	0.19
9	327.0601	326.6282	0.13	37	341.1348	342.2737	0.33
10	327.2823	327.4032	0.04	38	337.2596	340.6094	0.99
11	327.4636	327.6296	0.05	39	344.4914	346.0531	0.45
12	327.5574	327.4093	0.05	40	346.7369	348.11	0.4
13	327.8506	327.9317	0.02	41	349.7124	346.9165	0.8
14	327.8573	328.0264	0.05	42	350.2553	354.4135	1.19
15	328.0698	327.4147	0.2	43	354.1239	356.2509	0.6
16	328.0952	327.9378	0.05	44	356.6046	357.8281	0.34
17	328.6052	328.6063	0	45	356.4842	356.9937	0.14
18	328.78	328.8409	0.02	46	356.1091	353.8884	0.62
19	328.9419	328.9391	0	7	359.6905	359.0097	0.19
20	329.2916	328.9139	0.11	48	359.4884	362.3081	0.78
21	329.9575	329.9383	0.01	49	364.8886	356.661	2.25
22	330.2033	330.0604	0.04	50	366.3418	363.0908	0.89
23	330.49	330.8666	0.11	51	366.8694	366.6123	0.07
24	330.647	330.0678	0.18	52	370.7154	369.8433	0.24
25	330.8481	330.6011	0.07	53	373.1772	373.9697	0.21
26	331.0391	331.0083	0.01	54	374.9427	374.308	0.17
27	331.4212	331.5581	0.04	55	384.8339	382.6765	0.56
28	331.7393	332.218	0.14	56	398.315	389.5384	2.2
moyenne							0.3

Tableau IV.18 Résultats obtenus facteur acentrique ω .

N° FR	ω (lit)	ω (est)	écart (%)	N° FR	ω (lit)	ω (est)	écart (%)
1	0.2623	0.2691	2.59	29	0.4626	0.4686	1.3
2	0.2621	0.2773	5.8	30	0.4704	0.4776	1.53
3	0.2756	0.2781	0.91	31	0.4956	0.5018	1.25
4	0.2787	0.2957	6.1	32	0.4961	0.491	1.03
5	0.2935	0.3018	2.83	33	0.4998	0.493	1.36
6	0.3012	0.3081	2.29	34	0.5181	0.5336	2.99
7	0.3065	0.3224	5.19	35	0.559	0.5571	0.34
8	0.3117	0.3043	2.37	36	0.4904	0.5009	2.14
9	0.3173	0.3086	2.74	37	0.6145	0.6368	3.63
10	0.3178	0.3263	2.67	38	0.5376	0.6037	12.3
11	0.3267	0.3319	1.59	39	0.6791	0.7102	4.58
12	0.3289	0.3267	0.67	40	0.7215	0.7478	3.65
13	0.3357	0.3383	0.77	41	0.7767	0.7261	6.51
14	0.3359	0.3404	1.34	42	0.7867	0.8644	9.88
15	0.3408	0.327	4.05	43	0.8568	0.897	4.69
16	0.3366	0.3387	0.62	44	0.9011	0.921	2.21
17	0.353	0.3534	0.11	45	0.8989	0.909	1.12
18	0.357	0.3585	0.42	46	0.8923	0.8546	4.23
19	0.3606	0.3608	0.06	47	0.9554	0.944	1.19
20	0.3638	0.3604	0.93	48	0.9519	1	5.05
21	0.3834	0.3826	0.21	49	1.0453	0.9041	13.51
22	0.3842	0.3853	0.29	50	1.0701	1.0119	5.44
23	0.3952	0.4027	1.9	51	1.0791	1.0712	0.73
24	0.3939	0.3856	2.11	52	1.144	1.125	1.66
25	0.4031	0.397	1.51	53	1.1851	1.1924	0.62
26	0.4025	0.4058	0.82	54	1.2144	1.1978	1.37
27	0.4156	0.4175	0.46	55	1.3757	1.3363	2.86
28	0.4177	0.4315	3.3	56	1.5892	1.4563	8.36
moyenne							2.86

Chapitre IV Application du modèle Perceptron multicouches dans la prédiction des propriétés des hydrocarbures pur et des fractions pétrolières

Tableau IV.19 Résultats obtenus pour la température de congélation Tcong (K).

N° FR	Tcong (lit)	Tcong (est)	écart (%)	N°FR	Tcong (lit)	Tcong (est)	écart (%)
1	165.5088	166.315	0.49	29	214.2274	214.9802	0.35
2	166.7706	169.153	1.43	30	215.8965	216.8618	0.45
3	169.1919	169.707	0.3	31	221.1852	221.889	0.32
4	170.0678	174.9059	2.84	32	221.2783	219.656	0.73
5	174.0514	176.6277	1.48	33	222.0543	220.0388	0.91
6	176.0912	178.4584	1.34	34	225.7946	228.381	1.15
7	177.4919	182.4984	2.82	35	233.9055	233.0829	0.35
8	178.8537	177.5698	0.72	36	220.1088	221.8645	0.8
9	180.2841	178.7541	0.85	37	244.4799	248.5915	1.68
10	181.6181	183.1912	0.87	38	229.6968	242.1762	5.43
11	182.6944	184.6863	1.09	39	256.2045	262.1988	2.34
12	183.2468	183.3615	0.06	40	263.5898	268.4732	1.85
13	184.9555	186.1162	0.63	41	272.8945	264.8995	2.93
14	184.9945	186.5862	0.86	42	274.5385	288.2396	4.99
15	186.2157	183.4779	1.47	43	285.828	293.3037	2.62
16	186.3608	186.2968	0.03	44	292.712	295.6864	1.02
17	189.233	189.6892	0.24	45	292.3838	294.7559	0.81
18	190.2003	190.8556	0.34	46	291.3574	286.5516	1.65
19	191.0893	191.3874	0.16	47	300.9362	299.9319	0.33
20	192.9849	191.3979	0.82	48	300.4084	307.7874	2.46
21	196.5094	196.3683	0.07	49	314.0462	294.3356	6.28
22	197.7836	196.9918	0.4	50	317.5624	308.9503	2.71
23	199.2526	200.8466	0.8	51	318.8243	317.0842	0.55
24	200.0496	197.1102	1.47	52	327.7984	314.1977	4.15
25	201.062	199.6283	0.71	53	333.3492	332.6732	0.2
26	202.016	201.5775	0.22	54	337.244	333.3494	1.15
27	203.9019	204.1288	0.11	55	357.8936	351.3911	1.82
28	205.4497	207.1253	0.82	56	383.4133	369.4506	3.64
moyenne							1.38

Tableau IV.20 Résultats obtenus pour la température critique Tc (K).

N° FR	Tc (lit)	Tc (est)	écart (%)	N°FR	Tc (lit)	Tc (est)	écart (%)
1	493.3923	490.9114	0.5	29	650.3532	651.0954	0.11
2	498.0812	501.2977	0.65	30	654.8304	657.1933	0.36
3	507.0003	509.6087	0.51	31	668.65	668.7349	0.01
4	510.2	525.3343	2.97	32	668.8883	664.1081	0.71
5	524.5645	531.7042	1.36	33	670.8685	665.8859	0.74
6	531.796	538.8142	1.32	34	680.2503	684.9548	0.69
7	536.7116	555.7211	3.54	35	699.7011	697.2334	0.35
8	541.4511	536.0223	1	36	665.8821	670.0704	0.63
9	546.3868	540.64	1.05	37	723.3246	731.9962	1.2
10	550.9499	555.8354	0.89	38	689.7581	718.779	4.21
11	554.6031	562.0647	1.35	39	747.4041	758.8852	1.54
12	556.4686	556.9906	0.09	40	761.5233	771.8745	1.36
13	562.1957	565.6376	0.61	41	778.2497	764.6397	1.75
14	562.3258	566.8673	0.81	42	781.0884	802.2355	2.71
15	566.3786	557.8539	1.51	43	799.6953	809.9124	1.28
16	566.858	567.015	0.03	44	810.3249	813.8443	0.43
17	576.2502	577.1385	0.15	45	809.8298	812.3581	0.31
18	579.3721	580.6283	0.22	46	808.2741	799.9906	1.02
19	582.2232	582.48	0.04	47	822.3656	819.5174	0.35
20	588.2433	583.554	0.8	48	821.6135	830.5546	1.09
21	599.2255	597.8061	0.24	49	840.1951	811.2435	3.45
22	603.1279	599.8832	0.54	50	844.712	832.5739	1.44
23	607.5833	611.2541	0.6	51	846.307	843.3871	0.35
24	609.9806	601.3656	1.41	52	857.27	853.1513	0.48
25	613.0058	608.3092	0.77	53	863.7319	864.372	0.07
26	615.8362	614.8064	0.17	54	868.1277	865.1	0.35
27	621.3732	622.3865	0.16	55	889.6832	884.5267	0.58
28	625.8607	629.7742	0.63	56	912.7672	901.3221	1.25
moyenne							0.94

Chapitre IV Application du modèle Perceptron multicouches dans la prédiction des propriétés des hydrocarbures pur et des fractions pétrolières

Tableau IV.21 Résultats obtenus pour la pression critique Pc (atm).

N° FR	Pc (lit)	Pc (est)	écart (%)	N° FR	Pc (lit)	Pc (est)	écart (%)
1	31.9203	32.2701	1.1	29	22.5072	22.5218	0.06
2	31.6843	31.6393	0.14	30	22.2295	22.1454	0.38
3	31.2188	31.1438	0.24	31	21.3771	21.4637	0.41
4	31.0469	30.1818	2.79	32	21.3625	21.7325	1.73
5	30.249	29.7918	1.51	33	21.2411	21.6324	1.84
6	29.8333	29.3555	1.6	34	20.6683	20.4914	0.86
7	29.5462	28.3102	4.18	35	19.4953	19.7489	1.3
8	29.2664	29.5202	0.87	36	21.5472	21.2907	1.19
9	28.9722	29.2379	0.92	37	18.1009	17.6989	2.22
10	28.6978	28.3163	1.33	38	20.0923	18.4788	8.03
11	28.4767	27.9296	1.92	39	16.7179	16.1349	3.49
12	28.3633	28.2417	0.43	40	15.9263	15.3709	3.49
13	28.0135	27.7192	1.05	41	15.008	15.8024	5.29
14	28.0056	27.6436	1.29	42	14.8543	13.7254	7.6
15	27.7566	28.1867	1.55	43	13.8627	13.3087	4
16	27.727	27.6297	0.35	44	13.3088	13.0703	1.79
17	27.1459	27.0176	0.47	45	13.3344	13.1808	1.15
18	26.9518	26.8078	0.53	46	13.415	13.8424	3.19
19	26.7741	26.6937	0.3	47	12.6926	12.8137	0.95
20	26.3981	26.6206	0.84	48	12.7308	12.2619	3.68
21	25.7098	25.7609	0.2	49	11.8025	13.2456	12.23
22	25.4647	25.631	0.65	50	11.5813	12.1506	4.92
23	25.1848	24.9391	0.98	51	11.5036	11.6367	1.16
24	25.0342	25.5338	2	52	10.9754	11.168	1.75
25	24.8441	25.1144	1.09	53	10.6689	10.6503	0.17
26	24.6662	24.7142	0.19	54	10.4625	10.6091	1.4
27	24.3184	24.2517	0.27	55	9.4749	9.7427	2.83
28	24.0368	23.813	0.93	56	8.463	8.9825	6.14
moyenne							2.02

Tableau IV.22 Résultats obtenus pour le volume critique Vc (l/mol).

N° FR	Vc (lit)	Vc (est)	écart (%)	N° FR	Vc (lit)	Vc (est)	écart (%)
1	0.2999	0.2947	1.73	29	0.6079	0.616	1.33
2	0.3068	0.308	0.38	30	0.62	0.6284	1.36
3	0.3203	0.3441	7.44	31	0.6588	0.667	1.25
4	0.3252	0.3551	9.2	32	0.6595	0.6479	1.75
5	0.3478	0.3638	4.59	33	0.6652	0.6875	3.34
6	0.3597	0.371	3.15	34	0.6934	0.7138	2.94
7	0.3679	0.3874	5.3	35	0.7562	0.7464	1.3
8	0.3759	0.3587	4.58	36	0.6508	0.6573	1
9	0.3845	0.3665	4.67	37	0.8417	0.8866	5.34
10	0.3925	0.4019	2.4	38	0.7233	0.8593	18.8
11	0.399	0.4068	1.96	39	0.9411	0.9823	4.38
12	0.4023	0.3996	0.68	40	1.0062	1.0528	4.63
13	0.4128	0.4221	2.26	41	1.0912	1.0315	5.47
14	0.413	0.4251	2.92	42	1.1065	1.2231	10.54
15	0.4206	0.3986	5.22	43	1.2144	1.2436	2.41
16	0.4215	0.4192	0.54	44	1.2824	1.2908	0.65
17	0.4394	0.4457	1.43	45	1.2792	1.2991	1.56
18	0.4455	0.4557	2.29	46	1.2689	1.2204	3.82
19	0.4512	0.4583	1.58	47	1.366	1.3536	0.91
20	0.4633	0.4534	2.13	48	1.3606	1.4453	6.23
21	0.4862	0.492	1.2	49	1.5043	1.2763	15.16
22	0.4946	0.494	0.11	50	1.5425	1.4556	5.63
23	0.5043	0.5199	3.09	51	1.5563	1.5605	0.27
24	0.5096	0.4912	3.61	52	1.6561	1.6232	1.99
25	0.5164	0.5098	1.28	53	1.7194	1.7286	0.54
26	0.5228	0.5208	0.39	54	1.7644	1.7337	1.74
27	0.5356	0.5374	0.33	55	2.0126	1.9901	1.12
28	0.5462	0.5623	2.95	56	2.3409	2.1327	8.89
moyenne							3.42

Tableau IV.23 Résultats obtenus pour le facteur de compressibilité critique Zc.

N° FR	ZC (lit)	Zc (est)	écart (%)	N° FR	Zc (lit)	Zc (est)	écart (%)
1	0.2699	0.2703	0.16	29	0.2546	0.2542	0.17
2	0.2695	0.2696	0.03	30	0.2541	0.2535	0.22
3	0.2689	0.2679	0.35	31	0.2522	0.2517	0.19
4	0.2686	0.2672	0.52	32	0.2521	0.2526	0.18
5	0.2675	0.2668	0.25	33	0.2519	0.2509	0.38
6	0.2669	0.2664	0.18	34	0.2505	0.2495	0.41
7	0.2665	0.2654	0.4	35	0.2475	0.2479	0.15
8	0.2661	0.2669	0.31	36	0.2526	0.252	0.22
9	0.2656	0.2665	0.32	37	0.2435	0.2415	0.83
10	0.2652	0.2648	0.17	38	0.2491	0.2428	2.53
11	0.2649	0.2645	0.16	39	0.2389	0.237	0.8
12	0.2648	0.2649	0.06	40	0.2359	0.2338	0.91
13	0.2642	0.2638	0.16	41	0.2321	0.2349	1.21
14	0.2642	0.2636	0.23	42	0.2314	0.2263	2.21
15	0.2638	0.2649	0.4	43	0.2266	0.2254	0.53
16	0.2638	0.2639	0.04	44	0.2236	0.2233	0.13
17	0.2629	0.2626	0.12	45	0.2237	0.223	0.33
18	0.2626	0.2621	0.19	46	0.2242	0.2264	0.99
19	0.2623	0.262	0.12	47	0.2199	0.2206	0.3
20	0.2617	0.2622	0.18	48	0.2202	0.2167	1.58
21	0.2606	0.2603	0.11	49	0.214	0.224	4.69
22	0.2602	0.2602	0.01	50	0.2123	0.2162	1.82
23	0.2597	0.2589	0.31	51	0.2117	0.2117	0.02
24	0.2594	0.2603	0.33	52	0.2075	0.2091	0.76
25	0.2591	0.2594	0.12	53	0.2049	0.2046	0.12
26	0.2588	0.2588	0.01	54	0.203	0.2043	0.66
27	0.2582	0.258	0.06	55	0.1927	0.1934	0.36
28	0.2576	0.2568	0.33	56	0.1794	0.1874	4.44
moyenne							0.59

Tableau IV.24 Résultats obtenus pour le volume molaire V_m (l/mol).

N° FR	V_m (lit)	V_m (est)	écart (%)	N° FR	V_m (lit)	V_m (est)	écart (%)
1	0.1268	0.1225	3.39	29	0.195	0.195	0
2	0.1276	0.1249	2.12	30	0.1976	0.1973	0.15
3	0.1293	0.1332	3.02	31	0.2058	0.2063	0.24
4	0.1299	0.1352	4.08	32	0.2059	0.2021	1.85
5	0.1333	0.1372	2.93	33	0.2071	0.2022	2.37
6	0.1354	0.1389	2.58	34	0.2128	0.2168	1.88
7	0.1369	0.1433	4.67	35	0.2248	0.2236	0.53
8	0.1386	0.1363	1.66	36	0.2042	0.2073	1.52
9	0.1404	0.1381	1.64	37	0.2406	0.2486	3.33
10	0.1422	0.146	2.67	38	0.2186	0.2377	8.74
11	0.1437	0.1474	2.57	39	0.259	0.2716	4.86
12	0.1445	0.1457	0.83	40	0.2714	0.2794	2.95
13	0.147	0.1507	2.52	41	0.2882	0.2749	4.61
14	0.1471	0.1514	2.92	42	0.2913	0.3182	9.23
15	0.1489	0.1456	2.22	43	0.3139	0.3291	4.84
16	0.1492	0.1502	0.67	44	0.3288	0.3365	2.34
17	0.1537	0.1561	1.56	45	0.3281	0.3289	0.24
18	0.1553	0.1583	1.93	46	0.3258	0.3137	3.71
19	0.1567	0.1589	1.4	47	0.3479	0.3396	2.39
20	0.1599	0.1581	1.13	48	0.3467	0.3585	3.4
21	0.1658	0.1666	0.48	49	0.381	0.3302	13.33
22	0.168	0.1672	0.48	50	0.3905	0.3703	5.17
23	0.1704	0.1731	1.58	51	0.3939	0.3926	0.33
24	0.1718	0.1668	2.91	52	0.4192	0.4056	3.24
25	0.1735	0.171	1.44	53	0.4356	0.4341	0.34
26	0.1751	0.1736	0.86	54	0.4474	0.4442	0.72
27	0.1782	0.1775	0.39	55	0.5142	0.4941	3.91
28	0.1808	0.1828	1.11	56	0.6052	0.5615	7.22
moyenne							2.66

Tableau IV.25 Résultats obtenus pour la tension superficielle Ts (dyne/cm).

N° FR	Ts (lit)	Ts (est)	écart (%)	N° FR	Ts (lit)	Ts (est)	écart (%)
1	17.593	17.2146	2.15	29	26.455	26.4607	0.02
2	17.961	18.0262	0.36	30	26.6517	26.7035	0.19
3	18.6336	18.8632	1.23	31	27.2542	27.2299	0.09
4	18.8666	19.8621	5.28	32	27.2646	27.0051	0.95
5	19.8641	20.2953	2.17	33	27.3506	27.0755	1.01
6	20.3384	20.7577	2.06	34	27.7576	27.9359	0.64
7	20.6512	21.8583	5.85	35	28.6052	28.4407	0.58
8	20.9458	20.5705	1.79	36	27.1339	27.4107	1.02
9	21.2456	20.8808	1.72	37	29.6592	30.0206	1.22
10	21.5167	21.8298	1.46	38	28.1707	29.3864	4.32
11	21.7299	22.2097	2.21	39	30.7888	31.3503	1.82
12	21.8374	21.9049	0.31	40	31.4899	31.9324	1.41
13	22.1622	22.3997	1.07	41	32.3695	31.6011	2.37
14	22.1695	22.4695	1.35	42	32.525	33.7677	3.82
15	22.3945	21.9622	1.93	43	33.5947	34.2469	1.94
16	22.4209	22.4858	0.29	44	34.2503	34.657	1.19
17	22.9278	23.0303	0.45	45	34.219	34.3254	0.31
18	23.0923	23.2127	0.52	46	34.1211	33.5956	1.54
19	23.2409	23.3095	0.3	47	35.0375	34.7827	0.73
20	23.5498	23.373	0.75	48	34.9868	35.5256	1.54
21	24.0976	24.0755	0.09	49	36.2993	34.3183	5.46
22	24.2879	24.1757	0.46	50	36.6384	35.9238	1.95
23	24.5024	24.7091	0.84	51	36.7602	36.6972	0.17
24	24.6168	24.25	1.49	52	37.6246	37.1463	1.27
25	24.7601	24.5726	0.76	53	38.1569	38.0283	0.34
26	24.8932	24.8698	0.09	54	38.5284	38.3331	0.51
27	25.1509	25.2071	0.22	55	40.4488	39.8156	1.57
28	25.3574	25.5373	0.71	56	42.5942	41.6711	2.17
moyenne							1.39

Tableau IV.26 Résultats obtenus pour la viscosité cinématique à 100°F μ (Cpoise).

N° FR	μ (lit)	μ (est)	écart (%)	N° FR	μ (lit)	μ (est)	écart (%)
1	0.361	0.3701	2.52	29	1.0182	1.0475	2.88
2	0.3676	0.3804	3.48	30	1.0638	1.1039	3.77
3	0.3812	0.4109	7.79	31	1.2241	1.2645	3.30
4	0.3864	0.4241	9.76	32	1.2272	1.1901	3.02
5	0.4126	0.4354	5.53	33	1.2529	1.2068	3.68
6	0.4275	0.4457	4.26	34	1.3853	1.5121	9.15
7	0.4384	0.477	8.80	35	1.7252	1.7218	0.20
8	0.4496	0.4342	3.43	36	1.1895	1.1885	0.08
9	0.4619	0.4441	3.85	37	2.2977	2.5951	12.94
10	0.474	0.4886	3.08	38	1.5393	2.2112	43.65
11	0.4841	0.501	3.49	39	3.1477	3.5501	12.78
12	0.4895	0.4883	0.25	40	3.8269	4.1588	8.67
13	0.5068	0.5196	2.53	41	4.875	3.8009	22.03
14	0.5072	0.5256	3.63	42	5.0855	8.1362	59.99
15	0.5202	0.4885	6.09	43	6.7672	8.6164	27.33
16	0.5217	0.5192	0.48	44	8.0232	9.6658	20.47
17	0.5547	0.5613	1.19	45	7.9589	9.0622	13.86
18	0.5665	0.5769	1.84	46	7.7608	7.9564	2.52
19	0.5778	0.5831	0.92	47	9.7936	9.7595	0.35
20	0.6029	0.5808	3.67	48	9.6703	11.2448	16.28
21	0.6539	0.6537	0.03	49	13.3367	8.7732	34.22
22	0.6739	0.6626	1.68	50	14.4612	12.0976	16.34
23	0.6979	0.7273	4.21	51	14.8847	14.3072	3.88
24	0.7115	0.6632	6.79	52	18.2237	16.515	9.38
25	0.7292	0.7051	3.30	53	20.6029	20.3244	1.35
26	0.7464	0.7397	0.90	54	22.4306	21.6702	3.39
27	0.7819	0.7889	0.90	55	34.6881	36.7569	5.96
28	0.8127	0.8513	4.75	56	57.5924	50.6271	12.09
moyenne							8.08

La confrontation des résultats estimés par réseau de neurone et les données de la littérature (base de test) est représentée sur les figures ci-après pour rendre compte de la fiabilité de cette nouvelle approche pour chacune des propriétés étudiées.

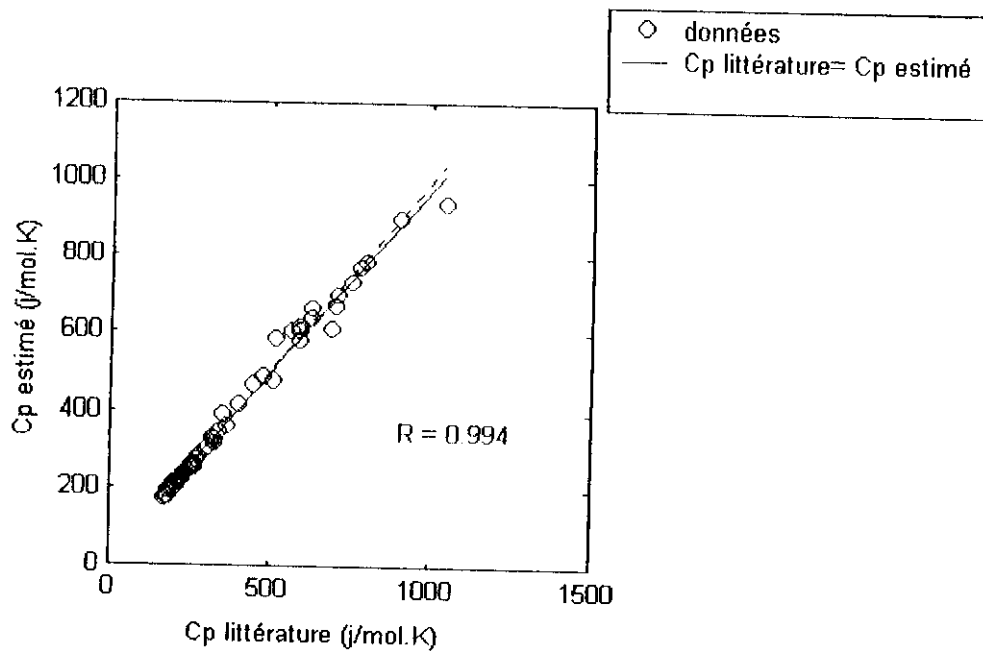


Figure .IV.17 Comparaison de Cp estimé et Cp littérature (base de test).

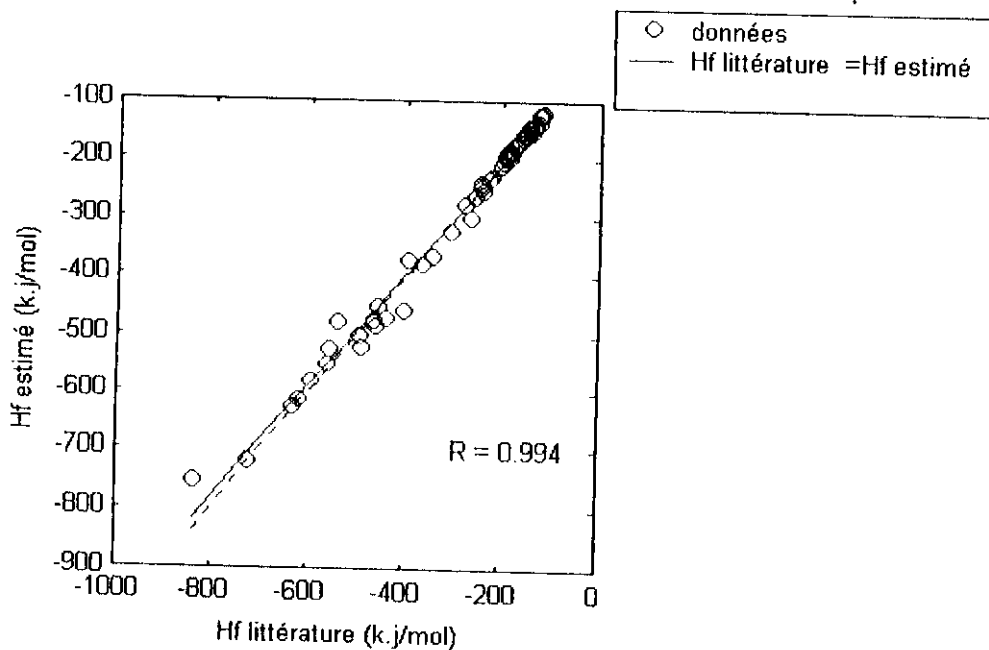


Figure .IV.18 Comparaison de Hf estimé et Hf littérature (base de test).

