

Πρόλογος

Η παρούσα εργασία έχει θέμα της τις σύγχρονες χημειομέτρικες μεθόδους ταυτοποίησης δειγμάτων βενζίνης. Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μία αναφορά γενικά στα καυσίμα και ιδιαίτερα στο αργό πετρέλαιο από το οποίο και προέρχεται η βενζίνη. Επίσης αναφέρονται οι ιδιότητες της βενζίνης καθώς και η συστασή της. Τέλος παρατίθενται ο τρόπος παρασκευής της από το αργό πετρέλαιο καθώς και και κάποια οικονομικά στοιχεία για τα εν λόγω καυσίμα.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια αναφορά στη χημειομετρία η οποία είναι μία στατιστική τεχνική που συσχετίζει ευθέως μέσα από μοντέλα, χαρακτηριστικά ποιότητας ή φυσικοχημικές ιδιότητες με αναλυτικά στοιχεία. Τέλος παρουσιάζονται οι χημειόμετρικες μέθοδοι ταυτοποίησης που χρησιμοποιούνται ευρέως όπως είναι η PCA κ.α.

Στο τρίτο κεφάλαιο αναφέρεται η πειραματική διαδικασία που ακολουθήθηκε για την ανάλυση ενεννηντα έξι δειγμάτων βενζίνης τα οποία αναλύθηκαν χρησιμοποιώντας ένα Perkin-Elmer 8700 GC, εξοπλισμένο με μια τριχοειδή στήλη Supelco SPB™ OCTYL 60m x 0.25mm x 1.0μm. Πενήντα τέσσερα συστατικά προσδιορίστηκαν βασισμένα στο χρόνο συγκράτησης τους χρησιμοποιώντας αναλυτικά πρότυπα reformate από το Supelco. Επιπλέον, τριάντα τέσσερα συστατικά καθορίστηκαν χρησιμοποιώντας τους δημοσιευμένους δείκτες συγκράτησης Kovats.

Τέλος στο τέταρτο κεφάλαιο παρατίθενται τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα της παρούσας διατριβής. Στο παράρτημα δίνονται όλα τα πειραματικά αποτελέσματα και επισυνάπτεται το paper “Classification of gasoline grades using compositional data and expectation – maximization algorithm, Nikos Pasadakis, Andreas A. Kardamakis, Popi Sfakianaki, Mineral Resource Engineering Department, Technical University of Crete, Chania, Greece” το οποίο βασίστηκε στα πειραματικά αποτελέσματα της παρούσας εργασίας.

Περιεχόμενα

Πρόλογος.....	1
Περιεχόμενα.....	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: «Βενζίνη».....	4
1.1 Εισαγωγή – Γενικά για τα καύσιμα.....	4
1.2 Αγρό πετρέλαιο	6
1.3 Βενζίνη.....	11
1.3.1 Ιστορικά στοιχεία.....	11
1.3.2 Γενικά για τις βενζίνες.....	13
1.3.3 Χαρακτηριστικά – Προδιαγραφές βενζινών.....	18
1.3.3.1 Αριθμός οκτανίου και βαθμός αντικροτικής ικανότητας	18
1.3.3.2 Πτητικότητα.....	25
1.3.3.3 Χαρακτηριστικά καύσης.....	27
1.3.3.4 Περιεχόμενο σε υδρογονάνθρακες	28
1.3.3.5 Περιεχόμενο σε θείο και διάβρωση	28
1.3.3.6 Περιεχόμενο σε μόλυβδο, φώσφορο και μαγγάνιο.....	29
1.3.3.7 Οξειδωτική Σταθερότητα.....	30
1.3.3.8 Μόλυνση της βενζίνης.....	30
1.4 Παραγωγή βενζίνης.....	32
1.4.1 Φυσικές διεργασίες	34
1.4.1.1 Ατμοσφαιρική απόσταξη	35
1.4.1.2 Απόσταξη υπό κενό	37
1.4.1.3 Αφαλάτωση.....	39
1.4.1.4 Διαχωρισμός αερίων	40
1.4.2 Διεργασίες μετατροπής	41
1.4.2.1 Αναμόρφωση	41
1.4.2.2 Ισομερίωση	44
1.4.2.3 Αλκυλίωση.....	45
1.4.2.4 Παραγωγή αιθέρων	46
1.4.2.5 Υδρογονοαποθείωση.....	48
1.4.2.6 Πυρολυτικές διεργασίες.....	50
1.4.2.7 Παραγωγή υδρογόνου.....	57
1.4.3 Τελικές κατεργασίες	59
1.4.3.1 Ανάμιξη.....	59
1.5 Οικονομικά στοιχεία	61
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: «Χημειομετρία»	64
2.1. Ανάλυση Σημαντικών παραμέτρων (Principal Component Analysis, PCA)....	65
2.1.1. Ιστορικό της PCA - εφαρμογές.....	65
2.1.2. Σκοπός της PCA.....	65
2.1.3. Συνοπτική παρουσίαση της μεθόδου PCA.....	66
2.1.4. Μαθηματική περιγραφή της PCA	67
2.1.5. PCA για clustering	70
2.1.5.1. Ιεραρχική κατηγοριοποίηση (Hierarchical clustering)	74
2.1.5.2. Δενδρογράμματα.....	77
2.1.5.3. Κ μέσω τιμών (K-means).....	79
2.1.5.4. Classification.....	81
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: «Ανάλυση GC σε δείγματα βενζινών- Πειραματική διαδικασία»	85

3.1. Δείκτες Kovats	85
3.2. Βιβλιογραφικές αναφορές για ανάλυση GC σε δείγματα βενζινών.....	91
3.3. Πειραματική διαδικασία.....	95
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: «Συζήτηση - Αποτελέσματα»	103
4.1. Συμπεράσματα	106
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	108
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	112

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: «Βενζίνη»

1.1 Εισαγωγή – Γενικά για τα καύσιμα

Η χρησιμοποίηση ενέργειας είναι αναπόσπαστη από κάθε παραγωγική δραστηριότητα, ο δε βαθμός κατανάλωσης της ενέργειας είναι άμεσα συνδεδεμένος με την οικονομική ανάπτυξη και το βιοτικό επίπεδο κάθε χώρας. Όλες σχεδόν οι πηγές ενέργειας που χρησιμοποιούνται στη γη προέρχονται (άμεσα ή έμμεσα) από την ενέργεια του ήλιου και περιλαμβάνουν τα συμβατικά καύσιμα (πετρέλαιο, φυσικό αέριο, στερεά καύσιμα) καθώς και τις ανανεώσιμες πηγές, όπως υδατοπτώσεις, βιομάζα, την ηλιακή ενέργεια αφ' εαυτή κλπ. [1]

Καύσιμα λέγονται οι ουσίες που ενώνονται με το οξυγόνο παράγοντας θερμότητα (ή όπως λέγεται συνήθως πιο επιστημονικά καίγονται με εξώθερμη αντίδραση). Τα καύσιμα χρησιμοποιούνται σε μια πληθώρα τεχνικών εφαρμογών για την παραγωγή ενέργειας, πιο ειδικά θερμικής ενέργειας (θερμότητας).

Ένα μεγάλο πλήθος ουσιών φυσικής ή τεχνητής προέλευσης μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν καύσιμα, αλλά μόνο ένας ορισμένος αριθμός από αυτές έχουν πρακτική αξία από τεχνική άποψη για παραγωγή ενέργειας. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα για να γίνει κατανοητή αυτή η λεπτή διαφορά είναι τα μέταλλα: τα μέταλλα δεν καίγονται (εκτός από το μαγνήσιο), όμως κάποια μέταλλα κάτω από ορισμένες συνθήκες ενώνονται με το οξυγόνο πολύ εύκολα. Έτσι π.χ. ο σίδηρος όταν είναι σε λεπτό διαμερισμό καίγεται και αυτό μπορούμε να το παρατηρήσουμε εύκολα κατά το κόψιμο μιας σιδηρόβέργας με ένα τροχό. Η παραγόμενη θερμότητα από αυτού του είδους τις καύσεις δεν είναι τεχνικά εκμεταλλεύσιμη.

Το κριτήριο επομένως για να χαρακτηριστεί μια ουσία καύσιμο, τουλάχιστον από τεχνική άποψη, είναι η παραγόμενη θερμότητα από την καύση της να είναι τεχνικά εκμεταλλεύσιμη, να μπορεί δηλαδή να μετατραπεί σε μηχανικό έργο στις (θερμικές) μηχανές.

Η ανάπτυξη της πυρηνικής φυσικής και συνακόλουθα της πυρηνικής τεχνολογίας, έχει διευρύνει την έννοια των καυσίμων περιλαμβάνοντας σε αυτά και ουσίες για τις οποίες η παραγόμενη θερμότητα δεν προέρχεται από καύση, αλλά από πυρηνικές αντιδράσεις, δηλαδή διεργασίες που γίνονται σε ατομικό επίπεδο στους πυρήνες των μορίων των ουσιών αυτών.

Έτσι, ο ορισμός για τα καύσιμα έχει πλέον διευρυνθεί, για την τεχνολογία:

«Καύσιμα είναι ουσίες που απελευθερώνουν ενέργεια κατά μία συμβατική ή πυρηνική αντίδραση και η ενέργεια αυτή είναι εκμεταλλεύσιμη, δηλαδή μπορεί να μετατραπεί σε μηχανικό έργο από θερμικές μηχανές».

Το πιο διαδεδομένο καύσιμο, αλλά και το πρώτο που χρησιμοποιήθηκε από τον άνθρωπο είναι η βιομάζα. Τα πιο συνηθισμένα καύσιμα σήμερα, είναι τα προϊόντα της απόσταξης του αργού πετρελαίου, δηλαδή το πετρέλαιο, η βενζίνη, η κηροζίνη κλπ.

Τα καύσιμα μπορούν να καταταγούν με πολλούς τρόπους. Ένας βασικός τρόπος κατάταξης είναι σε:

- Συμβατικά καύσιμα, όπως το πετρέλαιο
- Πυρηνικά καύσιμα, όπως το ουράνιο

Τα συμβατικά καύσιμα κατατάσσονται συνήθως σε τρεις κατηγορίες ανάλογα με την κατάσταση στην οποία βρίσκονται:

- Στερεά καύσιμα. Περιλαμβάνουν όλα τα συμβατικά καύσιμα που βρίσκονται σε στερεή κατάσταση, όπως λιγνίτης, λιθάνθρακας, ανθρακίτης
- Υγρά καύσιμα. Περιλαμβάνουν όλα τα καύσιμα που βρίσκονται σε υγρή μορφή. Ουσιαστικά περιλαμβάνουν όλα τα υγρά προϊόντα που προέρχονται από την επεξεργασία του αργού πετρελαίου, καθώς και τα υγρά προϊόντα που λαμβάνονται από αναβάθμιση στερεών καυσίμων. Στην κατηγορία αυτή ανήκει και η βενζίνη, η κηροζίνη κ.α.
- Αέρια καύσιμα. Περιλαμβάνουν τα καύσιμα που βρίσκονται σε αέρια κατάσταση. Στην κατηγορία αυτή ανήκουν το φυσικό αέριο, τα αέρια που παράγονται από την αναβάθμιση στερεών καυσίμων, τα συνθετικά αέρια πόλης και τα υγραέρια.[1], [2]

1.2 Αγρό πετρέλαιο

Τα υγρά καύσιμα, των οποίων ο ορισμός έχει ήδη δοθεί, αποτελούν στην συντριπτική πλειοψηφία τους προϊόντα της επεξεργασίας του αργού πετρελαίου στα διυλιστήρια. Το αργό πετρέλαιο (crude oil) αποτελείται κυρίως από υδρογονάνθρακες με μοριακό βάρος κυμαινόμενο από το μεθάνιο μέχρι βαριά στερεά μόρια που περιέχουν περισσότερα από 80 άτομα άνθρακα στο μόριο. Περιέχει επίσης και ενώσεις οξυγόνου, θείου, αζώτου και ελάχιστες ποσότητες μεταλλικών ενώσεων και νερού. Στα αέρια που εκλύονται από τις πετρελαιοπηγές και βρίσκονται διαλυμένα μέσα στο αργό πετρέλαιο, περιλαμβάνονται άζωτο, διοξείδιο του άνθρακα (CO₂), υδρόθειο (H₂S) και ήλιο. Η διακύμανση της περιεκτικότητας του αργού πετρελαίου στα στοιχεία από τα οποία αποτελείται φαίνεται στον πίνακα που ακολουθεί (πίνακας 1).

Πίνακας 1: Στοιχεία από τα όποια αποτελείται το αργό πετρέλαιο

Στοιχεία	Περιεκτικότητα (%κ.β)
Άνθρακας	83,90-86,80
Υδρογόνο	11,40-14,00
Θείο	0,06-8,00
Άζωτο	0,11-1,70
Οξυγόνο	0,5
Μέταλλα (Fe, V, Ni, κ.λ.π.)	0,03

Όσον αφορά τις μεταλλικές ενώσεις, δεν είναι πλήρως γνωστό με ποια μορφή βρίσκονται μέσα στο πετρέλαιο. Οι κυριότερες πάντως μορφές είναι διαλυμένων αλάτων σε θαλασσινό νερό το οποίο έχει σχηματίσει γαλάκτωμα με το πετρέλαιο, αλάτων οργανικών οξέων, ή σύμπλοκων οργανομεταλλικών ενώσεων.

Οι υδρογονάνθρακες που περιέχονται στο αργό πετρέλαιο είναι οι παραφινικοί, κανονικοί και ισοπαραφινικοί, κυκλοπαραφινικοί ή ναφθениκοί καθώς και αρωματικοί, τόσο μονοπυρηνικοί όσο και πολυπυρηνικοί. Σημειώνεται ότι στο αργό πετρέλαιο δεν υπάρχουν ακόρεστοι υδρογονάνθρακες (ολεφινικοί και πολυολεφινικοί). Η παρουσία τους στα προϊόντα πετρελαίου οφείλεται στις διεργασίες που γίνονται στο διυλιστήριο για την παραγωγή των τελικών προϊόντων. [1]

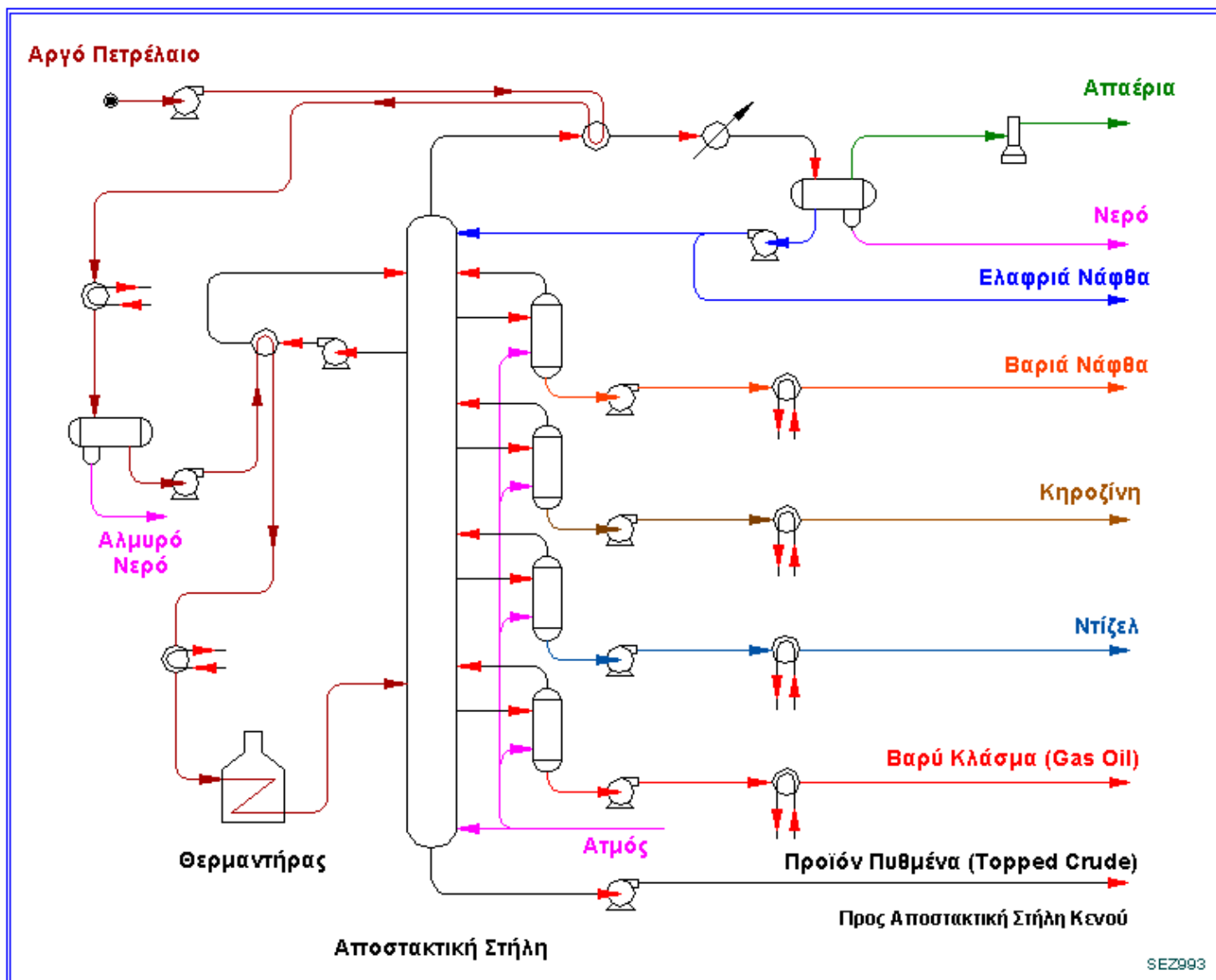
Το αργό πετρέλαιο παρά το γεγονός ότι είναι καύσιμό, δε χρησιμοποιείται ως έχει, για τρεις κυρίως λόγους:

1. Οι σύγχρονοι κινητήρες απαιτούν ως καύσιμα ή λιπαντικά εξειδικευμένα προϊόντα με καθορισμένες ιδιότητες οι οποίες δε μπορούν να καλυφθούν από το αργό πετρέλαιο.
2. Ακόμη και στην υποθετική περίπτωση κατά την οποία οι κινητήρες θα μπορούσαν να προσαρμοστούν ώστε να λειτουργούν ομαλά με έναν τύπο αργού πετρελαίου, πάλι δε θα ήταν δυνατή η ομαλή λειτουργία τους, επειδή οι διάφοροι τύποι αργού πετρελαίου διαφέρουν μεταξύ τους.
3. Λόγοι ασφαλείας δεν επιτρέπουν τη χρησιμοποίηση πολύ εύφλεκτων προϊόντων σε περιπτώσεις όπου επιβάλλεται η χρησιμοποίηση λιγότερο πτητικών προϊόντων.

Γι' αυτούς τους λόγους, το αργό πετρέλαιο υποβάλλεται σε διύλιση. Με τον όρο διύλιση εννοούνται:

1. Ο διαχωρισμός του αργού πετρελαίου σε προϊόντα με φυσικές διεργασίες διαχωρισμού και παρασκευή νέων προϊόντων με διεργασίες χημικής μετατροπής.
2. Ο εξευγενισμός των τελικών προϊόντων με τις τελικές κατεργασίες.
3. Η διαμόρφωση του τελικού προϊόντος που μπορεί να απαιτεί περαιτέρω διεργασίες όπως ανάμιξη κ.λ.π. [1]

Ο διαχωρισμός του αργού πετρελαίου σε προϊόντα βασίζεται στην απόσταξη του πετρελαίου σε κλάσματα συγκεκριμένων θερμοκρασιακών περιοχών. Στον πίνακα 2 δίνονται τα κλάσματα που λαμβάνονται από την απόσταξη του αργού πετρελαίου, καθώς και οι χρήσεις τους. Στο σχήμα 1 δίνεται το διάγραμμα ροής της απόσταξης του αργού πετρελαίου και στο σχήμα 2 δίνονται οι τυπικές καμπύλες απόσταξης των προϊόντων που λαμβάνονται από την απόσταξη του αργού πετρελαίου.

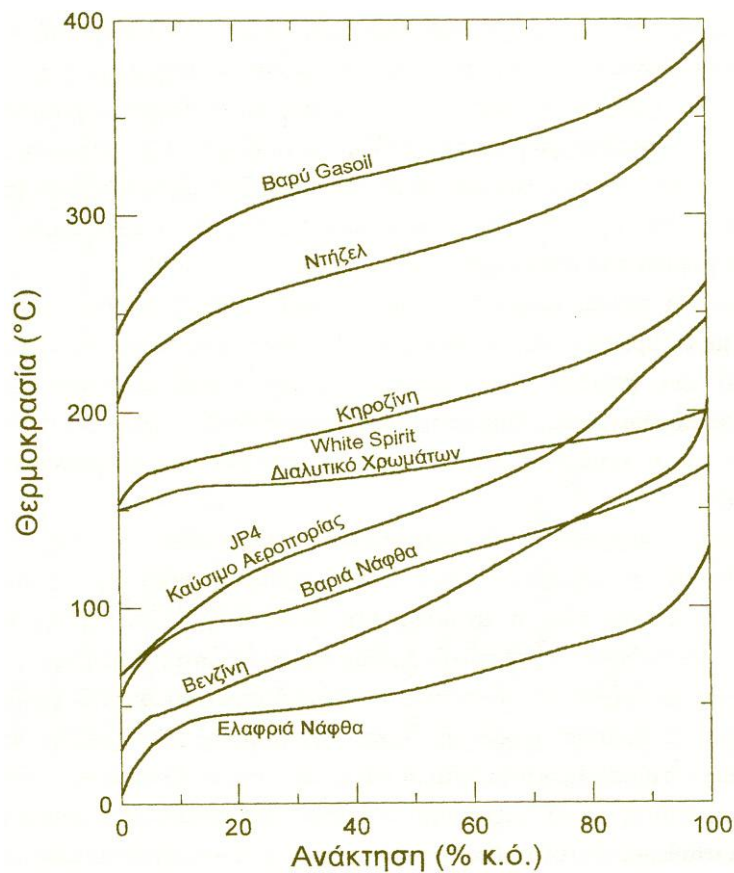


Σχήμα 1: Διάγραμμα ροής απόσταξης αργού πετρελαίου [3]

Πίνακας 2 :Θερμοκρασιακές περιοχές κλασμάτων αργού πετρελαίου.

Προϊόν	Περιοχή Ζέσης (°C)	Χρήσεις
Ελαφρά αέρια (Light Gases), CH ₄ , C ₂ H ₆	(-162)-(-42)	Καύσιμο διυλιστηρίου, πετροχημικά
Προπάνιο (Propane) C ₃ H ₈	-32	Υγραέρια (LPG), πετροχημικά
Βουτάνιο, (Butane) C ₄ H ₁₀	(-12)-0	Υγραέριο, πετροχημικά, βενζίνη
Ελαφριά Νάφθα (Light Naphta, Light Straight Run)	25-130	Βενζίνη, διαλύτες
Βαριά Νάφθα(Heavy Naphta)	80-200	Βενζίνη, διαλύτες, καύσιμα αεροπορίας
Κηροζίνη (kerosene)	150-250	Καύσιμα αεροπορίας, διαλύτες
Ελαφρύ Gasoil (Light Gasoil)	200-320	Ντίζελ κίνησης, πετρέλαιο θέρμανσης
Βαρύ Gasoil (Heavy Gasoil)	260-400	Ντίζελ κίνησης, πετρέλαιο θέρμανσης

Gasoil Κενού (Vaccum Gasoil)	400-600	Τροφοδοσία μονάδων πυρόλυσης, λιπαντικά
Ατμοσφαιρικό Υπόλειμμα (Atmospheric Residue)	400	Μαζούτ, τροφοδοσία απόσταξης υπό κενό
Υπόλειμμα κενού (Vaccum Residue)	600	Μαζούτ, άσφαλτος



Σχήμα 2: Τυπικές καμπύλες απόσταξης προϊόντων πετρελαίου.

Η σύσταση των προϊόντων εξαρτάται από το είδος του αργού πετρελαίου από το οποίο προήλθαν. Μια ένδειξη της σύστασης των προϊόντων, ανάλογα με τον τύπο του αργού πετρελαίου φαίνεται στον πίνακα 3.

Πίνακας 3: Ένδειξη σύστασης προϊόντων αργού πετρελαίου

Κλάσμα	Αργό παραφινικής βάσης			Αργό Ασφαλούχου βάσης		
	Παραφίνες	Ναφθένια	Αρωματικά	Παραφίνες	Ναφθένια	Αρωματικά
Νάφθα	65	30	5	35	55	10
Κηροζίνη	60	30	10	25	50	25
Gasoil	35	35	15	15	45	40

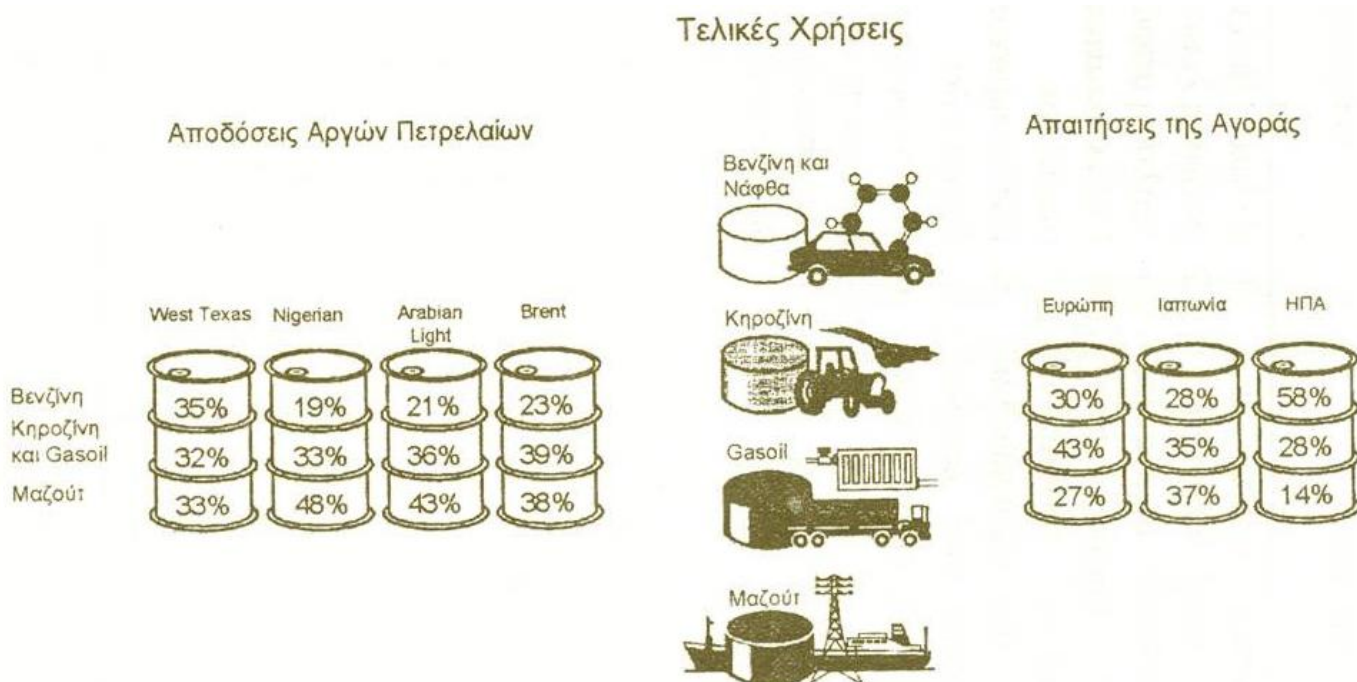
[1]

Όπως είναι γνωστό οι τύποι αργού πετρελαίου διαφέρουν μεταξύ τους στις ιδιότητες τους και τη σύστασή τους. Κατατάσσονται σε τρεις κατηγορίες: παραφινικής βάσης, ναφθениκής (ή ασφαλτούχου) βάσης και μικτής βάσης ανάλογα με την περιεκτικότητά τους σε παραφινικούς και ναφθениκούς / αρωματικούς υδρογονάνθρακες. Η απόδοση κάθε τύπου πετρελαίου σε προϊόντα διαφέρει, όπως φαίνεται στον πίνακα 4. Σαν μέσα αποστάγματα (middle distillates) εννοούνται η κηροζίνη και τα gasoil.

Πίνακας 4: Αποδόσεις (%) διαφόρων τύπων αργού πετρελαίου.

Τύπος	Arabian Light	Iranian Light	Zarzaitine	Sarir	Nigerian	Brent	Maya
Αέρια	0,7	1,8	1,8	2	0,6	2,1	1
Νάφθα	17,8	15,3	24,4	16,4	12,9	17,8	11,7
Μέσα							
Αποστάγματα	33,1	32,6	41,1	33,7	47,2	35,5	23,1
Υπολείμμα	48,4	46	30,6	47,9	39,3	44,6	64,2

Όπως φαίνεται όμως από το σχήμα 3, η παραγωγή «λευκών» προϊόντων από την ατμοσφαιρική απόσταξη αργού πετρελαίου δεν επαρκεί για να καλύψει τις ποσότητες που απαιτεί η παγκόσμια ή/και η τοπική αγορά. Απάντηση στο πρόβλημα δίνουν οι διεργασίες μετατροπής οι οποίες μετατρέπουν μέρος του υπολείμματος της ατμοσφαιρικής απόσταξης σε υψηλότερης αξίας λευκά προϊόντα.



Σχήμα 3: Παραγωγή και ζήτηση προϊόντων πετρελαίου

[1]

1.3 Βενζίνη

1.3.1 Ιστορικά στοιχεία

Η ανακάλυψη της ύπαρξης του αργού πετρελαίου από τον συνταγματάρχη Edwin Drake στην Titusville της Pennsylvaniato 1859, έδωσε μία νέα σημαντική πηγή ενέργειας στην ανθρωπότητα. Αποτέλεσε δε σημαντικό παράγοντα για την αλματώδη τεχνολογική εξέλιξη που παρουσιάστηκε τον 20^ο αιώνα. Τα χρόνια εκείνα, ήταν επιτακτική η ανάγκη παραγωγής ενός καυσίμου εναλλακτικού των φαλαινελαίων που χρησιμοποιούνταν στις λάμπες φωτισμού. Η παραγωγή αυτών των ελαίων δεν επαρκούσε για να καλύψει τις ανάγκες του τότε καυσίμου. Η απόσταξη του αργού πετρελαίου έδωσε την κηροζίνη που ήταν το απαιτούμενο για την εποχή εναλλακτικό καύσιμο. Η κηροζίνη όμως αποτελεί ένα μικρό ποσοστό του αργού πετρελαίου, γύρω στο 15%. Τα υπόλοιπα πλεονάζοντα κλάσματα του αργού πετρελαίου είτε καιγόταν (βενζίνη) είτε πετιόνταν (υπόλειμμα) προκαλώντας έτσι τεράστια ρύπανση.

Η πρώτη παραγωγή βενζίνης αναφέρεται στη Βοστώνη το 1863 από τον Joshua Merrill, στην προσπάθεια του να παρασκευάσει κηροζίνη για λάμπες φωτισμού. Στα πρώτα χρόνια της εμφάνισης των βενζινοκινητήρων, το μόνο διαθέσιμο καύσιμο ήταν τα ελαφριά κλάσματα της ατμοσφαιρικής απόσταξης του αργού πετρελαίου. Η περιοχή ζέσης αυτών των καυσίμων ήταν 50 με 200 °C. Η σχέση συμπίεσης των κινητήρων ήταν πολύ χαμηλή, κι έτσι δεν υπήρχε πρόβλημα λόγω χαμηλής αντικροτικότητας των καυσίμων.

Ο Α' Παγκόσμιος πόλεμος αύξησε τις ανάγκες για καλύτερης ποιότητας βενζίνη που χρησιμοποιούνταν στους κινητήρες των αεροπλάνων. Ο μόνος τρόπος για την παρασκευή βενζίνης υψηλής αντικροτικότητας ήταν η απόσταξη αργών πετρελαίων από το Βόρνεο και τις ολλανδικές Δυτικές Ινδίες που είχαν υψηλή περιεκτικότητα σε αρωματικές ενώσεις. Με το τέλος του πολέμου έγινε φανερό ότι πρέπει να βελτιωθεί η σύσταση της βενζίνης για να μπορέσει να αυξηθεί ο βαθμός απόδοσης των κινητήρων χρησιμοποιώντας υψηλότερες σχέσεις συμπίεσης. Οι έρευνες εκείνης της εποχής έδειξαν την υψηλή αντίσταση των αρωματικών και την πολύ χαμηλή των κανονικών παραφινών στην αυτανάφλεξη. Το καλύτερο καύσιμο εκείνης της εποχής ήταν το προϊόν απόσταξης της λιθανθρακόπισσας (μίγμα βενζολίου, τολουολίου και ξυλολίων). Σε αυτήν την εποχή διαπιστώθηκε η καλή

αντικροτικότητα των αλκοολών. Στην ίδια περίοδο ξεκίνησαν οι έρευνες για την καθιέρωση ενός κινητήρα που θα μπορούσε να μετρήσει την αντικροτικότητα των καυσίμων.

Το 1921 άρχισε η χρήση αλκυλοενώσεων του μολύβδου σαν πρόσθετα για την αύξηση της αντικροτικότητας των βενζινών. Η χρήση τους γενικεύτηκε από το καλοκαίρι του 1926. Την ίδια εποχή διαπιστώθηκε η πολύ καλή αντικροτικότητα των διακλαδωμένων παραφινών σε αντίθεση με τις κανονικές. Το 1929 καθιερώθηκε η χρήση του κινητήρα CFR για τη μέτρηση του αριθμού οκτανίου των βενζινών, με τη χρήση του κανονικού επτανίου και του ισοοκτανίου σαν καύσιμα αναφοράς, μέθοδος που αποτελεί ακόμη το διεθνώς καθορισμένο τρόπο μέτρησης της αντικροτικότητας των βενζινών.

Στα τέλη της δεκαετίας του '20 άρχισε η χρήση διεργασιών πυρόλυσης με σκοπό την αναβάθμιση των υπολειμμάτων της απόσταξης (η θερμική πυρόλυση εμφανίστηκε το 1913). Οι διεργασίες αυτές έδωσαν καύσιμα με ικανοποιητικό αριθμό οκτανίου, αλλά αυξημένη περιεκτικότητα σε ολεφίνες που είχε σαν αποτέλεσμα το σχηματισμό κομμωδών ενώσεων στο καύσιμο καθώς και δυσάρεστη οσμή αυτών των καυσίμων. Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος άρχισε η χρήση κατάλληλων προσθέτων. Η χρήση των διεργασιών πυρόλυσης κατέστη αναγκαία για να καλύψει την αυξημένη ζήτηση βενζίνης. Στα τέλη της δεκαετίας του '30, ο μέσος αριθμός οκτανίου ήταν 70 και η σχέση συμπίεσης των κινητήρων περίπου 5,5:1. Η καταλυτική πυρόλυση (έχει αναλυθεί παρακάτω, παράγραφος 1.4.2.6) έκανε την εμφάνιση της το 1936. Η αναβάθμιση των παραφινών μέσω της αναμόρφωσης τους εμφανίστηκε το 1940. Την ίδια εποχή άρχισαν να χρησιμοποιούνται η αλκυλίωση (1938) και η ισομερίωση (1943), διεργασίες αναδιάταξης των μορίων.

Στο Β' Παγκόσμιο πόλεμο παρατηρήθηκε έντονη ανάγκη για παραγωγή βενζίνης αριθμού οκτανίου 100, για τις ανάγκες των αεροσκαφών. Αυτό επιτευχθεί με αυξημένη χρήση μολύβδου και την ανάπτυξη διεργασιών καταλυτικής πυρόλυσης και αναμόρφωσης καθώς και καταλυτικής αποθείωσης. Μετά το τέλος του πολέμου, υπήρχε η δυνατότητα παραγωγής βενζίνης υψηλού αριθμού οκτανίου. Από το 1950 ως το 1955 παρατηρήθηκε γρήγορη αύξηση του αριθμού οκτανίου των βενζινών, για να φτάσει στο 95 περίπου. Με αυτόν τον τρόπο έγινε δυνατή η ανάπτυξη κινητήρων υψηλής σχέσης συμπίεσης και αυξημένου βαθμού απόδοσης.

