

Rezumat

Lucrarea de față tratează o temă de actualitate pe plan internațional și pe planul Uniunii Europene, obținerea unei benzine comerciale cât mai curată și cât mai puțin poluantă. Nevoia obținerii unui astfel de combustibil a apărut ca urmare a progreselor tehnologice care au avut loc pe parcursul secolului trecut. Aceste progrese au dus la creșterea cererii de benzină și, implicit, la creșterea poluării datorită arderii acesteia în motoarele cu aprindere prin scânteie.

În prezent, benzina comercială se obține prin formulare, care este procesul de amestecare a componentelor acesteia, după o anumită rețetă, astfel încât benzina obținută să fie conformă cu standardele în vigoare. Deoarece fiecare component vine cu costurile sale proprii de obținere sau de achiziție, formularea benzinei comerciale după o anumită rețetă vine cu costurile sale. Din acest motiv și deoarece există mai multe rețete de amestec, a apărut necesitatea determinării acelei rețete care oferă costul minim de obținere — rețeta optimă de amestec.

Lucrarea abordează aspectul important al optimizării rețetei de amestec pentru formularea benzinelor comerciale. Acest aspect devine și mai important dacă se ia în considerare faptul potrivit căruia rafinările din ziua de azi sunt proiectate să producă cantități uriașe de benzină (de ordinul milioanele de tone pe an) și orice economie, oricât de mică, duce la o creștere importantă a profitului anual.

Prima parte a tezei, studiul teoretic, constă în capitolul 2 și prezintă cele mai importante aspecte legate de:

1. Scopul și principiile formulării benzinelor comerciale (subcapitolul 2.1);
2. Componentii utilizați în cadrul formulării benzinelor comerciale, tipurile de componente și scopul utilizării acestora în cadrul obținerii produsului finit (subcapitolul 2.2);
3. Standardele aflate în vigoare în prezent cu privire la proprietățile benzinelor comerciale ecologice (subcapitolul 2.3).

Contribuțiile personale din această teză sunt prezentate în capitolele următoare.

Programul experimental, aparatura utilizată și rezultatele obținute sunt prezentate în capitolul 3. Tot în acest capitol sunt prezentate corelațiile dintre cifrele octanice Research și Motor ale amestecurilor și conținutul de oxigen al acestora (subcapitolul 3.3.3), corelații obținute pe baza tuturor perechilor de date experimentale obținute.

În capitolul 4 este prezentat un studiu comparativ între două modele matematice de amestec. Primul model luat în considerare este un model clasic, bazat pe ecuații matematice, care se găsește în literatura de specialitate (model prezentat în subcapitolul 4.1). Al doilea model matematic este bazat pe conceptul modern al rețelelor neuronale (model prezentat în subcapitolul 4.3). Studiul comparativ se găsește în subcapitolul 4.5 și, pe baza rezultatelor obținute, se formulează sugestii de alegere a modelului matematic potrivit, în funcție de datele de intrare existente.

Capitolul 5 are întinderea cea mai mare în cadrul tezei și reprezintă contribuțiile autorului cu privire la determinarea rețetei optime de amestec. Aceste contribuții au fost realizate cu ajutorul unui program de sinteză a rețetei optime de amestec, program scris de către autor și prezentat în subcapitolul 5.3. În subcapitolul 5.4. sunt prezentate și discutate rețelele optime de amestec pentru un număr variabil de proprietăți restrictive și de cantități totale de benzină care trebuie obținute.

Capitolul 6 discută anumite aspecte legate de aplicarea optimizării în cadrul formulării industriale a benzinelor comerciale ecologice. Este discutată problema planificării amestecurilor, problemă care este, la rândul ei, una de optimizare (subcapitolul 6.1). Deoarece acest capitol se ocupă de formularea benzinei la scară industrială, subcapitolul 6.2 se leagă de un sistem performant de automatizare a amestecurilor utilizat într-o rafinărie reprezentativă din România, sistemul GILB, tot în acest subcapitol fiind prezentată și instalația de amestec pe care este implementată acest sistem. În final, în subcapitolul 6.3 se oferă un exemplu de obținere a rețetei optime de amestec, având date de intrare oferite de aceeași rafinărie.