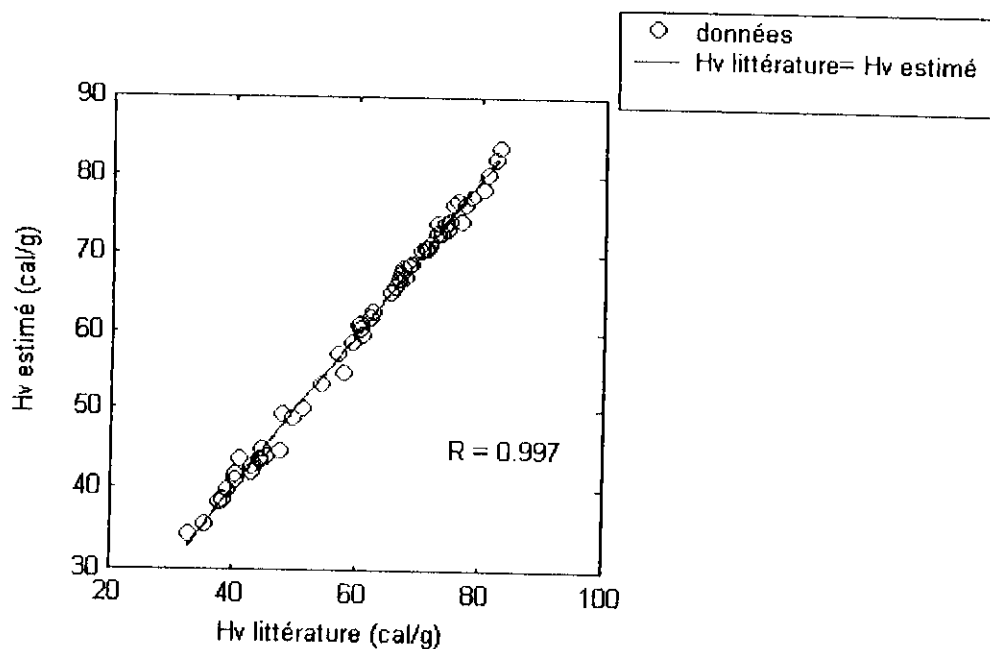


Figure .IV.19 Comparaison de Hv estimé et Hv littérature (base de test).

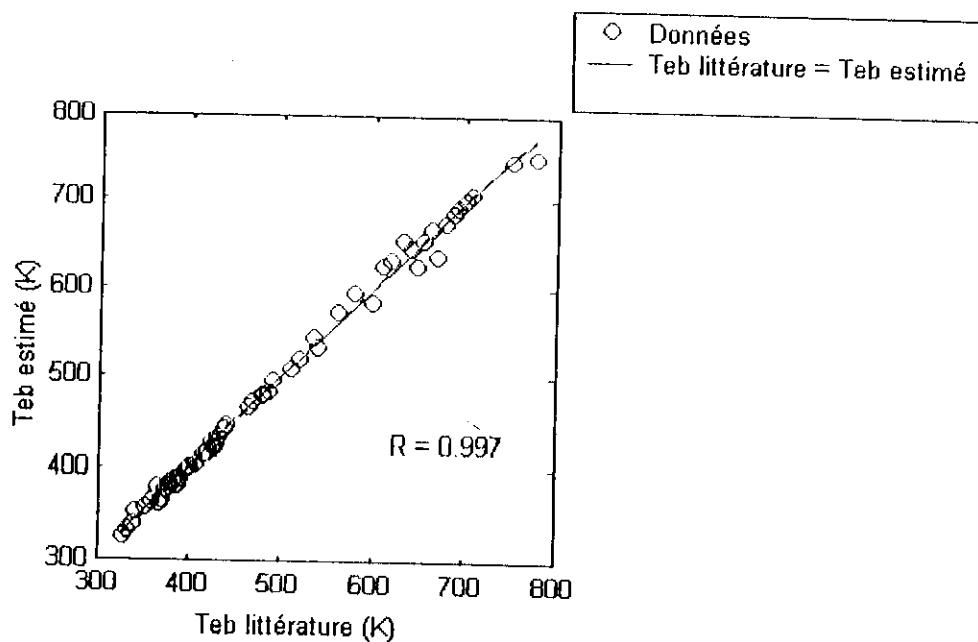


Figure .IV.20 Comparaison de Teb estimé et Teb littérature (base de test).

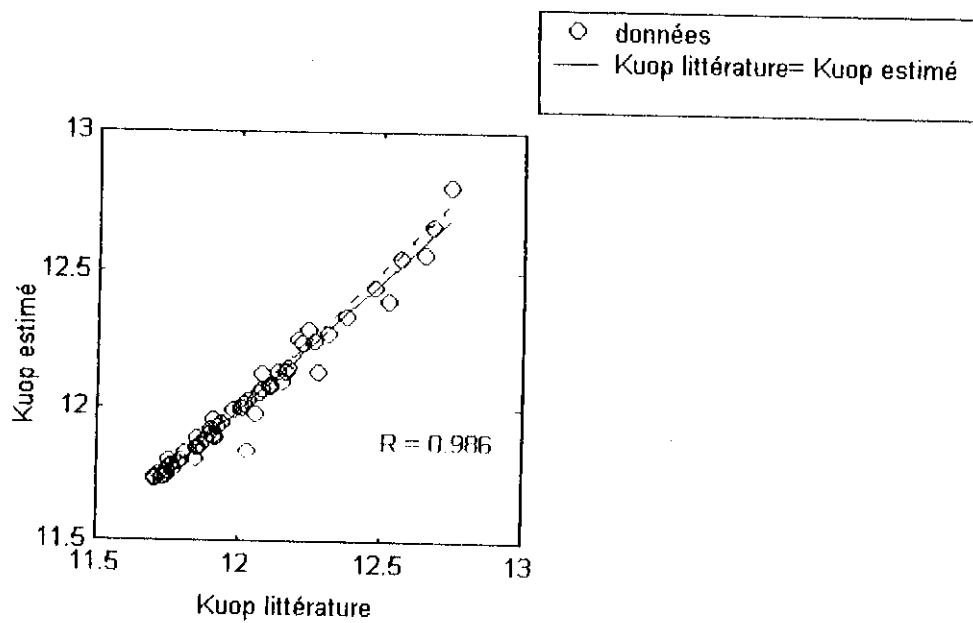


Figure .IV.21 Comparaison de Kuop estimé et Kuop littérature (base de test).

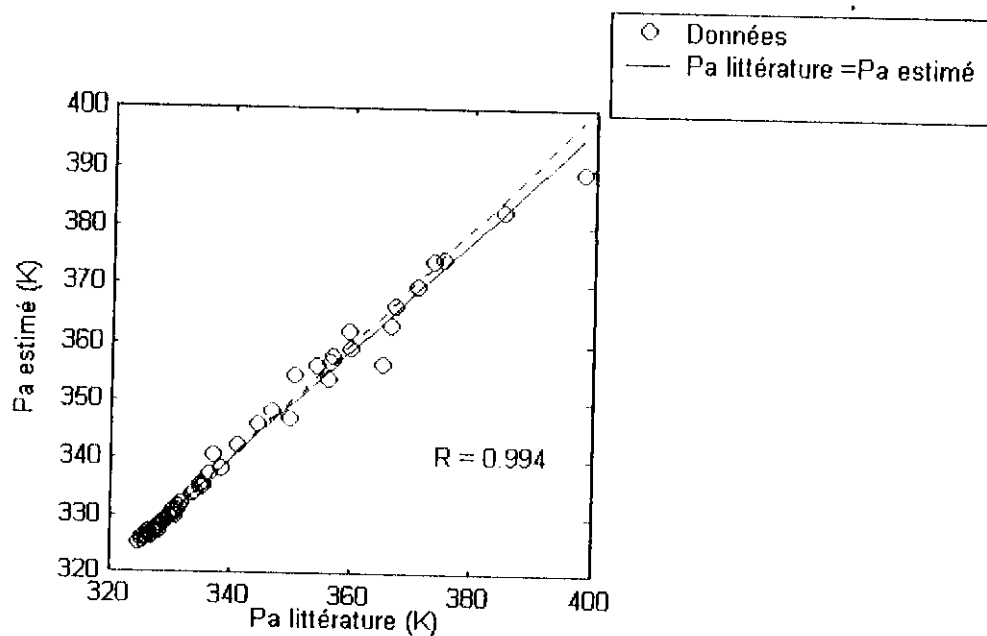


Figure .IV.22 Comparaison de Pa estimé et Pa littérature (base de test).

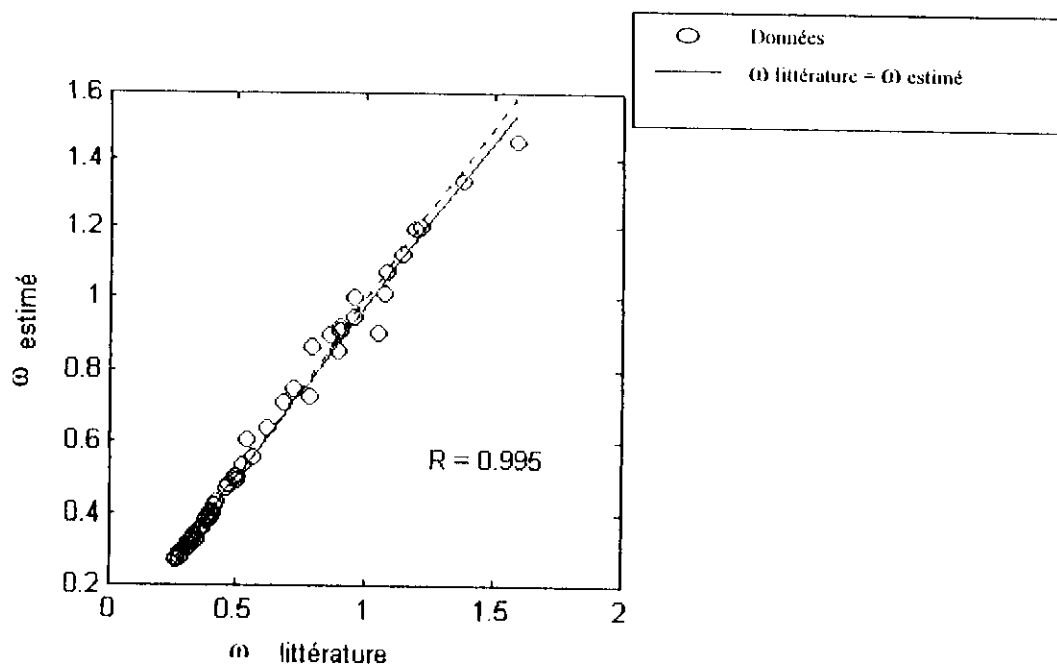


Figure .IV.23 Comparaison de ω estimé et ω littérature (base de test).

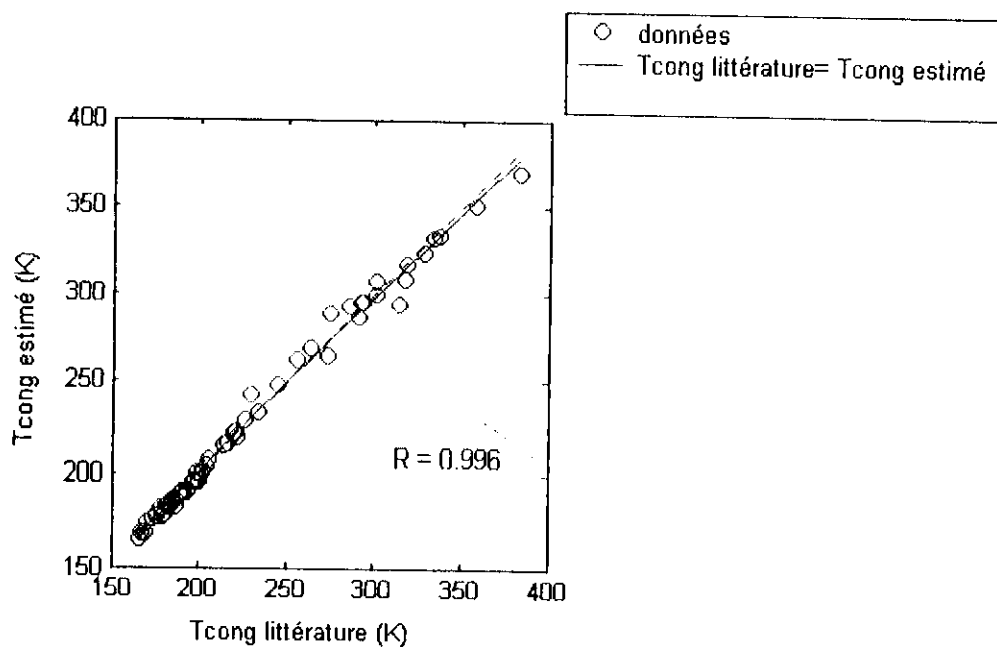


Figure .IV.24 Comparaison de T_{cong} estimé et T_{cong} littérature (base de test).

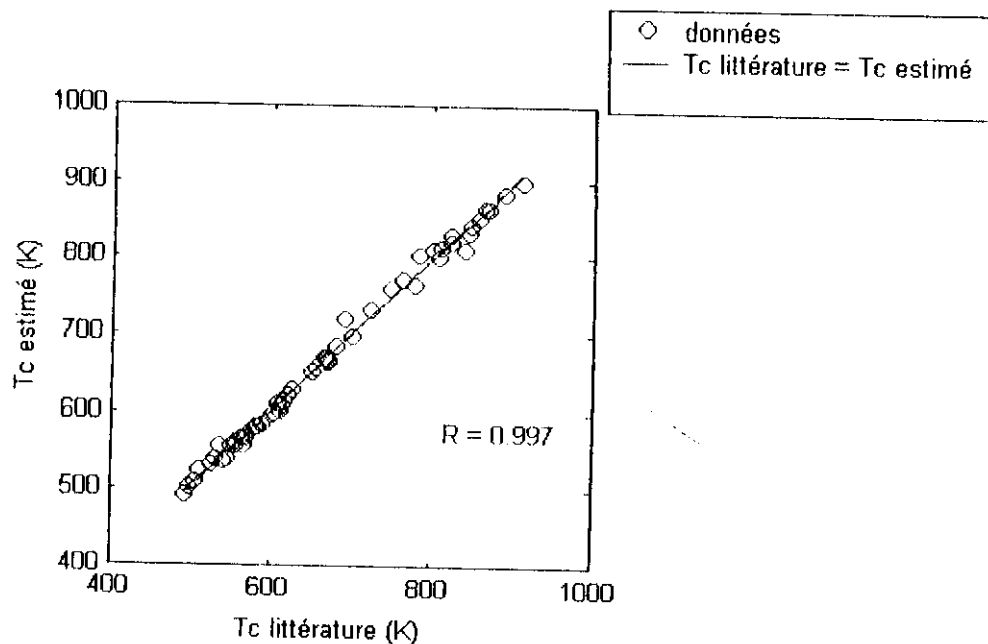


Figure .IV.25 Comparaison de Tc estimé et Tc littérature (base de test).

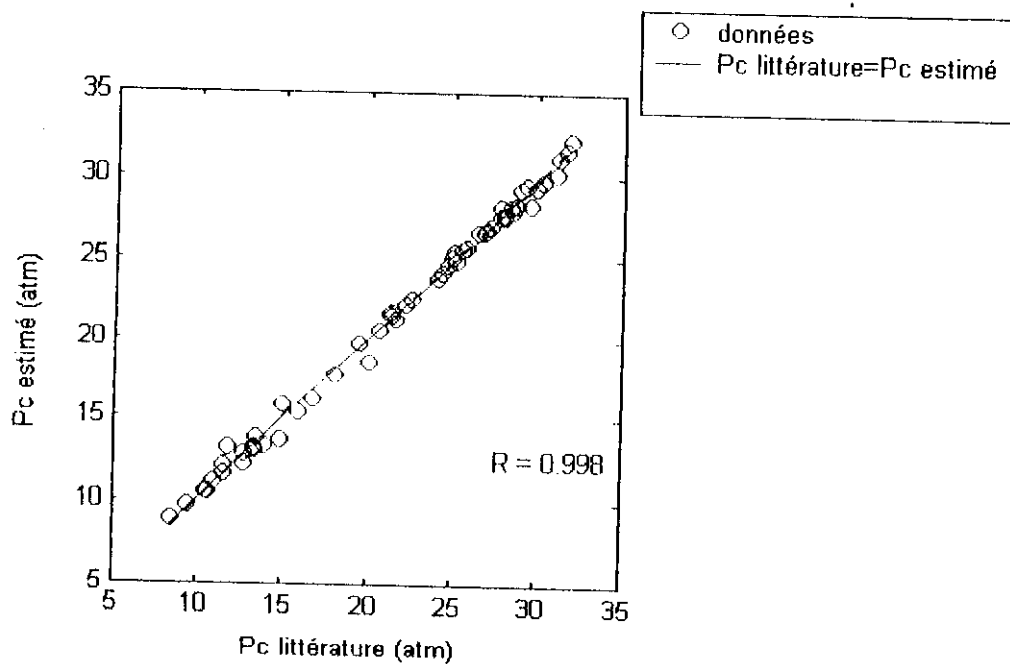


Figure .IV.26 Comparaison de Pc estimé et Pc littérature (base de test).

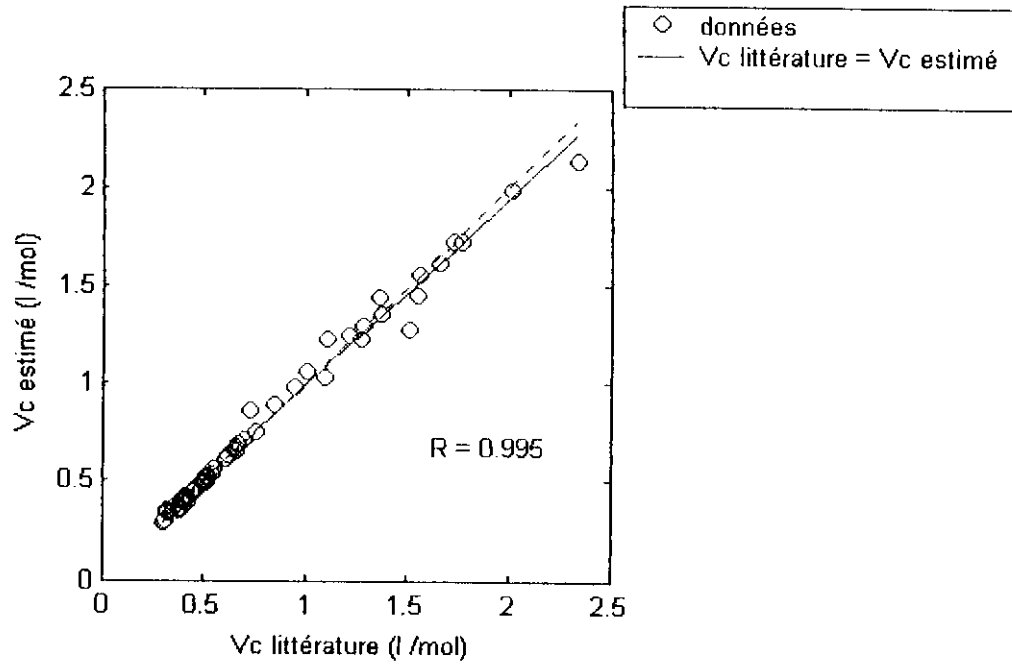


Figure .IV.27 Comparaison de V_c estimé et V_c littérature (base de test).

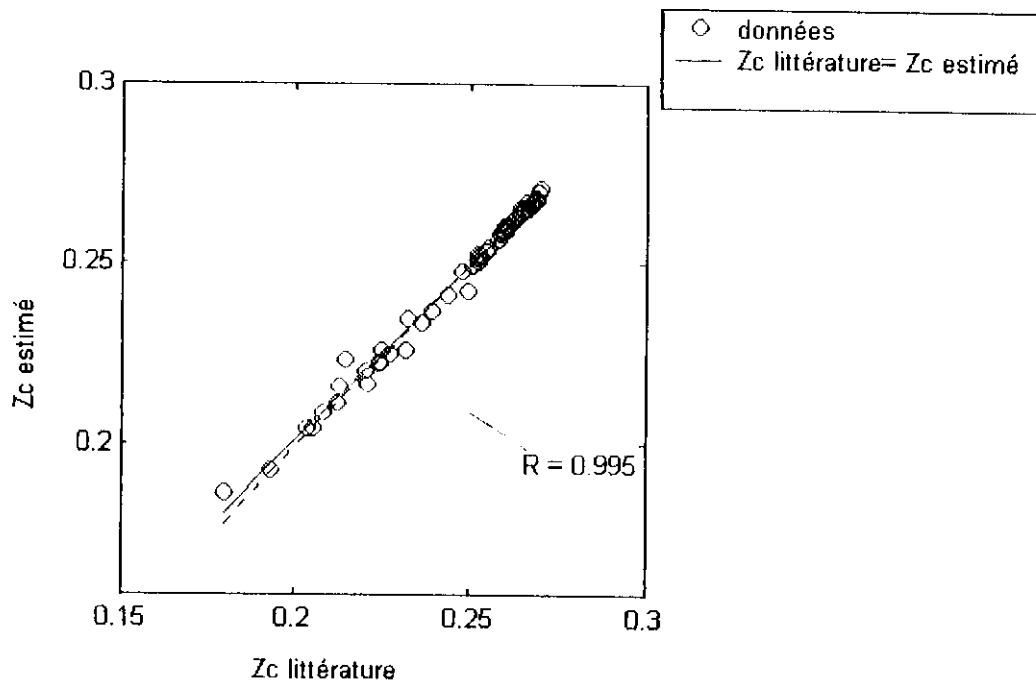


Figure .IV.28 Comparaison de Z_c estimé et Z_c littérature (base de test).

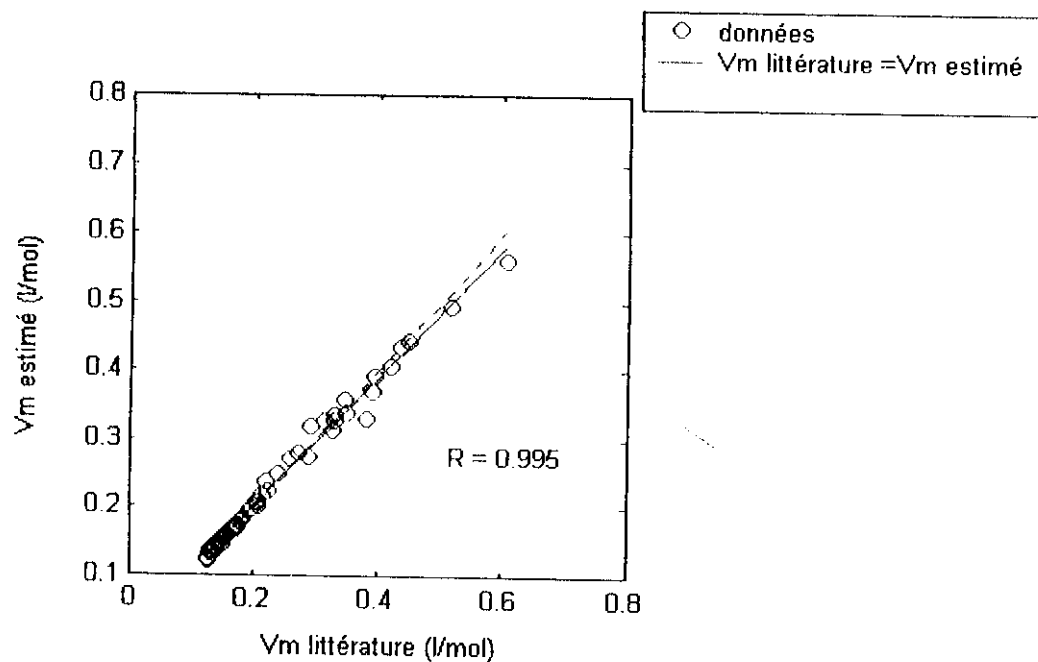


Figure .IV.29 Comparaison de V_m estimé et V_m littérature (base de test).

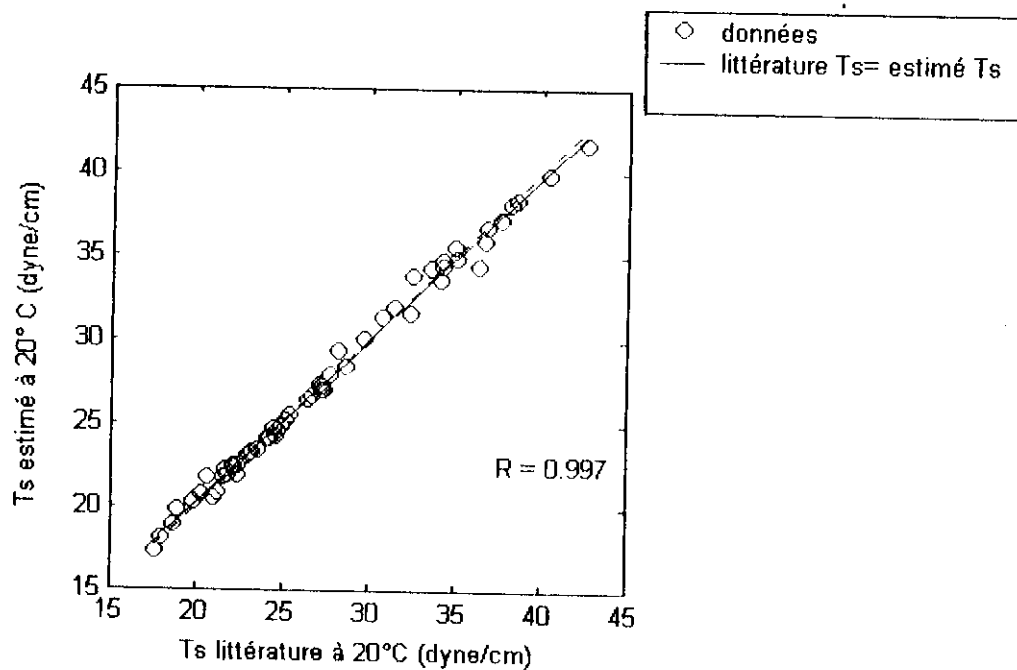


Figure .IV.30 Comparaison de T_s estimé et T_s littérature (base de test).

