

## **ΑΥΞΗΣΗ ΤΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ ΟΚΤΑΝΙΩΝ ΤΗΣ ΒΕΝΖΙΝΗΣ ΜΕ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΜΙΞΗΣ ΤΩΝ ΣΥΣΤΑΤΙΚΩΝ ΤΗΣ**

**Α. Μίντζα, Ν. Πασαδάκης**

Τμήμα Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης, 73100 Χανία

**Χ. Φωτεινόπουλος, Π. Κοτσόκολος, Δ.Βουγιουκλάκης**

Motor Oil Hellas

### **ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Ο αριθμός οκτανίων (Α.Ο.) αποτελεί χαρακτηριστική ιδιότητα της βενζίνης και καθορίζει σε μεγάλο βαθμό την εμπορική αξία της. Διαμορφώνεται ανάλογα με το είδος και την αναλογία μίξης των επιμέρους κλασμάτων πετρελαίου που είναι διαθέσιμα για την παραγωγή της. Στην βιομηχανική πρακτική χρησιμοποιούνται συνήθως εμπειρικές σχέσεις πρόβλεψης του Α.Ο. σε μίγματα κλασμάτων, δεδομένου ότι δεν αποτελεί προσθετική ιδιότητα. Στην παρούσα εργασία διερευνήθηκε η επίδραση στον Α.Ο. της τελικής βενζίνης, της συγκέντρωσης των κλασμάτων που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή της στο διωλιστήριο της Motor Oil Ελλάς (ΜΟΗ). Αναπτύχθηκαν αλγόριθμοι πρόβλεψης με βάση τα δεδομένα παραγωγής, χρησιμοποιώντας χημειομετρικές τεχνικές όπως νευρωνικά δίκτυα και ανάλυση κυρίων συνιστωσών. Ο αλγόριθμοι προβλέπουν αξιόπιστα τον αριθμό οκτανίων της τελικής βενζίνης και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως εργαλείο επιλογής της βέλτιστης σύστασης της βενζίνης, εισάγοντας επιπλέον κριτήρια κόστους

### **ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Ο αριθμός οκτανίων (Α.Ο.) αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους ποιοτικούς δείκτες της βενζίνης. Χαρακτηρίζει την αντικροτική συμπεριφορά της, δηλαδή την ικανότητα της να μη προκαλεί πρόωρη έκρηξη στις μηχανές εσωτερικής καύσης. Στην παρούσα εργασία ως Α.Ο. αναφέρεται η ιδιότητα Research Octane Number (RON) κατά τα πρότυπα της ASTM. Στο παρελθόν η χρήση αλκυλιωμένων παραγώγων του μολύβδου ως πρόσθετων στη βενζίνη εξασφάλιζε τους απαιτούμενους υψηλούς αριθμούς οκτανίων. Η απαγόρευση όμως της χρήσης των προσθέτων αυτών για περιβαλλοντικούς λόγους, (από τις αρχές του 2002 και στην Ελλάδα) δημιούργησε μια σημαντική νέα αγορά βενζίνης υψηλού αριθμού οκτανίων. Έτσι τα τεχνολογικά σχήματα των διωλιστηρίων αναμορφώθηκαν για να καλύψουν την διαφορά των 3-6 Α.Ο. (ανάλογα με την προδιαγραφή), η οποία προέκυψε από τον αποκλεισμό των προσθέτων μολύβδου.

Μία σημαντική εφεδρεία των διωλιστηρίων για την εξασφάλιση των επιδιωκόμενων τιμών-στόχων του Α.Ο. είναι η βελτιστοποίηση της διαδικασίας μίξης των επιμέρους κλασμάτων που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή της τελικής βενζίνης. Τόσο το κόστος όσο και η διαθεσιμότητα των κλασμάτων αυτών ποικίλει ανάμεσα σε διωλιστήρια, αλλά και στο ίδιο διωλιστήριο σε διαφορετικές χρονικές περιόδους. Επιπλέον είναι διαφορετική, η “συνεισφορά” του κάθε κλάσματος στον τελικό αριθμό οκτανίων. Η συνήθης πρακτική μίξης στηρίζεται σε ημι-εμπειρικά γραμμικά μοντέλα πρόβλεψης του Α.Ο. του μίγματος. Σήμερα είναι διαθέσιμα στην αγορά και αυτοματοποιημένα συστήματα μίξης, τα οποία προσδιορίζουν με υπέρυθρους αναλυτές τον αριθμό οκτανίων των διαθέσιμων για μίξη κλασμάτων και

καθορίζουν την αναλογία μίξης για την εξασφάλιση του Α.Ο.-στόχου, ικανοποιώντας ταυτόχρονα μια συνάρτηση ελαχιστοποίησης του κόστους. Τα συστήματα αυτά έχουν υψηλό κόστος εγκατάστασης και προσαρμογής σε κάθε διυλιστήριο.

Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται μία εξελιγμένη υπολογιστική μέθοδος πρόβλεψης του αριθμού οκτανίων της τελικής βενζίνης με χρήση νευρωνικών δικτύων και ανάλυση παλινδρόμησης κυρίων συνιστωσών (PCR). Οι αλγόριθμοι που παρουσιάζονται μπορούν να χρησιμοποιηθούν στον προσδιορισμό των αναλογιών μίξης που θα εξασφαλίζουν τον απαιτούμενο αριθμό οκτανίων, λαμβάνοντας υπόψη τα διαθέσιμα αποθέματα του διυλιστηρίου και το κόστος του τελικού προϊόντος.

### Η ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΤΗΣ ΒΕΝΖΙΝΗΣ ΣΤΟ ΔΙΥΛΙΣΤΗΡΙΟ ΤΗΣ ΜΟΗ

Η συνολική παραγωγή του διυλιστηρίου της ΜΟΗ σε βενζίνη ανέρχεται σε 1.300.000. τόνους ετησίως. Στην παρούσα εργασία συγκεντρώθηκαν συνολικά 157 σετ δεδομένων που περιελάμβαναν την % κ.ό. περιεκτικότητα των επιμέρους κλασμάτων στο τελικό προϊόν και τους Α.Ο. οκτανίων τόσο των κλασμάτων, όσο και της τελικής βενζίνης. Τα κλάσματα που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή της τελικής βενζίνης και τα όρια διακύμανσης (min-max) των Α.Ο. τους, παρουσιάζονται στον Πίνακα 1. Τα δείγματα των τελικών βενζινών που χρησιμοποιήθηκαν εμφανίζουν Α.Ο. οι οποίοι κυμαίνονται μεταξύ 93,5 και 99.

**Πίνακας 1.** Κλάσματα βενζίνης και όρια διακύμανσης του Α.Ο.

Κλάσμα		Αριθμός Οκτανίων (RON)	
		Min	Max
Βενζίνη καταλυτικής πυρόλυσης	<i>FCC</i>	92.4	94
Βενζίνη καταλυτικής αναμόρφωσης	<i>REF</i>	100.1	103.3
Βενζίνη ισομερισμού	<i>ISO</i>	77.5	84.9
Βενζίνη αλκυλίωσης	<i>ALK</i>	93.3	94.6
Βενζίνη διμερισμού	<i>DIM</i>	93.8	97.6
Βουτάνια	<i>C<sub>4</sub></i>	92.00	
Οξυγονωμένα πρόσθετα	<i>MTBE</i>	115.0	
Ισοπεντάνια	<i>C<sub>5</sub></i>	92.0	

Ο πειραματικός προσδιορισμός των Α.Ο. στα κλάσματα και στις τελικές βενζίνες έγινε σύμφωνα με την πρότυπη ASTM D-2699 στο εργαστήριο της ΜΟΗ.

### ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ Α.Ο. ΜΕ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

Ο προσδιορισμός του Α.Ο. των μιγμάτων δεν μπορεί να στηρίζεται σε γραμμικούς υπολογισμούς. Για το σετ δεδομένων της παρούσας εργασίας οι διαφορές των προσθετικά υπολογιζόμενων τιμών και των αντίστοιχων πειραματικών κυμαίνονται από -1 έως και 14 Α.Ο.. Το παραπάνω επιβεβαιώνει την ύπαρξη “φαινομένου μίξης” (blend effect), το οποίο είναι ιδιαίτερα σημαντικό τόσο από τεχνολογική όσο και από οικονομική άποψη. Τα νευρωνικά δίκτυα είναι μία τεχνική μοντελοποίησης και πρόβλεψης η οποία χρησιμοποιείται ευρέως λόγω της ικανότητας της να περιγράφει έντονα μη γραμμικές σχέσεις. Αναλυτικά η λογική της λειτουργίας και εφαρμογής των νευρωνικών δικτύων έχει παρουσιαστεί στη βιβλιογραφία [1].

Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε ένα νευρωνικό δίκτυο (N.N.) σε περιβάλλον Matlab, με ανεξάρτητες μεταβλητές τις συγκεντρώσεις των οκτώ πρώτων κλασμάτων

(Πίνακας 1) και εξαρτημένη μεταβλητή τους Α.Ο. των τελικών βενζινών. Τα όρια διακύμανσης των μεταβλητών-συγκεντρώσεων που χρησιμοποιήθηκαν παρουσιάζονται στον Πίνακα 2.

**Πίνακας 2.** Όρια διακύμανσης συγκεντρώσεων κλασμάτων βενζίνης (% κ.ο.)

	FCC	REF	ISO	ALK	MTBE	DIM	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>
min	6.60	0.73	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
max	97.14	43.37	32.02	15.99	12.87	14.15	7.42	7.31

**Σχήμα 1.** Σφάλμα υπολογισμού Α.Ο. δειγμάτων εκπαίδευσης και ελέγχου του N.N.



Η αρχιτεκτονική του δικτύου προώθησης (feed forward) που χρησιμοποιήθηκε ήταν  $8 \times 6 \times 4 \times 1$ , ενώ η εκπαίδευση πραγματοποιήθηκε με την μέθοδο back propagation of error με βάση την συνάρτηση “traingdx” του Matlab. Ο πληθυσμός των δεδομένων κατανεμήθηκε σε δύο τυχαίες ομάδες εκ των οποίων η πρώτη (140 δείγματα) χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση (training) του νευρωνικού δικτύου ενώ η δεύτερη (17 δείγματα) για τον έλεγχο της ικανότητας πρόβλεψης του (validation). Το σφάλμα της πρόβλεψης για τα δείγματα εκπαίδευσης και ελέγχου παρουσιάζονται γραφικά στο Σχήμα 1. Η μέση απόλυση τιμή του σφάλματος για τα σετ δειγμάτων εκπαίδευσης και ελέγχου ήταν 0.13 και 0.17 Α.Ο. ενώ η τυπική απόκλιση του απόλυτου σφάλματος 0.12 και 0.16 Α.Ο. αντίστοιχα.

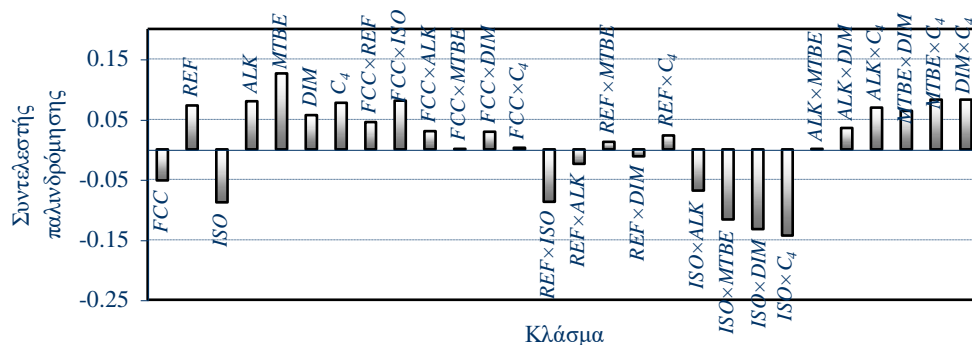
#### **ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΗΣ ΜΙΞΗΣ ΣΤΟΝ Α.Ο. (blend effect)**

Με στόχο την διερεύνηση των αλληλοεπιδράσεων μεταξύ των κλασμάτων κατά την μίξη των και την επίδραση που έχουν στον τελικό Α.Ο. τα ίδια δεδομένα παραγωγής που χρησιμοποιήθηκαν παραπάνω για την ανάπτυξη αλγορίθμου πρόβλεψης με νευρωνικά δίκτυα, υπεβλήθησαν και σε ανάλυση παλινδρόμησης κυρίων συνιστωσών (Principal Component Regression PCR). Η χημειομετρική αυτή τεχνική συνίσταται στον προσδιορισμό των κυρίων συνιστωσών (Principal Components) στο αρχικό σετ των ανεξάρτητων μεταβλητών, οι οποίες στη συνέχεια χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εισαγωγής σε ένα αλγόριθμο πολλαπλής παλινδρόμησης για την πρόβλεψη της εξαρτημένης μεταβλητής. Αναλυτικά η τεχνική αυτή παρουσιάζεται στην βιβλιογραφία [2]. Το βασικό πλεονέκτημα της συνίσταται στο γεγονός ότι σαν δεδομένα εισαγωγής στην μοντελοποίηση του Α.Ο. χρησιμοποιούνται οι τρεις πρώτες κύριες συνιστώσες των αρχικών μεταβλητών σύστασης οι οποίες αποδίδουν τις κύριες τάσεις χωρίς να περιέχουν “πειραματικό θόρυβο”. Επιπλέον των οκτώ αρχικών μεταβλητών σύστασης χρησιμοποιήθηκαν ως δεδομένα εισαγωγής και τα γινόμενά των ανά δύο, ώστε να