Partea finală a tezei, capitolul 7 prezintă concluziile care se pot trage din acest studiu de cercetare (subcapitolul 7.1). Tot în acest capitol sunt prezentate contribuțiile personale (subcapitolul 7.2) și sunt propuse direcțiile de cercetări ulterioare (subcapitolul 7.3).

Cuprins

1. INTRODUCERE.....	7
1.1. Actualitatea temei investigate.....	7
1.2. Scopul și oportunitatea tezei.....	8
1.3. Obiectivele tezei.....	9
1.4. Structura și volumul tezei.....	10
A. STUDIU TEORETIC	13
2. FORMULAREA BENZINELOR COMERCIALE ECOLOGICE.....	15
2.1. Scopul și principiile formulării benzinelor auto ecologice. Rețete de amestec.....	15
2.2. Componenti pentru formularea benzinelor auto ecologice.....	17
2.3. Standarde referitoare la proprietățile benzinelor comerciale ecologice.....	24
2.4. Scopul, specificațiile și evoluția standardelor EURO x.....	25
2.5. Prevederile și scopul emiterii standardului EN 228.....	26
B. PARTEA EXPERIMENTALĂ.....	29
3. EXPERIMENTE PENTRU DETERMINAREA PROPRIETĂȚILOR COMPOZIȚIILOR ȘI A BENZINELOR DE AMESTEC.....	31
3.1. Scopul și obiectivele programului experimental.....	31
3.2. Aparatura experimentală. Descrierea și utilizarea aparatelor IROX 2000 și Minidis.....	34
3.2.1. Aparatul IROX 2000.....	34
3.2.2. Aparatul Minidis.....	39
3.3. Desfășurarea experimentelor.....	41
3.3.1. Determinarea proprietăților fizice ale componentilor.....	41
3.3.2. Prepararea și analiza amestecurilor.....	42
3.3.3. Stabilirea corelațiilor dintre cifrele octanice Research și Motor ale amestecurilor și cantitatea de bioetanol adăugată.....	50
4. CONTRIBUȚII PRIVIND ELABORAREA ȘI VALIDAREA MODELELOR DE AMESTECARE A BENZINELOR.....	55
4.1. Modelul clasic al amestecării benzinelor.....	55
4.2. Validarea modelului matematic de amestecare a benzinelor.....	57
4.3. Contribuții privind elaborarea unui modelul de amestecare bazat pe rețele neuronale artificiale.....	58
4.3.1. Concepte și principii de bază.....	58
4.3.2. Crearea rețelei neuronale.....	61
4.3.3. Crearea bazei de date de antrenament.....	68
4.4. Adecvanța modelului matematic de amestec obținut cu ajutorul rețelei neuronale artificiale.....	72
4.5. Studiu comparativ între modelul matematic clasic de amestecare și cel bazat pe rețelele neuronale.....	73

5. CONTRIBUȚII PRIVIND DETERMINAREA REȚETEI OPTIME DE AMESTEC.....	77
5.1. Formularea problemei de optimizare.....	77
5.2. Algoritmul Simplex pentru rezolvarea problemei de optimizare.....	79
5.3. Contribuții la elaborarea unui program de sinteză a rețetelor optime de amestecare.....	81
5.3.1. Noțiuni legate de programul de sinteză a rețetelor de amestec.....	82
5.3.2. Descrierea și caracteristicile programului.....	84
5.3.3. Funcțiile programului.....	86
5.3.4. Exemplu de utilizare a programului.....	87
5.4. Sinteza rețetelor optime de amestecare.....	91
5.4.1. Rețetele de amestec care iau în considerare o singură proprietate restrictivă, fără a menționa o proporție fixă de bioetanol.....	92
5.4.2. Rețetele de amestec care iau în considerare două proprietăți restrictive, fără a menționa o proporție fixă de bioetanol.....	104
5.4.3. Rețetele de amestec care iau în considerare o singură proprietate restrictivă, dar având o proporție impusă de bioetanol în amestecul final.....	161
6. CONTRIBUȚII PRIVIND APLICAREA OPTIMIZĂRII LA FORMULAREA BENZINELOR AUTO COMERCIALE ÎNTR-O RAFINĂRIE.....	177
6.1. Studiu critic privind planificarea amestecurilor.....	177
6.2. Obținerea benzinelor comerciale ecologice într-o rafinărie reprezentativă din România.....	189
6.2.1. Sistemul GILB de automatizare a instalației de amestecare a benzinelor.....	189
6.2.2. Rețete de amestec utilizate.....	191
6.3. Contribuții privind determinarea unei rețete optime pentru obținerea industrială a benzinei comerciale.....	193
7. CONCLUZII.....	197
7.1. Concluzii generale.....	197
7.2. Contribuții personale.....	199
7.3. Perspective de dezvoltări ulterioare.....	199
Bibliografie.....	201
Anexe.....	207
Anexa 1: Curbele ASTM pentru amestecurile care formează seturile 2, 3 și 4.....	207

