

M0035/04A

*République Algérienne Démocratique Et Populaire*

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

**Ecole Nationale Polytechnique**

*Département de Génie Chimique*

**Mémoire de Magister**

PRESENTE PAR M<sup>LE</sup> *KAHINA MEZIOUD*

Thème :



*Caractérisation des hydrocarbures purs, de leurs  
mélanges et des fractions pétrolières par les Réseaux de  
Neurones Artificiels*

Membres du jury :

Présidente :	R.Derriche	Maître de conférences (ENP)
Rapporteurs :	F.SOUAHI	Maître de conférences (ENP)
	C.E. Chitour	Professeur (ENP)
Examineurs :	L.Hamami	Maître de conférences (ENP)
	D.Boukhetala	Maître de conférences (ENP)
	E.H Benyoussef	Maître de conférences (ENP)

**Novembre 2004**

ENP .10 avenue Pasteur, Hassen Badi ALger

ملخص : مساهمة على التعرف الخصائص الفيزيائية الهيدروكربونية بتطبيق شبكة العصبونات الاصطناعية

ملخص  
عملنا يتمثل في إيجاد الخصائص الفيزيائية للمركبات الهيدروكربونية عن طريق المجموعات العصبونية.

ينقسم عملنا إلى ثلاثة أقسام:

اقترحنا مجموعات عصبونية لتعرف على خصائص الهيدروكربونات التي تحتوي من 6 إلى 30 ذرة كربون , لخلانط الفحمات الهيدروكربونية و التجزئات البترولية, بدلالة درجة حرارة الغليان المتوسطة والكثافة .  
لتقييم النتائج المحصل عليها حاولنا بعد ذلك مقارنتها مع الدراسات المعتمدة التي تقترب أكثر من الحالة الحقيقية, و التي تستعمل عادة في المراجع.

الكلمات المفتاحية :

خصائص ,شبكة العصبونات الاصطناعية, التجزئات البترولية, الفحمات الهيدروكربونية.

## Caractérisation des hydrocarbures purs, de leurs mélanges et des fractions pétrolières par les réseaux de neurones artificiels

### Résumé :

Dans les procédés industriels mettant en œuvre des hydrocarbures, la connaissance des propriétés physico-chimiques est d'une grande importance 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. Notre travail consiste en une nouvelle technique d'approche basée sur les réseaux de neurones artificiels, pour cela nous avons établi des réseaux capables d'estimer avec un pourcentage d'erreur faible les propriétés désirées en fonction de la température d'ébullition et de la densité et ce pour les hydrocarbures purs, leurs mélanges, et les fractions pétrolières.

Une comparaison des résultats obtenus avec ceux calculés par les corrélations les plus citées dans la littérature, a permis de valider la méthode proposée.

**Mots clés :** propriété- hydrocarbure – fraction pétrolière- réseaux de neurones artificiels rétropropagation

**Contribution to determine of the proprieties of hydrocarbons, their mixtures, and oil fractions with the use of artificial neural network**

### Abstract

In the industrial processes using hydrocarbons, the knowing of physicochemical properties are of great importance, and for this we use various techniques of characterization.

But, in the major part of the cases, the used methods are long and require an expensive material.

This is why the techniques of the determination of these properties are very often replaced by empirical approaches

Our work is about a new technique of approach which is the networks artificial neurons for that we established networks able to estimate with a small percentage of error the properties according to the density and boiling point for pure hydrocarbons, their mixtures, and oil fractions.

A comparison of the obtained results with those calculated by the most quoted correlations in the literature, enable the validation of suggested method.

**Key words:** property - hydrocarbon - oil fraction – neural networks - back propagation

## *Remerciements*

Je ne saurai exprimer ma profonde gratitude à Madame Souahi ainsi qu'à Monsieur le Professeur Chitour pour leur gentillesse, patience ainsi que pour leurs nombreuses discussions et conseils très utiles qu'ils n'ont cessé de me prodiguer tout au long de ce travail.

Qu'ils trouvent ici mes respectueux remerciements.

Je tiens aussi à remercier Madame Derriche pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Mes remerciements s'adressent aussi à Madame Hamami et à Messieurs Boukhetala et Benyoussef d'avoir donné un peu de leur précieux temps afin d'examiner ce travail.

Enfin, je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail, Dieu seul sait combien leur aide m'a été précieuse.

*A mes parents ;*

*Qui par leur présence à mes cotés ont rendu ma vie pleine de joie, pour le soutien moral, dont j'ai bénéficié à chaque fois que j'en avais besoin, pour l'amour, le courage, le dévouement, et leur énorme sacrifice, je ne vous remercierai jamais assez.*

*A ma sœur et mes frères*

*A la mémoire de mes grands-parents paternels*

*A mes grands-parents maternels*

*A mes oncles, tantes, cousins et cousines*

*A tous mes ami(e)s*

*A tous Ceux qui me sont chers*

*A la mémoire de mon amie Nadia*

Nomenclature

Terme	Signification
API	densité définie par l'American Petroleum Institut
Cp	chaleur spécifique à pression constante (j/moleK)
d <sub>20</sub>	densité à 20 °c
E %	écart (%)
H <sup>0</sup>	enthalpie
Hv	Chaleur latente de vaporisation (kcal/mole)
CPS	Pouvoir calorifique supérieur ( KJ/mole)
Kuop	facteur de caractérisation
N	nombre d'atome de carbone
n <sup>20</sup>	indice de réfraction à 20°C
P	pression (atm)
Pc	pression critique (atm)
SpGr	specific gravity a 60°F/60°F
S <sup>0</sup>	Entropie standard
T	température
TBP	distillation true boiling point
Tc	température critique (°R)
Teb	température d'ébullition ( K )
Ts	tension superficielle (dyne/cm)
Vc	volume critique (cm <sup>3</sup> /mole)
Vm	volume molaire (cm <sup>3</sup> /mole)
Zc	facteur de compressibilité critique
μ	viscosité (cst)
ω	facteur acentrique
Neuff	Soubroutine pour la création des RNA à rétropropagation du gradient
Trainlm	Soubroutine d'entraînement des RNA
Purlin	Fonction d'activation des RNA
Tansig	Fonction d'activation des RNA
Wij	Poids synaptique
bij	biais
RNA	Réseaux de neurones artificiels
FP	Fraction pétrolière
M	Mélange d'hydrocarbure

<i>Introduction</i> .....	1
<i>Chapitre I</i> : Méthodes de caractérisation des hydrocarbures	
Introduction .....	3
1. Essais préliminaires .....	3
2. La distillation .....	3
3. Analyse physico chimique expérimentale.....	4
4. Modèles empiriques.....	4
a) Les équations d'états.....	4
b) Lois des états correspondants.....	5
c) Méthodes empiriques .....	6
<i>Chapitre II</i> : Les Réseaux de Neurones Artificiels (RNA)	
1. Introduction.....	7
2. historique.....	8
3. Modèle biologique.....	9
4. Modèle mathématique .....	11
5. Les réseaux de neurones multicouches .....	13
a) Présentation .....	13
b) Classification des RNA.....	14
c) Le perceptron multicouches .....	17
d) Algorithme de la rétropropagation du gradient.....	19
e) Procédure de développement d'un RNA.....	21
f) Applications, avantages et limites.....	24
<i>Chapitre III</i> : Caractérisation des hydrocarbures purs, de leurs mélanges et des fractions pétrolières par RNA	
1. Présentation des propriétés étudiées .....	26
2. Développement du modèle mathématique.....	34
3. Application du modèle, résultats et étude comparative	
a) Volume molaire .....	36
b) Tension superficielle .....	38

c) Viscosité.....	41
d) Température critique.....	43
e) Pression critique .....	46
f) Volume critique .....	48
g) Facteur de compressibilité critique .....	51
h) Enthalpie de vaporisation .....	53
i) Facteur de caractérisation Kuop.....	56
j) Facteur acentrique .....	58
k) Indice de réfraction.....	60
l) Entropie.....	62
m) Pouvoir calorifique supérieur.....	65
<i>Conclusion</i> .....	67
<i>Bibliographie</i> .....	69
<i>Annexe 1</i> .....	72
<i>Annexe 2</i> .....	76

LE **Pétrole** est une huile minérale naturelle formée d'hydrocarbures. C'est un liquide huileux, à odeur forte, constitué de divers composants organiques. On le trouve en grandes quantités sous la surface de la terre. On l'emploie comme combustible et comme matériau de base dans l'industrie chimique. Les pays industrialisés l'utilisent principalement comme source d'énergie pour se déplacer sur terre, sur mer et dans les airs, dans des proportions inimaginables. Le pétrole et ses dérivés servent également dans l'industrie des produits pharmaceutiques, des engrais, du plastique, des matériaux de construction, des peintures, des vêtements, et aussi pour produire de l'électricité.

Le pétrole joue un rôle fondamental mis en évidence par les « trois chocs pétroliers » de 1972, 1979 et 1980, lorsque l'organisation des Pays Exportateurs de Pétrole (OPEP) décida d'augmenter brutalement le prix du baril, pour rattraper l'inflation. Ces événements ont eu des répercussions économiques importantes sur les pays industrialisés et les pays en voie de développement. Les experts estiment que le pétrole, bien que très abondant, commencera à manquer à partir du milieu du XXIème siècle.

La découverte et l'exploitation de gisements ainsi que la chimie du pétrole demandent des connaissances faisant appel à tous les domaines scientifiques : géologie, informatique, sismologie, ingénierie, géochimie, physique, chimie, biologie et mathématiques, la plupart des ingénieurs du pétrole se spécialisent dans un des domaines du cycle d'exploitation

La connaissance des propriétés physico-chimiques du pétrole et des fractions pétrolières a toujours été un souci majeur pour l'ingénieur en génie chimique, en raffinage et en pétrochimie. La maîtrise de toutes les étapes de fabrication et de transformation des produits pétroliers, depuis l'acheminement du pétrole des puits jusqu'au stockage des produits finis passe par une parfaite connaissance des caractéristiques du pétrole et de ses dérivés.

L'obtention de ces caractéristiques commence par des essais préliminaires sur le pétrole brut et ses différents produits. Des méthodes d'analyse ont été développées et normalisées pour déterminer les principales caractéristiques physico-chimiques qui vont conditionner leurs traitements ultérieurs et pour que les contrôles, effectués par les différentes parties, soient comparables. Ces spécifications correspondent à des normes (ASTM, AFNOR, DIN, ...).

L'expérience fournit la majorité des 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



## *Introduction générale*

de manipulation souvent important. Les investisseurs, recherchant une 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 temps et argent. Des corrélations ont été proposées par différents auteurs.

Les réseaux de neurones sont en passe de devenir une composante importante de l'aide à la décision. Technique fortement stimulée par la vogue du Data-Mining, l'analyse neuronale arrive aujourd'hui à un degré de maturité lui permettant de traiter un bon nombre de problèmes de grande complexité.

Notre étude consiste à développer une méthode basée sur les réseaux de neurones artificiels pour déterminer les principales caractéristiques des hydrocarbures, de leurs mélanges et des fractions pétrolières. elle est fondée sur une représentation mathématique d'un neurone biologique, avec ses notions de mémorisation, d'apprentissage et de généralisation.

Dans la première partie de notre travail, nous avons présenté les méthodes de caractérisation des hydrocarbures, en passant de l'expérience aux corrélations basées essentiellement sur les équations d'états, la loi des états correspondants et la méthode de contribution de groupes.

Dans la seconde partie, nous avons présenté les réseaux de neurones, leurs fondements ainsi que leurs apports aux sciences de l'ingénieur. Cette partie permettra au lecteur de se familiariser avec les réseaux de neurones et de se rendre compte de l'importance de ces derniers.

La troisième partie a consisté, quant à elle, à présenter les résultats de simulation obtenus pour chaque groupe de propriétés. Nous avons appliqué notre méthode à pas moins de dix-sept (17) propriétés pour :

- chacune des trois familles les plus répandues dans les fractions pétrolières à savoir les n-paraffines, n-alkylcyclohexanes et les n-alkylbenzènes.
- les mélanges d'hydrocarbures à composition connue en utilisant l'hypothèse d'additivité.
- les fractions pétrolières issues des pétroles algériens.

Une présentation des résultats ainsi qu'une comparaison avec les corrélations les plus citées dans la littérature a été effectuée pour rendre compte de l'efficacité et de l'importance de cette nouvelle méthode.

# Chapitre - I -

## Introduction :

La mise en œuvre des fluides rencontrés dans l'industrie chimique, en particulier celle du pétrole, le dimensionnement des équipements des unités de fabrication, la simulation des procédés et leur optimisation reposent, essentiellement, sur la connaissance des caractéristiques physiques et thermodynamiques des corps purs et de leurs mélanges.

Depuis le milieu des années cinquante, de nombreuses études ont été menées visant des démarches qui utilisent des méthodes pour estimer rapidement et avec des précisions plus ou moins acceptables ces propriétés.

Dans ce chapitre, nous exposons les différents essais préliminaires sur le pétrole brut ainsi que le fondement des différentes lois sur lesquelles se basent la majorité des corrélations établies.

### 1) Essais préliminaires [1] :

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

### 2) La distillation [4]

▪ **La distillation TBP (True Boiling Point) :** La distillation est faite dans un appareillage représentant un nombre important d'étages ; c'est à dire un appareillage à très bonne sélectivité équivalent à la succession d'un très grand nombre de distillations simples élémentaires, nous obtenons, en notant la température de la vapeur en fonction du pourcentage distillé, une courbe dite TBP.

Pour un mélange constitué d'un nombre limité de constituants, la courbe est formée d'une succession de paliers horizontaux ; la longueur de chaque palier étant proportionnelle à la concentration du corps pur bouillant à cette température dans le mélange.

Si le mélange est très complexe, la succession de paliers n'est plus visible car les composants sont très nombreux avec des points d'ébullition voisins, et la courbe est en fait une courbe continue.

La distillation TBP du pétrole se fait d'abord sous une pression atmosphérique jusqu'à ce que la température dans le ballon atteigne une limite correspondant au début de cracking du résidu, nous passons à une distillation sous vide, si le résidu est important ; on procède alors à une distillation sous un vide poussé.

### ▪ La distillation ASTM (American Society for Testing Materials):

Cette distillation permet de prévoir le comportement du pétrole ou de la coupe durant la distillation TBP, son mode est très simple. Elle est surtout utilisée pour fournir les spécifications de distillation de produit pétrolier. De plus, son principal avantage est le temps court qu'elle nécessite. L'appareillage comporte un ballon pouvant contenir 100 à 200cm<sup>3</sup> de produit que l'on chauffe et distille à une vitesse déterminée à pression atmosphérique ; les vapeurs formées sont condensées dans un tube en cuivre baignant dans une éprouvette graduée, on notera la température régulièrement lorsque 5, 10, 15, ..... 90 et 95% du produit sont distillés, le maximum de la température représente le point final de la distillation.

### 3) Analyses physico-chimiques [5]:

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. Cette caractérisation (distillation et analyse élémentaire sur coupes) donne une bonne évaluation du pétrole brut. Ces analyses s'imposent en vue d'une valorisation complète des pétroles bruts.

En effet, les produits du pétrole brut sont séparés à partir d'un intervalle de distillation et doivent satisfaire à des critères imposés par les différentes utilisations (combustion, mise en œuvre et protection de l'environnement). Ces exigences sont définies par le biais de mesures conventionnelles et normalisées.

En plus des méthodes normalisées citées plus haut qui sont applicables à toutes les coupes obtenues, on fait appel à d'autres essais standard pour définir les qualités tel que : *Le point d'aniline, La tension superficielle, L'indice de réfraction* .

### 4) Méthodes empiriques de caractérisation des hydrocarbures [1]:

#### a) Les équations d'états :

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

La plus simple des équations d'état est représentée par l'équation des gaz parfaits  $P V = n R T$ . 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'interaction entre molécules ne sont plus négligeables. Parmi les équations d'état qui existent, les équations d'état 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. Parmi ce type d'équations, les plus connues sont celles de Van Der Waals V.D.W (1873), Redlich-Kwong R.K (1949), Soave-Redlich-Kwong S.R.K (1972) et Peng-Robinson P.R (1976). Les deux dernières équations ont connu cependant le plus grand succès.

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.

Une autre 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, tels que les fractions pétrolières.

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. Pour résoudre ce problème, certains auteurs se sont proposés de modifier les équations d'état en appliquant les méthodes de contributions de groupes pour la détermination de leurs paramètres et éviter ainsi l'utilisation des paramètres critiques.

Parmi ces auteurs, nous citons Bondi (1964) qui a proposé une méthode de contributions de groupes pour la détermination du paramètre  $b$  de l'équation d'état de Van Der Waals. Carrier et coll. (1988) ont proposé quant à eux une modification de l'équation de Peng-Robinson dans laquelle le paramètre  $b$  et le facteur acentrique sont exprimés en terme de contributions. Coniglio et coll. (1993) ont amélioré la méthode de Carrier en appliquant des contributions de type Bondi aux deux paramètres  $a$  et  $b$ . Enfin, plus récemment, Soave et coll. (1995) ont proposé une méthode de contributions de groupes pour la détermination du covolume de l'équation d'état de Redlich-Kwong.

#### **b) 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.

Corrélations fondées sur le facteur de compressibilité critique :

Le facteur de compressibilité critique est défini par :  $Z_c = P_c V_c / (R T_c)$

Le choix de ce facteur comme troisième paramètre pour développer des corrélations des états correspondants, repose sur l'examen des divergences entre le comportement des fluides réels et la loi des états correspondants à deux paramètres. En effet, cette dernière prévoit qu'au point critique, le facteur de compressibilité critique a la même valeur pour tous les corps, soit  $Z_c = Z(1,1) = 0.27$ . Or, il n'en est rien, puisque celui-ci varie de 0.232 pour l'eau à 0.3 pour l'hydrogène, tout en restant néanmoins voisin de 0.27. 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  $\omega$ , défini par Pitzer (1955) pour exprimer la non sphéricité des molécules:

$$\omega = - \log P_r^s - 1 \quad \text{à} \quad T_r = 0.7$$

$P_r^s$  est la pression de saturation réduite et  $T_r$  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 nombreuses corrélations ont été établies par, Curl et Pitzer (1958) ou bien, Lee et Kesler (1975)

**c) Méthodes empiriques :**

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

▪ **Méthodes de contribution de groupes :**

Par leurs principes ces méthodes ont pour objectifs de rapporter les propriétés des corps à leur structure moléculaire , leurs formes sont assez variées, et dépendent des types de

## Chapitre 1 -----Méthodes de caractérisation des hydrocarbures-----

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.

Citons par exemple les travaux de Lydersen ou bien Joback qui ont établis des corrélations pour le calcul des propriétés critiques en fonction de  $T_{eb}$ .

### ▪ **Corrélations basées sur des grandeurs facilement accessibles par expérience :**

Ce sont des méthodes basées essentiellement sur l'expérience où l'on essaie de caractériser les hydrocarbures à partir de propriétés facilement accessibles par expériences.

Des corrélations pour la détermination des propriétés critiques en utilisant la densité ou la masse moléculaire

Un grand nombre de chercheurs ont mis au point des corrélations pour le calcul des propriétés des corps purs et de mélanges complexes dont la composition n'est pas connue, tels que les fractions pétrolières nous pouvons citer comme exemple ; les travaux de Riazi Dauber, Riazi et El sahaf, Lee et Kesler, Watanasiri et coll. ou bien Chitour et coll.

### **Conclusion :**

Dans ce chapitre, nous avons montré les différentes méthodes de caractérisation des hydrocarbures et des fractions pétrolières ainsi que les différents essais pour l'évaluation des pétroles bruts, en passant de l'expérience jusqu'à l'utilisation de corrélations. L'ingénieur en génie chimique dispose d'un arsenal important en matière de caractérisation des hydrocarbures et coupes pétrolières et de ce fait il peut aisément dimensionner les différentes installations dans l'industrie pétrochimique.

L'inconvénient majeur de l'expérience est le coût important en temps et en argent, les techniques utilisées sont généralement lourdes à manipuler. Dans le but de faciliter la tâche à l'ingénieur, nous proposons une nouvelle méthode de prédiction des caractéristiques des hydrocarbures basée sur les Réseaux de Neurones Artificiels.

0909

1

11

1



### 1) Introduction

L'informatique est la science du traitement automatique de l'information. Son développement est souvent confondu avec celui des machines de traitement, jusqu'à aujourd'hui, les ordinateurs sont devenus de plus en plus puissants.

#### **Logique floue (ou Fuzzy logic) [2]**

La logique floue est une technique employée pour permettre à un programme de manipuler l'incertitude dans les données. Elle laisse des ordinateurs manipuler les choses qui ne sont pas uniquement " noire ou blanc / oui ou non ". Par exemple, au lieu de savoir que 5.000 visiteurs ont assisté à la convention, le programme en conclue qu'il y avait " énormément " de personnes (chose que les humains ont l'habitude de faire)

#### **Algorithmes Génétiques [2 ]**

Les algorithmes génétiques sont des procédures de recherche qui utilisent les mécanismes de la sélection normale et de la génétique normale. L'algorithme génétique, d'abord développé par John H. Holland dans les années 60 permet aux ordinateurs de résoudre des problèmes difficiles. Utilisant des techniques évolutionnaires, basées sur l'optimisation de fonctions et l'intelligence artificielle pour développer une solution. L'exécution de base d'un algorithme génétique est simple. D'abord une population de solutions possibles à un problème est développée, ensuite les meilleures solutions sont recombinaées l'une avec l'autre pour former quelques nouvelles solutions. Enfin les nouvelles solutions sont employées pour substituer la plus pauvre des solutions initiales et le processus est répété.

Une autre approche au traitement automatique de l'information semble donc s'offrir à nous, où l'on cherche à s'inspirer du traitement de l'information effectué par le cerveau.

L'hypothèse principale, à la base de l'essor des réseaux de neurones artificiels, est que le comportement intelligent est sous-tendu par un ensemble de mécanismes mentaux. Ces mécanismes étant basés sur des processus neurophysiologiques, nous supposons donc que la structure du système nerveux central est à la base du développement d'un comportement intelligent.

#### **Réseaux Neurologiques [3]**

Microsoft Encarta '99 définit un réseau neurologique en tant que "réseau fortement interconnecté d'éléments de traitement de l'information qui imite la connectivité et le fonctionnement du cerveau humain ". Ils peuvent résoudre beaucoup de problèmes qui pourraient être difficile à traiter avec des méthodes de programmation traditionnelles. Ils peuvent apprendre d'une manière qui est beaucoup plus semblable à la méthode d'étude humaine, et sont donc beaucoup plus pertinents dans certains domaines tels que la reconnaissance de la parole.

#### **Pourquoi les réseaux de neurones ?**

Malgré la constante augmentation de puissance des calculateurs, malgré les approches théoriques de plus en plus sophistiquées, un certain nombre de tâches résistent encore aux algorithmes et aux méthodes classiques de traitement des signaux et des données. Ces tâches relèvent typiquement du traitement, en temps réel, de très grands flots de données souvent multidimensionnelles et arrivant à des cadences élevées. Le grand nombre des données, leur variabilité, le fait qu'elles ne répondent pas à des modèles physiques connus nous laissent souvent démunis devant des tâches de caractérisation, de reconnaissance et de prise de décision.

communauté scientifique.

Capter une image la numériser, la segmenter en éléments de contours, détecter un objet mobile, le reconnaître quelque soit sa position et estimer sa profondeur. Capter le son d'une voix au milieu d'un brouhaha et du bruit ambiant et reconnaître les mots qui sont prononcés. Capter et analyser les deux cents signaux issus d'un processus industriel et en déduire si tout est conforme ou si une avarie se prépare.

Il y a des centaines d'exemples nous montrant à la fois combien on peut espérer de la modélisation du système nerveux mais aussi combien il sera difficile d'imaginer et de comprendre les divers aspects des problèmes de perception. Il paraît donc naturel d'essayer de comprendre comment les systèmes biologiques sont capables de telles performances, et si possible, de s'inspirer de leurs principes pour imaginer de nouveaux algorithmes ou de nouvelles machines plus efficaces que ceux dont nous disposons actuellement.

Les techniques de réseaux de neurones relèvent d'une telle approche : comprendre les principes selon lesquels les systèmes biologiques traitent l'information et s'en inspirer pour élaborer de nouvelles techniques en sciences de l'ingénieur. C'est donc une double démarche, à la fois cognitive et synthétique où le monde biologique doit être considéré comme une source de référence et de connaissance.

D'un point de vue technique, il est clair que seuls les principes seront important. Il ne sera pas généralement nécessaire, pour modéliser telle ou telle fonction, de simuler toutes les molécules chimiques et les enzymes qu'elle implique. L'adéquation fine aux modèles biologiques ne sera retenue que dans la mesure où elle conduit à des réalisations techniquement simples.

Les caractéristiques essentielles des réseaux de neurones réels que nous conserverons dans les modèles mathématiques étudiés, concernent le grand nombre de connexions, la non linéarité des relations entrée-sortie et la faculté de "plasticité" ou d'adaptabilité. Ces dernières, même simplifiées, leur confèrent déjà de multiples possibilités en traitement signaux et des informations ainsi que la faculté d'apprendre à classer, à reconnaître des formes ou à réaliser des tâches complexes.

## **2) Historique [ 10 et 14] :**

Les premiers à proposer un modèle sont deux biophysiciens de Chicago, McCulloch et Pitts, qui inventent en 1943 le premier neurone formel qui portera leurs noms (neurone de McCulloch-Pitts).

Quelques années plus tard, en 1949, Hebb propose une formulation du mécanisme d'apprentissage, sous la forme d'une règle de modification des connexions synaptiques (règle de Hebb). Cette règle, basée sur des données biologiques, modélise le fait que si des neurones, de part et d'autre d'une synapse, sont activés de façon synchrone et répétée, la force de la connexion synaptique va aller dans le sens croissant.

Le premier réseau de neurones artificiels apparaît en 1958, grâce aux travaux de Rosenblatt qui conçoit le fameux Perceptron. Le Perceptron est inspiré du système visuel (en

terme d'architecture neuro-biologique) et possède une couche de neurones d'entrée ("perceptive") et une couche de neurones de sortie ("décisionnelle"). Ce réseau parvient à apprendre à identifier des formes simples et à calculer certaines fonctions logiques. Il constitue donc le premier système artificiel présentant une faculté jusque là réservée aux êtres vivants : la capacité d'apprendre par l'expérience.

Malgré tout l'enthousiasme que soulève le travail de Rosenblatt dans le début des années 60, la fin de cette décennie sera marquée en 1969, par une critique violente du Perceptron par Minsky et Papert. Ils montrent dans un livre « Perceptrons » toutes les limites de ce modèle, et soulèvent particulièrement l'incapacité du Perceptron à résoudre les problèmes non linéairement séparables. Il s'en suivra alors, face à la déception, une période noire d'une quinzaine d'années dans le domaine des réseaux de neurones artificiels.

Il faudra attendre le début des années 80 et l'apport de Hopfield pour que l'intérêt pour ce domaine soit de nouveau présent. En effet, Hopfield démontre en 1982 tout l'intérêt d'utiliser des réseaux récurrents (dits "feed-back") pour la compréhension et la modélisation des processus. Les réseaux récurrents constituent alors la deuxième grande classe de réseaux de neurones, avec les réseaux type perceptron (dits "feed-forward").

En parallèle aux travaux de Hopfield, Werbos conçoit son algorithme de rétropropagation de l'erreur, qui offre un mécanisme d'apprentissage pour les réseaux multicouches de type Perceptron (appelés MLP pour Multi layer Perceptron), fournissant ainsi un moyen simple d'entraîner les neurones des couches cachées. Cet algorithme de "back propagation" ne sera pourtant popularisé qu'en 1986 par Rumelhart.

### 3) Neurone biologique [2]

On pense que le système nerveux compte plus de 1000 milliards de neurones interconnectés. Bien que les neurones ne soient pas tous identiques, leur forme et certaines caractéristiques permettent de les répartir en quelques grandes classes. En effet, il est aussi important de savoir, que les neurones n'ont pas tous un comportement similaire en fonction de leur position dans le cerveau. Avant de rentrer plus en avant dans les détails, examinons un neurone. Voici le schéma d'un neurone biologique :

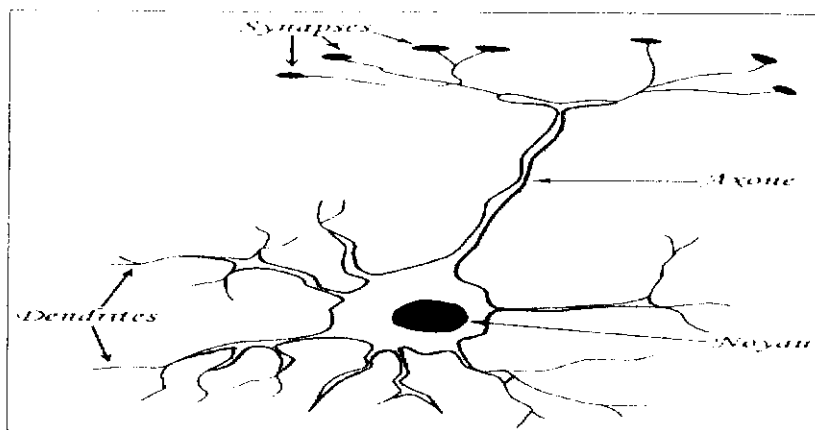


Fig. 1:Schéma d'un neurone biologique

On peut le décomposer en trois régions principales:

Le corps cellulaire :

Il contient le noyau du neurone ainsi que la machine biochimique nécessaire à la synthèse des enzymes. Ce corps cellulaire de forme sphérique ou pyramidale contient aussi les autres molécules essentielles à la vie de la cellule. Sa taille est de quelques microns de diamètre.

Les dendrites :

Ce sont de fines extensions tubulaires qui se ramifient autour du neurone et forment une sorte de vaste arborescence. Les signaux envoyés au neurone sont captés par les dendrites. Leur taille est de quelques dizaines de microns de longueur.

L'axone :

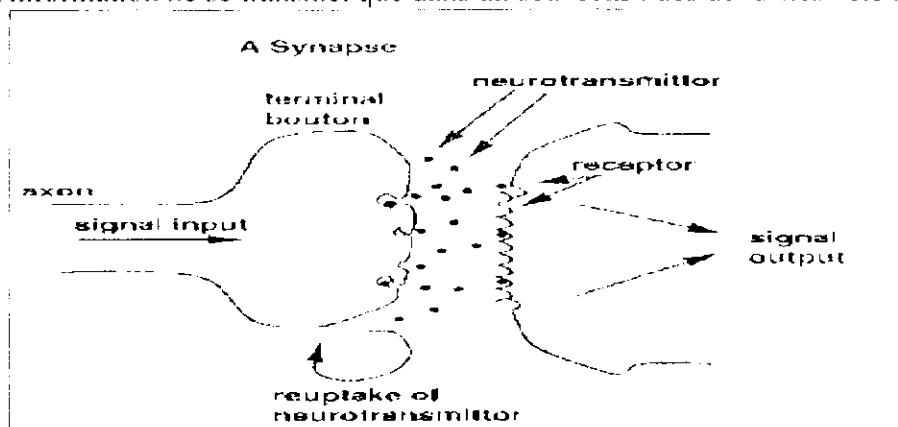
C'est le long de l'axone que les signaux partent du neurone. Contrairement aux dendrites qui se ramifient autour du neurone, l'axone est plus long et se ramifie à son extrémité ou il se connecte aux dendrites des autres neurones. Sa taille peut varier entre quelques millimètres à plusieurs mètres.

Synapse

Une synapse est une jonction entre deux neurones, et généralement entre l'axone d'un neurone et une dendrite d'un autre neurone (mais il existe aussi des synapses axo-axonaux par exemple).

**Fonctionnement**

D'un point de vue fonctionnel, il faut considérer le neurone comme une entité polarisée, c'est-à-dire que l'information ne se transmet que dans un seul sens : des dendrites vers l'axone.



**Fig. 2: schéma d'une synapse**

Le neurone va donc recevoir des informations, venant d'autres neurones, grâce à ses dendrites. Il va ensuite y avoir sommation, au niveau du corps cellulaire, de toutes ces informations et via un potentiel d'action (un signal électrique). Le résultat de l'analyse va transiter le long de l'axone jusqu'aux terminaisons synaptiques. A cet endroit, lors de l'arrivée du signal, des vésicules synaptiques vont venir fusionner avec la membrane cellulaire, ce qui va permettre la libération des neurotransmetteurs (médiateurs chimiques) dans la fente synaptique. Le signal électrique ne pouvant pas passer la synapse (dans le cas d'une synapse chimique), les neurotransmetteurs permettent donc le passage des informations, d'un neurone à un autre.

Les neurotransmetteurs excitent (neurotransmetteurs excitateurs) ou inhibent (neurotransmetteurs inhibiteurs) le neurone suivant et peuvent ainsi générer ou interdire la propagation d'un nouvel influx nerveux.

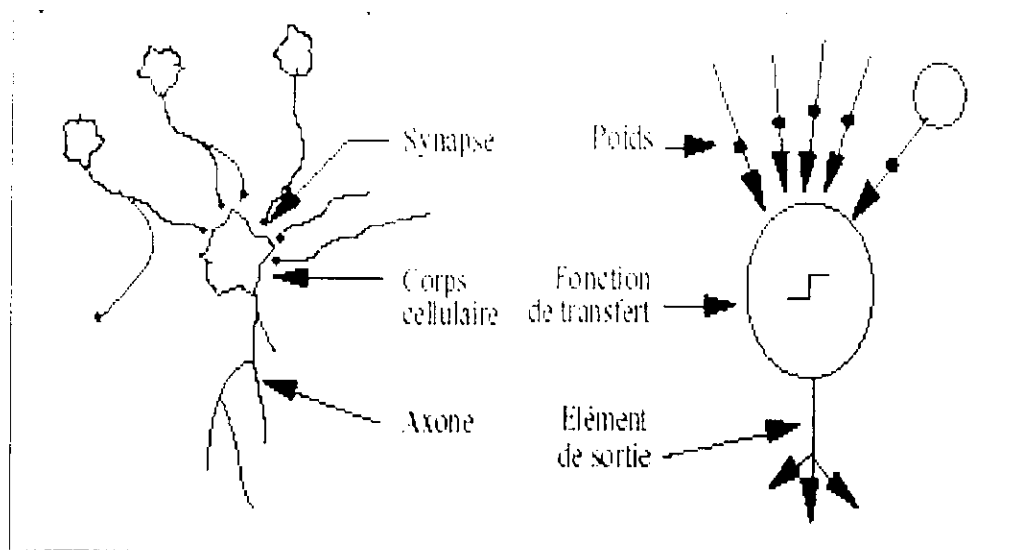
En effet, au niveau post-synaptique, sur la membrane dendritique, se trouvent des récepteurs pour les neurotransmetteurs. Suivant le type de neurotransmetteur et le type des récepteurs, l'excitabilité du neurone suivant va augmenter ou diminuer, ce qui fera se propager ou non l'information.

Les synapses possèdent une sorte de «mémoire» qui leur permet d'ajuster leur fonctionnement. En fonction de leur «histoire», c'est-à-dire de leur activation répétée ou non entre deux neurones, les connexions synaptiques vont donc se modifier. Ainsi, la synapse va faciliter ou non le passage des influx nerveux. Cette plasticité est à l'origine des mécanismes d'apprentissage.

**4) Neurone formel ou modèle mathématique [11]**

Le premier neurone formel est apparu en 1943. On le doit à Mac Culloch et Pitts. Le neurone formel est une modélisation mathématique qui reprend les principes de fonctionnement du neurone biologique, en particulier la sommation des entrées. Sachant qu'au niveau biologique, les synapses n'ont pas toutes la même «valeur» (les connexions entre les neurones étant plus ou moins fortes), les auteurs ont donc créé un algorithme qui pondère la somme de ses entrées par des poids synaptiques (coefficients de pondération).