διαπιστωθεί το μέγεθος της αλληλεπίδρασης των. Η ανάλυση πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας το χημειομετρικό λογισμικό Unscrambler 7.5 της Camo ASA. Οι τρεις πρώτες κύριες συνιστώσες (PCs), οι οποίες αποδίδουν το 70% της αρχικής διασποράς (variance) των δεδομένων, χρησιμοποιήθηκαν για την πρόβλεψη του τελικού αριθμού οκτανίων. Οι συντελεστές του γραμμικού μοντέλου παρουσιάζονται γραφικά στο Σχήμα 2. Το μέγεθος του κάθε συντελεστή είναι χαρακτηριστικό του βαθμού σημαντικότητας του αντίστοιχου κλάσματος στην διαμόρφωση του τελικού αριθμού οκτανίων, ενώ το πρόσημο υποδηλώνει την θετική ή αρνητική επίδρασή του αντίστοιχα. Οι συντελεστές των γινομένων των μεταβλητών χαρακτηρίζουν ποσοτικά την αλληλεπίδραση που υφίσταται κατά την μίξη των αντίστοιχων κλασμάτων.

Τα κλάσματα FCC και ISO επιδρούν αρνητικά στην διαμόρφωση του τελικού αριθμού οκτανίων, ενώ αντίθετα όλα τα υπόλοιπα κλάσματα έχουν θετική επίδραση. Θετική επίσης είναι και η αλληλεπίδραση ανάμεσα στο κλάσμα FCC και στα υπόλοιπα κλάσματα της βενζίνης. Το μικρό μέγεθος των συντελεστών αλληλεπίδρασης FCC×MTBE και FCC×C<sub>4</sub> πρέπει να αποδοθεί σε διαφορετικούς μηχανισμούς ανάφλεξης που αναπτύσσονται ανάμεσα σε μίγματα (όπως είναι το FCC) και σε καθαρά συστατικά, όπως είναι το MTBE και τα βουτάνια. Αντίθετα η μίξη του REF, με τα υπόλοιπα κλάσματα έχει αρνητική επίδραση στον Α.Ο., με εξαίρεση την μίξη του με MTBE και C<sub>4</sub>. Όμοια η μίξη της βενζίνης ισομερισμού ISO με όλα τα υπόλοιπα κλάσματα εμφανίζεται να έχει αρνητικό πρόσημο. Τέλος, η μίξη της βενζίνης αλκυλίωσης (ALK) με βενζίνη διμερισμού (DIM) και C<sub>4</sub> έχει θετικό αποτέλεσμα στον αριθμό οκτανίων του μίγματος.

Σχήμα 2. Συντελεστές γραμμικής παλινδρόμησης για τα κλάσματα των βενζινών



Η εξέταση των δεδομένων παραγωγής βενζίνης της MOH επιβεβαιώνει γενικά τα παραπάνω συμπεράσματα όμως η περαιτέρω ανάλυση και εξήγηση της συμπεριφοράς αυτής πρέπει να συνεχιστεί στηριζόμενη σε μετρήσεις Α.Ο. σε δυαδικά μίγματα κλασμάτων βενζίνης.

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Ο αλγόριθμος πρόβλεψης που παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον αξιόπιστο υπολογισμό του Α.Ο. μιγμάτων βενζινών σε διωλιστήριο. Τα αποτελέσματα της διερεύνησης των αλληλοεπιδράσεων ανάμεσα στα κλάσματα κατά την μίξη μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την μεγιστοποίηση του Α.Ο. των τελικών βενζινών.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] J.R.M. Smits, W.J. Melssen, L.M.C. Buydens, G. Kateman. Chemometrics & Intell. Lab. System, **22**:165 (1994).
- [2] C.E. Miller., Chemometrics & Intell. Lab. System, **30**:11 (1995).