

**NOUVELLES CORRELATIONS POUR LA PREDICTION DE  
L'INDICE D'OCTANE D'ESSENCES SUPER SANS  
PLOMB A BASE DU MTBE ET ETHANOL**

*Djamel EL-HADI (1), Karima IBELAID (2)*

*(1) Laboratoire d'analyse fonctionnelle des procédés chimiques, Département de Chimie Industrielle, Université de Blida Route de Soumâa B.P 270 09000 Blida Algérie,*

*(2) Centre de Recherche et Développement, Av. 1<sup>er</sup> Novembre Boumerdès Algérie,*

*E-Mails : elhadi\_djamel@yahoo.fr / k.ibelaid@yahoo.fr*

**Résumé** - L'indice d'octane est la caractéristique la plus importante des essences utilisées comme carburants dans les moteurs à allumage commandé. L'indice d'octane peut être déterminé par plusieurs méthodes, qui sont généralement coûteuses et nécessitent un temps long. L'objectif de ce travail est l'élaboration de nouvelles corrélations capables de déterminer l'indice ou le nombre d'octane recherche (NO) des essences sans plomb formulées à base du MTBE et Ethanol. Les modèles proposés expriment la variation de l'indice d'octane en fonction du pourcentage volumique des différentes bases utilisées. L'erreur relative en % calculée entre les valeurs théoriques et les valeurs déterminées expérimentalement des essences étudiées est de l'ordre de 0.15 à 0.56%. Ainsi, les coefficients de corrélation R des modèles obtenus varient entre 0.95 et 1.

Mots-clefs: Essence ; Formulation ; Corrélation ; Indice d'octane ; MTBE ; Ethanol.

## 1. INTRODUCTION

La coupe issue du pétrole brut la plus demandée est la gazoline ou essence, surtout avec l'essor de l'industrie automobile qui, exige de plus en plus des critères de qualité qui permettent d'obtenir les meilleurs performances du véhicule. L'amélioration des rendements des véhicules est due à l'augmentation de l'indice d'octane de nos carburants. Ce dernier est la caractéristique la plus importante qui mesure la qualité des carburants. Pour accroître l'indice d'octane d'un carburant on utilise des produits plombés c à d contiennent du plomb. On appelle ce type de carburant « supercarburant plombé ».

Les véhicules à essence plombée rejettent des polluants. Les principaux polluants sont : le monoxyde de carbone (CO) qui est toxique, les hydrocarbures imbrûlés qui contribuent à la formation du brouillard polluant et les oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>) qui, en présence d'oxygène se convertissent rapidement en dioxyde d'azote (NO<sub>2</sub>) qui, à son tour combiné à l'eau de l'atmosphère forme des pluies acides. Sous cette pression écologique, les industries des carburants doivent aboutir à des modifications concernant la formulation des carburants, pour produire des supercarburants plus propres. De ce fait, la suppression complète du plomb des essences est devenue une nécessité, qui a entraîné les raffineurs à fournir d'importants efforts afin de maintenir l'indice d'octane à un niveau satisfaisant. Une solution partielle a été trouvée, c'est celle d'incorporer des produits oxygénés permettant de réduire les concentrations des composants polluants et d'accroître l'indice d'octane.

Le but de cette étude dans un premier temps est de déterminer selon quel modèle l'indice d'octane varie en fonction de la composition en différentes bases utilisées pour la formulation des essences ; ce qui permet par la suite de détecter le facteur qui influe le plus sur l'accroissement de l'indice d'octane.

## 2. PARTIE EXPERIMENTALE

Dans une première étape nous avons caractérisé les essences commercialisées par les raffineries sélectionnées pour notre étude à savoir Alger et Skikda ; les résultats obtenus serviront de référence pour les essences reformulées au laboratoire. Les bases utilisées dans les formulations sont :

- Raffinerie d'Alger : Platformat A (PltA) ; Essence SR (ESR) ; Solvant léger (Slg)
- Raffinerie de Skikda : Platformat S (PltS) ; Isopentane (Isp) ; Naphta A (Npt) ; Aromatiques lourds (Arlo).

Dans l'annexe 1, nous avons donné les principales caractéristiques des bases utilisées.