Στα τέλη της δεκαετίας του '60 άρχισαν να ξεκαθαρίζουν οι προδιαγραφές στις διάφορες χώρες. Η εθνικοποίηση των πετρελαιοπηγών από τις αραβικές χώρες το 1973 και η διακοπή πώλησης πετρελαίου από το Ιράν (1979) αύξησε απότομα τις διεθνείς τιμές του αργού πετρελαίου κι επακολούθως όλων των προϊόντων του. Αποτέλεσμα ήταν η συνεχής προσπάθεια για όσο το δυνατόν καλύτερη οικονομία καυσίμου, καθώς και η στροφή σε εναλλακτικές πηγές ενέργειας (πχ αλκοόλες από βιομάζα).

Η έντονη ατμοσφαιρική ρύπανση σε πολλές περιοχές, που υπήρχε αυξημένη χρήση αυτοκινήτων, οδήγησε στην επιβολή ορίων εκπομπών από τους κινητήρες. Αποτέλεσμα αυτών των περιορισμών ήταν οι μεταβολές των κινητήρων και η εισαγωγή καταλυτικών μετατροπών, που οδήγησε στη μείωση των εκπομπών αλλά και στην απομάκρυνση των ενώσεων του μολύβδου λόγω δηλητηρίασης των μετατροπών. Η επίτευξη του απαραίτητου αριθμού οκτανίου έγινε με χρήση οξυγονούχων προσθέτων (αλκοόλες, αιθέρες). Ταυτόχρονα, έπρεπε να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα της αυξημένης παραγωγής πυρολυμένων προϊόντων επειδή η περιορισμένη ζήτηση μαζούτ οδήγησε σε αύξηση των εγκαταστάσεων μετατροπής των υπολειμμάτων σε προϊόντα υψηλότερης αξίας. [1]

1.3.2 Γενικά για τις βενζίνες

Η βενζίνη είναι προϊόν επεξεργασίας του αργού πετρελαίου. Το μίγμα υδρογονανθράκων που περιλαμβάνει το τελευταίο διαχωρίζεται με κλασματική απόσταξη σε διάφορα κλάσματα, μίγματα υδρογονανθράκων και αυτά, η σύσταση των οποίων καθορίζεται από τα όρια της θερμοκρασίας απόσταξης (Πιν. 2). Το αρχικό ακατέργαστο προϊόν της πρωτογενούς αυτής φυσικής διεργασίας που προορίζεται για παραγωγή καυσίμων αυτοκίνησης ανέρχεται σε 30-40% του αργού πετρελαίου που αποστάζεται και αποτελεί την πρώτη ύλη, η οποία με περαιτέρω κατεργασία και ανάμιξη με άλλα συστατικά, δίνει το τελικό προϊόν που αναφέρεται ως βενζίνη (gasoline).

Οι βενζίνες είναι προϊόντα μίξης κλασμάτων που προκύπτουν από εξειδικευμένες κατεργασίες διύλισης, οι οποίες και έχουν ήδη αναφερθεί. Λόγω του ότι υπήρξαν πάντοτε καθοριστικός παράγοντας για την ανάπτυξη της αυτοκινητοβιομηχανίας, η έρευνα στον τομέα των καυσίμων μετέβαλε συνεχώς την παραγωγή της βενζίνης. Στις αρχές του 20^{ού} αιώνα η βενζίνη παραγόταν αποκλειστικά ως απλό απόσταγμα του πετρελαίου, οι βελτιώσεις όμως στις μηχανές εσωτερικής καύσης (M.E.K.) επηρέασαν γρήγορα και τις

απαιτήσεις στην ποιότητα των καυσίμων. Σημαντική καινοτομία υπήρξε για την βελτίωση της αντικροτικής συμπεριφοράς των καυσίμων η προσθήκη τετρααιθυλιούχου μολύβδου.

Λόγω της μεγάλης κατανάλωσης της βενζίνης, παρασκευάζεται και τεχνητά με τρεις κυρίως μεθόδους:

- Μέθοδος με πυρόλυση
- Μέθοδος Μπεργκιους (Bergius) ή με υγροποίηση του άνθρακα
- Μέθοδος Φίσερ Τροπς (Fischer-Tropsch)

Η βενζίνη έχει σημειωθεί ότι αποτελεί κατά το μεγαλύτερο μέρος της μίγμα υδρογονανθράκων, ενώ εμπλουτίζεται και με διάφορα βελτιωτικά πρόσθετα που διαμορφώνουν τις τελικές φυσικές και χημικές ιδιότητες του καυσίμου, όπως τα οξυγονούχα πρόσθετα και οι αλκυλικές ενώσεις μολύβδου για την αύξηση του αριθμού οκτανίων. Η βενζίνη περιέχει γύρω στους 500 υδρογονάνθρακες με αλυσίδες τεσσάρων ως δώδεκα ατόμων άνθρακα, με εύρος σημείων βρασμού 30°C -220°C σε ατμοσφαιρική πίεση.

Οι υδρογονάνθρακες της βενζίνης διακρίνονται σε κορεσμένους και ακόρεστους, ανάλογα με το είδος των δεσμών μεταξύ των ατόμων άνθρακα, απλοί και διπλοί ή τριπλοί δεσμοί αντίστοιχα. Οι κορεσμένοι υδρογονάνθρακες (αλκάνια ή παραφίνες) αποτελούν το κύριο συστατικό των μολυβδωμένων βενζινών, καίγονται στον αέρα με λευκή φλόγα και ο αριθμός οκτανίων τους εξαρτάται από το είδος της αλυσίδας και τον αριθμό ατόμων άνθρακα. Τα κανονικά αλκάνια (ευθείες αλυσίδες) με μοριακό τύπο C_nH_{2n+2} εμφανίζουν χαμηλό αριθμό οκτανίων που μειώνεται καθώς αυξάνεται ο αριθμός ατόμων άνθρακα, σε αντίθεση με τα αλκάνια με διακλαδισμένη αλυσίδα (ισο-αλκάνια), τα οποία εμφανίζουν μεγαλύτερους αριθμούς οκτανίων που αυξάνονται με την αύξηση του μεγέθους του μορίου. Τα κυκλικά αλκάνια ή ναφθένια (C_nH_{2n}), όπως το κυκλοεξάνιο, εμφανίζουν επίσης υψηλούς αριθμούς οκτανίων.

Οι ακόρεστοι υδρογονάνθρακες της βενζίνης είναι περισσότερο ασταθείς, λόγω της ύπαρξης διπλών (αλκένια) και τριπλών (αλκίνια) δεσμών στο μόριό τους, παρουσιάζουν αυξημένη τοξικότητα και κατά την καύση τους δημιουργούν αιθαλομίχλη. Τα αλκένια ή ολεφίνες, αν και εμφανίζουν τους επιθυμητούς αριθμούς οκτανίων, είναι χημικά ενεργά και τοξικά ώστε περιορίζονται σε μικρό ποσοστό, ενώ τα αλκίνια (ακετυλένια), εμφανίζονται σε ίχνη στα

καύσιμα αυτοκινήτων και μόνο σε φτωχά ραφινάρισμένες βενζίνες. Οι αρωματικές ενώσεις (βενζόλιο, τολουόλιο) αποτελούν πάνω από 40% της βενζίνης, αν και τα τελευταία χρόνια σταδιακά μειώνονται κάτω από 20%. Αν και τοξικά, έχουν υψηλούς αριθμούς οκτανίων και χρησιμοποιούνται σε μεγάλο ποσοστό σε αμόλυβδες βενζίνες υψηλής ποιότητας αντικαθιστώντας τα βελτιωτικά μολύβδου. Τέλος, τα πολυκυκλικά αρωματικά (Polynuclear Aromatics, PNAs), όπως η ναφθαλίνη, υπάρχουν σε πολύ μικρές συγκεντρώσεις στην βενζίνη, ενώ η χρήση των μεγαλύτερων μελών της σειράς είναι απαγορευτική λόγω της υψηλής τοξικότητάς τους.

Για την διατήρηση στις αμόλυβδες βενζίνες των υψηλών αριθμών οκτανίων που επιτεύχθηκαν με την χρήση μολύβδου, σήμερα, εκτός από την αύξηση του ποσοστού των αρωματικών, χρησιμοποιούνται οξυγονούχα πρόσθετα. Πρόκειται για οργανικές ενώσεις που περιέχουν στο μόριό τους άτομα οξυγόνου, κυρίως αλκοόλες (C_x-O-H) ή αιθέρες (C_x-O-C_y) μέχρι έξι ατόμων άνθρακα (Σχήμα 4). Η παρουσία οξυγόνου δεν αυξάνει το ενεργειακό δυναμικό του καυσίμου, αλλά η δομή τους παρέχει μια σημαντική τιμή του δείκτη αντικροτικής συμπεριφοράς, έτσι ώστε να καθίστανται ικανά υποκατάστατα των αρωματικών. Παράγονται από ορυκτά καύσιμα (μεθανόλη, μεθυλικός τριτοταγής βουτυλικός αιθέρας MTBE, τεταρτοταγής αμυλομεθειθέρας TAME) και από βιομάζα (βιοαιθανόλη, αιθυλικός τριτοταγής βουτυλικός αιθέρας (ETBE)). Οι φυσικές ιδιότητες των ενώσεων αυτών είναι σημαντικά διαφορετικές από εκείνες των υδρογονανθράκων της βενζίνης και επομένως τα όρια τους διατηρούνται σε χαμηλά επίπεδα, ενώ το κλάσμα των υδρογονανθράκων πρέπει να τροποποιηθεί κατάλληλα ώστε να αξιοποιηθούν οι αντικροτικές και πτητικές ιδιότητες των οξυγονούχων προσθέτων. Σήμερα χρησιμοποιούνται σε καύσιμα με σημαντικά τροποποιημένο κλάσμα υδρογονανθράκων, που αναφέρονται ως ανασχηματισμένες βενζίνες (reformulated gasolines, RFGs), ώστε παράλληλα με την αύξηση του αριθμού οκτανίων να είναι δυνατή η μείωση των τοξικών ακόρεστων υδρογονανθράκων και του βενζολίου.



Σχήμα 4: Οξυγονούχες ενώσεις α) αιθανόλη και β) μεθυλικός τριτοταγής βουτυλικός αιθέρας

Οι βενζίνες μπορούν να περιέχουν και άλλα βελτιωτικά πρόσθετα, όπως μικρές ποσότητες άλλων ενισχυτικών του αριθμού οκτανίου, αντιοξειδωτικά και μεταλλικούς απενεργοποιητές για αύξηση της σταθερότητας της βενζίνης, τροποποιητές ανεπιθύμητων επικαθήσεων στο σύστημα ανάφλεξης (μπουζι) και προκαλούν προανάφλεξη, επιφανειακά ενεργά συστατικά που λειτουργούν ως αντιψυκτικά, αποτρέπουν τον σχηματισμό επικαθήσεων, βελτιώνουν την εξάτμιση και μειώνουν τις εκπομπές NOx, αντιδιαβρωτικά, και τέλος χρωστικές ουσίες και ιχνηθέτες για εύκολο διαχωρισμό των διαφόρων ποιοτήτων και για λόγους ασφάλειας. [1], [4]

Οι βενζίνες αποτελούν επομένως προϊόντα μίξης κλασμάτων-προϊόντων εξειδικευμένων κατεργασιών διύλισης, ώστε να πληρούν τις εκάστοτε ποιοτικές προδιαγραφές και τους ισχύοντες περιβαλλοντικούς κανονισμούς. Διαχωρίζονται σε ποιότητες ανάλογα με τον αριθμό οκτανίου, που όμως δεν αντιστοιχούν απαραίτητα στην ίδια χημική σύσταση και συνεπώς το ενεργειακό περιεχόμενο, την ταχύτητα φλόγας, την θερμοκρασία ανάφλεξης και τα υπόλοιπα ποιοτικά χαρακτηριστικά του καυσίμου. Μια τυπική σύσταση βενζίνης περιλαμβάνει 15% παραφίνες, 30% ισοπαραφίνες, 12% κυκλοαλκάνια, 35% αρωματικές ενώσεις και 8% ολεφίνες, ενώ τα νεότερα οξυγονωμένα καύσιμα περιέχουν μέχρι και 12-15% οξυγονούχες ενώσεις που αντικαθιστούν ποσοστό των αρωματικών ενώσεων και ολεφινών, μειώνοντας το εύρος του σημείου βρασμού. Σήμερα στις υψηλής ποιότητας αμόλυβδες βενζίνες το ποσοστό των αρωματικών τείνει να είναι κάτω του 25% για περιβαλλοντολογικούς λόγους. Οι κυριότερες ενώσεις των παραπάνω ομάδων με τους αριθμούς οκτανίων (RON, MON), το σημείο βρασμού, την πυκνότητα και την ελάχιστη θερμοκρασία αυτανάφλεξης (minimum autoignition temperature, AIT) που εμφανίζουν παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.

Πίνακας 5: Υδρογονάνθρακες της βενζίνης και οξυγονούχα πρόσθετα και ιδιότητες τους

Οργανική ένωση		RON	MON	Σ.Β. (°C)	d(g/ml σε 15°C)	AIT (°C)
Ξεπαραφίνες	βουτάνιο	113	114	-0.5	αέριο	370
	πεντάνιο	62	66	35	0.626	260
	εξάνιο	19	22	69	0.659	225
	επτάνιο	0	0	98	0.684	225
	οκτάνιο	-18	-16	126	0.703	220
Ισοπαραφίνες	2 μεθυλοπροπάνιο	122	120	-12	αέριο	460
	2 μεθυλοβουτάνιο	100	104	28	0.620	420
	2 μεθυλοπεντάνιο	82	78	62	0.653	306

	3 μεθυλοπεντάνιο	86	80	64	0.664	
	2 μεθυλοεξάνιο	40	42	90	0.679	
	3 μεθυλοεξάνιο	56	57	91	0.687	
	2, 2 διμεθυλοπεντάνιο	89	93	79	0.674	
	2,2,3 τριμεθυλοβουτάνιο	112	112	81	0.690	420
	2,2,4 τριμεθυλοπεντάνιο	100	100	98	0.692	415
κυκλοαλκάνια	κυκλοπεντάνιο	141	141	50	0.751	380
	μεθυλοκυκλοπεντάνιο	107	99	72	0.749	
	κυκλοεξάνιο	110	97	81	0.779	245
	μεθυλοκυκλοεξάνιο	104	84	101	0.770	250
αρωματικές ενώσεις	βενζόλιο	98	91	80	0.874	560
	τολουόλιο	124	112	111	0.867	480
	αιθυλοβενζόλιο	124	107	136	0.867	430
	m-ξυλόλιο	162	124	138	0.868	463
	p-ξυλόλιο	155	126	138	0.866	530
	o-ξυλόλιο	126	102	144	0.870	530
	3-αιθυλοτολουόλιο	162	138	158	0.865	
	1,3,5-τριμεθυλοβενζόλιο	170	136	163	0.864	
	1,2,4-τριμεθυλοβενζόλιο	148	124	168	0.889	
ολεφίνες	2-πεντένιο	154	138	37	0.649	
	2-μεθυλοβουτένιο-2	176	140	36	0.662	
	2-μεθυλοπεντένιο	159	148	67	0.690	
	κυκλοπεντένιο	171	126	44	0.774	
Οοξυγονούχα	μεθανόλη	133	105	65	0.796	385
	αιθανόλη	129	102	78	0.794	365
	ισοπροπυλική αλκοόλη	118	98	82	0.790	399
	MTBE	116	103	55	0.745	
	ETBE	118	102	72	0.745	
	TAME	111	98	86	0.776	

[5]

Πίνακας 6: Ιδιότητες βενζινών της ελληνικής αγοράς

Ιδιότητες	Απλή	Super	Αμόλυβδη
Αριθμός οκτανίου			
RON	90 ελαχ.	96-98	95 ελαχ.
MON			85 ελαχ.
Μόλυβδος (g/ltr) μεγ.	0,40	0,15	0,013
Θείο (%κ.β.) μεγ.	0,15	0,15	0,10
Πυκνότητα (g/ml, 15°C)	Αναφορά	0,720-0,770	0,730-0,790
Απόσταξη (%κ.ο.)			
Συμπύκνωμα στους 70 °C, ελαχ.	10%	10%	10%
Συμπύκνωμα στους 100 °C.		30-65%	30-65%
Συμπύκνωμα στους 130 °C, ελαχ.	50%		
Συμπύκνωμα στους 180 °C, ελαχ.	90%	85%	85%

Τέλος απόσταξης (°C) μεγ.	205	215	215
Υπόλειμμα απόσταξης (%κ.ο) μεγ.	1,50%	2%	2%
Τάση ατμών Reid (Κρα, 100 ° F) μεγ.			
α. 1/4 ως 31/10	54,5 Κρα	65 Κρα	65 Κρα
β. 1/11 ως 31/3	67,0 ΚΡα	80 Κρα	80 Κρα
Διάβρωση χαλκού (ASTM No.) μεγ.	1	1	1
Υπάρχοντα κομμωίδη (g/100ml) μεγ.	4	4	4
Αντοχή στην οξειδωση (min) ελαχ.	480	360	360
Βενζόλιο (% κ.ο.) μεγ.	-	5%	5%
Αρωματικά (% κ.ο)	-	Αναφορά	-
Ολεφίνες (% κ.ο)	-	Αναφορά	-
Χρώμα	Πορτοκαλί	Πράσινο	Άχρωμη ως
Οξυγονούχα	-	-	αχυρόχρωμη (*)

(*) Η περιεκτικότητα σε οξυγονούχα δίνεται στον πίνακα 7.

Πίνακας 7: Όρια Οξυγονούχων συστατικών στην αμόλυβδη βενζίνη

Οξυγονούχο	Ποσοστό (% κ.ο. μέγιστο)
Μεθανόλη	3
Αιθανόλη	5
Ισοπροπανόλη	5
κ-Βουτανόλη	7
ι-Βουτανόλη	7
δ-Βουτανόλη	7
τ-Βουτανόλη	7
Μεθυλο-τ-Βουτυλαιθέρας	10
Μεθυλο-τ-Αμυλαιθέρας	10
Αιθυλο-τ-Βουτυλαιθέρας	10

[1]

1.3.3 Χαρακτηριστικά – Προδιαγραφές βενζινών

Οι βενζίνες έχει ήδη αναφερθεί πρέπει να ικανοποιούν κάποιες προδιαγραφές οι οποίες έχουν να κάνουν με τη σωστή λειτουργία των μηχανών εσωτερικής καύσης (Μ.Ε.Κ.). Οι προδιαγραφές αυτές αφορούν φυσικά και χημικά χαρακτηριστικά της βενζίνης και είναι κυρίως ο αριθμός οκτανίου (octane number) και ο βαθμός αντικροτικής ικανότητας (antiknock rating) αλλά και η πτητικότητα (volality), τα χαρακτηριστικά καύσης, το περιεχόμενο σε θείο, σε μόλυβδο, σε φώσφορο και μαγγάνιο, το περιεχόμενο σε υδρογονάνθρακες, η οξειδωτική σταθερότητα (stability), η διάβρωση (corrosion) και η μόλυνση της βενζίνης.

1.3.3.1 Αριθμός οκτανίου και βαθμός αντικροτικής ικανότητας

Η έννοια του αριθμού οκτανίων εισήχθη από τον Graham Edgar (1926), που πρότεινε μία κλίμακα μέτρησης της αντικροτικής συμπεριφοράς της βενζίνης σε σχέση με αυτή που

εμφανίζει το δυαδικό μίγμα υδρογονανθράκων σε διάφορες αναλογίες και η οποία καθιερώθηκε σαν επίσημη μέθοδος το 1929. Για το πρότυπο αυτό μίγμα προτάθηκαν δύο υδρογονάνθρακες που μπορούσαν να παραχθούν σε ικανοποιητική καθαρότητα και ποσότητα, το “κανονικό επτάνιο” και ένα συνθετικό οκτάνιο, το “ισοοκτάνιο” ή “2, 4, 4-τριμεθυλοπεντάνιο”. Οι υδρογονάνθρακες αυτοί θεωρήθηκαν ιδανικοί λόγω της τεράστιας διαφοράς στην αντικροτική συμπεριφορά τους (δόθηκαν οι αυθαίρετες τιμές 0 και 100 για τα καθαρά τους μίγματα αντίστοιχα), αλλά και των παρόμοιων πτητικών ιδιοτήτων τους (Πίνακας 8), που διασφαλίζουν την σταθερή πτητική συμπεριφορά των μιγμάτων τους στις διάφορες αναλογίες από 0:100 ως 100:0.

Πίνακας 8: Πτητικές ιδιότητες κανονικού επτανίου και ισοκτανίου

	Σημείο τήξης (°C)	Σημείο βρασμού (°C)	Πυκνότητα (g/ml)	Θερμότητα ατμοποίησης (MJ/kg σε 25°C)
κανονικό επτάνιο	-90.7	98.4	0.684	0.365
ισοοκτάνιο	-107.45	99.3	0.6919	0.308

[1]

Ο αριθμός οκτανίου είναι ένα μέτρο της τάσεως ενός καυσίμου για την εμφάνιση «κτυπήματος» (knock) στον βενζινοκινητήρα. Η βενζίνη μπαίνει στους κυλίνδρους μιας μηχανής εσωτερικής καύσης μαζί με αέρα. Μέσα στους κυλίνδρους το μίγμα καυσίμου – αέρα βρίσκεται υπό πίεση και αναφλέγεται με τη βοήθεια των σπινθηριστών (μπουζί). Όταν όμως η πίεση ξεπεράσει κάποιο όριο, το οποίο εξαρτάται από την ποιότητα του καυσίμου, τότε η ανάφλεξη δεν γίνεται κανονικά αλλά αντίθετα προκαλείται αυτανάφλεξη του καυσίμου. Τότε ακούγεται ένας χαρακτηριστικός ήχος, το «κτύπημα», ο οποίος δημιουργείται από την επίδραση του κρουστικού κύματος της πρόωρης έκρηξης του καυσίμου στα τοιχώματα του κυλίνδρου του κινητήρα. Αποτέλεσμα του φαινομένου αυτού είναι η μείωση της ενεργειακής απόδοσης του κινητήρα αλλά και η φθορά των κυλίνδρων της μηχανής.

Το «κτύπημα» δεν εμφανίζεται στην ίδια πίεση σε όλες τις βενζίνες καθώς αυτή εξαρτάται από μια σημαντική ιδιότητα τους, την θερμοκρασία αυτανάφλεξης. Όσο υψηλότερη είναι η θερμοκρασία αυτή τόσο μεγαλύτερη αντικροτική ικανότητα εμφανίζει η βενζίνη, δηλαδή τόσο περισσότερο μπορεί να συμπιεστεί χωρίς να δώσει κτύπημα. Είναι ευνόητο ότι το καύσιμο

που μπορεί να συμπιεστεί περισσότερο θεωρείται και καλύτερης ποιότητας καθώς αυξάνεται η ενεργειακή απόδοση του κινητήρα.

Όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός οκτανίου ενός καυσίμου τόσο μεγαλύτερη είναι και η επιτρεπόμενη σχέση συμπίεσης, άρα και η ενεργειακή απόδοση του κινητήρα. Για να μπορέσουν λοιπόν να βαθμολογηθούν και να συγκριθούν οι διάφοροι τύποι βενζίνης καθιερώθηκε η λεγόμενη «κλίμακα οκτανίου». Το μηδέν αυτής της κλίμακας αποτελεί το κανονικό επτάνιο και το εκατό το ισοοκτάνιο (2,2,4-τριμέθυλο-πεντάνιο). Αυτό σημαίνει ότι το n-επτάνιο εμφανίζει το κτύπημα του κινητήρα σε χαμηλές τιμές συμπίεσης ενώ αντίθετα το ισοοκτάνιο αντέχει σε υψηλότερες συμπίεσεις. Η ανάμιξη n-επτανίου και ισοοκτανίου παρέχει προϊόντα με οποιονδήποτε αριθμό οκτανίου από 0 μέχρι 100.

Με βάση τα παραπάνω ο αριθμός οκτανίου ενός καυσίμου ορίζεται ως η % ποσότητα (κατ' όγκο) ισοοκτανίου (2,2,4-τριμέθυλο-πεντάνιο) σε πρότυπο μίγμα με n-επτάνιο έτσι ώστε αυτό το μίγμα να παρουσιάζει την ίδια αντικροτική συμπεριφορά (χτύπος της μηχανής) με το εξεταζόμενο καύσιμο. Έτσι, βενζίνη αριθμού οκτανίου 80 είναι εκείνη η οποία συμπεριφέρεται όπως το μίγμα που αποτελείται από 80% ισοοκτάνιο και 20% n-επτάνιο.
[6]

Για να μπορέσουν να εξαχθούν πιο αξιόπιστα συμπεράσματα αναφορικά με την αντικροτικότητα των βενζινών, ο αριθμός οκτανίου μετριέται με δύο διαφορετικές μεθόδους (Research και Motor) καθώς επίσης και σε μικρότερα θερμοκρασιακά κλάσματα του καυσίμου. Ο αριθμός οκτανίου με την ερευνητική μέθοδο (Research Octane Number, RON) σχετίζεται καλύτερα με ήπιες συνθήκες οδήγησης και χαμηλές στροφές, ενώ με τη μέθοδο του κινητήρα (Motor Octane Number, MON) σχετίζεται με υψηλές στροφές και μεταβατικές συνθήκες λειτουργίας. Η ανάγκη διεθνούς τυποποίησης για τον χαρακτηρισμό των καυσίμων καθιέρωσε για αρκετές δεκαετίες την πρότυπη μέθοδο ερευνητικής δοκιμής (Research Test Method) κατά ASTM (American Society for Testing and Materials). Για τον πλήρη χαρακτηρισμό μίας βενζίνης, δεν αρκεί ο προσδιορισμός ενός μόνο από τους δύο αριθμούς και χρησιμοποιείται εκτός από τον δείκτη αντικροτικής συμπεριφοράς $(RON+MON)/2$, και η ευαισθησία καυσίμου (fuel sensitivity), που υπολογίζεται ως διαφορά των δύο αριθμών οκτανίων του, $RON-MON$, που για τις συνήθεις βενζίνες έχει τιμή περίπου 10. Πρόκειται για δείκτη συμπεριφοράς ενός καυσίμου σε μεταβαλλόμενες συνθήκες λειτουργίας κινητήρα,

αφού οι δύο μέθοδοι προσδιορισμού του αριθμού οκτανίου διαφέρουν ουσιαστικά στην θερμοκρασία εισαγωγής του μίγματος, στο χρόνο αναφλέξεως του μίγματος καυσίμου – αέρα και την ταχύτητα της μηχανής. Οι συνθήκες μέτρησης των RON και MON δίνονται στον πίνακα 9. Και στις δύο μεθόδους η αντικροτικότητα του καυσίμου συγκρίνεται με την αντίστοιχη μιγμάτων ισοοκτανίου και n-επτανίου γνωστής αναλογίας.

Ο προσδιορισμός του αριθμού οκτανίου μιας βενζίνης γίνεται με τη βοήθεια ενός πρότυπου κινητήρα, στον οποίο αρχικά μπαίνει η εξεταζόμενη βενζίνη και μετριέται η συμπίεση στην οποία ακούγεται το κτύπημα. Έπειτα, μπαίνει κανονικό επτάνιο στο οποίο προστίθεται ισοοκτάνιο ωστόσο ακουστεί το κτύπημα στην ίδια πίεση με εκείνη της εξεταζόμενης βενζίνης. Το επί τοις εκατό ποσοστό του ισοοκτανίου που υπάρχει στο μίγμα δίνει τον αριθμό οκτανίου της βενζίνης.

Η κλίμακα οκτανίου μπορεί να προεκταθεί προς τιμές υψηλότερες του 100, αφού το ισοοκτάνιο δεν είναι η ουσία με τη μεγαλύτερη αντικροτική ικανότητα. Έτσι για παράδειγμα η αιθανόλη έχει RON ίσο με 129. Σε αυτή την περίπτωση ως καύσιμα συγκρίσεως λαμβάνονται μίγματα ισοοκτανίου και τετρααιθυλο- μολύβδου. [6]

Πίνακας 9: Συνθήκες δοκιμής των μεθόδων προσδιορισμού αριθμού οκτανίων

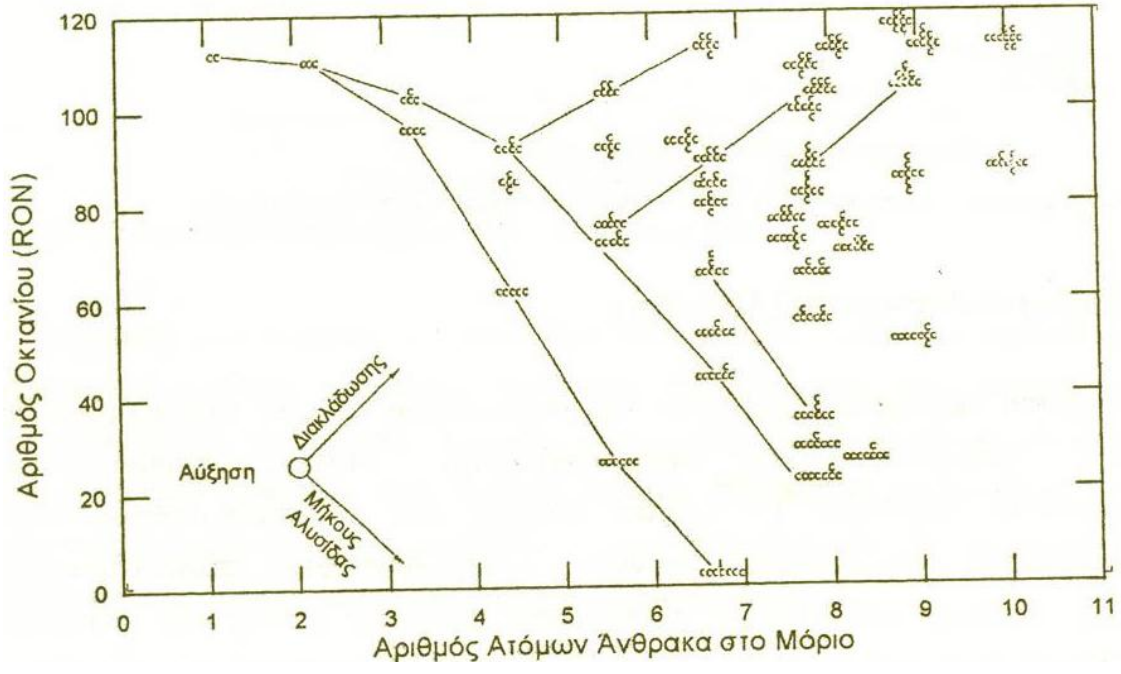
	Research	Motor
Μέθοδος CRC	F-1	F-2
Μέθοδος ASTM	D2699	D 2700
Στροφές κινητήρα (rpm)	600	900
Θερμοκρασία αέρα εισαγωγής (°C)	Εξαρτάται από τη βαρομετρική πίεση	38
Θερμοκρασία μίγματος (°C)	Δεν καθορίζεται	149
Θερμοκρασία Ψυκτικού (°C)	100	100
Προπορεία σπινθήρα (°C)	13° πριν το ΑΣΝ	Σχετίζεται με τη σχέση συμπίεσης

Έχει ήδη αναφερθεί ότι η αντικροτικότητα αποτελεί μία από τις βασικότερες ιδιότητες των βενζινών και μετριέται με τον αριθμό οκτανίου. Δηλαδή η αντικροτικότητα εξαρτάται από το είδος των υδρογονανθράκων που περιέχονται στο καύσιμο. Σε γενικές γραμμές η κατάταξη της αντικροτικότητας των κατηγοριών οργανικών ενώσεων είναι η ακόλουθη:

Αρωματικά> ισοπαραφίνες> ναφθένια > ολεφίνες > παραφίνες

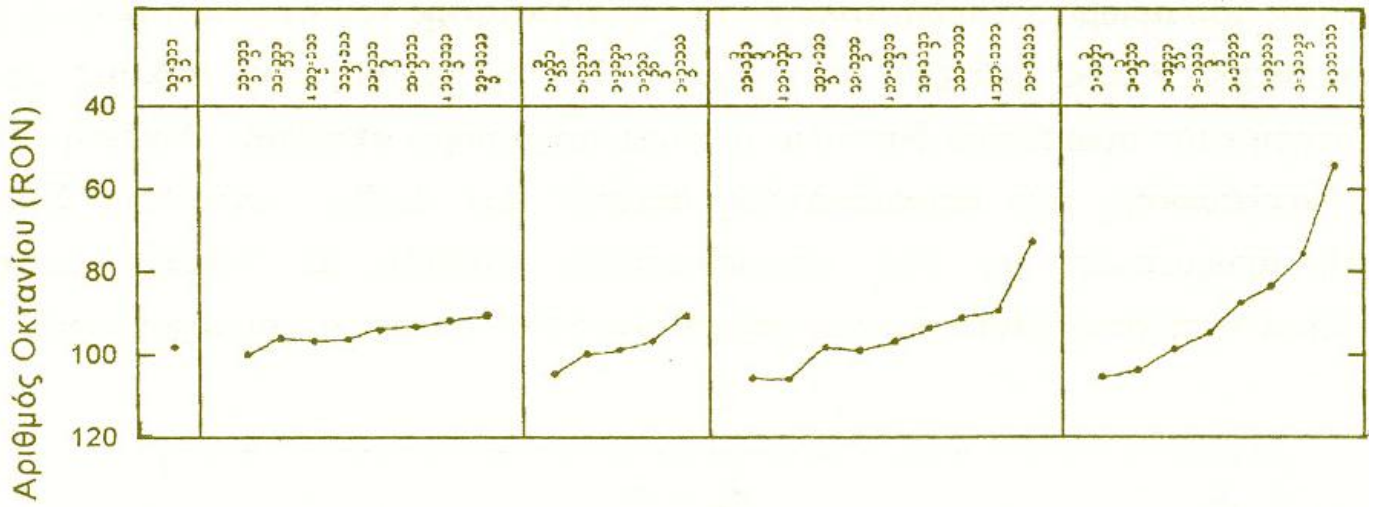
Η αντικροτικότητα των παραφινικών ενώσεων φαίνεται στο σχήμα 5. Αύξηση του μεγέθους του μορίου συνεπάγεται μείωση της αντικροτικότητας για ίδιο βαθμό διακλάδωσης. Παράλληλα, οι διακλαδισμένες και συντακτικά συμπαγείς παραφίνες παρουσιάζουν

μεγαλύτερη αντικροτικότητα από τις λιγότερο διακλαδισμένες και ευθείας αλυσίδας ισομερείς τους. Επιπλέον η παρουσία μεθυλίου αντί άλλου αλκυλίου στις διακλαδώσεις αυξάνει τον αριθμό οκτανίου.



