



Résumé de recherche – Incidence des propriétés du pétrole brut sur les propriétés d’inflammabilité

Transport des marchandises dangereuses | Division de la recherche scientifique

RÉSUMÉ

La présente étude a révélé des liens statistiques entre les propriétés mesurées du pétrole brut et a permis de conclure que bien que les mesures d’inflammabilité peuvent être prédites, les erreurs associées aux prédictions effectuées à partir des modèles peuvent toutefois en limiter l’application.

CONTEXTE

Des efforts ont été entrepris au Canada et aux États-Unis afin de mieux comprendre les caractéristiques du pétrole brut et de mieux évaluer certains risques associés à son transport. Le Comité directeur de coordination de la recherche sur le pétrole brut (*Crude Oil Research Coordination Steering Committee – CORC*), composé de représentants du département des Transports des États-Unis (DOT), du département de l’Énergie des États-Unis (DOE) et de Transports Canada (TC), a supervisé la création du plan d’échantillonnage, d’analyse et d’expérimentation (*Sampling, Analysis and Experiment Plan*) pour la recherche sur les caractéristiques du pétrole brut.

Pour compléter les travaux réalisés lors de la création du plan d’échantillonnage, d’analyse et d’expérimentation, TC a lancé, en 2019, une campagne d’analyse et d’échantillonnage du pétrole brut en vue d’obtenir 25 échantillons représentatifs des types de pétrole brut transportés par voie terrestre au Canada. Les échantillons recueillis représentent toute une gamme de pétroles lourds, moyens et légers, classiques ou sulfureux ou peu sulfureux. Les échantillons comprenaient également des condensats et du bitume dilué.

La caractérisation des pétroles bruts a été effectuée en mesurant leurs propriétés physiques (comme la densité et la viscosité), leurs propriétés chimiques (comme leur teneur en eau et en soufre et leur taux de carbone résiduel), leur point d’éclair, leur point initial d’ébullition, leur pouvoir calorifique, leurs pressions de vapeur, et leur composition en phase liquide ou gazeuse. Deux (2) échantillons qui ne répondaient pas aux critères du point d’éclair pour être classés comme des marchandises dangereuses de classe 3 ont été exclus des analyses subséquentes. Les résultats obtenus

après analyse des 23 échantillons restants ont été combinés aux résultats de six (6) campagnes d'échantillonnage précédentes réalisées au Canada et ont été évalués dans le cadre de la présente étude.

OBJECTIFS

Le but de ces travaux était de mieux comprendre les propriétés du pétrole brut qui ont la plus forte incidence sur ses propriétés d'inflammabilité (point d'éclair et point initial d'ébullition) et sur son pouvoir calorifique. Pour parvenir à cette fin, une analyse statistique des propriétés physiques et chimiques, de la composition, du pouvoir calorifique et des propriétés d'inflammabilité des échantillons de pétrole brut canadiens a été réalisée. Par la suite, l'analyse a été utilisée pour déterminer si le point initial d'ébullition déterminé par chromatographie en phase gazeuse (PI-CG), le point d'éclair, la teneur en sulfure d'hydrogène (H₂S) en phase gazeuse dans deux (2) conditions d'essai (rapport phase gazeuse/phase liquide de 0,1:1 et de 4:1), et le pouvoir calorifique brut (PC), conjointement « les propriétés ciblées », pouvaient être prédits au moyen d'autres propriétés mesurées. Une série d'analyses statistiques ont été réalisées en vue d'atteindre trois (3) objectifs :

1. Déterminer la relation statistique entre les propriétés mesurées du pétrole brut;
2. Définir des modèles pour prédire les quatre (4) principales propriétés ciblées au moyen d'autres propriétés mesurées;
3. Déterminer si les attributs des échantillons de pétrole comme le type ou le groupe d'emballage concordent avec les agrégations statistiques définies selon les propriétés mesurées.

MÉTHODES

Le rapport repose sur deux (2) ensembles de données sur le pétrole brut : le premier est tiré de 23 échantillons de pétrole brut recueillis en 2019 (« les échantillons de 2019 »), et le deuxième, de 107 échantillons de pétrole brut, qui comprennent les échantillons recueillis en 2019 ainsi que des échantillons recueillis lors de précédentes campagnes d'échantillonnage et d'analyse (« l'ensemble des échantillons »). Une analyse statistique a été effectuée sur les deux ensembles de données afin de déterminer les liens possibles entre les différentes propriétés du pétrole brut ainsi que les relations statistiques entre les propriétés du pétrole brut et ses propriétés d'inflammabilité.