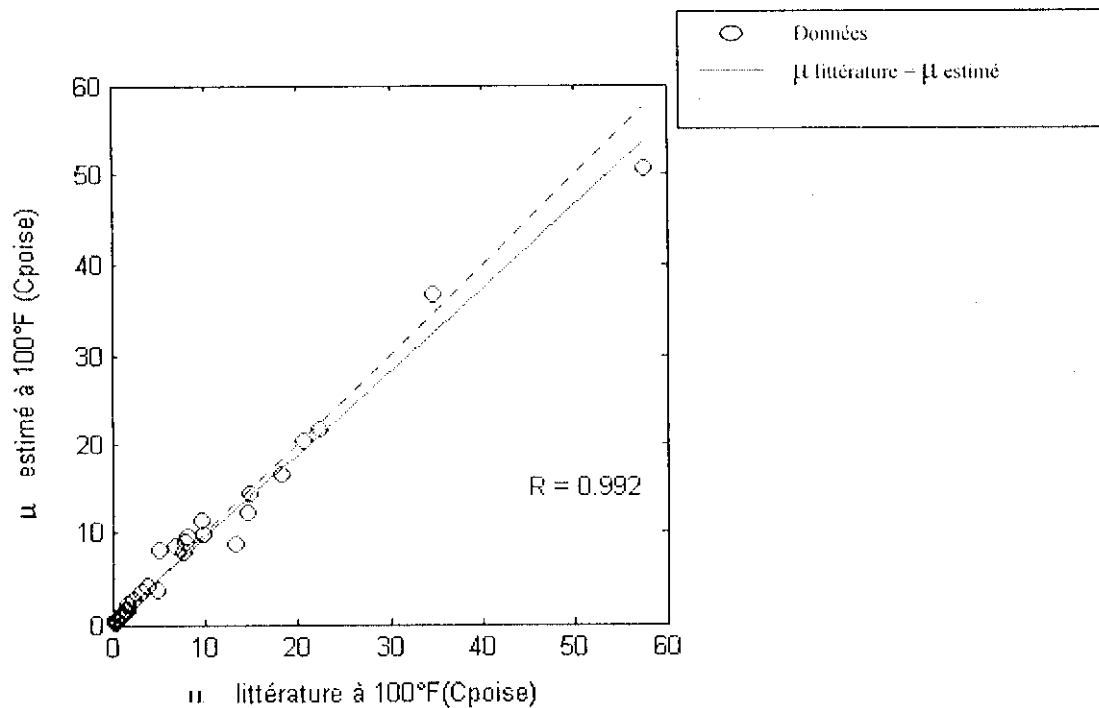


Figure IV.31 Comparaison de μ estimé et μ littérature (base de test).

La comparaison des performances des réseaux de neurone développés dans cette étude avec la littérature (base de test) est montrée sur les figures précédentes : On constate généralement un alignement parfait des résultats simulés par le réseau autour de la ligne de 45° (ligne rouge) ce qui est confirmé par des coefficients de corrélation proche de l'unité. On conclusion on peut dire que les modèles établis sont d'une capacité prédictive appréciable.

Les poids de connexions W_{ij} (l'indice i pour la couche considérée et j pour la couche précédente), ainsi que les biais des différents neurones des réseaux retenus sont donnés dans les tableaux (6-9) présentés en annexe3.

Conclusion

L'objectif principal de notre travail est de proposer une nouvelle technique empirique, basée sur les réseaux de neurones, pour la prédiction des propriétés des hydrocarbures, afin d'éviter des expériences longues, coûteuses et difficiles à effectuer. A cet effet, un perceptron à trois couches a été utilisé.

Notre étude a comporté deux parties principales :

Dans une première partie, nous avons établi des réseaux capables d'estimer quelques propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs à partir de leur structure moléculaire, autrement dit nous avons essayé de représenter la méthode de contribution de groupes conventionnels par des réseaux de neurones.

Dans la seconde partie, nous avons établi des réseaux pour la prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des fractions pétrolières en considérant comme paramètres d'entrées : l'indice de réfraction à 20°C, la masse moléculaire et la densité à 20°C des fractions pétrolières.

Une fois les données recueillies et pour les deux parties de notre travail, des apprentissages ont été effectués pour obtenir les poids optimaux du réseau, Ce dernier est ensuite 'gelé' et prêt à être utilisé dans le domaine où il a été calé. L'expérience ainsi acquise est accumulée et mémorisée dans les poids de connexion du réseau.

La comparaison des résultats estimés par les réseaux de neurones avec les données de la littérature nous a permis de conclure de la fiabilité des modèles et de leur pouvoir prédictif. Cependant des améliorations peuvent être apportées pour garantir une meilleure prédiction, comme par exemple par l'introduction des algorithmes génétique comme méthode d'optimisation des paramètres de modèle des réseaux de neurones.

Enfin, on suggère d'étendre la première partie de notre travail (contribution de groupes) au delà des hydrocarbures c'est-à-dire de considérer également les dérivés des hydrocarbures (alcools, acides, halogènes, etc.) dont l'intérêt n'est plus à démontrer.

1. Abilov A., "Use of neural network for modelling of non-linear process integration technology in chemical engineering", Chemical engineering and processing, 449-458, 39, 2000.
2. Alaouchiche O., Bouchakour Z., "Contribution a la détermination des propriétés physiques des fractions pétrolières par la méthode de nombre de carbone équivalent (ENC) ", Projet de fin d'étude, Ecole National Polytechnique, Alger, 1999.
3. Alexander P., "Application of quantitative structure- performance relationship and neural network models for the prediction of physical properties from molecular structure", Ing. Eng.chem. Res, 37, 3043-3051, 1998.
4. American Petroleum Institute, Projet 44, "Selected values of physical and thermodynamic properties of hydrocarbon and related components", 1982.
5. AZIBI N., Mecerem Z., "Réseaux de neurone : outil de traitement d'information ; application : prédiction des prix de pétrole", Projet de fin d'étude, Ecole Nationale Polytechnique, 1998, Alger.
6. Babhi, Dama, "Etude de la commande par RNA: application à un train de laminoir", Projet de fin d'étude, Ecole National Polytechnique, Alger, 1995.
7. Brambilla A., "Estimate product quality with ANNs", Hydrocarbon processing, September, 1996.
8. Benbouzid S. "Commande adaptative de la machine asynchrone par réseaux de neurones artificiels", Projet de fin d'étude, Ecole Nationale Polytechnique, 1999, Alger.
9. Benson S., "Thermochemical kinetics: Methods for the estimation of thermochemical data and rate parameters", 2 Edition, 1968, New York.
10. Berkouk M., Boukhezar B., "Commande par réseaux de neurones et algorithmes génétique. Application à un bras manipulateur", Projet de fin d'étude, Université de Béjaïa, 2000.
11. Bouamra F., "Contribution à la détermination des propriétés physiques des fractions pétrolières lourdes", Thèse de magister, Ecole Nationale Polytechnique, 1991.
12. Chen H., Siripitayananon S., "A new technique for lithofacies prediction: back-propagation neural network", Départ. Of computer science, the university of Alabama, 2000.
13. Chitour C. E., Skander. N, "Equivalent Carbon Number: un nouveau paramètre pour la caractérisation des fractions pétrolières étroites", Revue des Editions Entropie, Mai 2000.
14. Chitour C. E., "Raffinage : les propriétés thermique", Edition OPU, Tome 3, Alger, 1999.

15. Chitour E. C., Skander N., Alaouchiche O. et Bouchakour Z., "Prévision des propriétés des fractions pétrolières étroites à partir de l'Equivalent Carbon Number ECN", *Journal de la Société Algérienne de Chimie*, 13(12), 151-161, 2003.
16. Chitour C. E., "Raffinage: thermodynamique des fluides réels", Edition OPU, Tome 2, Alger, 1999.
17. Chitour C.E., "Raffinage: les propriétés physiques de hydrocarbures et des fractions pétrolières", Tome 1, Edition OPU, Alger, 1999.
18. Davalo Eric, Patrick Naim, "Des réseaux de neurones", Edition Eyrolles, 1993.
19. Daubert T.E., Danner R.P., "Physical and thermodynamic properties of pure chemicals", data compilation, Etats Unies.
20. Denise Y., Cohen Y., "Neural network based temperature-dependent quantitative structure property relations (QSPRs) for predicting vapor pressure of hydrocarbons", *J. chem. Inf. Comput. Sci*, 41,463-477, 2001.
21. Dreyfus G., Martinez J, Samuelides M., Godon M. B., Badran F., Thiria S., Herault L., sous la direction général de Gérard Dreyfus, "Réseaux de neurones : Méthodologie et application", Edition Eyrolles, 2002.
22. Edmister W., C, Lee B. I., "Applied hydrocarbon thermodynamics", Volume 1+2, second Edition by Gulf publishing company, Houcton, Texas, 1988.
23. El-Hadi M., "Contribution à la détermination de la composition des fractions pétrolières", Thèse de magister, Ecole Nationale Polytechnique, Alger, 1994.
24. Fekrache S., "Contribution à la détermination des propriétés des hydrocarbures par réseaux de neurones artificiels", Projet de fin d'étude, Ecole Nationale Polytechnique, 2002.
25. Freeman, "Neural network : application, algorithmes and programme technique", Edition Eyrolles, 1994.
26. Jean- Claude Perez, "La révolution des ordinateurs neuronaux", Technologie de pointe, Edition Hermes, 1994.
27. Jodouin J.F. "Les réseaux de neurone: principe et définition", 1994.
28. Heniche, "Etude sur l'utilisation des réseaux de neurones artificielle et système flous pour la linéiarisation et la commande des systèmes chimique non linéaire", Thèse de magister, Ecole National Polytechnique, 1997.
29. Herault J., Jutten C, "Réseaux de neurone et traitement de signal", Edition Hermes, 1994.

30. Gallant R., Railey W., Jam M., "Physical properties of hydrocarbons", Volume 2, Edition Technip, Paris.
31. Gabriela Espinosa, "Neural network based Quantitative structural property relations (QSPRs) for predicting boiling points of aliphatic hydrocarbons", J. Chem. Inf. Comput. Sci, 40, 859-879, 2000.
32. Gharbi R., "Estimating the Isothermal compressibility coefficient of undersaturated Middle East crudes using neural networks", Energy & Fuels, 11, 372-378, 1997.
33. Gharbi R., Adel M., Elsharkawy, Mansour Karkoub, "Universal neural- network-based model for estimating the PVT properties of crude oil systems", Energy & Fuels 13, 454-458, 1999.
34. Georgi St., Cholakov, William A., Wakeham, Roumiana, Stateva P, "Estimation of normal boiling points of hydrocarbons from descriptors of molecular structure", Fluid Phase Equilibria, 163, 21-42, 1999.
35. Gourlia J. P., "Modélisation en génie des procédés", Technique de l'ingénieur.
36. Kazitani, "Modélisation en RN : application à l'implantation d'un atelier", Thèse de magister, Ecole National Polytechnique, Alger, 1990.
37. Kitous O., "Contribution à l'étude des propriétés thermodynamiques des fractions pétrolières par des méthodes numérique", Thèse de magister, Ecole National Polytechnique, 1990.
38. Klineciewicz K M., Reid R. C., "Estimation of critical properties with group contribution methods", Aiche Journal, Vol, 30, No, 1.
39. Lefevre, "Notion de chimie du pétrole", Edition Mir, Moscou.
40. Li Gao, Norman W., Loney, "New hybrid neural network model for prediction of phase Equilibrium in a two- phase extraction system", Ind. Eng. chem. Res, 41, 112-119, 2002.
41. Margache S., "Contribution à l'étude analytique complète de pétrole brut à partir de corrélation : application a un nouveau pétrole brut HRS162", Thèse de magister, Ecole Nationale Polytechnique, Alger, 1995.
42. Marrero Jorge, Rafiqul Gani, "Group-contribution based estimation of pure component properties", Fluid Equilibria, 183-208, 2001.
43. Maxwell j. b., "Data book on hydrocarbons", Edition Van Nostrand Company, 1950.
44. Medjoubi. F, M. M. Mahmoud, "Conception et mise en œuvre d'un outil d'aide pour la conception de réseaux de neurones", Projet de fin étude, U.S.T.H.B, Alger, 1998.

45. Ming-Jer Lee, Jui-Tang Chen, "Fluid property predictions with the aid of neural networks", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32, 995-997, 1993.
46. Mokhtari M., "Matlab 5.2 & 5.3 et Simulink 2 & 3 pour étudiant et ingéniers", Edition Springer.
47. Neelakantan R., Guiver J., "Applying neural networks", *Process control and information system. Hydrocarbon processing*, 1988.
48. Nelson, "Petroleum refining engineering", Edition Mc Graw-Hill, 1958.
49. Nemmour A. L., "Utilisation des réseaux de neurones au vieillissement des polymères utilisés dans les câbles MT", *Projet de fin d'étude, Ecole Nationale Polytechnique*, 1999.
50. Neiryneck J., "Artificiel intelligence développement and application", *Conférence, Nev*, 1990.
51. Newman S. A., "Hydrocarbon processing", *Dec*, 1981
52. Nibouche N., "Development d'un système expert pour le choix d'une méthode de prévision de gestion", *Ecole Nationale Polytechnique*, 1995.
53. Normand, "Leçon sommaire sur l'industrie de raffinage du pétrole", Edition Technip, Paris, 1976.
54. Normandin A., Bernard P.A. Grandjean, and Jules Thibault, "PVT data analysis using neural network models". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32,970-975, 1993.
55. Olivier Eric, Bruce Eldridge R., "Prediction of the trayed distillation column mass-transfer performance by neural networks", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 41, 3436-3446, 2002.
56. Ouahes C, "Chimie Organique", Office des Publications Universitaires, Alger.
57. Queimada A. J., Isabel M., Marrucho A. P., Coutinho J., "Surface tension of pure heavy n-alkanes: a corresponding states approach", *Fluid Phase Equilibria*, 183-184, 229-238, 2001.
58. Reid R. C, Prausnitz J., M, Poling B. E., "The properties of gases and liquids", Edition Mc. Graw Hill, 1987.
59. Riddle A. L., "Neural networks help optimise solvent extraction", *Hydrocarbon processing*, Nov, 1998.
60. Rosenblatt, David H., Reehl F, William, Lyman, Warren J., "Handbook of chemical property estimation methods", McGraw-hill, book company.
61. Renders, Jean Michel, "Algorithme génétique et réseaux de neurones", Edition Hermes, 1995.

62. Sabine Gob, Esther Oliveros, "Modelling the kinetics of a photochemical water treatment process by means of artificial neural networks", *Chemical engineering and process* 38, 373-382, 1999.
63. Saidouni D, "Modélisation de la relation pluie-débit au pas de temps horaire par différentes approches". (DPFT- réseaux de neurones- ACP) ", Mémoire de magister. Ecole Nationale Polytechnique, 20002.
64. Skander N, "Contribution à la détermination des propriétés physiques des fractions pétrolières par la méthode de contribution de groupes", Thèse de magister, Ecole Nationale Polytechnique, 1997.
65. Sorin F., "Régulation d'un processus industriel par réseaux de neurones". Technique de l'ingénieur.
66. Souahi F., "Contribution à l'étude physico-chimique des pétrole bruts et des fractions pétrolières. comparaisons des méthodes expérimentales et empiriques aux méthodes numériques élaborées", Thèse de doctorat d'Etat, Ecole Nationale Polytechnique, 1999.
67. Thing Tran Phug, "Estimation of standard Heats of Formation ΔH_{fT}^* , standard Entropies of Formation ΔS_{fT}^* , standard Free Energies of Formation ΔF_{fT}^* and absolute Entropies S_{fT}^* of Hydrocarbons from Group contributions: an accurate approach". the *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol.54, August, 1976.
68. Thomas R., Cundari, Jun Deng, Youg Zhao, "Design of a propane ammoxidation catalyst using artificial neural networks and genetic algorithms", *Ind. Eng. Chem. Res.* 40, 5475-5480, 2001.
69. Tolle M., Hsinchun Chen., Hsiao-Hui Chow, "Estimating drug/ plasma pharmacokinetic data sets", *Decision support systems* 30, 139-151, 2000.
70. Touzet Claude, "Les réseaux de neurones artificiels, introduction au connexionisme : cours, exercices et travaux pratiques", Juillet 1992.
71. Tsutsumi A., Wie Chen, "Neural networks for prediction of the dynamic Heat-transfer Rate in bubble columns". *Ind. Eng. Chem. Res.* 40, 5358-5361, 2001.
72. Zemouri F., "Elaboration d'un logiciel permettant le calcul des propriétés physiques des fractions pétrolières, ne nécessitant que la courbe de distillation TBP", Thèse de Magister, Ecole Nationale Polytechnique, 1995.
73. Zidelkheir B., "Approche à la détermination des propriétés physiques des corps purs et des fractions pétrolières par des méthodes numériques de contribution de groupes". Thèse de Magister, Ecole National Polytechnique, 1993.
74. Vidal Jean, "Thermodynamique : application au génie chimique et à l'industrie pétrolière", Editions Technip, 1997.

Tableau .1 Pression critique, volume critique, facteur de compressibilité critique, Température d'ébullition, température critique des hydrocarbures purs de la base d'apprentissage.

Hydrocarbures	Pc (bar)	Vc (cm ³ / mol)	Zc	Teb (k)	Tc (k)
acetylene	62.5	112.9	0.274	189.3	309.2
propyne	53.5	163.7	0.275	250.12	401
biacetylene	58.6	183.5	0.271	283.5	470
1-butyne	48.6	220	0.27	281.2	463.7
2-butyne	50.8	221	0.277	300.1	488.7
1-pentyne	40.5	278	0.275	313.4	493.5
2-pentyne	42.3	277.5	0.27	329.2	522
3-methyl,1-butyne	42.1	271.5	0.289	300.99	476
1-héxyne	36.9	333.5	0.28	344.5	529
1-octyne	29.6	445.5	0.27	399.4	586.9
1-nonyne	26.7	501.5	0.264	399	610.8
1-decyne	24.3	557.5	0.257	447	632.5
1-undecyne	22.1	613.5	0.251	468	651
1-dodecyne	20.3	669.5	0.244	488.2	668.2
1-tridecyne	18.6	725.5	0.237	507.2	684.1
1-tetradecyne	17.2	781.5	0.231	525	698.9
1-pentadecyne	15.9	837.5	0.225	542	711.4
1-héxadecyne	14.7	893.5	0.219	557.2	724.3
1-hyptadecyne	13.7	949.5	0.212	572.2	735.2
1-octadecyne	12.8	1005.5	0.207	586.2	747.3
1-nonadecyne	11.9	1061.5	0.201	600.2	758.9
1-eicosyne	11.2	1117.5	0.195	613.2	769.8
1-heneicosyne	11.89	1157	0.13972	627	778.97
1-docosyne	11.39	1212	0.218	639	789.96
1-tricosyne	10.94	1267	0.2002	651	786.84
éthylène	51.1	127.2	0.28	169.48	282.8
propadiene	53.2	162	0.271	241.2	385.4
propène	46.1	188.4	0.289	225.46	365.75
1,2-butadiene	44.9	219	0.267	284	443.7
1-butene	40.2	240	0.277	266.92	419.6
cis, 2-butène	41.6	234.7	0.271	276.87	433.1
trans,2-butene	41.2	237.9	0.274	274.03	428.6
2-mpropene	40	238.8	0.275	266.24	417.9
1,2pentadiene	40.7	276	0.269	318	503
1,3pentadiene	39.9	275	0.266	315.1	496
1,3pentadiene	38.9	276.5	0.262	317.2	494.3
1,4pentadiene	37.9	276	0.263	299.1	478
2,3pentadiene	41.4	275.5	0.271	321.4	505.8
3-methyl,1,2butadiene	41.1	267	0.266	314	496
2-methyl,1-3butadiene	37.4	266	0.248	307.2	483.3
1-pentene	35.5	302.6	0.278	303.11	464.7
cis,2-pentene	36.4	295.5	0.275	310.07	474.9
trans,2-pentene	35.2	295.5	0.275	309.49	471
2-methyl,1-butène	34.3	297.5	0.279	304.3	464.8
3-methyl,1-butène	35.1	290.5	0.283	293.3	450
2-methyl,2-butène	34.5	296.5	0.274	311.7	470
cis,2-héxene	32.8	351	0.27	342.041	518
trans,2-héxene	32.7	351	0.27	341.034	516
cis, 3-héxene	32.8	350	0.27	339.6	517
trans, 3-héxene	32.5	350	0.26	340.23	519.9

2-methyl,1-pentene	32.8	353.5	0.275	335.263	506.5
3-methyl,1-pentene	32.9	346.5	0.277	327.33	495.3
4-methyl,1-pentene	32.9	346.5	0.277	327.02	494.8
2-methyl,2-pentene	32.8	351	0.27	340.458	518
cis,3-methyl,2-pentene	32.8	351	0.27	340.853	518
trans,3-methyl,2-pentene	32.9	350	0.27	343.6	521
cis,4-methyl,2-pentene	30.4	360	0.27	329.54	490
trans,4-methyl,2-pentene	30.4	360	0.27	331.7	493
2-ethylbutene	32.8	353.5	0.273	337.8	510.4
2,3dimethyl,1-butene	32.4	343	0.27	328.8	501
2-3dimethyl,2-butene	33.6	351	0.27	346.4	524
1-hyptene	28.5	438.9	0.28	366.8	537.2
1-octene	25.8	515.9	0.28	395.2	571.7
1-nonene	23.4	580	0.28	420.03	592
1-décene	22	650	0.28	443.74	615
1-undécene	19.9	632.5	0.24	465.86	637
1-dodécene	18.5	688.5	0.233	486.5	657
1-tridécene	17	744.5	0.226	505.9	674
1-tétradécene	15.6	800.5	0.22	524.3	689
1-pentadécene	14.5	856.5	0.214	541.61	704
1-héxadécene	13.3	912.5	0.208	558	717
1-hyptadécene	12.6	990.5	0.205	573.2	732.4
1-octadécène	11.3	1024.5	0.197	588	739
1-nonadécene	11.1	1106.5	0.195	601.7	755.1
1-eicosène	10.4	1164.5	0.19	614.9	765.4
1-heneicosène	9.82	1192.5	0.1807	628.15	779.35
1-docosène	9.25	1248.5	0.1756	640.37	790.99
1-tricosène	8.73	1304.5	0.1707	652.04	802.59
1-tétracosène	8.26	1360.5	0.166	663.15	814.08
1-pentacosène	7.82	1416.5	0.1613	674.26	826.31
éthane	48.8	145.7	0.285	184.6	305.4
propane	42.5	198.6	0.276	231.068	369.7
n-butane	37.6	255	0.274	272.638	425.6
n-pentane	33.6	310.6	0.267	309.215	470
n-hexane	30.2	368.4	0.264	341.9	507.9
n-hyptane	27.4	428.1	0.262	371.6	540.1
n-octane	24.9	490.9	0.259	398.83	569.1
n-nonane	23	543	0.253	423.968	594.8
n-décane	21.1	602	0.247	446.9	616.1
n-undécane	19.7	660	0.241	468.7	640.1
n-décane	18.3	718	0.238	488.6	659.5
n-tridécane	17.3	780	0.239	508.616	678.4
n-tétradécane	16	830	0.233	526.727	696.8
n-pentadécane	16	890	0.229	543.835	717.6
n-héxadécane	15.3	950	0.224	560.8	734.3
n-heptadécane	14.6	1000	0.216	576	749.3
n-octadécane	12	1043.5	0.195	589.5	748
n-eicosane	11.1	1155.5	0.184	617	767
n-heneicosane	9.57	1261.5	0.179	620.5	779.32
n-dodécane	9.02	1267.5	0.174	641.6	791.09
n-tricosane	8.52	1323.5	0.169	653.2	802.78
n-tétracosane	8.07	1379.5	0.164	664.3	814.43
n-pentacosane	7.54	1435.5	0.16	674.9	826.75
cyclopropane	55.5	162.8	0.28	240.34	397.8

cyclobutane	50.4	218	0.278	285.64	463.5
cyclopentane	45.2	259.9	0.276	322.37	511.8
cyclohexène	43.4	291.5	0.271	356.1	560.4
1-methyl, cyclopentène	37.9	311.2	0.273	349	542
3-methyl, cyclopentène	40.2	298.5	0.269	343.2	535.7
cyclohexane	40.7	308.3	0.273	353.9	553.5
1-méthylcyclopentane	38	319	0.273	345	533.2
4-méthylcyclohexène	40.2	298.5	0.265	348.3	543.8
cycloheptane	38.1	353	0.269	391.9	602
éthylcyclopentane	33.9	375	0.269	376.6	569.5
1,1-diméthylcyclopentane	34	353.5	0.27	360.96	550
cis, 1,2-diméthylcyclopentane	34	363.3	0.27	372.65	565
trans, 1,2-diméthylcyclopentane	34	363.3	0.27	364.99	553
cis, 1,3-diméthylcyclopentane	34	363.3	0.27	363.7	551
trans, 1,3-diméthylcyclopentane	34	363.3	0.27	363.9	553
méthylcyclohexane	34.7	344.5	0.263	374.1	572.3
propylcyclopentane	30	425	0.25	404.1	603
éthylcyclohexane	30	455.8	0.27	404.9	609
1,1-diméthylcyclohexane	29	448.9	0.27	392.7	591
cis, 1,2-diméthylcyclohexane	29	471.3	0.27	402.9	606
trans, 1,2-diméthylcyclohexane	29	471.3	0.27	396.7	596
cis, 1,3-diméthylcyclohexane	29	448.9	0.27	393.3	591
trans, 1,3-diméthylcyclohexane	29.7	415.5	0.254	397.6	598
cis, 1,4-diméthylcyclohexane	29	471.3	0.27	397.6	598
trans, 1,4-diméthylcyclohexane	29.7	415.5	0.27	392.5	587.7
butylcyclopentane	27.6	480.5	0.256	429.75	625.1
propylcyclohexane	28	472.5	0.256	429.865	639
butylcyclohexane	31.5	528.5	0.255	454.09	667
n-propylcyclohexane	23.4	584.5	0.2621	476.82	674
1-cyclopentylhéptane	20.1	647	0.229	497	682.6
n-héxylcyclohexane	20.1	637	0.224	497.8	687.7
1-cyclopentylloctane	19.1	704.5	0.231	516.9	702.1
1-cyclohexylheptane	19.6	696.5	0.231	518.1	708.6
1-cyclopentylnonane	16.7	757	0.213	535.2	714.9
1-cyclopentyldecane	16.3	816.5	0.219	559	730.6
1-cyclopentylundecane	14	867	0.233	568.9	742.2
1-cyclopentyltridecane	13.1	984.5	0.202	598.6	766.5
1-cyclohexyldodecane	13.3	976.5	0.202	600.9	772.8
1-cyclopentyltetradecane	11.2	1040.5	0.201	612.2	772
n-tétracycl cyclohexane	11.6	1088.5	0.2313	628.15	792.8
n-pentacycl cyclohexane	10.9	1144.5	0.2315	640.93	803.5
n-hexacycl cyclohexane	10.2	1200.5	0.2307	653.15	813.4
n-heptacycl cyclohexane	9.64	1256.5	0.22156	664.26	824.08
n-octacycl cyclohexane	9.09	1312.5	0.2273	675.37	834.22
n-nonacycl cyclohexane	8.58	1368.5	0.2298	685.37	843.56
éthylbenzene	37.3	374	0.268	409.2	617.9
o-xylene	37.4	369	0.262	417.579	631.1
m-xylene	35.6	376.1	0.259	412.27	619
p-xylene	35.3	378.6	0.26	411.51	617.4
2-mstyrène	33.7	412.5	0.254	441.2	658.2
3-mstyrène	33.7	412.5	0.252	444.2	662.7
4-mstyrène	33.7	412.5	0.253	442.2	659.7
propylbenzene	32.1	437.4	0.265	432.35	638.6
1-éthyl-2-méthylbenzene	28.4	490	0.26	434.5	637