Sur la base des performances à atteindre et des résultats de calculs, basés sur le critère d'additivité des caractéristiques les plus importantes (densité, tension de vapeur (TVR) et indice d'octane (NO)) ; la préparation des essences s'est effectuée en plusieurs séries de mélanges et cela par l'utilisation des différentes bases des deux raffineries avec incorporation de différentes proportions de MTBE (méthyl-tertio-butyl-ether) et Ethanol. Les compositions des essences reformulées en pourcentage volumique (% vol) sont représentées dans les annexes 2 et 3.

## 3. CORRELATIONS PROPOSEES

Le modèle mathématique proposé pour l'estimation de l'indice d'octane NO des essences reformulées est basé sur l'utilisation de la régression multilinéaire de l'indice d'octane déterminé expérimentalement sur les compositions X<sub>j</sub> (j = PltA, ESR, Slg, PltS, Isp, Npt, Arlo, MTBE, Etol(Ethanol)), en % vol des différentes bases utilisées. Ce qui permet de mettre en évidence les équations suivantes :

### 3.1 Corrélations spécifiques aux essences

*reformulées par ajout de MTBE :*

- Pour la première série :

$$NO = 0.8862X_{PltA} + 0.6327X_{ESR} + 0.5436X_{Slg} + 1.1373X_{Arlo} + 1.2466X_{MTBE} \quad (1)$$

- Pour la deuxième série :

$$NO = 1.0170X_{PltS} + 0.001125X_{Isp} + 0.5761X_{Npt} + 0.7276X_{Arlo} + 1.4178X_{MTBE} \quad (2)$$

- Pour la troisième série :

$$NO = 0.5731X_{ESR} + 0.8656X_{Slg} + 0.9255X_{PltS} + 1.0200X_{Arlo} + 1.4439X_{MTBE} \quad (3)$$

### 3.2 Corrélations spécifiques aux essences

*reformulées par ajout d'Ethanol :*

- Pour la première série :

$$NO = 0.8062X_{ESR} + 0.6545X_{Slg} + 1.0432X_{PltS} + 0.1318X_{Etol} \quad (4)$$

- Pour la deuxième série :

$$NO = 1.1314X_{ESR} + 0.6314X_{Slg} + 0.9514X_{PltS} + 0.7514X_{Isp} + 1.1514X_{Arlo} + 0.2430X_{Etol} \quad (5)$$

- Pour la troisième série :

$$NO = - 0.032X_{PhtS} - 0.08 X_{Isp} - 0.38 X_{Npt} + 0.223X_{Arlo} + 19.74X_{Etol} \quad (6)$$

Dans le but de déterminer la précision des différentes constantes, nous associons à chaque corrélation le calcul des grandeurs statistiques : l'erreur relative en pourcentage (Er (%)) et le coefficient de corrélation (R), qui sont définis par les formules suivantes :

$$Er(\%) = 100( \hat{a}^{1/2}NO_{exp} - NO_{the}^{1/2} / NO_{the} ) / n \quad (7)$$

$$R = ( \hat{a}(NO_{the} - x) / \hat{a}(NO_{exp} - x) )^{1/2} \quad (8)$$

Avec :  $NO_{exp}$  = la valeur expérimentale ou mesurée de NO ;  
 $NO_{the}$  = la valeur estimée ou théorique de NO ; n = nombre de points expérimentaux, x est donnée par la formule :  $x = ( \hat{a} NO_{exp} ) / n$ .

Les valeurs des grandeurs statistiques sont données dans le tableau 1.

Tableau 1 : Valeurs des grandeurs statistiques Er et R relatives aux différentes corrélations

Corrélation	Er (%)	R
Première série(MTBE)	0.265	0.997
Deuxième série(MTBE)	0.464	0.950
Troisième série(MTBE)	0.148	0.995
Première série(Ethanol)	0.187	0.998
Deuxième série(Ethanol)	0.564	0.990
Troisième série(Ethanol)	0.064	0.999

#### 4. DISCUSSION DES RESULTATS

Les valeurs des grandeurs statistiques représentées dans le tableau 1 montrent que les modèles proposés sont caractérisés par une très grande précision ( $Er_{moy} \approx 0.282\%$  et  $0.950 < r < 0.999$ ). Les figures 1, 2, 3, 4, 5 et 6 montrent aussi que les indices d'octane des essences reformulées, calculés par ces modèles sont très proches à ceux obtenus par expérience.