Pour permettre la réalisation d'une analyse exploratoire des données disponibles, les propriétés ont été groupées en catégories, comme les gaz, les fractions légères (C1 à C5), les fractions lourdes (C6 à C25 et plus) et les propriétés physiques. Les relations entre les quatre (4) principales propriétés ciblées (PI-CG, point d'éclair, teneur en H₂S en phase gazeuse et PC) et ces groupes de propriétés ont été explorées à l'aide de graphiques afin de vérifier la présence de données aberrantes et d'observer les relations statistiques sous-jacentes.

Deux (2) techniques statistiques différentes ont ensuite été utilisées pour bâtir les modèles prédictifs pour les principales propriétés ciblées : l'analyse de régression partielle par les moindres carrés et les forêts d'arbres décisionnels. Une validation croisée a été effectuée pour évaluer la justesse des prévisions générées par chacun des modèles.



RÉSULTATS

Plusieurs des propriétés mesurées sont statistiquement dépendantes, et l'analyse a mené à la conclusion que des relations statistiques existent entre trois (3) des quatre (4) propriétés ciblées et les autres propriétés mesurées parmi les échantillons de pétrole brut.

L'analyse initiale du point d'éclair a révélé un déséquilibre au sein des données : presque toutes les valeurs établies correspondaient à < -30 °C. Sans valeurs exactes, il était impossible de déterminer les relations statistiques entre le point d'éclair et d'autres propriétés du pétrole brut. L'analyse n'a pas été approfondie.

Les plus importantes corrélations (positives ou négatives) entre les propriétés du pétrole brut ont été établies entre les principales propriétés des fractions lourdes et d'autres propriétés physiques comme la densité, la viscosité et la teneur en soufre. Les corrélations entre les autres groupes de résultats étaient généralement plus faibles.

Pour ce qui est du PC, une corrélation de 0,80 a été établie avec la gamme C1 à C4; de 0,59 avec la gamme C6 à C24; et de 0,68 avec le naphta pour les échantillons de 2019. Des corrélations de 0,81; de 0,65; et de 0,69 ont été établies pour l'ensemble des échantillons, ce qui indique qu'à mesure que le pourcentage massique de la gamme C1 à C4 et C6 à C4 augmente, le pouvoir calorifique augmente.

Pour ce qui est du PI-CG, des corrélations négatives ont été observées avec la plupart des fractions légères pour les deux groupes d'échantillons.

Pour ce qui est de la teneur en H₂S en phase gazeuse (mesurée à la fois selon le

rapport phase gazeuse/phase liquide 0,1:1 et 4:1), une corrélation positive supérieure à 0,78 a été observée avec la teneur en H₂S en phase liquide pour les échantillons de 2019; une corrélation positive moyenne a été observée avec la teneur en thiols (0,58) et en eau ($\sim 0,55$); et des corrélations positives faibles ont été observées avec les autres propriétés.

Les deux (2) modèles (régression partielle par les moindres carrés et les forêts d'arbres décisionnels) ont permis de prédire le point PI-GC. Il est toutefois difficile d'établir si l'erreur associée au modèle est suffisamment petite pour que les modèles puissent être utilisés dans un contexte pratique. Les deux mesures de la teneur en H₂S en phase gazeuse n'étaient que faiblement prévisibles avec les deux modèles.

La mesure du pouvoir calorifique brut était nettement plus prévisible, la marge d'erreur s'approchant de celle de la méthode d'essai en laboratoire.

Pour observer les tendances dans les données sur le pétrole brut, deux (2) méthodes d'agrégation statistique ont été utilisées : la méthode des K moyennes et la méthode de partitionnement autour de médoïdes (PAM). Les deux ont donné des résultats très semblables. La densité du pétrole brut (et les propriétés qui y sont associées) semble être un important facteur d'agrégation, à la fois pour les échantillons de 2019 et pour l'ensemble des échantillons.



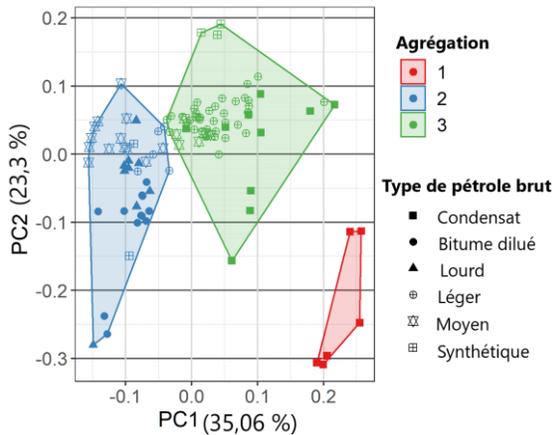


Figure 1 : Agrégation par K moyennes des covariables du point initial d'ébullition montrant trois agrégations et les types de pétrole brut. Ensemble des échantillons.