La figure 2 montre la structure d'un neurone artificiel. Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones amont. A chacune de ces entrées est associée un poids  $w$  abréviation de weight (poids en anglais) représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones avals. A chaque connexion est associée un poids.

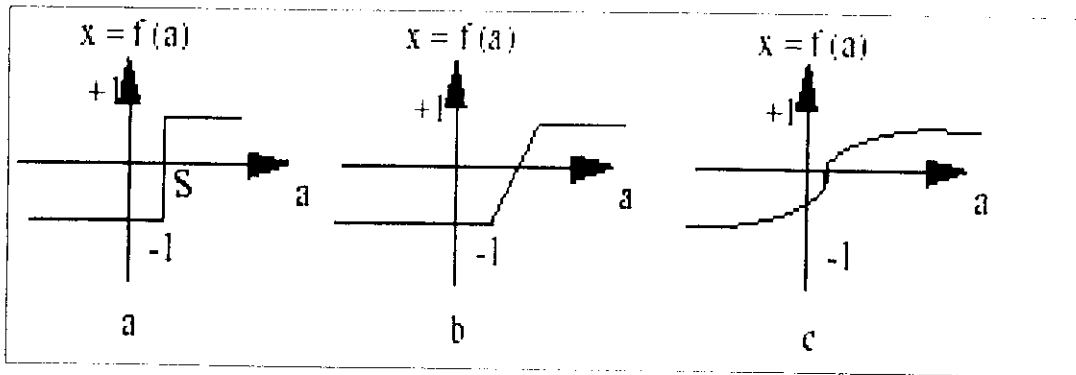


**Fig. 3: analogie neurone biologique neurones artificiel**

On distingue deux phases. La première est habituellement le calcul de la somme pondérée des entrées (a) selon l'expression suivante :

$$a = \sum (w_i \cdot c_i) \dots \dots \dots (1)$$

A partir de cette valeur, une fonction de transfert calcule la valeur de l'état du neurone. C'est cette valeur qui sera transmise aux neurones avals. Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert.



**Fig. 4: différentes Fonction activation**

Dans sa première version, le neurone formel était donc implémenté avec une fonction à seuil (a), mais de nombreuses versions existent. Ainsi le neurone de McCulloch et Pitts a été généralisé de différentes manières, en choisissant d'autres fonctions d'activations, comme les fonctions linéaires par morceaux (b), des sigmoïdes (c) par exemples.

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 extérieures, 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 5. L'information est ainsi transmise de manière unidirectionnelle. 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  $i$ .

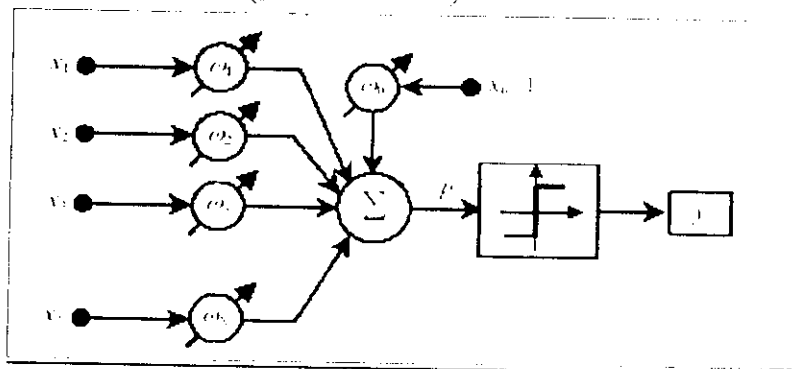
#  $f_i$  : la fonction d'activation associée au neurone  $i$ .

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

#  $W_{i0}$  : le 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:

$$S_i = f_i \left( \sum_{j=1}^p W_{ij} S_j - W_{i0} \right) \dots \dots \dots (2)$$



**Fig. 5 schéma d'un neurone formel**

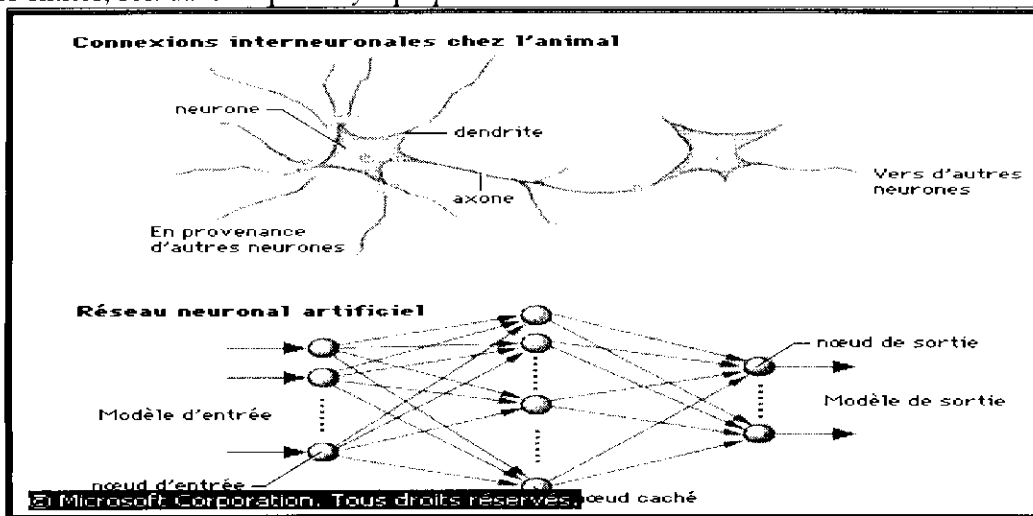
5) Les réseaux de neurones multicouches : [10 et 11]

**a) Présentation**

Un RNA (Réseau de Neurones Artificiels) est un ensemble de neurones formels (d'unités de calcul simples, de noeuds processeurs) associés en couches (ou sous-groupes) et fonctionnant en parallèle.

Dans un réseau, chaque sous-groupe fait un traitement indépendant des autres et transmet le résultat de son analyse au sous-groupe suivant. L'information donnée au réseau va donc se propager couche par couche, de la couche d'entrée à la couche de sortie, en passant soit par aucune, une ou plusieurs couches intermédiaires (dites couches cachées). Il est à noter qu'en fonction de l'algorithme d'apprentissage, il est aussi possible d'avoir une propagation de l'information à reculons ("back propagation"). Habituellement (excepté pour les couches d'entrée et de sortie), chaque neurone dans une couche est connecté à tous les neurones de la couche précédente et de la couche suivante.

Les RNA ont la capacité de stocker de la connaissance empirique et de la rendre disponible à l'usage. Les habiletés de traitement (et donc la connaissance) du réseau vont être stockées dans les poids synaptiques, obtenus par des processus d'adaptation ou d'apprentissage. En ce sens, les RNA ressemblent donc au cerveau car non seulement, la connaissance est acquise au travers d'un apprentissage mais de plus, cette connaissance est stockée dans les connexions entre les entités, soit dans les poids synaptiques.



**Fig. 6: architecture d'un réseau de neurones artificiels**

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

# la fonction identité :  $f(x) = x$ .....(3)

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

# la fonction sigmoïde :

$$f(x) = A \cdot \frac{\exp(K \cdot x) - 1}{\exp(K \cdot x) + 1} = A \cdot \tanh\left(\frac{K}{2} \cdot x\right) \dots\dots\dots(4)$$

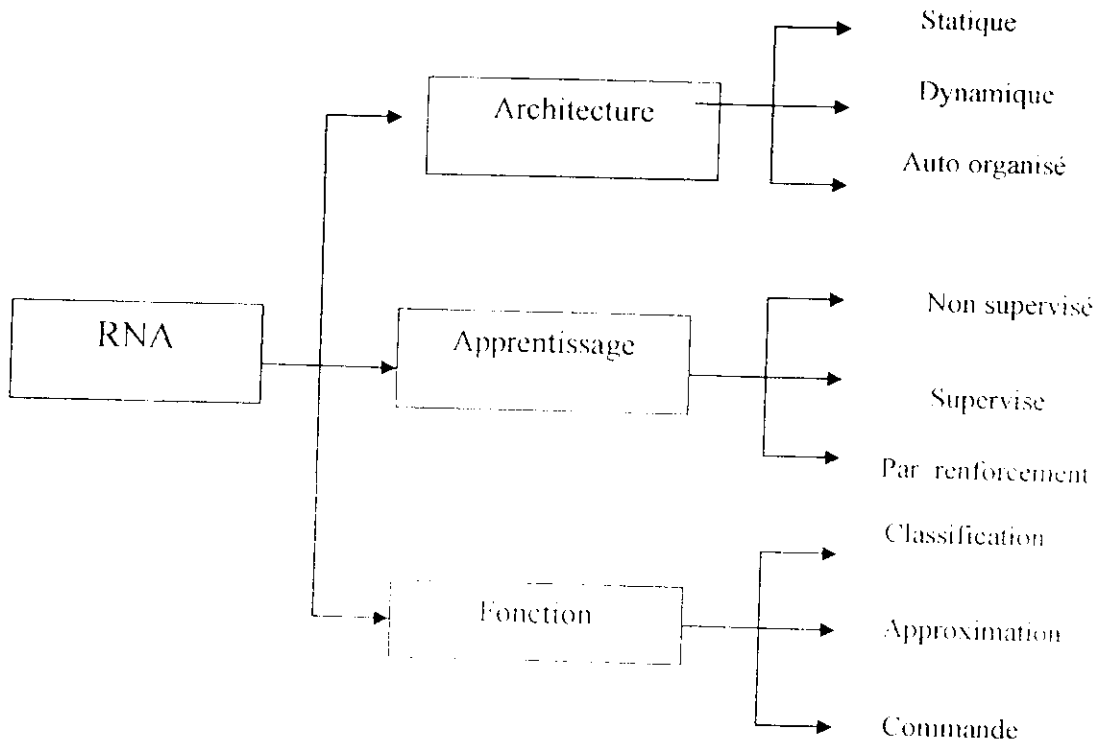
Le paramètre A règle la valeur de saturation, le paramètre K sert à réguler la valeur de la pente en tous points hors saturation.

penne en tous points hors saturation.

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 en  $+\infty$ . Elles permettent d'éviter que ne se propagent des valeurs trop grandes dans le réseau. La fonction d'activation peut également être une gaussienne, un échelon, etc....

**b) Classification des réseaux de neurones :**

La classification des réseaux de neurones se fait suivant trois critères : l'architecture, l'apprentissage et la fonction pour laquelle le réseau a été conçu.



**Fig. 7 Classification des réseaux de neurones**

✓ **L'architecture :**

On distingue deux grandes catégories de RNA :

**1) Les réseaux « Feed-Forward » (Réseaux statiques)**

Appelés aussi "réseaux de type Perceptron", ce sont des réseaux dans lesquels l'information se propage de couche en couche sans retour en arrière possible.

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 n'y a pas de retour (feed-back) d'information.

Le perceptron monocouche :

Historiquement le premier RNA est le Perceptron de Rosenblatt. C'est un réseau simple, puisque il ne se compose que d'une couche d'entrée et d'une couche de sortie. Il est calqué, à la base, sur le système visuel et de ce fait a été conçu dans un but premier de reconnaissance des



formes. Cependant, il peut aussi être utilisé pour faire de la classification et pour résoudre des opérations logiques simples (telle "ET" ou "OU"). Sa principale limite est qu'il ne peut résoudre que des problèmes linéairement séparables. Il suit généralement un apprentissage supervisé selon la règle de correction de l'erreur ou selon la règle de Hebb.

Le perceptron multicouches (PMC) :

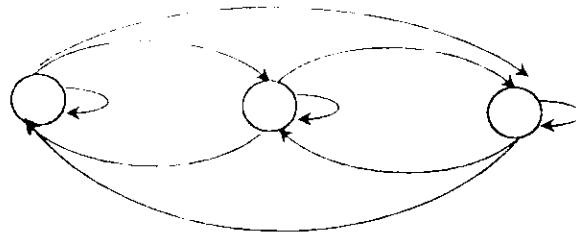
C'est une extension du précédent, avec une ou plusieurs couches cachées entre l'entrée et la sortie. Chaque neurone dans une couche est connecté à tous les neurones de la couche précédente et de la couche suivante (excepté pour les couches d'entrée et de sortie) et il n'y a pas de connexions entre les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

Les réseaux à fonction radiale :

Ce sont les réseaux que l'on nomme aussi RBF ("Radial Basic Functions"). L'architecture est la même que pour les PMC cependant, les fonctions de base utilisées ici sont des fonctions Gaussiennes. Les RBF seront donc employés dans les mêmes types de problèmes que les PMC à savoir, en classification et en approximation de fonctions particulièrement. L'apprentissage le plus utilisé pour les RBF est le mode hybride et les règles sont soit, la règle de correction de l'erreur soit, la règle d'apprentissage par compétition.

**2) Les réseaux « FEED-BACK »**

Appelés aussi "réseaux récurrents". 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, ce sont des réseaux dans lesquels il y a retour en arrière de l'information entre les neurones qui rend le système dynamique.



**Fig. 8 : RNA dynamique**

**▪Les cartes auto-organisatrices de Kohonen :**

Ce sont des réseaux à apprentissage non-supervisé qui établissent une carte discrète, ordonnée topologiquement, en fonction de patterns d'entrée. Le réseau forme ainsi une sorte de treillis dont chaque noeud est un neurone associé à un vecteur de poids. La correspondance entre chaque vecteur de poids est calculée pour chaque entrée. Par la suite, le vecteur de poids ayant la meilleure corrélation, ainsi que certains de ses voisins, vont être modifiés afin d'augmenter encore cette corrélation.

**▪Les réseaux de Hopfield :**

Les réseaux de Hopfield sont des réseaux récurrents et entièrement connectés. Dans ce type de réseau, chaque neurone est connecté à chaque autre neurone et il n'y a aucune différenciation entre les neurones d'entrée et de sortie. Ils fonctionnent comme une mémoire associative non-linéaire et sont capables de trouver un objet stocké en fonction de représentations partielles ou bruitées. L'application principale des réseaux de Hopfield est l'entrepôt de

connaissances mais aussi la résolution de problèmes d'optimisation. Le mode d'apprentissage utilisé ici est le mode non-supervisé.

### ▪ Les ART :

Les réseaux ART "Adaptative Résonance Théorie" sont des réseaux à apprentissage par compétition. Le problème majeur qui se pose dans ce type de réseaux est le dilemme « stabilité/plasticité ». En effet, dans un apprentissage par compétition, rien ne garantit que les catégories formées vont rester stables. La seule possibilité, pour assurer la stabilité, serait que le coefficient d'apprentissage tende vers zéro, mais le réseau perdrait alors sa plasticité. Les ART ont été conçus spécifiquement pour contourner ce problème. Dans ce genre de réseau, les vecteurs de poids ne seront adaptés que si l'entrée fournie est suffisamment proche, d'un prototype déjà connu par le réseau. On parlera alors de résonance. À l'inverse, si l'entrée s'éloigne trop des prototypes existants, une nouvelle catégorie va alors se créer, avec pour prototype, l'entrée qui a engendré sa création. Il est à noter qu'il existe deux principaux types de réseaux ART : les ART-1 pour des entrées binaires et les ART-2 pour des entrées continues. Le mode d'apprentissage des ART peut être supervisé ou non.

### ✓ L'Apprentissage :

Pour un RNA, l'apprentissage peut être considéré comme le problème de la mise à jour des poids des connexions au sein du réseau, afin de réussir la tâche qui lui est demandée. L'apprentissage est la caractéristique principale des RNA et il peut se faire de différentes manières et selon différentes règles.

#### 1) Le mode supervisé :

Dans ce type d'apprentissage, le réseau s'adapte par comparaison entre le résultat qu'il a calculé, en fonction des entrées fournies, et la réponse attendue en sortie. Ainsi, le réseau va se modifier jusqu'à ce qu'il trouve la bonne sortie, c'est-à-dire celle attendue, correspondant à une entrée donnée.

#### 2) Le renforcement :

Le renforcement est en fait une sorte d'apprentissage supervisé et certains auteurs le classe d'ailleurs, dans la catégorie des modes supervisés. Dans cette approche le réseau doit apprendre la corrélation entrée/sortie via une estimation de son erreur, c'est-à-dire du rapport échec/succès. Le réseau va donc tendre à maximiser un index de performance qui lui est fourni, appelé signal de renforcement. Le système étant capable ici, de savoir si la réponse qu'il fournit est correcte ou non, mais il ne connaît pas la bonne réponse.

#### 3) Le mode non-supervisé (ou auto-organisationnel) :

Dans ce cas, l'apprentissage est basé sur des probabilités. Le réseau va se modifier en fonction des régularités statistiques de l'entrée et établir des catégories, en attribuant et en optimisant une valeur de qualité, aux catégories reconnues.

#### 4) Le mode hybride :

Le mode hybride reprend en fait les deux autres approches, puisque une partie des poids va être déterminée par apprentissage supervisé et l'autre partie par apprentissage non-supervisé.

### ✓ les Règles d'Apprentissage :

#### 1) Règle de correction d'erreurs :

Cette règle s'inscrit dans le paradigme d'apprentissage supervisé, c'est -à-dire dans le cas où l'on fournit au réseau une entrée et la sortie correspondante. Si on considère y comme étant la sortie calculée par le réseau, et d la sortie désirée, le principe de cette règle est d'utiliser l'erreur (d-y), afin de modifier les connexions et de diminuer ainsi l'erreur globale du système. Le réseau va donc s'adapter jusqu'à ce que y soit égal à d.

Ce Principe est notamment utilisé dans le modèle du perceptron simple.

**2) Apprentissage de Boltzmann :**

Les réseaux de Boltzmann sont des réseaux symétriques récurrents. Ils possèdent deux sous-groupes de cellules, le premier étant relié à l'environnement (cellules dites visibles) et le second ne l'étant pas (cellules dites cachées). Cette règle d'apprentissage est de type stochastique (c'est à dire qui relève partiellement du hasard) et elle consiste à ajuster les poids des connexions, de telle sorte que l'état des cellules visibles satisfasse une distribution probabiliste souhaitée.

**3) Règles de Hebb :**

Basée sur des données biologiques, modélise le fait que si des neurones, de part et d'autre d'une synapse, sont activés de façon synchrone et répétée, la force de la connexion synaptique va aller dans le sens croissant. Il est à noter ici que l'apprentissage est localisé, c'est-à-dire que la modification d'un poids synaptique  $w_{ij}$  ne dépend que de l'activation d'un neurone  $i$  et d'un autre neurone  $j$ .

**4) Règle d'apprentissage par compétitions :**

La particularité de cette règle, c'est qu'ici l'apprentissage ne concerne qu'un seul neurone. Le principe de cet apprentissage est de regrouper les données en catégories. Les entrées similaires vont donc être rangés dans une même classe, en se basant sur les corrélations des données, et seront représentés par un seul neurone.

Dans un réseau à compétition simple, chaque neurone de sortie est connecté aux neurones de la couche d'entrée, aux autres cellules de la couche de sortie (connexions inhibitrices) et à elle-même (connexion excitatrice). La sortie va donc dépendre de la compétition entre les connexions inhibitrices et excitatrices.

modèle	Règle d'apprentissage	Architecture	Algorithme	Tâches
Supervisé	Correction d'erreur	Perceptron Simple ou Multi-Couches	Perceptron Rétro-Propagation, Adaline, Madaline	Classification, Approximation de fonctions Prédiction, Contrôle
	Boltzmann	Récurrente	Apprentissage de Boltzmann	Classification
	Hebb	Multi-Couches non bouclés	Analyse de discriminants linéaires	Analyse de données Classifications
	par compétition	à compétition	LVQ	Catégorisation au sein d'une classe Compression de données
		ART	ARTMap	Classification Catégorisation au sein d'une classe
Non supervisé	Correction d'erreur	Multi-couches non bouclé	Projection de Sammon	Analyse de données
	Hebb	Non bouclé ou à compétition	analyse en composantes principales	Analyse de données compression de données
	par compétition	à compétition	VQ	Catégorisation Compression de données
		Cartes de kohonen	SOM	Catégorisation Analyse de données
Hybride		ART	ART-1, ART-2	Catégorisation
	Correction d'erreur et par compétition	RBF	RBF	Classification Approximation de fonctions Prédiction, Contrôle

**Tableau 1 : récapitulatif des différents types réseaux de neurones cités**

**c) Le Perceptron Multicouches (PMC) [10] :**

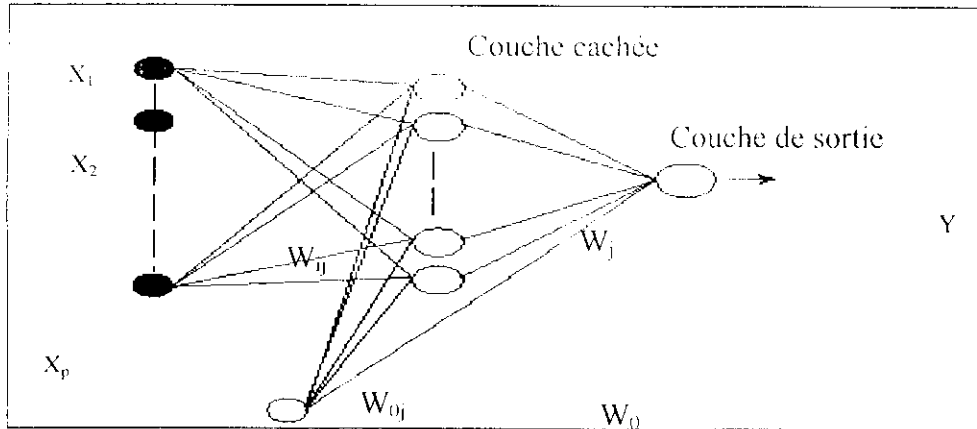
Le PMC a une structure bien particulière : ses neurones sont organisés en couches successives comme présenté sur la figure 9.

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'à un 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 les 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 9, 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  $Y$ . Ce modèle réalise une application de  $\mathcal{R}^p$  dans  $\mathcal{R}$ . L'architecture du réseau, déterminée par le schéma de connexion des neurones, fige ainsi une composition de fonction élémentaire et représente une famille  $(G, W)$  de fonctions non linéaires et dont les paramètres sont les poids de connexions du réseau  $W$ .



**Fig 9.** Architecture d'un PMC à une couche cachée (n neurones cachés sigmoïdes) avec p neurones d'entrée et (q=1) neurone de sortie linéaire.

La sortie du réseau aura une expression de la forme suivante dépendant du nombre de couches le composant :

$$Y = \sum_{i=1}^n W_{i0} \cdot f_i \left( \sum_{j=1}^p W_{ij} \cdot X_j + W_{i0} \right) + W_{00} \dots \dots \dots (5)$$

**Approximation de fonction**

La détermination d'une fonction neuronale à partir d'observations se ramène au problème classique de la détermination des paramètres du modèle (les poids de connexions) par rétropropagation de l'erreur. Pour construire cette fonction, deux choses sont indispensables : un

ensemble de fonctions candidates (définie par l'architecture du réseau), parmi lesquelles on va rechercher celle qui nous intéresse, et un critère d'apprentissage permettant d'en choisir une. Le but de l'apprentissage est donc de déterminer un modèle qui va généraliser un processus décrit par un nombre fini  $N$  de comportements qui composent l'ensemble d'apprentissage.

**Apprentissage**

Approximer une fonction  $T$  de  $\mathfrak{R}^p$  dans  $\mathfrak{R}^q$  à l'aide d'un PMC revient à utiliser une fonction  $g$  choisie au sein d'une famille  $G(\cdot, W)$  associée à une architecture de réseau dont les couches d'entrée et de sortie comportent respectivement  $p$  et  $q$  neurones.

$$\begin{array}{ccc} A \in \mathfrak{R}^p & \longrightarrow & B \in \mathfrak{R}^q \\ x & \longrightarrow & y = G(x, W) \end{array}$$

La famille  $G(\cdot, W)$  est donc un système paramétré qui associe un espace de sortie  $B \in \mathfrak{R}^q$  à un espace d'entrée  $A \in \mathfrak{R}^p$ . Approximer  $T$  à partir de  $G(\cdot, W)$  revient ainsi à rechercher la fonction  $g \in G(\cdot, W)$  telle que

$$g(x) = G(x, W^*) \approx T(x) \quad \forall x \in A$$

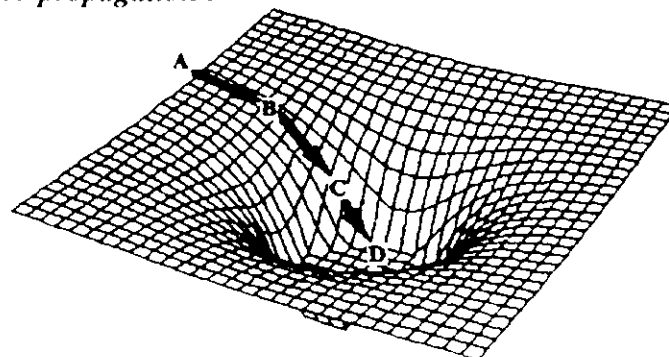
où  $W^*$  représente l'ensemble des poids du réseau.

Le nombre de couches cachées et le nombre de neurones des couches cachées sont à déterminer de manière optimale suivant la difficulté de la fonction à approximer et l'ensemble d'apprentissage dont on dispose. Le choix de l'architecture du réseau définit de façon implicite la famille de fonction  $G(\cdot, W)$ .

L'étape suivante est la détermination des poids optimaux  $W^*$  et donc de la fonction  $g$  dans  $G(\cdot, W)$  qui approche au mieux la fonction  $T$  étudiée. Ces poids sont déterminés par un algorithme dit d'apprentissage qui correspond à la phase d'estimation des paramètres du modèle. Cette détermination se fait à partir de  $N$  exemples  $(x_k, y_k)$ ,  $k \in \{1, N\}$  qui décrivent la fonction recherchée. La fonction  $g(x)$  obtenue en fin d'apprentissage est continue, elle permet donc d'interpoler la fonction entre les  $N$  points utilisés durant l'apprentissage.

L'algorithme d'adaptation des poids est connu sous le nom d'algorithme de rétropropagation du gradient (Rumelhart *et al.*, 1986 ; Le Cun *et al.*, 1985). La précision de l'approximation va dépendre de l'ensemble d'apprentissage et donc de la manière dont le problème est décrit par les données.

**d) Algorithme de rétro propagation :**



**Fig. 10** la descente de gradient trouve, à partir d'une solution initiale (A) des solutions successivement meilleures, en effectuant des sauts (B,C) dans la direction opposée au gradient de la fonction E, la solution (D) est minimum de E

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, hunton et William 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.  $\mu$  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 et de la couche de sortie

par :

*Première couche cachée :*

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

*deuxième couche cachée :*

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

*etc .*

*couche de sortie :*

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

4. Modifier les poids des connexions récursivement par :

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

avec :

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

*pour la couche de sortie*

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

*pour la couche cachée numéro k*

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

**e) Procédure de développement d'un réseau de neurones.**

Le cycle classique de développement peut être séparé en sept étapes :

1. la collecte des données,
2. l'analyse des données,
3. la séparation des bases de données,
4. le choix d'un réseau de neurones,
6. l'apprentissage,
7. la validation.

### **Collecte des données :**

L'objectif de cette étape est de recueillir des données, à la fois pour développer le réseau de neurones et pour le tester. Dans le cas d'applications sur des données réelles, l'objectif est de rassembler un nombre de données suffisant pour constituer une base représentative des données susceptibles d'intervenir en phase d'utilisation du système neuronal.

La fonction utilisée résulte d'un calcul statistique où le modèle établi n'a de validité que dans le domaine où on l'a ajusté. En d'autres termes, la présentation de données très différentes de celles qui ont été utilisées lors de l'apprentissage peut entraîner une sortie totalement imprévisible.

### **Analyse des données**

Il est souvent préférable d'effectuer une analyse des données de manière à déterminer les caractéristiques discriminantes pour détecter ou différencier ces données. Ces caractéristiques constituent l'entrée du réseau de neurones. Notons que cette étude n'est pas spécifique aux réseaux de neurones, quelque soit la méthode de détection ou de classification utilisée, il est généralement nécessaire de présenter des caractéristiques représentatives.

Cette détermination des caractéristiques a des conséquences à la fois sur la taille du réseau (et donc le temps de simulation), sur les performances du système (pouvoir de séparation, taux de détection), et sur le temps de développement (temps d'apprentissage).

Dans le cas d'un problème de classification, il appartient à l'expérimentateur de déterminer le nombre de classes auxquelles ses données appartiennent et de déterminer pour chaque donnée la classe à laquelle elle appartient.

### **Séparation des bases de données**

Afin de développer une application à base de réseaux de neurones, il est nécessaire de disposer de deux bases de données : une base pour effectuer l'apprentissage et une autre pour tester le réseau obtenu et déterminer ses performances. Il n'y a pas de règle pour déterminer ce partage de manière quantitative. Il résulte souvent d'un compromis tenant compte du nombre de données dont on dispose et du temps imparti pour effectuer l'apprentissage. Chaque base doit cependant satisfaire aux contraintes de représentativité de chaque classe de données et doit généralement refléter la distribution réelle, c'est à dire la probabilité d'occurrence des diverses classes.

#### La base d'apprentissage

La base d'apprentissage est une base de données contenant des couples d'entrées-sorties servant à déterminer les valeurs des paramètres d'un réseau de neurones lors de la phase d'apprentissage supervisé. Le PMC est un interpolateur imparfait des observations contenues dans cette base, puisqu'il commet une erreur aux points d'observations. Or, la base d'exemples n'échantillonne jamais l'espace des données de manière parfaite. Il est souhaitable, pour bien contraindre un PMC, que le nombre de contraintes (nombre d'exemples dans la base d'apprentissage) imposées soit très supérieur au nombre de degrés de liberté du réseau (nombre de poids). Le nombre minimum souhaitable d'exemples est lié à la complexité de la fonction à simuler et à l'architecture du réseau choisie.

#### La base de test

Du fait des capacités d'approximation universelle des modèles neuronaux, l'apprentissage peut mener à un sur ajustement de la fonction, on parle aussi de sur-apprentissage. On observe ce genre de problème lorsque l'on utilise un modèle comportant un grand nombre de paramètres pour modéliser une fonction de trop faible complexité. Pour mettre en évidence ce problème on utilise une base de test, autre échantillonnage de l'espace des données. Lors de l'étape d'estimation des paramètres, le phénomène de sur apprentissage se

traduit par une croissance de l'erreur sur les données de la base de test. Enfin, le réseau sélectionné est alors celui qui minimise l'erreur commise sur la base

### **Choix d'un réseau de neurones**

Il existe un grand nombre de types de réseaux de neurones, avec pour chacun des avantages et des inconvénients. Le choix d'un réseau peut dépendre :

- De la tâche à effectuer (classification, association, contrôle de processus, séparation aveugle de sources...),

- De la nature des données (si dans le cas, des données présentant des variations au cours du temps)

- D'éventuelles contraintes d'utilisation temps-réel (certains types de réseaux de neurones, tels que la 'machine de Boltzmann' [AZENCOTT et al., 1992], nécessitant des tirages aléatoires et un nombre de cycles de calculs indéfini avant stabilisation du résultat en sortie, présentent plus de contraintes que d'autres réseaux pour une utilisation temps-réel),

- Des différents types de réseaux de neurones disponibles dans le logiciel de simulation que l'on compte utiliser (à moins de le programmer).

Ce choix est aussi fonction de la maîtrise ou de la connaissance que l'on a de certains réseaux, ou encore du temps dont on dispose pour tester une architecture prétendue plus performante.

### **Apprentissage du réseau de neurones**

Tous les modèles de réseaux de neurones requièrent un apprentissage. Plusieurs types d'apprentissages peuvent être adaptés à un même type de réseau de neurones. Les critères de choix sont souvent la rapidité de convergence ou les performances de généralisation.

Le critère d'arrêt de l'apprentissage est souvent calculé à partir d'une fonction de coût, caractérisant l'écart entre les valeurs de sortie obtenues et les valeurs de références (réponses souhaitées pour chaque exemple présenté). La technique de validation croisée, qui sera précisée par la suite, permet un arrêt adéquat de l'apprentissage pour obtenir de bonnes performances de généralisation. Certains algorithmes d'apprentissage se chargent de la détermination des paramètres architecturaux du réseau de neurones. Si on n'utilise pas ces techniques, l'obtention des paramètres architecturaux optimaux se fera par comparaison des performances obtenues pour différentes architectures de réseaux de neurones.

Des contraintes dues à l'éventuelle réalisation matérielle du réseau peuvent être introduites lors de l'apprentissage.

### **Validation**

Une fois le réseau de neurones entraîné (après apprentissage), il est nécessaire de le tester sur une base de données différentes de celles utilisées pour l'apprentissage ou la validation croisée. Ce test permet à la fois d'apprécier les performances du système neuronal et de détecter le type de données qui pose problème. Si les performances ne sont pas satisfaisantes, il faudra soit modifier l'architecture du réseau, soit modifier la base d'apprentissage (caractéristiques discriminantes ou représentativité des données de chaque classe).

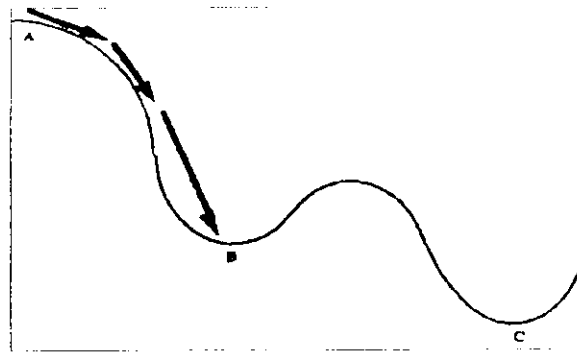
### **Les problèmes d'apprentissage**

Les problèmes rencontrés dans l'apprentissage des réseaux de neurones se résument comme suit :

#### **• Minima locaux :**

Problème rencontré dans les la majorité des apprentissages supervisés procédant par descente du gradient, il peut conduire à une solution sous optimale.





**Fig 11 : problème des minima locaux**

• **Mauvais choix des paramètres :**

les paramètres architecturaux décident du comportement des réseaux de neurones, de ce fait un mauvais choix de valeurs peut compromettre l'apprentissage, tel que le nombre de neurones cachés dans le réseau, cette valeur est particulièrement importante parce qu'elle détermine la capacité de calcul du réseau ou bien le pas d'apprentissage

• **Mauvais échantillonnage :**

Le corpus d'apprentissage n'est pas représentatif ce qui veut dire que le corpus ne reflète pas toujours adéquatement la tâche à accomplir, soit par ce que il est petit et le réseaux généralise mal, soit il se comporte incorrectement quand il est mis en situation réelle .

• **Mauvais codage.**

La technique de codage peut rendre obscure l'information nécessaire à la résolution du problème.

• **Sur apprentissage**

Quand l'apprentissage d'un réseau est prolongé, son choix de poids reflète trop pres les particularités du corpus d'apprentissage, au détriment de la tâche réelle

• **Oubli et interférence :**

Cela ce produit lorsque le corpus d'apprentissage est grand, ou que le comportement a apprendre comprend plusieurs cas exceptionnelles. Ces derniers sont alors difficiles à apprendre et peuvent nécessiter un traitement particulier

**f) Applications :**

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, et 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...