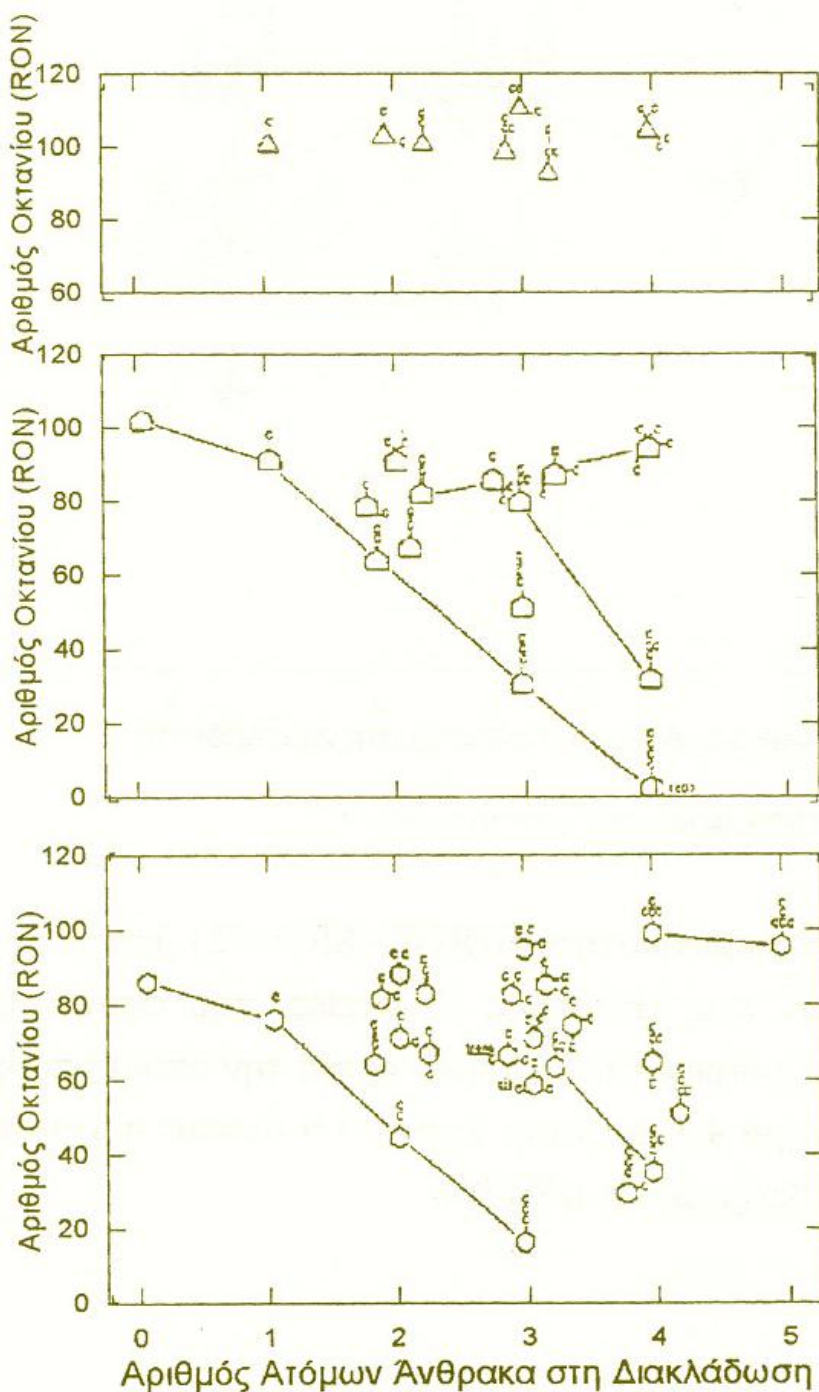
Σχήμα 5: Αντικροτικότητα παραφινικών ενώσεων

Η αντικροτικότητα των ολεφινών εξαρτάται από το βαθμό διακλάδωσης τους. Για ισομερείς ολεφίνες, αυτές με τη μεγαλύτερη κύρια αλυσίδα παρουσιάζουν τη χαμηλότερη αντικροτικότητα, όπως φαίνεται στο σχήμα 6. Αύξηση του μήκους της αλυσίδας αυξάνει τον αριθμό οκτανίου. Στις διολεφίνες φαίνεται ότι οι συζυγείς διπλοί δεσμοί προσδίδουν μεγαλύτερη αντικροτικότητα από τους διαδοχικούς ή τους μεμονωμένους.



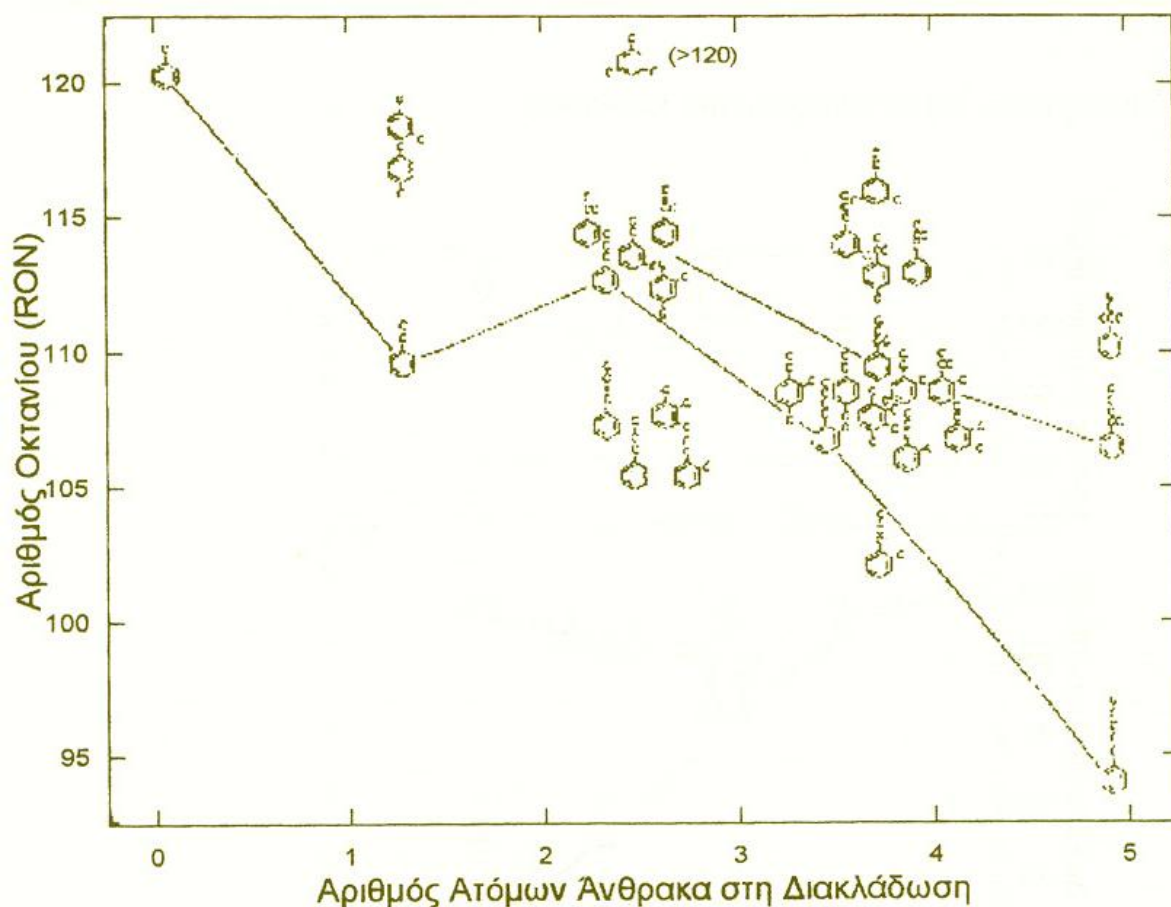
Σχήμα 6: Αντικροτικότητα ολεφινικών ενώσεων

Τα ναφθένια παρουσιάζουν αντίστοιχη συμπεριφορά με τις παραφίνες. Αύξηση του μεγέθους του δακτυλίου μειώνει την αντικροτικότητα (βλέπε σχήμα 7). Η προσθήκη πλευρικής αλυσίδας μειώνει την αντικροτικότητα και μάλιστα τόσο περισσότερο όσο μικρότερος είναι ο βαθμός της διακλάδωσης. Ναφθένια με δύο διακλαδώσεις στο ίδιο άτομο άνθρακα του δακτυλίου εμφανίζουν σχετικά υψηλή αντικροτικότητα.



Σχήμα 7: Αντικροτικότητα ναφθениκών ενώσεων

Οι αρωματικές ενώσεις εμφανίζουν μικρή τάση για κτύπημα, λόγω της σταθερότητας του αρωματικού δακτυλίου και της αντίστασης του στην αυτανάφλεξη λόγω συμπίεσης. Όπως φαίνεται στο σχήμα 8, η αύξηση του μήκους του υποκαταστάτη στον αρωματικό δακτύλιο μειώνει τον αριθμό οκτανίου. Αύξηση του βαθμού διακλάδωσης του υποκαταστάτη αυξάνει τον αριθμό οκτανίου. Στην περίπτωση αρωματικών με δύο υποκαταστάτες, ενώσεις με διάταξη μετα- παρουσιάζουν υψηλότερη αντικροτικότητα από τις ορθο- και παρα- ισομερείς τους.



Σχήμα 8: Αντικροτικότητα αρωματικών ενώσεων.

Ο σχεδιασμός της μηχανής και του οχήματος επηρεάζει τις απαιτήσεις τόσο σε RON, όσο και σε MON του καυσίμου, με τις περισσότερες μηχανές σήμερα να εμφανίζουν τον λεγόμενο περιορισμό του ενός βαθμού οκτανίων, που σημαίνει μία μεταβολή ενός βαθμού RON είναι ασφαλής αν συνοδεύεται από ίση και αντίθετη μεταβολή του MON.

Ο δείκτης αντικροτικής συμπεριφοράς (antiknock index) του καυσίμου $(RON+MON)/2$ δεν εντάσσεται σε αυστηρά καθορισμένα όρια αλλά εξαρτάται από τις απαιτήσεις των Μ.Ε.Κ., ενώ τυπικά θεωρούνται καύσιμα με δείκτη αντικροτικής συμπεριφοράς 87, 89, 91 (για αμόλυβδες βενζίνες), και 88 (για μολυβδωμένες βενζίνες). [1]

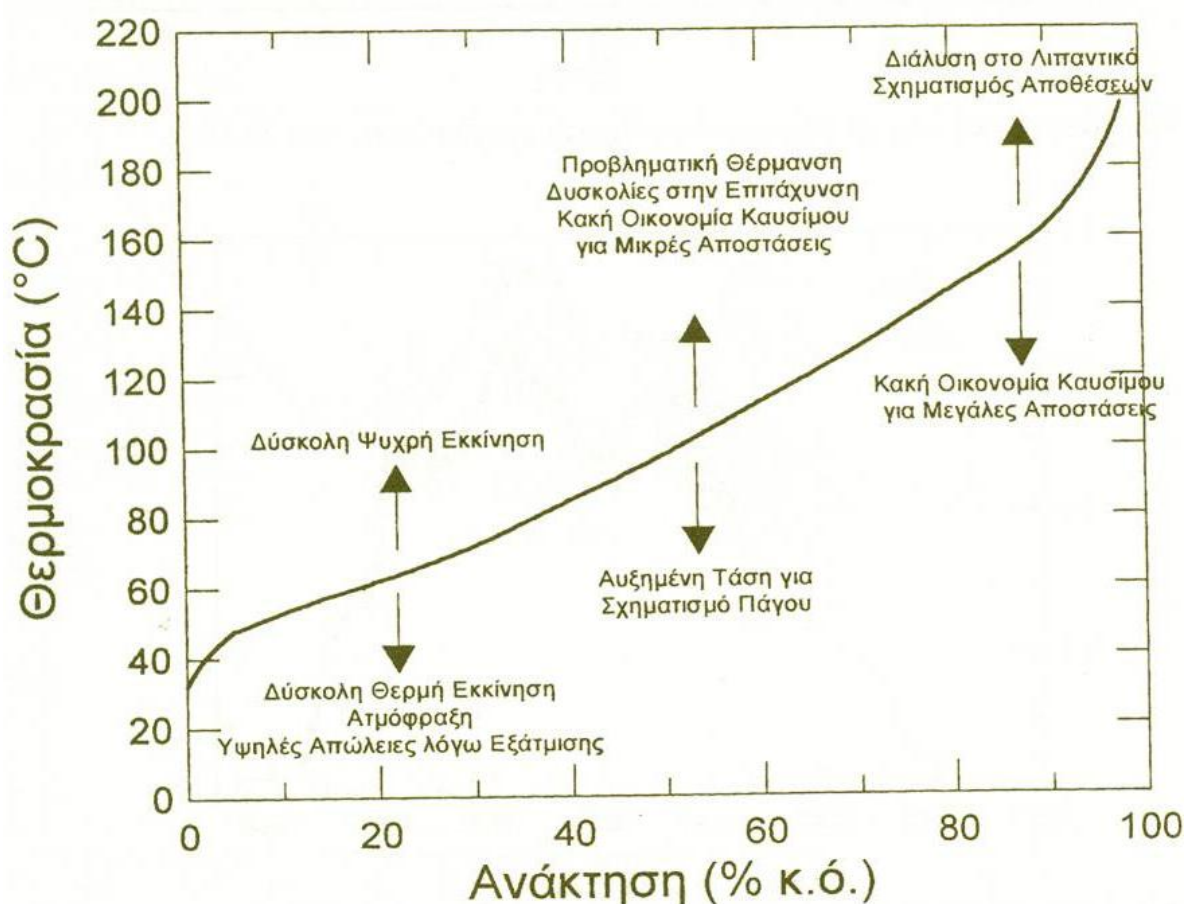
1.3.3.2 Πτητικότητα

Η πτητικότητα (ευκολία με την οποία εξατμίζεται η βενζίνη) αποτελεί μία σημαντική ιδιότητα των βενζινών. Λόγω του ότι μία βενζίνη περιέχει πολλές διαφορετικές ενώσεις, δεν έχει ένα συγκεκριμένο σημείο βρασμού, αλλά μία καμπύλη στην οποία το αρχικό από το τελικό σημείο διαφέρουν κατά 170 °C περίπου. Η περιοχή βρασμού της βενζίνης εξαρτάται από τη σύσταση της. Οι βενζίνες περιέχουν πάρα πολλά συστατικά (περίπου 400) κι έτσι εμφανίζουν ομαλές καμπύλες βρασμού, ακόμη και αν χρησιμοποιηθεί στήλη με υψηλό βαθμό διαχωρισμού.

Η πτητικότητα ενός καυσίμου προσδιορίζεται στο εργαστήριο από τα στοιχεία απόσταξης και από την τάση ατμών. Η πτητικότητα έχει μεγάλη σημασία για το κόστος παραγωγής του καυσίμου, για την ασφάλεια στους χειρισμούς του, για τις απώλειες λόγω εξάτμισης του και κυρίως για τη λειτουργία του κινητήρα. Όσο αυξάνεται η πτητικότητα της βενζίνης τόσο ευκολότερα ξεκινά ο κινητήρας και τόσο ευκολότερα θερμαίνεται. Για μια πτητική βενζίνη (μεγάλη αναλογία σε ελαφρά συστατικά) σε χαμηλή θερμοκρασία εξατμίζεται το 10% αυτής με αποτέλεσμα το γρήγορο ζέσταμα και ξεκίνημα της μηχανής. Μια τέτοια βενζίνη όμως παρουσιάζει μεγαλύτερες απώλειες από το ρεζερβουάρ και μερικές φορές δημιουργούνται θύλακες αερίων στις αντλίες και στις γραμμές του καυσίμου οπότε και προκύπτει μια μείωση της ροής του καυσίμου στους εξαερωτές με αποτέλεσμα την ανώμαλη λειτουργία της μηχανής. Δηλαδή οι πτητικές βενζίνες εμφανίζουν μεγάλες απώλειες και ανωμαλίες στην λειτουργία της μηχανής εξαιτίας της δημιουργίας φουσαλίδων αερίων στην γραμμή ροής του καυσίμου (φράγμα ατμών). Η παρουσία, εξάλλου, κλασμάτων με υψηλό σημείο βρασμού αυξάνει σημαντικά τα επίπεδα εκπομπής ανεπιθύμητων υδρογονανθράκων (βενζολίου, βουταδιενίου) και αλδευδών (φορμαλδεϋδης, ακεταλδεϋδης). Σε αντίθεση με τις πτητικές οι βενζίνες που εξατμίζονται δύσκολα δυσχεραίνουν την εκκίνηση της μηχανής και μπορεί να οδηγήσουν σε πάγωμα του εξαερωτήρα στις χαμηλές θερμοκρασίες, χαμηλή επιτάχυνση, κτύπο στον κινητήρα λόγω μη ομοιόμορφης κατανομής καυσίμου στους κυλίνδρους, διακοπή ροής του καυσίμου λόγω ύπαρξης ατμών σε περιόδους υψηλών θερμοκρασιών και

επιμόλυνση του λιπαντικού στον στροφαλοθάλαμο. Επομένως συμπεραίνεται ότι η πτητικότητα των βενζινών θα πρέπει να βρίσκεται εντός κάποιων συγκεκριμένων ορίων έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η ομαλή λειτουργία των κινητήρων. Ο προσδιορισμός αυτών των ορίων γίνεται βασιζόμενος στις εποχιακές μεταβολές της θερμοκρασίας καθώς και στις γεωγραφικές μεταβολές του υψομέτρου. Γι' αυτό και τα διυλιστήρια παράγουν βενζίνες διαφορετικής πτητικότητας τη χειμερινή περίοδο. Πρέπει να σημειωθεί ότι αύξηση της πτητικότητας των βενζινών οδηγεί σε σημαντική μείωση του μονοξειδίου του άνθρακα και των άκαυστων υδρογονανθράκων στα καυσαέρια.

Η πτητικότητα του καυσίμου καθορίζεται από τις συνθήκες απόσταξης και την τάση ατμών. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται για την απόσταξη των βενζινών είναι η ASTM D-86. Με τη μέθοδο αυτή, η κλασμάτωση που επιτυγχάνεται αντιστοιχεί σε μία θεωρητική βαθμίδα. 100 ml καυσίμου θερμαίνονται κάτω από τις συνθήκες που αναφέρει η μέθοδος και καταγράφονται οι θερμοκρασίες στις οποίες αποστάζουν συγκεκριμένα ποσοστά του καυσίμου.



Σχήμα 9: Τυπική καμπύλη απόσταξης βενζίνης.

Οι καμπύλες απόσταξης των βενζινών δεν είναι πάντα ίδιες, καθώς το σχήμα της καμπύλης εξαρτάται από τη σύσταση της βενζίνης. Υπάρχει περίπτωση η βενζίνη να περιέχει συστατικά που αποστάζουν σε μία στενή περιοχή, οπότε η καμπύλη απόσταξης θα έχει πεπλατυσμένη μορφή. Μπορεί όμως να περιέχει σε μεγάλο ποσοστό συστατικά με χαμηλή πτητικότητα και συστατικά με υψηλή πτητικότητα, οπότε η καμπύλη παρουσιάζει απότομη αύξηση στο μέσο περίπου. Η συμπεριφορά στην οδήγηση που εμφανίζουν τέτοιες «μη τυπικές» καμπύλες απόσταξης μπορεί να διαφέρουν σημαντικά από αυτή των τυπικών βενζινών. [1], [7]

1.3.3.3 Χαρακτηριστικά καύσης

Κατά τη διάρκεια της καύσης πρέπει να εξασφαλιστεί ότι το καύσιμο θα καεί ομαλά, χωρίς κτύπημα και χωρίς υψηλά επίπεδα εκπομπής τοξικών καυσαερίων. Η φάση διάδοσης της φλόγας ακολουθεί αμέσως μετά την ανάφλεξη του καυσίμου. Η φάση αυτή είναι ανώμαλη σε συνάρτηση με το χρόνο κι εξαρτάται μόνο από τη σύσταση του μίγματος. Ο χρόνος της καύσης εξαρτάται από την ταχύτητα διάδοσης της φλόγας. Η ταχύτητα της φλόγας εξαρτάται από τη διάχυση στο μέτωπό της φλόγας, την ένταση της τύρβης και το μέτωπο της θερμοκρασίας στο μέρος του μίγματος που δεν έχει καεί ακόμα. Η ένταση της τύρβης και το μέτωπο της φλόγας εξαρτώνται από το σχήμα του θαλάμου καύσης, το σχεδιασμό του συστήματος εισαγωγής του μίγματος και τη μετακίνηση του εμβόλου. Τέλος, η αύξηση της πίεσης επηρεάζει θετικά τη θερμοκρασία του μίγματος που δεν έχει καεί.

Η ποσότητα του αέρα που απαιτείται για την πλήρη καύση ενός καυσίμου μπορεί να υπολογιστεί αν είναι γνωστή η σύσταση του (αναλογία ατόμων άνθρακα – υδρογόνου). Στην περίπτωση των βενζινών, αν η σχέση αέρα καυσίμου είναι χαμηλότερη από 7:1, τότε το μίγμα είναι πολύ πλούσιο για να αναφλεγεί, ενώ αν είναι υψηλότερη από 20:1 τότε το μίγμα είναι πολύ φτωχό για να αναφλεγεί σε συμβατικούς βενζινοκινητήρες.

Η ομαλή καύση πραγματοποιείται όταν το μέτωπο της φλόγας μετακινείται ομαλά, αλλά σε ακανόνιστο σχήμα μέσα στο θάλαμο καύσης και μέχρι να καταναλωθεί όλο το καύσιμο. Η πίεση αυξάνει καθώς το μίγμα συμπιέζεται ενώ αυξάνει απότομα αμέσως μετά την ανάφλεξη λόγω της αύξησης της θερμοκρασίας και της δημιουργίας των καυσαερίων.

Ακόμη και σε συνθήκες ομαλής καύσης, η τιμή της μέγιστης πίεσης διαφέρει από κινητήρα σε κινητήρα λόγω διαφορετικών συνθηκών λειτουργίας και στροβιλισμού. [1]

1.3.3.4 Περιεχόμενο σε υδρογονάνθρακες

Η σύσταση των βενζινών αναφέρεται κυρίως σε συστατικά η περιεκτικότητα των οποίων πρέπει να βρίσκεται κάτω από συγκεκριμένα όρια είτε για περιβαλλοντικούς είτε για άλλους λόγους, π.χ. κλιματολογικές συνθήκες. Όσον αφορά τους υδρογονάνθρακες που περιέχονται στις βενζίνες το μεγαλύτερο ποσοστό τους είναι παραφίνες, ολεφίνες και αρωματικές ενώσεις. Η περιεκτικότητα στις κατηγορίες υδρογονανθράκων είναι σημαντική γιατί μέσω αυτής μπορεί να γίνει η εκτίμηση της τάσης της βενζίνης για σχηματισμό κομμωδών ουσιών και αποθέσεων. Ο προσδιορισμός των ενώσεων αυτών που περιέχονται σε μία βενζίνη γίνεται με διάφορες χημικές μεθόδους όπως η αέρια χρωματογραφία (GC η οποία και εφαρμόστηκε για τον προσδιορισμό των εν λόγω ενώσεων στα δείγματα των βενζινών που αναλύθηκαν κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας) καθώς και η φασματογραφία υπέρυθρου. [1]

1.3.3.5 Περιεχόμενο σε θείο και διάβρωση

Το αργό πετρέλαιο, από το οποίο όπως έχει ήδη αναφερθεί παράγεται και η βενζίνη, περιέχει θειούχα συστατικά όπου τα περισσότερα από αυτά απομακρύνονται κατά τη διάρκεια της διύλισης. Η περιεκτικότητα των βενζινών σε θείο είναι συνήθως κάτω από 0.1% κ.β.. Η παρουσία του θείου είναι ανεπιθύμητη για περιβαλλοντικούς λόγους κι επειδή συμβάλει στο σχηματισμό αποθέσεων στο θάλαμο καύσης. Στη βενζίνη το θείο εμφανίζεται με τη μορφή μερκαπτανών, σουλφιδίων, δισουλφιδίων και θειοφαινίων. Οι μερκαπτάνες είναι ανεπιθύμητες επειδή είναι δύσσομες και διαβρωτικές. Απομακρύνονται συνήθως με διεργασίες γλύκανσης. Ο προσδιορισμός τους γίνεται με ποτενσιομετρική τιτλοδότηση με νιτρικό άργυρο (ASTM D-2337).

Το θείο αποτελεί πρόσμιξη σημαντικής σημασίας για όλα σχεδόν τα προϊόντα πετρελαίου. Με την αποθείωση της βενζίνης έχουμε πολλαπλά οφέλη όπως :

- 1) μείωση της διαβρωτικής δράσης των βενζινών,
- 2) αύξηση αριθμού οκτανίου με μικρότερες ποσότητες οξυγονούχων ενώσεων στη βενζίνη,

3) μείωση της ρύπανσης του περιβάλλοντος από SO₂.

Η συνολική περιεκτικότητα της βενζίνης σε θείο, μπορεί να προσδιοριστεί με καύση και δίοδο των καυσαερίων από υπεροξείδιο του υδρογόνου που μετατρέπει το διοξείδιο του θείου σε θειικό οξύ. Το θειικό οξύ προσδιορίζεται με τιτλοδότηση με καυστικό νάτριο. Εναλλακτική και περισσότερο χρησιμοποιούμενη μέθοδος είναι με φθορισμό ακτινών X (ASTM D-4294).

Έχει ήδη αναφερθεί ότι η βενζίνη δεν πρέπει να περιέχει διαβρωτικές ουσίες (ελεύθερο θείο και θειούχες ενώσεις, οξυγονούχα συστατικά κ.α) όχι μόνο λόγω της φθοράς του εξοπλισμού, αλλά και επειδή τα μέταλλα που αποσπώνται μπορεί να δράσουν ως καταλύτες αντιδράσεων οξειδωσης συστατικών του καυσίμου και σχηματισμού αποθέσεων. Επιπρόσθετα τα προϊόντα της διάβρωσης προκαλούν φραγή σε φίλτρα και διαφράγματα και αυξάνουν τη φθορά των εξαρτημάτων.

Η μέθοδος μέτρησης της ανθεκτικότητας σε διάβρωση των βενζινών είναι η ASTM D-130 και η ανθεκτικότητα καθορίζεται με την δοκιμή διάβρωσης ελάσματος χαλκού (copper strip corrosion) που μετρά το ενεργό θείο και τον προσδιορισμό περιεκτικότητας σε θείο (maximum sulfur content), το όριο του οποίου είναι 0.15% κ.β. για μη αμόλυβδες βενζίνες και 0.10% κ.β. για αμόλυβδες με τυπικές τιμές μεταξύ 0.03% κ.β -0.04% κ.β.. [1,] [7]

1.3.3.6 Περιεχόμενο σε μόλυβδο, φώσφορο και μαγγάνιο

Τα αλκύλια του μολύβδου αποτελούσαν τα σημαντικότερα αντικροτικά πρόσθετα, αλλά η χρήση τους περιορίζεται συνεχώς για περιβαλλοντικούς λόγους. Αποτελούσαν τον οικονομικότερο τρόπο για την επίτευξη του επιθυμητού αριθμού οκτανίου. Η διεθνής όμως απαίτηση για περιορισμό των οξειδίων του αζώτου, έκανε επιτακτική την χρήση καταλυτικών μετατροπένων, οι οποίοι δηλητηριάζονται από βαριά μέταλλα, όπως ο μόλυβδος.

Ο τρόπος δράσης τους, όπως και όλων των οργανομεταλλικών προσθέτων είναι η διάσπαση τους στην κατάλληλη θερμοκρασία στον κύκλο της καύσης μέσα στον κινητήρα, και ο σχηματισμός σωματιδίων καταλυτικά ενεργών οξειδίων του μετάλλου. Τα σωματίδια αυτά εμποδίζουν τις παράπλευρες αντιδράσεις που οδηγούν στο κτύπημα.

Δηλαδή πριν χρόνια όλες οι βενζίνες παραγωγής περιείχαν πρόσθετα μολύβδου τα οποία όπως έχει ήδη σημειωθεί, συμβάλουν θετικά σε κάποια χαρακτηριστικά των βενζινών όμως, για την προστασία του περιβάλλοντος θεσπίστηκαν κάποιοι περιορισμοί οι οποίοι έχουν να κάνουν με την παραγωγή των καυσαερίων, οπότε και προέκυψε η παραγωγή των αμόλυβδων βενζινών.

Συχνά στις βενζίνες προστίθενται κάποια οργανομεταλλικά συστατικά φωσφόρου τα οποία και περιέχουν ως τροποποιητές μόλυβδο. Τέλος, στις βενζίνες χρησιμοποιούνται κάποια οργανομαγγανιούχα συστατικά τα οποία και συμβάλλουν στην βελτίωση του αριθμού οκτανίου. Τα συστατικά αυτά έχουν πολύ καλή αντικροτική συμπεριφορά, αλλά χρησιμοποιούνται σε χαμηλές συγκεντρώσεις λόγω προβλημάτων αστάθειας με το καύσιμο, σχηματισμού αποθέσεων στον κινητήρα και αύξησης των εκπομπών υδρογονανθράκων.

1.3.3.7 Οξειδωτική Σταθερότητα

Η σταθερότητα στην οξείδωση μιας βενζίνης εξαρτάται άμεσα από τη σύσταση της. Οι ολεφινικές ενώσεις παρουσιάζουν πολύ μικρότερη σταθερότητα σε σύγκριση με τις παραφινικές και τις αρωματικές ενώσεις. Οι ολεφινικές ενώσεις προέρχονται από τις διεργασίες πυρόλυσης. Ειδικά οι διεργασίες θερμικής πυρόλυσης παράγουν ακόμη και διολεφίνες, οι οποίες οξειδώνονται γρήγορα και δίνουν αδιάλυτες κομμωδεις ουσίες. Η οξείδωση διευκολύνεται από την παρουσία θειούχων και αζωτούχων ενώσεων. Τέλος, η οξείδωση καταλύεται από ορισμένα μέταλλα, όπως ο χαλκός, οπότε πρέπει να αποφεύγεται η χρήση τους στα συστήματα καυσίμου, ή να χρησιμοποιηθούν κατάλληλα πρόσθετα που θα απενεργοποιήσουν την καταλυτική δράση αυτών των μετάλλων. Η μέθοδος προσδιορισμού της οξειδωτικής σταθερότητας των βενζινών είναι η ASTM D-525. [1], [7]

1.3.3.8 Μόλυνση της βενζίνης

Μια βενζίνη παραγωγής δεν θα πρέπει να περιέχει νερό ή ίζημα διότι τα στερεά αλλά και τα υγρά υπολείμματα μπορεί να οδηγήσουν σε διάβρωση, σε πάγωμα της γραμμής του καυσίμου, σε σχηματισμό ζελατίνας (gel) και στο βούλωμα των φίλτρων. Όσον αφορά το νερό, η παρουσία ελεύθερου νερού στην βενζίνη είναι ανεπιθύμητη επειδή μπορεί να δημιουργήσει διαβρώσεις και φθορές στο σύστημα τροφοδοσίας καθώς και προβλήματα σχηματισμού πάγου στη δικλείδα του εξαερωτή σε χαμηλές θερμοκρασίες. Επομένως μία

βενζίνη παραγωγής πρέπει να είναι καθαρή και λαμπερή όταν παρατηρείται σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Όμως ενώ μια βενζίνη μπορεί να είναι καθαρή κατά την παραγωγή της μπορεί να επέλθει φυσική μόλυνση κατά τη διάρκεια διανομής της. Γι' αυτό το λόγο και απαιτείται συνεχής έλεγχος για τυχόν μολύνσεις τόσο από τα διυλιστήρια όσο και από τους διανομείς αλλά και από τους βενζινοπώλες. [1]

1.4 Παραγωγή βενζίνης

Τα διυλιστήρια σήμερα για να καλύψουν τις αυξημένες απαιτήσεις για βενζίνες υψηλού αριθμού οκτανίου, χρησιμοποιούν, εκτός της αρχικής ατμοσφαιρικής απόσταξης του αργού πετρελαίου, και τις κατεργασίες αναμόρφωσης και πυρόλυσης (refining processes) των κλασμάτων απόσταξης του αργού πετρελαίου, καθώς και άλλες μεθόδους παραγωγής βενζινών με καθαρά συνθετική πορεία. Η ανάπτυξη τέτοιων μεθόδων επεξεργασίας στοχεύει στην βελτίωση των ιδιοτήτων και την αύξηση της παραγωγής των κλασμάτων που θα αποτελέσουν την πρώτη ύλη για την σύνθεση του καυσίμου, καθώς και την οικονομική διαχείριση της συνολικής παραγωγής του διυλιστηρίου που περιλαμβάνει, εκτός της βενζίνης, αέρια καύσιμα, πετρέλαιο κίνησης και θέρμανσης, λιπαντικά και άλλα υποπροϊόντα. Εφόσον αυτές οι μέθοδοι χρησιμοποιούν σαν πρώτες ύλες τα αέρια προϊόντα που παράγονται κατά τις διαδικασίες απόσταξης και πυρόλυσης. Οι μέθοδοι αυτές είναι ο πολυμερισμός (polymerization), η αλκυλίωση (alkylation) και η ισομερίωση (isomerization). Οι διεργασίες που πραγματοποιούνται στις συνήθεις διυλιστηριακές εγκαταστάσεις κατατάσσονται σε τρεις κατηγορίες: πρωτογενείς, δευτερογενείς και δευτερεύουσες.

Ο όρος πρωτογενείς περιλαμβάνει όλες τις βασικές διεργασίες (Πίνακας 10), τόσο τις φυσικές, όπως ο διαχωρισμός του αργού πετρελαίου σε κλάσματα (απόσταξη), όσο και τις χημικές κατά τις οποίες παράγονται διάφορα συστατικά από τα κλάσματα του πετρελαίου με αλλαγή της μοριακής δομής των υδρογονανθράκων τους. Στο στάδιο των δευτερογενών διεργασιών πραγματοποιείται εξευγενισμός των προϊόντων των πρωτογενών, με τις ίδιες ουσιαστικά μεθόδους, προσαρμοσμένες έτσι ώστε, το τελικό προϊόν να πληροί τις απαιτούμενες προδιαγραφές. Χαρακτηριστικά αναφέρονται η αποπαραφίνωση των λιπαντικών και η γλύκανση των ελαφρών προϊόντων για απομάκρυνση των μερκαπτανών. Ενώ οι δευτερεύουσες αναφέρονται σε διεργασίες παρασκευής του έτοιμου τελικού προϊόντος, όπως η μίξη κλασμάτων βενζινών και η προσθήκη των απαραίτητων προσθέτων.

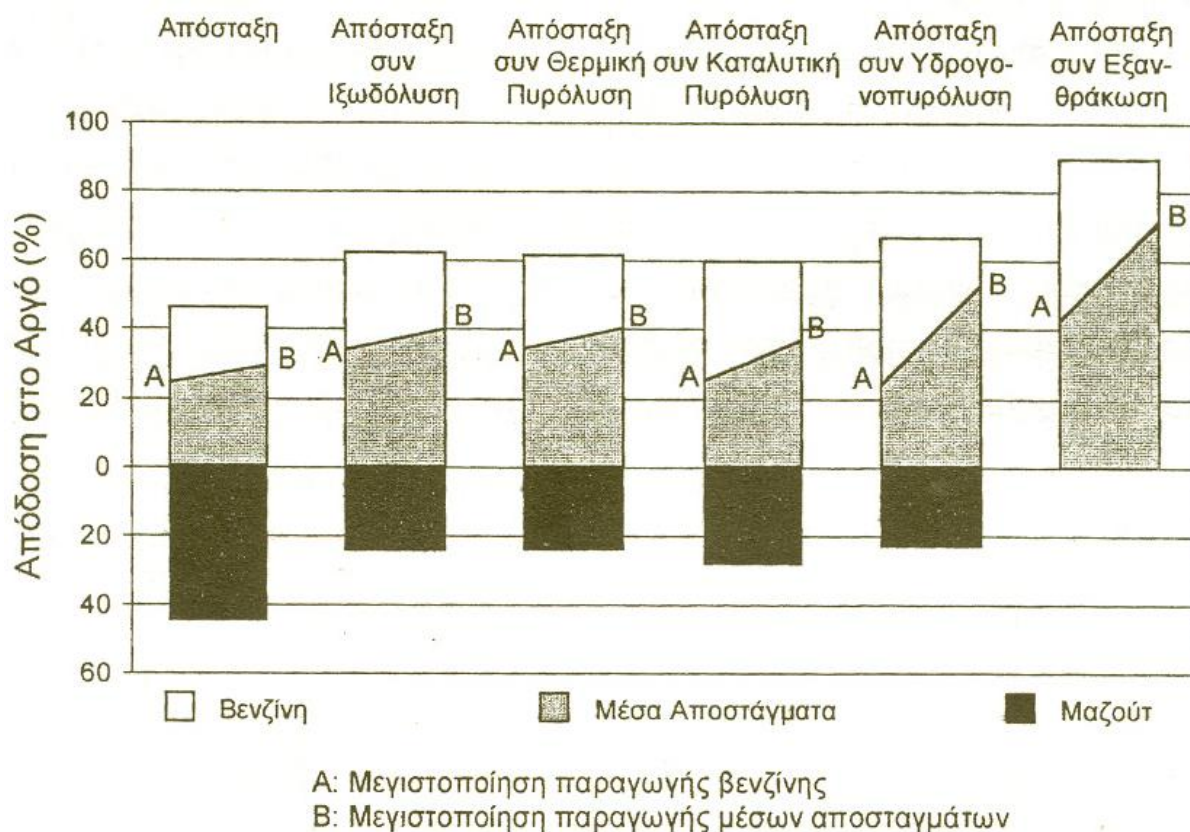
Έχει ήδη αναφερθεί ότι η παραγωγή υγρών καυσίμων από το αργό πετρέλαιο σε ένα διυλιστήριο γίνεται με φυσικές διεργασίες και με διεργασίες χημικής μετατροπής. Φυσικές διεργασίες είναι η ατμοσφαιρική απόσταξη και η απόσταξη υπό κενό. Οι διεργασίες αυτές είναι απαραίτητες για το διαχωρισμό του αργού πετρελαίου σε καύσιμα που θα έχουν σχετικά σταθερές ιδιότητες (καμπύλη απόσταξης, πυκνότητα) ανεξάρτητα από τον τύπο του αργού πετρελαίου που χρησιμοποιείται. Οι διεργασίες χημικής μετατροπής περιλαμβάνουν τις

διεργασίες πυρόλυσης και ανασχηματισμού των μορίων του καυσίμου μέσω χημικών αντιδράσεων. Στη μονάδα ατμοσφαιρικής απόσταξης, η απόσταξη γίνεται σε ατμοσφαιρική πίεση, με τη θερμοκρασία του φούρνου ρυθμισμένη στο να δώσει μέγιστο απόσταγμα χωρίς πυρόλυση. Η ποσότητα και η ποιότητα των εξαγομένων προϊόντων εξαρτάται από την περιοχή βρασμού τους και το αργό πετρέλαιο που χρησιμοποιείται.