On désire détecter quelles sont les bases utilisées dans la reformulation des essences qui influent le plus sur l'indice d'octane, pour cela on s'intéresse à une étude corrélatrice qui nous permet d'apercevoir le degré d'influence, plus précisément c'est l'étude de la corrélation partielle. Cette corrélation permet de choisir les variables explicatives à introduire dans le modèle statistique pour trouver les variables explicatives fortement liées à la variable à expliquer, tout en limitant les moindres corrélées entre elles. Alors le degré d'influence pourra être aperçu en calculant le coefficient de corrélation partiel entre l'indice d'octane et les bases utilisées dans les reformulations.

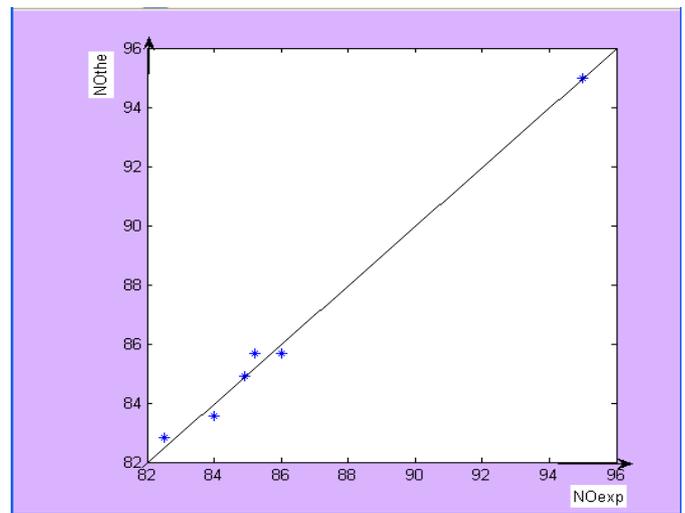


Figure 1 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (1<sup>ère</sup> série MTBE).

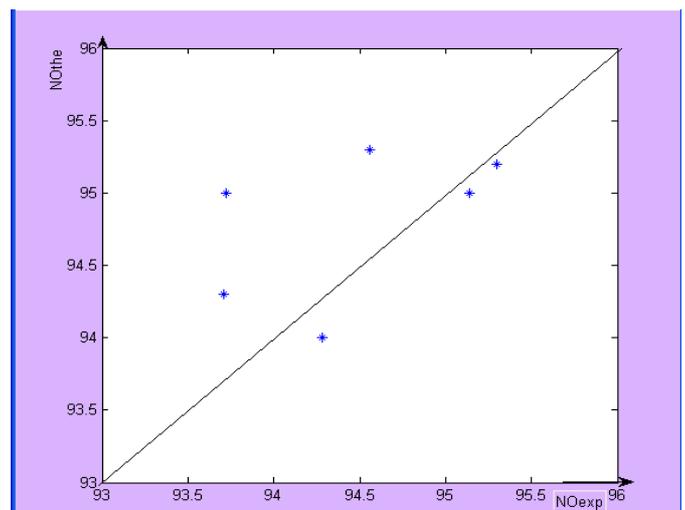


Figure 2 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (2<sup>ème</sup> série MTBE).

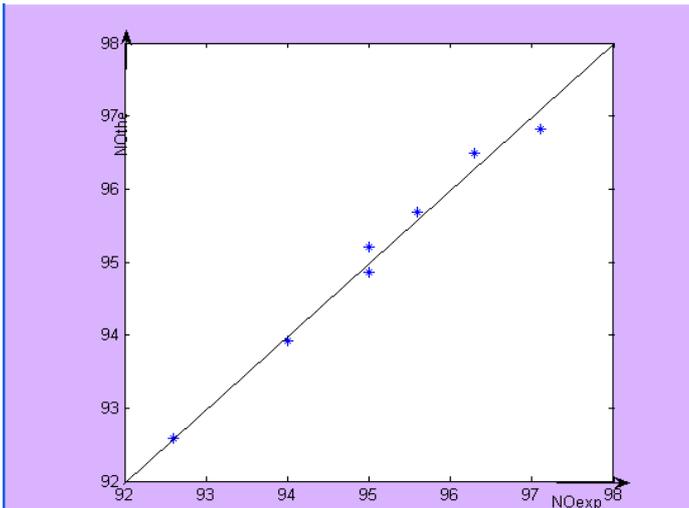


Figure 3 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (3<sup>ème</sup> série MTBE).