### Avantages

- Quelques propriétés spécifiques, à la fois sur le plan de la mise en oeuvre informatique et sur le plan des aptitudes.
  - Parallélisme : le principe et le potentiel sont clairement affichés. De nouveaux formalismes et les bénéfices à en tirer restent à étudier...
  - Capacité d'adaptation : apprentissage extrapolable et potentiel d'auto-organisation.
  - Mémoire distribuée. : données "bruitées", données "diffuses", informations plus facilement "adressables".
  - Capacité de généralisation : spectaculaire notamment en reconnaissance de "formes".
  - Simplicité de mise en oeuvre pour de nombreux problèmes.
  - Aspect "Boîte noire" risqué mais séduisant.
  - En modélisation : gains souvent modérés par rapport aux méthodes classiques, mais parfois suffisants pour justifier la démarche sur un plan économique.
  - Intérêt général dans le cas de problèmes pour lesquels on connaît peu d'informations a priori.
    - Intérêt probablement croissant à terme, avec l'évolution des travaux théoriques et appliqués qui feront progresser les performances, la compréhension, les capacités, et la facilité d'utilisation des réseaux de neurones domaines par domaines.

### Limites

- Manque de formalisme (ou dans certains cas, déficit d'informations sur les avancées théoriques, ce qui revient au même d'un point de vue pratique). Le "savoir" et la compétence sont plus liés à l'expérience qu'à la maîtrise des formalismes théoriques. La pluridisciplinarité et la complexité des systèmes mis en jeu dans les réseaux neuro-mimétiques ne favorisent peut-être pas l'émergence de formalismes universels et productifs...
- Manque de recul. Et par conséquent, manque d'expérience, ce qui est contraignant compte tenu du point précédent.
- Aspect "Boîte noire" séduisant car spectaculaire, mais risqué et parfois mal perçu (méfiance de la part des utilisateurs)...
- Importance du travail préliminaire de préparation des données, notamment : choix des variables pertinentes, normalisation, élimination de données aberrantes, organisation du protocole d'apprentissage et de validation...
- L'échec des méthodes traditionnelles sur certains problèmes de modélisation provient souvent du manque d'informations contenues dans les données. Ce ne sont pas les réseaux de neurones qui amélioreront les performances dans ce cas.

### Conclusion

Les réseaux de neurones sont depuis quelque temps un point de focalisation des médias, du public et des scientifiques. Les travaux menés dans le domaine des sciences de la cognition artificielle ont été marqués par quelques apports non négligeables.

Chapitre

III

**Introduction :**

La caractérisation des pétroles bruts et des fractions pétrolières vise principalement à déterminer leur composition et leurs propriétés physiques, indispensables pour la mise en œuvre de ces produits en vue de leur valorisation.

Notre but est de proposer des méthodes permettant le calcul des propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures appartenant aux familles chimiques les plus importantes.

Nous avons classé les différentes propriétés étudiées en six catégories :

**1. Propriétés de transport**

Leur connaissance est nécessaire dans les calculs de simulation de procédés et de dimensionnement des équipements faisant intervenir des écoulements ou le stockage des fluides, ou encore dans le calcul des réacteurs chimiques.

Les propriétés de transport faisant l'objet de cette étude sont :

- Volume molaire à 20°C
- Tension superficielle à 25°C
- Viscosité dynamique

▪ **Volume molaire à 20°C :**

Définition

$$V_m = M / d \dots\dots\dots(6)$$

V<sub>m</sub> : volume molaire en cm<sup>3</sup>/mole

M : masse molaire en g/mole et d densité à la température de mesure T

Corrélation de Riazi- Daubert

cette corrélation est valable pour 37.8°C < T<sub>eb</sub> < 450°C.

$$V_m = 7.6211 \times 10^{-5} \times T_b^{2.1262} \text{ Spgr}^{-1.8688} \dots\dots\dots(7)$$

V<sub>m</sub> : volume molaire en cm<sup>3</sup>/g.mole.

T<sub>eb</sub> : température d'ébullition en R°.

SpGr : specific-gravity.

Corrélation de Chitour et coll.

$$V_m = a + b.N \dots\dots\dots(8)$$

V<sub>m</sub> : volume molaire en (10<sup>-3</sup>m<sup>3</sup>/K mole).

N : nombre d'atome de carbone équivalent.

A et b sont des constantes.

Famille	a	b
Paraffine	31,61095	16,34356
Naphtène	11,105721	16,43677
Aromatique	-9,3967414	16,512202

**Tension superficielle**

Corrélation de Chitour et coll.

$$T_s = a + \frac{b}{1 + (N/c)^d} \dots\dots\dots(9)$$

Ts : tension superficielle en dyn/cm.  
 N : nombre d'atome de carbone.  
 A, b, c et d sont des constantes.

Famille	a	b	c	d
Paraffine	-15,489487	49,980704	3,1254045	-1,0720868
Naphtène	22,298482	9,014923	10,633427	-2,1806274
Aromatique	27,694314	2,7062063	9,22385513	-3,75313335

Corrélation de Boundi

$$T_s = 673.7 / Kuop \times (1-Tr)^{1.232} \dots\dots\dots(10)$$

Corrélation de Brock et Bird

$$T_s = P_c^{2/31} T_c T_c^{1/3} (0.1207(1+(tbrxLnPc)/(1-Tbr))-0.281(1-Tr)^{11/9} \dots\dots\dots(11)$$

**Viscosité dynamique**

Corrélation de Chitour et coll.

$$\mu = a+b.N+c.N^2+ d.N^3 \dots\dots\dots(12)$$

N : nombre d'atome de carbone.  
 a, b, c et d sont des constantes.

Famille	a	b	c	d
Paraffine	0.1324844	-0.00237646	0.00160794	0.0004476344
Naphtène	1.7080095	-0.36948669	0.03008017	-4.0188134*10 <sup>-5</sup>
Aromatique	0.83514028	-0.15148439	0.012853782	0.00021028015

Corrélation de Bcg-Amin-Hussain

$$\begin{aligned} \mu &= A \times EXP(B / T) \\ A &= -0.0339 \times (API)^{0.188} + 0.241 \times (Teb / B) \dots\dots\dots (13) \\ B &= EXP(5.471 + 0.00342 \times Teb). \end{aligned}$$

μ : viscosité cinétique en cst.  
 Teb : température d'ébullition en Kelvin  
 API : densité de la substance en °API.

Corrélation de l'API

$$\log(\mu_{100^{\circ}f}) = -1.2926 + 9.461.10^{-3}.Kuop + \frac{3.0522.Kuop + 9.9538.10^{-2}.Kuop^2}{API + 113.74 - 10.261.KUop} \dots\dots\dots(14)$$

$$\log(\mu_{210^{\circ}f}) = -0.878 + \frac{3.0952.Kuop - 5.8946}{API + 121.12 - 10.725.Kuop} \dots\dots\dots(15)$$

Corrélation de Abott et Coll.

$$\text{Log } \mu = A(Kuop, API) + \frac{B(Kuop, API)}{API + c(Kuop)} \dots\dots\dots(16)$$

A,B et C sont des fonctions du Kuop et de la densité API

**2. Propriétés critiques**

La connaissance des paramètres critiques est nécessaire dans la plupart des opérations de production et de traitement des coupes d'hydrocarbures où la coexistence d'une phase gazeuse et d'une phase liquide est fréquente. Ils permettent de prévoir le comportement des fluides dans un large intervalle de températures et de pressions et de définir ainsi les conditions d'existence de leurs différentes phases. Par ailleurs, la connaissance des propriétés critiques permet, par le biais de la loi des états correspondants, de prédire les propriétés thermodynamiques et volumétriques des corps purs et des mélanges de corps purs. Cette classe de propriétés comprend les paramètres suivants :

- Température critique
- Pression critique
- Volume critique
- Facteur de compressibilité critique

**-Température critique**

Corrélation de Watranassiri et coll.

$$\text{Ln } Tc = -0.00093906 T_{mav} + 0.030905 \ln M + 1.11067 \ln T_{mav} + M (0.078154 Spgr^{1/2} - 0.061061 Spgr^{1/3} - 0.01694 Spgr) \dots\dots\dots(17)$$

Corrélation de Lee et Kcsler

$$Tc = 314.7 + 811 Spgr + (0.4244 + 0.1174 Spgr) T_{mav} + (0.4669 - 3.2623 Spgr).10^5 / T_{mav} \dots\dots\dots(16)$$

Corrélation de RIAZI –DAUBERT

$$Tpc = 24.2787 .T_{mav}^{0.58848} .spgr^{0.3596} \dots\dots\dots(18)$$

**- Pression critique**

Corrélation de Watranassiri et coll.

$$\ln p_c = 3.9543 + 0.70682(T_c/V_c)^{0.8} + 4.8400M/T_c + 0.15919 T_b / M \dots\dots\dots(19)$$

Corrélation de RIAZI –DAUBERT

$$P_{pc} = 3.12281 \cdot 10^9 \cdot T_{MAV}^{-2.3125} \cdot spgr^{2.3201} \dots\dots\dots(20)$$

Corrélation de PENN-STAT

$$P_c = 3.4824 \cdot 10^9 \cdot spgr^{2.4853} / T_{eb}^{2.3177} \dots\dots\dots(21)$$

T<sub>c</sub> : température critique en °F  
 P<sub>c</sub> : pression critique (psia).  
 T<sub>eb</sub> : température d'ébullition en R

**- Volume critique**

Corrélation de Watranassiri et coll.

$$\ln V_c = 80.4479 - 129.8083 Sp_g + 63.1750 SP_{gr}^2 - 13.1750 SP_{gr}^3 + 1.10108 \ln M + 42.1958 \ln SP_{gr} \dots\dots\dots(22)$$

Corrélation de RIAZI –DAUBERT

$$V_c = 7.5214 \cdot 10^5 \cdot T_{mav}^{0.286} \cdot spgr^{0.7666} \dots\dots\dots(23)$$

V<sub>c</sub> : volume critique en ft<sup>3</sup>/lb.  
 T<sub>mav</sub> : température mean average en R°.

Corrélation de PENN-STAT

$$P_c = 3.4824 \cdot 10^9 \cdot spgr^{2.4853} / T_{eb}^{2.3177} \dots\dots\dots(24)$$

P<sub>c</sub> : pression critique (psia).  
 T<sub>eb</sub> : température d'ébullition en R°.

Corrélation de Riazi et EL-Sahhaf :

$$(V_c / M)^{-1} = a \cdot \exp(b - c \cdot M^d) \dots\dots\dots(25)$$

**- Facteur de compressibilité critique**

Equation d'Edmister

$$Z_c = 0.371 - 0.03431 \log P_c / [(T_c/T_b) - 1] \dots\dots\dots(26)$$

### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

Avec :  $P_c$  : pression critique (atm).  
 $T_c$  : température critique ( $K^\circ$ ).  
 $T_b$  : température d'ébullition ( $K^\circ$ ).

#### Corrélation de Lee-Kesler :

$$Z_c = 0.2901 - 0.0879 \omega \dots\dots\dots(27)$$

$\omega$ : facteur acentrique.

#### Corrélation de Chitour et coll :

$$O_c = a + \frac{b}{1 + (N/c)^d} \dots\dots\dots(28)$$

$N$  : nombre d'atome de carbone.  
 $O_c$  : paramètre critique.

Famille	a	B	c	d
Paraffine	103,75202	2233,8121	98,002306	-0,53374598
Naphtène	-158,01284	2557,2583	83,559087	-0,36096529
Aromatique	51,224035	1905,8379	52,388722	-0,45859314

### 3. Propriétés thermiques

Toute transformation physique ou chimique d'une substance est suivie d'un changement d'état caractérisé par un certain nombre de propriétés dont la connaissance est indispensable pour la mise en œuvre de cette substance. Ces propriétés que nous désignons par propriétés thermiques sont nombreuses; mais, dans le cadre de notre étude, nous avons limité celles-ci aux grandeurs suivantes :

- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur de combustion

#### Corrélation de Zidelheir-Chitour

$$\Delta H_v = a + b.N + c.N^2 + d.N^3 + e.N^4 \dots\dots\dots(29)$$

$\Delta H_v$  : chaleur de vaporisation (Kcal/mole).  
 $N$  : nombre d'atome de carbone.  
 $A, b, c, d$  et  $e$  sont des constants.

familles	a	b	C	d	e
paraffines	1,89756	0,982993	-0,0272393	0,00038576	0
naphtalènes	4,17028	0,281567	0,0494028	-0,00328003	6,53E-05
aromatiques	9,85228	-1,31016	0,210676	-0,0102073	0,00017131

#### Corrélation DE NERST-BINGHAM

$$\Delta H_v(\text{cal/g.mole}) = (1/M).(17 + 0,011.T).Teb \dots\dots\dots(30)$$

$Teb$  : température d'ébullition en Kelvin.  
 $T$  : température d'évaluation en Kelvin.  
 $M$  : masse molaire.



**4. Propriétés spécifiques**

Les propriétés spécifiques des hydrocarbures et des produits pétroliers sont très utiles pour la caractérisation de ces derniers ainsi que pour l'établissement de corrélations d'autres propriétés physiques ou encore, pour la composition.

Les propriétés spécifiques parmi les plus importantes sont étudiées. Il s'agit :

- Du facteur de caractérisation Kuop
- Du facteur acentrique

corrélation de Bouamra-Chitour

$$Kuop = a+b.Teb+c.d \dots\dots\dots(31)$$

Teb: température d'ébullition en Kelvin.

d: densité .

a,b et c sont des constants qui dépendent de la famille chimique.

familles	a	b	C
paraffines	11,0733	3,34E-03	2,16E-06
naphtènes	36,35006	0,00808	-34,95683
aromatiques	13,54416	6,185766e-3-6	-6,127023

corrélation de Chitour et col

$$Kuop=a+b.N+c.N^2+d.N^3+e.N^4 \dots\dots\dots(32)$$

N: nombre d'atome de carbone.

a, b, c, d et e sont des constants.

Familles	a	b	C	d	e
Paraffine	1,39E+01	-3,37E-01	3,01E-02	-0,00101814	1,23E-05
Naphtène	9,69E+00	2,87E-01	-0,01165707	0,00028317	-2,95E-06
Aromatique	6,9049661	6,55E-01	-3,46E-02	0,00095134	-1,03E-05

Whitson

$$kuop = 4.5579 \times M^{0.15178} \times Spgr^{0.84573} \dots\dots\dots(33)$$

- **facteur acentrique**

Corrélation d'EDMISTER ( 1958)

$$\omega = \frac{3}{7} \frac{\theta}{1-\theta} \log P_c - 1 \dots\dots\dots(34)$$

Pc: pression critique en atm.

θ =Teb/Tc.

Teb: température d'ébullition en °K.

Tc: température critique en °K.

corrélation de Lee-Kesle( 1976)

$$w = \frac{-\ln Pc - 5.92714 + 6.09648.\theta^{-1} + 1.28862\ln\theta - 0.169347\theta^6}{15.2518 - 15.6875\theta^{-1} - 13.4721\ln\theta + 0.43577\theta^6} \dots\dots\dots(35)$$

θ: teb/Tc avec Tc temperature critique

**Corrélation de Chitour et col :**

$$\omega = a+b N + c N^2 + d N^3 + e N^4 \dots\dots\dots(36)$$

N: nombre d'atome de carbone.

a, b, c, d et e sont des constants.

Famille	a	b	C	d	E
Paraffine	0.079527582	0.079687325	-0.0034314834	0.000127234	-1.7280608.10 <sup>-6</sup>
Naphtène	0.31242039	-0.058323423	0.0085567993	-0.0003027334	3.7675247.10 <sup>-6</sup>
Aromatique	-0.064402608	0.046877026	-0.000181745	2.7727473.10 <sup>-6</sup>	-7.2277381.10 <sup>-8</sup>

**5. Propriétés optiques**

Les propriétés optiques sont directement liées à la nature chimique des hydrocarbures. Dans le cadre de cette étude, nous avons étudié l'indice de réfraction à 20°C (n<sub>D</sub><sup>20</sup>), l'indice de corrélation étant une fonction de n<sub>20</sub> se déduira directement par sa formule.

Corrélation DE LIPKIN ET MARTIN

$$n_D^{20} = \frac{69.878.d - 0.4044.A.d - 0.797.A + 136.566}{5.543.d - 0.746.A + 126.683} \dots\dots\dots(37)$$

$$A = 55.3 + \frac{3516}{M + 12}$$

n<sub>D</sub><sup>20</sup> : indice de réfraction.

d : densité à 20°C.

M : masse molaire.

Corrélation DE CHITOUR ET COL

$$n_D^{20} = a + \frac{b}{1 + (N / c)^d} \dots\dots\dots(38)$$

Famille	a	b	C	d
Paraffine	1,0383849	0,43547681	1,9777596	-1,1058713
Naphtène	1,4044036	0,06399385	8,998799	-2,1008282
Aromatique	1,4795363	0,03254417	7,6142466	2,7867861

**6. Propriétés thermodynamiques**

Les variations de température, pression, phase ou encore de nature chimique d'une substance sont souvent accompagnées d'effets thermiques, quantifiées le plus souvent au moyen de fonctions thermodynamiques dont les plus importantes sont l'enthalpie, la chaleur spécifique et l'entropie. En particulier, la chaleur spécifique est fréquemment utilisée dans les corrélations d'autres propriétés physiques telles que la viscosité et la conductivité thermique.

Dans le cadre de cette étude, nous nous sommes intéressés particulièrement aux propriétés thermodynamiques prises à l'état standard, c'est à dire à l'état de gaz parfait sous une pression de une atmosphère et dans un intervalle de températures compris entre 298 et 1500K:

- pouvoir calorifique supérieur
- Entropie

Corrélation DE CHITOUR ET COL

$$PCS \text{ ( kj/mole) } = a+b N +c N^2 + d N^3 \dots\dots\dots(39)$$

Famille	a	b	C	d
Paraffine	276.298	646.098	0.48359	-0.00750182
Naphtène	20.1263	648.482	-0.00313949	-0.00313949
Aromatique	-624.251	646.057	-0.00520792	-0.00520792

Corrélation de Mergache et Chitour :

$$- PCS = -354.75+187.854Tmav-1.10893Tmav^2+0.0028094Tmav^3-2.59881-6Tmav^4 \dots\dots\dots(40)$$

Corrélation DE CHITOUR ET COL

$$S^0_{298} = a+b N +c N^2 + d N^3 \dots\dots\dots(40)$$

Famille	a	b	C	d
Paraffine	154.4153849	39.07242205	-0.006486232	0.0001108404
Naphtène	63.785732	39.936399	-5.5568 10 <sup>-2</sup>	9.626074 10 <sup>-4</sup>
Aromatique	18.029710	44.439004	-0.2874067	4.733563 10 <sup>-3</sup>

### Développement du modèle mathématique :

L'accomplissement de cette étude a nécessité le recueil de données expérimentales concernant les propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures allant du  $C_6$  au  $C_{30}$  et appartenant à trois familles d'hydrocarbures: n-paraffines, naphènes (n-alkylcyclohexanes) et aromatiques (n-alkylbenzènes). Ces données sont disponibles, pour la plupart, dans des banques de données dont les plus importantes sont les suivantes :

- API Technical Data Book of petroleum refining: tables publiées par l'Américain Petroleum Institute en 1977 et 1983 et plus récemment en 1994. [8]

- DIPPR(Design Institute of Chemical Engineers):banque de données développée par l'American Institute of Chemical Engineers, qui est une compilation des propriétés thermophysiques des constituants les plus communément rencontrés dans l'industrie chimique[ 9].

Le choix des n-paraffines, n-alkylcyclohexanes et n-alkylbenzènes comme familles chimiques de références pour l'établissement des réseaux a été conditionné par différents facteurs, que nous énumérons comme suit :

- Disponibilité des données dans les tables.

- Les hydrocarbures appartenant aux trois familles d'hydrocarbures choisies sont rencontrés pour certains en abondance dans le pétrole brut et les produits pétroliers issus de sa transformation;

- Du fait de la complexité de la composition des pétroles bruts et de leurs fractions, il s'avérait nécessaire de regrouper les constituants de ces mélanges complexes autour de constituants clés dont les propriétés sont représentatives. Ainsi, nous avons choisi les n-paraffines pour représenter tous les hydrocarbures saturés aliphatiques et leurs isomères, les n-alkylcyclohexanes pour représenter les cycliques saturés et enfin les n-alkylbenzènes pour représenter les hydrocarbures aromatiques.

Concernant l'application des réseaux proposées aux mélanges d'hydrocarbures de compositions connues, nous avons eu à poser certaines hypothèses simplificatrices :- Toutes les propriétés étudiées sont additives. Cette hypothèse est d'autant justifiée que les mélanges étudiés sont composés de constituants à points d'ébullition rapprochés et/ou appartenant à la même famille. À partir de ces simplifications, nous avons constitué une banque de données de 60 mélanges simulant des fractions pétrolière légères, moyennes et lourdes.

Pour ce qui est des fractions pétrolières, notre banque de données est composée de 60 fractions pétrolières issues de différentes distillations de pétroles algériens qui sont : Hassi R'mel HRS162, Guellala , Hassi messaoud et Gassi touil .

La détermination des propriétés physico-chimiques des hydrocarbures par réseaux de neurones s'appuie sur les avantages qu'offre cette méthode en identification des fonctions non linéaires et du traitement parallèle de l'information.

Pour cela, nous avons choisi de travailler 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.

L'objectif de ce travail est de créer des RNA pouvant approximer des fonctions non linéaires liant les différentes propriétés étudiées. L'approximation se fait par apprentissage supervisé en utilisant une banque de données contenant les différentes propriétés

- des corps purs allant du C<sub>6</sub> au C<sub>30</sub>
- des 51 mélanges de corps purs
- des 51 fractions pétrolières

**Méthodologie :**

La mise en œuvre des réseaux de neurones est résumée par les étapes suivantes :

**a) Introduction des données**

Les données sont introduites au réseau sous forme d'une matrice de couple température d'ébullition et densité.

**b) Apprentissage par réseau :**

Tout d'abord il faut choisir le type du réseau, après une importante recherche bibliographique, nous avons opté pour un réseau multicouche avec la rétro propagation du gradient, après cela reste alors à déterminer les composantes du réseau de neurones ; la fonction d'entraînement, la fonction d'activation et le nombre de neurones dans la couche cachée.

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 ; 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. 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.

D'après la littérature consultée l'algorithme de Lavenberg –Marquardt est celui qui converge à grande vitesse et a une grande capacité d'approximation.

Les réseaux de neurones proposés sont des réseaux à trois couches.

- Une couche d'entrée, composée de deux neurones sans fonction d'activation, ils ne font que transmettre les valeurs des entrées à la couche cachée.

- Une couche cachée, composée de plusieurs neurones dont le nombre est spécifique à chaque réseau.

les neurones sont dotés d'une fonction d'activation sigmoïde ce choix à été fait d'après plusieurs études qui ont montré que l'apprentissage des RN multicouches converge plus rapidement quand la fonction sigmoïde tangentielle est employée au lieu de la sigmoïde exponentielle.

Deux autres paramètres sont aussi optimisés ce sont le nombre d'époques qui est la durée d'apprentissage et la performance de l'apprentissage qui est l'écart minimal entre la valeur simulée et le point d'entrée.

- Une couche de sortie, composée d'un neurone avec la fonction d'activation identité, il est clair qu'on ne peut utiliser que la fonction linéaire du fait que les autres fonctions sont bornées et cela limite la plage des données de sortie, alors que le domaine est de  $[-\infty, +\infty]$  pour la fonction l'identité.

Ce qui nous a conduit à choisir les sous-routines suivantes :

- Newff : qui permet la création d'un réseau de neurones avec rétropropagation du 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 identité): fonction d'activation des neurones de sortie

**C) Calcul**

Après avoir effectué l'apprentissage et avoir trouvé les poids du réseau nécessaire au calcul des propriétés, il faut estimer l'erreur sur la base de test (données qui n'ont pas été utilisées dans la base d'apprentissage) pour évaluer la capacité de généralisation du réseau.

**3. Application du modèle et étude comparative :**

Dans ce qui suit, une application ainsi qu'une comparaison avec des corrélations sont effectuées sur les hydrocarbures utilisés dans notre base de test.

**a) Volume molaire :**

La représentation graphique de la simulation du volume molaire, des mélanges et des fractions pétrolières est donnée en figures 12 et 13 qui montrent un lissage convenable des données de référence par les réseaux établis.

La comparaison des résultats obtenus par nos modèles avec les données de référence ainsi que celles d'autres méthodes a permis de trouver les écarts donnés dans les tableaux 3, 4 et 5. L'examen de ces trois tableaux et ceci soit pour les corps purs, les mélanges ou les fractions pétrolières démontre d'une manière générale, que notre méthode fournit les écarts les plus faibles (voir figure 14 et 15).

▪ Corps purs

N- paraffine	Vm théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	146,500	146,039	0,315	157,650	7,611	145,991	0,347
C13	243,800	239,777	1,650	254,591	4,426	244,031	0,095
C20	358,300	352,792	1,537	354,945	0,936	358,411	0,031
C27	473,000	464,400	1,818	440,441	6,884	472,791	0,044
			<b>1.330</b>		<b>4.964</b>		<b>0.129</b>
n-alkylbenzene	Vm théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	105,160	105,220	0,05706	106,201	0,9903	106.18	0.97
C13	205,790	205,950	0,07775	204,951	0,4076	205.26	0.26
C20	321,120	321,021	0,03083	307,338	4,2918	320.84	0.872
C27	436,140	436,315	0,04012	391,005	10,3488	436.43	0.665
			<b>0.141</b>		<b>4.00</b>		<b>0.34</b>
n- Alkylcyclohexane	Vm théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	127,610	129,410	1,41055	128,3938	0,614	126.16	1.184
C13	224,870	223,010	0,82714	232,5126	3,399	224.87	0.038
C20	339,900	339,084	0,24007	338,8272	0,316	339.9	0.017
C27	454,810	457,567	0,60619	426,4514	6,235	454.81	0.019
			<b>0.76</b>		<b>2.63</b>		<b>0.302</b>

**Tableau 3: Résultats et comparaison du volume molaire des corps purs**

▪ Mélanges

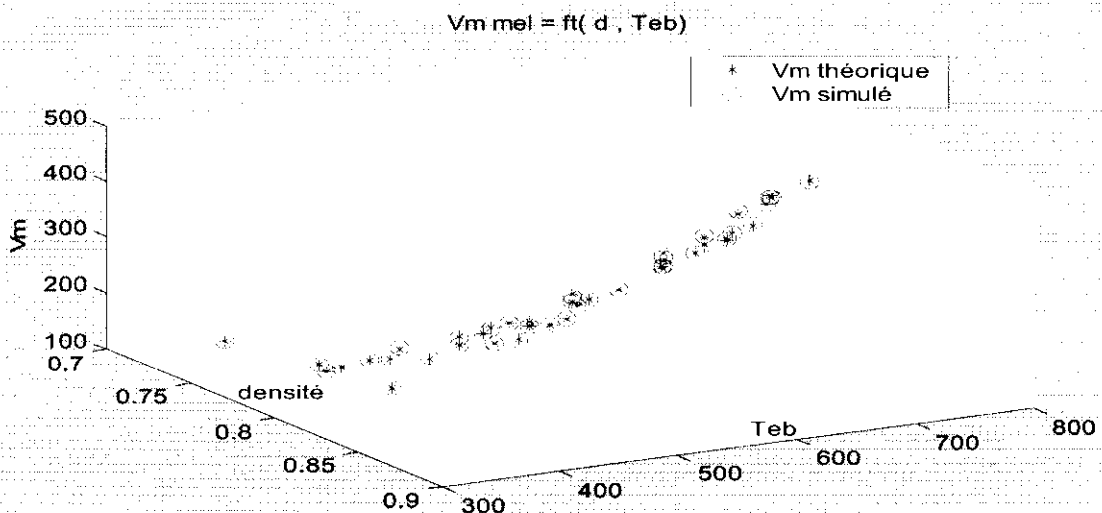
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
3	385,88	0,759	120,4	120,205	0,16	120,58	0,15	120,85	0,37
7	444,37	0,7873	174,4	172,64	1,01	177,344	1,69		1,86
37	423,44	0,7922	153,92	153,12	0,52	158,214	2,79	156,83	1,90
31	523,38	0,809	235,7	233,29	1,02	238,68	1,26	241,35	2,40
17	497,47	0,8102	210,0	208,10	0,90	205,67	2,06	208,58	0,68
44	477,07	0,8126	189,73	188,86	0,46	194,37	2,45	193,28	1,87
20	604,93	0,8242	317,7	316,79	0,29	313,60	1,29	317,98	0,09
50	666,018	0,8289	399,22	400,15	0,23	380,70	4,64	386,34	3,23
28	685,28	0,8327	430,2	429,02	0,27	401,04	6,78	409,75	4,75
					<b>0,54</b>		<b>2,57</b>		<b>1,91</b>

**Tableau 4 :** Résultats et comparaison du volume molaire des mélanges.

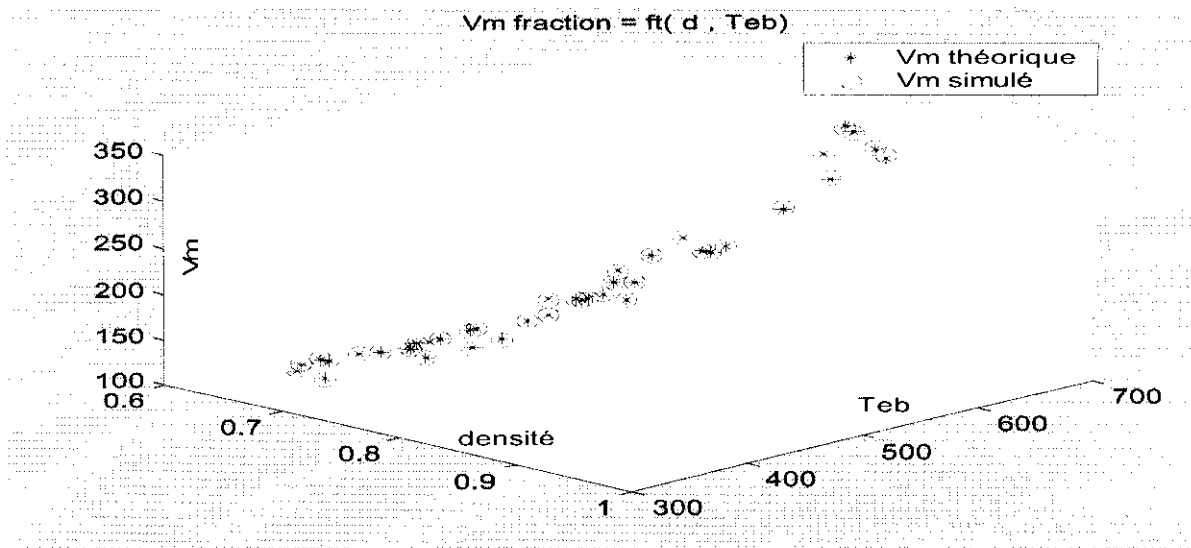
▪ Fraction pétrolière

FP	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	(M API)/d	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	142,9	142,147	0,53	156,10	9,24	145,00	1,47
20	426,15	0,7623	170,4	169,1214	0,75	180,20	5,75	174,40	2,35
24	483,15	0,7826	211,7	209,9794	0,81	219,90	3,87	214,50	1,32
30	425,65	0,7584	171,4	170,2706	0,66	181,20	5,72	174,90	2,04
36	558,15	0,8185	264,9	262,057	1,07	279,60	5,55	281,50	6,27
40	552,59	0,8436	245,5	242,6429	1,16	259,80	5,82	268,50	9,37
46	598,15	0,8578	281,5	278,065	1,22	304,60	8,21	314,50	11,72
47	638,15	0,8721	313,3	309,2246	1,30	348,70	11,30	359,00	14,59
50	668,15	0,8487	364,4	358,0649	1,74	413,80	13,56	409,20	12,29
					<b>1,03</b>		<b>7,67</b>		<b>6,82</b>

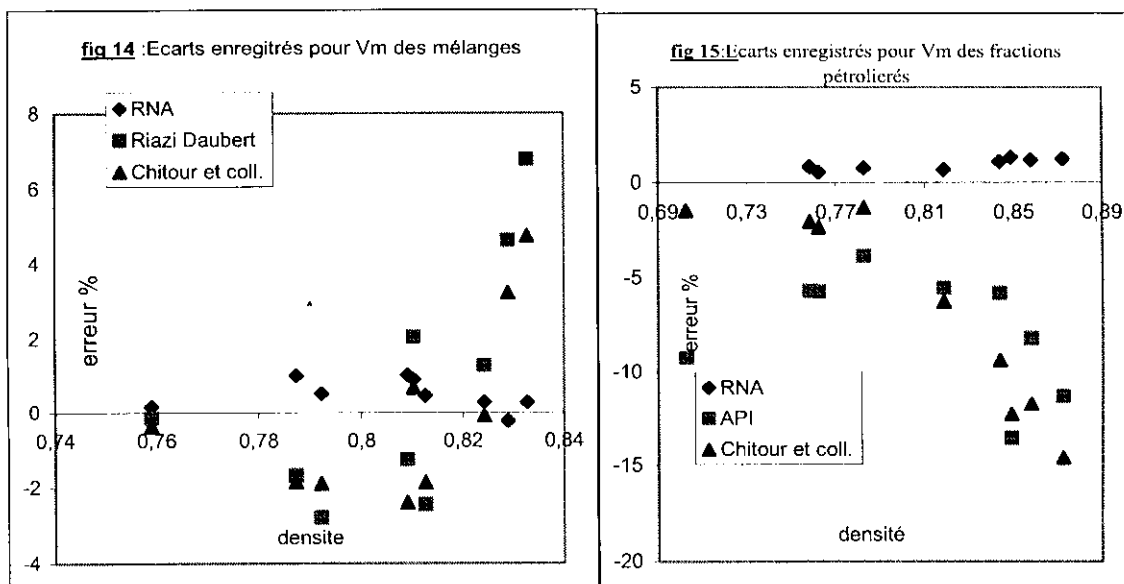
**Tableau 5 :** Résultats et comparaison du volume molaire des fractions pétrolières



**Fig. 12 :** Résultat de l'apprentissage du volume molaire en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**Fig13** : Résultat de l'apprentissage du volume molaire en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**b) Tension superficielle :**

Les résultats obtenus par les RNA pour les corps purs sont comparés à d'autres corrélations de la littérature et résumés par le tableau 6. Bien que certains écarts enregistrés par notre méthode atteignent 6%, ils restent tout de même ceux qui se rapprochent le plus de la référence, en terme d'écart moyen. La corrélation de Chitour et coll. fournit elle aussi d'assez bon écarts qui ne dépassent pas les 6% ; mais la méthode de Boundi présente des écarts très élevés par rapport à la référence.

Les tensions superficielles des mélanges étudiés et des fractions traitées sont représentées sur les figures 18 et 19. Pour ce qui est du tableau 7. Il représente la comparaison des valeurs



### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

obtenues par calcul selon différentes méthodes et celles obtenues par additivités des données de référence. Pour les mélanges, les écarts obtenus par différentes méthodes sont faibles.

Pour les fractions pétrolières , nous avons pris la corrélation de Boundi comme méthode de référence (voir tableau 8) nous avons comparé les valeurs des tensions superficielles des fractions obtenues par notre méthode et celles calculées par Chitour et coll. et Brock et Bird, voir la figure 19 , la première a donné des écarts moyen sur toute la base de test mais la deuxième corrélation donne des écarts relativement élevés surtout pour les fractions lourdes .