Πίνακας 10: Κατάταξη διυλιστηριακών διεργασιών

Φυσικές διεργασίες διαχωρισμού	Πρωτογενείς	Δευτερογενείς	Δευτερεύουσες
	<u>Διεργασίες Χημικής μετατροπής</u>		
1. Απόσταξη	1. Πυρολυτικές		1. Ανάμιξη βενζινών
α. Ατμοσφαιρική	α. Θερμική πυρόλυση		2. Ανάμιξη λιπαντικών
β. Υπό κενό	β. Ιξωδόλυση		3. Διάλυση ασφάλτου
γ. Σταθεροποιητική	γ. Εξανθράκωση		4. Γαλακτωματοποίηση ασφάλτου
δ. Αζεοτροπική	δ. Καταλυτική πυρόλυση	Οι διεργασίες αυτές δεν αποτελούν νέες διεργασίες.	5. Γαλακτωματοποίηση λιπαντικών
ε. Εκχυλιστική	ε. Υδρογονοπυρόλυση	Αφορούν φυσικές διεργασίες ή χημικής μετατροπής, ειδικά προσαρμοσμένες για τον εξευγενισμό των προϊόντων που λαμβάνονται από τις πρωτογενείς διεργασίες	6. Γαλακτωματοποίηση παραφίνης
στ. Μοριακή	στ. Μερική θερμική οξειδωση		7. Παρασκευή λιπαντικών λιπών (γράσων)
2. Κρυστάλλωση	ζ. Μερική καταλυτική οξειδωση		
α. Αποπαραφίνωση	2. Εποικοδομητικές		
β. Απελαίωση παραφίνης	α. Πολυμερισμός		
3. Εκχύλιση	β. Αλκυλίωση		
4. Απορρόφηση	3. Μετατρεπτικές		
5. Απογύμνωση	α. Αφυδρογόνωση		
6. Προσρόφηση	β. Ισομερίωση		
7. Θερμική διάχυση	γ. Κυκλίωση		
	δ. Θερμική αναμόρφωση		
	ε. Καταλυτική αναμόρφωση		
	στ. Αποθείωση		
	ζ. Παραγωγή θείου		
	4. Χημικής αντίδρασης		
	α. Κατεργασία με οξύ		
	β. Κατεργασία με βάση		
	γ. Εμφύσηση με αέρα		

Στο σχήμα 10 δίνονται οι δυνατότητες που μπορούν να επιτευχθούν χρησιμοποιώντας διάφορες διεργασίες μετατροπής. [1]



Σχήμα 10: Επίδραση των διεργασιών στην απόδοση του αργού πετρελαίου σε προϊόντα.

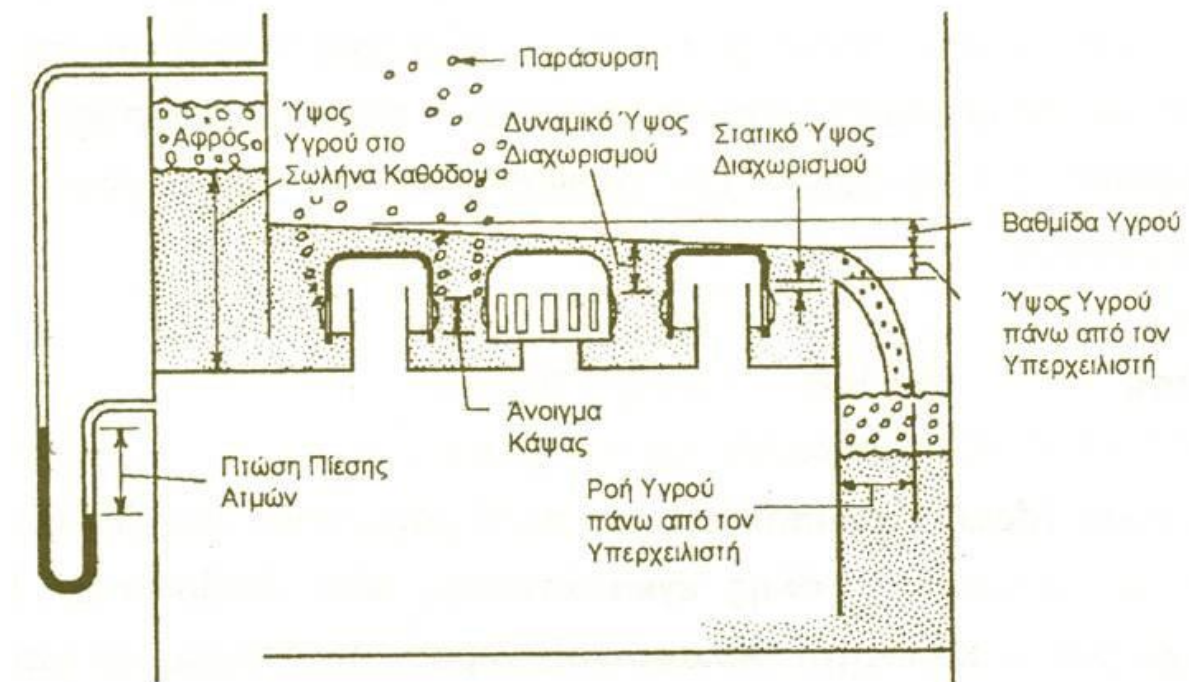
1.4.1 Φυσικές διεργασίες

Οι φυσικές διεργασίες αποτελούν τις απλούστερες διεργασίες που χρησιμοποιούνται για το διαχωρισμό του αργού πετρελαίου σε προϊόντα. Με τις φυσικές διεργασίες δε μεταβάλλεται το είδος των υδρογονανθράκων που περιέχονται στο πετρέλαιο, αλλά απλά κλασματώνονται σε ομάδες με παραπλήσια σημεία ζέσης.

Έχει ήδη αναφερθεί ότι οι φυσικές διεργασίες είναι κυρίως η απόσταξη. Η αποστακτική στήλη είναι ένας κατακόρυφος χαλύβδινος κύλινδρος ύψους 30m περίπου και διαμέτρου 3.5-4 m. Η αποστακτική στήλη περιέχει 30-35 δίσκους πάνω στους οποίους γίνεται η κλασμάτωση του πετρελαίου, δηλαδή ο διαχωρισμός των ελαφρύτερων από τα βαρύτερα συστατικά.

Το συμπυκνούμενο υγρό συγκεντρώνεται πάνω στο δίσκο μέχρι ύψους που καθορίζεται από το σωλήνα υπερχείλισης, μέσω του οποίου το υγρό κατεβαίνει στον κατώτερο δίσκο. Οι δίσκοι έχουν μεγάλο αριθμό οπών μέσω των οποίων διέρχονται οι ατμοί που έρχονται από το κάτω μέρος του δίσκου. Κάθε οπή περιβάλλεται από κοντό σωλήνα, πάνω απ' τον οποίο

βρίσκεται αντεστραμμένη κάψα διαμέτρου 10-15 cm, διάτρητη στην επιφάνεια. Έτσι, οι ατμοί εξαναγκάζονται να διέλθουν μέσα από το υγρό κατά την περιφέρεια της κάψας. Με αυτόν τον τρόπο αυξάνεται η επαφή μεταξύ ατμών και υγρού, η οποία προκαλεί εξάτμιση των πτητικών συστατικών του υγρού και τη συμπύκνωση των βαρύτερων συστατικών των ατμών. Έτσι σε κάθε δίσκο πραγματοποιείται συνεχής συμπύκνωση κι επαναπόσταξη. Κάθε δίσκος περιέχει κλάσμα πτητικότερο του αμέσως κατωτέρου του. Ένας τυπικός δίσκος φαίνεται στο σχήμα 11.



Σχήμα 11: Τομή τυπικού δίσκου απόσταξης πετρελαίου με κάψες.

1.4.1.1 Ατμοσφαιρική απόσταξη

Η ατμοσφαιρική απόσταξη (atmospheric distillation) είναι η πιο παλιά διεργασία διαχωρισμού του αργού πετρελαίου σε προϊόντα που μπορούν να βρουν πρακτική εφαρμογή. Η απόσταξη είναι μια φυσική διεργασία που απλά διαχωρίζει το μίγμα των υδρογονανθράκων σε κλάσματα με συγκεκριμένη περιοχή σημείων ζέσης. Συνήθως η ατμοσφαιρική απόσταξη δίνει ένα προϊόν κορυφής, που στη συνέχεια διαχωρίζεται σε αέρια και νάφθα, που με αναμόρφωση θα δώσει βενζίνη. Τα πλευρικά προϊόντα είναι συνήθως τρία. Το ελαφρύτερο είναι η κηροζίνη που χρησιμοποιείται για την παρασκευή καυσίμου αεριωθούμενων (jet fuel). Τα άλλα δύο πλευρικά προϊόντα, το ελαφρύ και το βαρύ gasoil χρησιμοποιούνται είτε αυτούσια είτε κατόπιν περαιτέρω επεξεργασίας για την παραγωγή ντίζελ κίνησης και

πετρελαίου θέρμανσης. Το υπόλειμμα της ατμοσφαιρικής απόσταξης χρησιμοποιείται είτε σαν πετρέλαιο εξωτερικής καύσης (μαζούτ), είτε σαν πρώτη ύλη για διεργασίες μετατροπής για παραγωγή λευκών προϊόντων.

Το αφαλατωμένο αργό πετρέλαιο προθερμαίνεται σε εναλλάκτες αντιρροής από τα θερμά προϊόντα της απόσταξης, ψύχοντας τα ταυτόχρονα. Στη συνέχεια εισέρχεται στην κάμινο θέρμανσης, διερχόμενο μέσα από σωλήνες οι οποίοι θερμαίνονται καταρχήν από τα καυσαέρια με αγωγή και στη συνέχεια με ακτινοβολία από τη φλόγα. Η θερμοκρασία του πετρελαίου ανεβαίνει μέχρι το επιθυμητό σημείο (συνήθως λίγο πάνω από τους 350 °C), οπότε σχηματίζεται και το νέφος ατμών και σταγονιδίων που εισέρχεται στην ατμοσφαιρική στήλη, λίγο κάτω από το μέσο της. Το σημείο αυτό διαχωρίζει νοητά την αποστακτική στήλη σε δύο τμήματα. Το πάνω τμήμα αποτελεί το τμήμα διύλισης (rectification section) όπου αυξάνει η καθαρότητα του προϊόντος λόγω των διαδοχικών επαναποστάξεων και συμπυκνώσεων που πραγματοποιούνται εκεί. Το κάτω μέρος ονομάζεται τμήμα απογύμνωσης (stripping section), όπου τα πτητικά συστατικά απομακρύνονται από τα βαρύτερα με τη βοήθεια ατμού που εισάγεται στο κάτω μέρος της αποστακτικής στήλης.

Τα πτητικότερα συστατικά, δηλαδή τα αέρια και η νάφθα εξέρχονται από την κορυφή της αποστακτικής στήλης. Το προϊόν κορυφής ψύχεται σε αερόψυκτους και υδρόψυκτους συμπυκνωτές. Μαζί με τους βαρύτερους υδρογονάνθρακες του προϊόντος κορυφής συμπυκνώνεται και ο υδρατμός που χρησιμοποιείται για την απογύμνωση του υπολείμματος και των πλευρικών κλασμάτων. Το νερό αυτό απομακρύνεται από το δοχείο συλλογής του προϊόντος κορυφής. Μέρος του συμπυκνώματος (νάφθα) επανεισάγεται στην κορυφή της αποστακτικής στήλης σαν αναρροή. Η αναρροή εξασφαλίζει τη συνεχή ροή υγρού από την κορυφή προς τον πυθμένα της αποστακτικής στήλης. [1]

Τα υπόλοιπα αποστάγματα παίρνονται σαν πλευρικά κλάσματα από την αποστακτική στήλη. Τα σημεία απόληψης γίνονται από τα σημεία τέτοια ώστε τα προϊόντα να έχουν την επιθυμητή περιοχή ζέσης. Για να βελτιωθεί η κλασμάτωση του αργού πετρελαίου σε προϊόντα, κάθε πλευρικό κλάσμα υφίσταται περαιτέρω κλασμάτωση σε μικρότερη αποστακτική στήλη που ονομάζεται απογυμνωτής (stripper). Υπάρχει ένας απογυμνωτής για κάθε πλευρικό κλάσμα. Το κλάσμα εισάγεται στην κορυφή του απογυμνωτή και απογυμνώνεται ερχόμενο σε επαφή με ανοδικό ρεύμα ατμού που εισέρχεται στον πυθμένα

του απογυμνωτή. Το ρεύμα ατμού – ελαφρών συστατικών επανεισάγεται στην αποστακτική στήλη.

Η βάση της αποστακτικής στήλης διατηρείται στην επιθυμητή θερμοκρασία με αναθέρμανση (reboiling) μέρους του υπολείμματος το οποίο επανεισάγεται στην αποστακτική στήλη. Η υπερβολική θέρμανση αποφεύγεται για να μην επέλθει πυρόλυση του υπολείμματος, η οποία θα του υποβάθμιζε την ποιότητα. Η απαραίτητη ροή ατμών από τον πυθμένα προς την κορυφή της αποστακτικής στήλης εξασφαλίζεται με την εισαγωγή ατμού στον πυθμένα της στήλης.

Επειδή η αφαλάτωση του αργού πετρελαίου δεν είναι ποτέ τέλεια, στην κορυφή της αποστακτικής στήλης προστίθεται συγκεκριμένη ποσότητα αμμωνίας (NH_3), η οποία εξουδετερώνει τυχόν σχηματισθέν υδροχλωρικό οξύ, καθώς και υδρόθειο (H_2S) που βρίσκεται διαλυμένο στο πετρέλαιο.

Ο έλεγχος της θερμοκρασίας της αποστακτικής στήλης γίνεται μέσω της αναρροής από την κορυφή και της αναθέρμανσης από τον πυθμένα. Για καλύτερο έλεγχο της θερμοκρασίας και για τη βελτίωση της κλασμάτωσης γίνεται ανακυκλοφορία (rump around) ποσοτήτων από τα πλευρικά κλάσματα της στήλης. Γίνεται δηλαδή απόληψη κλασμάτων από συγκεκριμένα σημεία της στήλης, τα οποία ψύχονται (θερμαίνοντας ταυτόχρονα την τροφοδοσία) και επανατροφοδοτούνται στην αποστακτική στήλη.

1.4.1.2 Απόσταξη υπό κενό

Στους περισσότερους τύπους αργού πετρελαίου, ένα ποσοστό γύρω στο 45 με 50% εγκαταλείπει την ατμοσφαιρική απόσταξη ως υπόλειμμα. Ο λόγος που δεν συνεχίζεται η ατμοσφαιρική απόσταξη σε υψηλότερες θερμοκρασίες είναι η διάσπαση των βαρύτερων υδρογονανθράκων λόγω πυρόλυσης, που δίνει ανεπιθύμητα προϊόντα. Για να αποφευχθεί αυτό το πρόβλημα, η απόσταξη συνεχίζεται με ελαττωμένη πίεση (vacuum distillation), όπου γίνεται περαιτέρω διαχωρισμός χωρίς το πρόβλημα των πυρολύσεων. Τα προϊόντα αυτής της διεργασίας είναι τα λεγόμενα gasoil κενού (vacuum gasoil) και ένα πολύ βαρύ υπόλειμμα. Τα vacuum gasoil χρησιμοποιούνται είτε για παραγωγή λιπαντικών είτε σαν τροφοδοτική ύλη μονάδων καταλυτικής μετατροπής. Το υπόλειμμα επειδή είναι πολύ βαρύ, οδηγείται συνήθως

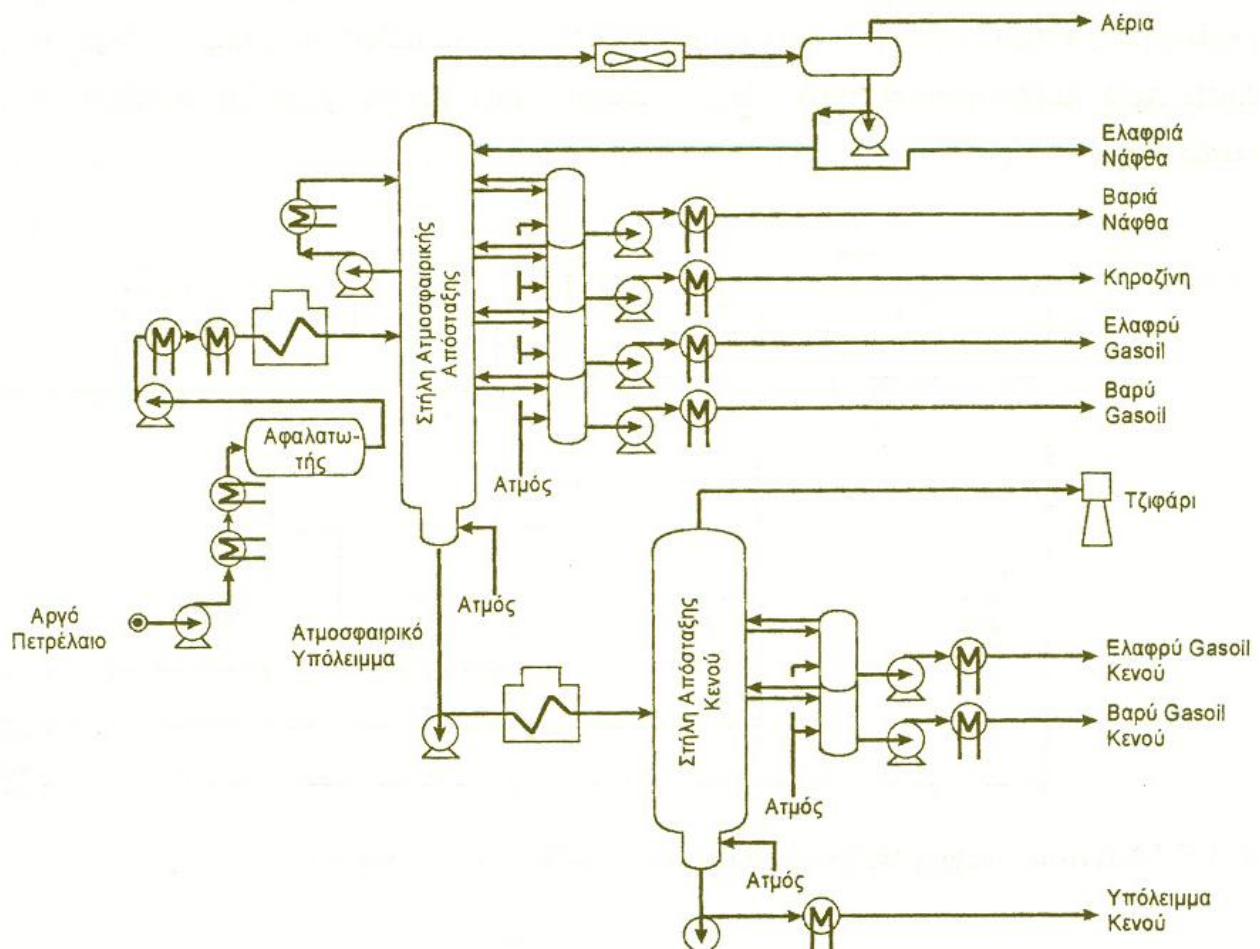
σε μονάδες ιξωδόλυσης, ή αναμιγνύεται με ελαφρύτερα συστατικά για να πωληθεί σαν μαζούτ.

Η πίεση στην απόσταση υπό κενό, κυμαίνεται από τα 40 mmHg όταν ενδιαφέρει η παραγωγή προϊόντων για τροφοδοσία μονάδων πυρόλυσης, μέχρι τα 120 mmHg, όταν ενδιαφέρει η παρασκευή λιπαντικών. Οι αντίστοιχες θερμοκρασίες είναι 450 και 400 °C. Και σε αυτήν την περίπτωση, η απογύμνωση υποβοηθάται από την εισαγωγή ατμού στον πυθμένα της αποστακτικής στήλης.

Το απαιτούμενο κενό δημιουργείται στη στήλη με απομάκρυνση των μη συμπυκνωμένων ατμών. Η απομάκρυνση γίνεται με τη χρησιμοποίηση ακροφυσίων ατμού (τζιφάρια) που συμπαρασύρουν τα μη συμπυκνωμένα αέρια δημιουργώντας έτσι το απαραίτητο κενό.

Η αποστακτική στήλη μπορεί να έχει από 20 δίσκους (παραγωγή προϊόντων τροφοδοσίας πυρολυτικών διεργασιών) έως 40 δίσκους (παραγωγή λιπαντικών). Ανάλογα κυμαίνεται και το ύψος τους από 20 έως 30m. Η διάμετρος τους φτάνει τα 6 m. Στην απόσταση υπό κενό χρησιμοποιούνται δίσκοι που αντί για κάψες έχουν καπάκια τα οποία ανασηκώνονται από την πίεση των ατμών. Αυτό συμβαίνει για να αποφευχθεί η μεγάλη πτώση πίεσης σε κάθε δίσκο. Λόγω του υψηλού ιξώδους του υγρού και του μικρού ύψους του υγρού πάνω από το δίσκο, ο βαθμός απόδοσης των δίσκων της απόσταξης υπό κενό, είναι σημαντικά μικρότερος από τον αντίστοιχο των δίσκων της ατμοσφαιρικής απόσταξης.

Στο σχήμα 12 δίνεται ένα τυπικό διάγραμμα μιας μονάδας ατμοσφαιρικής απόσταξης σε συνδυασμό με μονάδα απόσταξης υπό κενό.



Σχήμα 12: Διάγραμμα μονάδας ατμοσφαιρικής απόσταξης και απόσταξης υπό κενό.

1.4.1.3 Αφαλάτωση

Η αφαλάτωση (desalting) αποτελεί μία πολύ σημαντική διεργασία που έχει σαν στόχο την προστασία της όλης εγκατάστασης από διάβρωση. Το αργό πετρέλαιο περιέχει μικρή ποσότητα θαλασσινού νερού, διασπαρμένου υπό μορφή γαλακτώματος. Το νερό αυτό περιέχει διαλυμένο αλάτι (NaCl). Το αλάτι αυτό, μπορεί να μετατραπεί σε αραιό υδροχλωρικό οξύ υπό την επίδραση του υδρατμού που συγκεντρώνεται στην κορυφή της αποστακτικής στήλης.

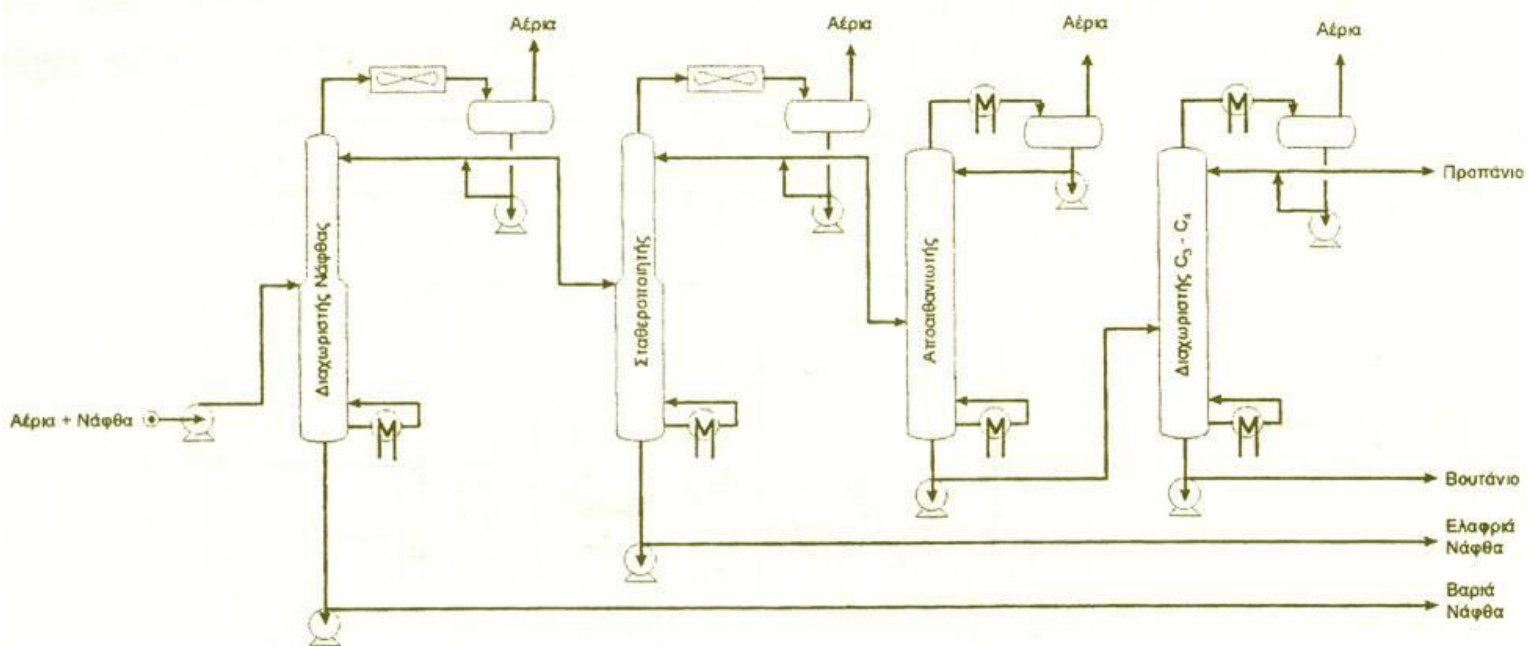
Η απομάκρυνση του αλατιού γίνεται με απομάκρυνση του θαλασσινού νερού. Το αργό πετρέλαιο θερμαίνεται και προστίθεται σε αυτό απογαλακτωματοποιητής. Στη συνέχεια οδηγείται σε δοχείο εντός του οποίου υπάρχει ισχυρό εναλλασσόμενο ηλεκτρικό πεδίο (4kV). Η συνεχής εναλλαγή της πολικότητας εξαναγκάζει τα πολικά μόρια του νερού να κινούνται συνεχώς πάνω κάτω. Έτσι, τα μόρια του νερού συγκρούονται μεταξύ τους, σπάζοντας το

γαλάκτωμα με τη βοήθεια του απογαλακτωματοποιητή και διαχωρίζονται από το πετρέλαιο λόγω βαρύτητας. Το αλάτι απομακρύνεται μαζί με το νερό από τον πυθμένα του δοχείου αφαλάτωσης. [1]

1.4.1.4 Διαχωρισμός αερίων

Το προϊόν κορυφής που απομακρύνεται από την αποστακτική στήλη, αποτελείται από μίγμα αερίων και νάφθας. Ο διαχωρισμός των αερίων (gas separation) από τη νάφθα γίνεται σε ειδικές αποστακτικές στήλες που ονομάζονται σταθεροποιητές (stabilizers). Οι σταθεροποιητές είναι αποστακτικές στήλες μικρής διαμέτρου που λειτουργούν υπό υψηλή πίεση, και έχουν μεγάλο αριθμό δίσκων (πάνω από 30).

Σε πρώτη φάση, το προϊόν κορυφής οδηγείται σε στήλη σταθεροποίησης, όπου διαχωρίζεται η νάφθα από τα ελαφρύτερα συστατικά. Η πίεση λειτουργίας του σταθεροποιητή είναι 15-20 atm. Το προϊόν κορυφής του σταθεροποιητή είναι αέρια από μεθάνιο έως βουτάνιο. Το μεθάνιο και το αιθάνιο βρίσκονται σε χαμηλές συγκεντρώσεις και δε συμφέρει οικονομικά ο διαχωρισμός τους. Απομακρύνονται σε στήλη αποαιθανίωσης (deethanizer) που λειτουργεί σε ακόμη υψηλότερη πίεση (30 atm). Το μίγμα προπανίου – βουτανίου που είναι προϊόντα εμπορεύσιμα, διαχωρίζονται σε αποστακτική στήλη υπό υψηλή πίεση (25 atm). Μια μονάδα διαχωρισμού αερίων φαίνεται στο σχήμα 13. [1]



Σχήμα 13: Μονάδα διαχωρισμού ελαφρών προϊόντων – αερίων. [1]

1.4.2 Διεργασίες μετατροπής

Οι διεργασίες μετατροπής έχουν σα σκοπό τους την αναδιάταξη του μορίου μέσω χημικών αντιδράσεων, για την παραγωγή καυσίμων με καλύτερη αντικροτική συμπεριφορά προκειμένου να χρησιμοποιηθούν σαν συστατικά ανάμιξης για την παρασκευή βενζινών. Η παραγωγή οξυγονούχων συστατικών που χρησιμοποιούνται για την παρασκευή αμόλυβδης βενζίνης. Στις διεργασίες αυτές μπορούν να περιληφθούν και οι διεργασίες της γλύκανσης και της υδρογονοαποθείωσης, με τις οποίες παράγονται και προϊόντα που δε χρησιμοποιούνται για την παρασκευή βενζίνης (ντίζελ, καύσιμα αεροπορίας).

1.4.2.1 Αναμόρφωση

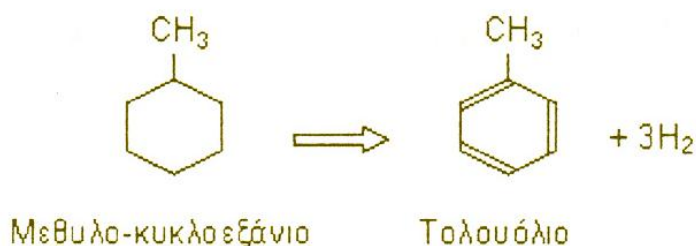
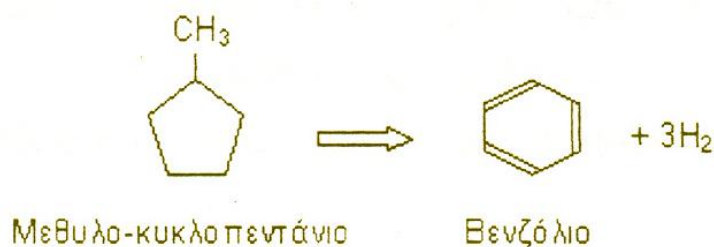
Η αναμόρφωση (reforming) εντάσσεται στις χημικές διεργασίες μετατροπής που στο σύνολό τους στοχεύουν στην αναδιάταξη των μορίων των υδρογονανθράκων των κλασμάτων κυρίως ελαφριάς και βαριάς νάφθας για την παραγωγή προϊόντων-κλασμάτων μίξης με καλύτερη αντικροτική συμπεριφορά. Πρόκειται για μία διεργασία κατά την οποία τα κορεσμένα συστατικά (παραφίνες και ναφθένια) χαμηλού αριθμού οκτανίων της βαριάς νάφθας από την ατμοσφαιρική απόσταξη, μετατρέπονται σε προϊόντα υψηλού Α.Ο. (100-104 RON) που περιέχουν περίπου 60% αρωματικά συστατικά. Διακρίνονται δύο τύποι αναμόρφωσης, η θερμική και η καταλυτική, με την τελευταία να κυριαρχεί λόγω της αυξημένης απόδοσης και καλύτερης ποιότητας του προϊόντος. Ο καταλύτης που χρησιμοποιείται είναι Pt/ Al₂O₃, ενώ για την υψηλή απόδοση απαιτούνται θερμοκρασίες της τάξης 500°C σε 10-20atm. Η μονάδα καταλυτικής αναμόρφωσης αποτελεί επίσης και την βασική πηγή υδρογόνου για τις υπόλοιπες διυλιστηριακές διεργασίες.

Οι κυριότερες αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα στην μονάδα αναμόρφωσης είναι:

- Αφυδρογόνωση ναφθενίων προς αρωματικά και υδρογόνο
- Ισομερισμός παραφινών και ολεφινών προς ισο-αλκάνια και ναφθενίων προς αρωματικά
- Αφυδρογονωτική κυκλοποίηση παραφινών προς αρωματικά και υδρογόνο
- Υδρογονοπυρόλυση (αντιδράσεις διάσπασης με προσθήκη H₂) παραφινών προς παραφίνες με μικρότερη ανθρακική αλυσίδα.
- Αποθείωση

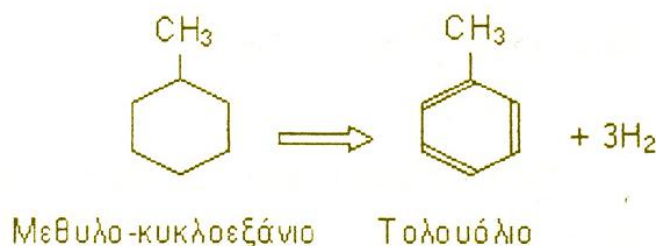
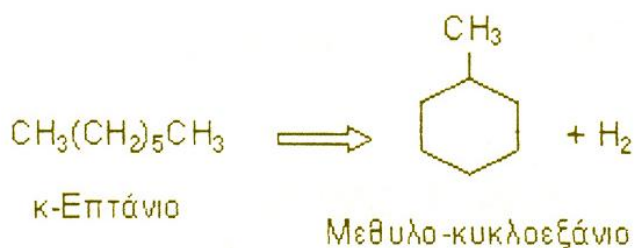
Ισομερισμός κανονικών παραφινών και ναφθενίων

Ο ισομερισμός (isomerization) αποτελεί καταλυτική διεργασία χημικής μετατροπής των παραφινών ευθείας αλυσίδας σε ισο-παραφίνες με σκοπό την αύξηση του Α.Ο. (80-88 RON) του κλάσματος της ελαφριάς νάφθας που δεν αναμορφώνεται. Ο καταλύτης που χρησιμοποιείται είναι $\text{AlCl}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$, ενώ η θερμοκρασία κυμαίνεται από 180°C (βουτάνιο) και 400°C (πεντάνιο, εξάνιο) σε πίεση περίπου 20atm.



Αφυδρογονωτική κυκλοποίηση

Κατά τις αντιδράσεις αυτές τα αλκάνια μετατρέπονται σε κυκλοαλκάνια και τελικά σε αρωματικούς υδρογονάνθρακες με αποτέλεσμα την μεγάλη αύξηση του αριθμού οκτανίου.



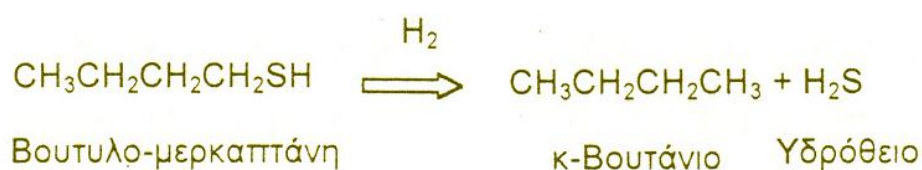
Υδρογονοπυρόλυση

Κατά τις αντιδράσεις αυτές παράγονται αλκάνια με μικρότερες ανθρακικές αλυσίδες.