1-ethyl-3-methylbenzene	30.4	460	0.26	438.3	651
1-ethyl-4-benzène	29.4	470	0.26	435.166	640
1,2,4-trimethylbenzene	32.3	435	0.256	442.528	649.3
1,2,3-trimethylbenzene	32.7	435	0.26	449.267	664.5
1,2,4,5-tetramethylbenzene	29	487.5	0.241	470	675.6
isobutylbenzene	30.5	480	0.271	445.9	650
sec-butylbenzene	28.9	475	0.254	446.455	649
tert-butylbenzene	28	481	0.251	442.269	645
butylbenzene	29.2	497.5	0.261	456.42	660.7
m-diethylbenzene	29.3	487.5	0.257	454.252	663.6
o-diethylbenzene	29.9	487.5	0.256	456.573	669.6
p-diéthylbenzene	28.1	480.5	0.25	456.9	657.9
1-ethylnaphtalene	31.4	521.5	0.253	531.5	774.9
1-2dimethylnaphtalène	30.1	521.5	0.243	539.5	775.3
heptylbenzene	22	660	0.25	519.2	713.5
1-butylnaphtatene	25	633.5	0.244	562.6	781.5
1-phenyloctane	20.4	720	0.25	537	728
1pentylnaphtalene	22.7	689.5	0.238	580.2	793.3
1-phenylnonane	19	790	0.25	555.2	741
1-phenyldecane	17.8	850	0.25	571	753
1-phenylundecane	16.7	910	0.24	586.4	764
1-phenyldodecane	15.8	980	0.24	600.8	774
1-phenyltridecane	15	1040	0.24	614.4	784
1-phenyltetradecane	14.2	1110	0.24	627.2	792
1-phenylpentadecane	13.5	1140	0.23	639.2	800
1-phenylhexadecane	11.12	1159.5	0.2228	651.15	808
1-phenylheptadecane	10.44	1215.5	0.21644	662.15	822.99
1-phenyloctadecane	9.82	1271.5	0.2271	673.15	832.69
1-phenylnonadecane	9.25	1327.5	0.2282	683.15	841.85
2-methylbutane	33.4	307.4	0.27	300.994	416.1
2,2-dimethylpropane	32	303.1	0.276	282.65	433.8
2-methylpentane	30.3	366.9	0.267	333.4	498.5
3-methylpentane	31.5	366.9	0.273	336.4	504.4
2,2dimethylbutane	31	359	0.272	322.9	488.2
2,3-dimethylbutane	31.3	357.4	0.269	331.2	500.3
ethylcyclopentane	33.9	375	0.269	376.6	569.5
2-methylhêxane	27.5	421	0.261	363.17	531
3-methylhexane	28.2	410.8	0.255	364.998	535.4
3ethylpentane	28.9	416	0.268	366.6	540.7
2,2-dimethylpentane	28.2	415.8	0.266	352.4	520.4
2,3-dimethylpentane	29.3	405	0.256	363.1	537.6
2,4-dimethylpentane	27.5	417.5	0.264	353.8	520.8
3,3-dimethylpentane	29.6	414	0.273	359.2	536.3
2,2,3-trimethylbutane	30	397.6	0.266	354	530.4
2-methylhyptane	24.9	488.3	0.261	390.8	560.6
3-methylhyptane	25.6	471.1	0.252	392.077	564.1
4-methylhyptane	25.6	476	0.259	390.86	562.2
3-ethylhêxane	26.3	460.5	0.252	391.69	566.1
2,2-dimethylhêxane	25.3	478	0.264	380	549.9
2,3-dimethylhêxane	26.5	468.2	0.263	388.76	564.5
2,4-dimethylhêxane	25.7	472	0.262	382.58	554.1
2,5-dimethylhêxane	24.9	482.3	0.262	382.25	549.9
3,3-dimethylhêxane	26.9	443	0.252	385.12	562.8
3-ethyl2-methylpentane	27.1	445.3	0.254	388.81	567

3-ethyl,3-methylpentane	28.3	455.1	0.266	391.4	576.5
2,2,3-trimethylpentane	27.2	436	0.254	382.99	563.5
2, 2,4-trimethylpentane	25.8	469.7	0.266	372.38	543.8
2, 3,3-trimethylpentane	28.2	455.1	0.269	387.92	573.5
2, 3,4-trimethylpentane	27.4	456.2	0.265	386.62	566.4
3-methyloctane	23.4	529	0.252	417.4	590
4-methyloctane	23.3	533.5	0.254	415.6	586.7
2,3-dimethylhéptane	24	515	0.257	413.7	589.6
2,6-dimethylhéptane	23	535	0.254	408.4	577.9
3,3-dimethylhéptane	24.3	506	0.256	410.2	588.4
3-ethyl,3-mhéxane	25.5	407	0.251	413.8	597.5
2, 2,3-trimethylhéxane	24.9	498.9	0.249	406.8	588
2, 2,5-trimethylhéxane	23.3	519	0.253	397.2	568
2, 3,3-trimethylhéxane	25.5	491	0.256	410.8	596
2, 3,5-trimethylhéxane	24	509	0.252	404.5	579.2
2, 4,4-trimethylhéxane	24.3	500	0.254	403.8	581.5
3, 3,4-trimethylhéxane	26.2	484	0.251	413.6	602.3
3,3-diethylpentane	26.7	528.5	0.254	419.3	610
3-ethyl-2,2-dimethylpentane	25.5	486	0.249	407	590.4
3-ethyl,2,4-dimethylpentane	25.2	489	0.254	409.9	591.2
2, 2, 3,3-tetramethylpentane	27.4	517.5	0.246	413.4	607.5
2, 2, 3,4-tetramethylpentane	26	516.5	0.251	406.2	592.6
2, 2, 4,4-tetramethylpentane	24.8	517.5	0.251	395.4	574.5
2, 3, 3,4-tetramethylpentane	27.2	516.5	0.257	414.7	607.5
2-methylnonane	21	596	0.246	440.15	610.3
2,5-dimethyloctane	21.5	569	0.244	431.6	603
2, 2, 3,4-tetramethylhéxane	23.7	525	0.241	432	620.4
2,2,3,4,4-pentamethylpentane	25.8	508	0.245	439.2	643.8
2-23-3-4-pentampentane	25.8	508	0.245	439.2	643.8
2-methylundecane	17.92	701.5	0.236	483.15	642.11
2-methyldodecane	16.55	757.5	0.228	502.65	659.93
2-methyltridecane	15.33	813.5	0.222	521.05	676.53
2-methyltétradecane	14.24	869.5	0.215	538.35	691.94
2-methylnonadecane	10.2	1149.5	0.186	612.15	759.19
2-methyleicosane	9.61	1265.5	0.18	624.9	771.63
2-methylhénéicosane	9.05	1261.5	0.175	637	783.89
2-methyldocosane	8.56	1317.5	0.17	648.6	796.09
2-methyltétracosane	7.67	1429.5	0.161	670.4	820.82

3-ethyl,3-methylpentane	28.3	455.1	0.266	391.4	576.5
2,2,3-trimethylpentane	27.2	436	0.254	382.99	563.5
2, 2,4-trimethylpentane	25.8	469.7	0.266	372.38	543.8
2, 3,3-trimethylpentane	28.2	455.1	0.269	387.92	573.5
2, 3,4-trimethylpentane	27.4	456.2	0.265	386.62	566.4
3-methyloctane	23.4	529	0.252	417.4	590
4-methyloctane	23.3	533.5	0.254	415.6	586.7
2,3-dimethylhéptane	24	515	0.257	413.7	589.6
2,6-dimethylhéptane	23	535	0.254	408.4	577.9
3,3-dimethylhéptane	24.3	506	0.256	410.2	588.4
3-ethyl,3-mhéxane	25.5	407	0.251	413.8	597.5
2, 2,3-trimethylhéxane	24.9	498.9	0.249	406.8	588
2, 2,5-trimethylhéxane	23.3	519	0.253	397.2	568
2, 3,3-trimethylhéxane	25.5	491	0.256	410.8	596
2, 3,5-trimethylhéxane	24	509	0.252	404.5	579.2
2, 4,4-trimethylhéxane	24.3	500	0.254	403.8	581.5
3, 3,4-trimethylhéxane	26.2	484	0.251	413.6	602.3
3,3-diethylpentane	26.7	528.5	0.254	419.3	610
3-ethyl-2,2-dimethylpentane	25.5	486	0.249	407	590.4
3-ethyl-2,4-dimethylpentane	25.2	489	0.254	409.9	591.2
2, 2, 3,3-tetramethylpentane	27.4	517.5	0.246	413.4	607.5
2, 2, 3,4-tetramethylpentane	26	516.5	0.251	406.2	592.6
2, 2, 4,4-tertamethylpentane	24.8	517.5	0.251	395.4	574.5
2, 3, 3,4-tetramethylpentane	27.2	516.5	0.257	414.7	607.5
2-methylnonane	21	596	0.246	440.15	610.3
2,5-dimethyloctane	21.5	569	0.244	431.6	603
2, 2, 3,4-tetramethylhéxane	23.7	525	0.241	432	620.4
2,2,3,4,4-pentamethylpentane	25.8	508	0.245	439.2	643.8
2-23-3-4pentaméthane	25.8	508	0.245	439.2	643.8
2-methylundecane	17.92	701.5	0.236	483.15	642.11
2-methyldodecane	16.55	757.5	0.228	502.65	659.93
2-methyltridecane	15.33	813.5	0.222	521.05	676.53
2-methyltétradécane	14.24	869.5	0.215	538.35	691.94
2-methylnonadécane	10.2	1149.5	0.186	612.15	759.19
2-méthyleicosane	9.61	1265.5	0.18	624.9	771.63
2-méthylhénéicosane	9.05	1261.5	0.175	637	783.89
2-méthyldocosane	8.56	1317.5	0.17	648.6	796.09
2-méthyltétracosane	7.67	1429.5	0.161	670.4	820.82

Tableau .2 Facteur acentrique, densité critique, l'énergie libre, l'enthalpie de formation, l'entropie des hydrocarbures constituant la base d'apprentissage.

Hydrocarbures	ω	dc (g/cm ³)	Gf (kcal/mol)	Hf (kcal/mol)	S (j/mol. ^o k)
acétylène	0.19	0.2306	50	54.19	200.62
propyne	0.215	0.2447	46.313	44.23	247.87
biacétylène	0.1	0.273	100.47	108.96	266.47
1-butyne	0.11	0.2459	48.3	39.48	290.55
2-butyne	0.124	0.2448	46.41	34.97	283.02
1-pentyne	0.164	0.245	50.16	34.5	329.46
2-pentyne	0.186	0.2455	46.41	29.32	331.47
3-méthyl, 1-butyne	0.176	0.2509	49.12	32.69	318.64
1-héxyne	0.249	0.2463	52.17	29.41	368.38
1-octyne	0.338	0.2474	56.19	19.53	446.215
1-nonyne	0.382	0.2478	58.2	14.59	485.13
1-decyne	0.426	0.248	60.2	9.65	524
1-undecyne	0.47	0.2515	62.21	4.71	562.92
1-dodecyne	0.512	0.2484	64.22	-0.23	601.83
1-tridecyne	0.553	0.2486	66.23	-5.17	640.752
1-tétracyne	0.591	0.2487	68.24	-10.11	679.66
1-pentacyne	0.628	0.2488	70.25	-15.05	718.583
1-héxacyne	0.661	0.2489	72.26	-19.99	757.499
1-hyptacyne	0.69	0.249	74.27	-24.93	796.41
1-octacyne	0.715	0.2491	76.28	-29.87	835.33
1-nonacyne	0.735	0.2492	78.29	-34.81	874.247
1-eicosyne	0.75	0.2492	81	-39.491	913.16
1-heneicosyne	1.891	0.2528	82.31	-44.69	939.87
1-docosyne	0.8141	0.2529	84.31	-49.63	978.78
1-tricosyne	1.134	0.253	86.31	-54.57	1017.7
éthylène	0.089	0.2205	16.282	12.5	219.24
propadiène	0.313	0.2473	48.37	45.92	243.694
propène	0.144	0.2234	14.99	4.88	266.684
1,2-butadiène	0.225	0.247	47.43	38.77	292.73
1-butène	0.191	0.2338	17.09	-0.03	305.3
cis, 2-butène	0.202	0.2391	15.74	-1.67	300.54
trans, 2-butène	0.205	0.2358	15.05	-2.67	296.18
2-mpropène	0.194	0.235	13.88	-4.04	293.31
1,2pentadiène	0.183	0.2468	50.29	34.8	333.14
1,3pentadiène	0.175	0.2477	34.88	22.73	323.95
1,3pentadiène	0.216	0.2464	35.07	18.6	319.35
1,4pentadiène	0.127	0.2468	40.69	25.2	333.14
2,3pentadiène	0.204	0.2473	49.22	34.54	324.36
3-méthyl, 1,2butadiène	0.16	0.2551	47.47	31	319.35
2-méthyl, 1-3butadiène	0.164	0.2561	34.87	18.1	315.33
1-pentène	0.233	0.2318	18.96	-5	345.477
cis, 2-pentène	0.251	0.2373	17.17	-6.71	345.93
trans, 2-pentène	0.259	0.2373	16.76	-7.59	340.08
2-méthyl, 1-butène	0.236	0.2357	15.51	-8.68	341.63
3-méthyl, 1-butène	0.209	0.2414	17.87	-6.92	333.14
2-méthyl, 2-butène	0.244	0.2365	14.26	-10.17	388.24
cis, 2-héxène	0.256	0.2398	19.16	-12.51	386.1
trans, 2-héxène	0.242	0.2398	18.63	-12.88	380.25
cis, 3-héxène	0.225	0.2405	19.66	-11.38	379.25

trans, 3-héxène	0.227	0.2405	19.04	-13.01	374.48
2-méthyl, 1-pentène	0.267	0.2381	17.47	-14.28	381.8
3-méthyl, 1-pentène	0.262	0.2429	20.4	-11.71	376.45
4-méthyl, 1-pentène	0.262	0.2429	20.45	-11.71	367.38
2-méthyl, 2-pentène	0.229	0.2398	16.34	-14.28	378.081
cis, 3-méthyl, 2-pentène	0.269	0.2398	16.98	-13.8	378.081
trans, 3-méthyl, 2-pentène	0.207	0.2405	16.74	-14.02	381.466
cis, 4-méthyl, 2-pentène	0.29	0.2338	18.4	-12.03	372.98
trans, 4-méthyl, 2-pentène	0.29	0.2338	17.77	-12.99	367.92
2-éthylbutène	0.267	0.2381	18.51	-9.88	376.241
2,3-diméthyl, 1-butène	0.221	0.2454	17.43	-13.32	365.29
2-3-diméthyl, 2-butène	0.239	0.2398	16.52	-14.15	343.428
1-hyptène	0.358	0.2237	22.95	-14.89	423.6
1-octène	0.386	0.2175	24.96	-19.82	462.55
1-nonène	0.43	0.2177	26.97	-24.74	501.51
1-décène	0.491	0.2158	28.98	-29.67	540.46
1-undécène	0.518	0.2439	30.98	-34.6	579.41
1-dodécène	0.558	0.2445	32.96	-39.52	618.33
1-tridécène	0.598	0.2449	-28.05	-44.45	657.28
1-tétradécène	0.644	0.2453	-31.69	-49.4	696.23
1-pentadécène	0.682	0.2457	-35.34	-54.36	735.19
1-héxadécène	0.721	0.246	-38.98	-59.28	774.14
1-hyptadécène	0.689	0.2407	-42.62	-64.21	813.1
1-octadécène	0.807	0.2464	-46.27	-69.148	852.05
1-nonadécène	0.747	0.2409	-49.91	-74.07	891
1-eicosène	0.77	0.2409	-53.56	-79.01	929.96
1-heneicosène	0.9182	0.247	52.07	-83.93	968.91
1-docosène	0.9574	0.2472	54.07	-88.86	1007.86
1-tricosène	0.9961	0.2473	56.07	-93.79	1046.81
1-tétracosène	1.0343	0.2474	58.07	-98.72	1085.76
1-pentacosène	1.0722	0.2476	60.07	-103.66	1124.71
éthane	0.099	0.2064	-7.86	-20.24	229.273
propane	0.153	0.222	-5.614	-24.82	269.692
n-butane	0.199	0.2279	-4.1	-30.15	309.822
n-pentane	0.251	0.2323	-2	-35	348.612
n-hexane	0.299	0.2339	-0.07	-39.96	388.03
n-hyptane	0.349	0.2341	1.92	-44.88	466.74
n-octane	0.398	0.2327	3.92	-49.82	466.74
n-nonane	0.445	0.2362	5.93	-54.74	505.69
n-décane	0.489	0.2364	7.94	-59.67	544.64
n-undécane	0.535	0.2368	9.95	-64.6	583.6
n-décane	0.575	0.2372	11.96	-69.52	622.51
n-tridécane	0.629	0.2364	13.97	-44.49	661.46
n-tétradécane	0.583	0.239	15.97	-79.45	700.42
n-pentadécane	0.604	0.2387	17.98	-84.39	739.37
n-héxadécane	0.742	0.2384	20.02	-89.318	778.33
n-heptadécane	0.77	0.2405	22.01	-94.24	817.28
n-octadécane	0.79	0.2439	24.01	-99.17	856.19
n-eicosane	0.907	0.2445	28.04	-108.93	934.14
n-heneicosane	0.9288	0.2351	30.14	-113.27	973.09
n-dodécane	0.9649	0.2451	32.14	-118.89	1012.04
n-tricosane	1.0035	0.2453	34.14	-123.83	1050.99
n-tétracosane	1.0417	0.2455	36.14	-128.76	1089.94
n-pentacosane	1.0794	0.2457	38.14	-133.69	1128.89

cyclopropane	0.13	0.2585	24.95	12.74	246.47
cyclobutane	0.181	0.2574	6.37	-1.31	155.66
cyclopentane	0.196	0.2698	9.23	-18.46	292.6
cyclohexène	0.21	0.2818	25.12	-1.28	310.44
1-méthyl, cyclopentène	0.219	0.264	23.46	0.47	326.04
3-méthyl, cyclopentène	0.221	0.2752	31.09	1.98	330.22
cyclohexane	0.212	0.273	7.59	-29.43	297.95
1-méthylcyclopentane	0.231	0.2638	8.55	-25.5	339.583
4-méthylcyclohexène	0.221	0.2752	24.05	-9.16	355.51
cycloheptane	0.237	0.2782	15.06	-28.52	272.41
éthylcyclopentane	0.271	0.2618	10.66	-30.37	377.95
1,1-diméthylcyclopentane	0.273	0.2778	9.33	-33.05	358.93
cis, 1,2-diméthylcyclopentane	0.269	0.2703	10.93	-30.96	365.79
trans, 1,2-diméthylcyclopentane	0.269	0.2703	9.17	-32.67	366.46
cis, 1,3-diméthylcyclopentane	0.272	0.2703	9.37	-32.76	366.46
trans, 1,3-diméthylcyclopentane	0.268	0.2703	9.91	-33.36	366.04
méthylcyclohexène	0.236	0.285	6.52	-36.99	343.01
propylcyclopentane	0.335	0.264	12.56	-35.39	416.87
éthylcyclohexène	0.243	0.2462	9.38	-41.05	343.35
1,1-diméthylcyclohexène	0.238	0.25	8.42	-43.26	364.66
cis, 1,2-diméthylcyclohexène	0.236	0.2381	9.85	-41.15	374.15
trans, 1,2-diméthylcyclohexène	0.242	0.2381	8.24	-43.02	370.56
cis, 1,3-diméthylcyclohexène	0.224	0.25	7.13	-44.16	370.09
trans, 1,3-diméthylcyclohexène	0.189	0.2701	8.68	-42.2	375.86
cis, 1,4-diméthylcyclohexène	0.234	0.2381	9.07	-42.22	370.09
trans, 1,4-diméthylcyclohexène	0.242	0.2701	7.58	-44.12	364.45
butylcyclopentane	0.354	0.2627	14.67	-40.68	455.78
propylcyclohexène	0.258	0.2672	11.31	-46.25	419.54
butylcyclohexène	0.362	0.2654	13.49	-50.95	458.04
n-propylcyclohexène	0.361	0.264	12.56	-55.93	497.45
1-cyclopentylhéptane	0.5146	0.2602	20.7	-55.35	572.49
n-héxylcyclohexène	0.4722	0.2642	17.51	-60.85	536.4
1-cyclopentyl-octane	0.526	0.2588	22.71	-60.29	611.41
1-cyclohexylheptane	0.498	0.2618	19.52	-65.79	574.79
1-cyclopentyl-nonane	0.566	0.2594	24.72	-64.85	650.32
1-cyclopentyl-decane	0.604	0.2577	26.72	-70.32	689.24
1-cyclopentyl-undecane	0.74	0.2589	28.73	-76.84	728.16
1-cyclopentyl-tridecane	0.697	0.2565	32.75	-85.11	805.98
1-cyclohexyl-dodecane	0.675	0.2586	29.56	-90.45	769.32
1-cyclopentyl-tetradecane	0.789	0.2542	34.76	-90.08	844.9
n-tétradécylcyclohexène	0.746	0.2577	33.58	-100.3	847.99
n-pentadécylcyclohexène	0.787	0.2574	35.59	-105.24	886.95
n-hexadécylcyclohexène	0.828	0.2571	37.6	-110.16	925.9
n-heptadécylcyclohexène	0.868	0.2568	38.52	-115.09	964.85
n-octadécylcyclohexène	0.908	0.2565	40.52	-120.02	1003.8
n-nonadécylcyclohexène	0.947	0.2548	42.52	-124.95	1042.75
éthylbenzène	0.302	0.2839	31.208	7.12	360.11
o-xylène	0.31	0.2877	29.177	4.54	352.41
m-xylène	0.325	0.2823	28.405	4.12	357.34
p-xylène	0.32	0.2804	28.952	4.29	352.08
2-mstyrène	0.325	0.2865	51.11	29.89	383.31
3-mstyrène	0.325	0.2865	50.34	29.33	389.16
4-mstyrène	0.325	0.2865	50.88	29.53	383.31
propylbenzène	0.344	0.2748	32.81	1.87	400.67

1-ethyl-2-methylbenzene	0.36	0.2453	31.323	-0.32	398.85
1-ethyl-3-methylbenzene	0.294	0.2613	30.217	-0.88	403.78
1-ethyl-4-benzene	0.322	0.2557	30.281	-0.68	398.52
1,2,4-trimethylbenzene	0.376	0.2763	27.912	-9.4	395.97
1,2,3-trimethylbenzene	0.366	0.2763	29.319	-8.04	390.83
1,2,4,5-tetramethylbenzene	0.435	0.2753	28.55	-10.82	418.5
isobutylbenzene	0.3782	0.2796	34.09	-5.15	423.43
sec-butylbenzene	0.2736	0.2826	35.23	-4.17	511.9
tert-butylbenzene	0.2647	0.279	33.45	-5.42	435.18
butylbenzene	0.393	0.2698	34.58	-3.3	439.5
m-diethylbenzene	0.359	0.2753	33.18	-5.26	430.25
o-diethylbenzene	0.354	0.2753	32.41	-5.82	435.18
p-diéthylbenzene	0.404	0.2793	32.96	-5.62	429.91
1-ethylnaphtalene	0.395	0.2995	52.85	22.21	426.73
1-2dimethylnaphtalène	0.443	0.2995	54.26	19.18	440.11
heptylbenzene	0.53	0.2671	40.56	-18.1	556.85
1-butylnaphtatene	0.533	0.2904	56.85	12.33	504.56
1-phenyloctane	0.577	0.2643	42.57	-23.031	595.8
1-pentylnaphtalene	0.575	0.2877	58.85	7.39	543.48
1-phenylnonane	0.628	0.2587	44.58	-27.96	634.75
1-phenyldecane	0.675	0.2569	46.58	-32.89	673.7
1-phenylundecane	0.722	0.2554	48.59	-37.82	712.65
1-phenyldodecane	0.773	0.2515	50.6	-42.75	751.6
1-phenyltridecane	0.816	0.2504	52.61	-47.68	790.55
1-phenyltétradecane	0.869	0.2473	54.62	-52.62	829.5
1-phenylpentadecane	0.914	0.2531	56.63	-57.55	868.45
1-phenylhexadecane	0.892	0.2609	58.64	-62.47	907.4
1-phenylheptadecane	0.932	0.2604	61.23	-67.4	946.35
1-phenyloctadecane	0.971	0.26	63.23	-72.33	985.3
1-phenylnonadecane	1.009	0.2596	65.23	-77.27	1024.25
2-methylbutane	0.227	0.2347	-3.54	-36.92	343.26
2,2-dimethylpropane	0.197	0.238	-3.64	-39.67	306.1
2-methylpentane	0.278	0.2349	-1.2	-41.66	380.54
3-methylpentane	0.272	0.2349	-0.51	-41.02	379.41
2,2dimethylbutane	0.232	0.2401	-2.37	-44.35	357.89
2,3-dimethylbutane	0.247	0.2411	-0.98	-42.49	365.41
ethylcyclopentane	0.271	0.2618	10.66	-30.37	377.95
2-methylhexane	0.329	0.238	0.77	-46.59	419.87
3-methylhexane	0.323	0.2439	1.1	-45.96	419.46
3ethylpentane	0.31	0.2409	2.57	-45.33	410.89
2,2-dimethylpentane	0.287	0.241	0.02	-49.27	392.29
2,3-dimethylpentane	0.296	0.2474	0.16	-47.62	413.65
2,4-dimethylpentane	0.302	0.24	0.72	-48.28	396.26
3,3-dimethylpentane	0.267	0.2421	0.63	-48.17	399.31
2,2,3-trimethylbutane	0.25	0.252	1.02	-48.95	382.88
2-methylhyptane	0.378	0.2339	3.06	-51.5	455.27
3-methylhyptane	0.37	0.2425	3.29	-50.82	461.13
4-methylhyptane	0.371	0.24	4	-50.69	452.9
3-ethylhexane	0.361	0.2481	3.95	-50.4	457.75
2,2-dimethylhexane	0.338	0.239	2.56	-53.71	430.79
2,3-dimethylhexane	0.346	0.244	4.23	-51.13	443.53
2,4-dimethylhexane	0.343	0.242	2.8	-52.44	445.21
2,5-dimethylhexane	0.356	0.2368	2.5	-53.21	438.6
3,3-dimethylhexane	0.32	0.2579	3.17	-52.61	437.64

3-ethyl-2-methylpentane	0.361	0.2565	5.08	-50.48	440.69
3-ethyl, 3-methylpentane	0.303	0.251	4.76	-51.38	432.54
2, 2, 3-trimethylpentane	0.297	0.262	4.09	-52.61	424.77
2, 2, 4-trimethylpentane	0.303	0.2432	3.27	-53.57	422.8
2, 3, 3-trimethylpentane	0.29	0.251	4.52	-51.73	431.12
2, 3, 4-trimethylpentane	0.315	0.2504	4.52	-51.97	427.65
3-methyloctane	0.413	0.2425	5	-56.74	490.39
4-methyloctane	0.416	0.2404	5	-56.74	490.69
2, 3-dimethylhéptane	0.385	0.249	3.86	-58.4	478.77
2, 6-dimethylhéptane	0.4	0.2397	3.86	-58.4	478.15
3, 3-dimethylhéptane	0.379	0.2535	4.36	-60.14	464.36
3-ethyl, 3-mhéxane	0.352	0.3151	5.93	-59.34	464.39
2, 2, 3-trimethylhéxane	0.332	0.2571	5.86	-61.2	451.73
2, 2, 5-trimethylhéxane	0.357	0.2471	3.21	-61.2	449.02
2, 3, 3-trimethylhéxane	0.333	0.2612	5.02	-61.82	449.01
2, 3, 5-trimethylhéxane	0.364	0.252	2.72	-60.06	463.44
2, 4, 4-trimethylhéxane	0.344	0.2565	3.22	-61.8	449.01
3, 3, 4-trimethylhéxane	0.328	0.265	5.02	-61.8	450.48
3, 3-diethylpentane	0.338	0.2427	8.38	-60.14	461.76
3-ethyl-2, 2-dimethylpentane	0.333	0.2639	4.79	-60.4	449.01
3-ethyl, 2, 4-dimethylpentane	0.352	0.2623	4.29	-60.46	463.44
2, 2, 3, 3-tetramethylpentane	0.303	0.2478	8.2	-56.7	421.85
2, 2, 3, 4-tetramethylpentane	0.313	0.2483	7.8	-56.64	436.266
2, 2, 4, 4-tetramethylpentane	0.312	0.2478	8.13	-57.83	460.76
2, 3, 3, 4-tetramethylpentane	0.313	0.2483	8.15	-56.46	475.18
2-methylnonane	0.459	0.2387	7	-61.31	533.17
2, 5-dimethyloctane	0.432	0.2501	5.86	-63.34	515.1
2, 2, 3, 4-tetramethylhéxane	0.345	0.271	3.45	-67.8	475.18
2, 2, 3, 4, 4-pentamethylpentane	0.294	0.2801	5.24	-71.2	600.46
2-23-3-4pentaméthane	0.294	0.2801	3.44	-71.8	448.01
2-methylundécane	0.54	0.2428	11	-71.17	611.07
2-methyldodécane	0.583	0.2434	13	-76.1	650.02
2-methyltridécané	0.625	0.2439	15	-81.033	688.97
2-methyltétradécane	0.667	0.2443	17	-85.96	727.92
2-methylnonadécane	0.872	0.2458	27	-110.62	922.67
2-méthyleicosane	0.912	0.2344	29	-115.55	961.62
2-méthylhénéicosane	0.951	0.2462	31	-120.48	1000.57
2-méthyldocosane	0.99	0.2464	33	-125.41	1039.52
2-méthyltétracosane	1.066	0.2467	37	-135.27	1117.42

Tableau.3 Chaleur spécifique, volume molaire, tension superficiel à 20°C, spécifique gravité, indice de réfraction à 20°C des hydrocarbures constituant la base d'apprentissage.