#### ▪ Corps purs

N- paraffine	Ts théorique	RNA	Erreur %	Boundi	Erreur %	Chitour et col.l.	Erreur %
C7	19,650	19,5630	0,44275	21,216	7,69	19,667	0,087
C13	25,350	24,8710	1,88955	24,076	5,02	25,580	0,907
C20	28,460	28,4050	0,19325	30,247	6,279	28,480	0,070
C27	29,999	29,9779	0,07034	39,790	32,63	29,985	0,047
			<b>0,64900</b>		<b>12,97</b>		<b>0,278</b>
n-alkylbenzene	Ts théorique	RNA	Erreur %	Boundi	Erreur %	Chitour et col.l.	Erreur %
C7	28,440	28,510	0,24613	18,1630	36,1357	28,4034	0,129
C13	29,810	29,779	0,10399	11,9319	59,9735	29,8154	0,018
C20	30,250	30,227	0,07603	8,0340	73,4414	30,2600	0,033
C27	30,360	30,314	0,15152	6,6624	78,0555	30,3533	0,022
			<b>0,144</b>		<b>61,99</b>		<b>0,05</b>
n- Alkylcyclohexane	Ts théorique	RNA	Erreur %	Boundi	Erreur %	Chitour et col.l.	Erreur %
C7	24,9300	23,3280	6,42599	45,0788	80,822	22,67	9,03
C13	27,8000	27,8283	0,10180	32,3178	16,251	25,58	7,98
C20	29,4800	29,4657	0,04851	25,1072	14,833	28,48	3,39
C27	30,2800	30,2833	0,01090	21,6101	28,632	29,98	0,97
			<b>1,64</b>		<b>35,145</b>		<b>5,345</b>

**Tableau 6 :** Résultats et comparaison de la tension superficielle des corps purs

#### ▪ Mélanges

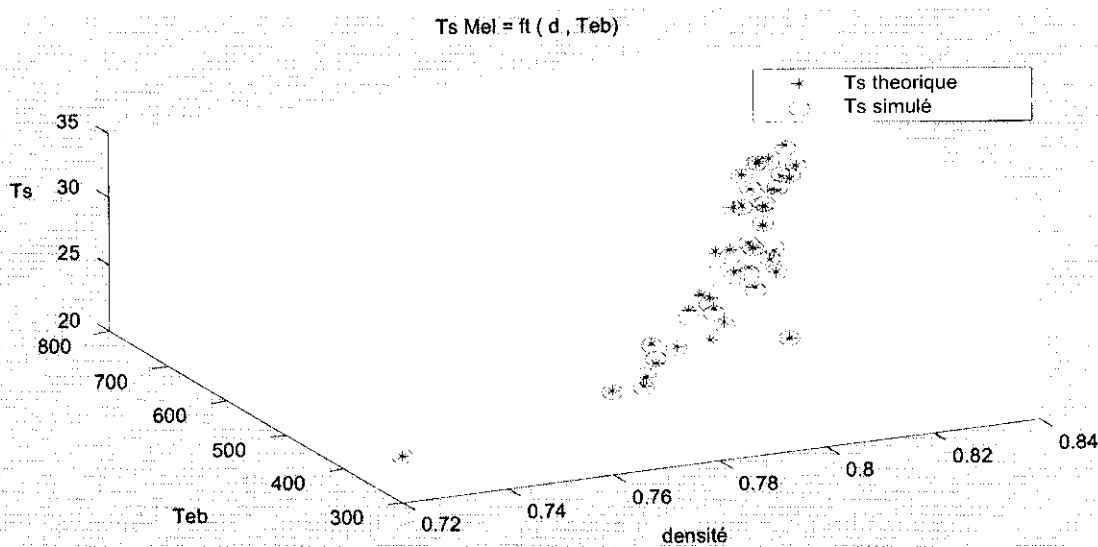
m	Teb	densité	Valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et col	Erreur %	Boundi	Erreur %
3	385,88	0,759	23,60	23,09	2,16	22,79	3,45	21,60	8,50
7	444,37	0,7873	25,70	25,88	0,70	25,62	0,33	25,96	1,03
37	423,44	0,7922	25,40	25,83	1,69	25,89	1,93	25,73	1,31
31	523,38	0,809	27,40	27,8	1,46	26,72	2,48	27,38	0,08
17	497,47	0,8102	27,40	27,53	0,47	27,15	0,91	28,16	2,78
44	477,07	0,8126	27,47	27,36	0,38	27,41	0,20	28,14	2,46
20	604,93	0,8242	29,20	29,13	0,24	29,09	0,39	30,12	3,15
50	666,018	0,8289	29,95	29,91	0,13	29,79	0,53	30,87	3,07
28	685,28	0,8327	30,10	30,11	0,03	29,90	0,66	31,03	3,09
					<b>0,81</b>		<b>1,21</b>		<b>2,83</b>

**Tableau 7 :** Résultats et comparaison de la tension superficielle des mélanges

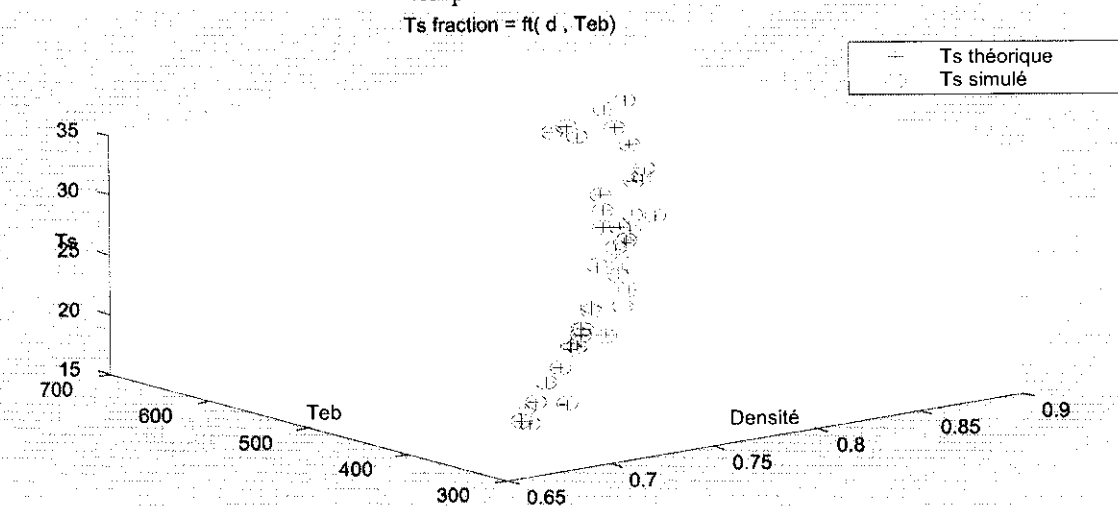
▪ Fraction pétrolière

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Brock et Bird	Erreur %
10	365,65	0,7027	20,3	20,31	0,05	22,100	8,87	19,4	4,43
20	426,15	0,7623	24,7	24,6651	0,14	24,900	0,81	23,1	6,48
24	483,15	0,7826	26,7	26,6923	0,03	26,800	0,37	24,5	8,24
30	425,65	0,7584	24,5	24,489	0,04	24,900	1,63	23	6,12
36	558,15	0,8185	29,2	29,1358	0,22	27,800	4,79	26,1	10,62
40	552,59	0,8436	30,3	30,2472	0,17	27,700	8,58	27,2	10,23
46	598,15	0,8578	31,3	31,2258	0,24	28,500	8,95	27,5	12,14
47	638,15	0,8721	32,1	32,0917	0,03	29,100	9,35	27,6	14,02
50	668,15	0,8487	31,3	31,0204	0,89	29,600	5,43	26,2	16,29
					<b>0,20</b>		<b>5,42</b>		<b>9,84</b>

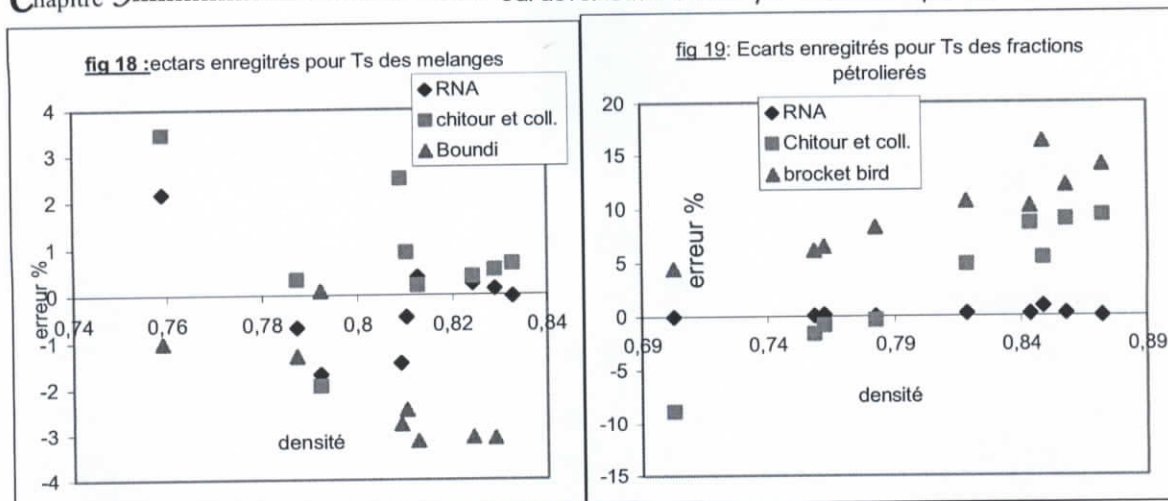
**Tableau 8 :** Résultats et comparaison de la tension superficielle des fractions pétrolières



**fig16 :** Résultat de l'apprentissage de la tension superficielle en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**fig 17 :** Résultat de l'apprentissage de la tension superficielle en fonction de la densité et de la température d'ébullition



c) La viscosité à 100°F

Les écarts pour les hydrocarbures purs sont d'une manière générale élevés mais restent moyens car ils ne dépassent pas les 4% dans le cas de notre méthode et atteignent 7% par la corrélation de Chitour et coll. Nous remarquons qu'ils sont constants pour chaque point de la base de test et pour chaque groupe par la méthode des RNA, par contre les écarts obtenus par l'autre corrélation croient avec l'augmentation du nombre de carbone (voir le tableau 9).

Les viscosités dynamiques à 100°F des mélanges d'hydrocarbures ont été calculées par notre méthode puis comparées aux valeurs obtenues à partir de l'additivité des données des tables, les écarts enregistrés par les autres méthodes restent élevés en particulier pour API.

Le calcul des viscosités des fractions pétrolières à 210°F par différentes méthodes a été effectué, ces résultats ont été comparé aux valeurs données par corrélation de l'API prise comme référence, voir figure 23, le meilleur écart est fourni par notre méthode, les deux autres donnent en terme d'écart moyen des valeurs assez élevées.

▪ Le corps pur

N- paraffines	μ100 théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	0.348	0.334	3.862	0.348	0.051
C13	1.355	1.414	4.413	1.357	0.132
C20	3.856	3.948	2.225	4.309	11.753
C27	8.620	8.663	0.50	10.051	16.604
			<b>2.751</b>		<b>7.135</b>
n-alkylbenzene	μ100 théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	0.478	0.497	4.163	0.477	0.270
C13	1.503	1.5622	3.938	1.5	0.192
C20	4.739	4.911	3.637	4.629	2.317
C27	12.171	11.813	2.938	10.254	15.747
			<b>3.669</b>		<b>4.63</b>
n- Alkylcyclohexane	μ100 théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	0.570	0.569	1.717	0.582	0.474
C13	1.898	1.924	1.369	1.90	0.102
C20	6.155	6.276	1.965	6.160	0.079
C27	15.32	15.54	1.396	15.364	0.251
			<b>1.6117</b>		<b>0.2265</b>

**Tableau 9 :** Résultats et comparaison de la viscosité des corps purs

▪ Mélanges

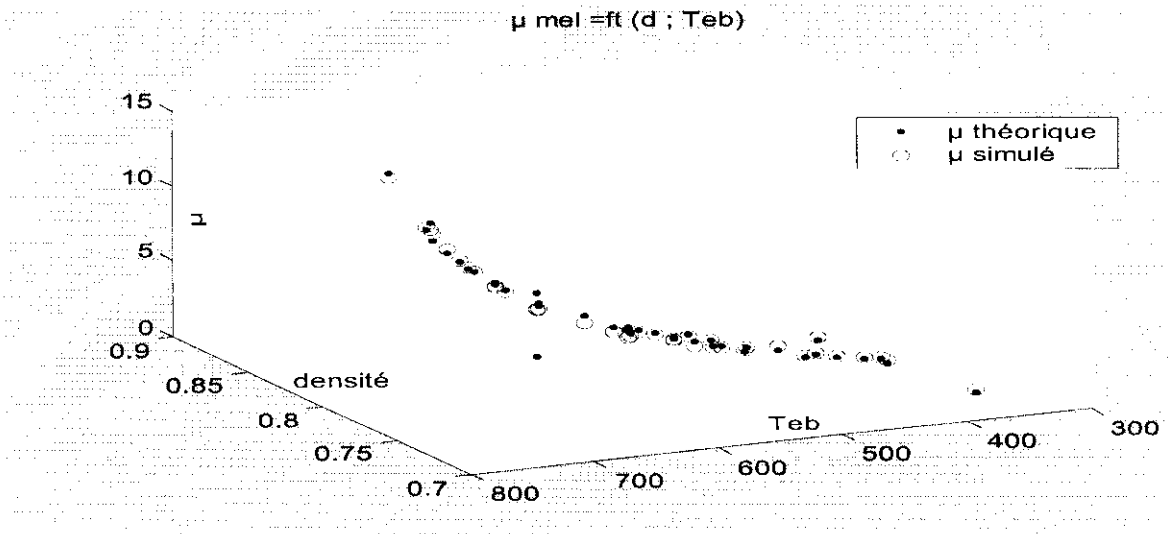
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	API	Erreur %
3	385,88	0,759	0,486	0,4487	7,67	0,319	34,4	0,7315	50,5
7	444,37	0,7873	0,79	0,8189	3,66	0,594	24,8	0,8526	7,9
37	423,44	0,7922	0,653	0,546	16,39	0,535	18,1	0,8076	23,7
31	523,38	0,809	1,796	1,6868	6,08	0,819	54,4	1,035	42,4
17	497,47	0,8102	1,353	1,3272	1,91	0,941	30,5	0,9706	28,3
44	477,07	0,8126	1,074	1,0966	2,10	0,843	21,5	0,894	16,8
20	604,93	0,8242	4,04	4,1384	2,44	4,825	19,4	1,3955	65,5
50	666,018	0,8289	8,287	7,6398	7,81	5,893	28,9	1,799	78,3
28	685,28	0,8327	9,781	9,54	2,46	6,385	34,7	2,096	78,6
					<b>5,61</b>		<b>29,6</b>		<b>43,54</b>

**Tableau 10:** Résultats et comparaison de la viscosité des mélanges

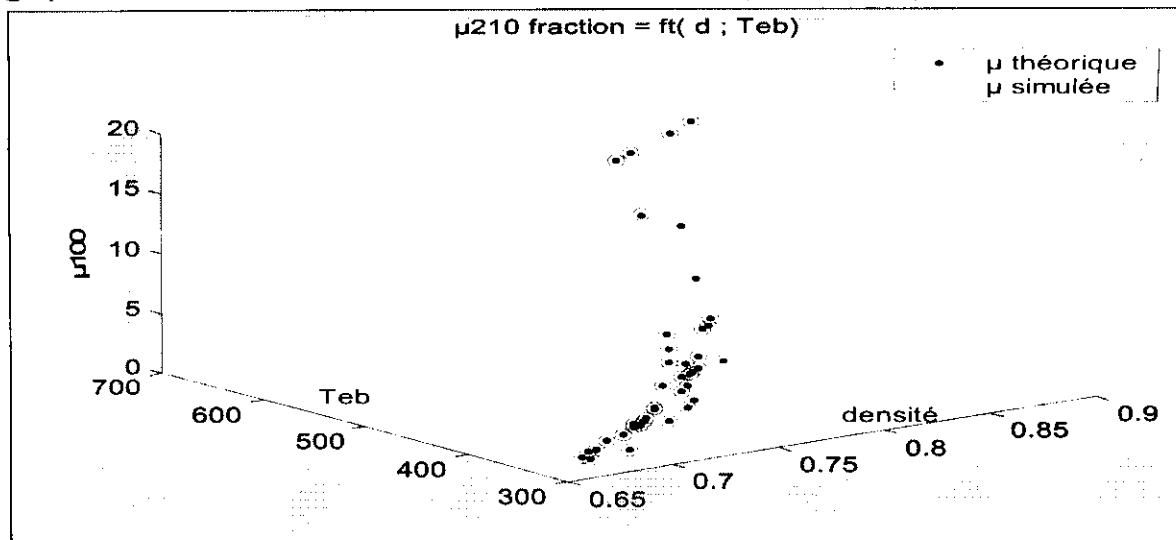
▪ Les fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Beg Amin et hussein	Erreur %	Abbott et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	0,388	0,397	2,32	0,309	20,4	0,315	18,8
20	426,15	0,7623	0,666	0,671	0,69	0,580	12,9	0,605	9,2
24	483,15	0,7826	1,155	1,151	0,37	0,980	14,8	1,049	9,2
30	425,65	0,7584	0,659	0,664	0,76	0,570	13,5	0,591	10,3
36	558,15	0,8185	2,929	2,915	0,50	2,226	24,0	2,671	8,8
40	552,59	0,8436	2,891	2,881	0,34	2,398	17,1	2,874	0,6
46	598,15	0,8578	5,86	5,806	0,91	4,102	30,0	5,439	7,2
47	638,15	0,8721	12,58	12,56	0,15	6,587	47,6	10,337	17,8
50	6668,15	0,8487	21,168	20,58	2,80	4,589	78,3	12,743	39,8
					<b>0,98</b>		<b>28,74</b>		<b>13,52</b>

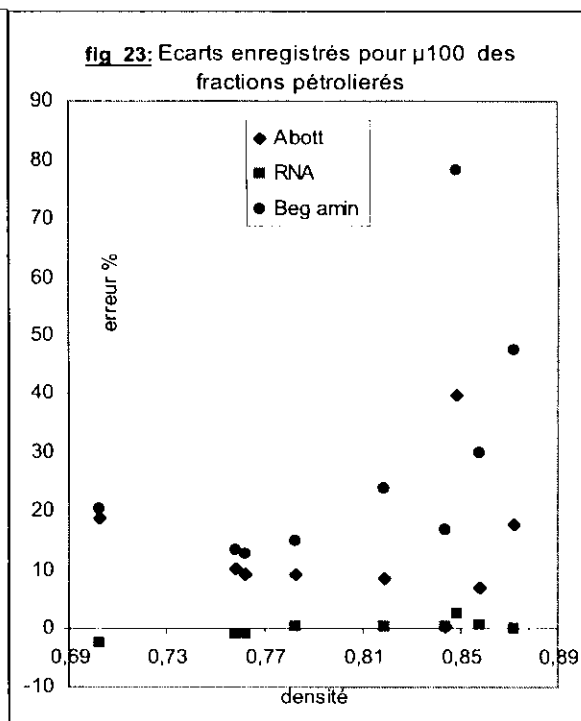
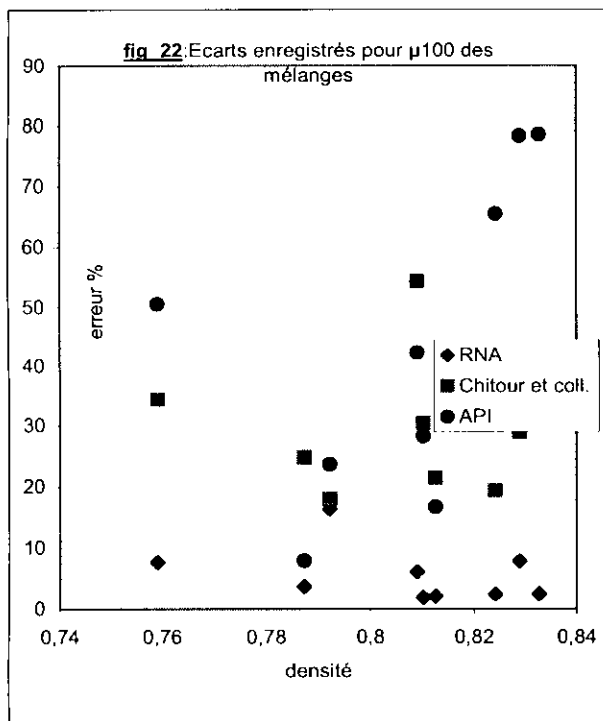
**Tableau 11 :** Résultats et comparaison de la viscosité des fractions pétrolières



**fig 20 :** Résultat de l'apprentissage de la viscosité en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**fig 21 :** Résultat de l'apprentissage de la viscosité en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**d) Température critique :**

Les valeurs obtenues par les RNA sont comparées à d'autres méthodes, les écarts moyens enregistrés pour chacune des familles par rapport aux données de référence sont donnés dans le tableau 12, l'examen de ce dernier montre que notre méthode présente des écarts qui ne dépassent pas 1% alors que les autres donnent des erreurs de l'ordre de 2%, mais restent toutes faibles et signifient que les trois méthodes approchent convenablement les valeurs des références.

### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

En utilisant la règle de Kay d'additivité nous avons calculé les températures critiques des mélanges d'hydrocarbures.

Le calcul à partir de deux corrélations prises de la littérature a été effectué sur la base de test, en prenant comme référence la valeur de la température critique obtenue par pondération des valeurs recueillies des tables, nous avons comparé les résultats et les écarts obtenus par différentes méthodes sont représentés en figure 26.

Le meilleur écart moyen est obtenu par les RNA, cependant Riazi Daubert se rapproche aussi de la théorie et elle est suivie de très près par la corrélation de Chitour et coll. Pour cette raison nous avons pris comme référence l'équation de Riazi Daubert en référence pour le calcul de Tc des fractions pétrolières.

D'après le tableau 14, nous remarquons que la méthode de Watannassiri présente le meilleur écart moyen le réseau proposé pour cette propriété donne des erreurs pratiquement constantes pour toute la base de test et restent toujours faibles et inférieures à 2%.

#### ▪ Corps purs

N-paraffines	TC DIPPR	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Leekesler	Erreur %
C7	540,100	539,623	0,088	538.00	0.39	540.2	0.15
C13	675,800	675,846	0,007	670.25	0.86	674.74	0.16
C20	766,000	768,316	0,302	758.6	0.98	767.41	0.18
C27	851,300	851,458	0,019	817.5	3.97	829.4	2.57
			<b>0.104</b>		<b>1.55</b>		<b>0.77</b>
n-alkylbenzene	Tc DiPPR	RNA	Erreur %	Riazi daubert	Erreur %	Leekesler	Erreur %
C7	591,720	592,02	0,0507	601,496	1,652	593,507	0,3021
C13	713,500	710,910	0,3630	714,439	0,132	710,047	0,4839
C20	792,000	795,300	0,4166	797,758	0,727	789,807	0,2768
C27	860,910	860,740	0,0197	852,484	0,979	841,252	2,2834
			<b>0.215</b>		<b>0.872</b>		<b>0.835</b>
n- Alkylcyclohexane	Tc DiPPR	RNA	Erreur %	Riazi daubert	Erreur %	Leekesler	Erreur %
C7	572,1200	552,769	3,38230	566,7200	0,944	560,5000	2,0310
C13	708,6000	710,711	0,29794	699,5000	1,284	694,5600	1,9814
C20	792,8000	792,901	0,01284	788,6000	0,530	779,8100	1,6385
C27	864,4300	865,109	0,07864	846,8420	2,035	834,2000	3,4971
			<b>0,94293</b>		<b>1,198</b>		<b>2,2870</b>

**Tableau 2:** Résultats et comparaison la température critique des corps purs

#### ▪ Mélanges

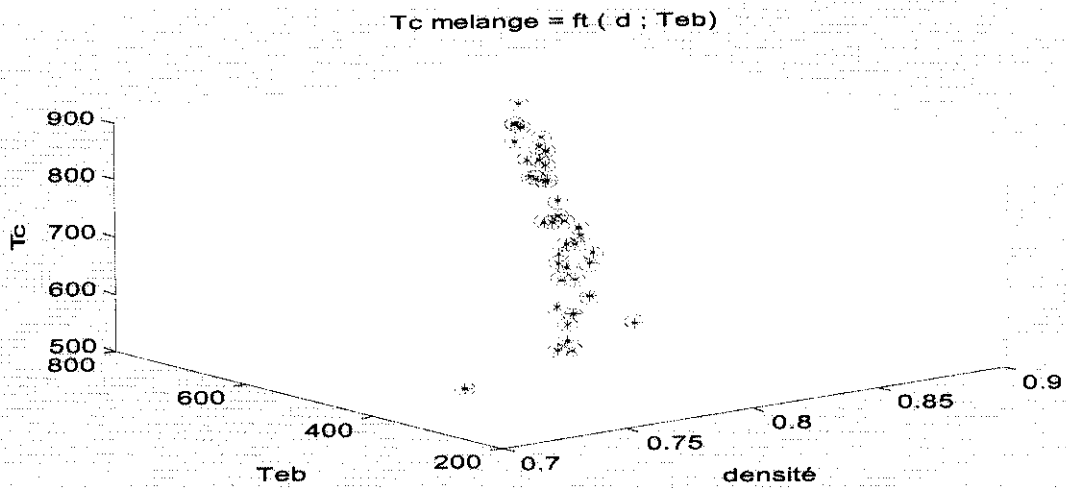
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
3	358,67	0,75	547	547,5	0,09	550,34	0,61	545	0,37
7	444,146	0,781	637,9	637,91	0,00	632,34	0,87	637,45	0,07
37	422,464	0,7892	618,44	619,53	0,18	616,02	0,39	620,58	0,35
31	533,537	0,8034	703,9	705,26	0,19	675,59	4,02	678,94	3,55
17	497,27	0,8046	684,9	685,2	0,04	682,77	0,31	686,78	0,27
44	476,595	0,8113	670,85	670,23	0,09	666,87	0,59	673,48	0,39
20	607,325	0,8221	769,7	773,6	0,51	770,79	0,14	786,86	2,23
50	665,475	0,8286	824,57	824,9	0,04	817,35	0,88	840,27	1,90
28	684,56	0,8278	842,7	846,14	0,41	832,55	1,20	852,458	1,16
					<b>0,17</b>		<b>1,00</b>		<b>1,14</b>

**Tableau 13 :** Résultats et comparaison de la température critique des mélanges

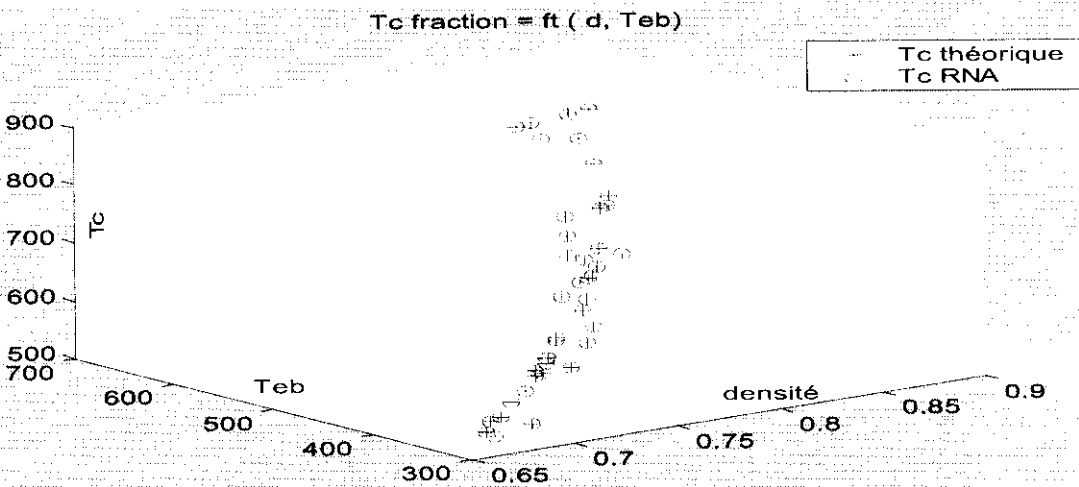
▪ Fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	watan,asiri et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	542,6	548,386	1,07	567,700	4,63	537,2	1,00
20	426,15	0,7623	611,1	618,1407	1,15	623,000	1,95	612,1	0,16
24	483,15	0,7826	664,3	671,79	1,13	674,700	1,57	669,1	0,72
30	425,65	0,7584	609,7	616,504	1,12	622,600	2,12	610,6	0,15
36	558,15	0,8185	734,8	743,57	1,19	729,500	0,72	741,4	0,90
40	552,59	0,8436	738,2	746,6133	1,14	721,200	2,30	749,1	1,48
46	598,15	0,8578	778,1	786,76	1,11	757,500	2,65	789,6	1,48
47	638,15	0,8721	813,1	821,7819	1,07	789,600	2,89	824,8	1,44
50	668,15	0,8487	827,3	837,937	1,29	797,400	3,61	826,0	0,16
					<b>1,14</b>		<b>2,49</b>		<b>0,83</b>

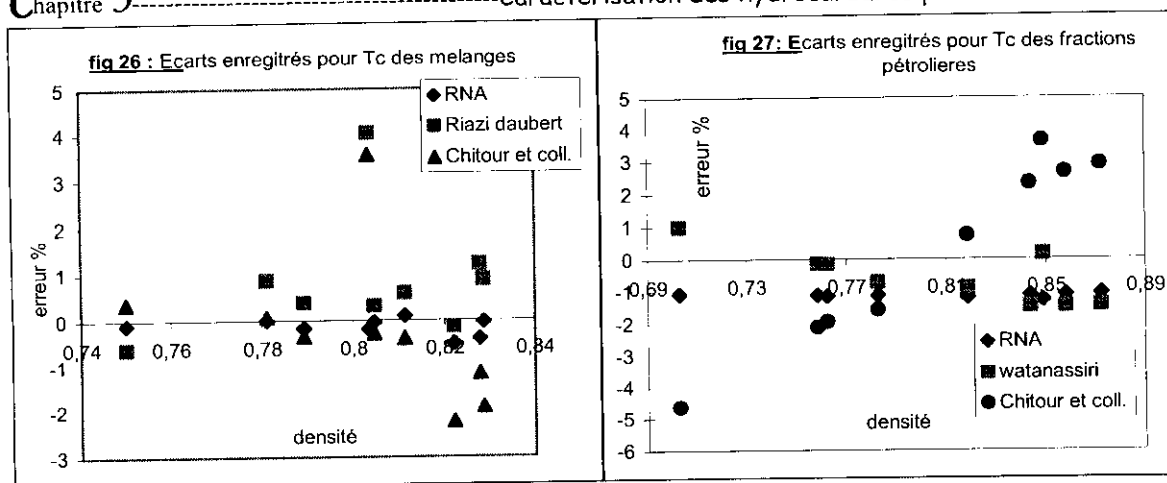
**Tableau 14:** Résultats et comparaison de la température critique des fractions pétrolières



**fig 25:** Résultat de l'apprentissage de la température critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**fig 24:** Résultat de l'apprentissage de la température critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



e) Pression critique :

Le réseau proposé pour les corps purs des trois familles étudiées est comparé en tableau 15 avec les valeurs de référence, bien que certains écarts atteignent 4%, la méthode reste celle qui se rapproche le plus des données de référence puisque l'erreur moyenne de l'équation de Riazi Daubert atteint 15% et celle de Pen State 9%.

En figures 28 et 29 nous avons tracé les données recueillies et celle obtenues par nos réseaux, l'examen de ces figures démontre l'ajustement des deux résultats que se soit pour les mélanges ou pour les fractions pétrolières. Pour les mélanges d'hydrocarbures à composition connue les écarts enregistrés par chacune des méthodes par rapport aux données de références obtenues par pondération molaire des pressions critiques de référence sont représentés en figure 31.

D'une manière générale les écarts les plus faibles sont donnés par notre méthode. Les deux autres méthodes présente des écarts du même ordre et qui ont tendance a augmenté le plus souvent pour les mélanges moyennement lourds.

Nous avons pris comme référence la méthode de Riazi Daubert, les écarts trouvés lors de la comparaison sont représenté au tableau 17, la méthode de Chitour et coll. a fourni des écarts faibles uniquement dans le cas des fractions légères, par contre pour la méthode de Watanassiri et coll. présente des écarts sont constants et ont tendances a augmenter pour atteindre les 20% pour les fractions lourdes.