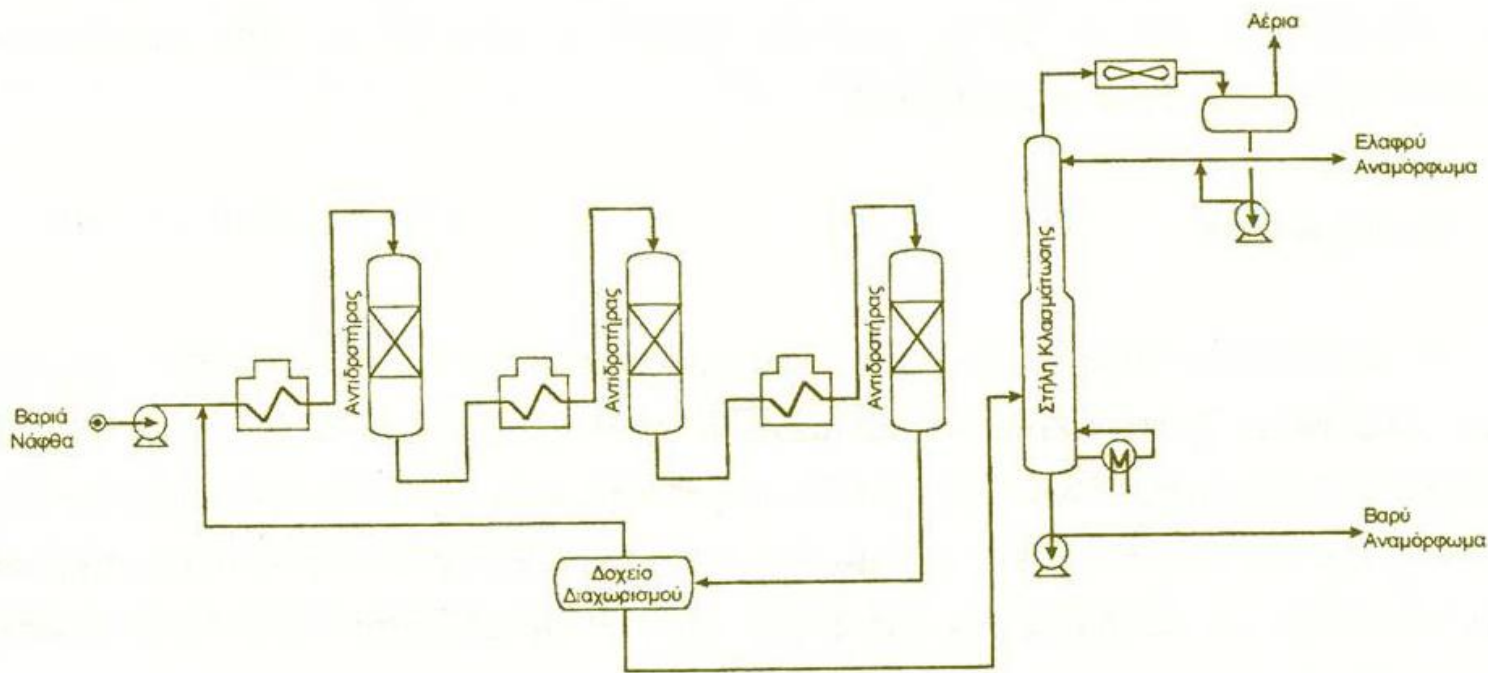
Αποθείωση

Κατά τις αντιδράσεις αποθείωσης το υδρογόνο που απελευθερώνεται από τις αφυδρογονωτικές αντιδράσεις, αντιδρά με τις μερκαπτάνες οπότε και παράγεται υδρόθειο και ο αντίστοιχος υδρογονάνθρακας.



Επειδή τα ελαφρά συστατικά της νάφθας (30-120 °C) αναμορφώνονται δύσκολα, η νάφθα κλασματούνεται σε ελαφριά και βαριά και αναμορφώνεται μόνο η βαριά. Επίσης, κατά την αναμόρφωση παρατηρείται αύξηση του τελικού σημείου ζέσης του προϊόντος κατά 15-20 °C, γι' αυτό και το τελικό σημείο ζέσης της βαριάς νάφθας είναι 20 °C χαμηλότερο αυτού των προδιαγραφών της βενζίνης. Ο αριθμός οκτανίου του αναμορφώματος κυμαίνεται από 85-105, ανάλογα με το είδος της τροφοδοσίας.

Κατά την αναμόρφωση παράγεται σημαντική ποσότητα υδρογόνου, γι' αυτό και οι μονάδες αναμόρφωσης αποτελούν βασική πηγή υδρογόνου για τις λοιπές διυλιστηριακές διεργασίες. Μια τυπική μονάδα αναμόρφωσης φαίνεται στο σχήμα 14. [1]

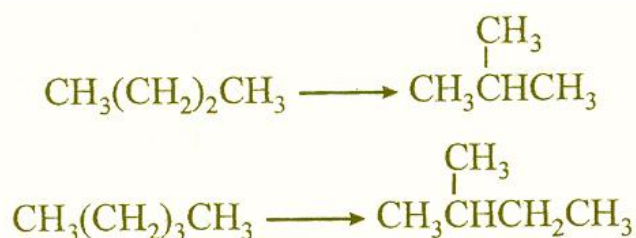


Σχήμα 14: Τυπική μονάδα αναμόρφωσης νάφθας

1.4.2.2 Ισομερίωση

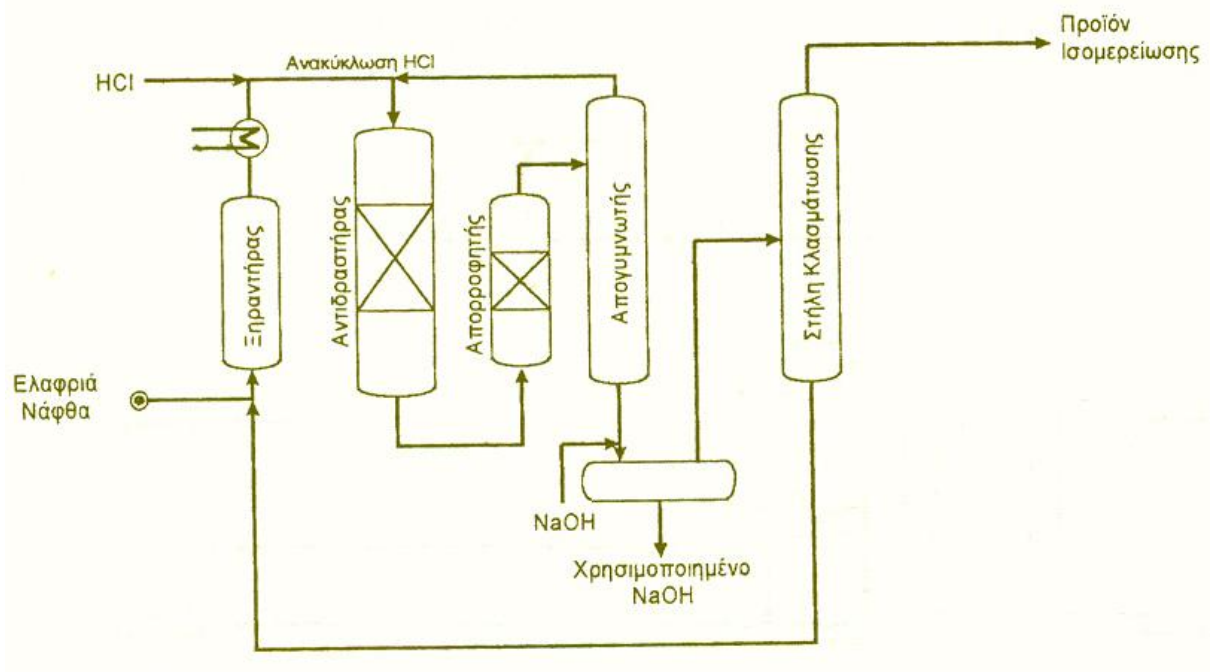
Η ισομερίωση (isomerization) είναι καταλυτική διεργασία χημικής μετατροπής που μετατρέπει τις ευθείας αλυσίδας παραφίνες σε υψηλότερου αριθμού οκτανίου διακλαδισμένες παραφίνες. Χρησιμοποιείται κυρίως για την αναβάθμιση της ελαφριάς νάφθας η οποία δεν αναμορφώνεται. Με τη διεργασία αυτή παράγεται προϊόν υψηλής αντικροτικότητας που δεν περιέχει καθόλου αρωματικές ενώσεις. Χρησιμοποιούνται πιέσεις γύρω στις 20 atm, ενώ η θερμοκρασία κυμαίνεται μεταξύ 180 °C (βουτάνιο) και 400 °C (πεντάνιο και εξάνιο).

Οι βασικές αντιδράσεις ισομερισμού είναι οι εξής:



Ο καταλύτης της ισομερίωσης είναι όξινος και συνίσταται από χλωριούχο αργίλιο (AlCl₃) που ενεργοποιείται με άνυδρο υδροχλώριο σε φορέα αλούμινα. Η τροφοδοσία (βουτάνιο ή ελαφριά νάφθα) ξηραίνεται, θερμαίνεται, αναμιγνύεται με αέριο υδροχλώριο και εισάγεται

στον αντιδραστήρα. Το προϊόν της αντίδρασης αφού διαχωριστεί από το υδροχλώριο που ανακυκλώνεται, οδηγείται σε στήλη κλασμάτωσης όπου διαχωρίζονται οι ισοπαραφίνες που αποτελούν το τελικό προϊόν, από τις κανονικές παραφίνες που ανακυκλώνονται στην τροφοδοσία. Στο σχήμα 15 φαίνεται ένα τυπικό διάγραμμα μονάδας ισομερίωσης.

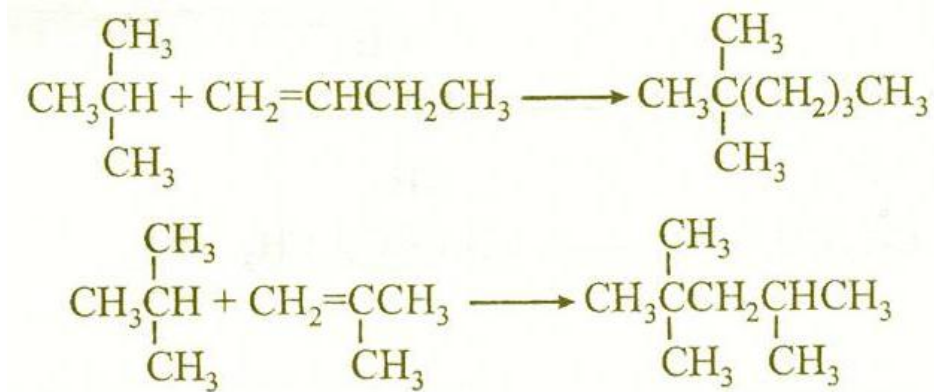


Σχήμα 15: Τυπικό διάγραμμα μονάδας ισομερίωσης

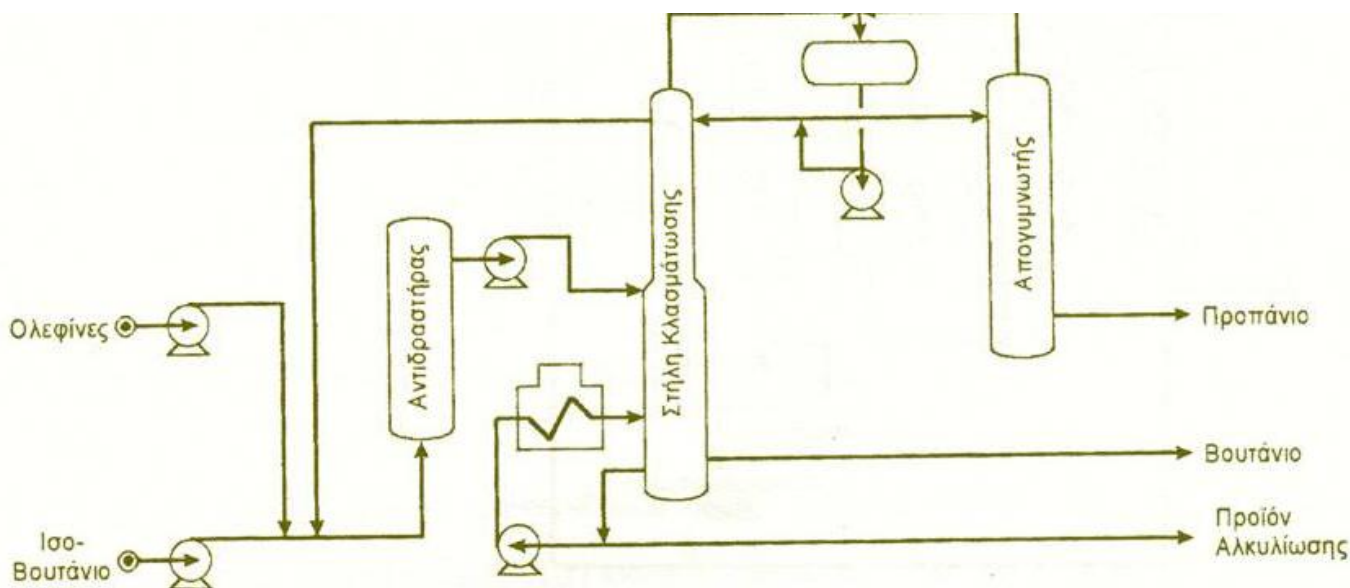
1.4.2.3 Αλκυλίωση

Η αλκυλίωση (alkylation) είναι καταλυτική διεργασία χημικής μετατροπής που παράγει προϊόν υψηλού αριθμού οκτανίου από ισοβουτάνιο και ελαφρές ολεφίνες σε έντονα όξινης συνθήκες. Οι ολεφίνες προέρχονται από μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης και είναι συνήθως μίγμα προπενίων και βουτενίων. Με τη μέθοδο αυτή μετατρέπονται οι ολεφίνες που έχουν έντονη τάση προς πολυμερισμό και σχηματισμό κομμωδών ουσιών σε υψηλής αντικροτικότητας συστατικά. Οι πιέσεις είναι υψηλές (200 atm), ενώ η θερμοκρασία είναι χαμηλή (5 °C για καταλύτη H₂SO₄ και 50 °C για καταλύτη HF). Το υδροφθόριο πλεονεκτεί σαν καταλύτης γιατί μπορεί να αλκυλιώσει C₃ και C₅ ολεφίνες, σε αντίθεση με το θειικό οξύ που αλκυλιώνει μόνο C₄ ολεφίνες.

Τυπικές αντιδράσεις αλκυλίωσης είναι οι ακόλουθες:



Όπως φαίνεται από τις προηγούμενες αντιδράσεις, εκτός από ολεφίνες χρησιμοποιείται και ισοβουτάνιο. Με αυτό τον τρόπο η αλκυλίωση συμβάλει στην αύξηση της παραγωγής βενζίνης από αέριους υδρογονάνθρακες. Η τροφοδοσία της μονάδας αλκυλίωσης είναι μίγμα βουτανίου / βουτενίου πλούσιο σε ισοβουτάνιο. Η σχέση ισοβουτανίου / ολεφίνης πρέπει να είναι τουλάχιστον 4:1 για να αποφευχθεί ο πολυμερισμός της ολεφίνης. Από τα προϊόντα της αντίδρασης διαχωρίζεται το αλκυλίωμα, που αποτελεί το τελικό προϊόν, ενώ το ισοβουτάνιο που δεν αντέδρασε ανακυκλώνεται στην τροφοδοσία. Μια τυπική μονάδα αλκυλίωσης φαίνεται στο σχήμα 16. [1]

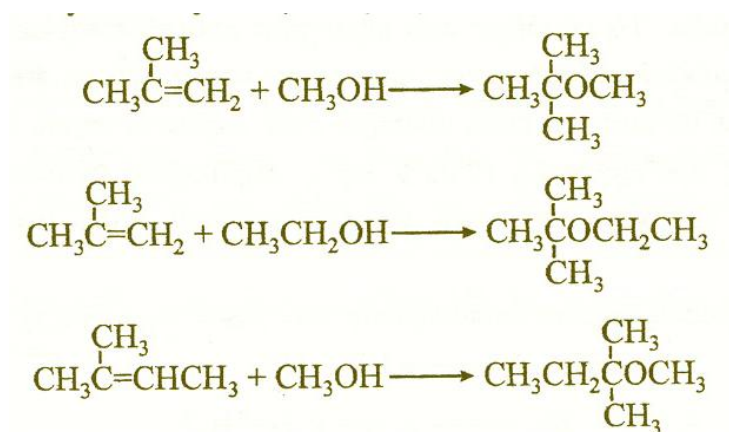


Σχήμα 16: Τυπικό διάγραμμα μονάδας αλκυλίωσης. [1]

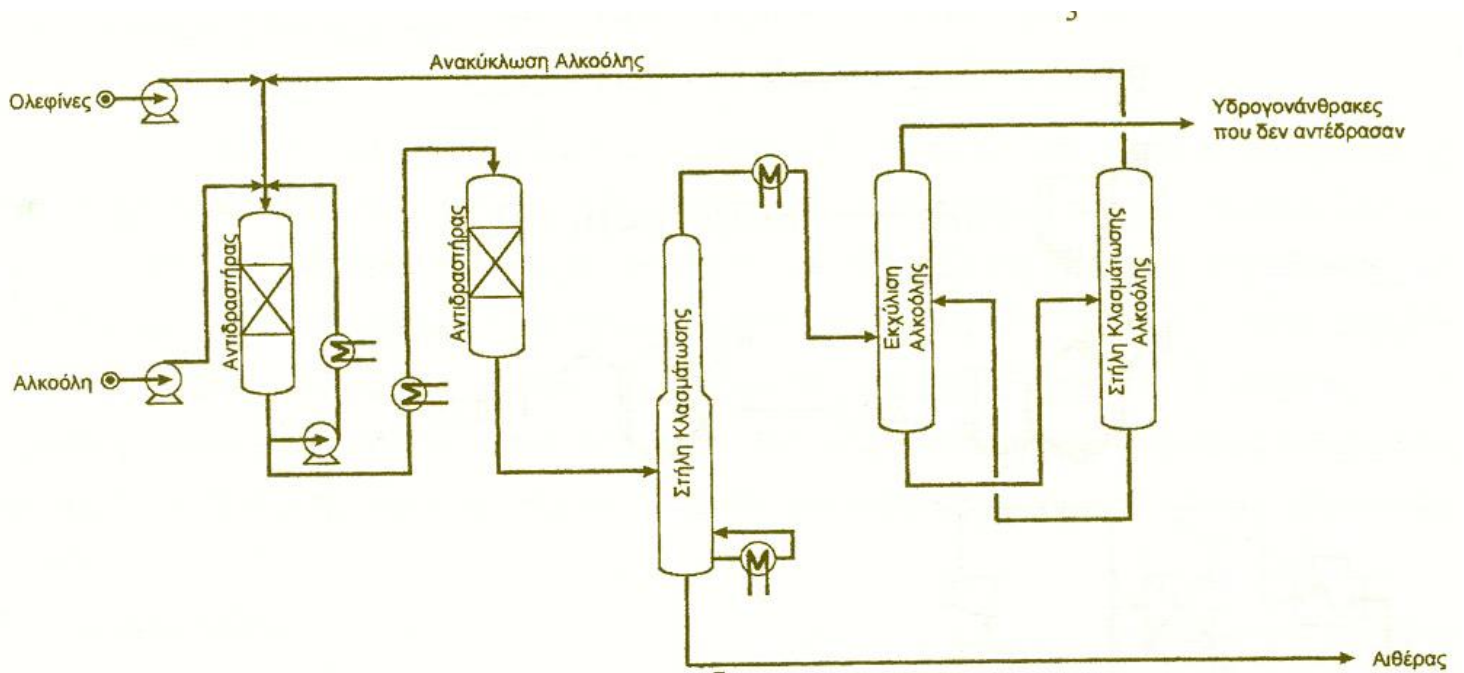
1.4.2.4 Παραγωγή αιθέρων

Η παρούσα κατάσταση παραγωγής βενζίνης και οι μελλοντικές τις τάσεις απαιτούν τη χρησιμοποίηση οξυγονούχων συστατικών και μάλιστα αιθέρων, σαν συστατικά για την αύξηση του αριθμού οκτανίου του τελικού προϊόντος. Οι αιθέρες (ethers) που

χρησιμοποιούνται είναι: μεθυλο-τριτοταγής βουτυλαιθέρας (MTBE), αιθυλο-τριτοταγής βουτυλαιθέρας (ETBE) και τριτοταγής ισοαμυλαιθέρας (TAME). Οι αιθέρες αυτοί παρασκευάζονται από αντίδραση ολεφινών με τις κατάλληλες αλκοόλες. Τυπικές αντιδράσεις παραγωγής αιθέρων είναι:



Η διεργασία παραγωγής των αιθέρων είναι καταλυτική, με τον καταλύτη να έχει την μορφή όξινης ιοντοεναλλακτικής ρητίνης. Η τροφοδοσία που αποτελείται από την επιθυμητή ολεφίνη αναμιγνύεται με την αντίστοιχη αλκοόλη και οδηγείται στον αντιδραστήρα, που αποτελείται από δύο κλίνες. Το προϊόν της αντίδρασης κλασματούνεται και σε πρώτη φάση διαχωρίζεται ο αιθέρας, ο οποίος είναι και το προϊόν της διεργασίας. Η αλκοόλη διαχωρίζεται από τους υδρογονάνθρακες που δεν αντέδρασαν και ανακυκλώνεται στην τροφοδοσία της αντίδρασης. Οι υδρογονάνθρακες που δεν αντέδρασαν συνήθως οδηγούνται σε εγκατάσταση ισομερίωσης, αυξάνοντας με αυτόν τον τρόπο την ποσότητα της παραγόμενης βενζίνης. Μια μονάδα παραγωγής αιθέρων φαίνεται στο σχήμα 17.

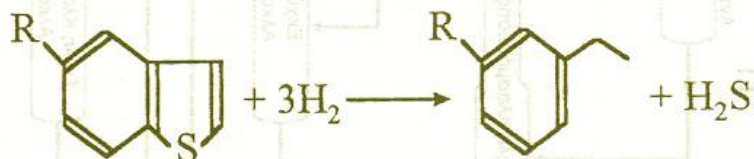


Σχήμα 17: Τυπικό διάγραμμα μονάδας παραγωγής αιθέρων. [1]

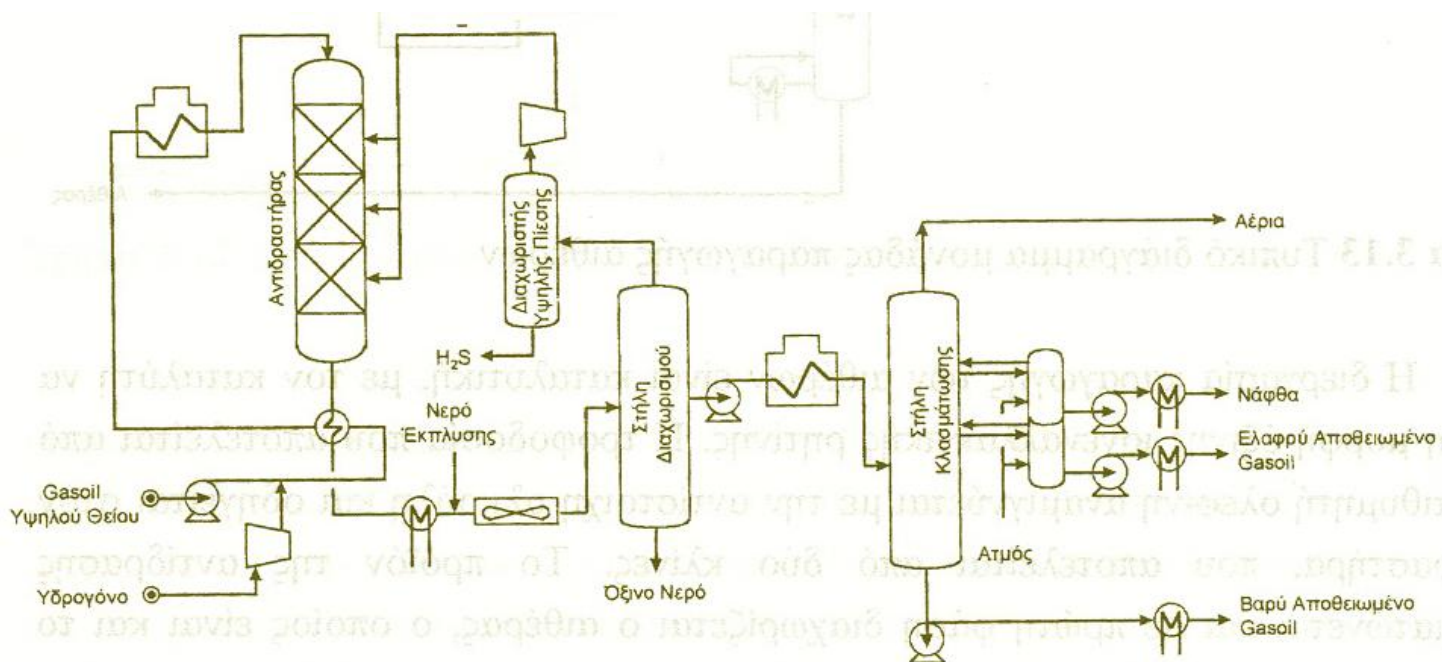
1.4.2.5 Υδρογονοαποθείωση

Επειδή οι περισσότεροι τύποι αργού πετρελαίου δίνουν gasoil με περιεκτικότητα σε θείο μεγαλύτερη από αυτή που θέτουν οι προδιαγραφές, κρίνεται αναγκαία η υδρογονοαποθείωση (hydrodesulfurization) τους. Ταυτόχρονα με την αποθείωση γίνεται και απαζώτωση, που βελτιώνει το χρώμα και την οσμή του καυσίμου. Χρησιμοποιείται καταλύτης που περιέχει κοβάλτιο (Co) και μολυβδένιο (Mo) σε φορέα αλούμινα. Το υδρόθειο που παράγεται μετατρέπεται σε θείο με τη μέθοδο Claus. Η θερμοκρασία λειτουργίας είναι γύρω στους 320 με 400 °C και η πίεση γύρω στις 50 με 60 atm. Τα πολύ αυστηρά όρια περιεκτικότητας σε θείο που θέτουν οι ισχύουσες προδιαγραφές (0.05% κ.β.), επιβάλλουν έντονες συνθήκες αποθείωσης, καθώς και καταλύτες που επιτυγχάνουν πολύ υψηλό βαθμό μετατροπής.

Τυπικές αντιδράσεις υδρογονοαποθείωσης των gasoil είναι οι εξής:



Η τροφοδοσία αναμιγνύεται με υδρογόνο, προθερμαίνεται σε εναλλάκτες και παίρνει την απαιτούμενη θερμοκρασία στην κάμινο θέρμανσης. Στη συνέχεια οδηγείται στον αντιδραστήρα. Τα προϊόντα της αντίδρασης οδηγούνται σε διαδοχικές στήλες κλασμάτωσης, όπου λαμβάνονται τα επιθυμητά αποθειωμένα προϊόντα. Η περίσσεια υδρογόνου που δεν αντέδρασε, ανακυκλώνεται, αφού προηγουμένως έχει καθαριστεί από το υδρόθειο. Μια τυπική μονάδα υδρογονοαποθείωσης φαίνεται στο σχήμα 18.



Σχήμα 18: Τυπικό διάγραμμα μονάδας υδρογονοαποθείωσης. [1]

1.4.2.6 Πυρολυτικές διεργασίες

Οι πυρολυτικές διεργασίες που εμφανίζονται σε ένα διυλιστήριο χωρίζονται σε δύο κύριες κατηγορίες, στις θερμικές και τις καταλυτικές. Οι θερμικές πυρολυτικές διεργασίες είναι πιο ήπιες, και με αυτές επιτυγχάνεται χαμηλότερος βαθμός μετατροπής. Οι καταλυτικές πυρολυτικές διεργασίες χρησιμοποιούνται σε μεγαλύτερο βαθμό καθώς με αυτές παράγονται προϊόντα πιο σταθερά και με καλύτερες ιδιότητες.

Για την αξιοποίηση επομένως των βαρέων κλασμάτων της απόσταξης του αργού πετρελαίου και της μετέπειτα απόσταξης υπό κενό του υπολείμματος της πρώτης, αναπτύχθηκε η διεργασία της πυρόλυσής τους προς ελαφρύτερα υψηλότερης αξίας προϊόντα (βενζίνη υψηλού Α.Ο., diesel και υγραέρια). Αποτελεί μία από τις βασικότερες μεθόδους παραγωγής κλασμάτων μίξης βενζινών και περιλαμβάνει ένα μεγάλο εύρος διεργασιών, την **Θερμική πυρόλυση**, την **καταλυτική πυρόλυση** και την **υδροπυρόλυση**.

α) Θερμική πυρόλυση

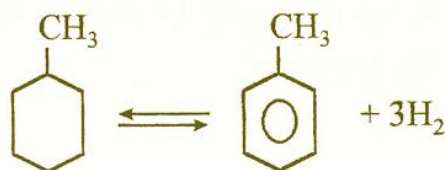
Κατά την διεργασία αυτή πραγματοποιείται θερμική διάσπαση (425-650°C σε 15atm) μορίων ανώτερων υδρογονανθράκων, απουσία αέρος, προς μικρότερα μόρια αλκανίων και αλκενίων, που οδηγεί σε παραγωγή μεγάλων ποσοτήτων αερίων και βενζίνης χαμηλού αριθμού οκτανίου. Κατά την θερμική πυρόλυση παράγεται χαμηλής ποιότητας προϊόν λόγω της υψηλής περιεκτικότητάς του σε ασταθείς και εύκολα πολυμεριζόμενες ολεφίνες, γι' αυτό και σταδιακά αντικαθίσταται από μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης. Η θερμική πυρόλυση (thermal cracking) αποτελεί την πρώτη διεργασία η οποία χρησιμοποιήθηκε για την αύξηση της απόδοσης του αργού πετρελαίου σε λευκά προϊόντα. Με τη θερμική πυρόλυση, το υπόλειμμα της απόσταξης υφίσταται θέρμανση στους 450 – 500 °C, υπό υψηλή σχετικά πίεση (15 atm). Κατά τη θέρμανση αυτή επέρχεται διάσπαση των μεγαλομορίων του υπολείμματος σε μικρότερα μόρια που έχουν σημεία ζέσης στην περιοχή της βενζίνης και του ντίζελ.

Τυπικές αντιδράσεις θερμικής πυρόλυσης είναι οι εξής:

1. Σχάση μορίου



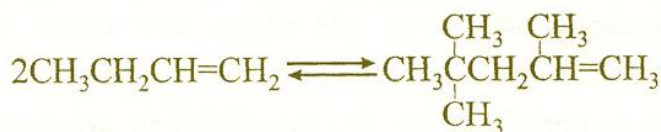
2. Αφυδρογόνωση παραφινών και ναφθενίων προς αρωματικά



3. Ισομερισμός ολεφινών



4. Πολυμερισμός ολεφινών



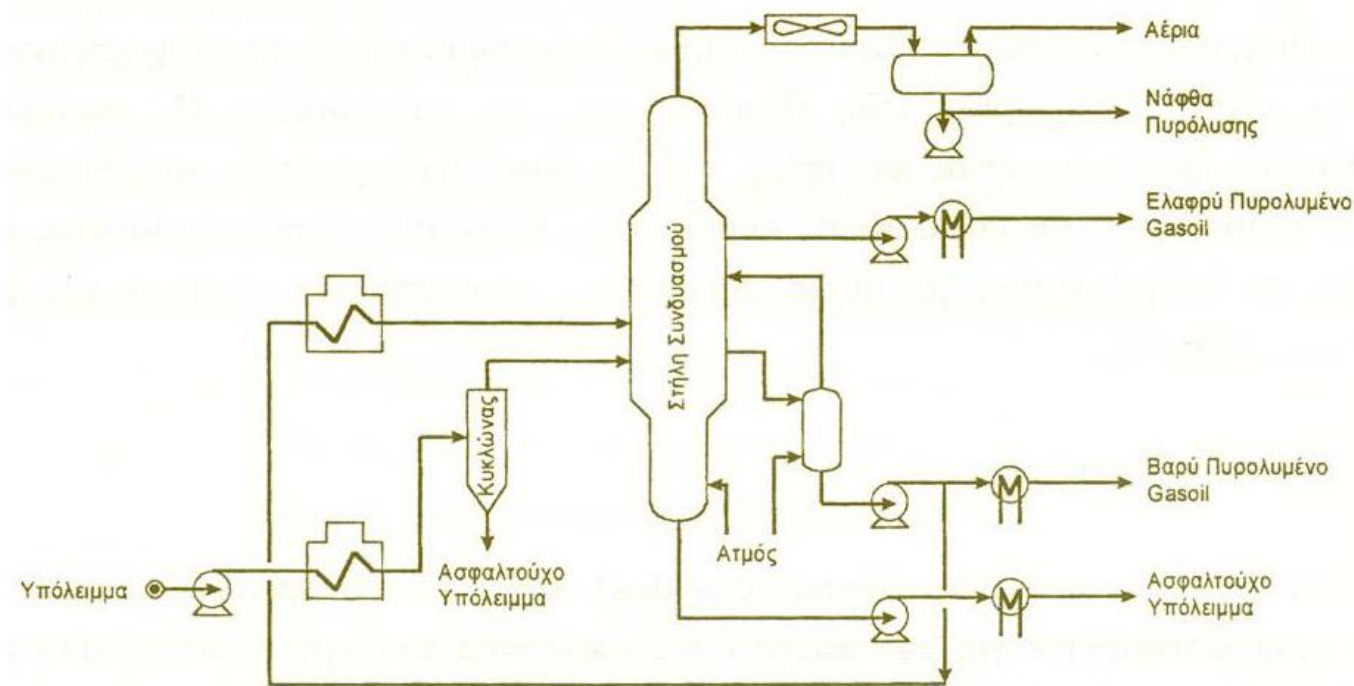
5. Περαιτέρω αφυδρογόνωση ολεφινών



Η κατάταξη των τύπων υδρογονανθράκων όσον αφορά τη δραστηριότητα στις συνθήκες πυρόλυσης είναι: παραφίνες > ναφθένια > αρωματικά. Σε ναφθένια και αρωματικά με παραφινική πλευρική αλυσίδα, η ευκολία διάσπασης εξαρτάται από την πλευρική αλυσίδα. Στην περίπτωση των παραφινών, όσο μεγαλύτερο είναι το μήκος της αλυσίδας τόσο ευκολότερη είναι η πυρόλυση.

Μια τυπική μονάδα θερμικής πυρόλυσης φαίνεται στο σχήμα 19. Η τροφοδοσία θερμαίνεται στην κάμινο του υπολείμματος όπου υφίσταται πυρόλυση και οδηγείται στη στήλη κλασμάτωσης. Τα προϊόντα της πυρόλυσης είναι αέρια, νάφθα, ελαφρύ και βαρύ gasoil και ένα βαρύ ασφαλτούχο υπόλειμμα. Το βαρύ gasoil οδηγείται σε κάμινο όπου θερμαίνεται, πυρολύεται και επανατροφοδοτείται στη στήλη κλασμάτωσης.

Κατά τη θερμική πυρόλυση παράγονται προϊόντα με υψηλή περιεκτικότητα σε ολεφίνες. Οι ολεφίνες είναι ασταθείς κι έχουν μεγάλη τάση για πολυμερισμό, ο οποίος αλλοιώνει την ποιότητα του καυσίμου. Γι ' αυτό το λόγο τα προϊόντα θερμικής πυρόλυσης θεωρούνται χαμηλής ποιότητας. [1]



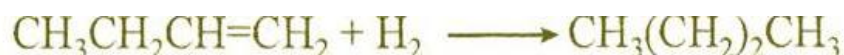
Σχήμα 19: Τυπικό διάγραμμα μονάδας θερμικής πυρόλυσης.

β) Καταλυτική πυρόλυση

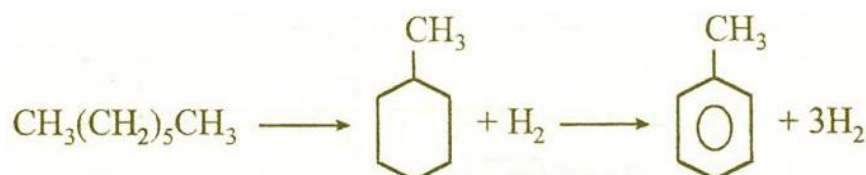
Η καταλυτική πυρόλυση αποτελεί μεταγενέστερο στάδιο της θερμικής πυρόλυσης. Η χρησιμοποίηση καταλύτη επιτρέπει μεγαλύτερη απόδοση σε συστατικά κατάλληλα για την παραγωγή βενζίνης, καθώς και υψηλότερο αριθμό οκτανίου αυτών των προϊόντων. Η χρήση καταλύτη δεν επιτρέπει την τροφοδοσία υπολείμματος που περιέχει υψηλές συγκεντρώσεις μετάλλων που τον απενεργοποιούν. Έτσι σαν τροφοδοσία χρησιμοποιείται είτε vacuum gasoil είτε ατμοσφαιρικό gasoil.