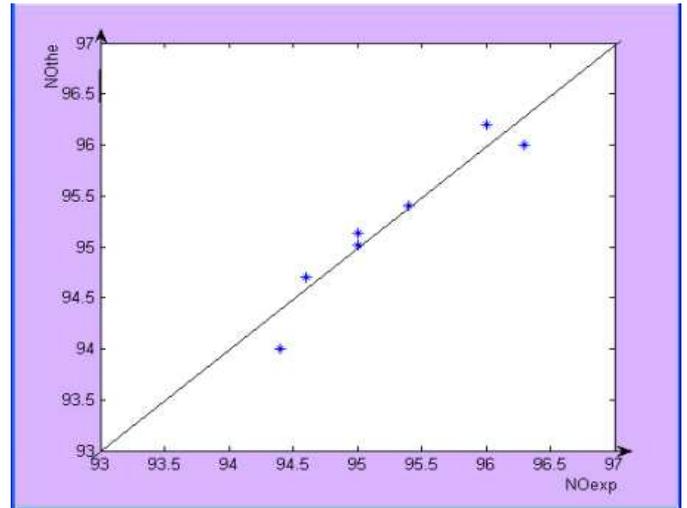


Figure 5 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (2<sup>ème</sup> série Ethanol).

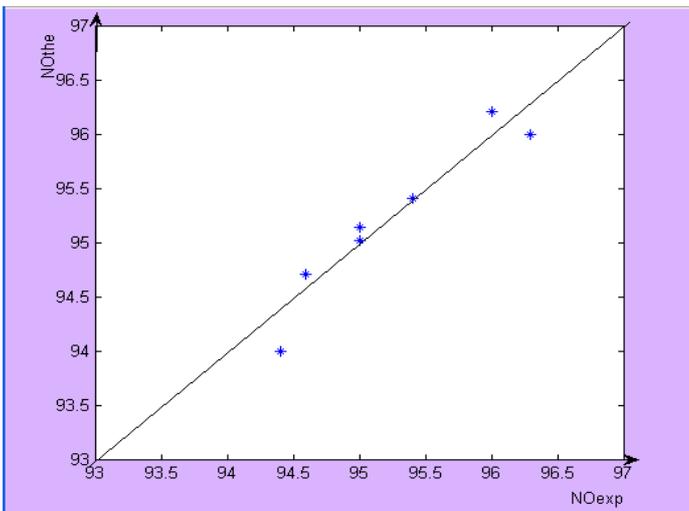


Figure 4 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (1<sup>ère</sup> série Ethanol).

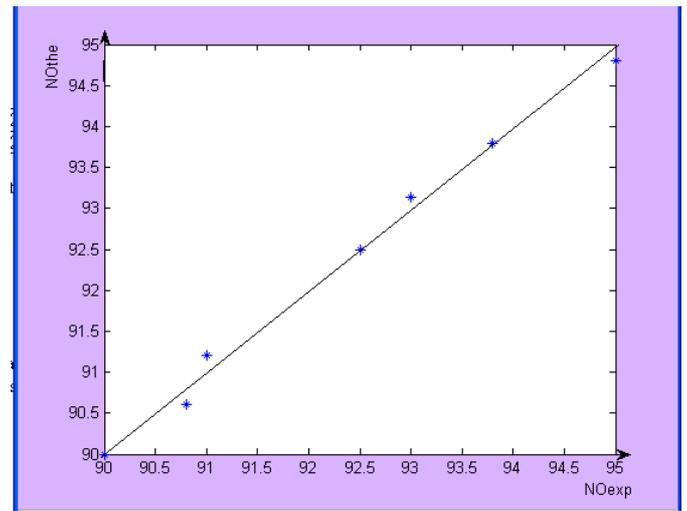


Figure 6 : Comparaison des deux indices d'octane théorique et expérimental (3<sup>ème</sup> série Ethanol).