Hydrocarbures	Cp(cal/mol.°C)	Vm(cm ³ /mol)	Ts (dyne/cm)	Spgr	n	Hv (kcal.mol)
acétylène	10.499	32.91	1.79	0.416	1.44389	4.05
propyne	14.5	47.81	13.22	0.63	1.46074	5.23
biacétllene	44.3	53.62	20.59	0.779	1.4291	5.72
1-butyne	18.46	64.34	16.85	0.65	1.47164	5.97
2-butyne	18.63	64.64	20.7	0.697	1.39654	6.37
1-pentyne	25.18	81.4	18.87	0.695	1.3848	6.19
2-pentyne	23.59	81.25	21.54	0.716	1.4039	6.50
3-methyl,1-butyne	25.02	79.49	17.86	0.6705	1.3723	5.97
1-héxyne	30.65	97.74	21.53	0.719	1.3986	6.94
1-octyne	41.58	130.74	24.12	0.751	1.4163	8.21
1-nonyne	47.04	147.26	19.73	0.762	1.4219	7.13
1-decyne	52.51	163.78	25.49	0.771	1.4272	9.36
1-undecyne	57.98	180.32	25.77	0.778	1.4314	9.87
1-dodecyne	63.44	196.86	26.15	0.785	1.435	10.40
1-tridecyne	68.91	213.41	26.21	0.786	1.4381	10.86
1-tetradecyne	74.37	229.96	26.29	0.801	1.4467	11.29
1-pentadecyne	79.84	246.52	26.4	0.799	1.4431	11.75
1-héxadecyne	85.31	263.09	25.97	0.803	1.4451	12.00
1-hyptadecyne	90.77	279.66	25.95	0.8055	1.4469	12.37
1-octadecyne	96.24	296.24	25.55	0.809	1.4485	12.57
1-nonadecyne	101.7	312.82	25.032	0.823	1.45	12.73
1-eicosyne	107.17	329.4	24.7	0.813	1.4513	12.90
1-heneicosyne	112.69	462.61	28.45	0.808	1.4812	17.20
1-docosyne	118.14	485.68	28.32	0.8099	1.4536	17.59
1-tricosyne	123.59	508.8	31.03	0.8126	1.4546	19.61
éthylène	10.41	37.11	4.89	0.435	1.00067	3.24
propadiene	14.1	47.31	11.38	0.657	1.56411	4.45
propène	15.27	55.06	7.34	0.522	1.00097	4.40
1,2-butadiene	19.15	64.05	16.67	0.658	1.3916	5.91
1-butene	20.47	70.22	12.41	0.601	1.00156	5.24
cis, 2-butène	18.86	68.67	15	0.627	1.364	5.59
trans,2-butene	20.99	69.61	13.7	0.61	1.355	5.44
2-mpropene	21.3	69.87	12.27	0.594	1.0012	5.27
1,2pentadiene	22.6	80.81	19.43	0.698	1.42091	6.59
1,3pentediene	24.7	80.52	18.81	0.691	1.43634	6.19
1,3pentadiene	25.1	80.96	18.85	0.676	1.43008	6.31
1,4pentadiene	24.2	80.81	15.63	0.661	1.38876	6.01
2,3pentadiene	25.2	80.66	20.34	0.695	1.42842	6.40
3-methyl,1,2butadiene	25.3	78.16	19.15	0.692	1.42026	6.19
2-methyl,1-3butadiene	25	77.87	16.69	0.686	1.42194	5.90
1-pentene	26.19	88.64	16	0.646	1.37148	6.04
cis,2-pentene	24.32	86.55	17.38	0.661	1.383	6.25
trans,2-pentene	25.92	86.55	16.9	0.653	1.3807	6.25
2-methyl,1-butène	26.69	87.14	16.5	0.656	1.3778	6.04
3-methyl,1-butène	28.35	85.08	14.4	0.632	1.3647	5.81
2-methyl,2-butène	25.1	86.84	17.61	0.668	1.3877	6.39
cis,2-héxene	30.04	102.89	19.3	0.687	1.39561	6.81
trans,2-héxene	31.64	102.89	19.16	0.678	1.39363	6.79
cis, 3-héxene	29.55	102.59	18.86	0.68	1.39189	6.68
trans, 3-héxene	31.75	102.59	18.65	0.677	1.39561	6.61

2-methyl,1-pentene	32.41	103.63	18.63	0.684	1.392	6.71
3-methyl,1-pentene	34.64	101.56	17.74	0.672	1.38422	6.53
4-methyl,1-pentene	30.23	101.56	17.71	0.668	1.38267	6.63
2-methyl,2-pentene	30.26	102.89	18.97	0.691	1.4003	6.70
cis,3-methyl,2-pentene	30.26	102.89	19.05	0.698	1.40452	6.73
trans,3-methyl,2-pentene	30.26	102.59	19.48	0.702	1.40157	6.83
cis,4-methyl,2-pentene	31.92	105.54	17.06	0.669	1.38793	6.65
trans,4-methyl,2-pentene	33.8	105.54	17.31	0.669	1.38878	6.70
2-ethylbutene	31.92	103.63	18.91	0.694	1.39671	6.76
2,3dimethyl,1-butene	30.23	100.53	17.38	0.683	1.39022	6.42
2-3dimethyl,2-butene	30.48	102.89	20.3	0.678	1.41235	6.98
1-hyptene	37.1	140.87	19.8	0.701	1.3998	7.43
1-octene	42.56	156.95	21.28	0.719	1.4087	8.07
1-nonene	48.03	173.11	22.54	0.733	1.41572	8.68
1-décene	53.49	189.33	23.54	0.746	1.42146	9.24
1-undecene	58.96	205.63	24.41	0.754	1.42609	9.86
1-dodecene	64.43	221.94	25.15	0.762	1.43002	10.60
1-tridecene	69.89	238.27	25.8	0.769	1.43336	10.10
1-tetradecene	75.36	254.6	26.36	0.775	1.43336	10.83
1-pentadecene	80.82	270.99	26.87	0.78	1.43883	11.17
1-héxadecene	86.29	287.3	27.32	0.785	1.4412	11.46
1-hyptadecene	91.76	303.72	27.71	0.79	1.4431	12.07
1-octadécène	97.22	320.08	28.1	0.794	1.4449	12.38
1-nonadecene	102.69	336.49	28.9	0.797	1.4466	11.93
1-eicosene	108.15	352.85	29.22	0.799	1.448	12.41
1-heneicosene	113.72	369.23	29.51	0.831	1.4493	12.76
1-docosene	119.19	385.65	29.78	0.832	1.4505	12.99
1-tricosene	124.66	402.13	30.03	0.833	1.4516	13.21
1-tetracosene	130.14	418.44	30.26	0.835	1.4527	13.43
1-pentacosene	135.61	434.93	30.48	0.835	1.4536	13.66
éthane	12.58	42.53	0.98	0.356	1.000709	3.52
propane	17.57	58.06	7.49	0.508	1.00129	4.49
n-butane	23.29	74.63	12.41	0.584	1.3326	5.35
n-pentane	28.73	90.99	16	0.631	1.35748	6.16
n-hexane	34.2	130.7	18.42	0.664	1.37486	6.91
n-hyptane	39.67	146.5	20.3	0.688	1.38764	7.58
n-octane	45.14	162.6	21.76	0.707	1.3975	8.22
n-nonane	50.6	178.7	22.38	0.722	1.40542	8.82
n-decane	56.07	194.9	23.37	0.734	1.41189	9.40
n-undécane	61.53	211.2	24.21	0.744	1.41725	9.83
n-decane	67	227.5	24.49	0.753	1.4216	10.04
n-tridecane	72.47	243.8	25.55	0.76	1.4256	10.69
n-tetradecane	77.93	260.1	26.13	0.767	1.42892	11.05
n-pentadecane	83.4	276.5	26.64	0.773	1.43188	11.38
n-héxadecane	88.86	292.8	27.04	0.777	1.43453	11.69
n-heptadécane	94.33	309.1	27.48	0.782	1.4368	11.96
n-octadecane	99.8	325.5	27.87	0.786	1.4389	12.20
n-eicosane	110.73	358.3	28.46	0.791	1.4425	12.58
n-heneicosane	116.31	374.7	28.79	0.799	1.444	12.84
n-dodecane	121.78	391	29.03	0.802	1.4454	13.06
n-tricosane	127.25	407.4	29.25	0.804	1.4467	13.30
n-tetracosane	132.72	423.9	29.46	0.806	1.4479	13.51
n-pentacosane	138.196	440.3	29.65	0.808	1.449	13.75
cyclopropane	11.9	47.55	11.99	0.75	1.56822	4.79

cyclobutane	15.85	63.76	18.4	0.694	1.365	5.78
cyclopentane	19.82	76.08	22.61	0.75	1.40645	6.50
cyclohexène	25.1	85.37	25.74	0.816	1.44654	7.21
1-méthyl, cyclopentène	24.1	91.17	22.21	0.7835	1.4322	6.93
3-méthyl, cyclopentène	23.9	87.43	22.67	0.7683	1.421	6.88
cyclohexane	25.4	108.09	24.98	0.783	1.42623	7.16
1-méthylcyclopentane	26.24	93.47	23.7	0.754	1.4097	6.93
4-méthylcyclohexène	3.31	87.43	23.27	0.803	1.4414	6.98
cycloheptane	29.6	103.48	27.53	0.815	1.4449	7.98
ethylcyclopentane	31.49	109.96	23.88	0.771	1.41981	7.61
1,1-diméthylcyclopentane	31.86	103.63	21.74	0.759	1.41356	7.18
cis, 1,2-diméthylcyclopentane	32.06	106.51	23.27	0.777	1.42217	7.50
trans, 1,2-diméthylcyclopentane	32.14	106.51	22.5	0.756	1.412	7.36
cis, 1,3-diméthylcyclopentane	32.14	106.51	22.37	0.753	1.41074	7.33
trans, 1,3-diméthylcyclopentane	32.14	106.51	22.26	0.749	1.40894	7.28
méthylcyclohexane	32.27	127.61	24.93	0.774	1.4231	7.44
propylcyclopentane	36.96	124.7	24.04	0.781	1.42626	8.04
ethylcyclohexane	37.96	142.41	25.65	0.792	1.433	8.20
1,1-diméthylcyclohexane	52.4	131.74	24.12	0.785	1.429	7.56
cis, 1,2-diméthylcyclohexane	53.57	138.35	25.72	0.801	1.4358	7.76
trans, 1,2-diméthylcyclohexane	54.31	138.35	24.05	0.78	1.4308	7.66
cis, 1,3-diméthylcyclohexane	54.07	131.74	23.12	0.77	1.449	7.60
trans, 1,3-diméthylcyclohexane	54.07	121.89	24.67	0.789	1.4229	7.74
cis, 1,4-diméthylcyclohexane	54.07	138.35	24.45	0.787	1.4296	7.66
trans, 1,4-diméthylcyclohexane	54.15	121.89	23.02	0.767	1.4209	7.72
butylcyclopentane	42.42	141.06	25.62	0.789	1.4316	8.82
propylcyclohexane	44.03	159.06	26.08	0.798	1.43705	8.62
butylcyclohexane	49.5	175.5	27.04	0.803	1.44075	9.40
n-propylcyclohexane	55.014	208.39	27.04	0.8082	1.4437	9.68
1-cyclopentylhéptane	33.26	190.21	26.18	0.805	1.4421	10.43
n-héxylcyclohexane	60.49	208.39	27.44	0.812	1.4466	10.09
1-cyclopentyloctane	39.03	207.2	26.96	0.809	1.4578	10.96
1-cyclohexylheptane	65.95	224.87	27.8	0.815	1.4486	10.47
1-cyclopentylnonane	69.75	296.57	27.06	0.812	1.4467	11.29
1-cyclopentyldecane	52.56	240.31	28.59	0.815	1.44862	12.46
1-cyclopentylundecane	80.68	341.89	27.26	0.817	1.4503	13.80
1-cyclopentyltridecane	67.86	290.02	26.33	0.706	1.4531	12.79
1-cyclohexyldodecane	93.31	306.99	26.41	0.71	1.456	11.86
1-cyclopentyltétradecane	73.62	306.6	24.15	0.825	1.4543	12.65
n-tétradécylcyclohexane	104.26	339.9	29.48	0.8972	1.4579	12.24
n-pentadécylcyclohexane	109.72	356.35	29.63	0.859	1.4588	12.42
n-hexadécylcyclohexane	115.2	372.74	29.77	0.858	1.4596	12.58
n-heptadécylcyclohexane	120.67	389.15	29.9	0.858	1.4603	12.78
n-octadécylcyclohexane	126.14	405.6	30.01	0.858	1.461	12.94
n-nonadécylcyclohexane	131.61	422.01	30.11	0.858	1.4616	13.11
ethylbenzene	24.8	121.22	28.48	0.872	1.49588	6.76
o-xylène	31.85	108.19	30.03	0.885	1.50545	8.77
m-xylène	30.49	110.28	28.63	0.863	1.49722	8.63
p-xylène	30.32	111.02	28.31	0.866	1.49582	8.60
2-mstyrène	34.7	121.01	30.64	0.912	1.54393	9.19
3-mstyrène	34.7	121.01	30.91	0.913	1.54115	9.25
4-mstyrène	34.7	121.01	30.73	0.925	1.53965	9.21

propylbenzene	36.73	139.44	28.99	0.867	1.49202	9.14
1-etyl-2-methylbenzene	37.74	143.86	30.2	0.885	1.50456	8.84
1-etyl-3-methylbenzene	36.38	135.02	29.07	0.869	1.4966	8.87
1-etyl-4-benzene	36.22	137.96	28.84	0.866	1.495	8.90
1,2,4-trimethylbenzene	37.1	127.64	29.71	0.88	1.50484	9.45
1,2,3-trimethylbenzene	51.6	127.64	31.27	0.899	1.51393	9.45
1,2,4,5-tetramethylbenzene	44.57	143.13	31.35	0.891	1.5116	10.88
isobutylbenzene	41	140.91	29.72	0.858	1.48646	9.04
sec-butylbenzene	41.89	139.44	28.36	0.866	1.4902	9.07
tert-butylbenzene	41.89	141.21	26.88	0.871	1.49266	8.99
butylbenzene	41.89	156.05	29.32	0.865	1.48979	9.38
m-diethylbenzene	41.5	143.13	29.06	0.867	1.49552	9.44
o-diethylbenzene	41.5	143.13	29.57	0.883	1.50346	9.47
p-diethylbenzene	41.5	141.06	29.13	0.865	1.49483	9.69
1-ethylnaphtalene	43	153.16	37.76	1.01	1.31432	11.41
1,2-dimethylnaphtalène	42.52	153.16	38.29	0.85	1.4639	11.82
heptylbenzene	58.29	205.79	29.81	0.861	1.4857	10.81
1-butylaphtatene	54.53	186.23	36.67	0.98	1.7145	12.57
1-phenyloctane	63.78	222.3	29.91	0.859	1.4848	11.25
1-pentylaphtalene	60.3	202.77	36.079	0.97	1.74496	13.04
1-phenylnonane	69.25	238.79	30.97	0.859	1.4841	11.57
1-phenyldecane	74.72	255.27	30.07	0.859	1.48319	11.88
1-phenylundecane	80.2	271.73	31.35	0.859	1.4828	12.14
1-phenyldodecane	85.66	288.2	30.18	0.859	1.4822	13.88
1-phenyltridecane	91.14	304.64	30.22	0.859	1.4818	12.57
1-phenyltetradecane	96.61	321.12	30.25	0.859	1.4815	12.76
1-phenylpentadecane	102.07	337.57	30.28	0.859	1.4812	12.92
1-phenylhexadecane	107.55	353.98	30.3	0.793	1.4813	13.04
1-phenylheptadecane	113.02	370.43	30.32	0.796	1.4811	13.39
1-phenyloctadecane	118.49	386.85	30.33	0.798	1.4809	13.56
1-phenylnonadecane	123.96	403.31	30.35	0.802	1.4807	13.74
2-methylbutane	28.39	90.05	15	0.625	1.35373	7.64
2,2-dimethylpropane	29.07	88.79	11.83	0.557	1.3356	5.44
2-methylpentane	34.46	131.94	17.38	0.658	1.37145	6.63
3-methylpentane	34.2	107.57	18.12	0.669	1.37652	6.75
2,2dimethylbutane	33.91	105.25	16.3	0.654	1.36876	6.31
2,3-dimethylbutane	33.59	104.77	17.37	0.666	1.37495	6.51
ethylcyclopentane	31.49	109.96	23.88	0.771	1.41981	7.61
2-methylhexane	39.67	147.67	19.29	0.683	1.38487	7.34
3-methylhexane	39.67	120.51	19.79	0.692	1.38864	7.39
3ethylpentane	39.67	122.04	20.44	0.703	1.3934	7.40
2,2-dimethylpentane	39.67	121.98	18.02	0.678	1.38216	7.02
2,3-dimethylpentane	39.67	118.8	19.96	0.7	1.39197	7.30
2,4-dimethylpentane	39.67	122.48	18.15	0.677	1.38148	7.03
3,3-dimethylpentane	39.67	121.45	19.59	0.658	1.39092	7.10
2,2,3-trimethylbutane	39.67	116.62	18.76	0.695	1.40295	6.98
2-methylhptane	45.14	163.67	20.6	0.702	1.39494	8.08
3-methylhptane	45.14	138.29	21.17	0.71	1.39848	8.02
4-methylhptane	45.14	139.73	21	0.709	1.39792	8.00
3-ethylhexane	45.14	135.16	21.51	0.718	1.40162	8.01
2,2-dimethylhexane	45.14	140.32	19.6	0.7	1.39349	7.71
2,3-dimethylhexane	45.14	137.43	20.99	0.716	1.40113	7.94
2,4-dimethylhexane	45.14	138.55	20.05	0.705	1.39534	7.71
2,5-dimethylhexane	45.14	141.59	19.73	0.698	1.39246	7.80

3,3-dimethylhexane	45.14	130	20.63	0.714	1.40009	7.76
3-ethyl-2-methylpentane	45.14	130.68	21.52	0.724	1.40401	7.86
3-ethyl-3-methylpentane	45.14	133.57	21.99	0.732	1.40775	7.86
2, 2,3-trimethylpentane	45.14	127.94	20.67	0.72	1.40295	7.59
2, 2,4-trimethylpentane	45.14	137.88	18.77	0.696	1.39145	7.35
2, 3,3-trimethylpentane	45.14	133.57	21.56	0.73	1.4075	7.71
2, 3,4-trimethylpentane	45.14	133.89	21.14	0.723	1.40422	7.76
3-methyloctane	50.6	155.37	22.34	0.725	1.4063	8.63
4-methyloctane	50.6	156.7	22.34	0.725	1.4062	8.60
2,3-dimethylheptane	50.6	151.24	22.34	0.73	1.4085	8.45
2,6-dimethylheptane	50.6	157.14	20.83	0.714	1.4007	8.35
3,3-dimethylheptane	50.6	148.59	22.01	0.729	1.4088	8.28
3-ethyl-3-mhexane	50.6	119.39	23.22	0.74	1.414	8.37
2, 2,3-trimethylhexane	50.6	146.49	21.86	0.734	1.4105	8.13
2, 2,5-trimethylhexane	50.6	152.42	20.04	0.711	1.39972	7.94
2, 3,3-trimethylhexane	50.6	144.16	22.41	0.742	1.4141	8.21
2, 3,5-trimethylhexane	50.6	149.47	21.27	0.726	1.4061	8.16
2, 4,4-trimethylhexane	50.6	146.81	21.17	0.728	1.40745	8.06
3, 3,4-trimethylhexane	50.6	142.09	23.27	0.749	1.4178	8.28
3,3-diethylpentane	50.6	155.22	23.75	0.757	1.42051	8.48
3-ethyl-2,2-dimethylpentane	50.6	142.68	22.38	0.739	1.4123	8.44
3-ethyl-2,4-dimethylpentane	50.6	143.57	22.8	0.742	1.4137	8.28
2, 2, 3,3-tetramethylpentane	50.6	151.98	23.38	0.761	1.4236	8.24
2, 2, 3,4-tetramethylpentane	50.6	151.68	21.98	0.743	1.41472	8.07
2, 2, 4,4-tetramethylpentane	50.6	151.98	20.37	0.724	1.40694	7.78
2, 3, 3,4-tetramethylpentane	50.6	151.68	23.31	0.759	1.42222	8.31
2-methylnonane	56.12	195.88	22.71	0.731	1.41	9.16
2,5-dimethyloctane	56.12	167.18	22.05	0.734	1.4112	8.88
2, 2, 3,4-tetramethylhexane	56.12	154.19	22.74	0.759	1.4216	8.60
2, 2,3, 4,4-pentamethylpentane	56.12	149.18	24.14	0.771	1.43069	8.59
2-23-3-4pentampentane	56.12	149.18	24.14	0.784	1.43606	8.59
2-methylundecane	67.062	228.4	24.26	0.751	1.4199	9.83
2-methyldodecane	72.53	244.75	24.9	0.758	1.424	10.23
2-methyltridecane	78	261.08	25.47	0.7648	1.4275	10.60
2-methyltetradecane	83.47	277.38	26.53	0.7707	1.4305	10.94
2-methylnonadecane	110.83	359.26	28.56	0.7915	1.4414	12.33
2-methyleicosane	116.3	376.04	28.88	0.793	1.4422	12.57
2-methylheneicosane	121.77	392.38	29.16	0.799	1.4437	12.81
2-methyldocosane	127.89	408.71	29.43	0.801	1.4451	13.05
2-methyltetracosane	138.18	441.36	29.9	0.805	1.4475	13.29

Les corrélations utilisées pour compléter la base de donnée :

1. Tension superficielle

$$T_s = P_c^{2/3} T_c^{1/3} \phi (1 - T_r)^{11/9}$$

$$\phi = 0.1207 \left(1 + \frac{T_{ebr} \ln P_c}{1 - T_{ebr}} \right) - 0.281 \dots \dots \dots \quad (\text{Brock et Bird (1955)}).$$

2. L'indice de réfraction :

$$\text{Log}(M) = 0.0019764 T_{eb} + 1.93436 + \log(2.15 - n_{20d20}) \dots \dots \dots \quad (\text{Hersh})$$

3. Volume molaire:

$$V_m = 0.285 V_c^{1.048} \dots \dots \dots \quad (\text{Tyne-Calus}).$$

4. Capacité calorifique :

$$\text{Contribution de groupes} \dots \dots \dots (\text{Rihani et Doraiswamy}).$$

5. Chaleur latente de vaporisation :

$$H_v = \frac{T_{eb}(5 \log P_c - 2.17)}{0.930 - (T_{eb}/T_c)} \dots \dots \dots (\text{Riedel}).$$

6. Densité critique :

$$d_c = M/V_c \dots \dots \dots (\text{Définition}).$$

7. Chaleur de formation standard :

$$\text{Contribution de groupes} \dots \dots \dots (\text{Verma et Doraiswamy}).$$

8. L'énergie libre standard de formation :

$$\text{contribution de groupes} \dots \dots \dots (\text{Rihani et Doraiswamy's}).$$

9. L'entropie standard :

$$\text{Contribution de groupes} \dots \dots \dots (\text{Anderson-Beyer-Watson}).$$

Tableau. 1 fraction massique en paraffine et naphène, densité, spécifique-gravity, indice de réfraction, masse moléculaire et température d'ébullition des fractions de la base d'apprentissage.