Οι αντιδράσεις που πραγματοποιούνται κατά την καταλυτική πυρόλυση είναι ίδιες με αυτές τις θερμικής πυρόλυσης, προσθέτοντας τις εξής αντιδράσεις:

1. Υδρογόνωση ολεφινών



2. Αφυδρογονοκυκλίωση παραφινών

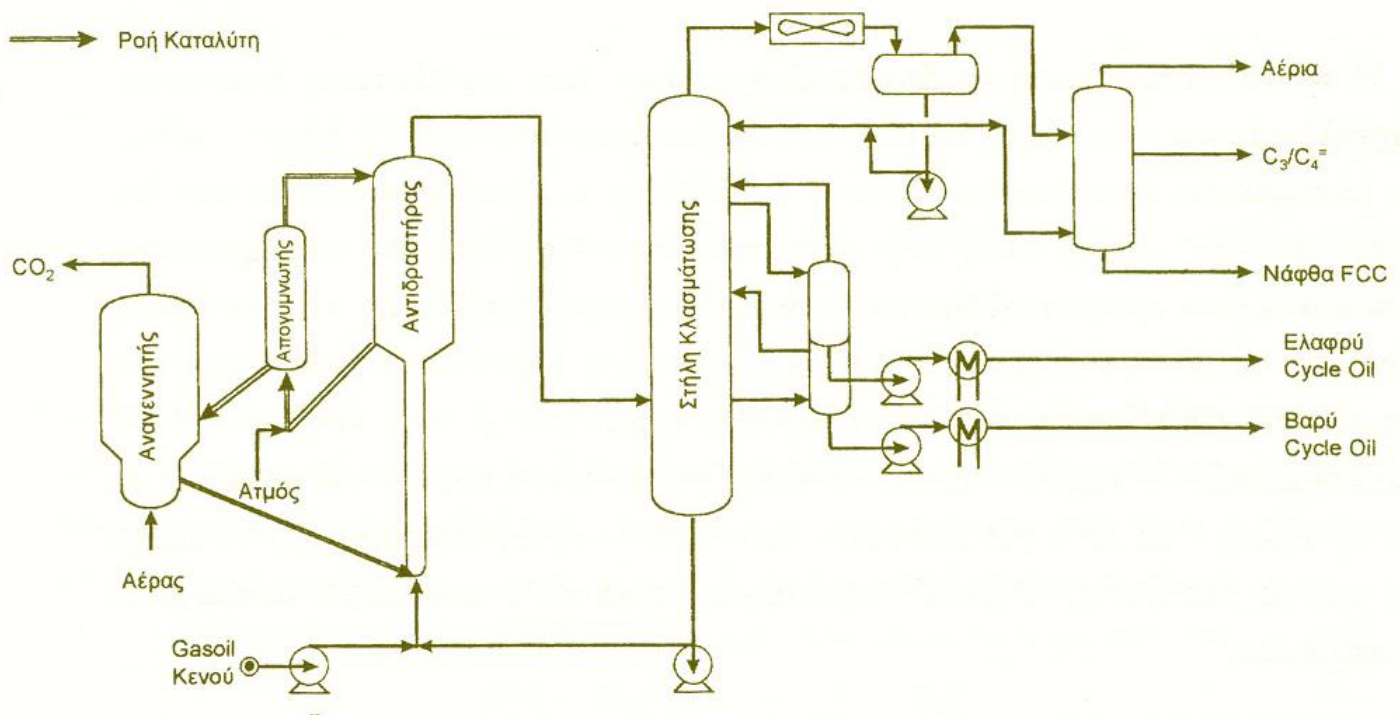


Η σειρά δραστηριότητας των υδρογονανθράκων κατά την καταλυτική πυρόλυση είναι: ολεφίνες > αλκυλοβενζόλια > ναφθένια > πολυμεθυλοαρωματικά > παραφίνες > αρωματικά χωρίς υποκατάστατες.

Ο καταλύτης της αντίδρασης αποτελείται από μίγμα αργιλοπυριτικών ενώσεων (Al_2O_3 και SiO_2), ενεργοποιημένο με οξύ.

Η πιο συνηθισμένη μέθοδος που χρησιμοποιείται στα σύγχρονα διυλιστήρια είναι η καταλυτική πυρόλυση ρευστοστερεάς κλίνης, η οποία ουσιαστικά έχει εξαλείψει τις μεθόδους σταθερής κλίνης από τα σημερινά διυλιστήρια. [1]

Στο σχήμα 20 φαίνεται μια τυπική μονάδα καταλυτικής πυρόλυσης ρευστής κλίνης. Η τροφοδοσία εισάγεται στη βάση του σωλήνα του αντιδραστήρα, όπου ατμοποιείται αναμειγνυόμενη με το θερμό καταλύτη, ο οποίος έχει τη μορφή σφαιριδίων ή κυλινδρίσκων. Ο καταλύτης μεταφέρεται από τους ατμούς και μαζί εισέρχονται στον αντιδραστήρα. Μέσα στον αντιδραστήρα ο καταλύτης αρχίζει να διαχωρίζεται από τους ατμούς, δημιουργώντας έτσι την κλίση του καταλύτη. Οι αντιδράσεις πυρόλυσης ξεκινούν στο σωλήνα τροφοδοσίας και συνεχίζονται και μέσα στην κλίση του αντιδραστήρα. Οι ατμοί εξέρχονται από την κορυφή του αντιδραστήρα κι οδηγούνται στην αποστακτική στήλη για κλασμάτωση. Ο καταλύτης απάγεται συνεχώς από τον αντιδραστήρα από το σωλήνα εξόδου και οδηγείται στον απογυμνωτή, όπου απομακρύνονται οι υδρογονάνθρακες που είχαν προσροφηθεί στην επιφάνεια του καταλύτη. Ο απογυμνωθής καταλύτης οδηγείται στον αναγεννητή. Εκεί, με τη βοήθεια ρεύματος θερμού αέρα καίγεται ο άνθρακας που έχει εναποτεθεί πάνω στον καταλύτη. Ο θερμός αναγεννηθής καταλύτης οδηγείται στο κάτω μέρος του σωλήνα τροφοδοσίας του αντιδραστήρα, όπου συναντά την τροφοδοσία, οπότε και αρχίζει νέος κύκλος πυρόλυσης.



Σχήμα 20: Τυπικό διάγραμμα μονάδας καταλυτικής πυρόλυσης ρευστοστερεάς κλίνης. [1]

Η καταλυτική πυρόλυση έχει καλύτερη απόδοση από τη θερμική, ενώ δίνει και σταθερότερα προϊόντα, καθώς η ύπαρξη καταλύτη δεν ευνοεί το σχηματισμό διολεφινών.

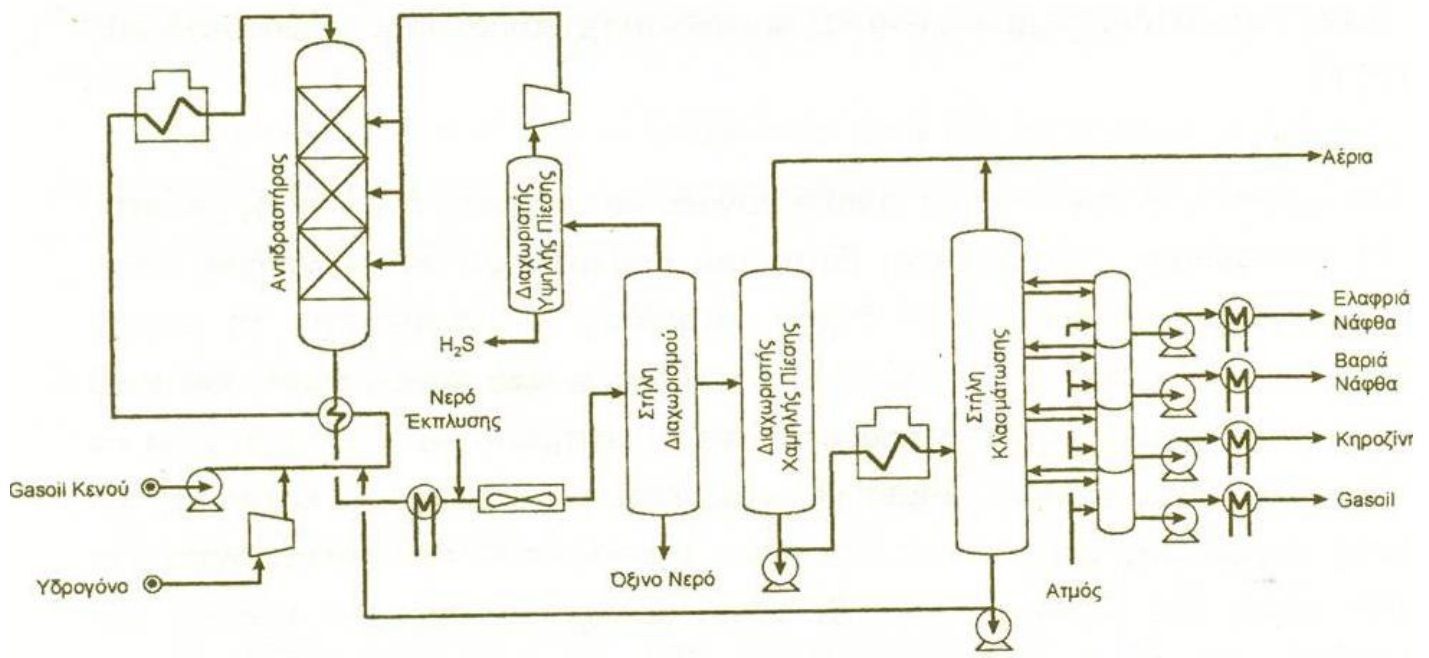
γ) Υδρογονοπυρόλυση

Η υδρογονοπυρόλυση (hydrocracking) ανήκει στις καταλυτικές διεργασίες, αλλά χρειάζεται και υδρογόνο, καθώς περιλαμβάνει και αντιδράσεις υδρογόνωσης. Με τις αντιδράσεις αυτές αποφεύγεται η εναπόθεση άνθρακα στον καταλύτη και δεν απαιτείται συνεχής αναγέννηση του. Με την υδρογονοπυρόλυση μετατρέπονται βαριά πολυκυκλικά αρωματικά προϊόντα σε ελαφρύτερα κορεσμένα. Οι απαιτήσεις της μονάδας σε υδρογόνο είναι υψηλές και συνήθως η μονάδα συνοδεύεται από μονάδα παραγωγής υδρογόνου. Η θερμοκρασία κυμαίνεται μεταξύ 400 και 450°C και η πίεση μεταξύ 70 και 200 atm. Η απόδοση σε προϊόντα κυμαίνεται μεταξύ 1 με 5% για τα αέρια, 7 με 25% για τη νάφθα (που απαιτεί όμως αναμόρφωση γιατί έχει χαμηλό αριθμό οκτανίου), 30 με 65% για το gasoil και 16 με 60% για το υπόλειμμα, ανάλογα με την τροφοδοσία.

Οι συνθήκες που επικρατούν κατά την υδρογονοπυρόλυση ευνοούν αντιδράσεις διάσπασης και υδρογόνωσης πολυπυρηνικών ενώσεων προς μονοπυρηνικές και παραφίνες (κανονικές και ισοπαραφίνες). Η παρουσία υδρογόνου και καταλύτη μετατρέπει τις ολεφίνες που

παράγονται από τις διασπάσεις των μορίων σε παραφίνες. Έτσι, το προϊόν της πυρόλυσης είναι πολύ σταθερό. Ο καταλύτης της διεργασίας είναι μεταλλικός (Co/Mo ή Ni/Co/Mo) σε φορέα αλούμινα. Καταλύτες που περιέχουν και λευκόχρυσο (Pt) έχουν ακόμη μεγαλύτερη δραστηκότητα.

Στο σχήμα 21 φαίνεται μια τυπική μονάδα υδρογονοπυρόλυσης. Η τροφοδοσία αφού αναμιχθεί με το αέριο υδρογόνο προθερμαίνεται σε εναλλάκτες, οδηγείται σε κάμινο θέρμανσης κι εν συνεχεία στον αντιδραστήρα. Τα προϊόντα του αντιδραστήρα κλασματώνονται σε διάφορες βαθμίδες. Η περίσσεια του υδρογόνου διαχωρίζεται από το παραχθέν υδρόθειο και επανατροφοδοτείται στον αντιδραστήρα.



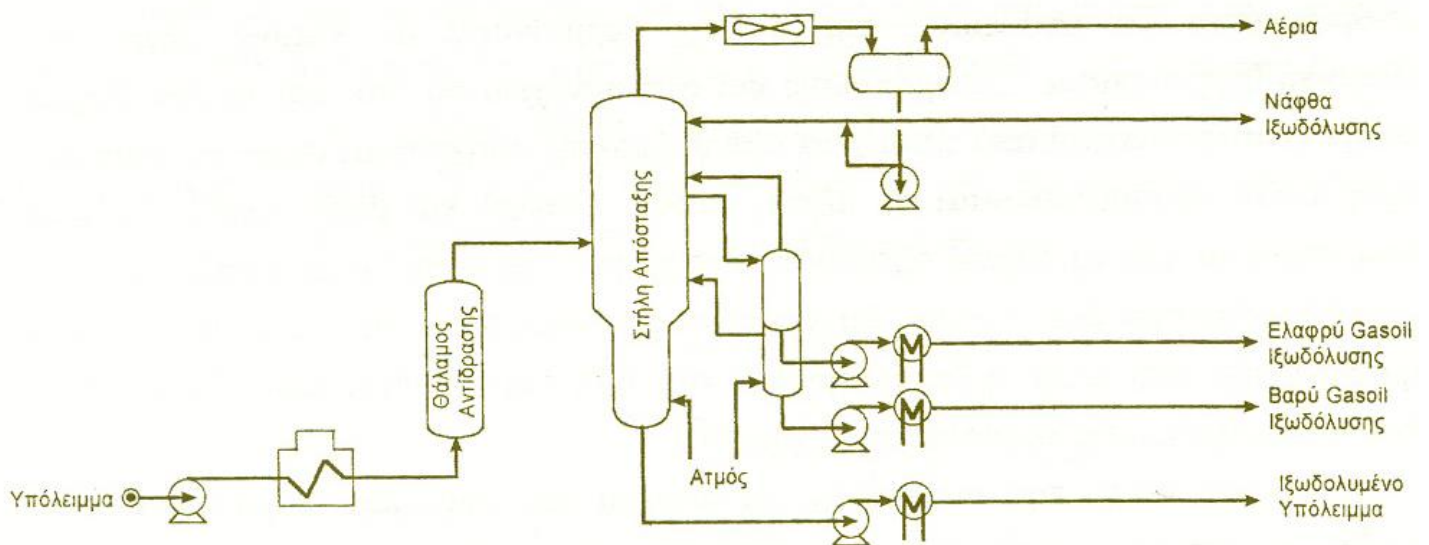
Σχήμα 21: τυπικό διάγραμμα μονάδας υδρογονοπυρόλυσης. [1]

δ) Ιξωδόλυση

Η ιξωδόλυση (visbreaking) είναι μία ήπιας μορφής θερμική πυρόλυση, που έχει σαν στόχο τη μείωση του ιξώδους βαρέων υπολειμμάτων είτε ατμοσφαιρικής απόσταξης είτε απόσταξης υπό κενό. Με αυτόν τον τρόπο ελαχιστοποιείται η ποσότητα των μέσων αποσταγμάτων που πρέπει να αναμιχθούν με τα βαρέα υπολείμματα ώστε να παραχθεί μαζούτ που θα πληροί τις προδιαγραφές της αγοράς. Εκτός όμως από υπόλειμμα χαμηλού ιξώδους παράγονται και μερικές ποσότητες αποσταγμάτων. Οι συνθήκες λειτουργίας είναι θερμοκρασίες γύρω στους

500°C και πιέσεις περίπου 20 atm. Η παραγωγή νάφθας κυμαίνεται μεταξύ 4 και 8%, ενώ του gasoil μεταξύ 12 και 15% ανάλογα με το είδος της τροφοδοσίας.

Η τροφοδοσία που είναι βαρύ υπόλειμμα με υψηλό ιξώδες, εισάγεται σε κάμινο όπου θερμαίνεται και στη συνέχεια οδηγείται στο θάλαμο αντίδρασης, όπου παραμένει τον απαιτούμενο χρόνο ώστε να επέλθει η πυροδιάσπαση. Τα προϊόντα του θαλάμου αντίδρασης οδηγούνται σε στήλη κλασμάτωσης, όπου και διαχωρίζονται. Μια τυπική μονάδα ιξωδόλυσης φαίνεται στο σχήμα 22.



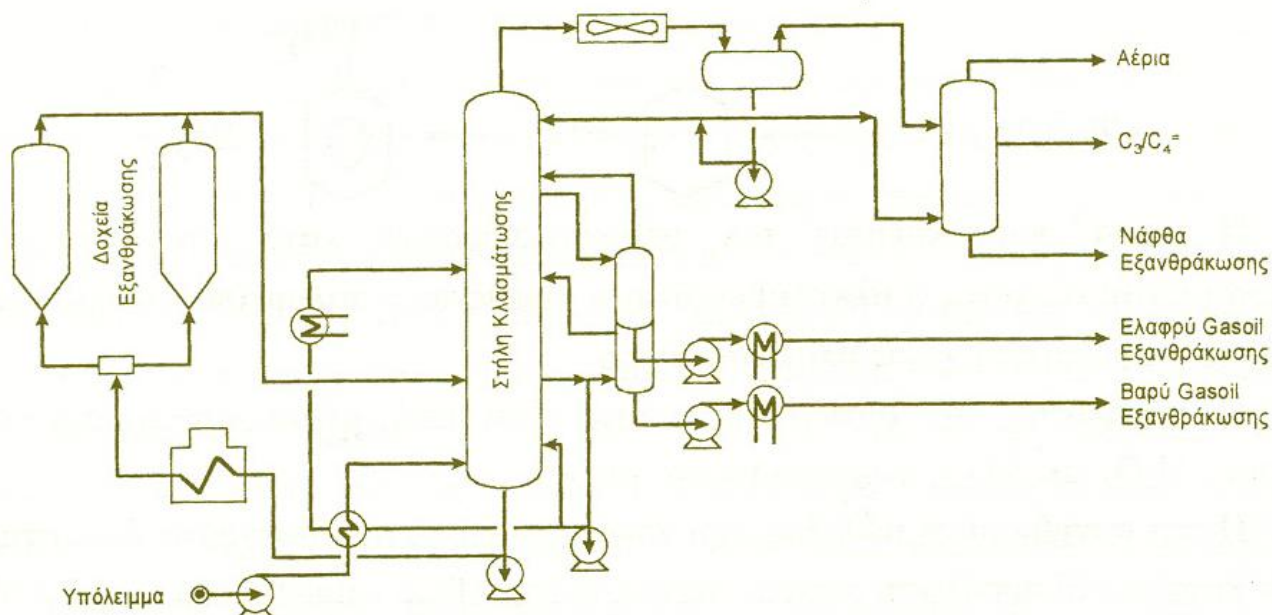
Σχήμα 22: Τυπικό διάγραμμα μονάδας ιξωδόλυσης.

Επειδή η ιξωδόλυση είναι ουσιαστικά μια θερμική πυρόλυση, τα ελαφρά προϊόντα που παράγονται είναι χαμηλής ποιότητας λόγω της ύπαρξης ολεφινών. [1]

ε) Εξανθράκωση

Η εξανθράκωση (coking) ανήκει επίσης στις διεργασίες θερμικής πυρόλυσης και μετατρέπει υπολείμματα απόσταξης σε λευκά προϊόντα και άνθρακα. Είναι μία αρκετά σημαντική διεργασία, ιδίως σε αγορές με περιορισμένη ζήτηση μαζούτ. Ο άνθρακας που παράγεται μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε σαν καύσιμο είτε σαν ηλεκτρόδια για ηλεκτροχημικές δράσεις. Η θερμοκρασία της εξανθράκωσης είναι 500°C περίπου και η πίεση από 1 έως 7 atm. Η παραγωγή σε προϊόντα κυμαίνεται ανάλογα με το είδος της τροφοδοσίας και είναι 7 έως 10 % αέρια, 9 έως 20% νάφθα, 42 έως 51% gasoil και 25 έως 40% άνθρακα.

Η θερμή τροφοδοσία εισέρχεται στον πυθμένα της στήλης κλασμάτωσης, όπου κλασματούνεται μαζί με την ανατροφοδοσία των συμπυκνωμάτων του δοχείου εξανθράκωσης. Το υπόλειμμα της στήλης θερμαίνεται σε κάμινο μέχρι την επιθυμητή θερμοκρασία εξανθράκωσης και στη συνέχεια σε ένα από τα δύο δοχεία εξανθράκωσης. Οι ατμοί από τα δοχεία εξανθράκωσης οδηγούνται στην αποστακτική στήλη, όπου κλασματούνονται σε αέρια, νάφθα, ελαφρύ και βαρύ gasoil. Ο άνθρακας απομακρύνεται από τα δοχεία εξανθράκωσης χρησιμοποιώντας νερό υψηλής πίεσης. Η μονάδα διαθέτει δύο δοχεία εξανθράκωσης, ούτως ώστε στο ένα να γίνεται η παραγωγή και στο άλλο η απομάκρυνση του ήδη παραχθέντος άνθρακα. Μια τυπική μονάδα εξανθράκωσης φαίνεται στο σχήμα 23.



Σχήμα 23: Τυπικό διάγραμμα μονάδας εξανθράκωσης.

Και σε αυτήν την περίπτωση, τα ελαφρά προϊόντα που παράγονται είναι χαμηλής ποιότητας λόγω υψηλής περιεκτικότητας σε ολεφίνες. [1]

1.4.2.7 Παραγωγή υδρογόνου

Οι διεργασίες οι οποίες αιτούν υδρογόνο σε ένα διυλιστήριο είναι πολλές. Το βασικό πλεονέκτημα των υδρογονοκατεργασιών είναι η παραγωγή σταθερών προϊόντων που δεν παρουσιάζουν τάση για σχηματισμό κομμωδών ουσιών. Η βασική πηγή υδρογόνου στα διυλιστήρια ήταν οι διεργασίες αναμόρφωσης. Η παραγωγή όμως υδρογόνου από την αναμόρφωση δεν επαρκεί για να καλύψει τις ανάγκες ενός σύγχρονου διυλιστηρίου. Γι' αυτό

το λόγο στα διυλιστήρια παράγεται υδρογόνο από τη σχάση ελαφρών υδρογονανθράκων (υδραερίων ή νάφθας).

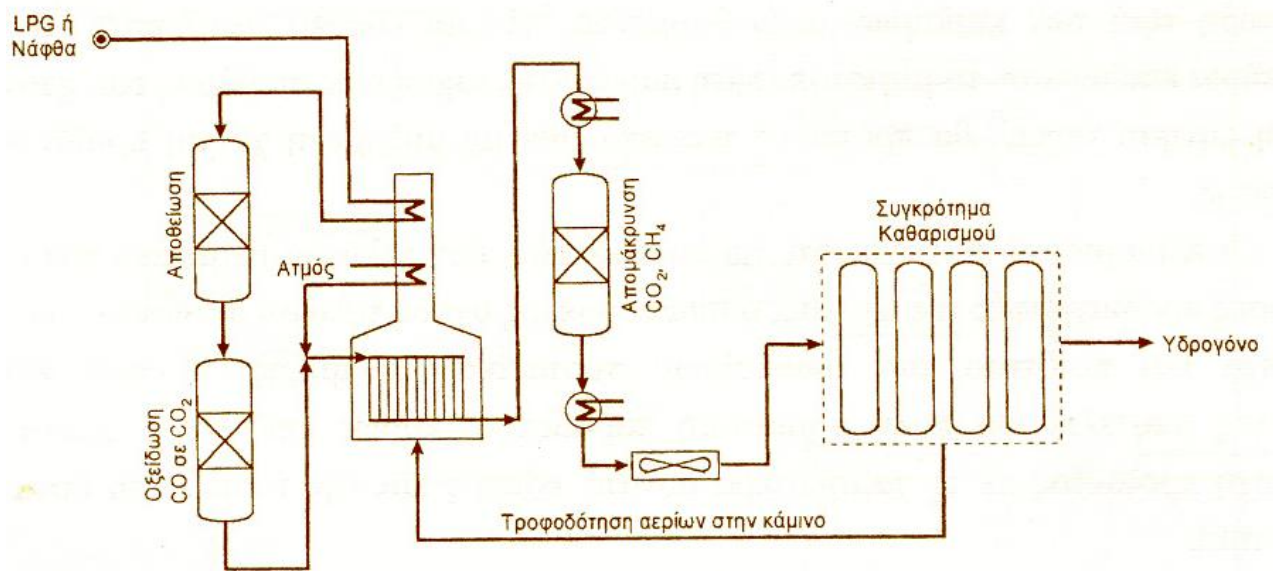
Η παραγωγή υδρογόνου βασίζεται στη γνωστή αντίδραση του «υδραερίου»



που στη γενική περίπτωση της είναι:



Η τροφοδοσία προθερμαίνεται και οδηγείται σε στήλη απομάκρυνσης θειούχων ενώσεων με καταλύτη οξειδίου του ψευδαργύρου (ZnO). Στη συνέχεια οδηγείται σε οξειδωτική κλίνη όπου το παραχθέν κατά την προθέρμανση της τροφοδοσίας μονοξείδιο του άνθρακα μετατρέπεται σε διοξείδιο. Στη συνέχεια οδηγείται στην κάμινο αντίδρασης όπου γίνεται η μετατροπή με τη βοήθεια καταλύτη νικελίου (Ni). Η θερμοκρασία αντίδρασης είναι 760 με 780°C. το προϊόν της αντίδρασης καθαρίζεται από το διοξείδιο του άνθρακα και μεθάνιο σε στήλη απορρόφησης. Το μεθάνιο διαχωρίζεται από το διοξείδιο του άνθρακα και χρησιμοποιείται σαν καύσιμο στην κάμινο. Στο σχήμα 24 φαίνεται μια μονάδα παραγωγής υδρογόνου από σχάση ελαφρών υδρογονανθράκων.



Σχήμα 24: Τυπικό διάγραμμα μονάδας παραγωγής υδρογόνου. [1]

1.4.3 Τελικές κατεργασίες

Οι τελικές κατεργασίες είναι αυτές που έχουν σαν στόχο την παρουσίαση του έτοιμου τελικού προϊόντος στην αγορά. Η σημαντικότερη από αυτές τις διεργασίες είναι η ανάμιξη, μέσω της οποίας αναμιγνύονται συστατικά διαφορετικών μεταξύ τους ιδιοτήτων με σκοπό την παραγωγή ενός προϊόντος που θα ικανοποιεί τις προδιαγραφές της αγοράς.

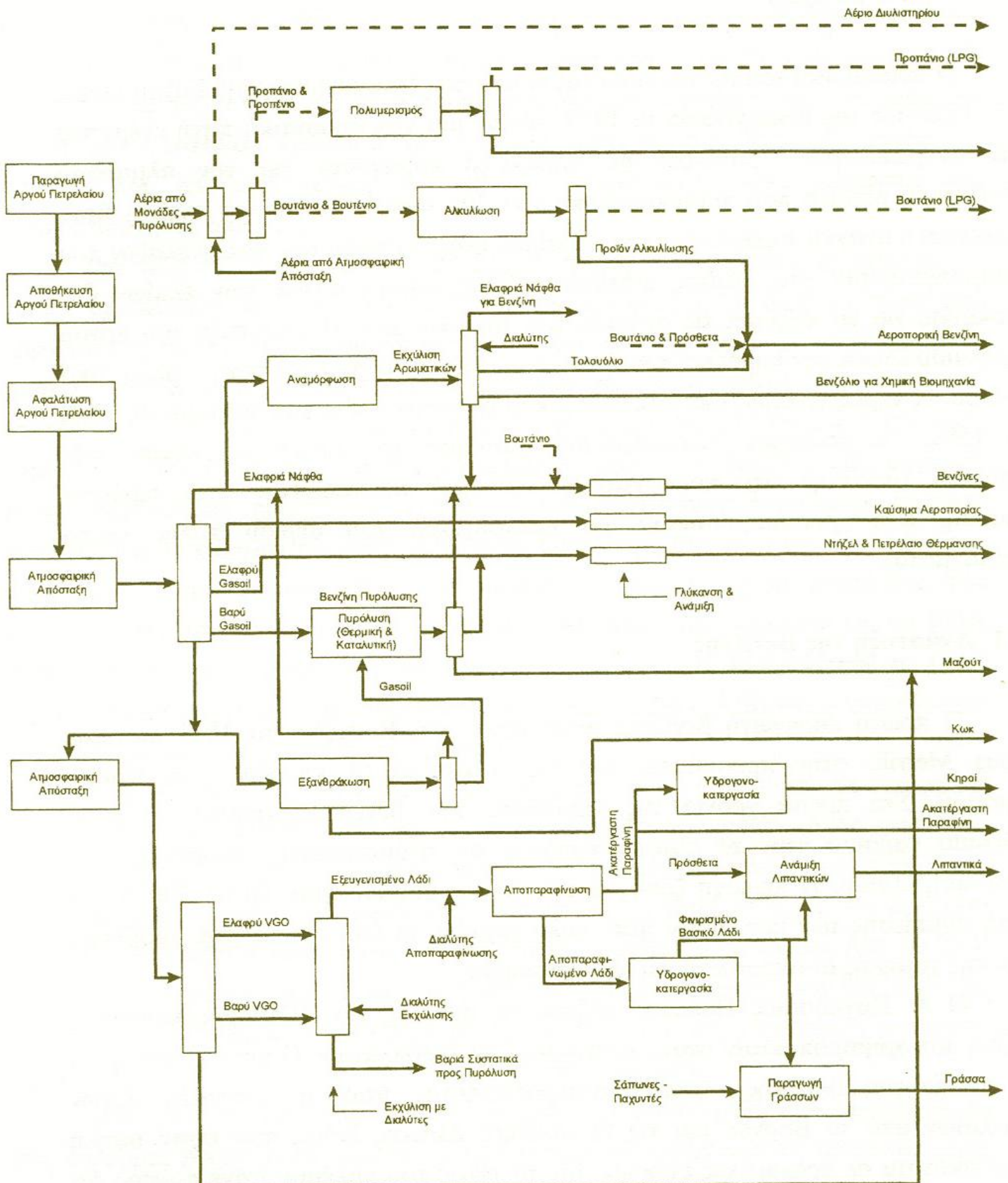
1.4.3.1 Ανάμιξη

Η παραγωγή ενός τελικού προϊόντος απαιτεί συνήθως την ανάμιξη δύο τουλάχιστον συστατικών. Η διεργασία ανάμιξης δεν είναι απλή υπόθεση, καθώς οι περισσότερες από τις βασικές ιδιότητες των καυσίμων δεν ακολουθούν γραμμικές σχέσεις ανάμιξης. Η πολυπλοκότητα της ανάμιξης αυξάνει με την ύπαρξη μονάδων μετατροπής και με την επεξεργασία πολλών τύπων αργού πετρελαίου. Η χρήση οξυγονούχων συστατικών σε συνδυασμό με την ύπαρξη ποικιλίας προϊόντων από διεργασίες μετατροπής κάνει αρκετά πολύπλοκο το πρόβλημα της ανάμιξης. Θα πρέπει να υπάρχει συμβατότητα μεταξύ των συστατικών που αναμιγνύονται και να παρασκευαστεί ένα προϊόν που θα έχει σταθερές ιδιότητες. Με δεδομένη την υψηλότερη τιμή των αεριωθούμενων καυσίμων, γίνεται εύκολα αντιληπτό ότι τα διυλιστήρια επιδιώκουν την μεγιστοποίηση παραγωγής κηροζίνης σε βάρος του gasoil. Έτσι, η ζήτηση ντίζελ θα πρέπει να ικανοποιηθεί με αυξημένη χρήση προϊόντων πυρόλυσης.

Οι περιορισμοί που τίθενται για τη σύσταση των τελικών μιγμάτων είναι οι ισχύουσες προδιαγραφές της αγοράς, ο απαιτούμενος όγκος τελικού προϊόντος και η ποσότητα και ποιότητα των διαθέσιμων συστατικών ανάμιξης. Η τιμή κάθε προϊόντος αποτελεί μια πολύ σημαντική παράμετρο, καθώς επιζητείται πάντα η παραγωγή προϊόντος με το χαμηλότερο δυνατό κόστος και την υψηλότερη δυνατή τελική τιμή.

Ο προγραμματισμός της ανάμιξης γίνεται ακόμη πιο σύνθετος αν συνυπολογιστεί η δυνατότητα χρήσης κάποιων συστατικών σε δύο ή περισσότερα τελικά προϊόντα. Η χρήση ηλεκτρονικών υπολογιστών και προγραμμάτων γραμμικού προγραμματισμού έχουν βοηθήσει σημαντικά σε αυτήν την κατεύθυνση. Η χρήση νέων μεθόδων μη γραμμικού προγραμματισμού έχει επιδείξει εντυπωσιακά αποτελέσματα. Η προσπάθεια για βελτίωση του προγραμματισμού ανάμιξης συνεχίζεται στην κατεύθυνση της άμεσης σύνδεσης του προγράμματος ανάμιξης με τα δεδομένα των μονάδων ελέγχου του διυλιστηρίου και των

δεδομένων ποιοτικής ανάλυσης των προϊόντων. Στο σχήμα 25 δίνεται ένα γενικευμένο διάγραμμα ενός διυλιστηρίου.