**Corps purs**

N- paraffines	Pc théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	PenState	Erreur %
C7	27,360	27,552	0,702	23,271	14,945	23,657	13,533
C13	17,230	17,281	0,296	15,735	8,674	16,172	6,141
C20	11,150	10,421	6,538	11,096	0,487	11,471	2,881
C27	6,890	6,834	0,813	8,826	28,101	9,150	32,803
			<b>2,087</b>		<b>15,113</b>		<b>13,840</b>
n-alkylbenzene	Pc théorique	RNA	Erreur%	Riazi Daubert	Erreur %	Pennstate	Erreur %
C7	41,090	40,890	0,48674	41,191	0,2464	43,363	5,534
C13	21,990	21,710	1,27331	20,033	8,8969	21,015	4,430
C20	12,690	12,860	1,33964	12,879	1,4954	13,493	6,329
C27	8,260	8,2300	0,36320	9,9107	19,9849	10,375	25,617
			<b>0,865</b>		<b>7,65</b>		<b>10,447</b>
n- Alkylcyclohexane	Pc théorique	RNA	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Pennstate	Erreur %
C7	34,7100	33,033	4,83002	34,372	0,9733	33,295	4,074
C13	19,6000	19,365	1,19694	18,425	6,0179	17,719	9,595
C20	11,6000	11,664	0,55517	12,316	6,1775	11,820	1,940
C27	7,6900	7,6393	0,65930	9,6231	25,1382	9,2312	20,042
			<b>1,81</b>		<b>9,57</b>		<b>8,91</b>

**Tableau 15 :** Résultats et comparaison la pression critique des corps purs



▪ Mélanges

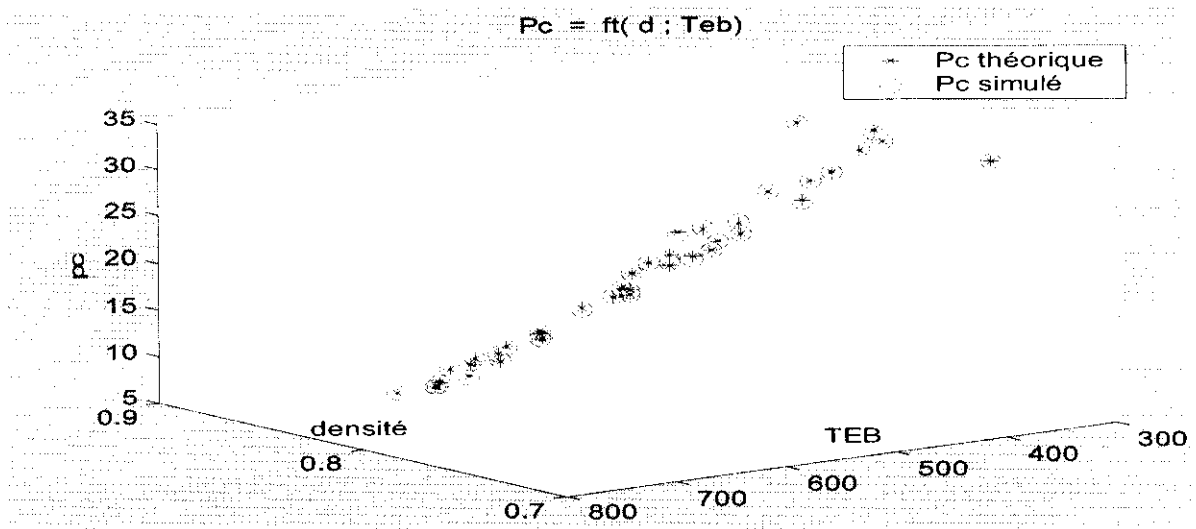
m	Teb	densité	valeur théorique	réseau de neurones	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %	Pen state	Erreur %
3	385,88	0,759	36,4	35,75	1,79	35,5	2,47	36,58	0,49
7	444,37	0,7873	25,3	25,25	0,20	23,58	6,80	24,42	3,48
37	423,44	0,7922	28,265	28,14	0,43	26,75	5,36	27,73	1,89
31	523,38	0,809	18,7	18,68	0,11	20,13	7,65	20,92	11,87
17	497,47	0,8102	21,1	21,34	1,14	19,42	7,96	20,19	4,31
44	477,07	0,8126	23,67	23,56	0,46	21,54	9,00	22,41	5,32
20	604,93	0,8242	12,9	13,27	2,87	12,85	0,39	13,93	7,98
50	666,018	0,8289	9,42	9,40	0,21	10,43	10,72	10,86	15,29
28	685,28	0,8327	8,3	8,52	2,65	9,86	18,80	10,28	23,86
					<b>1,09</b>		<b>7,68</b>		<b>8,28</b>

**Tableau 16 :** Résultats et comparaison de la pression critique des mélanges

▪ Fraction pétrolière

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Watanasiri et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	29,300	29,52	0,75	29,00	1,02	26,90	8,19
20	426,15	0,7623	24,830	24,89	0,24	24,80	0,12	24,00	3,34
24	483,15	0,7826	19,700	19,73	0,15	20,20	2,54	19,60	0,51
30	425,65	0,7584	24,600	24,67	0,27	24,70	0,41	23,80	3,25
36	558,15	0,8185	15,700	15,62	0,51	14,70	6,37	15,10	3,82
40	552,59	0,8436	17,100	17,12	0,12	15,60	8,77	17,00	0,58
46	598,15	0,8578	14,800	14,78	0,18	12,90	12,84	14,10	4,73
47	638,15	0,8721	13,300	13,15	0,94	10,80	18,80	11,90	10,53
50	668,15	0,8487	11,200	11,23	0,27	10,40	7,14	8,90	20,54
					<b>0,38</b>		<b>6,45</b>		<b>6,17</b>

**Tableau 17 :** Résultats et comparaison de la pression critique des fractions pétrolières



**fig 28 :** Résultat de l'apprentissage de la pression critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition

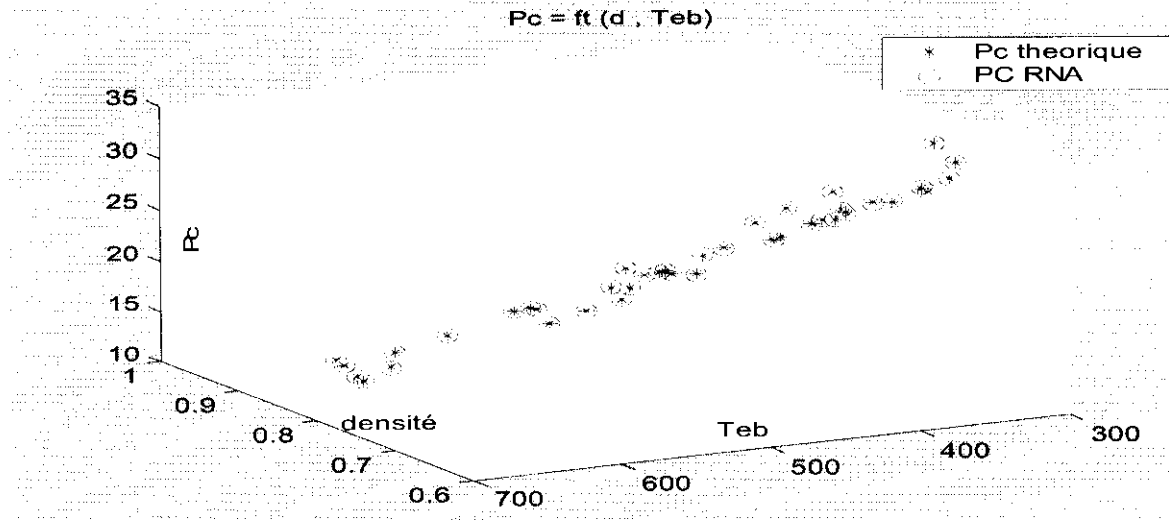
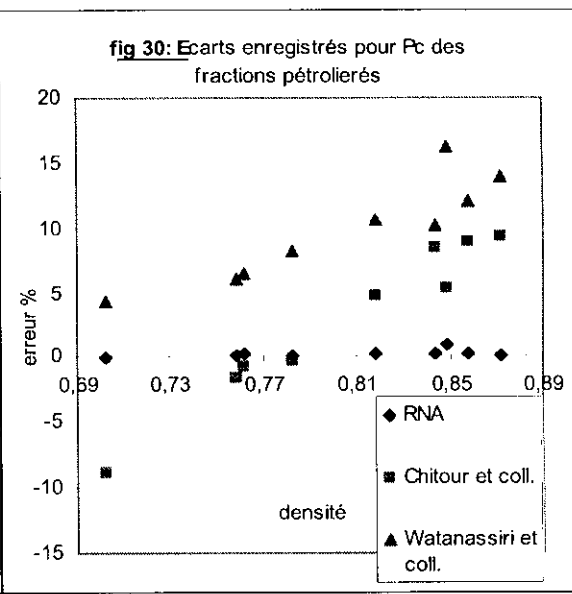
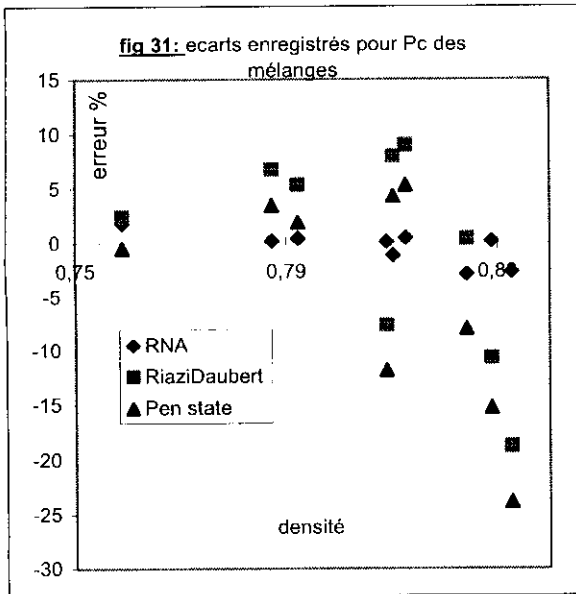


fig 29 : Résultat de l'apprentissage de la pression critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**f) Volume critique :**

L'examen du tableau 18 qui présente les écarts enregistrés pour les trois familles d'hydrocarbures purs étudiées par rapport à la référence ainsi que les erreurs obtenues par d'autres méthodes citées par la littérature, nous permet de dire qu'en général notre méthode et celle de Chitour et coll. fournissent des résultats du même ordre que la référence, cependant l'écart moyen de Wattanasisi et coll. reste tout acceptable puisque il est de l'ordre de 8%.

La représentation graphique de la simulation du volume critique est donnée en figures 32 et 33, pour les mélanges d'hydrocarbures et les fractions pétrolières, ces deux figures démontrent l'ajustement parfait entre les données de la base d'apprentissage et les résultats trouvés par les réseaux établis.

### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

Pour les mélanges, la comparaison des résultats obtenus par les RNA avec ceux obtenus en appliquant la règle de Kay aux données de tables démontre une parfaite concordance entre la théorie et la méthode proposée selon la fig 34, quant aux deux autres corrélations, elle fournissent des écarts moyens du même ordre de 3,5% .

En suivant la même procédure de calcul que pour les autres propriétés déjà citées, nous avons appliqué le modèle choisi aux fractions de la banque de test. Les résultats regroupés en tableau 20, représentés en figure 35, les trois méthodes donnent des écarts du même ordre et qui est de 3%.

#### ▪ corps purs

N-parafines	Vc théorique	RNA	Erreur %	Watanasiri et coll.	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %
C7	432,000	433,94	0,45023	461,430	6,813	431,951	0,011
C13	770,000	755,52	1,87974	843,710	9,573	766,232	0,489
C20	1150,000	1143,7	0,54304	1267,62	10,228	1156,22	0,541
C27	1547,500	1527,7	1,27838	1663,99	7,528	1546,22	0,083
			<b>1,03800</b>		<b>8,535</b>		<b>0,281</b>
n-alkylbenzene	Vc théorique	RNA	Erreur %	Watanasiri et coll.	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %
C7	316,000	317,960	0,62025	318,15610	0,6823	325,19577	2,910
C13	660,000	664,330	0,65606	658,73736	0,1913	659,63808	0,055
C20	1047,500	1051,62	0,39332	1075,1547	2,6401	1049,820	0,222
C27	1439,500	1438,35	0,07989	1506,1150	4,6277	1440,0034	0,035
			<b>0,437</b>		<b>2,03</b>		<b>0,805</b>
n-Alkylcyclohexane	Vc théorique	RNA	Erreur %	Watanasiri et coll.	Erreur %	Riazi Daubert	Erreur %
C7	368,0000	364,821	0,86383	386,7413	5,0927	361,9312	1,649
C13	696,5000	697,130	0,09055	726,2327	4,2689	697,3796	0,126
C20	1088,5000	1087,04	0,13395	1144,9391	5,1850	1088,7362	0,022
C27	1480,5000	1484,01	0,23760	1577,9069	6,5793	1480,0927	0,028
			<b>0,331</b>		<b>5,28</b>		<b>0,453</b>

**Tableau 1 8:** Résultats et comparaison volume critique des corps purs

#### ▪ Mélanges

M	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Wantanasiri et coll.	Erreur %
3	385,88	0,759	347,4	339,223	2,35	351,08	1,059	355,65	2,37
7	444,37	0,7873	535	533,79	0,23	544,16	1,712	533,6	0,26
37	423,44	0,7922	470,45	472,24	0,38	476,95	1,382	486,27	3,36
31	523,38	0,809	746,3	749,91	0,48	645,53	13,503	658,53	11,8
17	497,47	0,8102	658,8	661,038	0,34	677,38	2,820	684,07	3,84
44	477,07	0,8126	592,25	594,04	0,30	604,157	2,010	614,24	3,71
20	604,93	0,8242	1025,4	1020,4	0,49	1023,58	0,177	1057,1	3,09
50	666,018	0,8289	1299,6	1306,43	0,53	1256,15	3,343	1317,22	1,36
28	685,28	0,8327	1404,9	1407,05	0,15	1335,23	4,959	1396,94	0,57
					<b>0,58</b>		<b>3,441</b>		<b>3,37</b>

**Tableau 19 :** Résultats et comparaison du volume critique des mélanges

▪ fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Riazi et el sahhaf	Erreur %
10	365,65	0,7027	421,3	438,577	4,10	438,10	3,99	438,5	4,08
20	426,15	0,7623	526,2	543,244	3,24	552,20	4,94	544,3	3,44
24	483,15	0,7826	677,3	697,721	3,02	659,00	2,70	683,6	0,93
30	425,65	0,7584	528,4	546,481	3,42	552,70	4,60	545,8	3,29
36	558,15	0,8185	902,0	942,60	4,50	911,60	1,06	905,1	0,34
40	552,59	0,8436	838,7	877,36	4,61	863,70	2,98	863,1	2,91
46	598,15	0,8578	1000,8	1049,62	4,88	1019,50	1,87	1013,1	1,23
47	638,15	0,8721	1157,3	1212,16	4,74	1174,00	1,44	1157,7	0,03
50	668,15	0,8487	1372,8	1414,52	3,04	1213,80	11,6	1195,6	12,9
					<b>3,95</b>		<b>3,91</b>		<b>3,24</b>

**Tableau 20 :** Résultats et comparaison volume critique des fractions pétrolières

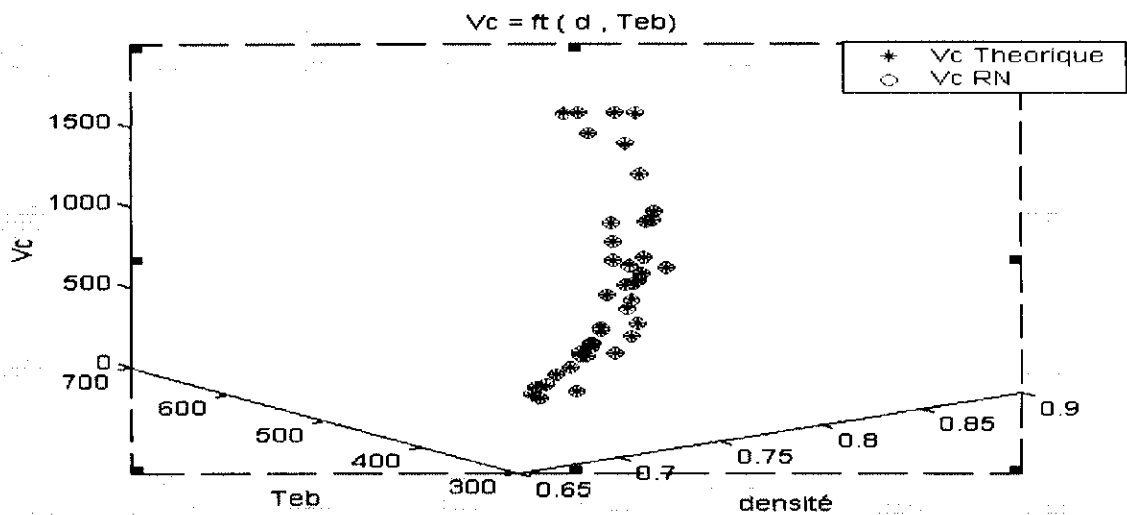


fig 32 : Résultat de l'apprentissage du volume critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition

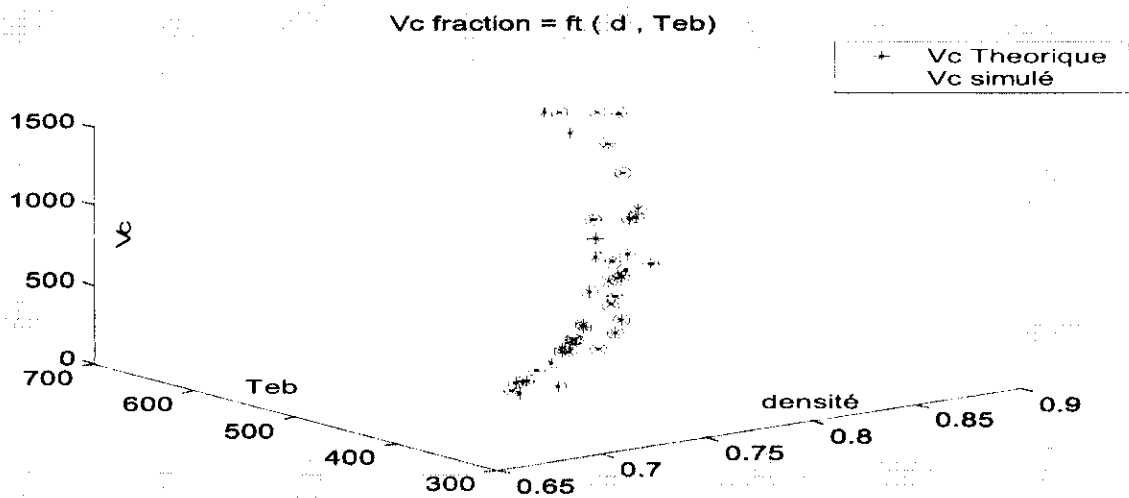
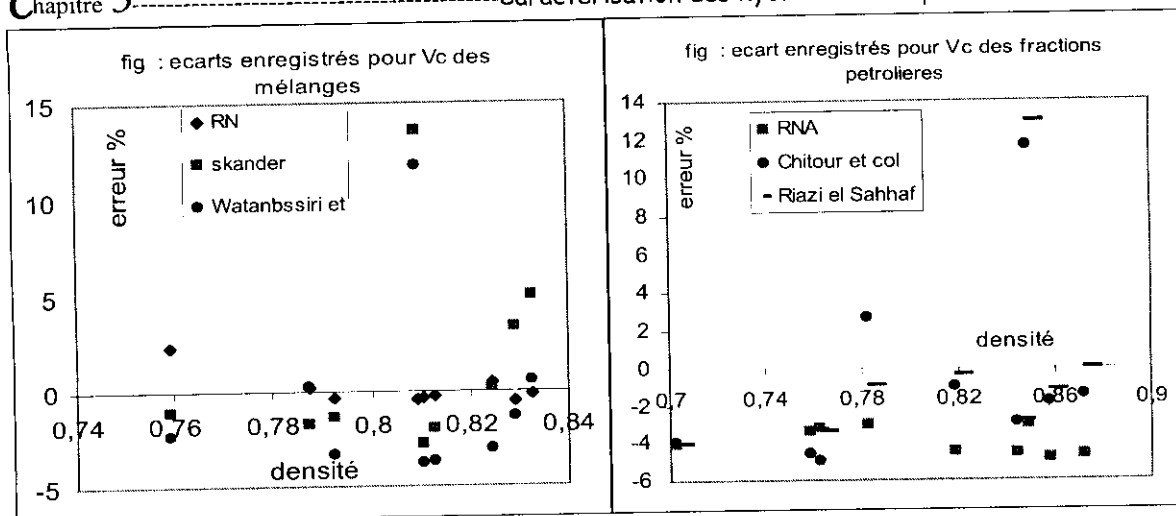


fig 33 : Résultat de l'apprentissage du volume critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**g) Facteur de compressibilité critique**

Dans le tableau 21, nous avons comparé la méthode proposée avec d'autres méthodes de calcul, le réseau établi pour l'estimation du facteur de compressibilité critique des hydrocarbures purs permet un bon lissage des données de référence avec des écarts moyens ne dépassant pas 1%.

L'examen du tableau 22 et de la figure 38 montre que notre méthode donne des écarts relativement faibles par rapport à la théorie, parmi les autres méthodes proposées Chitour et coll. se rapproche des valeurs de référence par contre la méthode d'Edmister a fourni des écarts acceptables uniquement pour les mélanges légers, elle atteint 20% pour les moyennement lourds.

Pour les fractions pétrolière nous avons considéré comme référence la méthode de Riazi Daubert nous avons remarqué le phénomène inverse se produire c'est la méthode d'Edmister qui se rapproche le plus de la référence avec notre méthode et celle de Chitour et coll. reste plus ou moins valable pour les fraction légères.

▪ corps purs

N-parafines	Zc théorique	RNA	Erreur %	Lee Kesler	Erreur %	Edmister	Erreur %
C7	0,263	0,2623	0,266	0,2524	4,035	0,262	0,228
C13	0,236	0,2346	0,593	0,2352	0,319	0,242	2,585
C20	0,190	0,1866	1,789	0,2133	23,815	0,223	17,105
C27	0,151	0,1506	0,265	0,1893	41,260	0,205	35,762
			<b>0,7284</b>		<b>17,357</b>		<b>13,920</b>
n-alkylbenzene	Zc théorique	RNA	Erreur %	Leekesler	Erreur %	Edmister	Erreur %
C7	0,2640	0,2632	0,30303	0,265970	0,7462	0,30923	17,136
C13	0,2440	0,2408	1,31148	0,241834	0,8875	0,32022	31,241
C20	0,2018	0,2043	1,23885	0,215393	6,7363	0,32967	63,367
C27	0,166	0,1655	0,30120	0,220610	32,8977	0,336511	102,718
			<b>0,78</b>		<b>10,31</b>		<b>53,00</b>
n-Alkylcyclohexane	Zc théorique	RNA	Erreur %	Leekesler	Erreur %	Edmister	Erreur %
C7	0,2640	0,2632	0,30303	0,2660	0,7462	0,2711	2,689
C13	0,2440	0,2408	1,31148	0,2418	0,8875	0,2505	2,664
C20	0,2018	0,2043	1,23885	0,2154	6,7363	0,2317	14,817
C27	0,1660	0,1655	0,30120	0,2206	32,8977	0,2036	22,663
			<b>0,78864</b>		<b>10,3169</b>		<b>10,708</b>

**Tableau 21 : Résultats et comparaison Facteur de compressibilité critique des corps purs**

▪ Mélanges

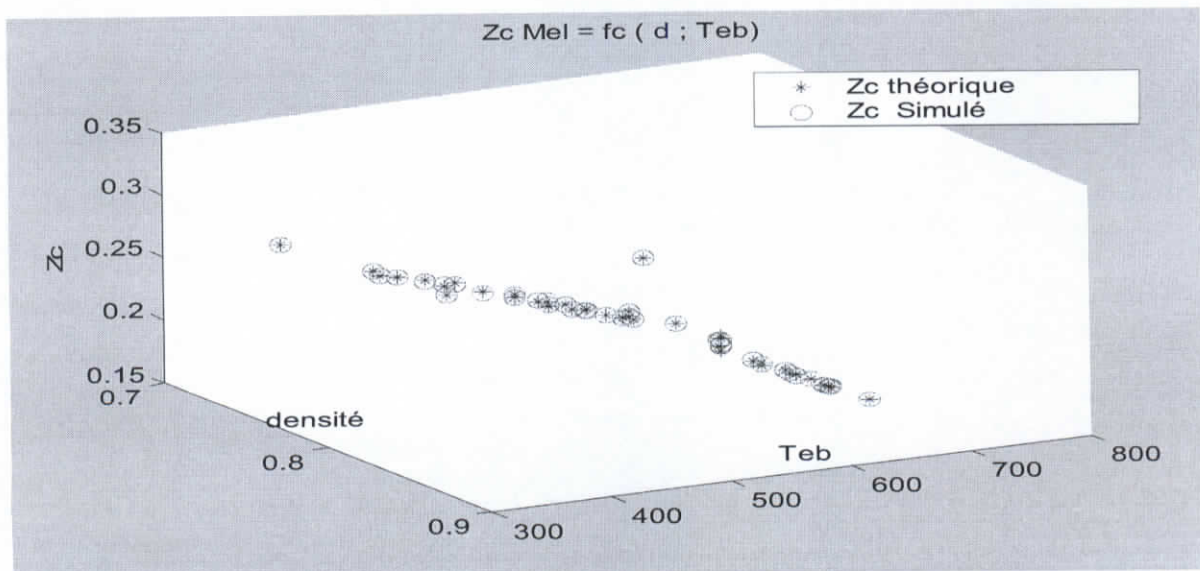
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Edmister	Erreur %	Chitour et Coll.	erreur %
3	385,88	0,759	0,268	0,26798	0,007	0,2689	0,336	0,2657	0,858
7	444,37	0,7873	0,252	0,2538	0,714	0,2626	4,206	0,2515	0,198
37	423,44	0,7922	0,259	0,2575	0,579	0,2658	2,625	0,2572	0,695
31	489,05	0,809	0,234	0,232	0,855	0,2558	9,316	0,2413	3,120
17	497,47	0,8102	0,24	0,242	0,833	0,2549	6,208	0,2399	0,042
44	477,07	0,8126	0,248	0,2472	0,323	0,2599	4,798	0,2466	0,565
20	604,93	0,8242	0,202	0,2078	2,871	0,2245	11,139	0,2019	0,050
50	666,018	0,8289	0,175	0,1737	0,743	0,1975	12,857	0,1779	1,657
28	685,28	0,8327	0,165	0,1657	0,424	0,1812	9,818	0,1703	3,212
					<b>0,817</b>		<b>6,812</b>		<b>1,1551</b>

**Tableau 22 :** Résultats et comparaison du facteur de compressibilité critique des mélanges

▪ Fractions Pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Edmister	Erreur %
10	365,65	0,7027	0,274	0,2732	0,29	0,261	4,74	0,265	3,28
20	426,15	0,7623	0,257	0,25656	0,17	0,254	1,17	0,258	0,39
24	483,15	0,7826	0,242	0,24253	0,22	0,241	0,41	0,249	2,89
30	425,65	0,7584	0,256	0,25611	0,04	0,254	0,78	0,257	0,39
36	558,15	0,8185	0,231	0,23155	0,24	0,218	5,63	0,221	4,33
40	552,59	0,8436	0,234	0,23457	0,24	0,222	5,13	0,225	3,85
46	598,15	0,8578	0,230	0,22894	0,46	0,205	10,87	0,232	0,87
47	638,15	0,8721	0,227	0,22752	0,23	0,188	17,18	0,224	1,32
50	668,15	0,8487	0,224	0,22311	0,40	0,184	17,86	0,223	0,45
					<b>0,25</b>		<b>7,09</b>		<b>1,97</b>

**Tableau 23 :** Résultats et comparaison du facteur de compressibilité critique des fractions pétrolières



**fig 36 :** Résultat de l'apprentissage du facteur de compressibilité critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition

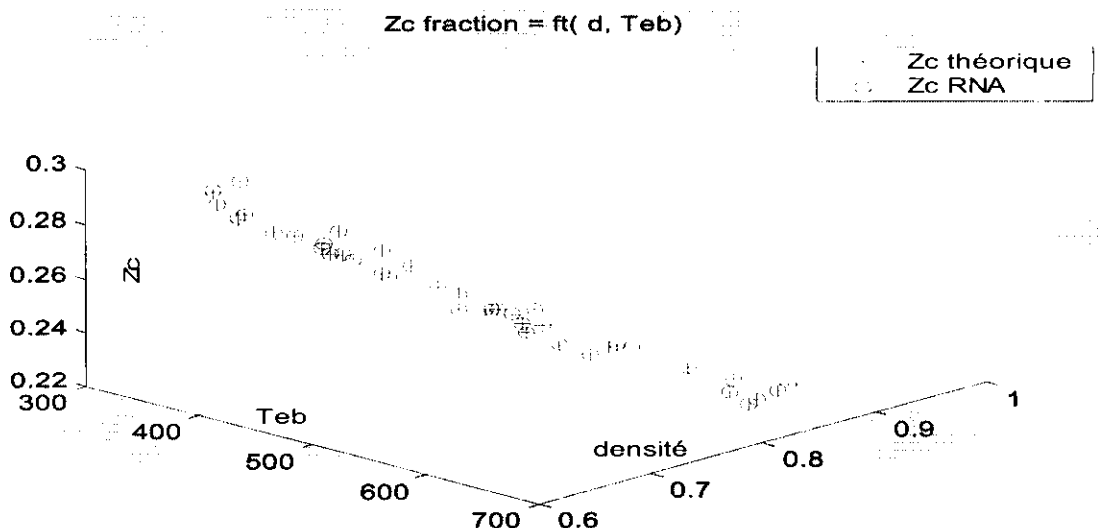
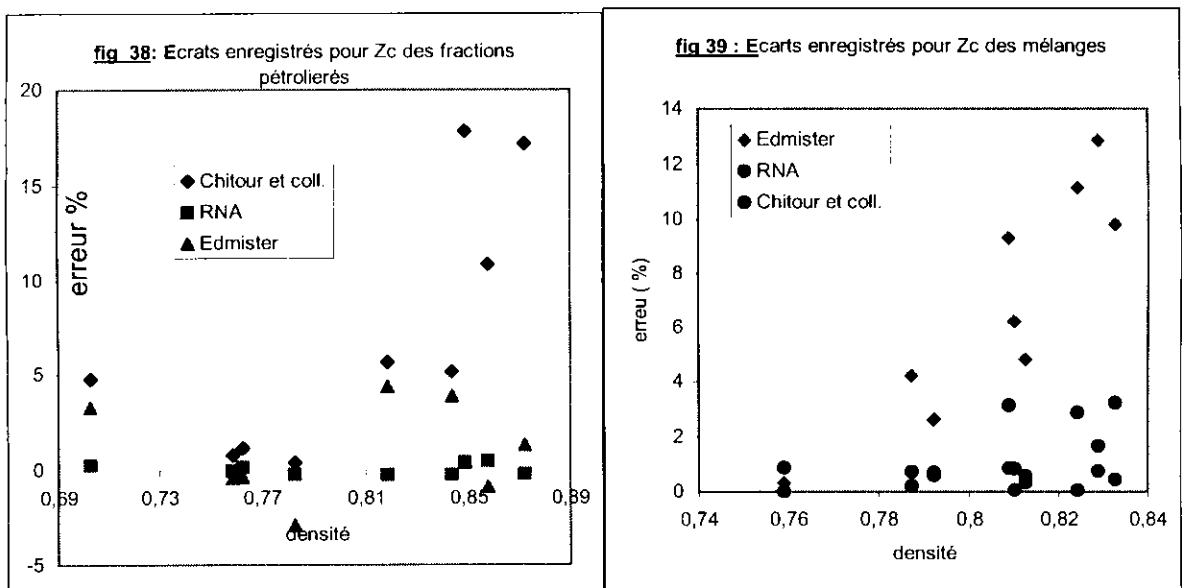


fig 37 : Résultat de l'apprentissage du facteur de compressibilité critique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



### h) Enthalpie de vaporisation

Les résultats obtenus lors de la simulation de notre base de test sont très satisfaisants, l'erreur moyenne pour les trois familles ne dépasse pas 2.5%, la comparaison avec d'autres corrélations de la bibliographie est résumée par les écarts enregistrés dans le tableau 24, l'examen de ce dernier nous permet de voir que l'équation de Zeidelkhir donne des écarts assez importants en particulier dans le cas des hydrocarbures lourds.

Les chaleurs latentes de vaporisation des mélanges d'hydrocarbures de composition connue ont été estimées moyennant la méthode proposée ainsi que d'autres méthodes empiriques, en

### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

comparant les résultats voir figure 42, nous remarquons une très bonne concordance entre les valeurs trouvées par les RNA et celles de référence.

Pour les fractions pétrolières, nous avons comparé les résultats obtenus par RNA avec ceux trouvés par la méthode de Riazi Daubert qui a été prise comme référence et d'autres résultats fournis par Chitour et coll. et Nert Bingham, la figure 43 montre en terme d'écart moyen que ces dernières sont équivalentes. Notre méthode se rapproche plus de la méthode de référence, l'erreur reste constante et ne dépasse pas 0.1% pour chaque fraction prise dans la base de test.

#### ▪ corps purs

N-parafines	Hv théorique	RNA	Erreur %	Zeidelkhir	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	31,700	31,689	0,035	31,668	0,101	32,006	0,965
C13	44,700	45,538	1,87472	45,648	2,121	44,277	0,946
C20	52,600	53,503	1,71673	57,466	9,251	53,233	1,203
C27	59,600	60,340	1,24161	67,606	13,433	59,628	0,047
			<b>1,21700</b>		<b>6,22</b>		<b>0,791</b>
n-alkylbenzene	Hv théorique	RNA	Erreur %	Zeidelkhir	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	33,180	33,6200	1,32610	33,08259	0,2936	32,05	3,4
C13	45,190	45,5600	0,81877	45,52768	0,7473	43,55	3,6
C20	53,360	53,3446	0,02886	57,14344	7,0904	51,34	3,78
C27	58,930	58,9281	0,00322	62,04103	5,0362	56,437	4,23
			<b>0,544</b>		<b>3,3005</b>		<b>3,75</b>
n-Alkylcyclohexane	Hv théorique	RNA	Erreur %	Zeidelkhir	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	31,1300	28,3132	9,04851	31,6681	1,7285	32,0055	2,812
C13	43,7700	43,8626	0,21156	45,6478	4,2902	44,2772	1,159
C20	51,1500	51,2159	0,12884	57,4656	12,3472	53,2331	4,073
C27	56,2900	56,3225	0,05774	67,6063	20,1036	59,6279	5,930
			<b>2,36</b>		<b>9,61</b>		<b>3,49</b>

**Tableau 24 :** Résultats et comparaison enthalpie de vaporisation des corps purs

#### ▪ Mélange

m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Nerst	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
3	385,88	0,7590	30,5	30,58	0,26	39,58	29,8	30,69	0,6
7	444,37	0,7873	38,5	38,62	0,31	51,29	33,2	38,83	0,9
37	423,44	0,7922	36,58	36,69	0,30	50,37	37,7	37,11	1,4
31	523,38	0,8090	45,2	45,03	0,38	53,86	19,2	42,36	6,3
17	497,47	0,8102	42,9	43,14	0,56	53,99	25,9	43,27	0,9
44	477,07	0,8126	41,28	41,303	0,06	53,97	30,7	41,7	1,0
20	604,93	0,8242	51,2	51,46	0,51	52,87	3,3	51,25	0,1
50	666,018	0,8289	55,4	56,175	1,40	50,98	8,0	55,14	0,5
28	685,28	0,8327	57	57,623	1,09	50,469	11,5	56,28	1,3
					<b>0,54</b>		<b>22,1</b>		<b>1,4</b>

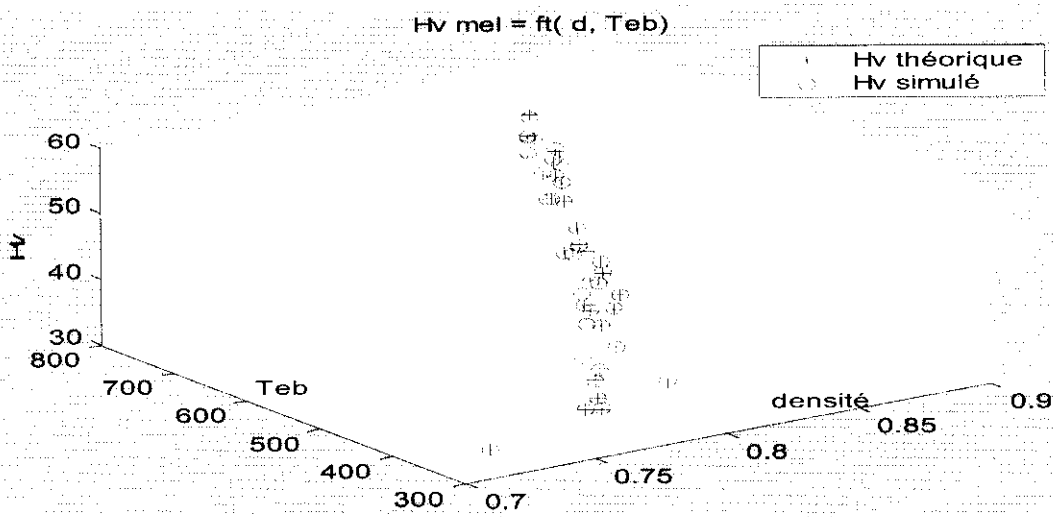
**Tableau 25 :** Résultats et comparaison enthalpie de vaporisation des mélanges



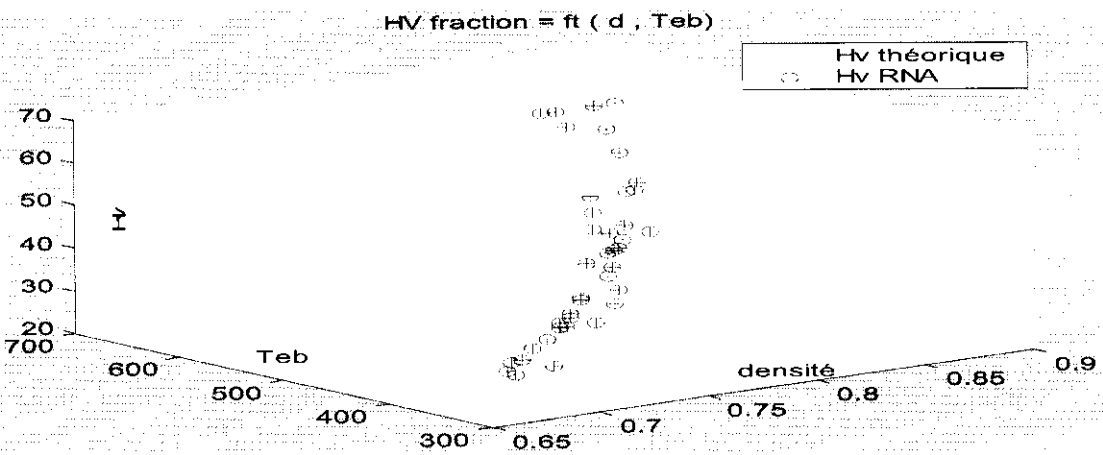
▪ Fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Nerst Binham	Erreur %
10	365,65	0,7027	31,2	31,110	0,29	33,20	6,41	32,20	3,21
20	426,15	0,7623	37,2	37,110	0,24	38,10	2,42	38,70	4,03
24	483,15	0,7826	42,9	42,855	0,11	42,80	0,23	45,10	5,13
30	425,65	0,7584	37,1	37,067	0,09	38,10	2,70	38,60	4,04
36	558,15	0,8185	50,6	50,557	0,09	48,20	4,74	54,00	6,72
40	552,59	0,8436	50,1	49,979	0,24	47,10	5,99	53,40	6,59
46	598,15	0,8578	54,8	54,710	0,16	50,50	7,85	59,00	7,66
47	638,15	0,8721	59	58,935	0,11	53,30	9,66	64,10	8,64
50	668,15	0,8487	62,2	62,081	0,19	56,50	9,16	68,10	9,49
					0,17		5,46		6,17

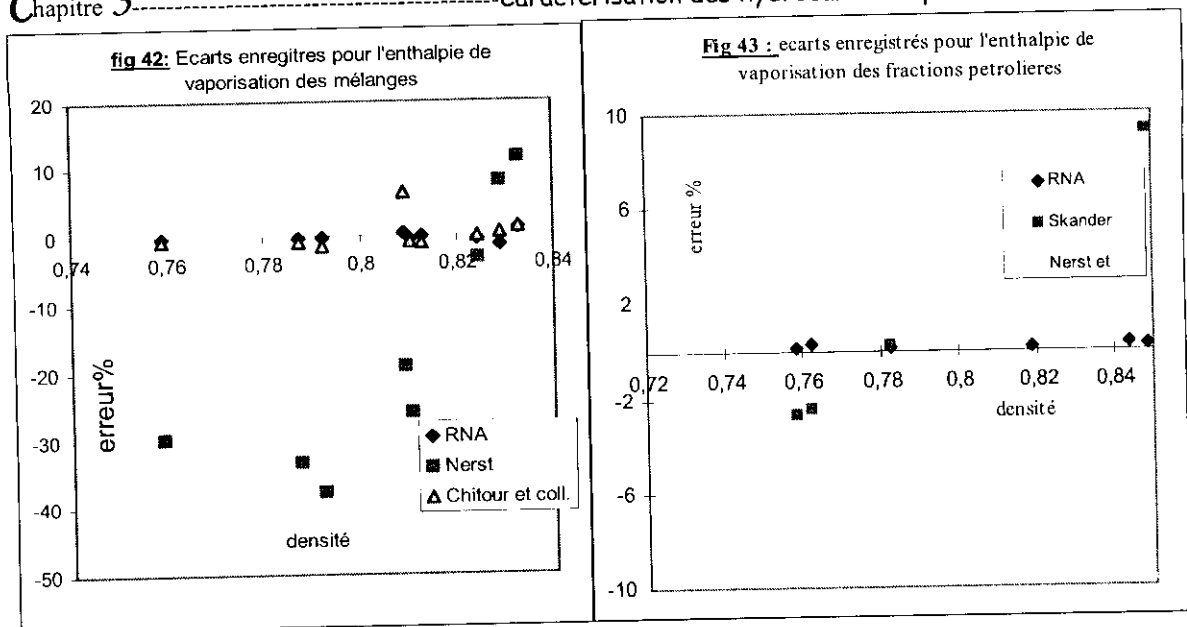
**Tableau 26 :** Résultats et comparaison de l'enthalpie de vaporisation des fractions pétrolières



**fig 40 :** Résultat de l'apprentissage de l'enthalpie de vaporisation en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**fig 41 :** Résultat de l'apprentissage de l'enthalpie de vaporisation en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**i) Facteur de caractérisation :**

En appliquant notre méthode aux mélanges de la base de test nous obtenons des résultats très proches de ceux trouvés en appliquant l'additivité du facteur Kuop des tables de référence, les écarts obtenus par différentes méthodes sont représentés en figure 45.