FR (Réf)	XP (%)	XN (%)	d ₂₀	Spgr	n ₂₀	M (g/mol)	Teb (° C)
FR1(12)	100	0	0.616	0.6205	1.361	73	35
FR2 (11)	99.5	0.5	0.631	0.6355	1.358	79	40
FR3 (12)	85.72	12.08	0.634	0.6385	1.369	77.6	45
FR4 (19)	89	9	0.6575	0.662	1.3711	79	53
FR5 (19)	92.7	6	0.6525	0.657	1.3694	80	54.5
FR6 (11)	87	13	0.649	0.6535	1.3682	85.1	55
FR7 (12)	91.66	5	0.647	0.6515	1.375	82	55
FR8 (13)	82	16	0.6655	0.67	1.375	81	58
FR9 (19)	84	13	0.6705	0.675	1.3774	83	62
FR10 (19)	87.5	11	0.6585	0.663	1.3722	82	62
FR11 (2)	72.45	23.53	0.678	0.6832	1.3812	85.97	62
FR12 (13)	77.5	19.5	0.667	0.6715	1.376	82	63
FR13 (12)	71.26	18.1	0.662	0.6665	1.382	86.4	65
FR14 (13)	90.43	9.57	0.677	0.6815	1.389	85.4	65
FR15 (2)	65.08	26.68	0.698	0.7032	1.3909	85.99	66
FR16 (12)	70.63	29.37	0.682	0.6865	1.388	92	75
FR17 (19)	65.6	32.9	0.693	0.6975	1.391	92.1	75
FR18 (13)	77.26	22.74	0.689	0.6935	1.394	90.3	75
FR19 (3)	72.7	23.18	0.6836	0.6887	1.3902	93.99	77.5
FR20 (19)	68	30	0.689	0.6735	1.3871	88	79
FR21 (16)	71.2	19	0.6904	0.6949	1.3929	94	80.5
FR22 (17)	77.2	18.7	0.7129	0.7172	1.4058	92.3	82
FR23 (12)	70.56	29.44	0.701	0.7053	1.399	95.3	85
FR24 (16)	66	20	0.7001	0.7043	1.3969	96.4	85.5
FR25 (11)	68.3	31.1	0.703	0.7072	1.394	100.8	90
FR26 (19)	80	15	0.6895	0.694	1.388	92	90
FR27 (16)	57.9	21.8	0.7062	0.7104	1.4001	98.7	90.5
FR28 (19)	71.5	17	0.698	0.7025	1.3921	92	91
FR29 (19)	78.6	16	0.6918	0.6963	1.3893	93	92
FR30 (3)	67.34	25.21	0.7027	0.7077	1.3995	100.42	92.5
FR31 (4)	68.21	24.86	0.7006	0.7055	1.3984	100.67	92.5
FR32 (19)	63.7	32.8	0.7038	0.708	1.3951	94	94
FR33 (19)	65	25.5	0.7048	0.709	1.3955	94	94
FR34 (12)	63.78	28.29	0.715	0.7193	1.405	100.3	95
FR35 (13)	59.2	21.26	0.706	0.7103	1.402	100.4	95
FR36 (16)	55.3	18.8	0.7095	0.7138	1.4022	101.1	95.5
FR37 (19)	77.5	15.5	0.6955	0.7	1.3913	95	97
FR38 (19)	63.5	26	0.7117	0.716	1.3993	97	100
FR39 (19)	56.5	31.5	0.7237	0.728	1.4052	101	100
FR40 (1)	65.17	25.93	0.7114	0.716	1.3991	103.86	100
FR41 (16)	52.8	18	0.716	0.7203	1.404	104.1	100.5
FR42 (15)	58	39	0.73	0.7343	1.41	104.2	102
FR43 (19)	72	19	0.7168	0.721	1.4019	102	103.89
FR44 (19)	76.5	15.5	0.701	0.706	1.3947	97	104
FR45 (12)	58.33	41.67	0.724	0.7283	1.409	105.5	105
FR46 (13)	63.27	12.24	0.714	0.7182	1.406	105.5	105
FR47 (16)	53.5	16	0.7191	0.7233	1.4065	106.3	105
FR48 (19)	64.5	28.5	0.7218	0.726	1.4045	104	107
FR49 (19)	68.5	23	0.7097	0.714	1.3987	100	108.89

FR50 (19)	75.5	16	0.7067	0.711	1.3973	100	109
FR51 (19)	56.5	32.5	0.7228	0.727	1.4052	101	110
FR52 (19)	60	35	0.7188	0.723	1.4032	102	110
FR53 (19)	48	40	0.7398	0.744	1.4139	106	112
FR54 (19)	64	16.5	0.7347	0.739	1.4113	107	112
FR55 (14)	59.1	37.4	0.7241	0.7283	1.4052	111.6	112
FR56 (4)	62.4	26.74	0.7228	0.7277	1.4	109.79	112.5
FR57 (3)	61.18	27.15	0.7261	0.7309	1.4118	109.35	112.5
FR58 (19)	63	22	0.7337	0.738	1.4109	107	113
FR59 (19)	67.5	16	0.7193	0.7235	1.4036	102	113.5
FR60 (19)	66	24	0.7163	0.7205	1.4021	103	114
FR61 (12)	54.68	42.1	0.73	0.7343	1.412	111	115
FR62 (13)	61.8	19.2	0.726	0.7303	1.412	110.4	115
FR63 (19)	52.5	33	0.7377	0.742	1.413	107	115
FR64 (19)	61.5	28	0.7312	0.7355	1.4097	108.8	116
FR65 (11)	66.9	21.1	0.7305	0.7348	1.4094	108	117
FR66(19)	68.5	19.5	0.7318	0.736	1.41	110	117
FR67(2)	62.11	26.76	0.7255	0.7304	1.4116	112.81	118
FR68 (19)	63.5	25.5	0.7228	0.727	1.4057	106	121
FR69 (19)	51.9	41.7	0.7427	0.747	1.4159	115	124
FR70 (19)	58.1	25.9	0.732	0.7362	1.411	118	125
FR71 (12)	58.23	26.22	0.74	0.7442	1.42	114.6	125
FR72 (17)	73	21.5	0.7326	0.7369	1.415	116.6	126
FR73 (19)	61.9	30.6	0.7352	0.7395	1.4121	120.9	126.67
FR74 (19)	51	32.5	0.7483	0.7525	1.4188	114	126.67
FR75 (19)	45.5	40.5	0.7508	0.755	1.4202	114	127
FR76 (4)	59.58	27.44	0.7355	0.7404	1.417	117.31	127.5
FR77 (19)	68.5	19	0.7387	0.743	1.414	115	128
FR78 (19)	56.5	30.5	0.7427	0.747	1.4161	115	130
FR79 (3)	52.15	29.47	0.758	0.7625	1.4288	117.49	132.5
FR80 (19)	56	30	0.7458	0.75	1.4178	117	133
FR81 (19)	62	20	0.7508	0.755	1.4204	118	134
FR82 (13)	50.29	36.84	0.745	0.7492	1.422	120.5	135
FR83 (19)	39.7	39.6	0.7734	0.7774	1.4328	131	138.89
FR84 (11)	67.9	24.2	0.749	0.7533	1.4193	125.8	140
FR85 (13)	60.97	22.37	0.754	0.7582	1.427	125.7	145
FR86 (17)	62.1	23	0.749	0.7532	1.4239	127.2	146
FR87 (2)	56.88	27.96	0.749	0.7539	1.4239	127.11	146
FR88 (19)	60.5	13.5	0.7513	0.7555	1.421	126	147
FR89 (19)	51	31	0.768	0.772	1.4300	127	147
FR90 (19)	50	27	0.7635	0.7675	1.4275	127	147
FR91 (19)	42	39	0.7685	0.7725	1.4303	127	148
FR92 (1)	50.45	29.53	0.7682	0.7721	1.4301	125.83	148
FR93 (18)	65	17	0.759	0.7628	1.4325	130	151.11
FR94 (19)	49	31.5	0.77	0.774	1.4312	129	152
FR95 (4)	54.3	28.53	0.7584	0.7631	1.43	129.99	152.5
FR96 (19)	63.7	17.4	0.7623	0.7666	1.4272	126	153
FR97 (19)	42	40	0.7715	0.7755	1.4319	130	153
FR 98 (19)	50	29	0.767	0.771	1.4296	130	153
FR 99 (11)	67.8	22.8	0.767	0.771	1.429	133.3	155
FR 100 (13)	59.41	27.39	0.764	0.768	1.434	130	155
FR 101 (18)	66.5	17	0.762	0.7658	1.435	133	157.22
FR 102 (19)	47.5	32	0.772	0.776	1.4324	133	158
FR 103 (19)	60	15	0.765	0.769	1.4286	133	158.5

FR 104 (19)	40.5	41	0.7745	0.7785	1.4338	133	159
FR 105 (18)	18.6	69.8	0.8008	0.8046	1.4436	144	160.56
FR 106 (19)	59.3	30.8	0.7581	0.7624	1.4251	142.4	161.11
FR 107 (19)	22	21	0.8648	0.8679	1.4889	122	164
FR 108 (13)	32.48	47.29	0.769	0.773	1.437	135.7	165
FR 109 (18)	46	32	0.7756	0.7795	1.4382	137	165
FR 110 (19)	45.5	35	0.776	0.78	1.4347	137	165
FR 111 (17)	71.8	13.5	0.7627	0.7667	1.4311	138.6	166
FR 112 (19)	25.93	48.33	0.775	0.779	1.44	141.7	175
FR 113 (11)	55.1	33.4	0.779	0.783	1.4345	145.7	175
FR 114 (3)	49.7	29.11	0.7794	0.7839	1.4404	143.48	177.5
FR 115 (2)	53.39	28.33	0.7713	0.776	1.4354	150.55	186
FR 116 (17)	73.8	8.8	0.7713	0.7753	1.4354	151.3	186
FR 117 (1)	49.62	28.85	0.7854	0.7896	1.4401	155.35	196
FR 118 (19)	53.8	18.1	0.7856	0.7896	1.4402	153	196
FR 119 (19)	43.5	38.5	0.7915	0.7955	1.4434	157	196
FR 120 (18)	30	49.5	0.801	0.805	1.447	157	196.11
FR 121 (1)	42.09	34.8	0.7928	0.797	1.4442	156.89	200
FR 122 (18)	42.5	39.5	0.793	0.797	1.4443	160	200
FR 123 (18)	58	22.5	0.788	0.792	1.449	162	200
FR 124 (25)	29.5	49.5	0.806	0.8101	1.45	161	202.78
FR 125 (24)	30.9	64.3	0.8045	0.8083	1.4444	162	206.67
FR 126 (30)	42	40.5	0.796	0.80	1.4459	165	207
FR 127 (30)	36.5	45.5	0.8023	0.806	1.4494	166	207
FR 128 (4)	41.32	35.27	0.7985	0.803	1.4503	161.4	207.5
FR 129 (25)	28.5	50.5	0.808	0.8121	1.4485	166	207.78
FR 130 (20)	54	26.7	0.782	0.786	1.4369	168.3	208
FR 131 (23)	18.09	42.71	0.8004	0.8041	1.451	162.6	208
FR 132 (2)	47.31	29.62	0.7826	0.7874	1.4412	165.67	210
FR 133 (30)	42	41	0.7985	0.8025	1.4473	170	213.89
FR 134 (25)	26	52.5	0.81	0.816	1.45	171	213.89
FR 135 (22)	54.3	6	0.7919	0.7959	1.4453	170.5	216
FR 136 (21)	51.5	26.3	0.79	0.797	1.445	175.5	222
FR 137 (30)	10.4	5	0.9553	0.9606	1.5524	155	223.5
FR 138 (3)	41.15	34.9	0.8078	0.8121	1.4545	172.22	225
FR 139 (2)	46.2	30.19	0.793	0.7978	1.4461	174.77	225
FR 140 (30)	3	12.3	0.9308	0.936	1.5321	171	235.56
FR 141 (30)	5.3	4	0.9681	0.9733	1.5602	158	244.61
FR 142 (30)	5.8	6	0.9501	0.9553	1.5459	167	244.61
FR 143 (5)	46.27	29.29	0.8027	0.8072	1.4508	188.23	245
FR 144 (30)	3	4	0.968	0.9732	1.56	161	245.72
FR 145 (30)	3.3	3.3	0.9657	0.9709	1.5581	154	246.28
FR 146 (22)	48.4	20.2	0.8066	0.8104	1.4533	197.9	255
FR 147 (30)	3.9	3	0.9756	0.9807	1.5644	156	258.5
FR 148 (30)	2.2	15.1	0.9664	0.9715	1.5565	187	262.22
FR 149 (2)	55.27	32.65	0.8281	0.8323	1.4685	198.74	265
FR 150 (2)	60.29	25.89	0.8112	0.8157	1.4568	202.15	265
FR 151 (30)	4.6	4	0.9752	0.9802	1.5632	156	265
FR 152 (4)	54.18	34.34	0.8324	0.8369	1.4703	198.86	266.5
FR 153 (1)	53.61	35.19	0.8436	0.8475	1.4715	207.1	279.44
FR 154 (30)	38.8	41.5	0.8438	0.8475	1.4716	214	279.44
FR 155 (2)	61.78	23.97	0.8185	0.823	1.4598	216.82	285
FR 156 (24)	29.8	46.17	0.8578	0.8616	1.4776	227	286.11
FR 157 (22)	48.9	26.2	0.8219	0.8256	1.461	248.7	295

FR 158 (26)	34.1	45.9	0.9082	0.9119	1.5016	233	298.67
FR 159 (22)	51.5	29.2	0.831	0.8347	1.4652	258.6	305
FR 160 (27)	10.5	63.9	0.8912	0.8939	1.4896	250	306.27
FR 161 (27)	58	34	0.877	0.88	1.4838	253	306.8
FR 162 (23)	73.84	5	0.8343	0.8381	1.469	263.1	311.5
FR 163 (4)	58.62	29.87	0.8488	0.8528	1.478	234.27	314
FR 164 (26)	70	22.7	0.8319	0.8357	1.4637	265	323.67
FR 165 (26)	30.4	43	0.936	0.9397	1.5212	248	326.67
FR 166 (28)	43	45	0.8756	0.8788	1.4968	263	327.72
FR 167 (30)	57	28	0.8888	0.8919	1.5044	265	333.22
FR 168 (23)	82.38	6.56	0.8461	0.8499	1.4742	292.8	337
FR 169 (30)	43	43	0.8806	0.8837	1.4993	277	340.35
FR 170 (30)	40	41	0.9036	0.9082	1.5138	268	340.77
FR 171 (26)	56.5	30.7	0.8709	0.8746	1.4842	282	342.67
FR 172 (26)	30.9	37	0.9568	0.9605	1.5366	267	344.67
FR 173 (7)	43	39	0.9	0.9107	1.513	283	352.25
FR 174 (30)	45	33	0.9092	0.916	1.5156	284	354.19
FR 175 (5)	66.71	17.56	0.8433	0.8478	1.4729	271.63	355
FR 176 (23)	68.41	19.88	0.953	0.8563	1.4798	318.1	359.75
FR 177 (30)	48	34	0.904	0.9107	1.512	296	361.64
FR 178 (30)	51	36	0.8868	0.8899	1.5004	306	362.54
FR 179 (30)	31.8	34	0.9671	0.9708	1.5452	281	364.67
FR 180 (4)	61.63	28.72	0.8721	0.8761	1.4913	273.23	365
FR 181 (30)	47	30	0.918	0.9249	1.519	3000	367.88
FR 182 (30)	48	35	0.9036	0.9904	1.5108	307	369.11
FR 183 (30)	55	32	0.888	0.8911	1.5	321	373.08
FR 184 (5)	68.47	13.67	0.866	0.852	1.4878	289.25	375
FR 185 (3)	62.67	17.74	0.8571	0.8701	1.483	284.05	375
FR 186 (6)	70.55	11.66	0.8408	0.8453	1.4683	291.1	375
FR 187 (30)	47	29	0.9236	0.9305	1.5218	313	379.15
FR 188 (30)	72	16	0.8612	0.8644	1.4836	343	379.15
FR 189 (30)	46	31	0.924	0.9309	1.522	319	383.78
FR 190 (30)	75	16	0.86	0.8633	1.482	353	384.67
FR 191 (30)	32.9	32.2	0.9742	0.9779	1.5492	305	384.67
FR 192 (30)	65	21	0.886	0.8891	1.498	348	390.87
FR 193 (30)	75	17	0.8602	0.8635	1.4821	363	391.47
FR 194 (30)	53	32	0.903	0.9097	1.5085	341	392.07
FR 195 (30)	60	34	0.8684	0.8717	1.4862	364	394.25
FR 196 (30)	68	31	0.8532	0.8565	1.4766	374	394.73
FR 197 (30)	64	23	0.8868	0.8901	1.4974	357	396.25
FR 198 (30)	66	21	0.8878	0.8909	1.4979	366	402.62
FR 199 (30)	76	17	0.862	0.8652	1.482	383	404
FR 200 (30)	46	28	0.9204	0.9273	1.5172	354	405.39
FR 201 (30)	77	16	0.864	0.8672	1.483	388	407.74
FR 202 (30)	76	17	0.8666	0.8698	1.4833	394	410.52
FR 203 (30)	71	21	0.869	0.8723	1.4855	392	411.63
FR 204 (28)	10.2	45.5	0.907	0.936	1.5142	364	412.93
FR 205 (30)	52	34	0.9116	0.9184	1.5108	372	413.6
FR 206 (30)	71	20	0.872	0.8752	1.487	397	415.59
FR 207 (30)	65	23	0.89	0.8931	1.498	387	416.02
FR 208 (30)	72	20	0.87	0.8733	1.486	400	416.96
FR 209 (30)	72	20	0.8726	0.8759	1.4863	405	419.69
FR 210 (30)	64	25	0.892	0.8951	1.498	398	422.54
FR 211 (30)	73	20	0.873	0.8763	1.4865	412	424.14

FR 212 (26)	59	28	0.9001	0.9046	1.5002	403	425.67
FR 213 (30)	78	15	0.8724	0.8756	1.4852	422	428.98
FR 214 (30)	73	19	0.8744	0.8777	1.4872	426	433.1
FR 215 (30)	81	19	0.8448	0.8485	1.4694	446	433.2
FR 216 (30)	78	16	0.8732	0.8765	1.4856	430	434.04
FR 217 (30)	73	19	0.8768	0.8801	1.4856	438	439.81
FR 218 (30)	79	15	0.8738	0.8771	1.4859	440	440.18
FR 219 (30)	73	20	0.8776	0.8809	1.4878	442	442.41
FR 220 (30)	78	15	0.8798	0.8831	1.4869	482	463.69
FR 221 (30)	79	13	0.91	0.9168	1.504	521	485.54
FR 222 (30)	75	20	0.886	0.8891	1.489	521	485.54
FR 223 (30)	66	24	0.918	0.9249	1.509	497	486.27
FR 224 (30)	68	22	0.924	0.9309	1.509	571	523.89

Tableau .2 Fraction massique en paraffine et naphène, densité, indice de réfraction, masse moléculaire, température moyenne d'ébullition et spécifique gravity des fractions de la base de test.

FR (Ref)	Xp (%)	Xn (%)	d ₂₀	n ₂₀	M (g/mol)	Teb (°C)	Spgr
FR1 (19)	82	15.5	0.6535	1.3694	78	54.44	0.658
FR2 (19)	89.5	9.1	0.6602	1.3726	82	58	0.6647
FR3 (11)	81.5	18.5	0.658	1.3743	89.2	65	0.6625
FR4 (4)	74.02	22.72	0.6764	1.388	89.22	67.5	0.6816
FR5 (1)	70.98	23.9	0.6889	1.387	94.38	79	0.6935
FR6 (13)	64.65	35.35	0.698	1.398	95.3	85	0.7025
FR7 (12)	36.2	58.2	0.7322	1.4074	102	91.11	0.7365
FR8 (19)	80	15	0.7067	1.3964	93	93	0.711
FR9 (19)	71	18	0.7088	1.3976	96	97	0.713
FR10 (19)	67	29	0.7153	1.401	101	101	0.7195
FR11 (11)	55.1	39.9	0.73	1.4098	106	105	0.7343
FR12 (17)	88.5	8.5	0.7242	1.4106	105.4	106	0.7284
FR13 (16)	53.3	12.6	0.7235	1.4087	108.9	110.5	0.7278
FR14 (1)	56.24	28.77	0.7395	1.4138	107.45	112	0.744
FR15 (19)	59.5	27.5	0.7258	1.4069	104	114	0.73
FR16 (19)	47.5	40	0.7437	1.4162	109	116	0.748
FR17 (4)	60.09	27.35	0.7324	1.41	114.62	122.5	0.7373
FR18 (13)	53.82	23.4	0.733	1.418	114.5	125	0.7372
FR19 (3)	59.59	27.44	0.7357	1.4165	117.34	127.58	0.7404
FR20 (19)	66.4	19.6	0.742	1.4158	114	133	0.7463
FR21 (4)	57.19	27.93	0.747	1.425	125.12	142.5	0.7519
FR22 (18)	65.5	17	0.752	1.427	127	146.11	0.7558
FR23 (18)	51	39.5	0.759	1.424	132	150.56	0.7628
FR24 (2)	53.07	28.82	0.7626	1.4271	129.89	153	0.7667
FR25 (19)	65.6	17.1	0.7627	1.4274	130	155.5	0.7667
FR26 (18)	49	29.5	0.7711	1.4356	133	158.89	0.775
FR27 (18)	39	41.5	0.782	1.437	137	165	0.786
FR28 (4)	51.08	29.01	0.7722	1.4376	137.76	167.5	0.7769
FR29 (19)	60	21	0.785	1.4398	154	190	0.789
FR30 (19)	37.5	44	0.799	1.4476	161	196	0.803
FR31 (25)	59	20	0.786	1.443	165	206.11	0.7899
FR32 (25)	56.3	18.7	0.792	1.45	161	207.22	0.796
FR33 (4)	37.19	38.43	0.8132	1.4565	162.15	212.5	0.8177
FR34 (3)	43.46	33.07	0.7975	1.4493	168.67	217.5	0.797
FR35 (23)	13.6	15.43	0.8076	1.455	183.2	237.5	0.8113
FR36 (30)	3.8	2	0.9641	1.5569	156	245.11	0.9693
FR37 (23)	45.31	5.16	0.8232	1.463	210	262.5	0.827
FR38 (30)	4.7	9.6	0.9602	1.5513	186	265	0.9652
FR39 (23)	59.81	5.58	0.8277	1.466	235.5	287	0.8314
FR40 (26)	58.4	31.8	0.8497	1.4719	245	305.67	0.8535
FR41 (4)	58.21	31.18	0.8578	1.4836	241.47	325	0.8618
FR42 (30)	42	37	0.898	1.51	266	336.97	0.9011
FR43 (22)	56.9	25.9	0.84	1.471	305.6	345	0.8437
FR44 (26)	69.4	22.4	0.8425	1.4694	297	357.67	0.8463
FR45 (30)	61	25	0.8864	1.50002	311	366.23	0.8895
FR46 (30)	46	31	0.9214	1.5207	307	374.06	0.9283
FR47 (26)	58.4	28.9	0.8845	1.4919	325	380.67	0.8883
FR48 (30)	48	32	0.9182	1.5172	330	388.78	0.9251
FR49 (5)	71.67	10.11	0.8487	1.4719	308.42	395	0.8527

FR50 (28)	72	25	0.8664	1.477	394	404.21	0.87
FR51 (30)	58	29	0.8978	1.5029	378	413.15	0.9009
FR52 (30)	74	26	0.848	1.472	415	416.88	0.8517
FR53 (30)	74	24	0.8568	1.4764	428	427.17	0.601
FR54 (30)	70	26	0.8646	1.4803	435	433.52	0.8619
FR55 (30)	66	24	0.9178	1.5089	483	478.32	0.9247
FR56 (29)	78.4	13.3	0.875	1.4865	523	502.78	0.876

• **Origine de la base de donnée :**

- Ref1-fraction pétrolières recueillies par Riazi et Daubert (1986).
 Ref2-fraction pétrolières issues de la distillation du pétrole brut de Guellala (Centre de Recherche et Développement, Alger, 1995)
 Ref3-fraction pétrolières issues de la distillation du pétrole brut de Hassi Messaoud (Centre de Recherche et Développement, Alger, 1988).
 Ref4-fractions pétrolières issues de la distillation du pétrole brut de Gassi Touil (Centre de Recherche et Développement, Alger, 1987).
 Ref.5-fraction pétrolières issues de la distillation du pétrole brut de Hassi R'mel 162(Goual et Skander).
 Ref 6-fractions issues d'un brut Algérien de Gassi Touil (Centre de Recherche et Développement, Alger, 1988).
 Ref11-fraction issues d'un brut Algérien de Gellala.
 Ref12-fraction issues d'un brut Algérien de Hassi Messaoud "solvant léger".
 Ref13-fraction issues d'un brut Algérien de Hassi Messaoud "solvant lourd".
 Ref14-fraction issue d'un brut Algérien D'ohanet.
 Ref15-fraction issue d'un brut Algérien de Zarzaitine.
 Ref16-fraction issues d'un brut Algérien de Rastomb.
 Ref17-fraction issues d'un brut Algérien de Hassi R'mel.
 Ref18-private communication.
 Ref19- data in this fraction have been taken from the bank of data collected at penn state from Private open literature and government sources.
 Ref20-fraction issue d'un brut Algérien d'ohanet.
 Ref21-fraction issues d'un brut Algérien de Zarzaitine.
 Ref22- fractions issues d'un brut Algérien de Hassi R'mel.
 Ref23-fractions d'un résidu issu d'un brut Algérien.
 Ref24-Lenoir and Hipkin (1973).
 Ref25-private communication.
 Ref26-Van Ness and Van Westen (1951)
 Ref27- Pennzoil (1975)
 Ref28-A.S.M.E (1953)
 Ref29-Witco (1973).
 Ref30- data in this fraction have been taken from the bank of data collected at penn state from private open literature and government sources.

Tableau .3 Point d'aniline, facteurs de caractérisation, chaleur spécifique, température critique, pression critique et volume critique des fractions de la base d'apprentissage.