Σχήμα 25: Γενικευμένο διάγραμμα ενός σύνθετου διυλιστηρίου. [1]

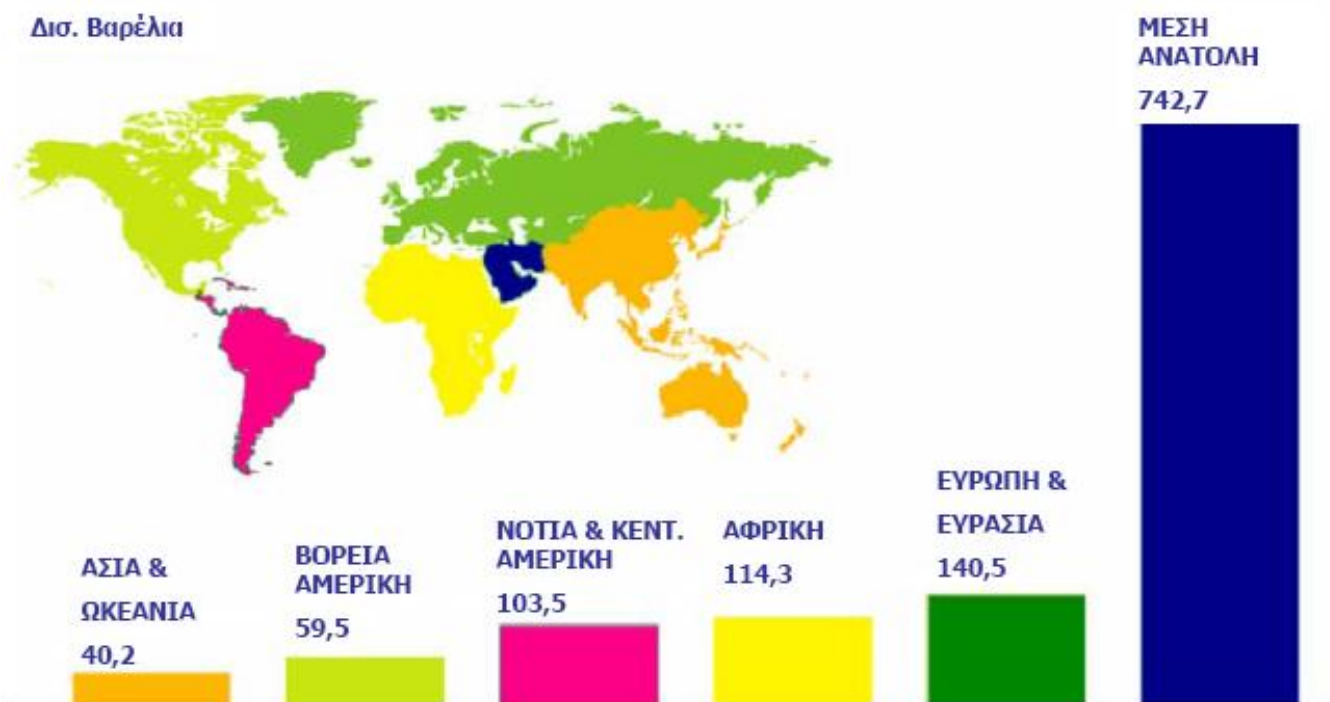
1.5 Οικονομικά στοιχεία

Οι τιμές του πετρελαίου ανήλθαν σε ιστορικά επίπεδα από την εποχή του Κόλπου. Η αύξηση αυτή των τιμών του πετρελαίου παρατηρείται από τις αρχές του 1999 και έδωσε την αφορμή για διάλογο, ο οποίος περιλαμβάνει τις τρεις συνιστώσες των τιμών κατανάλωσης με τις οποίες επιβαρύνεται ο Ευρωπαίος καταναλωτής: 1) την τιμή του αργού πετρελαίου, 2) τα περιθώρια διύλισης και διανομής και 3) τη φορολογία των πετρελαϊκών προϊόντων. Η σημαντική αυτή αύξηση των τιμών οφείλεται σαφώς στο επίπεδο της αγοράς του αργού πετρελαίου. [8]

Η τιμή του πετρελαίου καθορίζεται από διάφορους παράγοντες. Αυτοί είναι:

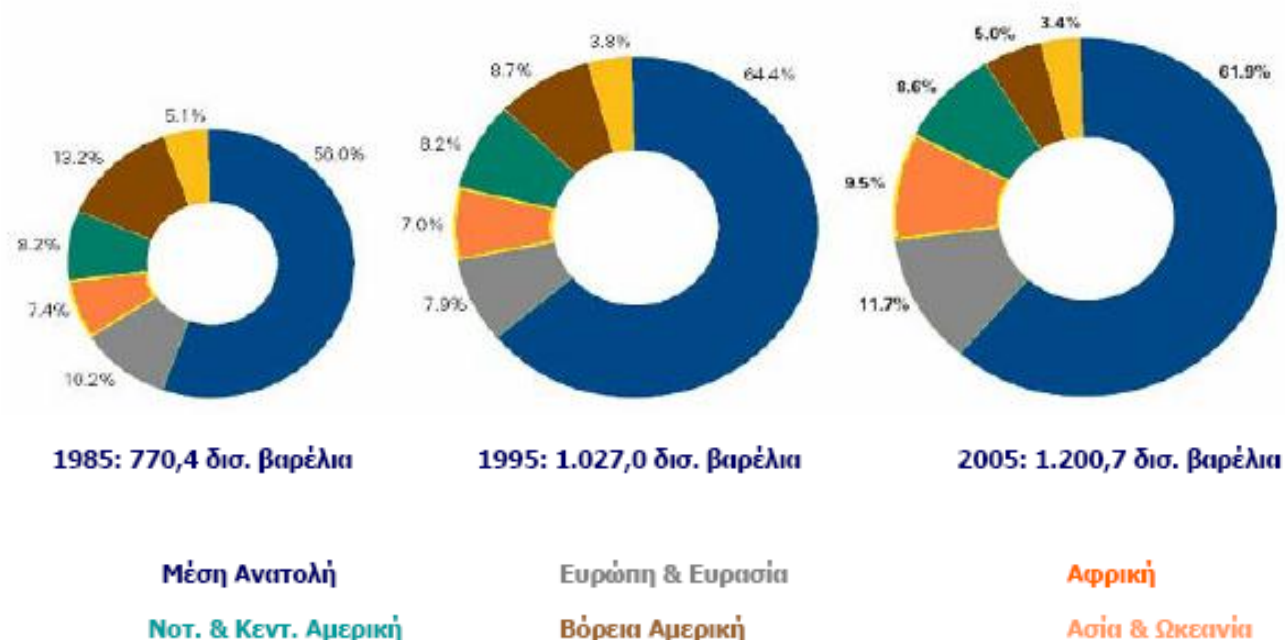
- Πορεία παραγωγής και αποθεμάτων
- Εξέλιξη αναπτυξιακών ρυθμών παγκόσμιας οικονομίας
- Γεωπολιτικά γεγονότα
- Προβλήματα στην ομαλή ροή πετρελαίου
- Καιρικές συνθήκες και εποχικότητα
- Υποκατάστατα προϊόντα ενέργειας
- Θέσεις κερδοσκοπικών κεφαλαίων
- Έκτακτα γεγονότα
- Η παγκόσμια προσφορά και ζήτηση αποτελούσε διαχρονικά τον κυριότερο παράγοντα διαμόρφωσης της τιμής
- Η Ρωσία και οι υπόλοιπες χώρες της πρώην Σοβιετικής Δημοκρατίας εγείρονται ως νέοι ρυθμιστικοί παράγοντες
- Η ζήτηση ενεργειακών πηγών από χώρες όπως η Κίνα και η Ινδία αποτελεί τα τελευταία χρόνια καθοριστικό παράγοντα από την πλευρά της ζήτησης

Τα επιβεβαιωμένα αποθέματα του πετρελαίου φαίνονται στο σχήμα 26 που ακολουθεί.



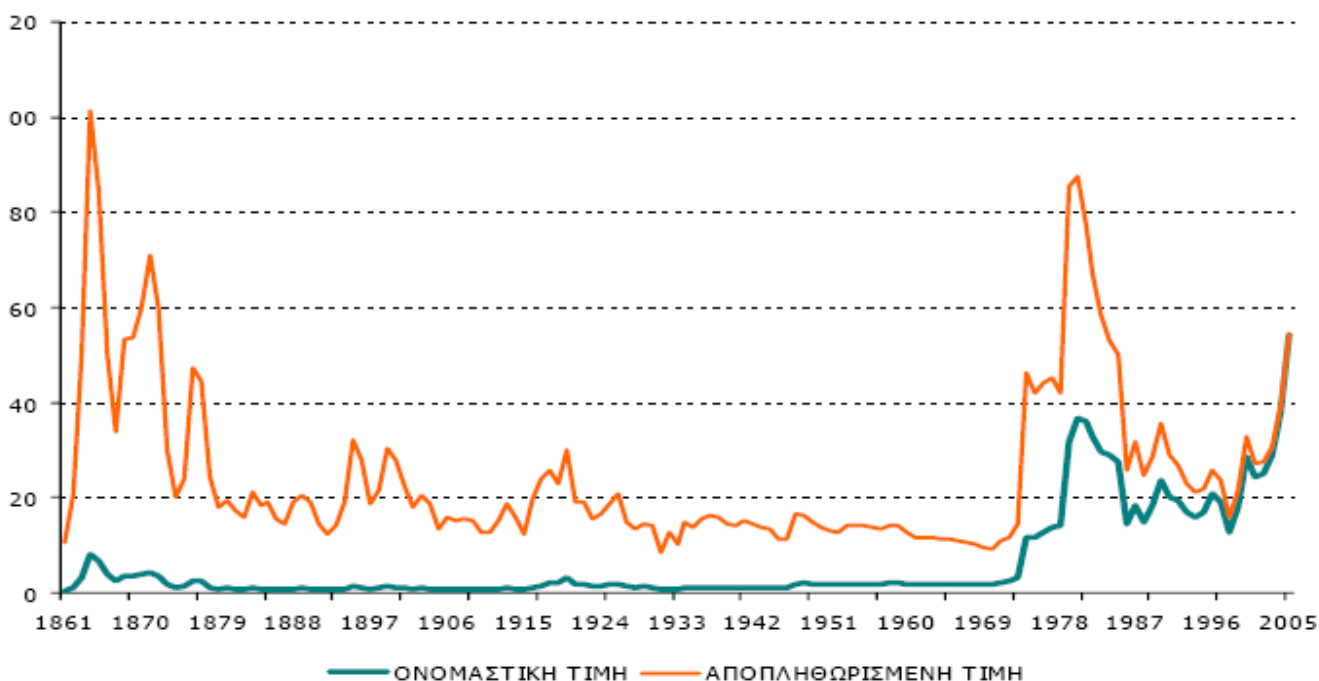
Σχήμα 26: Επιβεβαιωμένα αποθέματα πετρελαίου.

Η διάρθρωση των αποθεμάτων του πετρελαίου για τα έτη 1985, 1995 και 2005 στις διάφορες περιοχές της γης φαίνεται στο σχήμα 27.



Σχήμα 27: Διάρθρωση αποθεμάτων πετρελαίου.

Η εξέλιξη της τιμής του πετρελαίου από το 1860 έως το 2005 φαίνεται στο γράφημα που ακολουθεί, σχήμα 28.



Πηγή: BP 2006

1950-1983, Arabian Light, 1984-2004: Crude West Texas Intermediate

Σχήμα 28: Εξέλιξη τιμής πετρελαίου 1860- 2005, μηνιαία μεταβολή. [9]

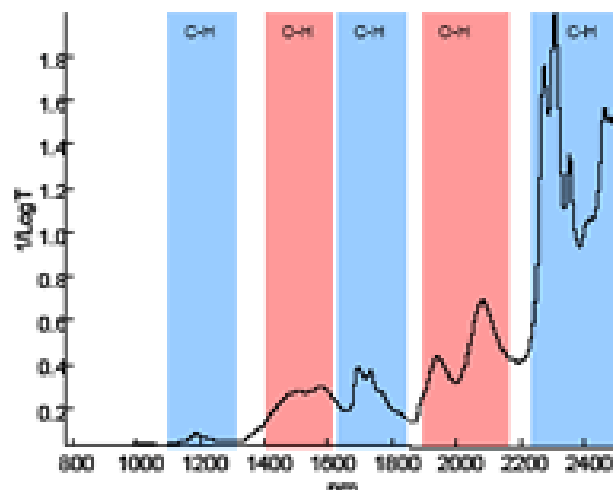
Όσον αφορά τώρα τις τελευταίες εξελίξεις οι τιμές του αργού πετρελαίου κυμαίνονται γύρω στα 139 δολ. / βαρέλι, ενώ παράλληλα οι τιμές των καυσίμων συνέχισαν την ανοδική τους πορεία (τιμή της αμόλυβδης 1,318€/L) .[10]

Σύμφωνα με τις τελευταίες πανελλαδικές μετρήσεις τιμών του υπουργείου Ανάπτυξης (ΥΠΑΝ) σε 2.300 περίπου πρατήρια, η μέση τιμή της αμόλυβδης βενζίνης, διαμορφώθηκε στις 14 Σεπτεμβρίου 2008 στα 1,023 ευρώ ανά λίτρο σημειώνοντας, δηλαδή, αύξηση κατά 0,2% από τα 1,021 ευρώ ανά λίτρο στις 7 Σεπτεμβρίου.

Συγκριτικά μπορεί να σημειωθεί ότι από τις αρχές του 2004, η διεθνής τιμή της βενζίνης έχει συνολικά αυξηθεί κατά 133,56%, η τιμή της αμόλυβδης έχει συνολικά αυξηθεί κατά 39,95%, ενώ στο ίδιο διάστημα η τιμή του πετρελαίου αυξήθηκε κατά 149,94%. [10]

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: «Χημειομετρία»

Η Χημειομετρία είναι μία στατιστική τεχνική που συσχετίζει ευθέως μέσα από μοντέλα, χαρακτηριστικά ποιότητας ή φυσικοχημικές ιδιότητες με αναλυτικά στοιχεία που δημιουργούνται από όργανα όπως φασματογράφους κατά την διάρκεια παραγωγής σε βιομηχανίες τροφίμων και φαρμάκων. Η ανάπτυξη μοντέλων βασίζεται σε δεδομένα αντιπροσωπευτικά της ποιότητας και των χαρακτηριστικών των παραγομένων προϊόντων. Εφαρμογή τέτοιων μοντέλων πάνω σε νέα αναλυτικά στοιχεία με σκοπό την πρόβλεψη (prediction) και κατηγοριοποίηση (classification) της ποιότητας, γίνεται υπόθεση ρουτίνας. Η χημειομετρική προσέγγιση επιτυγχάνει άμεση και αποτελεσματική εκτίμηση της ποιότητας, αυτοματοποιημένο ποιοτικό έλεγχο και αποδοτικές εργαστηριακές πρακτικές. Οι μόνες απαιτήσεις που υπάρχουν είναι η χρήση καταλλήλου οργάνου καθώς και λογισμικού για ερμηνεία των αναλυτικών στοιχείων.



Η χρήση μεθόδων Χημειομετρίας για έλεγχο ποιότητας τροφίμων και φαρμάκων επιτυγχάνει μεταξύ άλλων και τα παρακάτω:

- Πιο περιεκτική παρακολούθηση της ποιότητας προϊόντων και των αλλαγών σε διεργασίες παραγωγής
- Έλεγχο ποιότητας και αυθεντικότητας πρώτων υλών και πιστοποίηση της γεωγραφικής τους προέλευσης με χρήση μεθόδων ρουτίνας
- Αποτελεσματική ανίχνευση νοθείας, μόλυνσης και αντικατάστασης προϊόντων.
- Χρήση αναλυτικών οργάνων αντί μεθόδων οργανοληπτικής ανάλυσης.[11]

2.1. Ανάλυση Σημαντικών παραμέτρων (Principal Component Analysis, PCA)

2.1.1. Ιστορικό της PCA - εφαρμογές

Η PCA αναπτύχθηκε από κοινωνικούς επιστήμονες στις αρχές του 1930. Παρόλο που η μέθοδος ήταν ιδανική για τη λύση χημικών προβλημάτων, άρχισε να εφαρμόζεται από τους χημικούς επιστήμονες το 1970.

Οι πρώτες περιγραφές της PCA έγιναν από τον Pearson το 1901 και τον Hotelling το 1933. Η έλλειψη των ηλεκτρονικών υπολογιστών την εποχή εκείνη, άφησαν τις μεθόδους ανεκμετάλλευτες και αδύνατες να εφαρμοστούν, αφού απαιτούσαν μεγάλο αριθμό πράξεων. Την δεκαετία του 60 με την εισαγωγή των Η/Υ η PCA μπόρεσε να εφαρμοστεί και να γίνει έρευνα στην ερμηνεία των αποτελεσμάτων της. Το 1970 άρχισε να εφαρμόζεται και σε χημικά δεδομένα οπότε και γεννήθηκε το πεδίο της χημειομετρίας.

Η PCA σαν πολυμεταβλητή μέθοδος ανάλυσης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ποικίλα δεδομένα. Χρησιμοποιείται σαν μόνο ή και πρώτο στάδιο για την ανάλυση δεδομένων πολλών μεταβλητών. Εφαρμόζεται γενικά:

- Για μείωση του αριθμού και του όγκου δεδομένων χωρίς να χαθεί η πληροφοριακή αξία.
- Για ανάλυση πολύπλοκων μιγμάτων.
- Για ταξινόμηση μετρήσεων σε ομάδες.
- Για συσχέτιση μετρήσεων διαφορετικών μεθόδων στο ίδιο αντικείμενο.

[12], [13], [14]

2.1.2. Σκοπός της PCA

Ο βασικός σκοπός της PCA είναι να μειώσει τις διαστάσεις ενός σετ δεδομένων που αποτελείται από μεγάλο αριθμό αλληλοεξαρτώμενων μεταβλητών, ενώ θα συγκρατεί την μέγιστη δυνατή διασπορά τους. Αυτό μπορεί να γίνει με μετασχηματισμό δεδομένων σε μια καινούργια ομάδα μεταβλητών, τους βασικούς παράγοντες (PC, Principal Components), οι οποίοι δεν συσχετίζονται μεταξύ τους και ταξινομούνται έτσι ώστε οι πρώτοι PCs να έχουν την περισσότερη διασπορά από το σύνολο. [12], [14]

2.1.3. Συνοπτική παρουσίαση της μεθόδου PCA

Η ανάλυση εφαρμόζεται σε πίνακα δεδομένων X , ο οποίος έχει διαστάσεις $n \times p$, όπου n ο αριθμός των δειγμάτων και p ο αριθμός των μεταβλητών – ιδιοτήτων κάθε δείγματος. Ο στόχος της ανάλυσης, όπως έχει ήδη αναφερθεί, είναι να αναδείξει σχέσεις ανάμεσα στα δείγματα και αλληλοεξαρτήσεις μεταξύ των ιδιοτήτων τους, οι οποίες δεν είναι προφανείς με την απλή παρατήρηση των δεδομένων ή με τη χρήση στατιστικών μεθόδων μιας μεταβλητής. (univariate).

Η PCA είναι μια μέθοδος η οποία ουσιαστικά προβάλλει τα δείγματα σε επίπεδα απλοποιώντας έτσι την απεικόνιση τους από τον χώρο των p -διαστάσεων στον οικείο αναλυτή χώρο των 2 ή 3 διαστάσεων. Η PCA δίνει τη δυνατότητα να προσδιορισθεί η ομοιότητα μεταξύ δειγμάτων και οι μεταβλητές (ιδιότητες) που καθορίζουν την ομοιότητα αυτή. Επίσης βοηθά στην απομόνωση του «πειραματικού θορύβου» από τα δεδομένα, αναδεικνύοντας τις συσχετίσεις που υπάρχουν.

Μαθηματικά η μέθοδος PCA υλοποιείται με την ανάλυση του αρχικού πίνακα δεδομένων X σε δυο επιμέρους πίνακες T , P και έναν πίνακα που περιέχει το σφάλμα, δηλαδή την πληροφορία η οποία δεν μπορεί να μοντελοποιηθεί.

$$X = T * P^T + E$$

Ανεξάρτητα από το μαθηματικό υπόβαθρο της μεθόδου θα παρουσιαστεί παρακάτω η γεωμετρική διάσταση της. Ένα δείγμα, για το οποίο είναι διαθέσιμες οι τιμές τριών ιδιοτήτων όταν απεικονιστεί σε ένα χώρο τριών διαστάσεων (x,y,z) με την κάθε διάσταση να αντιστοιχεί σε μια ιδιότητα ορίζοντας ένα σημείο.

Εάν στον ίδιο χώρο οριστούν τα σημεία διαφορετικών δειγμάτων είναι προφανές ότι η σχετική θέση των σημείων μεταξύ τους δίνει το μέτρο της ομοιότητας τους. Όμοια σε ένα χώρο p -διαστάσεων η θέση κάθε δείγματος ως προς τα υπόλοιπα είναι χαρακτηριστική. Η ουσία της μεθόδου βρίσκεται στο ότι προσδιορίζει τις διευθύνσεις στο n -διάστατο χώρο, κατά τις οποίες η απόσταση των σημείων είναι η μέγιστη. Έτσι αναδεικνύεται μια βασική ταξινόμηση των δειγμάτων στο χώρο.

Οι διευθύνσεις που ορίζονται είναι κάθετες μεταξύ τους και είναι τόσες όσες και οι μεταβλητές – ιδιότητες των δειγμάτων. Μια ακόμη σημαντική ιδιότητα των αξόνων είναι ότι η μεταβλητότητα που περιγράφουν φθίνει κατά σειρά. Επομένως μπορεί κανείς να επιλέξει τον αριθμό των PCs, που είναι απαραίτητος, για να περιγραφεί ένα δείγμα ή ένα φαινόμενο χωρίς να χρησιμοποιηθεί μεγάλος αρχικός όγκος δεδομένων.

Η συμμεταβλητότητα (covariance) μεταξύ δύο μεταβλητών x_1 και y_1 είναι το μέτρο της ύπαρξης γραμμικής σχέσης μεταξύ τους.

$$\text{cov}(x, y) = \sum_i^n \frac{(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n - 1}$$

Εάν μεγάλες τιμές της μεταβλητής x συνοδεύονται από μικρές τιμές της y και το αντίστροφο, τότε η συμμεταβλητότητα είναι αρνητική. Μεγάλες συμμεταβλητότητες (κατ' απόλυτη τιμή) μαρτυρούν ισχυρή αλληλοεξάρτηση μεταξύ των μεταβλητών. Επειδή όμως το μέγεθος της συμμεταβλητότητας δεν μπορεί να εκτιμηθεί κατ' ευθείαν, αντί γι' αυτό χρησιμοποιείται το μέγεθος συσχέτιση (correlation). Η συσχέτιση μεταξύ δύο μεταβλητών ορίζεται ως το πηλίκο της συμμεταβλητότητας προς το γινόμενο των τυπικών αποκλίσεων τους. Είναι αδιάστατο μέγεθος.

$$r = \frac{\text{cov}(x, y)}{G_x * G_y}$$

Συνήθως χρησιμοποιείται ως r^2 . Τιμές του συντελεστή r ίσες με το μηδέν υποδηλώνουν πλήρη ανυπαρξία συσχέτισης ανάμεσα στις μεταβλητές. Αντίθετα τιμές που προσεγγίζουν το +1 ή το -1 υποδηλώνουν ισχυρή γραμμική συσχέτιση θετική ή αρνητική αντίστοιχα ανάμεσα στις μεταβλητές. [15], [16], [17]

2.1.4. Μαθηματική περιγραφή της PCA

Πριν την εφαρμογή της PCA τα δεδομένα μπορούν να υποστούν κάποια προεπεξεργασία. Η ανάλυση με PCA ξεκινά υπολογίζοντας τον πίνακα συνδιακύμανσης (covariance matrix). Εάν D είναι ο πίνακας δεδομένων με r γραμμές και c στήλες τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης βρίσκεται όταν πολλαπλασιάσουμε τον ανάστροφο του D με τον D :

$$Z = D^T D$$

Παρόλο που δεν είναι απαραίτητο ο D να είναι τετραγωνικός πίνακας ο πίνακας συνδιακύμανσης έχει πάντα μέγεθος $c \times c$. Εάν πολλαπλασιάσουμε τον D με τον ανάστροφό του D^T δηλαδή

$$Z = DD^T,$$

τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης έχει μέγεθος $r \times r$.

Ο επεξεργασμένος τώρα πίνακας Z διαγωνιοποιείται βρίσκοντας ένα πίνακα Q τέτοιον ώστε:

$$Q^{-1}ZQ = [\lambda_j \delta_{jk}] = \Lambda$$

Όπου δ_{jk} είναι το γνωστό δέλτα του Kronecker :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ 1, & j = k \end{cases}$$

Και λ_j είναι μια ιδιοτιμή του συνόλου των εξισώσεων:

$$Zq_j = \lambda_j q_j$$

όπου q_j είναι j-οστή στήλη του πίνακα Q. Αυτές οι στήλες λέγονται ιδιοδιανύσματα και αποτελούν ένα αμοιβαίως ορθοκανονικό σύνολο. Έτσι

$$Q^{-1} = Q^T$$

Ο αντίστροφος του πίνακα Q ισούται με τον ανάστροφο του. Δεδομένου του πίνακα D πρέπει να βρεθούν πίνακες R και C τέτοιοι ώστε:

$$D = RC \quad (1)$$

Συνεχίζοντας θα αποδειχθεί ότι ο Q^T είναι όμοιος με τον πίνακα C:

$$Q^{-1}ZQ = Q^{-1}(D^T D)Q = (Q^T D^T)DQ = P^T P$$

όπου $P = DQ$ (2). Λύνοντας την ως προς D παίρνουμε:

$$D = PQ^T \quad (3)$$

Συγκρίνοντας την (1) και (3) προκύπτει ότι:

$$Q^T = C$$

$$\text{και } P=R. \quad (4)$$

Έτσι ο ανάστροφος του πίνακα που διαγωνοποιεί τον πίνακα συνδιακύμανσης, παριστάνει τον πίνακα C. Αφού κάθε γραμμή του πίνακα είναι ένα ιδιοδιάνυσμα, ο πίνακας λέγεται γενικά πίνακας ιδιοδιανυσμάτων. Επιπλέον, επειδή τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθοκανονικά ισχύει:

$$C^{-1} = C^T$$

Ο πίνακας γραμμών R μπορεί να υπολογιστεί από τις (2) και (4). Τελικά ο πίνακας δεδομένων D μπορεί να αναπαραχθεί από τους πίνακες R και C.

Γενικά δεν χρειάζονται όλα τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα Q. Το μέγεθος της ιδιοτιμής υποδεικνύει πόσο σημαντικό είναι το ιδιοδιάνυσμα και πόση διασπορά εξηγεί. Τα ιδιοδιανύσματα με τις μεγαλύτερες ιδιοτιμές είναι τα πιο σημαντικά, ενώ ιδιοδιανύσματα με πολύ μικρές ιδιοτιμές μπορούν να θεωρηθούν αμελητέα, ανάλογα με την περίπτωση και δεν χρησιμοποιούνται στην ανάλυση. Έτσι επιτυγχάνεται συμπίεση των παραγόντων.

Για μια πρώτη δοκιμή της λύσεως, ο πίνακας δεδομένων ξαναυπολογίζεται χρησιμοποιώντας μόνο το πιο σημαντικό ιδιοδιάνυσμα q_1 , το οποίο συνδέεται με τη μεγαλύτερη ιδιοτιμή λ_1 ($c_1=q_1$). Παίρνοντας το γινόμενο του c_1^T με το r_1 προκύπτει ένας ξαναυπολογισμένος πίνακας δεδομένων που συγκρίνεται με τον πρωτότυπο πίνακα δεδομένων. Εάν η διαφορά είναι εντός μιας περιοχής αποδεκτού σφάλματος, τότε μόνο ένας παράγοντας είναι σημαντικός. Αν όχι, τότε γίνεται μια δεύτερη δοκιμή χρησιμοποιώντας τα πρώτα δύο πιο σημαντικά ιδιοδιανύσματα (που συνδέονται με τις δύο μεγαλύτερες ιδιοτιμές λ_1 και λ_2) έχοντας έτσι:

$$R = [r_1 \ r_2]$$

$$\text{Και } C = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

Ξαναγίνεται έλεγχος κατά πόσο τα αναπαραγόμενα δεδομένα αντιπροσωπεύουν επαρκώς τα αρχικά δεδομένα. Με αυτό τον τρόπο προστίθενται ιδιοδιανύσματα που συνδέονται με τις μεγαλύτερες ιδιοτιμές μέχρι που τα αρχικά δεδομένα να αναπαραχθούν επαρκώς:

$$[r_1 \ r_2 \ \dots \ r_n] \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \overline{RC} = \overline{D} \cong D$$

Σημειώνεται ότι στη μορφή που είναι οι πίνακες R και C παριστάνουν μαθηματικές λύσεις στο πρόβλημα, αλλά δεν είναι ερμηνεύσιμοι σαν φυσικές ή χημικές ποσότητες. Παρόλα αυτά και στη μορφή που βρίσκονται αυτοί οι παράγοντες περιέχουν χρήσιμες πληροφορίες.

Έτσι επιδιώκεται ο μετασχηματισμός των πινάκων R και C που προκύπτουν από την PCA σε R_1 , C_1 ούτως ώστε να αποκτήσουν και χημική υπόσταση μέσω κατάλληλων πράξεων πινάκων (λύση μέσω της γραμμικής άλγεβρας) ή περιστροφή των αρχικών αξόνων (γεωμετρική λύση) κατά κατάλληλες γωνίες. [12], [18]

2.1.5. PCA για clustering

Στην πρακτική ενός αναλυτικού εργαστηρίου ή σε ένα τμήμα ποιοτικού ελέγχου μιας βιομηχανικής μονάδας είναι συνηθισμένο να χαρακτηρίζονται πληθυσμοί δειγμάτων χρησιμοποιώντας ένα μεγάλο αριθμό μετρήσεων – δοκιμών. Έτσι δημιουργείται ένα πολυπαραμετρικό σετ δεδομένων. Συχνά τα δείγματα αυτά πρέπει να χωριστούν σε επιμέρους ομάδες για ερευνητικούς ή άλλους λόγους με βάση τις τιμές των ιδιοτήτων τους. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να εντοπιστούν υποσύνολα ομοίων δειγμάτων και να προσδιοριστούν οι περιοχές των τιμών των ιδιοτήτων που αντιστοιχούν σε καθένα από αυτά τα υποσύνολα.

Χρησιμοποιώντας μόνο επιμέρους ιδιότητες το σύνολο των δειγμάτων θα μπορούσε να χωριστεί σε υποσύνολα με μία απλή επισκόπηση των αριθμητικών τιμών ή με κάποια γραφική παράσταση ή τέλος θέτοντας όρια στις τιμές της συγκεκριμένης ιδιότητας για το κάθε υποσύνολο. Η προσέγγιση αυτή θα οδηγήσει πιθανότατα σε αντιφατικά αποτελέσματα δεδομένου ότι η κατηγοριοποίηση θα είναι διαφορετική ανάλογα με τη μεταβλητή – ιδιότητα η οποία χρησιμοποιείται. Επομένως με τον τρόπο αυτό δεν θα αναδειχθούν οι πραγματικές διαφορές μεταξύ των δειγμάτων του πληθυσμού που μελετάτε. Το ζητούμενο λοιπόν είναι να προσδιορισθούν τα τυχόν υποσύνολα ομοίων δειγμάτων που υπάρχουν στον αρχικό πληθυσμό χρησιμοποιώντας ταυτόχρονα το σύνολο της διαθέσιμης πληροφορίας. Το πρόβλημα έχει ιδιαίτερη σημασία σε σύνθετα συστήματα (δείγματα, όπως στην περίπτωση μας όπου χρησιμοποιείται η ομαδοποίηση πετρελαϊκών δειγμάτων με βάση το φάσμα τους) που επηρεάζονται από πολλούς παράγοντες και των οποίων οι ιδιότητες είναι έντονα ασυσχέτιστες μεταξύ τους.

Οι πολυπαραμετρικές μέθοδοι (PCA) που εφαρμόζονται σε τέτοια προβλήματα έχουν στόχο:

- Τον προσδιορισμό υποσυνόλων ομοίων υποκειμένων (clusters) σε ένα σύνολο δειγμάτων
- Την κατάταξη ενός αγνώστου δείγματος σε κάποια από τις ήδη υφιστάμενες κατηγορίες.

Η λογική των μεθόδων προσδιορισμού υποσυνόλων (clusters) στο αρχικό σετ δεδομένων έγκειται στον συσχετισμό των δειγμάτων εκείνων που έχουν μεταξύ τους τις μικρότερες διαφορές. Έτσι κάθε υποσύνολο είναι μία σχετικά ομοιογενής ομάδα, με τις διαφορές ανάμεσα στα μέλη της να είναι μικρότερες από τις διαφορές των μελών της από τα δείγματα των άλλων ομάδων. Σε αντίθεση με άλλες στατιστικές τεχνικές σύγκρισης δειγμάτων, οι μέθοδοι αυτές δεν απαιτούν την εκ των προτέρων ύπαρξη κάποιας υπόθεσης η οποία ελέγχεται στατιστικά εάν ισχύει. Αποτελούν δηλαδή ένα εργαλείο στο διερευνητικό στάδιο ενός φαινομένου ή μιας σχέσης.

Μέχρι σήμερα έχει αναπτυχθεί ένας μεγάλος αριθμός αλγορίθμων οι οποίοι υλοποιούν τον πολυπαραμετρικό προσδιορισμό ομάδων και την κατάταξη δειγμάτων σε κατηγορίες οι οποίες διακρίνονται σε μεθόδους εποπτευόμενης και μη εποπτευόμενης εκπαίδευσης. Στην πρώτη κατηγορία ανήκουν οι μέθοδοι στις οποίες είναι εκ των προτέρων γνωστά τα σμήνη των δεδομένων στον συνολικό πληθυσμό και αναζητείται μία συνάρτηση η οποία θα περιγράψει την διαχωριστική γραμμή ή επιφάνεια μεταξύ τους. Χρησιμοποιώντας αυτή την συνάρτηση στη συνέχεια είναι δυνατόν να καταταχθεί ένα νέο άγνωστο δείγμα σε ένα από τα υφιστάμενα σμήνη.

Αντίθετα στις μη εποπτευόμενες μεθόδους είναι άγνωστα εκ των προτέρων τόσο η ύπαρξη όσο και ο αριθμός των σμηνών που μπορούν να εντοπιστούν στον συγκεκριμένο πληθυσμό δειγμάτων. Αυτά αναζητούνται με βάση τις αποστάσεις ή την ομοιότητα των δειγμάτων στον m - παραμετρικό χώρο. Οι μέθοδοι μη εποπτευόμενης ταξινόμησης διακρίνονται στις μεθόδους clustering και στις μεθόδους προβολής σε ένα χώρο μικρότερων διαστάσεων (projection). Οι μέθοδοι clustering διακρίνονται στις ιεραρχικές μεθόδους (hierarchical clustering) και στις μεθόδους βελτιστοποίησης διαχωρισμού (k-means clustering).

Γενικά στις ιεραρχικές μεθόδους (παραγρ. 2.1.5.1), ο πληθυσμός αρχικά ομαδοποιείται σε μικρά υποσύνολα του ενός ή δύο δειγμάτων. Τα σμήνη αυτά στη συνέχεια συνενώνονται σταδιακά μεταξύ τους με κριτήριο την μεγαλύτερη δυνατή ομοιότητα μεταξύ τους. Αντίθετα στις μεθόδους βελτιστοποίησης διαχωρισμού, όπως η k-means clustering (παραγρ. 2.1.5.3), η ομαδοποίηση γίνεται προσπαθώντας να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο, όπως η μεγιστοποίηση της συνολικής απόστασης ανάμεσα στα υποσύνολα των δειγμάτων. Περαιτέρω ανάλυση των μεθόδων αυτών γίνεται παρακάτω.

Ανεξάρτητα από το είδος της μεθόδου που χρησιμοποιείται, είναι απαραίτητος ο ορισμός των εννοιών της απόστασης (distance) και της ομοιότητας(similarity), δεδομένου ότι η κατάταξη σε σμήνη πραγματοποιείται στον πολυπαραμετρικό χώρο στη βάση της μικρότερης απόστασης ή της μεγαλύτερης ομοιότητας που υφίστανται ανάμεσα τους. Οι κυριότερες αποστάσεις που χρησιμοποιούνται σε αριθμητικές μεταβλητές είναι οι ακόλουθες.

Ένα γενικό μέτρο της απόστασης ανάμεσα στα δείγματα στον πολυπαραμετρικό χώρο είναι η απόσταση Minkowski, η οποία υπολογίζεται ανάμεσα σε δύο δείγματα i και j ως:

$$d_{ij} = \left[\sum |x_{im} - x_{jm}|^p \right]^{1/r}$$

όπου m είναι ο αριθμός των μεταβλητών.

Συνήθως χρησιμοποιείται η τιμή $p=2$ και $r=2$ και η απόσταση στην περίπτωση αυτή αναφέρεται ως Ευκλείδεια απόσταση. Έτσι για δύο δείγματα η Ευκλείδεια απόσταση είναι:

$$d_{12} = \left[(y_{11} - y_{21})^2 + (y_{12} - y_{22})^2 \right]^{1/2}$$

Η Ευκλείδεια απόσταση σε ένα δι- ή τρι-διάστατο χώρο είναι η πραγματική απόσταση ανάμεσα στα σημεία που αντιστοιχούν στα δείγματα. Βέβαια στον n -διάστατο χώρο η έννοια αυτή δεν έχει την συμβατική σημασία της απόστασης, αλλά είναι ενδεικτική της σχετικής θέσης των δειγμάτων μεταξύ τους. Μερικές φορές χρησιμοποιείται ως μέτρο της απόστασης το τετράγωνο της Ευκλείδειας απόστασης. Στην περίπτωση αυτή σταθμίζονται ισχυρότερα τα απομακρυσμένα δείγματα σε σχέση με εκείνα που βρίσκονται πλησίον.

Για $p=1$ η απόσταση αναφέρεται ως Manhattan ή city-block και είναι:

$$d_{ij} = \left[\sum_{m=1}^m |x_{im} - x_{jm}| \right]$$

Χρησιμοποιώντας τον υπολογισμό αυτό οι αποστάσεις των ακραίων δειγμάτων δεν αναδεικνύονται ιδιαίτερα.

Μία ακόμη έκφραση της απόστασης ανάμεσα στα δείγματα i και j στην οποία λαμβάνεται υπόψιν και η διασπορά των σημείων κάθε μεταβλητής είναι η απόσταση Pearson η οποία ορίζεται ως ένα μείον τον συντελεστή r (Pearson product moment correlation coefficient). Επίσης χρησιμοποιείται και η απόσταση Rsquared η οποία υπολογίζεται ως ένα μείον το r^2 .

Στις περιπτώσεις που είναι επιθυμητή η ανάδειξη της απόστασης ανάμεσα σε δείγματα τα οποία διαφέρουν ισχυρά τουλάχιστον σε μία ιδιότητα – μεταβλητή χρησιμοποιείται η απόσταση Chebychev

$$d_{ij} = \max |x_i - x_j|$$

Στις περιπτώσεις που είναι επιθυμητή η στάθμιση επιλεκτικά κάποιων μεταβλητών ή αντίστοιχα η ανάδειξη ή η υποβάθμιση των διαφορών ανάμεσα σε δείγματα οι παράμετροι r και γ στον τύπο υπολογισμού της απόστασης Minkowski μπορούν να ρυθμιστούν αντίστοιχα από τον αναλυτή.