L'examen du tableau 29 qui regroupe les résultats obtenus par différentes méthodes et comparés à la référence ( définition du Kuop) montre que notre méthode donne une erreur inférieure à 0.1% ce qui traduit donc la fiabilité du modèle proposé.

▪ Corps purs

N- paraffines	Koup DiPPR	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Bouamara	Erreur %
C7	10,160	10,2000	0,39370	10,21521	0,5435	10,20491	0,442
C13	11,360	11,3270	0,29049	11,38668	0,2349	11,41267	0,464
C20	12,120	12,0810	0,32178	12,20087	0,6672	12,18101	0,503
C27	12,590	12,5346	0,44003	12,78424	1,5428	12,65286	0,499
			<b>0,361</b>		<b>0,747</b>		<b>0,477</b>
n-alkylbenzene	Koup DiPPR	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Bouamara	Erreur %
C7	11,3200	11,3348	0,13074	12,7115	12,2922	11,4109	0,803
C13	11,9800	11,9879	0,06594	12,7445	6,3813	11,8917	0,737
C20	12,5500	12,5467	0,02629	13,0626	4,0843	12,2595	2,315
C27	12,9300	12,9234	0,05104	13,3026	2,8819	12,5174	3,191
			<b>0,06</b>		<b>6,4</b>		<b>1,76</b>
n- Alkylcyclohexane	Koup DiPPR	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Bouamara	Erreur %
C7	12,697		0,05516	12,711	0,165	11,402	10,150
C13	12,751		0,07053	12,744	0,125	11,860	7,053
C20	13,043		0,05364	13,063	0,100	12,222	6,345
C27	13,307		0,02630	13,303	0,053	12,483	6,213
			<b>0,05100</b>		<b>0,111</b>		<b>7,440</b>

**Tableau 27 :** Résultats et comparaison facteur de caractérisation des corps purs

▪ Mélanges

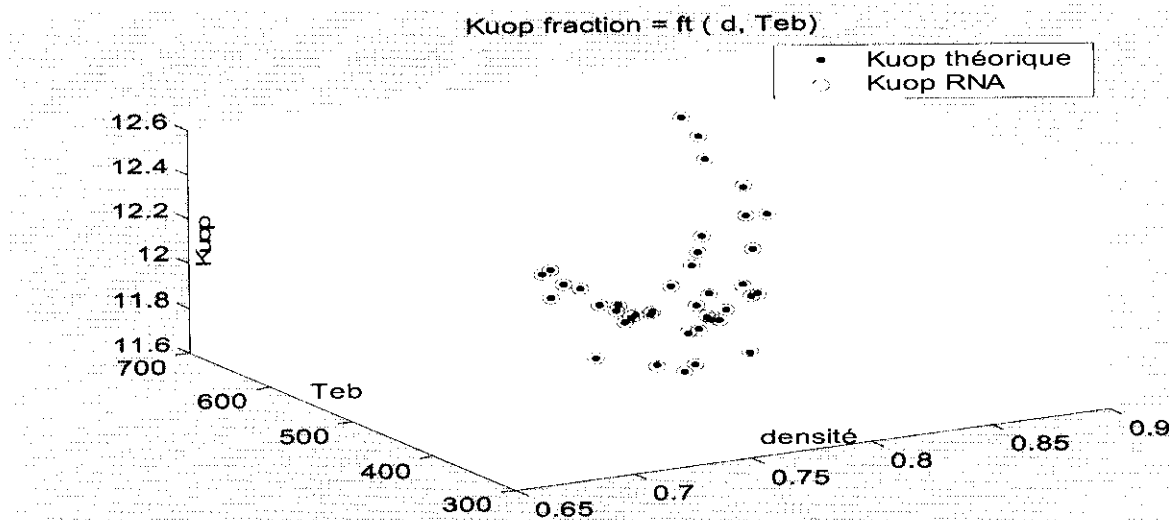
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Whitson	Erreur %
3	358,67	0,75	11,5	11,573	0,63	11,56	0,52	11,39	0,96
7	444,146	0,781	11,8	11,782	0,15	11,93	1,10	11,79	0,08
37	422,464	0,7892	11,5	11,47	0,26	11,55	0,43	11,53	0,26
31	533,537	0,8034	12,1	12,14	0,33	12,11	0,08	11,84	2,15
17	497,27	0,8046	11,9	11,89	0,08	12,08	1,51	11,89	0,08
44	476,595	0,8113	11,6	11,80	1,72	11,75	1,29	11,69	0,78
20	607,325	0,8221	12,5	12,47	0,24	12,56	0,48	12,48	0,16
50	665,475	0,8286	12,79	12,82	0,23	12,81	0,16	12,81	0,16
28	684,56	0,8278	12,9	12,94	0,31	12,92	0,16	12,88	0,16
					<b>0,44</b>		<b>0,64</b>		<b>0,53</b>

**Tableau 28 :** Résultats et comparaison du facteur de caractérisation des mélanges

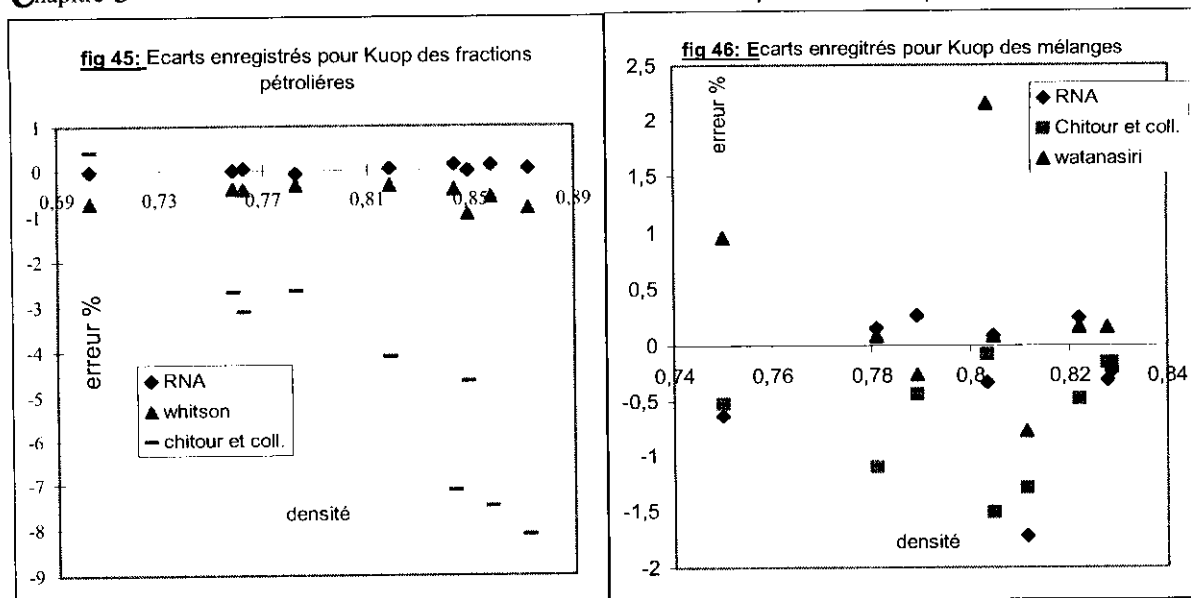
▪ Fraction pétrolière

fraction	Teb	densité	Valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Whitson	Erreur %
10	365,65	0,7027	12,29	12,2939	0,03	12,24	0,41	12,38	0,73
20	426,15	0,7623	11,94	11,9354	0,04	12,31	3,10	11,99	0,42
24	483,15	0,7826	12,12	12,1293	0,08	12,44	2,64	12,16	0,33
30	425,65	0,7584	11,99	11,9911	0,01	12,31	2,67	12,04	0,42
36	558,15	0,8185	12,17	12,1661	0,03	12,67	4,11	12,21	0,33
40	552,59	0,8436	11,78	11,7641	0,13	12,62	7,13	11,83	0,42
46	598,15	0,8578	11,89	11,8756	0,12	12,78	7,49	11,96	0,59
47	638,15	0,8721	11,95	11,9453	0,04	12,92	8,12	12,05	0,84
50	668,15	0,8487	12,47	12,4724	0,02	13,05	4,65	12,59	0,96
					<b>0,06</b>		<b>4,48</b>		<b>0,56</b>

**Tableau 29 :** Résultats et comparaison du facteur de caractérisation des fractions pétrolières



**fig. 44 :** Résultat de l'apprentissage du facteur de caractérisation en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**j) Facteur acentrique :**

Les résultats que regroupe ce tableau N° 30 de comparaison du facteur acentrique des trois familles fournissent un écart moyen de l'ordre de 2% pour notre méthode, l'erreur moyenne de l'équation d'Edmister est toujours du même ordre, elle est de 10% ce qui est relativement élevé, mais la corrélation de Chitour et coll. a tendance à se rapprocher le plus des valeurs du facteur acentrique des n-alkylbenzene.

En prenant comme référence les valeurs des facteurs acentriques calculés en appliquant la règle d'additivité aux données des tables, nous avons obtenu des écarts faibles dans le cas de notre méthode de l'ordre de 0.7% et variables pour les autres méthodes, il est de l'ordre de 3.7% et 7.5 %, les écarts sont plus importants dans le cas des mélanges lourds voir la figure 49.

Nous avons considéré comme référence l'équation Leekesler, et évalué les écarts pour différentes méthodes ( voir figure 50 ), la méthode a enregistré des écarts moyens acceptables par rapport à la référence , il en est de même pour Chitour et Coll. et l'équation d'Edmister ( voir le tableau 32).

▪ Corps purs

N- paraffine	W DiPPR	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Edmister	Erreur %
C7	0.3506	0.340	3.023	0.396	12.5	0.445	26.925
C13	0.5974	0.607	1.60	0.640	7.131	0.605	1.272
C20	0.8863	0.900	1.545	0.927	4.59	0.822	7.255
C27	1.1537	1.180	2.2882	1.213	5.14	1.073	6.995
			<b>2.116</b>		<b>7.453</b>		<b>9.61</b>
n-alkylbenzene	W DiPPR	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Edmister	Erreur %
C7	0.257	0.253	1.556	0.2559	0.395	0.285	11.26
C13	0.518	0.512	1.158	0.518	0.133	0.537	3.79
C20	0.812	0.801	1.354	0.811	0.07	0.799	1.58
C27	1.085	1.067	1.658	1.085	0.03	0.738	31.97
			<b>1.432</b>		<b>0.157</b>		<b>12.155</b>

**Tableau 30:** Résultats et comparaison du facteur acentrique des corps purs

▪ Mélanges

m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Leekesler	Erreur %
3	385,88	0,759	0,261	0,2697	3,33	0,2619	0,34	0,2364	9,43
7	444,37	0,7873	0,388	0,3950	1,80	0,3953	1,88	0,3915	0,90
37	423,44	0,7922	0,347	0,3350	3,46	0,354	2,02	0,3418	1,50
31	523,38	0,809	0,553	0,539	2,53	0,4766	13,82	0,4733	14,41
17	497,47	0,8102	0,476	0,4883	2,58	0,5042	5,92	0,4924	3,45
44	477,07	0,8126	0,439	0,4640	5,69	0,4472	1,87	0,4413	0,52
20	604,93	0,8242	0,757	0,7759	2,50	0,7584	0,18	0,7768	2,62
50	666,018	0,8289	0,953	0,9736	2,16	0,9239	3,05	1,1287	18,44
28	685,28	0,8327	1,028	1,0400	1,17	0,981	4,57	1,177	14,49
					<b>2,80</b>		<b>3,74</b>		<b>7,31</b>

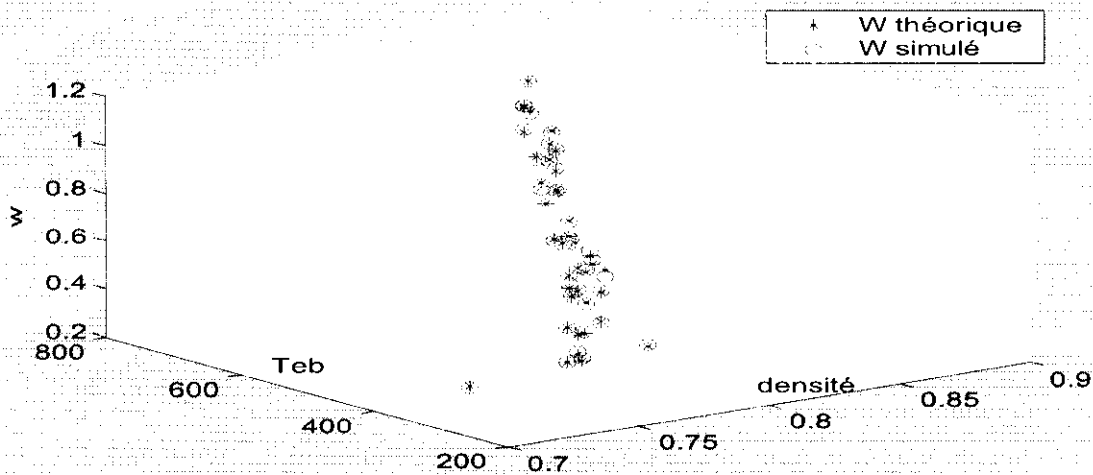
**Tableau 31 :** Résultats et comparaison facteur acentrique des mélanges

▪ Fractions pétrolières

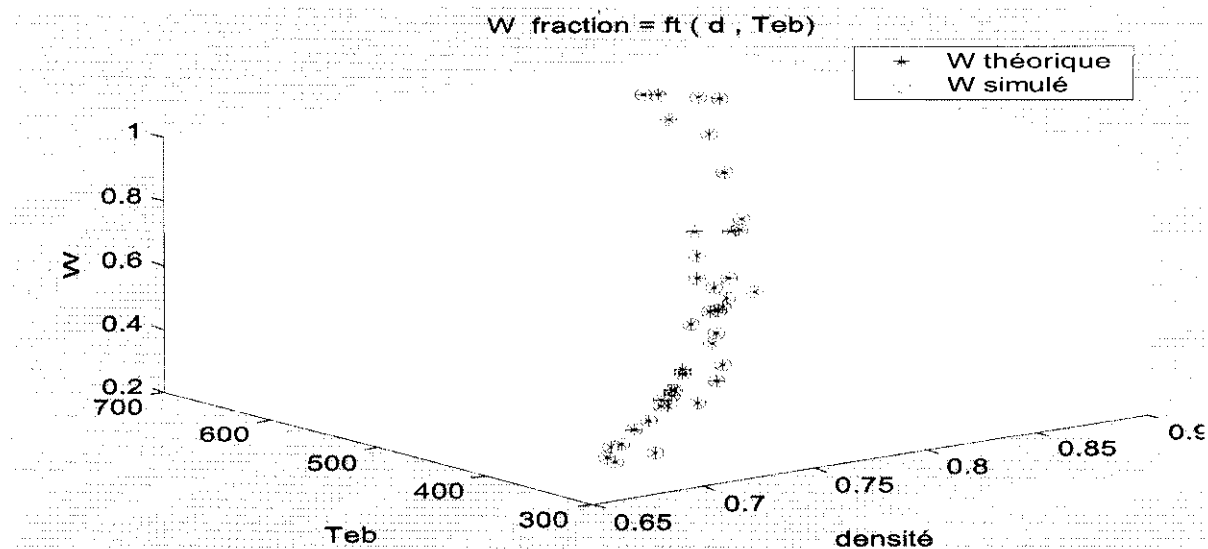
FP	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Edmister	Erreur %
10	365,65	0,7027	0,319	0,322	0,84	0,333	4,39	0,325	1,88
20	426,15	0,7623	0,418	0,421	0,72	0,417	0,24	0,418	-
24	483,15	0,7826	0,543	0,547	0,71	0,521	4,73	0,53	2,39
30	425,65	0,7584	0,419	0,423	0,97	0,417	0,48	0,419	-
36	558,15	0,8185	0,714	0,719	0,68	0,680	4,76	0,681	4,62
40	552,59	0,8436	0,668	0,673	0,75	0,650	2,69	0,643	3,74
46	598,15	0,8578	0,783	0,788	0,64	0,762	2,68	0,742	5,24
47	638,15	0,8721	0,885	0,891	0,68	0,870	1,69	0,831	6,10
50	668,15	0,8487	1,013	1,017	0,36	0,989	2,37	0,946	6,61
					<b>0,70</b>		<b>2,67</b>		<b>3,40</b>

**Tableau 32 :** Résultats et comparaison facteur acentrique des fractions pétrolières

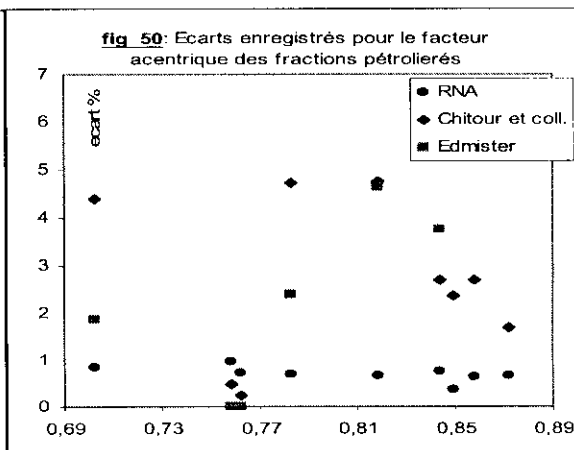
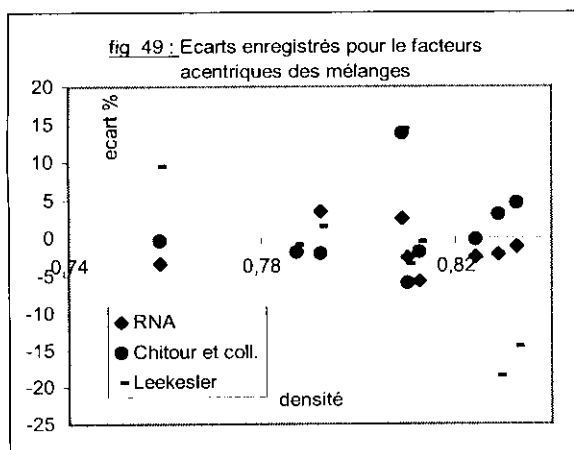
$$W_{\text{mel}} = f_t(d, \text{Teb})$$



**fig 47 :** Résultat de l'apprentissage du facteur de acentrique en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**fig 48** : Résultat de l'apprentissage du facteur acentrique fonction de la densité et de la température d'ébullition



**k) Indice de réfraction :**

Pour les corps purs, nous remarquons que pour cette propriété les écarts les plus faibles sont ceux fournis par la corrélation de Chitour et coll. suivie de très près des résultats obtenus par notre méthode.

Quant aux mélanges d'hydrocarbures purs notre méthode et celle de Lipkin Martin sont du même ordre et la corrélation de Chitour et coll. se rapproche le plus de la référence.

L'application des RNA aux fractions pétrolières, les résultats obtenus par cette dernière méthode ainsi que quelques méthodes de la littérature sont comparés aux valeurs expérimentales comme le montre la figure 53, la méthode de Lipkin Martin et notre méthode donnent des écarts du même ordre. Les écarts les plus élevés sont enregistrés par la corrélation de Chitour et coll. toutefois ils ne dépassent pas 2%

▪ Corps purs

N- paraffines	n20 DiPPR	RNA	Erreur %	Lipkin	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	1,3876	1,3892	0,11531	1,38724	0,026	1,3876	0,003
C13	1,4256	1,4280	0,16835	1,42500	0,042	1,4256	0,000
C20	1,4425	1,4459	0,23570	1,44187	0,044	1,4426	0,005
C27	1,4510	1,4540	0,20675	1,45035	0,045	1,4509	0,004
			<b>0.181</b>		<b>0.039</b>		<b>0.003</b>
n-alkylbenzene	n20 DiPPR	RNA	Erreur %	Lipkin	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	1,497	1,5001	0,21378	1,45951	2,4981	1,48328	0,910
C13	1,485	1,4942	0,59243	1,46686	1,2484	1,49055	0,347
C20	1,482	1,4926	0,72884	1,46994	0,8004	1,49008	0,559
C27	1,480	1,4924	0,81059	1,47155	0,5980	1,48874	0,563
			<b>0.58</b>		<b>1.28</b>		<b>0.59</b>

**Tableau 33 :** Résultats et comparaison de l'indice de réfraction des corps purs

▪ Mélanges

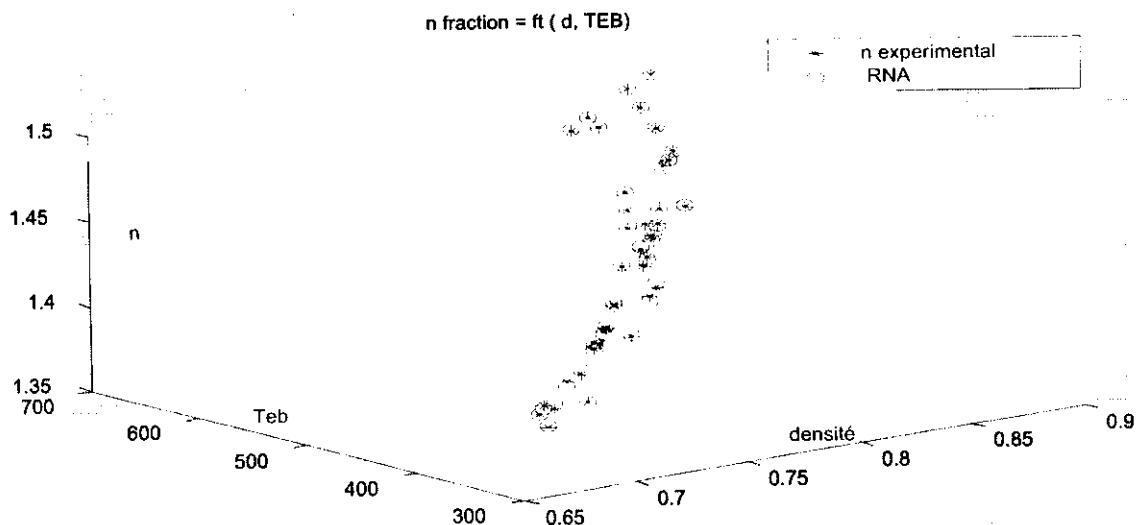
m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Linpin	Erreur %
3	385,88	0,759	1,4226	1,4128	0,69	1,4213	0,09	1,41580	0,48
7	444,37	0,7873	1,4384	1,4432	0,33	1,4377	0,05	1,43500	0,24
37	423,44	0,7922	1,4437	1,4235	1,40	1,4482	0,31	1,43540	0,57
31	523,38	0,809	1,4512	1,4536	0,17	1,4436	0,52	1,44630	0,34
17	497,47	0,8102	1,4513	1,4536	0,16	1,4486	0,19	1,44720	0,28
44	477,07	0,8126	1,457	1,4536	0,23	1,4566	0,03	1,44710	0,68
20	604,93	0,8242	1,4588	1,459	0,01	1,4584	0,03	1,45660	0,15
50	666,018	0,8289	1,464	1,4613	0,18	1,4628	0,08	1,45980	0,29
28	685,28	0,8327	1,4632	1,4635	0,02	1,4624	0,05	1,46180	0,10
					<b>0,36</b>		<b>0,15</b>		<b>0,35</b>

**Tableau 34 :** Résultats et comparaison de l'indice de réfraction des mélanges

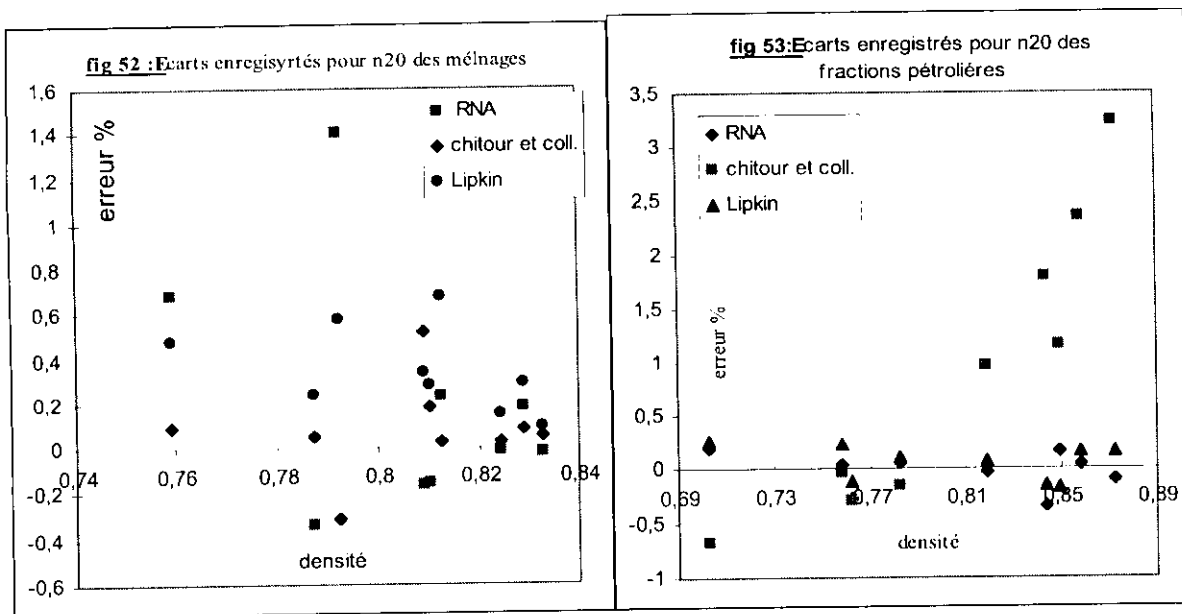
▪ Fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	expérience	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	erreur %	Linpin	Erreur %
10	365,65	0,7027	1,3995	1,3969	0,19	1,4088	0,66	1,40	0,25
20	426,15	0,7623	1,4271	1,431	0,27	1,4314	0,30	1,43	0,12
24	483,15	0,7826	1,4412	1,4405	0,05	1,4435	0,16	1,44	0,11
30	425,65	0,7584	1,43	1,4296	0,03	1,4306	0,04	1,43	0,23
36	558,15	0,8185	1,4598	1,4602	0,03	1,4457	0,97	1,46	0,06
40	552,59	0,8436	1,4715	1,4766	0,35	1,4450	1,80	1,47	0,15
46	598,15	0,8578	1,4836	1,4831	0,03	1,4487	2,35	1,48	0,16
47	638,15	0,8721	1,4913	1,4928	0,10	1,4433	3,22	1,49	0,15
50	668,15	0,8487	1,4719	1,4695	0,16	1,4548	1,16	1,47	0,17
					<b>0,13</b>		<b>1,19</b>		<b>0,16</b>

**Tableau 35 :** Résultats et comparaison de l'indice de réfraction des fractions pétrolières



**fig 51:** Résultat de l'apprentissage de l'indice de réfraction en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**D) Entropie :**

Le tableau 36 regroupe les résultats obtenus par notre modèle ainsi que ceux de la corrélation de Chitour et coll., en terme d'écart moyen on observe une augmentation de l'erreur moyenne pour un même nombre d'atomes de carbones et pour différentes familles, toutefois les résultats restent très proches des valeurs de référence.

Le calcul des entropies standards des mélanges d'hydrocarbures à 298 K a été effectué par RNA et par d'autres corrélations de la littérature, ainsi que la comparaison de ces résultats avec ceux obtenus en appliquant la règle d'additivité, pour les mêmes mélanges de la base de test. La figure 57 et le tableau 37 montrent d'une manière générale que les valeurs de Chitour et coll et Thin et coll. se rapprochent des valeurs de référence, suivies de très près par notre méthode.



### Chapitre 3-----Caractérisation des hydrocarbures par les RNA-----

Le tableau 38 regroupe les écarts enregistrés par la corrélation de Chitour et coll. et notre méthode sont pratiquement constants en les comparant à l'équation de Thin et coll. que nous avons pris comme référence (voir figure 56).