Cuvinte cheie: benzină ecologică, optimizare, rețete de amestec, reformulare, combustibili ecologici, bioetanol

Abstract

The present work discusses a topical issue on international and European Union level, obtaining of the cleanest and the most environmentally-friendly commercial gasoline. The need to obtain such a fuel appeared as a result of the technological progress that happened in the past century. This progress led to an increase in gasoline demand and, subsequently, to an increase of the pollution level because of the fuel burnt in the spark ignition engines.

In the present, the commercial gasoline is obtained through formulation, which is the process of blending its components, after a certain blending recipe, so as the obtained gasoline complies with today's standards. Because every component comes with its own obtaining or acquisition costs, the gasoline formulation by a certain recipe also comes with its costs. Because of this reason and because there is more than one blending recipe, the necessity of the determination of the recipe that offers the lowest cost — the optimum recipe — appeared.

This work discusses the important aspect of blending recipe optimization to formulate commercial gasoline. This aspect becomes even more important if it's taken into account the fact that today's refineries are built to produce huge amounts of gasoline (millions of tons per year) and every savings, no matter how marginal they are, lead to an important increase of the yearly profit.

The first part of the thesis, the theoretical study, consists in chapter 2 and presents the most important aspects about:

1. The purpose and the principles of commercial gasoline formulation (subchapter 2.1);
2. The utilized components in commercial gasoline formulation, the component types and the purpose of its utilization to obtain the finished product (subchapter 2.2);
3. Today's standards regarding the properties of the ecologic commercial gasoline (subchapter 2.3).

The personal contributions in this thesis are presented in the following chapters.

The experimental program, the utilized equipment and the obtained results are presented in chapter 3. In the same chapter, the correlations between the blends' Research and Motor octane number and the oxygen content are presented (subchapter 3.3.3), correlations obtained from all the obtained experimental data.

Chapter 4 presents a comparative study between two blending models. The first model taken into account is a classical model, based on mathematical equations, which can be found in the literature (model presented in subchapter 4.1). The second

mathematical model is based on the modern concept of neural networks (model presented in subchapter 4.3). The comparative study is found in subchapter 4.5 and, based on the obtained results, suggestions about choosing the right mathematical model judging by the input data, are formulated.

Chapter 5 is the lengthiest of all and presents the author's contributions regarding the determination of the optimal blending recipe. These contributions had been realized with the aid of an optimum blending recipe synthesis software, program written by the author and presented in subchapter 5.3. In subchapter 5.4 the optimum blending recipes with a variable number of restrictive properties and variable total quantities of gasoline are presented and discussed.

Chapter 6 studies some aspects concerning applying optimization in gasoline formulation in the industry. The blending planning problem is discussed, problem which is also an optimization problem (subchapter 6.1). Because this chapter is about gasoline formulation at an industrial scale, subchapter 6.2 presents a performant blending automation system which is utilized in a representative refinery from Romania, the GILB system the blending plant being also presented in this subchapter. Finally, in subchapter 6.3 it is presented an example of determining the optimum blending recipe, using input data from the same refinery.