FR°N	Pa (K)	Kuop	Vm (cm ³ /mol)	Cp (j/mol)	Tc (K)	Pc (atm)	Vc (cm ³ /mol)
FR1	323.8022	13.2310	119.2862	155.9020	466.2057	33.1348	261.5379
FR2	324.0691	13.0735	122.3800	160.3882	473.8656	32.8232	272.0598
FR3	324.3044	12.9520	124.2290	164.3109	480.4374	32.5352	281.2601
FR4	324.7200	12.7705	126.5101	171.1652	491.6395	32.0068	297.3363
FR5	324.7886	12.7440	126.8300	172.2886	493.4414	31.9178	299.9711
FR6	324.8087	12.7364	126.9225	172.6177	493.9676	31.8917	300.7431
FR7	324.8058	12.7375	126.9092	172.5700	493.8914	31.8955	300.6312
FR8	324.9693	12.6783	127.6484	175.2360	498.1242	31.6821	306.8839
FR9	325.1707	12.6114	128.5591	178.5026	503.2383	31.4176	314.5456
FR10	325.1681	12.6123	128.5472	178.4606	503.1731	31.4210	314.4472
FR11	325.1660	12.6129	128.5374	178.4260	503.1193	31.4239	314.3659
FR12	325.2222	12.5953	128.7968	179.3353	504.5294	31.3498	316.4987
FR13	325.3241	12.5646	129.2758	180.9773	507.0601	31.2156	320.3498
FR14	325.3216	12.5654	129.2641	180.9379	506.9995	31.2188	320.2573
FR15	325.3391	12.5602	129.3478	181.2195	507.4316	31.1957	320.9177
FR16	325.8489	12.4270	132.0233	189.3672	519.6853	30.5245	340.0276
FR17	325.8314	12.4311	131.9231	189.0896	519.2756	30.5475	339.3765
FR18	325.8389	12.4293	131.9658	189.2083	519.4508	30.5377	339.6548
FR19	325.9836	12.3965	132.8171	191.5015	522.8168	30.3482	345.0334
FR20	326.0595	12.3801	133.2817	192.7023	524.5645	30.2490	347.8497
FR21	326.1410	12.3630	133.7929	193.9869	526.4231	30.1430	350.8627
FR22	326.1645	12.3582	133.9427	194.3565	526.9557	30.1125	351.7295
FR23	326.3730	12.3175	135.3225	197.6316	531.6344	29.8427	359.4110
FR24	326.4044	12.3117	135.5379	198.1239	532.3313	29.8022	360.5657
FR25	326.6586	12.2671	137.3459	202.0908	537.8874	29.4771	369.8698
FR26	326.6898	12.2619	137.5752	202.5754	538.5589	29.4375	371.0063
FR27	326.6784	12.2638	137.4911	202.3981	538.3134	29.4520	370.5904
FR28	326.7305	12.2552	137.8777	203.2088	539.4343	29.3859	372.4918
FR29	326.8041	12.2435	138.4301	204.3500	541.0047	29.2929	375.1683
FR30	326.8055	12.2433	138.4408	204.3717	541.0345	29.2911	375.2194
FR31	326.8118	12.2423	138.4889	204.4702	541.1696	29.2831	375.4503
FR32	326.8945	12.2295	139.1209	205.7506	542.9204	29.1791	378.4533
FR33	326.8914	12.2300	139.0974	205.7032	542.8559	29.1830	378.3423
FR34	326.9153	12.2263	139.2816	206.0724	543.3588	29.1530	379.2082
FR35	326.9476	12.2215	139.5326	206.5725	544.0387	29.1125	380.3810
FR36	326.9661	12.2187	139.6766	206.8578	544.4259	29.0894	381.0503
FR37	327.0981	12.1997	140.7189	208.8931	547.1724	28.9251	385.8239
FR38	327.2339	12.1810	141.8151	210.9819	549.9636	28.7573	390.7230
FR39	327.1828	12.1879	141.4000	210.1966	548.9174	28.8203	388.8810
FR40	327.2339	12.1810	141.8151	210.9819	549.9636	28.7573	390.7230
FR41	327.2479	12.1791	141.9298	211.1977	550.2503	28.7400	391.2291
FR42	327.2752	12.1755	142.1531	211.6165	550.8060	28.7065	392.2113
FR43	327.4573	12.1523	143.6636	214.4046	554.4775	28.4843	398.7506
FR44	327.5182	12.1448	144.1760	215.3345	555.6913	28.4106	400.9316
FR45	327.4943	12.1477	143.9745	214.9696	555.2156	28.4395	400.0758
FR46	327.5392	12.1423	144.3538	215.6553	556.1088	28.3852	401.6840
FR47	327.5176	12.1449	144.1711	215.3255	555.6796	28.4113	400.9106
FR48	327.6329	12.1312	145.1497	217.0820	557.9578	28.2726	405.0304
FR49	327.8054	12.1118	146.6348	219.7045	561.3242	28.0669	411.1811
FR50	327.8233	12.1098	146.7897	219.9754	561.6695	28.0458	411.8164

FR51	327.8219	12.1100	146.7776	219.9542	561.6425	28.0474	411.7667
FR52	327.8407	12.1080	146.9404	220.2384	562.0045	28.0253	412.4334
FR53	327.8573	12.1062	147.0854	220.4911	562.3258	28.0056	413.0260
FR54	327.8879	12.1029	147.3516	220.9541	562.9136	27.9695	414.1119
FR55	327.9463	12.0968	147.8622	221.8387	564.0332	27.9008	416.1867
FR56	327.9823	12.0930	148.1769	222.3817	564.7181	27.8587	417.4603
FR57	327.9659	12.0947	148.0337	222.1348	564.4068	27.8779	416.8811
FR58	327.9595	12.0954	147.9771	222.0372	564.2837	27.8854	416.6522
FR59	328.0685	12.0843	148.9357	223.6847	566.3544	27.7580	420.5162
FR60	328.1153	12.0796	149.3479	224.3890	567.2348	27.7038	422.1682
FR61	328.1132	12.0798	149.3295	224.3576	567.1956	27.7062	422.0945
FR62	328.1348	12.0777	149.5210	224.6841	567.6028	27.6811	422.8602
FR63	328.0676	12.0844	148.9277	223.6710	566.3373	27.7591	420.4842
FR64	328.1732	12.0740	149.8607	225.2619	568.3219	27.6368	424.2155
FR65	328.2443	12.0672	150.4920	226.3322	569.6488	27.5549	426.7258
FR66	328.2375	12.0678	150.4309	226.2288	569.5209	27.5628	426.4834
FR67	328.3361	12.0586	151.3088	227.7103	571.3474	27.4499	429.9580
FR68	328.5588	12.0389	153.3008	231.0451	575.4130	27.1979	437.7795
FR69	328.6465	12.0315	154.0879	232.3545	576.9922	27.0998	440.8505
FR70	328.7860	12.0202	155.3418	234.4328	579.4791	26.9451	445.7251
FR71	328.7352	12.0242	154.8854	233.6772	578.5778	27.0012	443.9530
FR72	328.8521	12.0149	155.9361	235.4154	580.6466	26.8724	448.0298
FR73	328.8832	12.0125	156.2164	235.8782	581.1947	26.8383	449.1152
FR74	328.7936	12.0196	155.4100	234.5457	579.6135	26.9367	445.9899
FR75	328.7979	12.0192	155.4486	234.6095	579.6895	26.9320	446.1396
FR76	328.9363	12.0085	156.6933	236.6653	582.1240	26.7803	450.9612
FR77	328.9547	12.0071	156.8594	236.9391	582.4465	26.7602	451.6035
FR78	329.0699	11.9985	157.8953	238.6459	584.4478	26.6353	455.6065
FR79	329.1288	11.9942	158.4244	239.5168	585.4629	26.5719	457.6493
FR80	329.2647	11.9846	159.6440	241.5231	587.7860	26.4267	462.3547
FR81	329.2991	11.9822	159.9524	242.0303	588.3700	26.3902	463.5444
FR82	329.4168	11.9743	161.0062	243.7634	590.3550	26.2660	467.6091
FR83	329.4574	11.9716	161.3697	244.3613	591.0363	26.2233	469.0116
FR84	329.7570	11.9528	164.0347	248.7521	595.9826	25.9133	479.3097
FR85	330.0971	11.9332	167.0289	253.7102	601.4512	25.5701	490.9385
FR86	330.2163	11.9267	168.0691	255.4417	603.3326	25.4519	494.9997
FR87	330.2105	11.9270	168.0191	255.3584	603.2424	25.4576	494.8043
FR88	330.2750	11.9236	168.5790	256.2927	604.2519	25.3941	496.9956
FR89	330.1237	11.9317	167.2619	254.0977	601.8735	25.5435	491.8474
FR90	330.1674	11.9293	167.6429	254.7317	602.5629	25.5002	493.3344
FR91	330.1962	11.9278	167.8941	255.1501	603.0167	25.4717	494.3157
FR92	330.1962	11.9278	167.8941	255.1501	603.0167	25.4717	494.3157
FR93	330.5335	11.9104	170.8097	260.0328	608.2511	25.1429	505.7677
FR94	330.4945	11.9123	170.4751	259.4698	607.6534	25.1804	504.4473
FR95	330.6413	11.9051	171.7315	261.5876	609.8942	25.0396	509.4144
FR96	330.6480	11.9048	171.7882	261.6836	609.9952	25.0332	509.6395
FR97	330.5583	11.9092	171.0219	260.3903	608.6298	25.1191	506.6061
FR98	330.6045	11.9069	171.4174	261.0571	609.3349	25.0747	508.1702
FR99	330.7648	11.8993	172.7805	263.3646	611.7583	24.9225	513.5820
FR100	330.7949	11.8979	173.0352	263.7972	612.2099	24.8941	514.5968
FR101	330.9967	11.8887	174.7331	266.6943	615.2123	24.7054	521.3916
FR102	330.9556	11.8906	174.3886	266.1045	614.6042	24.7436	520.0084
FR103	331.0697	11.8856	175.3418	267.7386	616.2853	24.6380	523.8411
FR104	331.0101	11.8882	174.8445	266.8851	615.4087	24.6931	521.8392

FR105	330.8192	11.8968	173.2408	264.1467	612.5742	24.8712	515.4165
FR106	331.3510	11.8737	177.6662	271.7565	620.3680	24.3816	533.2646
FR107	330.1059	11.9327	167.1060	253.8384	601.5910	25.5613	491.2392
FR108	331.5696	11.8650	179.4464	274.8679	623.4811	24.1861	540.5622
FR109	331.4973	11.8679	178.8604	273.8403	622.4576	24.2504	538.1520
FR110	331.4916	11.8681	178.8139	273.7589	622.3763	24.2555	537.9611
FR111	331.7211	11.8593	180.6656	277.0169	625.6071	24.0528	545.6025
FR112	332.3686	11.8366	185.7512	286.1532	634.4303	23.5000	567.0309
FR113	332.3203	11.8382	185.3785	285.4737	633.7858	23.5403	565.4371
FR114	332.5319	11.8314	187.0010	288.4435	636.5891	23.3650	572.4025
FR115	333.4101	11.8061	193.5086	300.6785	647.7784	22.6672	601.0988
FR116	333.4186	11.8058	193.5699	300.7963	647.8834	22.6607	601.3750
FR117	334.1918	11.7870	199.0138	311.4522	657.1764	22.0842	626.3675
FR118	334.1918	11.7870	199.0138	311.4522	657.1764	22.0842	626.3675
FR119	334.1064	11.7889	198.4243	310.2796	656.1733	22.1463	623.6173
FR120	333.9722	11.7920	197.4929	308.4361	654.5866	22.2446	619.2935
FR121	334.4787	11.7807	200.9720	315.3797	660.5020	21.8787	635.5791
FR122	334.4787	11.7807	200.9720	315.3797	660.5020	21.8787	635.5791
FR123	334.5534	11.7791	201.4770	316.4007	661.3581	21.8259	637.9739
FR124	334.5474	11.7792	201.4364	316.3184	661.2892	21.8301	637.7808
FR125	334.9711	11.7706	204.2621	322.0905	666.0656	21.5359	651.3186
FR126	335.1411	11.7674	205.3788	324.3997	667.9462	21.4204	656.7347
FR127	335.0433	11.7692	204.7375	323.0717	666.8668	21.4867	653.6202
FR128	335.1441	11.7673	205.3984	324.4404	667.9792	21.4183	656.8301
FR129	335.0199	11.7697	204.5839	322.7543	666.6079	21.5026	652.8756
FR130	335.4590	11.7616	207.4401	328.7031	671.4059	21.2082	666.8279
FR131	335.1777	11.7667	205.6172	324.8948	668.3472	21.3957	657.8960
FR132	335.6484	11.7583	208.6532	331.2598	673.4340	21.0840	672.8244
FR133	335.8219	11.7554	209.7548	333.5970	675.2707	20.9718	678.3063
FR134	335.5860	11.7594	208.2548	330.4182	672.7687	21.1247	670.8508
FR135	336.1572	11.7501	211.8596	338.1015	678.7642	20.7587	688.8712
FR136	336.7974	11.7410	215.7966	346.6578	685.2376	20.3656	708.9393
FR137	333.0885	11.8148	191.1666	296.2140	643.7611	22.9173	590.6277
FR138	336.8643	11.7401	216.2027	347.5494	685.9002	20.3254	711.0304
FR139	337.1203	11.7368	217.7457	350.9522	688.4088	20.1738	719.0114
FR140	334.9764	11.7705	204.2971	322.1627	666.1247	21.5323	651.4882
FR141	334.7770	11.7745	202.9759	319.4505	663.8946	21.6695	645.1269
FR142	335.3403	11.7637	206.6743	327.0982	670.1224	21.2868	663.0638
FR143	339.3159	11.7161	230.4990	379.7899	708.4593	18.9743	786.6478
FR144	334.8941	11.7721	203.7538	321.0448	665.2083	21.5887	648.8660
FR145	335.0250	11.7696	204.6171	322.8230	666.6640	21.4991	653.0368
FR146	340.5211	11.7096	237.2463	395.3734	718.4686	18.3847	823.1976
FR147	336.0002	11.7526	210.8784	335.9953	677.1382	20.8578	683.9313
FR148	336.7260	11.7419	215.3628	345.7070	684.5285	20.4085	706.7091
FR149	341.3402	11.7070	241.7730	405.8716	724.9157	18.0083	847.8201
FR150	341.7364	11.7063	243.9517	410.9244	727.9383	17.8328	859.6710
FR151	336.7364	11.7418	215.4262	345.8460	684.6323	20.4022	707.0352
FR152	341.4262	11.7068	242.2464	406.9697	725.5770	17.9699	850.3958
FR153	342.9357	11.7059	250.5225	426.1235	736.7317	17.3259	895.3193
FR154	342.9357	11.7059	250.5225	426.1235	736.7317	17.3259	895.3193
FR155	344.4155	11.7091	258.6218	444.6876	746.9014	16.7463	938.8598
FR156	343.4785	11.7066	253.4915	432.9561	740.5450	17.1077	911.3445
FR157	345.8786	11.7160	266.6675	462.8483	756.2926	16.2178	981.4541
FR158	343.5865	11.7068	254.0826	434.3128	741.2922	17.0651	914.5265

FR159	347.2193	11.7253	274.1052	479.3336	764.3788	15.7680	1020.1190
FR160	345.4103	11.7134	264.0858	457.0559	753.3542	16.3825	967.8685
FR161	346.0043	11.7167	267.3621	464.4006	757.0712	16.1743	985.0949
FR162	348.1942	11.7338	279.5637	491.2317	769.9737	15.4597	1048.0250
FR163	348.1346	11.7332	279.2286	490.5064	769.6381	15.4781	1046.3237
FR164	350.3871	11.7576	292.0227	517.7378	781.7684	14.8176	1110.1929
FR165	346.7680	11.7218	271.5934	473.8009	761.7094	15.9159	1007.1426
FR166	349.5414	11.7477	287.1867	507.5566	777.3428	15.0572	1086.3137
FR167	349.9799	11.7527	289.6893	512.8421	779.6561	14.9318	1098.7103
FR168	352.3456	11.7840	303.3801	541.1290	791.4758	14.2973	1165.0548
FR169	351.6258	11.7738	299.1798	532.5613	787.9921	14.4832	1144.9600
FR170	350.6248	11.7606	293.3894	520.5906	782.9861	14.7519	1116.8839
FR171	352.4457	11.7854	303.9668	542.3183	791.9530	14.2719	1167.8442
FR172	348.7981	11.7397	282.9690	498.5665	773.3273	15.2760	1065.2281
FR173	352.6501	11.7885	305.1665	544.7444	792.9219	14.2205	1173.5343
FR174	352.7648	11.7902	305.8405	546.1039	793.4621	14.1918	1176.7231
FR175	355.9883	11.8437	325.0983	583.9993	807.7687	13.4412	1265.6034
FR176	356.6305	11.8555	329.0045	591.4769	810.4311	13.3033	1283.1415
FR177	354.4922	11.8177	316.0866	566.4881	801.3325	13.7768	1224.5326
FR178	355.6966	11.8385	323.3315	580.5953	806.5400	13.5050	1257.6198
FR179	351.8671	11.7771	300.5848	535.4378	789.1707	14.4202	1151.7067
FR180	356.8613	11.8598	330.4142	594.1594	811.3741	13.2547	1289.4331
FR181	355.0186	11.8266	319.2427	572.6636	803.6353	13.6563	1239.0166
FR182	356.0354	11.8446	325.3837	584.5479	807.9657	13.4310	1266.8901
FR183	357.8677	11.8791	336.5926	605.8203	815.4011	13.0476	1316.7828
FR184	360.1502	11.9253	350.7946	632.0721	824.0587	12.6070	1378.3541
FR185	359.3191	11.9081	345.5943	622.5442	820.9795	12.7630	1356.0072
FR186	360.4424	11.9314	352.6311	635.4147	825.1226	12.5532	1386.1938
FR187	357.0620	11.8636	331.6419	596.4889	812.1879	13.2127	1294.8967
FR188	360.5294	11.9333	353.1783	636.4085	825.4372	12.5374	1388.5247
FR189	358.0399	11.8824	337.6548	607.8097	816.0766	13.0130	1321.4486
FR190	361.8658	11.9620	361.6300	651.6359	830.1685	12.2998	1424.2393
FR191	355.3959	11.8332	321.5147	577.0803	805.2600	13.5716	1249.3756
FR192	362.0085	11.9651	362.5365	653.2560	830.6622	12.2751	1428.0393
FR193	363.4862	11.9979	371.9775	669.9869	835.6540	12.0267	1467.2800
FR194	361.1387	11.9463	357.0219	643.3616	827.6185	12.4276	1404.8326
FR195	363.7482	12.0037	373.6600	672.9426	836.5164	11.9840	1474.2123
FR196	364.6359	12.0239	379.3805	682.9361	839.3902	11.8421	1497.6514
FR197	363.2453	11.9925	370.4327	667.2664	834.8552	12.0663	1460.8994
FR198	364.7725	12.0270	380.2634	684.4711	839.8260	11.8206	1501.2514
FR199	366.5443	12.0678	391.7710	704.3067	845.3269	11.5513	1547.7742
FR200	363.2521	11.9926	370.4762	667.3433	834.8779	12.0651	1461.0796
FR201	367.4118	12.0881	397.4420	713.9721	847.9228	11.4251	1570.4435
FR202	368.0038	12.1019	401.3239	720.5495	849.6589	11.3410	1585.8703
FR203	368.1595	12.1056	402.3471	722.2782	850.1112	11.3191	1589.9248
FR204	364.5495	12.0219	378.8227	681.9653	839.1138	11.8557	1495.3744
FR205	365.8777	12.0524	387.4296	696.8597	843.2896	11.6507	1530.3079
FR206	369.0583	12.1267	408.2633	732.2334	852.6839	11.1951	1613.2739
FR207	368.1073	12.1044	402.0038	721.6984	849.9597	11.3264	1588.5649
FR208	369.5408	12.1380	411.4479	737.5649	854.0399	11.1299	1625.7785
FR209	370.1389	12.1521	415.4034	744.1618	855.6970	11.0505	1641.2510
FR210	369.7480	12.1429	412.8170	739.8513	854.6168	11.1023	1631.1411
FR211	371.3570	12.1808	423.4842	757.5558	858.9932	10.8933	1672.6655
FR212	369.9951	12.1487	414.4513	742.5764	855.3008	11.0695	1637.5324

FR213	372.7811	12.2141	432.9700	773.1469	862.7190	10.7167	1709.2331
FR214	373.8515	12.2390	440.1240	784.8190	865.4333	10.5888	1736.6089
FR215	375.6193	12.2796	451.9780	804.0109	869.7633	10.3862	1781.6220
FR216	374.2042	12.2472	442.4854	788.6564	866.3121	10.5476	1745.6093
FR217	375.7009	12.2815	452.5259	804.8937	869.9586	10.3771	1783.6925
FR218	376.0083	12.2885	454.5921	808.2201	870.6916	10.3429	1791.4942
FR219	376.4408	12.2982	457.5007	812.8942	871.7137	10.2954	1802.4568
FR220	383.1499	12.4405	502.8176	884.6620	886.3383	9.6255	1970.7823
FR221	388.1001	12.5297	536.3394	936.7968	895.8461	9.2001	2093.0600
FR222	390.4663	12.5662	552.3435	961.4935	900.0641	9.0139	2150.9838
FR223	387.6386	12.5221	533.2158	931.9639	895.0000	9.2376	2081.7247
FR224	401.9042	12.6712	629.1245	1079.0393	918.0025	8.2401	2426.6774

Tableau .4 Température de congélation, facteur de compressibilité critique, viscosité cinématique à 100^o F, chaleur de vaporisation, tension superficielle à 20°C, chaleur de formation des fractions de la base d'apprentissage.

FR	Tcong (K)	ω	Zc	μ (Cp)	Hv (cal/g)	Ts (dynes/cm)	Hf (kJ/mol)
FR1	158.3214	0.2374	0.2718	0.3290	86.9741	15.2329	-105.3617
FR2	160.3269	0.2442	0.2713	0.3370	85.7797	15.9406	-109.0673
FR3	162.0589	0.2502	0.2708	0.3445	84.7731	16.5197	-112.3074
FR4	165.0390	0.2606	0.2700	0.3586	83.0931	17.4528	-117.9691
FR5	165.5220	0.2624	0.2699	0.3611	82.8268	17.5969	-118.8970
FR6	165.6632	0.2629	0.2698	0.3618	82.7492	17.6387	-119.1689
FR7	165.6428	0.2628	0.2698	0.3617	82.7604	17.6327	-119.1295
FR8	166.7822	0.2669	0.2695	0.3677	82.1396	17.9643	-121.3315
FR9	168.1671	0.2718	0.2691	0.3753	81.3968	18.3541	-124.0298
FR10	168.1494	0.2718	0.2691	0.3752	81.4062	18.3492	-123.9951
FR11	168.1348	0.2717	0.2691	0.3751	81.4140	18.3452	-123.9665
FR12	168.5182	0.2731	0.2690	0.3773	81.2105	18.4507	-124.7177
FR13	169.2083	0.2756	0.2688	0.3813	80.8467	18.6380	-126.0739
FR14	169.1917	0.2756	0.2689	0.3812	80.8554	18.6335	-126.0413
FR15	169.3098	0.2760	0.2688	0.3819	80.7935	18.6652	-126.2739
FR16	172.6885	0.2837	0.2679	0.4032	79.0587	19.5339	-133.0040
FR17	172.5745	0.2880	0.2679	0.4024	79.1160	19.5057	-132.7747
FR18	172.6233	0.2882	0.2679	0.4028	79.0915	19.5178	-132.8727
FR19	173.5620	0.2917	0.2676	0.4091	78.6217	19.7468	-134.7670
FR20	174.0514	0.2935	0.2675	0.4126	78.3789	19.8641	-135.7588
FR21	174.5734	0.2954	0.2673	0.4163	78.1215	19.9877	-136.8199
FR22	174.7233	0.2960	0.2673	0.4174	78.0479	20.0229	-137.1252
FR23	176.0454	0.3010	0.2669	0.4272	77.4042	20.3280	-139.8304
FR24	176.2432	0.3018	0.2668	0.4287	77.3088	20.3729	-140.2371
FR25	177.8287	0.3031	0.2664	0.4411	76.5520	20.7249	-143.5138
FR26	178.0213	0.3085	0.2663	0.4427	76.4610	20.7668	-143.9140
FR27	177.9509	0.3083	0.2663	0.4421	76.4942	20.7515	-143.7676
FR28	178.2728	0.3095	0.2662	0.4447	76.3425	20.8212	-144.4372
FR29	178.7249	0.3112	0.2661	0.4485	76.1304	20.9183	-145.3798
FR30	178.7335	0.3113	0.2661	0.4486	76.1263	20.9201	-145.3978
FR31	178.7725	0.3114	0.2661	0.4489	76.1081	20.9284	-145.4791
FR32	179.2782	0.3087	0.2659	0.4532	75.8723	21.0357	-146.5367
FR33	179.2595	0.3133	0.2659	0.4530	75.8810	21.0318	-146.4976
FR34	179.4051	0.3139	0.2659	0.4543	75.8134	21.0625	-146.8025
FR35	179.6020	0.3146	0.2658	0.4559	75.7221	21.1038	-147.2156

FR36	179.7143	0.3151	0.2658	0.4569	75.6701	21.1273	-147.4513
FR37	180.5130	0.3182	0.2656	0.4639	75.3024	21.2926	-149.1324
FR38	181.3288	0.3214	0.2653	0.4713	74.9303	21.4586	-150.8578
FR39	181.0225	0.3202	0.2654	0.4685	75.0696	21.3966	-150.2091
FR40	181.3288	0.3214	0.2653	0.4713	74.9303	21.4586	-150.8578
FR41	181.4129	0.3217	0.2653	0.4721	74.8922	21.4755	-151.0360
FR42	181.5759	0.3223	0.2653	0.4736	74.8183	21.5083	-151.3820
FR43	182.6572	0.3266	0.2649	0.4838	74.3319	21.7226	-153.6850
FR44	183.0164	0.3280	0.2648	0.4872	74.1716	21.7927	-154.4531
FR45	182.8755	0.3274	0.2649	0.4859	74.2344	21.7653	-154.1517
FR46	183.1401	0.3285	0.2648	0.4884	74.1166	21.8167	-154.7180
FR47	183.0129	0.3280	0.2648	0.4872	74.1732	21.7920	-154.4457
FR48	183.6893	0.3307	0.2646	0.4939	73.8732	21.9226	-155.8965
FR49	184.6942	0.3300	0.2643	0.5040	73.4318	22.1133	-158.0627
FR50	184.7977	0.3351	0.2643	0.5051	73.3866	22.1327	-158.2864
FR51	184.7896	0.3350	0.2643	0.5050	73.3902	22.1312	-158.2689
FR52	184.8981	0.3355	0.2642	0.5062	73.3428	22.1515	-158.5037
FR53	184.9945	0.3359	0.2642	0.5072	73.3009	22.1695	-158.7124
FR54	185.1710	0.3366	0.2642	0.5090	73.2241	22.2023	-159.0949
FR55	185.5078	0.3379	0.2641	0.5126	73.0781	22.2647	-159.8256
FR56	185.7142	0.3340	0.2640	0.5148	72.9889	22.3028	-160.2741
FR57	185.6203	0.3384	0.2640	0.5138	73.0294	22.2855	-160.0701
FR58	185.5833	0.3382	0.2640	0.5134	73.0455	22.2787	-159.9895
FR59	186.2084	0.3407	0.2638	0.5201	72.7761	22.3932	-161.3503
FR60	186.4750	0.3418	0.2638	0.5230	72.6618	22.4416	-161.9321
FR61	186.4631	0.3418	0.2638	0.5229	72.6669	22.4395	-161.9061
FR62	186.5866	0.3423	0.2637	0.5242	72.6141	22.4618	-162.1758
FR63	186.2033	0.3407	0.2638	0.5200	72.7783	22.3923	-161.3390
FR64	186.8049	0.3431	0.2637	0.5266	72.5209	22.5012	-162.6531
FR65	187.2084	0.3448	0.2635	0.5311	72.3492	22.5735	-163.5372
FR66	187.1695	0.3446	0.2635	0.5307	72.3657	22.5665	-163.4518
FR67	187.7267	0.3469	0.2634	0.5370	72.1298	22.6655	-164.6755
FR68	188.9747	0.3520	0.2630	0.5516	71.6067	22.8833	-167.4301
FR69	189.4623	0.3539	0.2628	0.5575	71.4043	22.9671	-168.5116
FR70	190.2335	0.3571	0.2626	0.5670	71.0863	23.0979	-170.2283
FR71	189.9535	0.3560	0.2627	0.5635	71.2014	23.0506	-169.6042
FR72	190.5970	0.3539	0.2625	0.5715	70.9374	23.1589	-171.0400
FR73	190.7680	0.3593	0.2624	0.5737	70.8676	23.1875	-171.4223
FR74	190.2753	0.3573	0.2626	0.5675	71.0692	23.1049	-170.3216
FR75	190.2990	0.3574	0.2626	0.5678	71.0595	23.1089	-170.3743
FR76	191.0583	0.3605	0.2623	0.5774	70.7493	23.2357	-172.0724
FR77	191.1592	0.3609	0.2623	0.5787	70.7083	23.2525	-172.2986
FR78	191.7869	0.3635	0.2621	0.5868	70.4541	23.3558	-173.7084
FR79	192.1063	0.3649	0.2620	0.5910	70.3254	23.4079	-174.4278
FR80	192.8400	0.3679	0.2618	0.6009	70.0316	23.5266	-176.0849
FR81	193.0250	0.3687	0.2617	0.6034	69.9578	23.5562	-176.5039
FR82	193.6558	0.3713	0.2615	0.6121	69.7075	23.6567	-177.9354
FR83	193.8729	0.3723	0.2614	0.6152	69.6218	23.6910	-178.4293
FR84	195.4595	0.3790	0.2609	0.6381	69.0012	23.9378	-182.0561
FR85	197.2347	0.3865	0.2604	0.6652	68.3193	24.2064	-186.1515
FR86	197.8507	0.3892	0.2602	0.6750	68.0857	24.2978	-187.5818
FR87	197.8211	0.3890	0.2602	0.6745	68.0969	24.2934	-187.5130
FR88	198.1527	0.3904	0.2601	0.6798	67.9717	24.3422	-188.2847
FR89	197.3727	0.3871	0.2603	0.6674	68.2668	24.2269	-186.4716