#### • Corps purs

N- paraffine	S° Théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
C7	427,780	428,340	0,13091	427,641	0,0325
C13	661,460	663,230	0,26759	661,498	0,0057
C20	934,140	937,808	0,39266	934,136	0,0004
C27	1206,790	1213,840	0,58419	1206,77	0,0017
			<b>0.34</b>		<b>0.01</b>
n-alkylbenzene	S°théorique	RNA	Erreur%	Chitour et coll.	Erreur%
C7	319,750	320,2100	0,14386	316,6434	0,9716
C13	556,850	553,4460	0,61130	557,5646	0,1283
C20	829,500	826,0730	0,41314	829,7156	0,0260
C27	1102,150	1094,1343	0,72728	1101,5340	0,0559
			<b>0.45</b>		<b>0.29</b>
n- Alkylcyclohexane	S°théorique	RNA	Erreur%	Chitour et coll.	Erreur%
C7	343,3500	337,5180	1,69856	340,948	0,6996
C13	575,3600	573,7700	0,27635	575,683	0,0561
C20	847,9900	842,5730	0,63880	847,987	0,0003
C27	1120,6500	1115,6100	0,44974	1120,506	0,0128
			<b>0.76</b>		<b>0.2</b>

**Tableau 36 :** Résultats et comparaison de l'entropie des corps purs

#### • Mélanges

m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	thin et coll	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
3	385,88	0,759	345,4	359,4864	4,08	344,3	0,3	346,8	0,41
7	444,37	0,7873	477,5	480,1125	0,55	476,4	0,2	477,1	0,08
37	423,44	0,7922	424,52	433,016	2,00	422,1	0,6	423,87	0,15
31	523,38	0,809	625,7	613,12	2,01	624,5	0,2	626,8	0,18
17	497,47	0,8102	560,6	553,64	1,24	559,7	0,2	560,7	0,02
44	477,07	0,8126	514,47	510,5861	0,75	520,3	1,1	521,58	1,38
20	604,93	0,8242	818,1	791,8104	3,21	817,2	0,1	818,3	0,02
50	666,018	0,8289	1009,99	980,62	2,91	995,68	1,4	998,32	1,16
28	685,28	0,8327	1084,9	1044,594	3,72	1084,3	0,1	1084,6	0,03
					<b>2,27</b>		<b>0,5</b>		<b>0,38</b>

**Tableau 37 :** Résultats et comparaison de l'entropie des mélanges

#### • Fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	413,2	415,320	0,51	414,300	0,3
20	426,15	0,7623	480,5	482,900	0,50	481,800	0,3
24	483,15	0,7826	574,9	584,389	1,65	576,500	0,3
30	425,65	0,7584	481,8	484,360	0,53	483,200	0,3
36	558,15	0,8185	737,3	742,143	0,66	739,300	0,3
40	552,59	0,8436	702,4	703,607	0,17	704,100	0,2
46	598,15	0,8578	813,3	818,646	0,66	815,000	0,2
47	638,15	0,8721	920,4	926,75	0,69	922,000	0,2
50	6668,15	0,8487	1045,8	1 050,94	0,49	1 047,400	0,2
					<b>0,65</b>		<b>0,24</b>

**Tableau 38 :** Résultats et comparaison de l'entropie des fractions pétrolières

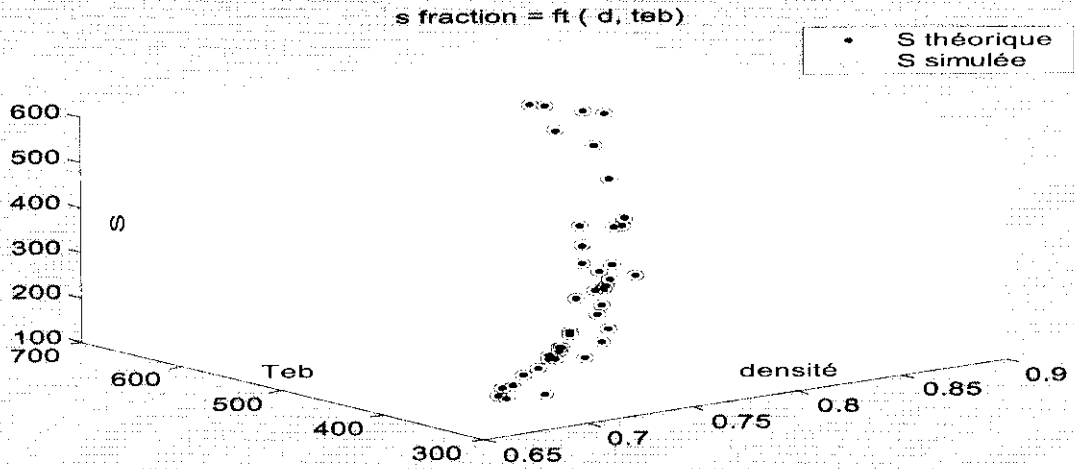


fig 54 : Résultat de l'apprentissage de l'entropie en fonction de la densité et de la température d'ébullition

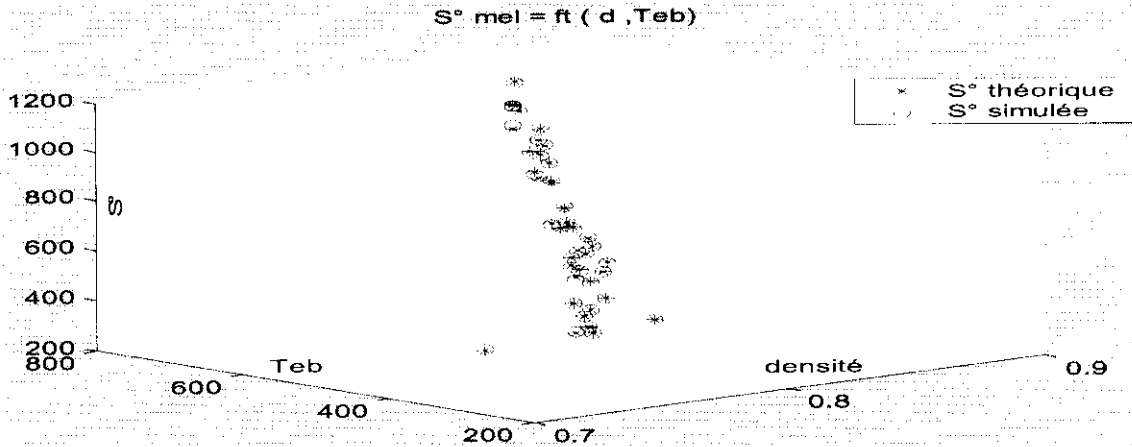
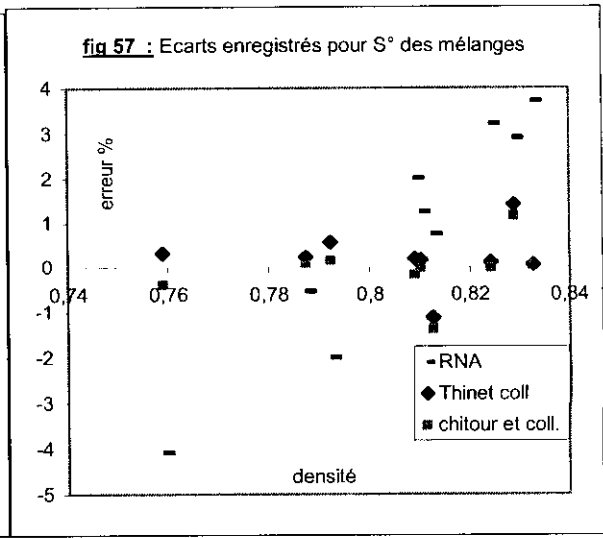
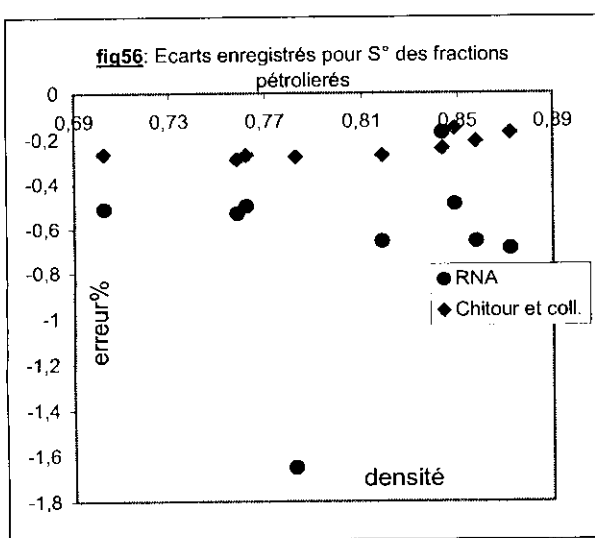


fig 55 : Résultat de l'apprentissage de l'entropie en fonction de la densité et de la température d'ébullition



**m) Pouvoir calorifique supérieur :**

L'application de notre modèle pour le pouvoir calorifique supérieur aux mélanges d'hydrocarbures de composition connue a donné des résultats très proches des valeurs des PCS obtenues en appliquant la règle d'additivité aux données des tables. Les autres méthodes empiriques citées ont donné des résultats comparables à ceux de la référence avec des écarts en moyenne inférieurs à 6%( figure 61).

Nous avons appliqué notre modèle pour estimer le pouvoir calorifique des fractions pétrolières ainsi que des corrélations de la littérature, en prenant comme référence les résultats donnés par l'abaque de Wuithier, nous avons évalué les écarts enregistrés pour chaque méthode, la figure 60 montre que notre méthode donne une erreur presque constante de l'ordre de 3% par contre les deux autres fournissent des écarts de 1,5 %et 1% respectivement.

•Mélanges

m	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Merghache chitour	Erreur %
3	385,88	0,759	4,1466	4,211	1,55	4,131	0,4	3,735	9,9
7	444,37	0,7873	6,3017	6,234	1,07	6,368	1,1	6,643	5,4
37	423,44	0,7922	5,45889	5,56	1,85	5,544	1,6	5,98	9,5
31	523,38	0,809	8,757	8,747	0,11	7,649	12,7	9,073	3,6
17	497,47	0,8102	7,7804	7,759	0,28	7,854	0,9	8,172	5,0
44	477,07	0,8126	7,0124	7,022	0,14	7,0005	0,2	6,95	0,9
20	604,93	0,8242	12,0439	11,962	0,68	11,892	1,3	12,371	2,7
50	666,018	0,8289	15,3316	15,224	0,70	14,595	4,8	14,857	3,1
28	685,28	0,8327	16,542	16,406	0,82	15,509	6,2	15,648	5,4
					<b>0,80</b>		<b>3,2</b>		<b>5,1</b>

**Tableau 40 :** Résultats et comparaison du pouvoir calorifique supérieur des mélanges

•Fractions pétrolières

fraction	Teb	densité	valeur théorique	RNA	Erreur %	Chitour et coll.	Erreur %	Armonstrong et coll.	Erreur %
10	365,65	0,7027	5,0391	5,15	2,18	4,97	1,41	5,05	0,22
20	426,15	0,7623	6,237	6,40	2,62	6,23	0,14	6,266	0,46
24	483,15	0,7826	7,907	8,15	3,06	7,86	3,54	7,943	0,46
30	425,65	0,7584	6,259	6,43	2,66	6,24	0,29	6,287	0,45
36	558,15	0,8185	10,371	10,72	3,38	10,45	0,80	10,442	0,68
40	552,59	0,8436	9,719	10,05	3,41	9,97	2,58	9,823	1,07
46	598,15	0,8578	11,479	11,88	3,45	11,79	2,68	11,617	1,20
47	638,15	0,8721	13,169	13,61	3,38	13,55	2,93	13,359	1,44
50	6668,15	0,8487	15,414	15,87	2,95	15,52	0,69	15,552	0,90
					<b>3,01</b>		<b>1,67</b>		<b>0,76</b>

**Tableau 39 :** Résultats et comparaison du pouvoir calorifique supérieur des fractions pétrolières

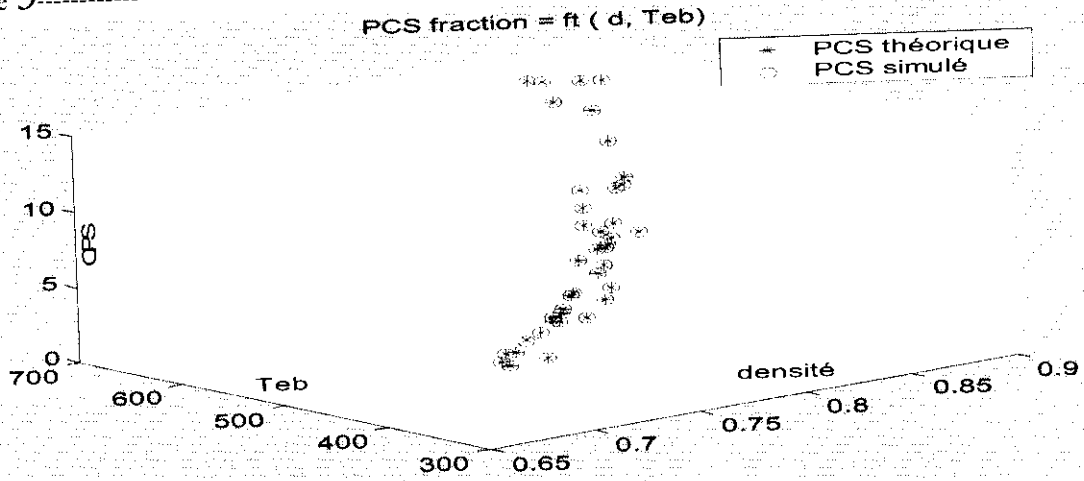


fig 58 : Résultat de l'apprentissage du pouvoir calorifique supérieur en fonction de la densité et de la température d'ébullition

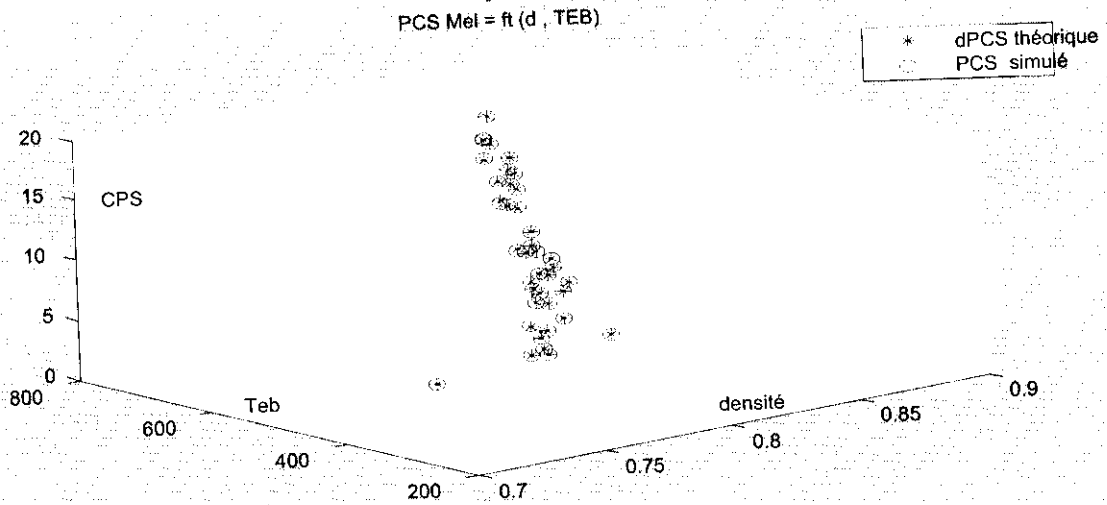
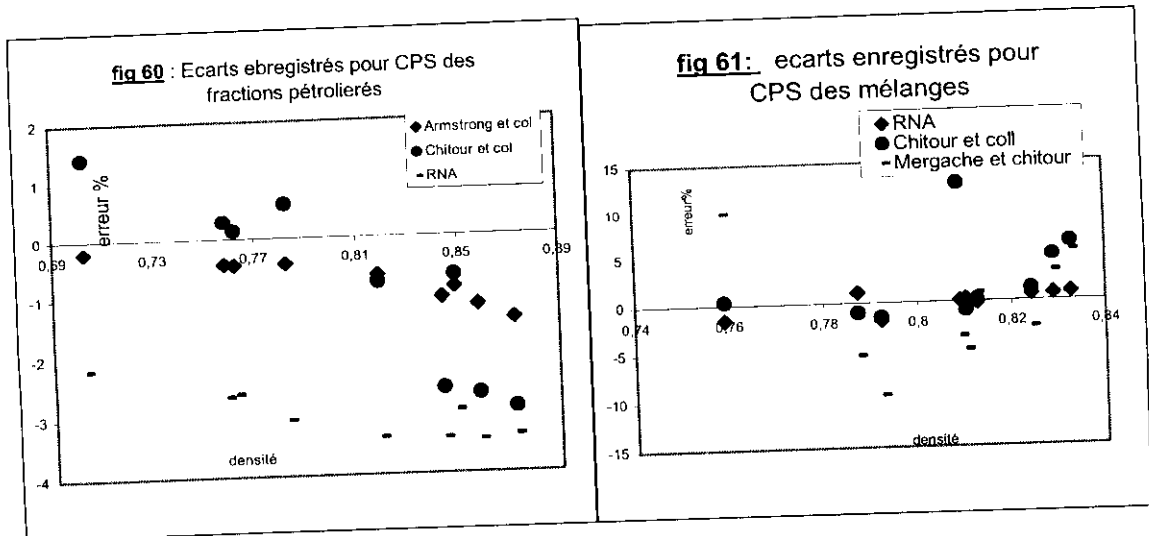


fig 59 : Résultat de l'apprentissage du pouvoir calorifique supérieur en fonction de la densité et de la température d'ébullition



## *Conclusion*

Le but de notre étude est de proposer une nouvelle méthode de prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs et des fractions pétrolières sans passer par l'expérience. Cette dernière présente un certain nombre de limitations du fait de sa complexité, du coût élevé de l'appareillage et du temps de manipulation souvent important.

Le modèle de calcul proposé est basé sur les Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) qui ne sont qu'une représentation mathématique d'un neurone biologique et de sa capacité de mémorisation, d'apprentissage et de généralisation.

Notre étude comporte deux étapes ; la première étape a consisté à constituer une banque de données des mélanges d'hydrocarbures et des fractions pétrolières.

Durant la deuxième étape nous avons réalisé trois grandes parties :

Dans un premier temps, nous avons estimé les propriétés physiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs en n'utilisant que deux propriétés facilement accessibles et qui sont la densité et la température d'ébullition.

Dans la deuxième partie nous avons procédé à l'identification des caractéristiques des mélanges d'hydrocarbures de compositions connues composés de plusieurs constituants dans le but de simuler une fraction pétrolière.

La troisième partie de cette étape a concerné la caractérisation des coupes pétrolières issues de pétroles algériens qui sont des mélanges complexes d'hydrocarbures.

Les réseaux établis dans chaque cas ont donné des résultats intéressants puisque l'erreur maximum ne dépasse pas 2 %. La comparaison des résultats estimés par la méthode proposée avec ceux calculés par différentes corrélations données dans la littérature traduit la fiabilité des modèles et leur pouvoir prédictif. Cependant des améliorations peuvent être apportées pour garantir une meilleure prédiction.

Nous avons voulu démontrer par ce travail les réels avantages de l'utilisation des RNA pour la détermination des propriétés du pétrole. Les résultats obtenus donnent un aperçu des capacités des réseaux de neurones.

Sans une banque de données bien homogène et dense les avantages des RNA s'estompent et montrent même des limites car comme pour la viscosité la mise en oeuvre du réseau a été une tâche très difficile à réaliser.

Pour palier à cela, nous proposons la constitution d'une banque de données des fractions pétrolières et des mélanges expérimentalement fiables nécessaires lors de l'apprentissage, ce qui nous permettra d'avoir un seul réseau représentatif de toutes les propriétés étudiées.

La suite de cette étude consisterait à compléter ce travail, en traitant une dizaine d'autres propriétés, en soulignant encore que la difficulté viendrait cependant de la banque de données.

Il est possible d'envisager aussi une autre démarche qui consisterait à optimiser les différentes étapes de la modélisation (nombre de couches, nombre de neurones...) de façon à affiner encore plus les résultats obtenus

**Bibliographie**

- [1] **N.Skander**. Contribution à la détermination des propriétés physiques des mélanges d'hydrocarbures et des fractions perlières par des méthodes de contribution des groupes. Thèse de Magister, Ecole Nationale Polytechnique (1997).
- [2] **Wikipedia encyclopédie libre** ; <http://fr.wikipedia.org/>
- [3] **Encyclopedie encarta** version électronique (1999).
- [4] **P.Wuithier**. Raffinage du pétrole, Tome 1 et 2, Edition Technip, Paris (1972).
- [5] **F.Souahî**: Contribution à l'étude physico-chimique des pétroles bruts et des fractions pétrolières. Thèse de Doctorat, ENP (1999).
- [6] **C.E.Chitour**. Thermodynamique de pétrole, Tome 1, Edition OPU (Alger 1999).
- [7] **C.E.Chitour**. Thermodynamique de pétrole, Tome 2, Edition OPU (Alger-1999) .
- [8] **American Petroleum Institute**. projet 44. Selected values of physical and thermodynamic properties of hydrocarbon and related compounds.
- [9] **DIPPR**(Design Institute of Chemical Enginners)( 1983)
- [10] **Emmanuel Moreau**, Restitution de paramètres atmosphériques par radiométrie hyperfréquence spatiale : Utilisation de méthodes neuronales. Thèse de Doctorat : Université Paris 7 – Denis Diderot, septembre 2000
- [11] **C.Touzet**, les Réseaux de Neurones Artificiels, introduction au connexionnisme cours exercices et travaux pratique.
- [12] **E.Carlos Meja**, Architectures Neuronales pour l'Approximation des Fonctions de Transfert : application à la télédétection, Thèse de Doctorat, Université de Paris Sud, octobre 1992
- [13] **Michel Weinfeld** ; Les réseaux de neurones ; techniques de l'ingénieur
- [14] **E.Davalo et P.Naim**. Des réseaux de neurones, Edition EYROLLES (1993).
- [15] **Jean Francois Jodouin** , Les réseaux de neurones, Edition Hermes (1994).
- [16] **G.Dreyfus, J-M-Martinez, M. Samuelides, M.B.Godon, F.Badran, S. Thiria, L. Hérault**, sous la direction général de Gerard Dreyfus, réseaux de neurones : méthodologie et application. Edition Eyrolles (2002).
- [17] **Yeddou** : Etude de synthèse sur les réseaux de neurones et leur application'. Thèse de Magistère. Département automatique. Ecole nationale polytechnique. (1998).

- [18] **S .Fekrache**, contribution à la détermination des propriétés des hydrocarbures par réseaux de neurones artificiels, projet de fin d'étude, département de génie chimique, Ecole Nationale polytechnique (juin 2002).
- [19] **N.Azibi, Z.Mecclem**, Réseaux de neurones, outil de traitement d'information, application, prédiction des prix de pétrole, projet de fin d'étude, ENP, 1998, Alger.
- [20] **Babhi , Dama**, Etude de la commande par RNA, application à un train de laminoir, projet de fin d'étude , ENP,1995,Alger
- [21] **S.Benbouzid** , Commande adaptative de la machine asynchrone par RNA, projet de fin d'étude , ENP,1999,Alger
- [22] **Freeman** , Neural networks : algorithms, applications and programming techniques édition Eyrolles ,1994
- [23] **J.Herault**, Jutten c, Réseaux de neurones et traitement de signal, Edition Hermes 1994
- [24] **J.C. Perez**, De Nouvelles Voies vers l'Intelligence Artificielle. MASSON Editeur PARIS, Mars 1988
- [25] Les Nouveaux Ordinateurs, La Recherche, N°204, Novembre 1988, techniques des ordinateurs de demain.
- [26] **A.Abilov**, use the neural netwrk for modelling of non linear process integration technologie in chemical engineering, chem. eng. process. 2000
- [27] **Paul Bourret,James Reggia , Manuel Samuelides**, Réseaux neuronaux. édition Teknea 1991
- [28] **C.E.Chitour**. Thermodynamique de pétrole, Tome 3. Edition OPU (Alger1999).
- [29] **S.Grossberg**, Competitive learning :from interactive activation to adaptative resonance , cognitive science 11; 1987.
- [30] **Kohonen** Self organisation and associative memory. spinger Verlag (second edition 1988)
- [31] **M.Minsky** , the society of mind, , simon&Schuter, New York,1985
- [32] **F. Blayo, M. Verleysen**, Les Réseaux de Neurones Artificiels. Presses Universitaires de France, collection "Que sais-je?", Paris ( 1996)
- [33] **Labbi, Abderrahim**. Sur l'Approximation et les Systèmes Dynamiques dans les Réseaux Neuronaux. Thèse de Doctorat en Mathématiques Appliquées. Laboratoire LIFIA - IMAG,Grenoble - France, Décembre 1993
- [34] **Azencotte et all**. Synchronous Boltzmann Machines and online based classification, Klumer published. Boston, pp 7-10, Juillet 1990



- [35] **Rumelahrt, D,E, Hinton,G,E Williams R, J** (1986) , Learning internal representation by error propagation, parallel distribute of processing, vol 1, Cambrige, Ma, MIT press.
- [36] **Y Cun**, Modèles connexionnistes de l'apprentissage, thèse de doctorat, université Pierre et Marie Curie, Paris, France,1987.
- [37]: **D.O Hebb**, The Organization of Behaviour, Wiley, New York 1949
- [38] **F.Bouamra**. Contribution à la détermination des propriétés physiques et des fractions pétrolières lourdes. Thèse de magister, Dpt de génie Chimique, Ecole Nationale Polytechnique (1990).
- [39] **A.Boundi** , J, Phys,Chem, 68 (1964).
- [40] **S.watanassiri, V H Owens et KE Starling**, ind eng chem ,processDEs,Dev,n°2,(1985)
- [41] **S.Merghache**, Contribution à l'étude analytique de pétrole brut à partir de corrélation. thèse de Magister, ENP 1995
- [42] **B.Zeidelkeir**. Approche à la détermination des propriétés physiques des corps purs et des fractions pétrolières par les méthodes numériques de contribution de groupe. Thèse de Magistere, Dpt de génie Chimique. Ecole Nationale Polytechnique (1993).
- [44] **W.C.Edmister, B.IK Lee**. Appleid hydrocarbon thermodynamics, vol 1 et 2, second Edition (1984)

*A*

*YES*

Tableau 1 : caractéristiques des fractions pétrolières

fr	densité	Teb	CP	CPS	Hv	Kuop	n20	Pc
1	0.6889	352.1500	163.2000	4.7936	29.9000	12.3900	1.3870	30.5000
2	0.7114	373.1500	173.9000	5.1735	31.9000	12.2300	1.3991	28.8000
3	0.7395	385.1500	171.9000	5.2566	33.1000	11.9000	1.4138	29.2000
4	0.7682	421.1500	195.7000	6.0242	36.7000	11.8000	1.4301	25.9000
5	0.6780	335.1500	150.7000	4.4310	28.2000	12.3700	1.3812	33.1000
6	0.6980	339.1500	145.7000	4.3799	28.6000	12.0600	1.3909	34.4000
7	0.7255	391.1500	185.8000	5.5529	33.7000	12.1800	1.4116	27.0000
8	0.7490	419.1500	204.4000	6.1561	36.5000	12.0700	1.4239	24.8000
9	0.6836	350.6500	164.1000	4.7935	29.7000	12.4600	1.3902	30.3000
11	0.7261	385.6500	179.4000	5.3899	33.2000	12.1100	1.4118	27.9000
12	0.7357	400.7300	190.9000	5.7368	34.7000	12.1100	1.4165	26.4000
13	0.7580	405.6500	184.0000	5.6658	35.2000	11.8100	1.4288	27.4000
14	0.6764	340.6500	157.2000	4.5860	28.8000	12.4700	1.3880	31.7000
15	0.7006	365.6500	171.4000	5.0588	31.2000	12.3300	1.3984	29.1000
16	0.7228	385.6500	181.2000	5.4198	33.2000	12.1700	1.4100	27.7000
17	0.7324	395.6500	186.9000	5.6177	34.2000	12.1100	1.4155	26.9000
18	0.7355	400.6500	190.8000	5.7344	34.6000	12.1100	1.4170	26.4000
19	0.7470	415.6500	201.5000	6.0694	36.1000	12.0700	1.4250	25.1000
21	0.7854	469.1500	244.4000	7.3810	41.5000	11.9700	1.4401	21.2000
22	0.7928	473.1500	244.6000	7.4266	41.9000	11.8900	1.4442	21.3000
23	0.7713	459.1500	240.5000	7.2058	40.5000	12.0900	1.4354	21.5000
25	0.7930	498.1500	279.3000	8.3197	44.5000	12.0900	1.4461	18.9000
26	0.8027	518.1500	302.2000	8.9553	46.5000	12.1000	1.4508	17.8000
27	0.7794	450.6500	224.2000	6.8267	39.6000	11.9000	1.4404	22.9000
28	0.7975	490.6500	265.3000	7.9861	43.7000	11.9700	1.4493	19.8000
29	0.8078	498.1500	268.2000	8.1205	44.5000	11.8700	1.4545	19.7000
31	0.7722	440.6500	216.2000	6.5824	38.6000	11.9100	1.4376	23.7000
32	0.7900	470.6500	242.8000	7.3678	41.7000	11.9100	1.4465	21.4000
33	0.7985	480.6500	250.5000	7.6211	42.7000	11.8700	1.4503	20.9000
34	0.8132	485.6500	246.9000	7.5993	43.2000	11.6900	1.4565	21.3000
35	0.8112	538.1500	327.2000	9.6359	48.6000	12.1300	1.4568	16.7000
37	0.8281	538.1500	312.5000	9.3694	48.6000	11.8900	1.4685	17.5000
38	0.8378	548.1500	320.3000	9.6259	49.6000	11.8200	1.4730	17.2000
39	0.8324	539.6500	310.9000	9.3579	48.7000	11.8300	1.4703	17.6000
41	0.8433	628.1500	465.5000	13.2717	58.0000	12.2900	1.4729	12.8000
42	0.8480	648.1500	505.2000	14.2683	60.1000	12.3600	1.4748	12.0000
43	0.8571	618.1500	428.3000	12.4642	56.9000	12.0300	1.4830	13.7000
44	0.8660	648.1500	481.2000	13.8393	60.1000	12.1000	1.4878	12.6000
45	0.8488	587.1500	377.5000	11.1382	53.7000	11.9400	1.4780	15.1000
48	0.8761	648.1500	468.5000	13.6099	60.1000	11.9600	1.4940	12.9000
49	0.8408	648.1500	514.4000	14.4318	60.1000	12.4500	1.4683	11.8000
50	0.7067	366.00	204.6755	13.2717	76.0702	12.2402	1.3964	29.2664
51	0.7242	379.00	215.9322	14.2683	74.0692	12.1401	1.4106	28.3633
52	0.7626	426.00	261.6669	12.4642	67.264	11.9049	1.4271	25.0342
53	0.785	463.00	303.5836	13.8393	62.3901	11.8006	1.4398	22.5072
54	0.8123	485.50	328.0298	11.1382	59.9786	11.7625	1.4565	21.2411
55	0.8076	510.50	366.8219	13.6099	56.6488	11.724	1.455	19.4953
51	0.8277	560.00	445.6342	14.4318	51.2565	11.7093	1.466	16.7179
52	0.8578	598.00	509.6194	13.2717	47.8234	11.7496	1.4836	15.008
53	0.799	469.00	308.7185	14.2683	61.8605	11.7916	1.4476	22.2295

54	0.8332	535.5	328.029	12.4642	59.9786	11.7625	1.4565	21.2411
55	0.8497	578.67	473.4187	13.8393	49.6811	11.7216	1.4719	15.9263
56	0.7395	385.00	220.4911	11.1382	73.3009	12.1062	1.4138	28.005
57	0.7975	490.5	340.0414	13.6099	58.881	11.7479	1.4493	20.6683
58	0.7626	426.00	261.6696	14.4318	67.264	11.9049	1.4271	25.342
59	0.7627	428.5	264.5616	14.2683	66.8921	11.8954	1.4274	28.8441
60	0.782	438.00	272.4972	12.4642	65.7843	11.8709	1.437	24.3184

Tableau 2 : caractéristiques des fractions pétrolières

fr	Tc	Ts	S°	Vc 1.0e+003	Vm	Zc	w	μ
1	526.9000	19.2000	399.9000	0.3999	137.0000	0.2790	0.2980	0.3470
2	551.4000	21.0000	420.5000	0.4329	146.0000	0.2710	0.3310	0.4140
3	569.6000	22.6000	423.8000	0.4389	145.3000	0.2710	0.3420	0.4670
4	608.5000	24.8000	467.8000	0.5064	163.8000	0.2590	0.4030	0.6440
5	509.0000	18.1000	379.6000	0.3679	126.8000	0.2870	0.2690	0.3060
6	517.9000	19.1000	374.7000	0.3624	123.2000	0.2890	0.2710	0.3220
7	571.0000	22.2000	441.4000	0.4664	155.5000	0.2650	0.3620	0.4810
8	601.6000	24.0000	475.9000	0.5196	169.7000	0.2570	0.4110	0.6170
9	524.2000	19.0000	400.3000	0.4001	137.5000	0.2780	0.2970	0.3420
11	566.4000	22.0000	431.9000	0.4516	150.6000	0.2680	0.3500	0.4620
12	582.1000	22.9000	451.8000	0.4824	159.5000	0.2630	0.3777	0.5240
13	592.5000	24.0000	446.8000	0.4746	155.0000	0.2640	0.3750	0.5600
14	513.5000	18.3000	388.8000	0.3818	131.9000	0.2830	0.2800	0.3170
15	542.0000	20.3000	424.4000	0.4231	143.7000	0.2730	0.3200	0.3870
16	565.5000	21.9000	433.8000	0.4545	151.9000	0.2670	0.3520	0.4600
17	576.8000	22.6000	444.9000	0.4718	156.9000	0.2640	0.3680	0.5020
18	582.0000	22.9000	451.6000	0.4822	159.5000	0.2630	0.3770	0.5230
19	598.0000	23.8000	470.9000	0.5118	167.5000	0.2580	0.4040	0.5980
21	653.6000	26.6000	574.8000	0.6288	197.8000	0.2460	0.5040	1.0120
22	659.1000	27.0000	546.5000	0.6323	197.9000	0.2460	0.5080	1.0640
23	641.3000	25.8000	537.2000	0.6137	195.2000	0.2470	0.4910	0.9020
25	679.6000	27.4000	600.4000	0.7144	220.4000	0.2400	0.5730	1.3710
26	698.4000	28.1000	639.3000	0.7722	234.5000	0.2360	0.6170	1.7370
27	636.6000	26.0000	515.1000	0.5786	184.1000	0.2510	0.4630	0.8450
28	674.7000	27.5000	580.6000	0.6833	211.5000	0.2420	0.5490	1.2770
29	683.9000	28.1000	589.5000	0.6947	213.2000	0.2410	0.5590	1.4090
31	626.3000	25.5000	500.7000	0.5568	178.4000	0.2530	0.4450	0.7650
32	656.3000	26.8000	547.2000	0.6272	196.7000	0.2460	0.5040	1.0350
33	667.0000	27.4000	558.1000	0.6489	201.8000	0.2440	0.5220	1.1570
34	675.4000	28.1000	558.2000	0.6464	199.4000	0.2450	0.5210	1.2500
35	716.9000	28.7000	691.8000	0.8344	249.2000	0.2340	0.6640	2.2350
37	722.1000	29.4000	678.4000	0.8080	240.0000	0.2350	0.6460	2.3190
38	733.0000	30.0000	695.7000	0.8307	244.3000	0.2350	0.6620	2.6910
39	724.7000	29.7000	678.4000	0.8064	238.9000	0.2350	0.6440	2.3880
41	796.2000	30.7000	917.0000	1.1709	322.1000	0.2260	0.8950	9.2910
42	812.4000	31.0000	977.4000	1.2643	341.1000	0.2250	0.9520	13.8200
43	793.1000	31.3000	872.9000	1.0931	302.3000	0.2280	0.8450	8.1860
44	818.6000	31.9000	957.2000	1.2212	328.0000	0.2260	0.9250	14.9840
45	766.8000	30.8000	790.3000	0.9701	276.0000	0.2300	0.7620	4.7970
48	822.0000	32.4000	948.5000	1.1981	321.1000	0.2270	0.9100	15.6680
49	810.1000	30.7000	984.9000	1.2808	346.2000	0.2240	0.9620	13.4730

50	541.4511	20.9458	678.4000	0.3759	138.60	0.2661	0.3117	0.4496
51	556.4686	21.8374	917.0000	0.3996	143.70	0.2648	0.3289	0.4895
52	609.9806	24.6168	977.4000	0.5096	171.80	0.2594	0.3939	0.7115
53	650.3532	26.445	872.9000	0.6079	195.00	0.2546	0.4626	1.0182
54	670.8685	27.3506	957.2000	0.6652	207.1000	0.2519	0.4998	1.2529
55	699.7011	28.6052	790.3000	0.7562	224.80	0.2475	0.559	1.7252
51	747.4041	30.788	948.5000	0.9411	259.00	0.2389	0.6791	3.1477
52	778.2497	32.3695	984.9000	1.0912	288.20	0.2321	0.7767	4.875
53	654.8304	26.695	917.0000	0.6200	197.60	0.2541	0.4704	1.0638
54	670.8685	27.3506	977.4000	0.6652	207.10	0.2519	0.4998	1.2529
55	761.5233	31.4899	872.9000	1.0062	271.40	0.2359	0.7215	3.8269
56	562.3258	22.1695	957.2000	0.413	147.10	0.2642	0.3359	0.5072
57	680.2503	27.75	790.3000	0.6934	212.18	0.2505	0.5181	1.3853
58	609.9806	24.6168	948.5000	0.5096	171.80	0.2594	0.3939	0.7115
59	613.0058	24.7601	917.0000	0.5164	173.50	0.2591	0.4031	0.7292
60	621.3732	25.1509	977.4000	0.5356	178.20	0.2582	0.4156	0.7819