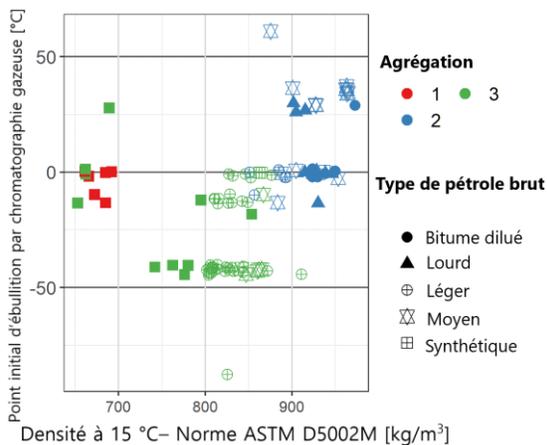


Figure 2 : Relation entre la densité et le point initial d'ébullition par agrégation et type de pétrole brut. Ensemble des échantillons.

CONCLUSIONS

Il existe effectivement des relations statistiques entre les propriétés d'inflammabilité du pétrole brut et ses autres propriétés.

- Les corrélations les plus fortes ont été observées entre les principales propriétés des fractions lourdes et les propriétés physiques, comme la

densité, la viscosité et la teneur en soufre. Ces corrélations étaient généralement négatives avec le pouvoir calorifique, et généralement positives avec le PI-CG.

- À mesure que la fraction massique de la gamme C1 à C4, du naphta et de la gamme C6 à C24 (ce qui comprend la fraction naphta) augmente, le pouvoir calorifique d'un pétrole brut augmente, et la densité et le point initial d'ébullition diminuent.
- Il existe des corrélations positives entre les deux mesures de la teneur en H₂S en phase gazeuse et la teneur en H₂S en phase liquide, et des corrélations positives moyennes entre ces mesures et la teneur en thiols en phase liquide. Bien que la teneur en H₂S en phase gazeuse augmente généralement à mesure que la teneur en H₂S en phase liquide augmente, il ne s'agit pas d'une corrélation linéaire et prévisible, comme il a été démontré lors de modélisations subséquentes.

Les résultats de la modélisation statistique démontrent que le PC, à la fois pour les échantillons de 2019 et l'ensemble des échantillons, est beaucoup plus prévisible que le PI-CG. Les deux valeurs mesurées pour la teneur en H₂S en phase gazeuse ne sont que faiblement prévisibles : des erreurs de prédiction de 4 300 ppmv pour le modèle des forêts d'arbres décisionnels et de 9 200 ppmv pour le modèle de régression partielle par les moindres carrés ont été observées.

La densité du pétrole brut (et les propriétés qui y sont associées) semble être l'un des principaux facteurs dans l'agrégation statistique. Les trois groupes d'emballage ne présentent pas de relation forte avec les agrégations définies lors de l'analyse statistique, ce qui porte à croire que les agrégations, définies au moyen des propriétés mesurées, dépendent de

facteurs autres que le point initial d'ébullition et le point d'éclair.

MESURES À VENIR

Ce projet est maintenant terminé et la Division de la recherche scientifique du Transport des marchandises dangereuses de TC n'a pas prévu de réaliser d'autres travaux relativement à ce projet.

RÉFÉRENCES

Les références des travaux décrits dans le présent document figurent dans le rapport complet.

TP15460E

ISBN: 978-0-660-36841-2

Numéro de Catalogue: T86-10/1-2020E-PDF

REMERCIEMENTS

TC tient à remercier les producteurs de pétrole et les opérateurs de terminaux qui lui ont permis d'accéder à leurs installations pour la collecte des échantillons.

Nous tenons également à remercier Ashutosh Garga, d'Alberta Energy, qui a organisé la collecte d'un ensemble d'échantillons dans le cadre du Bitumen Assay Program de l'Alberta.

L'examen par les pairs a été réalisé par les membres du Comité directeur de coordination de la recherche sur le pétrole (CORC).

Ces travaux ont été réalisés avec InnoTech Alberta, et la DGTMD souhaite remercier Amanda Prefontaine and Craig Aumann.

COMMUNIQUER AVEC

Pour obtenir une copie du rapport, veuillez communiquer avec nous :

Division de la recherche scientifique du Transport des marchandises dangereuses
TC.TDGScientificResearch-RecherchescientifiqueTMD.TC@tc.gc.ca

MOTS-CLÉS

pétrole brut, point initial d'ébullition déterminé par chromatographie en phase gazeuse, PI-CG, point d'éclair, teneur en H₂S en phase gazeuse, pouvoir calorifique, densité