The final part of the thesis, chapter 7 presents the conclusions that can be drawn from this research study (subchapter 7.1). Also, in this chapter the personal contributions are presented (subchapter 7.2) and the ulterior research directions are suggested (subchapter 7.3)

Table of contents

1. INTRODUCTION.....	7
1.1. The importance of the investigated topic	7
1.2. Thesis' purpose and opportunity.....	8
1.3. Thesis' objective.....	9
1.4. Thesis' structure and volume.....	10
A. THEORETICAL STUDY.....	13
2. COMMERCIAL ECOLOGICAL GASOLINE FORMULATION.....	15
2.1. The purpose and the principles of ecological commercial gasoline. Blending recipes	15
2.2. Components used for ecological commercial gasoline formulation.....	17
2.3. Standards for commercial ecological gasoline properties	24
2.4. The purpose,, the specifications and the evolution of the EURO x standards	25
2.5. The specifications and the purpose of the EN 228 standard.....	26
B. EXPERIMENTAL PART.....	29
3. EXPERIMENTS FOR THE DETERMINATION OF THE COMPONENTS AND BLENDINGS PROPERTIES	31
3.1. The purpose and the objectives of the experimental program.....	31
3.2. Experimental equipment. The description and the use of the IROX 2000 and Minidis equipment	34
3.2.1. IROX 2000 equipment.....	34
3.2.2. Minidis equipment.....	39
3.3. Experiments development.....	41
3.3.1. The components' physical properties determination.....	41
3.3.2. Blendings preparation and analysis.....	42
3.3.3. The correlations between Research and Motor octane numbers and the bioethanol added quantity determination	50
4. CONTRIBUTIONS REGARDING GASOLINE BLENDING MODELS ELABORATION AND VALIDATION.....	55
4.1. Gasoline blending classic model.....	55
4.2. The validation of the gasoline blending classic model.....	57
4.3. Contributions regarding the elaboration of a blending model based on artificial neural network.....	58
4.3.1. Concepts and basic principles.....	58
4.3.2. Neural network creation.....	61
4.3.3. Training database creation.....	68
4.4. The adequacy of the blending model determined using neural networks	72

4.5. Comparative study between the classical blending model and the one based on neural networks	73
5. CONTRIBUTIONS REGARDING OPTIMUM BLENDING RECIPE DETERMINATION	77
5.1. The formulation of the optimization problem	77
5.2. The Simplex algorithm for the optimization problem solving.....	79
5.3. Contributions to the elaboration of an optimum blending recipe synthesis software	81
5.3.1. Basic notions about the blending recipe synthesis program.....	82
5.3.2. Program description and characteristics.....	84
5.3.3. Program functions.....	86
5.3.4. Example	87
5.4. Optimum blending recipes synthesis.....	91
5.4.1. Blending recipes which take into consideration a single restrictive property without a pre-defined bioethanol proportion.....	92
5.4.2. Blending recipes which take into consideration two restrictive properties without a pre-defined bioethanol proportion	104
5.4.3. Blending recipes which take into consideration a single restrictive property using a pre-defined bioethanol proportion	161
6. CONTRIBUTIONS REGARDING APPLYING OPTIMIZATION TO GASOLINE FORMULATION IN A REFINERY.....	177
6.1. Critical study regarding blending scheduling.....	177
6.2. Obtaining commercial ecological gasoline in a refinery from Romania.....	189
6.2.1. The GILB system for automation of the gasoline blending plant.....	189
6.2.2. Utilized blending recipes.....	191
6.3. Contributions regarding the determination of an optimum blending recipe for obtaining commercial gasoline in a refinery	193
7. CONCLUSIONS.....	197
7.1. General conclusions.....	197
7.2. Personal contributions.....	199
7.3. Perspectives of further development.....	199
Bibliography.....	201
Appendix.....	207
Appendix 1: The ASTM curves for the blendings from the sets 2, 3 and 4.....	207

Keywords: ecological gasoline, optimization, blending recipes, reformulation, ecological fuel, bioethanol