FR90	197.5984	0.3881	0.2602	0.6709	68.1812	24.2604	-186.9953
FR91	197.7471	0.3887	0.2602	0.6733	68.1249	24.2825	-187.3409
FR92	197.7471	0.3887	0.2602	0.6733	68.1249	24.2825	-187.3409
FR93	199.4742	0.3962	0.2596	0.7017	67.4772	24.5344	-191.3740
FR94	199.2759	0.3953	0.2597	0.6983	67.5510	24.5058	-190.9090
FR95	200.0208	0.3985	0.2594	0.7110	67.2746	24.6127	-192.6583
FR96	200.0545	0.3987	0.2594	0.7115	67.2622	24.6175	-192.7376
FR97	199.6000	0.3967	0.2596	0.7038	67.4305	24.5524	-191.6693
FR98	199.8345	0.3977	0.2595	0.7078	67.3436	24.5861	-192.2201
FR99	200.6436	0.4012	0.2592	0.7218	67.0453	24.7011	-194.1260
FR100	200.7949	0.4019	0.2592	0.7244	66.9898	24.7225	-194.4834
FR101	201.8051	0.4063	0.2589	0.7425	66.6215	24.8639	-196.8764
FR102	201.5999	0.4054	0.2589	0.7388	66.6960	24.8353	-196.3893
FR103	202.1680	0.4079	0.2587	0.7491	66.4902	24.9142	-197.7391
FR104	201.8715	0.4066	0.2588	0.7437	66.5975	24.8731	-197.0340
FR105	200.9171	0.4024	0.2591	0.7266	66.9451	24.7397	-194.7721
FR106	203.5575	0.4140	0.2583	0.7753	65.9917	25.1043	-201.0578
FR107	197.2804	0.3867	0.2603	0.6659	68.3019	24.2132	-186.2574
FR108	204.6267	0.4188	0.2579	0.7962	65.6131	25.2481	-203.6279
FR109	204.2743	0.4172	0.2580	0.7892	65.7374	25.2009	-202.7790
FR110	204.2463	0.4171	0.2580	0.7887	65.7473	25.1972	-202.7118
FR111	205.3617	0.4220	0.2577	0.8110	65.3551	25.3457	-205.4030
FR112	208.4559	0.4360	0.2566	0.8770	64.2903	25.7465	-212.9496
FR113	208.2274	0.4349	0.2567	0.8719	64.3678	25.7175	-212.3882
FR114	209.2239	0.4395	0.2564	0.8944	64.0311	25.8436	-214.8413
FR115	213.2770	0.4581	0.2550	0.9932	62.6956	26.3415	-224.9475
FR116	213.3156	0.4583	0.2550	0.9942	62.6831	26.3462	-225.0448
FR117	216.7795	0.4746	0.2537	1.0889	61.5837	26.7544	-233.8466
FR118	216.7795	0.4746	0.2537	1.0889	61.5837	26.7544	-233.8466
FR119	216.4012	0.4681	0.2539	1.0781	61.7020	26.7105	-232.8780
FR120	215.8051	0.4700	0.2541	1.0613	61.8893	26.6410	-231.3553
FR121	218.0414	0.4805	0.2533	1.1259	61.1923	26.8996	-237.0907
FR122	218.0414	0.4805	0.2533	1.1259	61.1923	26.8996	-237.0907
FR123	218.3682	0.4821	0.2532	1.1357	61.0917	26.9370	-237.9341
FR124	218.3419	0.4820	0.2532	1.1349	61.0998	26.9340	-237.8661
FR125	220.1799	0.4908	0.2525	1.1917	60.5398	27.1419	-242.6338
FR126	220.9107	0.4943	0.2523	1.2152	60.3198	27.2237	-244.5413
FR127	220.4908	0.4876	0.2524	1.2016	60.4460	27.1767	-243.4444
FR128	220.9235	0.4944	0.2523	1.2156	60.3159	27.2251	-244.5749
FR129	220.3902	0.4918	0.2525	1.1984	60.4763	27.1655	-243.1822
FR130	222.2657	0.5009	0.2518	1.2600	59.9160	27.3739	-248.0959
FR131	221.0670	0.4950	0.2522	1.2203	60.2729	27.2411	-244.9502
FR132	223.0666	0.5048	0.2515	1.2874	59.6797	27.4619	-250.2077
FR133	223.7961	0.5083	0.2512	1.3128	59.4660	27.5416	-252.1383
FR134	222.8034	0.5035	0.2516	1.2783	59.7571	27.4330	-249.5126
FR135	225.1950	0.5105	0.2507	1.3631	59.0603	27.6931	-255.8590
FR136	227.8270	0.5282	0.2498	1.4634	58.3113	27.9741	-262.9265
FR137	211.8076	0.4513	0.2555	0.9560	63.1736	26.1637	-221.2598
FR138	228.0995	0.5296	0.2497	1.4742	58.2348	28.0029	-263.6630
FR139	229.1360	0.5348	0.2493	1.5161	57.9454	28.1119	-266.4737
FR140	220.2028	0.4909	0.2525	1.1924	60.5328	27.1445	-242.6935
FR141	219.3413	0.4867	0.2528	1.1654	60.7941	27.0475	-240.4532
FR142	221.7614	0.4984	0.2520	1.2431	60.0656	27.3182	-246.7702
FR143	237.7276	0.5741	0.2461	1.9137	55.6491	28.9915	-290.2938

FR144	219.8481	0.4892	0.2527	1.1812	60.6401	27.1046	-241.7701
FR145	220.4120	0.4919	0.2525	1.1991	60.4697	27.1679	-243.2389
FR146	242.2360	0.6025	0.2444	2.1624	54.5124	29.4391	-303.1658
FR147	224.5421	0.5120	0.2510	1.3394	59.2490	27.6226	-254.1193
FR148	227.5361	0.5268	0.2499	1.4520	58.3931	27.9433	-262.1411
FR149	245.2235	0.6185	0.2432	2.3444	53.7833	29.7318	-311.8373
FR150	246.6477	0.6262	0.2427	2.4362	53.4422	29.8704	-316.0109
FR151	227.5787	0.5223	0.2499	1.4536	58.3812	27.9478	-262.2560
FR152	245.5338	0.6202	0.2431	2.3641	53.7086	29.7620	-312.7444
FR153	250.8802	0.6494	0.2410	2.7301	52.4526	30.2793	-328.5655
FR154	250.8802	0.6494	0.2410	2.7301	52.4526	30.2793	-328.5655
FR155	255.9488	0.6777	0.2390	3.1264	51.3127	30.7644	-343.8995
FR156	252.7583	0.6598	0.2403	2.8710	52.0247	30.4595	-334.2092
FR157	260.8063	0.7054	0.2371	3.5563	50.2638	31.2262	-358.9003
FR158	253.1294	0.6619	0.2401	2.8997	51.9409	30.4951	-335.3298
FR159	265.1338	0.7258	0.2353	3.9851	49.3633	31.6360	-372.5172
FR160	259.2675	0.6966	0.2377	3.4145	50.5916	31.0801	-354.1157
FR161	261.2170	0.7078	0.2369	3.5951	50.1770	31.2651	-360.1825
FR162	268.2111	0.7487	0.2340	4.3184	48.7415	31.9270	-382.3450
FR163	268.0246	0.7476	0.2341	4.2975	48.7788	31.9093	-381.7459
FR164	274.9353	0.7891	0.2312	5.1375	47.4336	32.5625	-404.2392
FR165	263.6898	0.7221	0.2359	3.8370	49.6603	31.4994	-367.9472
FR166	272.3733	0.7736	0.2323	4.8100	47.9239	32.3203	-395.8295
FR167	273.7065	0.7769	0.2318	4.9780	47.6676	32.4463	-400.1953
FR168	280.7273	0.8248	0.2288	5.9535	46.3596	33.1107	-423.5604
FR169	278.6207	0.8117	0.2297	5.6441	46.7448	32.9111	-416.4834
FR170	275.6486	0.7934	0.2309	5.2322	47.2988	32.6299	-406.5956
FR171	281.0184	0.8266	0.2287	5.9975	46.3069	33.1383	-424.5427
FR172	270.0896	0.7599	0.2333	4.5343	48.3692	32.1045	-388.4036
FR173	281.6113	0.8303	0.2284	6.0879	46.1998	33.1944	-426.5467
FR174	281.9429	0.8323	0.2283	6.1390	46.1401	33.2259	-427.6697
FR175	291.0256	0.8854	0.2243	7.6977	44.5607	34.0894	-458.9713
FR176	292.7825	0.9015	0.2236	8.0371	44.2670	34.2570	-465.1479
FR177	286.8665	0.8634	0.2261	6.9446	45.2709	33.6934	-444.5071
FR178	290.2221	0.8849	0.2247	7.5467	44.6962	34.0128	-456.1597
FR179	279.3298	0.8161	0.2294	5.7466	46.6145	32.9783	-418.8595
FR180	293.4100	0.9056	0.2233	8.1616	44.1630	34.3170	-467.3636
FR181	288.3405	0.8728	0.2255	7.2036	45.0167	33.8336	-449.6081
FR182	291.1549	0.8910	0.2243	7.7222	44.5389	34.1018	-459.4245
FR183	296.1216	0.9187	0.2221	8.7193	43.7190	34.5762	-476.9956
FR184	302.1314	0.9634	0.2194	10.0778	42.7646	35.1522	-498.6797
FR185	299.9650	0.9489	0.2204	9.5678	43.1040	34.9443	-490.8096
FR186	302.8876	0.9685	0.2191	10.2614	42.6474	35.2248	-501.4406
FR187	293.9538	0.9092	0.2230	8.2708	44.0733	34.3689	-469.2878
FR188	303.1120	0.9700	0.2190	10.3165	42.6127	35.2464	-502.2615
FR189	296.5815	0.9264	0.2219	8.8172	43.6445	34.6202	-478.6388
FR190	306.5289	0.9932	0.2174	11.1876	42.0912	35.5749	-514.8394
FR191	289.3899	0.8749	0.2251	7.3932	44.8374	33.9335	-453.2563
FR192	306.8900	0.9957	0.2173	11.2834	42.0368	35.6097	-516.1777
FR193	310.5937	1.0212	0.2156	12.3082	41.4864	35.9664	-529.9974
FR194	304.6772	0.9806	0.2183	10.7078	42.3723	35.3968	-508.0048
FR195	311.2431	1.0257	0.2153	12.4962	41.3914	36.0290	-532.4388
FR196	313.4283	1.0410	0.2143	13.1473	41.0745	36.2397	-540.6935
FR197	309.9946	1.0171	0.2158	12.1371	41.5745	35.9087	-527.7503

FR198	313.7625	1.0433	0.2141	13.2494	41.0264	36.2719	-541.9614
FR199	318.0477	1.0689	0.2121	14.6228	40.4196	36.6852	-558.3456
FR200	310.0116	1.0172	0.2158	12.1419	41.5720	35.9103	-527.8137
FR201	320.1137	1.0883	0.2111	15.3286	40.1331	36.8845	-566.3293
FR202	321.5115	1.0983	0.2105	15.8229	39.9415	37.0193	-571.7623
FR203	321.8779	1.1010	0.2103	15.9548	39.8915	37.0546	-573.1902
FR204	313.2167	1.0395	0.2144	13.0829	41.1049	36.2193	-539.8916
FR205	316.4461	1.0622	0.2129	14.0955	40.6444	36.5307	-552.1944
FR206	323.9789	1.1161	0.2093	16.7298	39.6075	37.2570	-581.4132
FR207	321.7550	1.0954	0.2104	15.9105	39.9083	37.0428	-572.7112
FR208	325.0981	1.1243	0.2088	17.1560	39.4577	37.3648	-585.8170
FR209	326.4774	1.1343	0.2081	17.6943	39.2746	37.4976	-591.2661
FR210	325.5769	1.1278	0.2086	17.3412	39.3940	37.4109	-587.7056
FR211	329.2590	1.1547	0.2068	18.8251	38.9103	37.7649	-602.3296
FR212	326.1465	1.1319	0.2083	17.5638	39.3184	37.4657	-589.9565
FR213	332.4657	1.1785	0.2053	20.2069	38.4982	38.0723	-615.2079
FR214	334.8450	1.1963	0.2041	21.2888	38.1978	38.2998	-624.8491
FR 215	338.7186	1.2209	0.2022	23.1587	37.7182	38.6686	-640.7017
FR 216	335.6233	1.2022	0.2038	21.6535	38.1005	38.3740	-628.0188
FR 217	338.8957	1.2269	0.2022	23.2475	37.6966	38.6854	-641.4309
FR 218	339.5619	1.2320	0.2018	23.5843	37.6153	38.7486	-644.1785
FR 219	340.4957	1.2391	0.2014	24.0636	37.5020	38.8370	-648.0393
FR 220	354.5068	1.3486	0.1944	32.3475	35.8770	40.1417	-707.3198
FR 221	364.3268	1.4280	0.1894	39.5431	34.8161	41.0205	-750.3833
FR 222	368.8819	1.4657	0.1871	43.3287	34.3442	41.4144	-770.7828
FR 223	363.4284	1.4160	0.1899	38.8314	34.9107	40.9417	-746.3912
FR 224	389.7894	1.6449	0.1760	65.0386	32.3260	43.0661	-867.8759

Les corrélations utilisées pour constituer la banque de données :

- $T_c = a + b \cdot \ln(ENC)/ENC$,
- $P_c = a + b/ENC + c/ENC^2 + d/ENC^3$,
- $V_c = a + b \cdot ENC$,
- $Z_c = a + b \cdot ENC / \ln(ENC)$,
- $Ku_{op} = a + b \cdot ENC + c \cdot ENC^3 + d / \ln(ENC) + e / ENC$,
- $Pa = a + b \cdot ENC \cdot \ln(ENC)$,
- $\omega = a + b \cdot ENC$,
- $T_s = a + b \cdot ENC^2 + c \cdot ENC^{2.5} + d / ENC^2$,
- $V_m = a + b / \ln(ENC) + c / (\ln(ENC))^2 + d / (\ln(ENC))^3 + e / (\ln(ENC))^4 + f / (\ln(ENC))$,
- $\mu = a + b \cdot ENC^c$,
- $T_{cong} = a \cdot ENC^b$,
- $C_p = a + b \cdot ENC$
- $H_v = a + ENC^b$
- $H_f = a + b \cdot ENC$,

a, b, c, d, e, f sont des constantes spécifique pour chaque propriétés.

Tableau.IV.1 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3 sont respectivement G, Hf, S.

couche d'entrée															biais	
i/j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	bi
1	0.0264	-0.0001	-0.0100	-0.0113	-0.0107	-0.0176	-0.0111	-0.0170	-0.0285	-0.0301	0.0000	-0.0037	-0.0013	-0.0272	-0.0169	0.0740
2	0.0188	0.0971	0.0095	0.0053	0.0112	0.0126	0.0055	0.0076	0.0149	0.0141	0.0212	0.0065	0.0009	0.0258	0.0091	0.0696
3	-7.0762	27.0492	1.6558	6.1136	-4.2211	-17.2180	-0.4926	0.1848	-16.3372	-16.2717	-0.6048	2.2013	-0.0063	-20.0663	-4.9737	0.1032
4	-4.9805	-16.0847	0.7273	0.4778	4.9157	6.5229	1.3313	0.4505	8.0951	7.7831	-2.0305	1.4526	0.6462	6.7416	6.0246	-2.1401
couche de sortie															biais	
i/j	1	2			3			4				bi				
1	-9.3704	5.2879			1.7831			10.7478				0.4131				
2	-11.0892	-8.2196			-0.0287			0.0166				1.3883				
3	4.0213	11.6740			-0.0274			0.0231				-1.0891				

Tableau.IV.2 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, 4 sont respectivement Teb, Tc, Pc, Vc.

couche d'entrée															biais	
i/j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	bi
1	0.1027	0.6557	0.0662	0.0128	0.0171	0.0598	0.0185	0.0303	0.0390	0.0411	0.1372	0.0524	-0.2656	0.1317	0.0846	1.9602
2	-0.2445	-0.7546	-0.0234	0.0191	-0.0635	-0.0467	-0.0078	-0.0038	-0.0312	-0.0083	-0.1559	-0.0314	0.0275	-0.1156	-0.0327	-2.4517
3	-0.0573	-0.1301	0.0148	0.0481	-0.0039	-0.0086	0.0211	0.0028	-0.0237	0.0256	0.0258	-0.0031	0.6678	0.0185	0.0377	-1.4128
4	-0.0669	-0.2941	-0.0219	-0.0072	-0.0180	-0.0178	-0.0070	-0.0034	-0.0109	-0.0067	-0.0618	-0.0185	-0.0312	-0.0580	-0.0197	0.2073
couche de sortie															biais	
i/j	1	2			3			4				bi				
1	9.0452	-3.1170			8.3568			-2.9407				-3.4773				
2	13.9520	-2.9209			13.2394			-2.4361				-3.6313				
3	2.9982	36.3243			2.4630			1.2568				34.5080				
4	0.3910	-1.9376			-0.1663			-3.7042				-1.6676				

Annexe 3

Tableau IV.3 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sortie 1, 2, 3 sont respectivement Hv, Cp, Vm.

		couche d'entrée															biais
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	bi
i/j																	
1		5.9511	16.9155	0.6521	4.0869	-0.3148	3.6466	4.5820	5.8949	3.1204	3.2520	8.5248	-4.1430	3.1240	1.3242	8.9246	-33.1042
2		26.8912	0.9244	-12.1048	-10.8303	3.8912	4.9725	-2.1498	1.9851	9.6825	3.5208	14.1987	-0.8634	-1.0650	4.7486	8.9246	-13.6726
3		-0.1090	-0.4033	-0.0316	-0.0128	-0.0355	-0.0055	0.0001	0.0077	0.0269	0.0824	-0.0290	0.0402	0.0174	-0.0674	-3.9565	0.6409
4		0.0412	0.2732	0.0313	0.0182	0.0088	0.0200	0.0125	0.0087	0.0087	0.0177	0.0633	0.0217	0.0034	0.0517	0.0464	0.6716
		couche de sortie															biais
		1	2	3	4											bi	
i/j																	
1		0.9851			-0.2020				1.0306						8.4194		-4.4526
2		0.0555			0.3641				-2.0904					2.4508			0.0058
3		0.6419			0.1411				-1.3773					3.8647			-0.7424

Tableau IV.4 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, 4 respectivement sont ω , Zc, dc, Ts.

		couche d'entrée															biais
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	bi
i/j																	
1		-0.2710	-1.2201	-0.0300	0.0541	-0.0836	-0.0968	-0.0399	-0.0384	-0.0488	-0.1211	-0.3505	-0.1147	-0.0024	-0.6302	-0.0369	-2.5670
2		0.0783	0.1850	-0.0220	-0.0425	0.0172	0.0095	-0.0057	-0.0010	0.0044	0.0014	0.0193	-0.0012	-0.0027	0.0203	-0.0028	0.8226
3		-0.1088	-0.5286	-0.0605	-0.0360	-0.0240	0.0095	-0.0057	-0.0332	-0.0409	0.0029	-0.1440	-0.0085	-0.0080	-0.1308	-0.1492	0.2698
4		-0.4764	1.4881	0.6111	0.5806	-0.1180	-0.1364	0.0852	0.1339	0.3404	0.3875	1.5461	0.0235	0.2610	1.5645	1.3404	-3.9727
		couche de sortie															biais
		1	2	3	4											bi	
i/j																	
1		0.6132			4.9735				-1.4280					-0.1338			-2.4871
2		-0.2298			1.7546				3.0564					0.9674			-1.3882
3		-10.2990			-23.2073				-3.9176					-0.3538			6.3051
4		-13.4604			-8.6062				-2.1760					-0.0425			-6.5995

Tableau.IV.5 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sortie 1,2 sont respectivement Spgr, n20.

couche d'entrée															biais	
i/j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	bi
1	0.0452	-1.8077	-0.3708	-0.2432	0.0129	-0.1821	-0.1570	0.2429	0.0168	-0.1647	-0.3607	-0.6605	0.1329	-0.4313	-0.1807	-2.7657
2	10.6188	-41.6807	-10.8330	-10.8173	4.0899	-3.2654	-4.8684	6.7213	-1.2465	-2.1811	0.3643	-4.0570	3.3523	0.1442	-5.0730	-35.2029
3	-0.0315	-0.1310	-0.0040	0.0094	-0.0060	-0.0114	-0.0038	0.0471	0.0074	-0.0014	-0.0077	-0.0111	0.0210	0.0042	0.0005	-0.9043
4	-0.0353	0.3160	0.0847	0.0741	-0.0039	0.0363	0.0380	0.1636	-0.0160	0.0480	0.0953	0.0451	0.6270	0.1036	0.1740	1.7301
couche de sortie															biais	
I/j	1				2				3				4			bi
1	-2.3913				-0.1580				8.0367				21.4038			-16.1846
2	2.0792				-2.6263				5.3971				16.7140			-11.9817

Tableau .IV.6 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, 4 sont respectivement Cp, IIf, IIV et Teb.

		couche d'entrée			biais		
I/j	1	2	3	bi			
1	0.9365	-0.9849	-7.6021	3.7949			
2	-4.4339	1.4609	0.4357	0.4161			
3	0.2874	-0.0402	-0.0654	-0.1798			
4	0.2771	0.3372	2.7900	2.8901			
5	0.0484	-0.0025	1.7226	0.6429			
		couche de sortie					biais
I/j	1	2	3	4	5	bi	
1	0.1677	6.7143	9.7432	-0.6253	0.0588	0.2015	
2	-0.1677	-6.7143	-9.7432	0.6253	-0.0588	-0.2015	
3	-0.0819	-2.4059	-3.3958	-1.5170	-1.1870	1.8993	
4	0.0377	3.0791	4.8673	-0.008	0.9371	-0.3294	

Tableau .IV.7 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sortie 1, 2, 3, 4 sont respectivement Kuop, Pa, ω et Teong.

		couche d'entrée			biais		
I/j	1	2	3	bi			
1	-3.8873	-0.3872	4.4108	11.3208			
2	-0.2601	0.0048	-2.8803	-3.7378			
3	0.9597	0.4122	-0.7845	3.7284			
4	0.0017	-0.0004	0.5361	-0.7072			
5	-0.0004	-0.0002	0.2714	-0.6767			
		couche de sortie					biais
I/j	1	2	3	4	5	bi	
1	5.3672	40.6265	-27.6637	38.2900	-73.6477	41.6684	
2	-5.4901	4.7794	14.0766	-7.7359	26.1796	7.0090	
3	-6.5821	5.2557	18.1057	-12.7532	36.3671	7.5706	
4	-9.1111	5.3363	25.1780	-21.7104	54.3888	8.4162	

Tableau .IV.6 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, 4 sont respectivement Cp, IIf, IIv et Teb.

		couche d'entrée			biais		
I/j		1	2	3	bi		
1		0.9365	-0.9849	-7.6021	3.7949		
2		-4.4339	1.4609	0.4357	0.4161		
3		0.2874	-0.0402	-0.0654	-0.1798		
4		0.2771	0.3372	2.7900	2.8901		
5		0.0484	-0.0025	1.7226	0.6429		
		couche de sortie					biais
I/j		1	2	3	4	5	bi
1		0.1677	6.7143	9.7432	-0.6253	0.0588	0.2015
2		-0.1677	-6.7143	-9.7432	0.6253	-0.0588	-0.2015
3		-0.0819	-2.4059	-3.3958	-1.5170	-1.1870	1.8993
4		0.0377	3.0791	4.8673	-0.008	0.9371	-0.3294

Tableau .IV.7 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sortie 1, 2, 3, 4 sont respectivement Kuop, Pa, ω et Tcong.

		couche d'entrée			biais		
I/j		1	2	3	bi		
1		-3.8873	-0.3872	4.4108	11.3208		
2		-0.2601	0.0048	-2.8803	-3.7378		
3		0.9597	0.4122	-0.7845	3.7284		
4		0.0017	-0.0004	0.5361	-0.7072		
5		-0.0004	-0.0002	0.2714	-0.6767		
		couche de sortie					biais
I/j		1	2	3	4	5	bi
1		5.3672	40.6265	-27.6637	38.2900	-73.6477	41.6684
2		-5.4901	4.7794	14.0766	-7.7359	26.1796	7.0090
3		-6.5821	5.2557	18.1057	-12.7532	36.3671	7.5706
4		-9.1111	5.3363	25.1780	-21.7104	54.3888	8.4162

Tableau .IV.8 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, sont respectivement V_m , T_s à $20^\circ C$ et μ à $100^\circ F$.

		couche d'entrée			biais		
I/j		1	2	3	bi		
1		-0.0658	324.7790	0.6241	19.4515		
2		3.2300	-1.7096	-3.9419	13.3884		
3		-0.4210	-0.8793	-2.3026	-2.7036		
4		0.0039	0.0016	1.2754	0.5039		
5		-18.0268	-2.3010	-15.9311	30.9752		
		couche de sortie					biais
I/j		1	2	3	4	5	bi
1		23.3504	23.1806	0.0166	1.3807	-0.0566	-0.7469
2		10.2860	10.3105	-1.6715	1.6555	-0.0273	-2.2464
3		0.1497	0.2830	-19.4854	7.9244	11.5471	-0.1088

Tableau .IV.9 Poids de connexion et biais du réseau retenu avec les sorties 1, 2, 3, 4 sont respectivement T_c , P_c , V_c et Z_c .

		couche d'entrée			biais		
I/j		1	2	3	bi		
1		-15.6055	-0.7858	10.5119	4.7729		
2		2.0390	-1.1441	-0.8231	6.2211		
3		0.0319	-0.0583	1.8103	0.7061		
4		0.0105	-47.1871	-0.2042	-2.4451		
5		-0.9990	0.9754	0.5367	-3.9445		
		couche de sortie					biais
I/j		1	2	3	4	5	bi
1		0.0020	-29.6411	1.4925	-4.1833	-32.5616	-0.7683
2		-0.0037	32.1069	-1.6219	3.1842	34.1723	0.5634
3		-0.0566	11.4274	0.4093	-11.9529	1.6516	-2.5548
4		0.0529	-8.2085	-0.5321	11.124	0.8443	2.3749