D'après les résultats obtenus du calcul des coefficients de corrélation partiels de tous les ordres, on peut classer les différentes bases selon influence dans l'ordre décroissant suivant :

- Pour la première série (MTBE) : Platformat A, Aromatiques lourds, MTBE, Essence SR, Solvant léger.

- Pour la deuxième série (MTBE) : Platformat S, Solvant léger, MTBE, Essence SR, Aromatiques lourds.

- Pour la troisième série (MTBE) : Platformat S, MTBE, Naphta A, Isopentane, Aromatiques lourds.

- Pour la première série (Ethanol) : Ethanol, Platformat S, Essence SR, Solvant léger.

- Pour la deuxième série (Ethanol) on a remarqué que l'Ethanol est le plus influent sur l'accroissement du NO, par contre les autres bases ont le même degré d'influence.

- Pour la troisième série (Ethanol) : Ethanol, Platformat S, Isopentane, Naphta A, Aromatiques lourds.

Ce classement s'interprète par le rôle d'introduction de ces bases pour l'accroissement de la valeur de l'indice d'octane.

Les résultats obtenus montrent que le platformat représente la base principale dans la formulation des essences ; l'introduction du MTBE permet d'obtenir des carburants de bonne qualité. Nous remarquons aussi que la substitution du platformat de la raffinerie d'Alger par celui de Skikda a nettement amélioré la qualité des essences formulées. Le platformat d'Alger peut être amélioré par ajout d'une faible quantité d'aromatiques lourds et du MTBE.

Pour les essences obtenus par introduction de l'Ethanol, nous remarquons que ce dernier influe fortement sur la valeur de l'indice d'octane; mais la faible concentration permise (5%) ne permet pas d'atteindre les spécifications demandées.

## 5. CONCLUSION

L'industrie du raffinage est confrontée à des contraintes majeurs : évolution de la demande, durcissement des spécifications des produits et contraintes environnementales. Cependant, l'Algérie doit relever ce défi et développer le créneau relatif à la production de carburants propres ; et avant de passer aux investissements lourds notamment la construction d'unités d'isomérisation ou autres, une solution plus urgente et efficace peut être adoptée, qui est la reformulation de carburants avec des bases disponibles dans les raffineries existantes.

En effet, cette étude a mis en lumière la possibilité de produire des essences sans plomb de bonne qualité; ainsi les corrélations obtenues peuvent être utilisées comme un outil efficace pour le choix quantitative et qualitative des bases utilisées dans une formulation.

Les modèles utilisés dans ce travail sont du type "Premier degré" ; les corrélations obtenues peuvent être améliorées, en utilisant les modèles quadratiques, cubiques, etc. Pour une meilleure valorisation de ces corrélations, l'étape suivante sera consacré à la mise au point des formules d'essences en optimisant l'indice d'octane ( $NO_{max}$ ). La mise en évidence de cette étude nécessite l'utilisation de l'outil mathématique : planification d'expériences en formulation et optimisation.

## REFERENCES

- [1] J. C. Guibet, "Utilisation des produits organiques oxygénés comme carburants et combustibles dans les moteurs, Première partie: Aspects techniques de l'utilisation sur moteurs", Revue de l'Institut Français du Pétrole, Vol.36, N°5, Septembre-Octobre 1981.
- [2] J. C. Guibet, "Carburants et moteurs", Tome 1 et 2, Institut Français du Pétrole, Edition Technip, 1970.
- [3] J. L. Nocca, A. Forestière et J. Cosyns, "Nouvelles technologies IFP pour la reformulation des essences", Revue de l'Institut Français du Pétrole, Vol.49, N°5, Septembre-Octobre 1994.
- [4] K. Dexter Miller, "MTBE demand to decline after peaking", Oil and Gas Journal, Nov., 19, 2000.
- [5] K. Ibelaid, Thèse de Magister en Génie Chimique, "Reformulation de super carburants sans plomb par ajout de composés oxygénés" E.N.P.Alger, Algérie, Mars 2005.
- [6] D. Mathieu, R. Phan-Tan-Luu, "Planification d'expériences en formulation : criblage", Techniques de l'Ingénieur, traité Génie des procédés, J2240.
- [7] D. Mathieu, R. Phan-Tan-Luu, "Planification d'expériences en formulation : optimisation", Techniques de l'Ingénieur, traité Génie des procédés, J2241.