Tableau 3 : caractéristiques des mélanges des corps purs

	densité	Teb	Cps	Hv	zc	Kuop	S° 1.0e+003 *
1	0.7266	361.5000	4.3904	30.6000	0.2660	12.0000	0.3748
2	0.7690	381.6000	4.6684	32.6000	0.2640	11.6000	0.3785
3	0.7745	379.1000	4.5373	32.4000	0.2640	11.5000	0.3725
4	0.7760	390.3000	4.7972	33.4000	0.2620	11.5000	0.3898
5	0.7802	408.5700	5.1900	35.2000	0.2600	11.5000	0.4136
6	0.7818	431.1500	5.8764	37.3200	0.2560	11.7000	0.4544
7	0.7850	418.6600	5.5045	36.2400	0.2570	11.6000	0.4287
8	0.7927	466.4000	6.9147	40.5000	0.2480	12.0000	0.5232
9	0.7969	460.8500	6.6937	40.0000	0.2490	11.8000	0.5029
10	0.7972	486.2700	7.5441	42.0000	0.2420	12.0000	0.5516
11	0.7960	435.8800	5.9168	37.7700	0.2560	11.5000	0.4508
12	0.7981	479.1300	7.3150	41.4000	0.2440	12.0000	0.5389
13	0.8000	498.4000	7.9350	43.0300	0.2400	12.0000	0.5769
14	0.8036	394.4000	4.7468	33.7000	0.2630	11.2000	0.3746
15	0.8058	508.3300	8.2010	44.0000	0.2380	12.1000	0.5926
16	0.8062	544.3300	9.6923	46.6500	0.2320	12.2000	0.6825
17	0.8065	476.6900	7.1266	41.1000	0.2450	11.8000	0.5216
18	0.8081	505.1300	8.0457	43.5300	0.2390	11.9500	0.5762
19	0.8085	540.3000	9.3454	46.7000	0.2300	12.2000	0.6607
20	0.8118	489.0500	7.5184	42.3800	0.2440	11.8000	0.5470
21	0.8128	539.5000	9.3127	46.6000	0.2300	12.2000	0.6588
22	0.8129	548.2300	9.6434	47.3000	0.2770	12.3000	0.6783
23	0.8131	515.0000	8.3726	44.4000	0.2360	12.0000	0.5956
24	0.8152	526.4200	8.7649	45.4000	0.2340	12.1000	0.6190
25	0.8167	606.3800	12.4888	51.2150	0.1990	12.5000	0.8472
26	0.8177	567.2480	10.4011	48.6000	0.2260	12.3000	0.7186
27	0.8180	604.3600	12.0575	51.2400	0.2090	11.3000	0.8224
28	0.8212	598.9300	11.7935	50.9000	0.2050	12.5000	0.8068
29	0.8216	599.2800	11.7057	50.7900	0.2140	12.4000	0.7972
30	0.8226	633.1700	13.5794	53.1000	0.1870	12.5000	0.9152
31	0.8239	659.7000	14.9157	54.9600	0.1770	12.8000	0.9918
32	0.8260	628.5200	13.2880	53.0000	0.1910	12.6000	0.8964
33	0.8263	620.2700	12.7997	52.2000	0.1940	12.6000	0.8629
34	0.8289	678.4300	16.3049	57.0000	0.1670	12.9000	1.0774
35	0.8295	679.8000	16.2606	56.6000	0.1670	12.9000	1.0706

36	0.8301	645.6300	14.1136	54.0000	0.1830	12.7000	0.9418
37	0.8306	674.0400	15.8664	56.6000	0.1700	12.9000	1.0483
38	0.8310	640.1400	13.7708	55.3300	0.1870	12.6000	0.9180
39	0.8342	658.1700	14.7576	54.9000	0.1790	12.7000	0.9775
40	0.8367	701.7000	17.6093	58.5000	0.1580	12.9000	1.1459

Tableau 4 : caractéristiques des mélanges des corps purs

	Tc	Ts	Vc*10-3	Vm	w	n20	Pc	$\mu$
1	542.1000	21.6000	3.7690	130.3000	0.2850	1.4058	32.6000	0.4090
2	571.5000	23.8000	3.9310	133.3000	0.2900	1.4284	33.0000	0.5210
3	569.0000	23.9000	3.8270	129.6000	0.2900	1.4334	33.9000	0.5020
4	580.0000	24.2000	4.0540	136.2000	0.3030	1.4349	31.7000	0.5000
5	600.2500	24.5800	4.4460	147.3500	0.3600	1.3490	29.4000	0.5680
6	623.1300	25.3500	5.0095	163.5400	0.3720	1.4400	26.6500	0.7030
7	613.1000	25.2300	4.6517	153.2500	0.3540	1.3662	28.4500	0.6380
8	653.2000	26.3000	5.9460	190.8000	0.4530	1.4436	23.1000	0.9380
9	652.1000	26.4000	5.7060	184.0000	0.4260	1.4451	24.0000	0.9040
10	672.0000	26.7000	6.4170	205.6000	0.4660	1.4436	21.4000	1.2040
11	631.5000	26.1000	5.0053	162.9800	0.3660	1.4020	27.0000	0.5740
12	666.4000	26.6000	6.2290	199.7000	0.4570	1.4449	22.3000	1.1550
13	681.7200	22.8900	6.7625	215.2000	0.5030	1.4500	20.8100	1.4970
14	591.7000	25.6000	3.9320	131.8000	0.2860	1.4493	33.4000	0.5440
15	691.5000	27.4000	6.9940	221.8000	0.5170	1.4495	19.8000	1.4750
16	719.7800	27.9200	8.2548	259.9110	0.6130	1.4520	17.3000	2.5630
17	668.0000	27.0000	6.0320	193.6000	0.4370	1.4464	23.0000	1.0930
18	691.7300	27.6400	6.8080	216.5500	0.4920	1.4530	20.6500	1.4630
19	718.5400	28.0700	7.9625	250.4800	0.5910	1.4530	17.5000	2.0560
20	678.8000	27.5800	6.3740	203.0870	0.5150	1.4560	22.6800	1.3230
21	718.9000	28.0000	7.9380	249.7000	0.5880	1.4532	17.5000	2.0410
22	724.4000	28.1000	8.2090	257.9000	0.6100	1.4532	16.7000	2.2580
23	699.8000	27.7000	7.0900	224.8000	0.5140	1.4528	19.7000	1.6200
24	709.4000	28.0000	7.4080	234.7000	0.5390	1.4539	18.8000	1.8220
25	772.1000	29.0400	10.6189	329.3400	0.7850	1.3840	13.0250	4.8740
26	741.2480	28.6500	8.8054	276.0810	0.6520	1.4580	15.5000	2.9280
27	768.5400	29.1200	10.2375	318.6000	0.6910	1.4580	12.8000	0.6910
28	764.0000	29.0000	10.0600	312.0000	0.7480	1.4574	13.2000	3.7600
29	765.8800	29.1000	9.9240	309.2740	0.7370	1.4600	13.4300	3.9540
30	790.5000	29.4000	11.5550	357.4000	0.8590	1.4579	10.8000	5.3400
31	814.3400	29.7700	12.6820	392.5100	0.9390	1.4601	9.5500	7.0840
32	788.1000	29.4000	11.2960	349.3000	0.8450	1.4603	11.3000	5.2370
33	781.8000	29.4000	10.8510	336.6000	0.8040	1.4599	11.9000	4.7120
34	836.0000	29.9000	13.8880	425.5000	1.0230	1.4610	8.5000	9.6070
35	836.4000	30.0000	13.8230	423.8000	1.0130	1.4613	8.4000	9.0980
36	803.0000	29.7000	11.9840	369.3000	0.8900	1.4623	10.3000	6.1190
37	830.5000	30.3000	13.4940	413.8000	0.9950	1.4623	8.8000	8.2890
38	798.6000	29.6000	11.6680	360.2000	0.8630	1.4625	10.7000	5.8780
39	814.9000	29.9000	12.5180	384.7000	0.9280	1.4646	9.8000	7.0750
40	861.4000	30.2000	14.9470	456.2000	1.0890	1.4655	7.7000	12.8150

		<i>W1ij(couche cachée)</i>		<i>biais</i>			
<i>i\j</i>		1	2	<i>bi</i>			
1		-0.0924	3.1210	-12.4307			
2		-0.0019	-0.7337	3.1669			
3		0.3961	17.9317	-10.2782			
4		-1.8075	32.6975	-37.0884			
5		25.4465	-36.1736	26.0852			
		<i>W2ij (Couche de sortie)</i>			<i>Biais</i>		
<i>i\j</i>		<i>Wij(1.0 e-03)</i>			<i>bi</i>		
1		-0.4713	-2.8633	0.5692	-0.6220	0.6180	617.314

Tableau 5 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu Vm des n-paraffines

		<i>W1ij (1.0 e-02)</i>		<i>biais</i>		
<i>i\j</i>		1	2	<i>bi(1.0 e-02)</i>		
1		0.001152896	0.029746904	0.102651734309		
2		-0.0024596863	0.3489854823	2.35330630262		
3		0.0000224138	-0.1040290754	0.03802934911		
4		-0.0097642946	-1.59994236730	1.14087173803		
<i>i\j</i>		<i>W2ij(1.0 e-05)</i>			<i>biais</i>	
1		0.5598300654	0.5587321933	2.239028360	-0.560628603	56022.2062

Tableau 6 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour Vm des n-alkylbenzènes :

<i>Poids des connexions et biais pour le réseau retenu</i>									
		<i>W1ij</i>		<i>biais</i>					
<i>i\j</i>		1	2	<i>bi</i>					
1		-0.0475	89.7095	-88.6505					
2		-19.0173	139.3083	-101.5552					
3		-0.0026	0.5796	5.0718					
4		-0.1312	-165.0361	135.6767					
5		0.1288	-38.6629	17.3735					
6		0.8275	141.5922	-121.0763					
7		-0.0030	4.8161	-6.6873					
8		-0.3375	-30.2037	35.7909					
9		-0.3384	127.5301	109.5896					
10		0.8968	-164.0674	130.0631					
11		-5.6705	-130.0120	101.2648					
<i>i\j</i>		<i>W2ij(1.0 e-05)</i>			<i>biais</i>				
1		-0.1485	-0.1484	-2.8697	-0.1493	0.1493	-1.3822	-0.1493	14940

Tableau 7 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vm des n-alkylcyclohexanes :

	<i>W 1 (I,J)</i>		<i>Biais 1 (I,J)</i>	<i>W 2 (I,J)</i>		<i>Biais 2</i>
<i>I\J</i>	1	2	1	1	1	1
1	56.8239	0.5222	-35.0858	11.0422	55.9089	
2	57.6954	-0.0668	-57.6048	-27.1479		
3	1.5896	-0.0038	0.9385	-272.5411		
4	46.1352	-0.0937	-22.6075	-20.8017		
5	-49.6461	-0.5642	23.5368	-64.5620		
6	65.9180	0.5367	-37.3439	56.1578		
	-3.1159	-0.0232	-17.3539	61.6667		

Tableau 8 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vm des mélanges

I/J	W 1 ( I,J)		Biais 1 ( I,J)	W 2 ( I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	1.0839	0.0018	-1.3221	120.6117	77.6812
2	19.4421	1.2406	-13.4470	31.9177	
3	2.2199	-0.0027	0.2319	-405.8813	
4	-29.4010	0.0158	-2.7000	-40.6234	
5	234.7352	-1.0780	259.2980	0.1785	
6	-31.4065	-1.8756	10.9115	-173.3751	
7	27.2339	-14.8022	-0.4687	0.9948	
8	24.0656	19.2589	-8.5875	78.1700	

Tableau 9 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vm des fractions pétrolières

W1ij (couche cachée)			biais		
i\j	1	2	bi		
1	-0.0419	156.9870	-101.2697		
2	0.0031	-52.1323	41.9445		
3	0.0269	10.3878	-0.5075		
4	-0.0197	25.5593	-10.3245		
5	0.0166	-20.2757	7.8292		
i\j	W2ij(couche de sortie)			biais	
1	-129.5650	-30.9279	-45.9689	47.6328	58.2454
					-33.9049

Tableau 10 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ts n-paraffines

W1ij			biais		
i\j	1	2	bi		
1	-0.0385	-81.1809	59.2423		
2	0.0333	287.2811	-262.1550		
3	0.1763	-250.3040	218.6609		
4	0.0001	-142.4591	121.8635		
5	-0.2240	-142.7132	126.6464		
i\j	W2ij			biais	
1	-3.2496	-0.3508	2.8555	1.7908	-11.9713
					12.2309

Tableau 11 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ts des n-alkylbenzènes

W1ij			biais		
i\j	1	2	bi		
1	-0.139724545	-43.8851953	25.4912768		
2	-0.08706565	-82.27112093	60.3588371		
3	-0.00002593	1.96196415	-3.647344078		
4	-0.101576268	0.913500869	-21.53604174		
i\j	W2ij(1.0 e-03)			biais	
1	-0.2539159657	-0.252235114	1.010872866	0.246705709	254.1456224

Tableau 12 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ts des n-alkylcyclohexanes



I/J	W 1 ( i , j )		biais 1 ( i , j )	W 2 ( i , j )	biais 2
	1	2	1	1	1
1	206.5675	-0.1048	-127.1091	-15.8401	7.0784
2	46.7329	0.0032	-39.6007	2.4315	
3	-60.0006	-0.0450	37.8616	-2.0845	
4	-55.3579	0.1407	40.8640	1.1833	
5	-23.5870	-0.0188	25.1407	-2.0153	
6	-39.0418	2.0048	21.2000	-0.4558	

Tableau 13 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ts des mélanges

I/J	W 1 ( i , j )		biais 1 ( i , j )	W 2 ( i , j )	biais 2
	1	2	1	1	1
1	21.4233	1.4213	-15.1263	5.0712	17.8814
2	-32.5052	2.8770	7.8812	-3.7484	
3	3.8808	-0.0003	-4.1286	27.2753	
4	-23.6685	0.0612	7.8719	-0.3630	
5	1.76110	0.0032	-1.7977	17.5382	
6	-24.1407	-0.6727	16.1065	-16.6799	

Tableau 14 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ts des fractions pétrolières

i\j	W1ij		biais
	1	2	bi
1	0.01739759	-11.2472062	1.228088
2	-0.19234682	31.7656099	-20.04813032
3	-0.01208066	30.4271128	-19.0403197
4	-20.3813795	22.1974558	-13.1456638
5	1.13058057	20.8816065	-10.2968971
i\j	W2ij		biais
1	-19.3353727	-117.329495	440.928736
1	116.3276907	115.0397502	-115.9688486

Tableau 15 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Pe des n-paraffines :

i\j	W1ij		biais
	1	2	bi(1.0 e-02)
1	-0.02382783	-215.4963	1.7593016
2	0.0013148	-3.216480	0.070543
3	-0.5572284	-253.7752	2.203271
4	0.25841343	-199.04273	1.675568
5	0.38549464	-140.55443	1.175127
i\j	W2ij(1.0 e-05)		biais
1	-0.7328965	-3.66449781	-0.7328012
1	0.73288714	0.7328645	73292.02505

Tableau 16 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Pe des n-alkylbenzènes

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu			
i\j	W1ij(1.0 e-02)		biais
	1	2	bi(1.0 e-02)
1	-0.0005851	-0.351879	0.17711369
2	0.00007807	0.1492505	-0.15762003
3	-0.00008976	0.09424206	-0.01891287
4	-0.00041599	-0.76580997	0.538876314
5	0.00129684	4.84832711	-3.30977618
i\j	W2ij		biais
1	-12.976018	-8.653608	5.579904
1	6.1750876	1.8687277	13.140894

Tableau 17 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Pe des n-alkylelohexanes :

I/J	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	74.1241	-0.2238	64.3122	7.2141	0.2042
2	62.0830	-0.2169	70.2233	-7.2185	
3	-4.0575	0.0098	-2.6693	-0.0608	
4	-0.1428	-0.0166	7.1932	0.0084	

Tableau 18 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Pe des melanges

I/J	W 1 (i, j)		biais 1 (i, j)	W 2 (i, j)	biais 2
	1	2	1	1	1
1	4.5502	9.1083	-20.0647	146.9	155.7213
2	-9.0166	0.1830	0.2281	144.8	
3	-16.3736	0.0682	6.6746	148.3	
4	-2.7984	0.0069	2.1345	-1.03	
5	24.4649	0.1631	-3.1159	157.4	
6	-20.2269	0.1394	6.5380	-155.0	
7	-25.5747	0.3109	11.8827	142.4	
8	3.0570	0.0041	-0.6787	14.2	

Tableau 19 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Pe des fractions pétrolières

i/j	Wij		biais	
	1	2	bi	
1	0.8329858	-38.71776299	18.5091747	
2	-0.09863888	-9.867773308	-7.62856711	
3	86.99893868	-42.80772758	20.66015832	
4	-0.109018870	50.96564173	-27.6669322	
5	0.626898365	13.92107425	1.50441632	
6	0.07678367	-24.93718715	1.44152491	
7	-0.01489334	21.199193937	-6.25675237	
8	0.00260247	0.4298769123	1.24539279	
9	9.35338678	31.405005183	16.42567803	
10	-31.65208815	-45.6879336	30.14841721	
$\sum$	Wij(1.0 e-02)		biais	
	0.86344742	-1.13885954	-0.12628952	0.1763024
1	-1.48388403	-0.10359746	-0.9323953	3.670934488
	1.55129	0.1227130		

Tableau 20 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Te des n-paraffines

i/j	Wij(1.0 e-03)		biais	
	1	2	bi(1.0 e-02)	
1	-8.16737771	-0.05581219	0.0740973	
2	-0.0005423	0.2246838	-1.9875746	
3	-0.00017565	-0.24182085	2.0051148	
4	0.0000011681	-0.01217302	0.060027162	
5	-0.00086696	-0.22474985	2.51786784	
$\sum$	Wij(1.0 e-05)		biais	
1	0.50648846	0.509871432	-0.50759038	50983.76133
	2.5385177	0.509403466		

Tableau 21 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Te des n-alkylbenzenes

$W1_{ij}(1.0 e-02)$			biais		
$i \setminus j$	1	2	$b_i(1.0 e-02)$		
1	-0.0000335	0.08030189	0.011551908		
2	0.0080143	0.25478686	-0.2403328054		
3	0.0023691	0.32014687	-0.1225721595		
4	-0.00135873	-1.2698901	1.1673165408		
5	-0.00001352	-0.06098655	-0.000040974		
6	-0.0075638	-1.32031704	1.086743689		
7	-0.00418276	0.6036560	-0.562903139		
8	-0.00271722	-1.0496153	0.856211806		
$i \setminus j$	$W2_{ij}(1.0 e-06)$			biais	
1	-4.939386481	0.147796814	0.147918653	-0.147866749	148515.153
1	-3.904456660	-0.147868953	-0.147836603	-0.147864631	1

Tableau 22 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Te des n-alkylbenzènes

I/J	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	-216.9455	-2.4777	183.3314	162.1069	345.1393
2	-2.3475	-0.9195	-191.8697	9.1213	
3	-277.9467	-0.2732	-40.5118	340.4445	
4	-229.6981	0.6494	167.8586	170.3317	
	431.8754	-1.1110	-128.6022	398.9114	
	-316.2103	0.9671	280.4254	244.5889	

Tableau 23 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Te des mélanges

I/J	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	18.4772	0.9931	11.0138	0.0232	300.3173
2	0.2294	0.9637	9.4378	1.0644	
3	336.4717	-3.1484	13.17604	0.0373	
4	4.1387	-0.0848	-1.461	9.0611	
	11.0810	0.2175	8.4186	0.4007	

Tableau 24 Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Te des fractions pétrolières

$W1_{ij}$			biais		
$i \setminus j$	1	2	$b_i$		
1	-3.5639	1.9910	-11.4904		
2	0.0019	0.6501	-3.1231		
3	-85.4032	28.2361	-21.5684		
4	0.2227	32.2653	-33.3989		
5	1.0563	16.8862	61.9070		
6	-0.2525	37.5205	-31.1454		
$i \setminus j$	$W2_{ij}(1.0 e-04)$			biais	
1	-0.1327	1.0338	-0.1442	0.1773	0.1600
					2118.7
					-0.2119

Tableau 25 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Ve n-paraffines :

<i>W1ij (1.0 e-02)</i>			<i>biais</i>		
<i>i\j</i>	1	2	<i>bi(1.0 e-02)</i>		
1	0.001906711	-0.605579373	-0.117126015		
2	0.197079483	-2.887789791	2.581980077		
3	0.005205256	-1.566871049	1.376028253		
4	0.025736533	3.1328821506	-2.739478916		
5	0.005602662	1.7026462722	-1.591736161		
6	0.000025505	-0.2454693417	0.176270939		
7	-0.007443668	-1.25655519158	1.023340594		
8	-0.573934531	-2.1472286370	1.906121157		
<i>i\j</i>	<i>W2ij(1.0 e-04)</i>			<i>biais</i>	
	0.18132506	0.197476107	0.1653825589		
1	0.1561892141	0.1990085083	1.4280848575		
	-0.1560648108	-0.1975210023	1975.02287		

**Tableau 26** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vc des n-alkylbenzènes :

<i>W1ij (1.0 e-02)</i>			<i>biais</i>		
<i>i\j</i>	1	2	<i>bi(1.0 e-04)</i>		
1	0.000368147	0.663109612	-0.2778205135		
2	1.359958023	1.26775651743	-0.941637857		
3	-0.028828812	-0.99674643283	0.488841002		
4	-0.000007080	0.00555150577	-0.019078334		
5	-0.000029234	-0.00582977472	0.0497477854		
6	0.0015623971	0.53792854587	-0.3101637286		
7	0.0447428406	1.23218877306	-1.0565235222		
8	-0.42941521729	0.1790131773	-0.0796543828		
<i>i\j</i>	<i>W2ij(1.0 e-04)</i>			<i>biais</i>	
	0.521233793	0.53378033	-0.53398689	-1.98718539	5337.267974
1	-5.53366911	0.525674949	0.5098838295	0.530648381	

**Tableau 27** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vc des n-alkylcyclohexanes :

<i>i\j</i>	<i>W 1 ( I.J)</i>		<i>Biais 1 ( I.J)</i>	<i>W 2 ( I.J)</i>		<i>Biais 2</i>
	1	2	1	1	1	1
1	0.1808	-0.1056	34.5999	-74.4985		78.0572
2	1.0459	-0.0021	2.2711	226.9948		
3	38.2019	-0.1793	-25.5609	-73.8217		
4	-13.0213	-0.0177	17.9257	-0.2243		

**Tableau 28 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vc des mélanges

<i>i\j</i>	<i>W 1 ( I.J)</i>		<i>Biais 1 ( I.J)</i>	<i>W 2 ( I.J)</i>		<i>Biais 2</i>
	1	2	1	1	1	1
1	-0.3608	0.0024	-1.1906	2.6058		405.0019
2	-0.5893	0.3429	27.7021	0.2632		
3	-56.8718	0.6361	-61.6628	0.5033		
4	17.7941	0.0069	62.8583	0.0949		
	19.2963	-1.1303	6.1800	-0.0629		
	18.2739	-1.0923	-34.7119	0.2389		
	-8.5534	-0.7788	10.286	0.4673		
	0.1709	0.0002	-0.4254	0.1434		

**Tableau 29 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Vc des fractions pétrolières

$W1_{ij} (1.0 e-02)$			biais	
$i \setminus j$	1	2	$bi(1.0 e-02)$	
1	-0.000194803	0.322333783	-0.122515727	
2	-0.000159384	1.348580876	-0.9629356697	
3	0.000123029	-0.3932795357	0.2768654908	
4	-0.003178806	0.1526796043	1.2449351851	
$i \setminus j$	$W2_{ij}$		biais	
1	0.037572340	-0.037448782	61.86953315	-61.679908
	0.000839601			

Tableau 30 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Zc des n-paraffines

$W1_{ij} (1.0 e-03)$			biais	
$i \setminus j$	1	2	$bi(1.0 e-03)$	
1	-0.00001814	-4.05754280	3.47984420188	
2	-0.00001809	-4.0495974432	3.473019539181	
3	-0.000004812	0.7367163467	-0.629718574426	
4	-0.000239160	-1.02425486805	0.985434734351	
5	0.0000514882	0.254484380	-0.2175613528033	
$i \setminus j$	$W2_{ij}$		biais	
1	33.309152744	-33.371855207	0.0099542267	0.126009445
	0.007883136 0.0679265635			

Tableau 31 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Zc des n-alkylbenzènes :

$W1_{ij} (1.0 e-02)$			biais	
$i \setminus j$	1	2	$bi(1.0 e-02)$	
1	0.000141543	0.63148688	-0.621841242	
2	-0.00013761	-0.640241576	0.626492688	
3	0.00005806	0.539142952	-0.474577949	
4	0.00059130	1.312533675	-1.2591337468	
5	0.00008224	1.094752687	-0.9219917773	
6	0.00051005	0.947758596	-0.83194604251	
7	-0.00048947	-1.321585772	1.22509396023	
8	-0.00028278	-0.270846155	0.29064586425	
$i \setminus j$	$W2_{ij}$		biais	
1	0.81111768	0.84362661	-0.02327852	3.48645584
	-0.007335601 -0.38535597		3.538617989	-1.11555649

Tableau 32 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Zc des n-alkylcyclohexanes :

I/J	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	-36.3343	0.2506	3.4877	72.1285	46.6283
2	-7.6706	0.2820	-31.4901	44.1545	
3	5.0894	-0.2083	124.8888	0.3416	
4	-1.1936	0.0024	1.2433	213.1433	
5	-15.0712	0.1042	1.8466	49.3493	

Tableau 33 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Zc des mélanges

I/J	W 1 ( I,J)		Biais 1 ( I,J)	W 2 ( I,J)		Biais 2
	1	2	1	1	1	1
1	-26.9477	0.0100	26.8869	-0.2399	-0.4115	
2	26.9501	0.0123	-25.020	-0.6557		
3	29.5338	-0.0035	-21.6222	0.0663		
4	11.7781	-0.0124	-4.0351	0.0306		
5	18.2550	0.0176	-21.3884	0.0612		
6	-15.6027	0.0083	4.646	-1.2347		
7	17.5118	0.0183	-18.5216	-0.0123		
7	28.0021	-0.0001	-15.3861	-0.2988		

Tableau 35 :Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Zc des fraction pétrolières

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu						
i/j	W1ij(couche cachée)			biais		
	1	2		bi		
1	-0.6542	-28.0016		9.4732		
2	-0.0468	-22.9907		3.7009		
3	0.0072	-8.7640		-1.8351		
4	-0.0224	23.6548		-11.0018		
5	-0.0002	-19.7504		14.1126		
6	3.8639	32.5863		20.5890		
i/j	W2ij (1.0e-04)(couche de sortie)				biais	
1	-0.5921	-0.5922	1.0481	1.3196	-0.0046	5920.4
	0.5921					

Tableau 36 :Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Hv des n-paraffines

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu						
i/j	W1ij(couche cachée)			biais		
	1	2		bi		
1	-0.5278	38.2394		164.9038		
2	0.0152	72.4234		-72.8425		
3	0.0064	-51.8393		-41.0539		
4	-0.0684	-267.9500		236.2043		
5	-216.7321	94.8972		-90.0025		
6	0.3284	-258.6463		223.9528		
i/j	W2ij(couche de sortie)				biais	
1	-1.8311	5.2530	11.3393	3.1597	-5.2349	22.9628
						23.890
						1

Tableau 37 :Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Hv des n-alkylbenzènes

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu						
I/j	W1ij(couche cachée)			biais		
	1	2		bi		
1	0.000058987	0.434322756		0.319192667		
2	0.079172919	96.92206008		-83.658860014		
3	-0.16598949	1.118748909		-78.001502320		
4	0.036972716	-150.5152396		98.356553437		
i/j	W2ij(couche de sortie)				biais	
1	911.574667385	-182.026007812	186.820170693	136.660160278		
	2.680869077					

Tableau 38 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Hv des n-alkylcyclohexanes

i/j	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	253.2539	-0.4151	-227.2991	70.2901	-63.9465
2	114.3964	-82.1361	-115.3031	71.4566	
3	273.8594	0.2412	-366.3998	-100.8676	
4	-1.1979	-0.0014	-0.0411	-628.3919	
5	-92.2351	0.4856	59.9968	-82.8158	
6	-118.0538	-0.0372	78.0512	68.4579	
6	-288.7205	3.0731	223.2990	-84.2396	

Tableau 39 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Hv de mélange hv

i/j	W 1 (I,J)		Biais 1 (I,J)	W 2 (I,J)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	274.6499	-0.9175	343.4389	-0.0206	11.6486
2	-31.8300	0.1482	-2.4423	32.6107	
3	740.4807	-2.6554	475.2523	-0.0077	
4	0.0006	-0.0009	1.6101	-116.5016	
5	79.5282	-0.1113	84.1313	11.7827	
6	-12.4368	0.3403	1.2303	32.3921	
7	-13.7992	1.1076	18.1031	0.5964	
7	26.4356	-0.0781	-9.3352	2.1809	

Tableau 40 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour Hv des fraction pétrolières

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu					
W1ij		bi		bi	
i\j	1	2	bi		
1	0.0015	13.1011	-12.0539		
2	0.1258	2.1757	10.3231		
3	0.0204	29.9694	9.1597		
4	0.1191	33.7078	24.2044		
i\j	W2ij		bi		
1	10.0107	5.9355	-8.1172	6.2396	6.1543
2	3.5378	1.9558	-2.0976	1.2837	2.5681

Tableau 41 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour la viscosité n-paraffines :

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu					
W1ij		bi		bi	
i\j	1	2	bi		
1	-0.0279	-335.9582	307.9585		
2	-0.0429	-177.6099	147.6884		
3	0.0085	-88.5295	69.6788		
4	0.0054	-17.5459	9.542		
i\j	W2ij		bi		
1	-8.385	-63.8641	2.0541	118.3545	65.246
2	-0.7311	-31.2434	-1.5895	65.3788	33.4567

Tableau 42 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour la viscosité n-alkylbenzènes :

<i>Poids des connexions et biais pour le réseau retenu</i>					
<i>W1ij</i>				<i>biais</i>	
<i>i\j</i>	1	2			<i>bi</i>
1	-0.1087	-35.6508			17.1159
2	0.0267	-38.7513			12.4862
3	0.0464	-110.3515			88.9721
4	0.0662	-73.9730			53.8718
5	-0.0058	-8.3830			11.1507
<i>i\j</i>	<i>W2ij</i>				<i>biais</i>
1	-8.5977	14.7852	3.5413	6.7139	8.5565
	12.2489				

**Tableau 43 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour la viscosité à 100°F n-alkylcyclohexanes :

<i>Poids des connexions et biais pour le réseau retenu</i>					
<i>W1ij</i>				<i>biais</i>	
<i>i\j</i>	1	2			<i>bi</i>
1	0.3080	62.7013			158.4417
2	0.0001	-1.7086			1.4424
3	-0.0062	53.8855			-40.9731
4	-0.0019	-28.4941			24.1421
5	-0.0431	-17.6129			8.0529
<i>i\j</i>	<i>W2ij</i>				<i>biais</i>
1	-0.0007	-0.3689	-1.0918	-0.0454	0.7972
	0.3425				

**Tableau 44 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour l'indice de réfraction des n-paraffines .

<i>Poids des connexions et biais pour le réseau retenu</i>					
<i>W1ij</i>				<i>biais</i>	
<i>i\j</i>	1	2			<i>bi</i>
1	-0.0000	216.8			-195.8
2	0.0000	-70.4			59.8
3	0.2000	-349.9			221.2
4	0.200	2473.5			-2211.9
5	-0.100	149.5			-125.4
<i>i\j</i>	<i>W2ij</i>				<i>biais</i>
1	-14.1473	-0.0137	-0.0004	-40.1309	13.7442
	-13.7275				

**Tableau 45 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour l'indice de réfraction des n-alkylbenzènes

<i>Poids des connexions et biais pour le réseau retenu</i>					
<i>W1ij</i>				<i>biais</i>	
<i>i\j</i>	1	2			<i>bi</i>
1	0.123	20.7326			-24.9041
2	0.0664	-543.2537			404.6011
3	0.0985	-108.7799			85.7617
4	0.0123	20.7231			-24.8909
5	0.0165	25.5115			13.1223
<i>i\j</i>	<i>W2ij</i>				<i>biais</i>
1	-3.8057	0.0010	309.5451	3.8125	308.1018
	0.0159				

**Tableau 46 :** Poids des connexions et biais pour le réseau retenu des pour l'indice de réfraction des n-alkylcyclohexanes



Poids des connexions et biais pour le réseau retenu						
i\j	W1ij			biais		biais
	1	2		bi		
1	-0.0018	-12.9672		12.0365		
2	-0.0179	48.2483		-26.9603		
3	0.0139	-181.0011		150.5144		
4	-0.1182	-67.7790		51.5899		
5	0.0034	-253.7361		217.4883		
i\j	W2ij					biais
1	-1.2817	0.1179	0.7303	-0.0988	0.8212	0.0192

Tableau 47 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour facteur acentrique *n*-paraffines

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu							
i\j	W1ij					biais	
	1	2				bi	
1	0.0359	-248.4359				185.4843	
2	-0.0380	300.9995				-263.6755	
3	-0.1040	-193.5778				206.2515	
4	-0.0028	11.5358				-7.4172	
5	0.0640	-162.8433				114.7106	
6	0.0655	289.9632				251.9181	
7	-0.2547	331.2618				-177.2168	
i\j	W2ij					biais	
1	0.0344	1.6423	7.5888	-1.7016	-4.5136	-1.5116	0.8975
							-2.8267

Tableau 48 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour facteur acentrique *n*-alkylbenzenes :

I\J	W 1 (LJ)		Biais 1 (LJ)		W 2 (LJ)		Biais 2	
	1	2	1	2	1	2	1	2
1	-317.5191	-61.0148	21.1111	1.1111	-211.331	-211.331	211.331	211.331
2	317.5191	61.0148	-21.1111	-1.1111	211.331	211.331	-211.331	-211.331
3	-1.2111	1.1111	1.1111	-1.1111	1.1111	1.1111	-1.1111	-1.1111
4	-4.1111	1.1111	1.1111	1.1111	1.1111	1.1111	-1.1111	-1.1111
	-173.2472	-3.0649	1.1111	1.1111	-1.1111	-1.1111	1.1111	1.1111
	82.1830	0.0455	4.1111	1.1111	1.1111	1.1111	-1.1111	-1.1111

Tableau 49 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour facteur acentrique *n*-alkylbenzenes :

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu						
i\j	W1ij			biais		biais
	1	2		bi		
1	-0.0107	5.0570		1.5750		
2	-3.6986	28.4649		-29.3227		
3	-0.0079	16.8113		-8.0953		
4	0.0768	-41.0678		28.4373		
5	-0.0928	22.6812		20.7433		
i\j	W2ij					biais
1	-0.1523	-1.0655	0.7049	3.4220	7.3095	
						-1.3266

Tableau 50 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour Kuop.*n*-paraffines :

Poids des connexions et biais pour le réseau retenu					
i\j	W1ij		biais		
	1	2	bi		
1	-0.0025	52.5694	-43.2592		
2	0.4208	-235.8607	11.5367		
3	-0.1670	274.2902	-183.7958		
4	-1.9979	247.4463	-213.9194		
5	0.3708	-206.4567	176.8055		
i\j	W2ij				biais
1	-2.2385	0.0191	-5.7806	-1.7746	2.8537
	1.8967				

Tableau 51 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour facteur acentrique *n-alkylbenzenes* :

i\j	W 1 ( IJ)		Biais 1 ( IJ)	W 2 ( IJ)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0000	-0.00000001	-0.00000000	0.00000000	0.00000000
3	0.0000	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
4	0.0000	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
	0.0000	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000

Tableau 52 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour Kuop les melanges

i\j	W 1 ( IJ)		Biais 1 ( IJ)	W 2 ( IJ)	Biais 2
	1	2	1	1	1
1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tableau 53 : Poids des connexions et biais pour le réseau retenu pour Kuop de fractions petrolières