## ANNEXE

## ANNEXE 1 : Caractéristiques des bases des Raffineries d'Alger et de Skikda

Caractéristiques	Platformat A	Essence SR	Solvant léger	Platformat S	Isopentane	Naphta A	Aromatiques lourds
Densité à 15°C	0.7705	0.6365	0.7071	0.7940	0.6300		0.8801
Indice de réfraction à 20°C	1.4455	1.3690	1.4012	1.4598	-	0.6979	1.5078
TVR en kPa	34.75	116.40	26.1	26.4	202.2	1.3862	6.1
Teneur en soufre en ppm	-	13.4	20.9	-	-	55.5	1.5
NO	90	69	64	97.2	91.2	1.5	109.6
Distillation ASTM :						66.9	
Point initial	46	25	68	47	-		157
Point final	196	83	130	191	-	41	231
Résidu en % vol	1.0	0.3	0.7	1	-	105	1.2
Pertes en % vol	0.7	3.3	0.7	0.7	-	0.5	0.1
Analyse Chromatographique:						1	
Teneur en paraffines	14.0	53.8	33.2	9.5	-		0.04
Teneur en isoparaffines	46.6	40.4	38.2	19.8	-	68.1	-
Teneur en naphthène	11.9	4.9	25.7	2.5	-	-	-
Teneur en aromatiques	26.5	0.9	2.9	67.6	-	28.6	99.96
Teneur en oléfines	1.4	0.0	0.0	0.6	-	3.3-	-

## ANNEXE 2: Composition des essences reformulées par ajout de MTBE

N° Essence	Bases RA <sub>1</sub> G (%vol)			Bases RA <sub>1</sub> K (%vol)				MTBE (%vol)
	Platformat A	Essence SR	Solvant léger	Platformat S	Naphta A	Isopentane	Aromatiques Lourds	
Première série A								
1	60	10	20	-	-	-	-	10
2	56	9	20	-	-	-	-	15
3	58	10	17	-	-	-	-	15
4	60	10	16	-	-	-	-	14
5	58	10	20	-	-	-	-	12
Première série B								
6	-	10	10	60	-	-	0	20
7	-	11	9	65	-	-	0	15
8	-	12	8	65	-	-	0	15
9	-	5	10	70	-	-	0	15
10	-	15	5	60	-	-	5	15
11	-	16	5	60	-	-	5	14
Deuxième série A								
12	-	-	-	68	17	3	-	12
13	-	-	-	67	15	3	-	15
14	-	-	-	70	10	5	-	15
Deuxième série B								
15	-	-	-	50	20	5	10	15
16	-	-	-	55	15	5	10	15
17	-	-	-	60	15	5	5	15
18	-	-	-	65	10	6	4	15
Troisième série								
19	70	2	3	-	-	-	10	15
20	66	4	3	-	-	-	12	15

Source : SONATRACH / AMT /Division CRD

## ANNEXE 3: Composition des essences reformulées par ajout d’Ethanol

N° Essence	Bases RA <sub>1</sub> G (%vol)			Bases RA <sub>1</sub> K (%vol)				Ethanol (%vol)
	Platformat A	Essence SR	Solvant Léger	Platformat S	Naphta A	Isopentane	Aromatiques Lourds	
Première série								
1	-	18	2	75	-	-	-	5
2	-	8	7	80	-	-	-	5
3	-	20	0	75	-	-	-	5
4	-	15	0	80	-	-	-	5
5	-	10	5	80	-	-	-	5
6	-	13	2	80	-	-	-	5
7	-	15	5	75	-	-	-	5
Deuxième série								
8	-	10	20	60	-	5	0	5
9	-	10	15	65	-	5	0	5
10	-	10	10	60	-	6	9	5
11	-	11	9	65	-	5	5	5
12	-	10	20	50	-	5	10	5
Troisième série								
13	-	-	-	60	15	10	10	5
14	-	-	-	65	15	10	5	5
15	-	-	-	55	20	10	10	5
16	-	-	-	70	10	10	5	5
17	-	-	-	70	15	10	0	5
18	-	-	-	75	10	5	5	5
19	-	-	-	75	6	8	5	5

Source : SONATRACH / AMT /Division CRD