Μία ακόμη απόσταση η οποία λαμβάνει υπόψιν της τόσο το μέγεθος των μεταβλητών όσο και τη συσχέτιση που υπάρχει μεταξύ τους είναι η απόσταση Mahalanobis. Το μέγεθος αυτό ορίζεται ως η απόσταση ενός σημείου σε ένα χώρο m διαστάσεων από το κέντρο βάρους του χώρου αυτού. Το κέντρο βάρους (centroid) ορίζεται ως το σημείο στον m -παραμετρικό χώρο που καθορίζεται από τους αριθμητικούς μέσους όρους των m μεταβλητών. Στην περίπτωση όπου όλες οι μεταβλητές είναι ασυσχέτιστες μεταξύ τους η απόσταση Mahalanobis ισούται με την Ευκλείδεια. Η απόσταση Mahalanobis υπολογίζεται ως:

$$d_{ij}^2 = (x_i - y_j)^T * C^{-1} * (y_i - y_j)$$

όπου C είναι ο πίνακας συνδιακύμανσης (covariance matrix) και Y_i, Y_j τα διανύσματα των στηλών για τα δείγματα i και j αντίστοιχα.

Εναλλακτικά των αποστάσεων στις μεθόδους ομαδοποίησης χρησιμοποιούνται και τα λεγόμενα μέτρα ομοιότητας. Το μέτρο ομοιότητας ορίζεται ως:

$$S_{ij} = 1 - \frac{d_{ij}}{d_{ij}(\max)}$$

όπου d_{ij} η απόσταση Minkowski για τα δείγματα i και j και $d_{ij}(\max)$ η μέγιστη απόσταση ανάμεσα στα δείγματα του σετ δεδομένων που μελετώνται. Προφανώς για όμοια δείγματα η ομοιότητα τείνει στο 0 ενώ για εντελώς διαφορετικά στο 1.[14], [16], [18], [19]

2.1.5.1. Ιεραρχική κατηγοριοποίηση (Hierarchical clustering)

Η ανάλυση σε ομάδες έχει σκοπό να διαχωρίσει το σύνολο του πληθυσμού σε φυσικές ομάδες, έτσι ώστε τα μέλη κάθε ομάδας να είναι όσο το δυνατό όμοια μεταξύ τους, ενώ τα μέλη διαφορετικών ομάδων να είναι όσο το δυνατό ανόμοια. Γεωμετρικά αυτό σημαίνει ότι δύο όμοιες παρατηρήσεις θα βρίσκονται σε γειτονικά σημεία, ενώ δύο ανόμοιες σε απομακρυσμένα σημεία.

Η πιο συνηθισμένη μέθοδος σχηματισμού των ομάδων, όπως έχει ήδη σημειωθεί είναι η ιεραρχική κατηγοριοποίηση η οποία χρησιμοποιεί δύο τεχνικές, τη συσσωρευτική ανάλυση σε ομάδες ή την επιμεριστική ανάλυση σε ομάδες. Στη συσσωρευτική ανάλυση, οι ομάδες σχηματίζονται με την ομαδοποίηση των παρατηρήσεων σε όλο και μεγαλύτερες ομάδες, έως ότου όλες οι παρατηρήσεις γίνουν μέλη μιας και μόνο ομάδας. Η επιμεριστική ανάλυση αρχίζει με όλες τις παρατηρήσεις ομαδοποιημένες σε μια ομάδα και τις επιμερίζει μέχρις ότου γίνουν τόσες ομάδες όσες και οι παρατηρήσεις. Η πιο συνηθισμένη τεχνική είναι η πρώτη.

Υπάρχουν πολλά κριτήρια που καθορίζουν ποιες παρατηρήσεις ή ομάδες πρέπει να συνδυαστούν σε κάθε στάδιο, και διαφέρουν στον τρόπο με τον οποίο εκτιμούν τις αποστάσεις μεταξύ των ομάδων στα διαδοχικά στάδια. Ανάλογα με το κριτήριο που χρησιμοποιείται μπορούμε να καταλήξουμε σε διαφορετικές κάθε φορά ομαδοποιήσεις. Όλα τα κριτήρια στηρίζονται σε πίνακα αποστάσεων μεταξύ ζευγών των παρατηρήσεων. Δηλαδή σύμφωνα με τη μεθοδολογία της ιεραρχικής κατηγοριοποίησης τα δείγματα ενός πληθυσμού κατατάσσονται σε ομάδες (συστάδες, σμήνη) ανάλογα με την απόσταση ή την ομοιότητα που υφίστανται μεταξύ τους. Η διαδικασία της κατηγοριοποίησης ξεκινά θεωρώντας κάθε δείγμα ως ένα ανεξάρτητο σμήνος και υπολογίζοντας τις αποστάσεις κάθε σημείου από όλα τα άλλα. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιοσδήποτε από τους τρόπους υπολογισμού της απόστασης, οι οποίοι έχουν αναφερθεί παραπάνω. Πρέπει να σημειωθεί ότι η επιλογή γίνεται ανάλογα με την φύση των δεδομένων και τον στόχο της ανάλυσης. Στη συνέχεια τα δύο πλησιέστερα δείγματα, δηλαδή αυτά που εμφανίζουν τη μικρότερη απόσταση θεωρούνται ως ένα σμήνος με μηδενική απόσταση μεταξύ τους και υπολογίζονται οι αποστάσεις όλων των υπολοίπων δειγμάτων από το πρώτο σμήνος χρησιμοποιώντας τις αποστάσεις που υπολογίστηκαν στο προηγούμενο στάδιο. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται μέχρι την εξάντληση όλων των δειγμάτων του πληθυσμού.

Τα κριτήρια που καθορίζουν ποιες παρατηρήσεις ή ομάδες πρέπει να συνδυαστούν σε κάθε στάδιο είναι τα ακόλουθα:

1. **Κριτήριο εγγύτερου γείτονα** (nearest neighbour). Με αυτό συνδυάζονται οι δύο πρώτες παρατηρήσεις που έχουν την μικρότερη απόσταση μεταξύ τους. Υπολογίζεται στη συνέχεια η μικρότερη απόσταση μεταξύ μιας παρατήρησης στη νέα ομάδα και μιας άλλης εξατομικευμένης παρατήρησης. Σε κάθε στάδιο η απόσταση μεταξύ δύο ομάδων θεωρείται η απόσταση μεταξύ των εγγύτερων σημείων τους.
2. **Κριτήριο απώτερου γείτονα** (farthest neighbour). Ίδια λογική με την προηγούμενη με την διαφορά ότι η απόσταση μεταξύ των ομάδων υπολογίζεται ως αυτή των μακρύτερων σημείων τους.
3. **Κριτήριο μέσου δεσμού**. Ορίζει την απόσταση μεταξύ δύο ομάδων ως τη μέση τιμή των αποστάσεων μεταξύ όλων των ζευγών των παρατηρήσεων, όπου ένα μέλος ζεύγους προέρχεται από καθεμιά από τις ομάδες.

Είναι γνωστό ότι στην ανάλυση σε ομάδες δεν υπάρχει η δυνατότητα στατιστικών ελέγχων. Επίσης η ομαδοποίηση εξαρτάται πολλές φορές από το κριτήριο ομαδοποίησης. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης φαίνονται από το συσσωρευτικό σχέδιο και το δενδρόγραμμα, το οποίο και παρουσιάζεται αναλυτικότερα παρακάτω (παραγρ. 2.1.5.2).

Το συσσωρευτικό σχέδιο είναι ένας πίνακας όπου η πρώτη σειρά αφορά το πρώτο στάδιο, η δεύτερη το δεύτερο στάδιο κτλ. μέχρι τον αριθμό των διαφορετικών επιλογών. Επίσης φαίνονται σε στήλη συντελεστές που αφορούν το τετράγωνο της ευκλείδιας απόστασης των αντίστοιχων παρατηρήσεων του σταδίου. Οι πληροφορίες που υπάρχουν στο συσσωρευτικό σχέδιο αποτυπώνονται στο δενδρόγραμμα με τις αποστάσεις-συντελεστές να επανακλιμακώνονται σε κλίμακα εύρους 0-25. Σε αυτό οι κάθετες γραμμές δηλώνουν συνδυασμούς ομάδων παρατηρήσεων, ενώ το μήκος κάθε γραμμής δηλώνει την απόσταση κατά την οποία οι ομάδες συνδυάζονται. Διαφορετική ομάδα σχηματίζεται όταν εμφανίζεται κενό στο δενδρόγραμμα και η απόσταση είναι μικρότερη ή ίση μιας τιμής “κατωφλίου” όπως ονομάζεται. Το δενδρόγραμμα δηλαδή οπτικοποιεί ουσιαστικά τις αποστάσεις που υφίστανται ανάμεσα στα δείγματα. Εάν στα δείγματα υπάρχει καθαρή εικόνα ξεχωριστών σμηνών αυτή αντανακλάται στη μορφή του δενδρογράμματος. Όμως η απόφαση για τον αριθμό των σμηνών που μπορούν να διακριθούν, λαμβάνεται χρησιμοποιώντας τη συνολική

γνώση που υπάρχει για το συγκεκριμένο πληθυσμό ή τα όρια ανοχής (ελάχιστη απόσταση) που μπορεί να υφίστανται ανάμεσα στα δείγματα του ίδιου σμήνους.

Η σύνδεση (linkage) των σμηνών που δημιουργούνται από τον υπολογισμό των αποστάσεων ανάμεσα στα αρχικά δείγματα στο πρώτο στάδιο της ιεραρχικής κατηγοριοποίησης εκτελείται με μία σειρά από τρόπους, οι οποίοι επιλέγονται και πάλι ανάλογα με την φύση των δεδομένων. Μερικοί από τους πλέον διαδεδομένους τρόπους σύνδεσης είναι οι παρακάτω.

Η απόσταση ανάμεσα σε ένα σμήνος k και σε ένα δείγμα i μπορεί να υπολογιστεί ως ο μέσος όρος (average linkage) των δειγμάτων A και B που ανήκουν στο σμήνος k από το δείγμα i .

$$d_{ki} = \frac{dA_i + dB_i}{2}$$

Ένας άλλος τρόπος είναι με τη χρήση της ελάχιστης απόστασης ανάμεσα στα δείγματα που ανήκουν σε δύο διαφορετικά σμήνη. Η σύνδεση αυτή αναφέρεται ως Single linkage.

$$d_{ki} = \frac{dA_i + dB_i}{2} - \frac{|dA_i - dB_i|}{2} = \min(dA_i, dB_i)$$

Εναλλακτικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η μέγιστη απόσταση, δηλαδή η απόσταση ανάμεσα στα δείγματα των δύο σμηνών που απέχουν περισσότερο μεταξύ τους. Η σύνδεση αυτή αναφέρεται ως Complete linkage.

$$d_{ki} = \frac{dA_i + dB_i}{2} + \frac{|dA_i - dB_i|}{2} = \max(dA_i, dB_i)$$

Πολλές φορές τα σμήνη συνδέονται μεταξύ τους χρησιμοποιώντας το μέσο όρο όλων των αποστάσεων ανάμεσα σε όλα τα δυνατά ζεύγη δειγμάτων δύο σμηνών (unweighted average linkage). Εναλλακτικά η απόσταση αυτή μπορεί να υπολογιστεί σταθμισμένα χρησιμοποιώντας ως βάρος στάθμισης τον αριθμό των δειγμάτων σε κάθε σμήνος (weighted average linkage).

$$d_{ki} = \frac{N_A}{N} dA_i + \frac{N_B}{N} dB_i$$

όπου $N=N_A+N_B$ ο συνολικός αριθμός των δειγμάτων και N_A, N_B ο πληθυσμός σε κάθε σμήνος.

Ένας ακόμη τρόπος σύνδεσης των σμηνών μεταξύ τους συνίσταται στην χρήση του κέντρου βάρους τους (centroid).

$$d_{ki} = \frac{N_A}{N} dA_i + \frac{N_B}{N} dB_i - \frac{N_A N_B}{N^2} d_{AB}$$

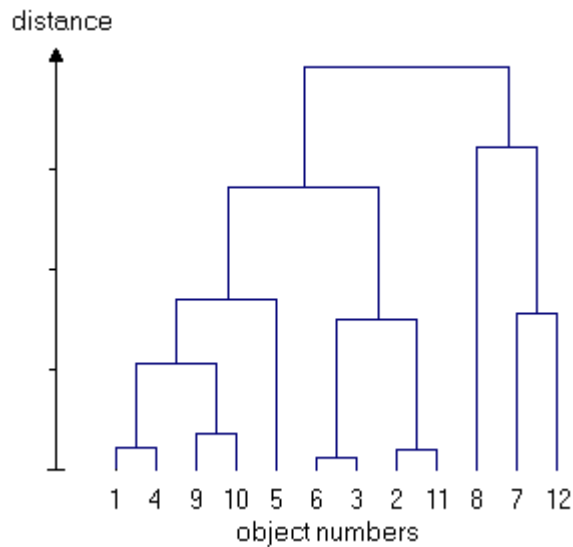
Επισημαίνεται ξανά ότι η επιλογή του τρόπου υπολογισμού των αποστάσεων ανάμεσα σε πολυπαραμετρικά δείγματα καθώς και του τρόπου σύνδεσης των σμηνών μεταξύ τους εξαρτάται από την φύση των δεδομένων και τον σκοπό της ανάλυσης. Μόνο με εφαρμογή διαφορετικών προσεγγίσεων στον διαθέσιμο πληθυσμό δειγμάτων μπορεί να επιλεγεί η βέλτιστη μέθοδος η οποία θα ταξινομή τα δεδομένα με τρόπο που δεν θα βρίσκεται σε αντίθεση με την συνολική γνώση που διαθέτουμε για τα δείγματα αυτά.[19], [20], [21]

2.1.5.2. Δενδρογράμματα

Με την Cluster analysis, όπως έχει ήδη αναφερθεί τα αντικείμενα τοποθετούνται σε ομάδες σύμφωνα με ένα μέτρο ομοιότητας και ένα αλγόριθμο ομαδοποίησης. Τα αποτελέσματα εκφράζονται με το συσσωρευτικό σχέδιο και με ένα δενδρόγραμμα, το οποίο είναι ένα δυσδιάστατο διάγραμμα ιεράρχησης που αντιπροσωπεύει τις πολύπλοκες πολυπαραγοντικές σχέσεις μεταξύ των αντικειμένων. [22]. Οι πληροφορίες που υπάρχουν στο συσσωρευτικό σχέδιο αποτυπώνονται στο δενδρόγραμμα με τις αποστάσεις-συντελεστές να επανακλιμακώνονται σε κλίμακα εύρους 0-25. Σε αυτό οι κάθετες γραμμές δηλώνουν συνδυασμούς ομάδων παρατηρήσεων, ενώ το μήκος κάθε γραμμής δηλώνει την απόσταση κατά την οποία οι ομάδες συνδυάζονται. Διαφορετική ομάδα σχηματίζεται όταν εμφανίζεται κενό στο δενδρόγραμμα και η απόσταση είναι μικρότερη ή ίση μιας τιμής “κατωφλίου” όπως ονομάζεται. [23]

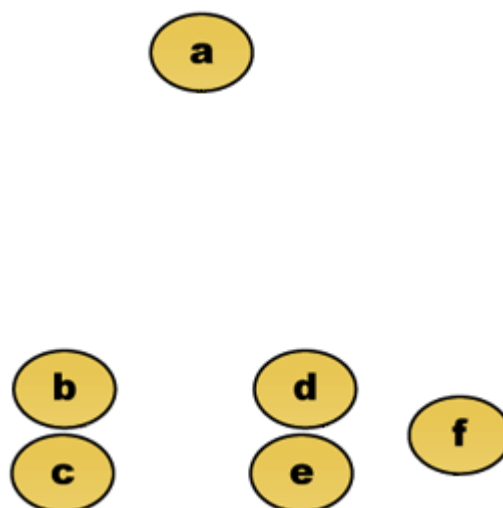
Τα δενδρογράμματα όπως έχει ήδη σημειωθεί, χρησιμοποιούνται για να παραστήσουν την γραφική σχέση που έχουν οι συστάδες. Ένα δενδρόγραμμα δείχνει τις πολυδιάστατες αποστάσεις των αντικειμένων σε τρισδιάστατη δομή. Τα αντικείμενα τα οποία είναι πιο κοντά το ένα στο άλλο στον πολυδιάστατο χώρο των δεδομένων συνδέονται με μία οριζόντια

γραμμή, σχηματίζοντας μία συστάδα η οποία μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα καινούργιο αντικείμενο. Το νέο αντικείμενο και τα δεδομένα που έχουν μείνει ξαναμελετώνται για την εύρεση των κοντινότερων αντικειμένων και ούτω καθεξής. Η απόσταση των συστάδων προσδιορίζεται από το ύψος της οριζόντιας γραμμής στο δενδρόγραμμα.

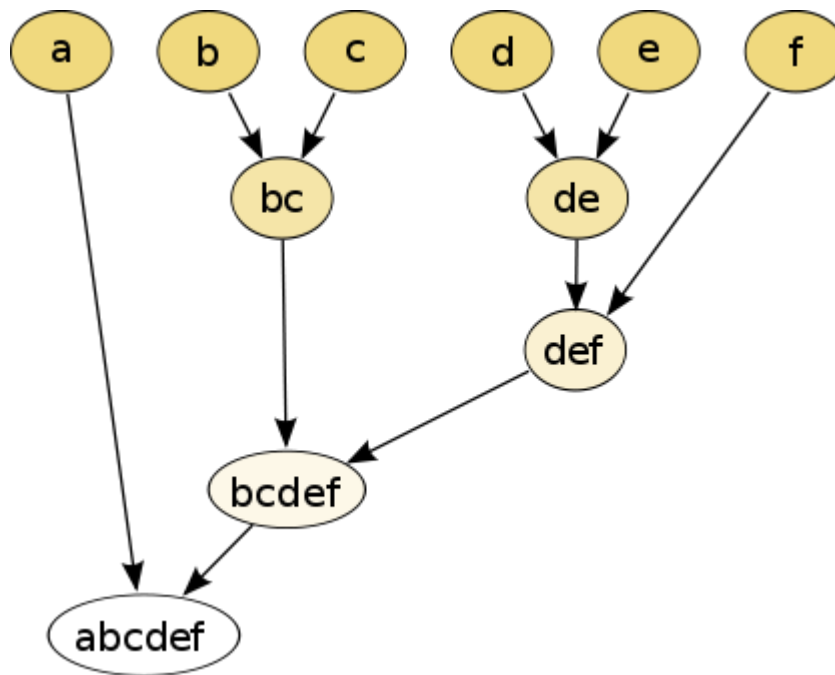


Τα δενδρογράμματα έχουν ισχυρή εξάρτηση από το μέτρο που χρησιμοποιείται για τη μέτρηση των αποστάσεων μεταξύ των αντικειμένων. [24]

Για ένα παράδειγμα κατηγοριοποίησης (clustering), υποθέτουμε ότι τα δεδομένα που θα κατηγοριοποιηθούν χρησιμοποιώντας την Ευκλείδεια απόσταση είναι τα ακόλουθα:



Το δενδρόγραμμα της ιεραρχικής κατηγοριοποίησης θα είναι όπως αυτό που παρουσιάζεται παρακάτω.



[23]

2.1.5.3. K μέσων τιμών (K-means)

Οι περισσότεροι μη ιεραρχικοί αλγόριθμοι διαφέρουν ως προς τη μέθοδο που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό των κέντρων βάρους των ομάδων και τον κανόνα για την επαναταξινόμηση των παρατηρήσεων. Συνήθως, χρησιμοποιείται για τη μη ιεραρχική δημιουργία ομάδων ο αλγόριθμος K-means, που υλοποιείται στα ακόλουθα στάδια:

- Επιλογή των k πρώτων παρατηρήσεων ως κέντρων βάρους των ομάδων
- Ομαδοποίηση των παρατηρήσεων ανάλογα με το πλησιέστερο κέντρο βάρους
- Προσδιορισμός των κέντρων βάρους των ομάδων, όπως διαμορφώνονται με τα νέα μέλη
- Εάν η μεταβολή της θέσης του κέντρου βάρους είναι μεγαλύτερη από το θεσπισμένο κριτήριο σύγκλισης (convergence), γίνεται νέα ταξινόμηση των παρατηρήσεων με υπολογισμό των νέων αποστάσεων από το κέντρο βάρους
- Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με επιστροφή στο τρίτο στάδιο. Επαναλαμβάνεται, εφόσον η μεταβολή της θέσης του κέντρου βάρους ξεπερνά το κριτήριο σύγκλισης και δεν έχει ξεπεραστεί ο ανώτερος επιτρεπτός αριθμός επαναλήψεων. [20], [25], [26], [27], [28]

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στις μεθόδους βελτιστοποίησης διαχωρισμού (k-means) η ομαδοποίηση γίνεται προσπαθώντας να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο. Στον αλγόριθμό των K μέσων τιμών το κριτήριο για την ταξινόμηση των δεδομένων σε ομάδες είναι η ελαχιστοποίηση της μέσης τετραγωνικής απόστασης όλων των δεδομένων από τα αντίστοιχα κέντρα ομαδοποίησης.

Ένα κρίσιμο πρόβλημα του αλγορίθμου είναι η επιλογή του αριθμού K των κέντρων συγκέντρωσης. Αλλάζοντας τον αριθμό K των κέντρων προκύπτουν τελείως διαφορετικές ομάδες. Κρίσιμη είναι επίσης και η επιλογή των αρχικών κέντρων συγκέντρωσης, αφού κάποιες ομάδες μπορεί να μείνουν άδειες αν τα κέντρα απέχουν από την κατανομή των δεδομένων. Ο αλγόριθμος των K μέσων τιμών είναι υπολογιστικά απλός και γρήγορος και χρησιμοποιείται συνήθως για την ταξινόμηση μεγάλου αριθμού δεδομένων.

Ο αλγόριθμος K-means είναι μία τυπική μέθοδος κατηγοριοποίησης. Δεδομένου ενός αριθμού K, ο αλγόριθμος χωρίζει τα δεδομένα σε K ομάδες (όχι απαραίτητα ξένες μεταξύ τους) βελτιστοποιώντας την ακόλουθη συνάρτηση:

$$E = \sum_{i=1}^k \sum_{o \in C_i} |O - \mu_i|^2$$

όπου:

O : ένα αντικείμενο δεδομένων στην συστάδα C_i

μ_i : ο μέσος όρος των αντικειμένων του C_i

Ο K-means είναι ένας απλός και γρήγορος αλγόριθμος. Μάλιστα η πράξη έχει δείξει ότι με λίγες επαναλήψεις έχουμε πετύχει μία ικανοποιητική σύγκλιση.

Τα μειονεκτήματα της είναι:

1. Είναι δύσκολο να γνωρίζουμε εξ αρχής το πλήθος των συστάδων που θα χρειαστούμε. Σαν λύση αρκετοί επαναλαμβάνουν τον αλγόριθμο με διαφορετικό k κάθε φορά, και συγκρίνουν τα αποτελέσματα. Για μεγάλο πλήθος δεδομένων όμως δεν είναι ιδιαίτερα βολική αυτή η προσέγγιση.
2. Αν τα δεδομένα έχουν πολύ θόρυβο (όπως συμβαίνει συνήθως), ο αλγόριθμος εξακολουθεί να τοποθετεί τα δεδομένα σε συστάδες, πράγμα που τον κάνει ευαίσθητο στον θόρυβο. Μία βελτίωση που προτάθηκε ήταν η χρήση global παραμέτρων για τον

έλεγχου της ποιότητας των εξαγόμενων συστάδων. Τότε όμως θέτονται τα ερωτήματα πως επιλέγονται αυτές οι παράμετροι και πως τελικά η ποιότητα των δεδομένων στις συστάδες μπορεί να διαφέρουν από τις παραμέτρους αυτές. [20], [26], [27], [29], [29]

2.1.5.4. Classification

Όπως έχει ήδη αναφερθεί οι μέθοδοι για τον προσδιορισμό των ομάδων και την κατάταξη των δειγμάτων σε κατηγορίες διακρίνονται σε μεθόδους εποπτευόμενης και μη εποπτευόμενης εκπαίδευσης. Οι μέθοδοι της μη εποπτευόμενης εκπαίδευσης έχουν αναλυθεί στις προηγούμενες παράγραφους (clustering). Όσον αφορά την πρώτη κατηγορία, σ' αυτήν ανήκουν οι μέθοδοι στις οποίες είναι εκ των προτέρων γνωστά τα σμήνη των δεδομένων στον συνολικό πληθυσμό και αναζητείται μία συνάρτηση η οποία θα περιγράψει την διαχωριστική γραμμή ή επιφάνεια μεταξύ τους. Χρησιμοποιώντας αυτή την συνάρτηση στη συνέχεια είναι δυνατόν να καταταχθεί ένα νέο άγνωστο δείγμα σε ένα από τα υφιστάμενα σμήνη.

Η εποπτευμένη προσέγγιση υποθέτει ότι η πληροφορία των χαρακτηριστικών είναι επισυνημμένη στα δείγματα. Με αυτή την πληροφορία μπορεί να κατασκευαστεί ένας ταξινομητής που περιέχει μόνο πληροφοριακά χαρακτηριστικά. Βασισμένοι σε αυτόν τον ταξινομητή, τα δείγματα μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ώστε να ταιριάζουν οι μεταξύ τους και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να προβλεφθούν τα μελλοντικά δείγματα από τα προφίλ έκφρασης. Τα βήματα για να κατασκευαστεί ένας ταξινομητής (classifier) είναι:

1. Επιλογή δείγματος εκπαίδευσης: Στο βήμα αυτό ένα υποσύνολο δειγμάτων επιλέγεται για να αποτελέσει το σετ εκπαίδευσης. Αφού το πλήθος των δειγμάτων είναι περιορισμένο, το μέγεθος του σετ εκπαίδευσης είναι συνήθως της ίδιας σημαντικότητας με το αρχικό πλήθος των δειγμάτων.
2. Επιλογή πληροφοριακών δειγμάτων: Ο στόχος είναι η επιλογή δειγμάτων των οποίων τα πρότυπα διαχωρίζουν τα διάφορα χαρακτηριστικά. Μερικές προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται για να επιτευχθεί αυτό είναι: η προσέγγιση γειτονικής ανάλυσης, οι εποπτευμένες μαθητευόμενες μέθοδοι και μία ποικιλία από μεθόδους βασισμένες σε ταξινόμηση.
3. Κατηγοριοποίηση των δειγμάτων και ταξινόμηση: μετά από περίπου 50~200 πληροφοριακά χαρακτηριστικά τα οποία φανερώνουν μία κατηγορία στο επιλεγμένο

δείγμα εκπαίδευσης, το όλο σύνολο δειγμάτων κατηγοριοποιείται χρησιμοποιώντας μόνο τα πληροφοριακά χαρακτηριστικά σαν χαρακτηριστικό. Και αφού το σύνολο των χαρακτηριστικών είναι σχετικά μικρό, συμβατικοί αλγόριθμοι κατηγοριοποίησης χρησιμοποιούνται, όπως ο K-means ή ο SOM, για να κατηγοριοποιήσουν τα δείγματα. [29]

Η διαδικασία της κατηγοριοποίησης πραγματοποιείται με τον προσδιορισμό της κατηγορίας στην οποία ανήκει ένα αντικείμενο. Αρχικά προσδιορίζεται το σύνολο των δεδομένων που περιγράφουν το αντικείμενο οπότε και επιλέγεται η κατηγορία στην οποία ανήκει. Πρέπει να σημειωθεί ότι η επιλογή της κατηγορίας γίνεται από προκαθορισμένο σύνολο, κάθε αντικείμενο δεν ανήκει σε μία μόνο κατηγορία και ότι κάθε αντικείμενο δεν ανήκει σίγουρα σε κάποια κατηγορία. Επίσης σημειώνεται ότι οι κατηγορίες είναι οργανωμένες σε ιεραρχίες, οι υποκατηγορίες έχουν τις ιδιότητες των υπερκατηγοριών και οι κατηγορίες του ίδιου επιπέδου έχουν αλληλοαναιρούμενες ιδιότητες.

Η κατηγοριοποίηση μπορεί να είναι είτε εξαντλητική είτε ευριστική. Η εξαντλητική κατηγοριοποίηση αρκεί στις απλές περιπτώσεις και πραγματοποιείται με την απλή σύγκριση των «επιφανειακών» χαρακτηριστικών του αντικειμένου. Όταν όμως υπάρχουν πολλές ιδιότητες και πολύπλοκη ιεραρχία κατηγοριών, τα επιφανειακά χαρακτηριστικά δεν επαρκούν για την κατάταξη και η εξαντλητική σύγκριση δεν είναι πρακτική. Όσον αφορά την ευριστική κατηγοριοποίηση η κατάταξη γίνεται πιο γρήγορα αλλά με μικρότερη ακρίβεια, διότι προσπαθεί να κατατάξει τα αντικείμενα σε κατηγορίες χωρίς να περάσει από όλα τα επίπεδα της ιεραρχίας και να κάνει όλες τις συγκρίσεις. Χρησιμοποιεί εμπειρική γνώση για αντικείμενα, κατηγορίες και συσχετίσεις.

Γενικότερα για την ευριστική κατηγοριοποίηση οι φάσεις μέσα από τις οποίες πραγματοποιείται είναι οι ακόλουθες.

- Αφαίρεση ή γενίκευση των αντικειμένων – δεδομένων (data abstraction). Στην φάση αυτή πραγματοποιείται επικέντρωση μόνο στα σημαντικά χαρακτηριστικά ενός δεδομένου, ακολουθεί απλοποίηση των ποσοτικών δεδομένων και ιεραρχική οργάνωση των εννοιών.
- Ευριστική ταυτοποίηση (heuristic match) των γενικευμένων αντικειμένων σε μια γενικότερη περιγραφή ενός συνόλου κατηγοριών

- Επιλογή μιας συγκεκριμένης κατηγορίας – λύσης από το γενικό σύνολο των κατηγοριών (solution refinement).

Οι μέθοδοι κατηγοριοποίησης είναι:

1. Παραγωγή και δοκιμή
2. Από τα δεδομένα σε πιθανές λύσεις
3. Ιεραρχική κατηγοριοποίηση καθοδηγούμενη από τις λύσεις
4. Ιεραρχική κατηγοριοποίηση καθοδηγούμενη από τα δεδομένα

Η πρώτη μέθοδος εφαρμόζεται σε ελάχιστα συστήματα όπου το σύνολο των κατηγοριών (λύσεων) είναι αρκετά μικρό οπότε και η εξαντλητική σύγκριση είναι πρακτικά εφικτή. Στη μέθοδο αυτή όλα τα απαραίτητα δεδομένα μπορούν να αποκτηθούν στην αρχή της διαδικασίας.

Η δεύτερη μέθοδος μειώνει τον υπολογιστικό χρόνο όταν υπάρχει μεγάλος αριθμός λύσεων αφού επικεντρώνεται μόνο σε εκείνες που πιθανώς ικανοποιούν τα δεδομένα. Καταγράφει ποιες λύσεις έχουν ήδη δοκιμαστεί και ασχολείται με κάθε υποψήφια λύση μόνο μια φορά. Η μέθοδος αυτή πραγματοποιείται μέσω της διαδικασίας γενίκευσης των δεδομένων (data abstractor) που από μόνη της είναι ένα μικρό σύστημα κατηγοριοποίησης. Ακολουθεί η διαδικασία ανάκλησης υποψήφιων λύσεων (candidate retriever) και τέλος πραγματοποιείται η διαδικασία ελέγχου των λύσεων (solution tester) όπου με βάση κάποια κριτήρια βαθμολογούνται οι υποψήφιες λύσεις και επιλέγεται μία ή περισσότερες.

Η τρίτη μέθοδος είναι μία ιεραρχική τεχνική παραγωγής και δοκιμής. Κάνοντας την υπόθεση ότι οι πιθανές λύσεις είναι ιεραρχικά διατεταγμένες διασχίζει την ιεραρχία από πάνω προς τα κάτω. Σε κάθε επίπεδο συγκρίνει τις υποψήφιες λύσεις με τα δεδομένα και απορρίπτει. Στο τέλος στο κατώτερο επίπεδο γίνεται ο έλεγχος των λύσεων που δεν έχουν απορριφθεί. Οι προϋποθέσεις για να είναι δυνατή η εφαρμογή της εν λόγω μεθόδου είναι ότι θα πρέπει οι κατηγορίες να μπορούν να διαταχθούν σε ιεραρχία. Σε κάθε επίπεδο θα πρέπει να υπάρχει ένα υποσύνολο των δεδομένων που μπορεί να κάνει διάκριση μεταξύ των γενικών κατηγοριών του συγκεκριμένου επιπέδου. Στόχος της μεθόδου είναι η εύρεση των πιο ειδικών κατηγοριών που είναι συνεπείς με τα δεδομένα.

Η τέταρτη μέθοδος υποθέτει ότι όλα τα σχετικά δεδομένα έχουν δοθεί στην αρχή (όπως η δεύτερη μέθοδος), προχωρά στην επιλογή των υποψήφιας λύσεων μ' αυτά, αποκλείει από την ιεραρχία όλες εκείνες τις λύσεις που δεν είναι συμβατές με τα δεδομένα που δόθηκαν (όπως η τρίτη μέθοδος), αποκλείει επίσης κάποιες από τις αρχικές υποψήφιας λύσεις οι οποίες δεν επιβεβαιώνουν τα δεδομένα. Η μέθοδος αυτή βελτιώνει την ιεραρχική κατηγοριοποίηση καθοδηγούμενη από τις λύσεις εφόσον θεωρεί ότι όσα δεδομένα δίνονται στην αρχή είναι τα μόνα σχετικά με την περίπτωση και δεν εξετάζει καθόλου τις γενικές κατηγορίες οι οποίες δεν εξηγούν τα αρχικά δεδομένα. Η ιεραρχική κατηγοριοποίηση καθοδηγούμενη από τα δεδομένα όταν φτάσει στη γενίκευση των αρχικών δεδομένων λειτουργεί ανάστροφα, από τις λύσεις προς τα δεδομένα. Γενικά η μέθοδος αυτή είναι ευέλικτη και πιο αποδοτική αφού επικεντρώνεται στην εξέταση μόνο των λύσεων που είναι απολύτως σχετικές με τα δεδομένα. [30]

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: «Ανάλυση GC σε δείγματα βενζινών- Πειραματική διαδικασία»

3.1. Δείκτες Kovats

Ο λογαριθμικός δείκτης συγκράτησης Kovats είναι μία παράμετρος της αέριας χρωματογραφίας χαρακτηριστική της σχετικής συγκράτησης μιας διαλυτής ουσίας σε υγρή φάση και σε μια (ισόθερμη) θερμοκρασία. Είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο στον ποιοτικό προσδιορισμό των χρωματογραφικών κορυφών. Με βάση την παρατήρηση του υπό τις ισόθερμες συνθήκες λειτουργίας οι ρυθμισμένοι χρόνοι συγκράτησης των μελών μιας ομόλογης σειράς αυξάνουν λογαριθμικά με τον αυξανόμενο αριθμό άνθρακα. Ο δείκτης συγκράτησης Kovats είναι ένας αριθμός που δείχνει (σε μια λογαριθμική κλίμακα) τη συγκράτηση μιας ένωσης στη σειρά n-αλκανίων (ο ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης είναι ο πραγματικός χρόνος συγκράτησης μείον το χρόνο συγκράτησης του συστατικού όπως το μεθάνιο).

Ο δείκτης συγκράτησης Kovats δίνεται από τη σχέση:

$$I_{iso} = 700 + 100 * \left(\frac{\log t'R(A) - \log t'R(C_7)}{\log t'R(C_8) - \log t'R(C_7)} \right)$$

όπου:

I_A = δείκτης συγκράτησης του συστατικού που διαχωρίζεται με εκχύλιση μεταξύ n- C₇ και n- C₈,

$t_{R(A)}$ = ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης του συστατικού,

$t_{R(C_7)}$ = ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης του n-επτανίου, και

$t_{R(C_8)}$ = ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης του n-οκτανίου.

Ο ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης της κορυφής καθορίζεται με την αφαίρεση του χρόνου συγκράτησης της ουσία (μεθάνιο) από το χρόνο συγκράτησης της κορυφής. Εάν το 2,3,3-τριμέθυλοπεντάνιο και το τολουόλιο δεν διαχωρίζονται, τα μίγματα αναλύονται χωριστά, όπου το κάθε ένα θα περιέχει μόνο μια από αυτές τις ενώσεις μαζί με το n-C₇ και το n-C₈ με διαλύτη το n – εξάνιο.

Η εξίσωση που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του δείκτη I_{iso} συγκράτησης Kovats ενός σύνθετου A δίνεται από τη σχέση:

$$I_{iso} = 100 * N + 100 * \left(\frac{\log t'R(A) - \log t'R(N)}{\log t'R(N+1) - \log t'R(C_N)} \right)$$

Όπου $t'_{R(N)}$ και $t'_{R(N+1)}$ είναι ο ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης των n-αλκανίων του αριθμού άνθρακα N και N+1 αντίστοιχα και το $t'_{R(A)}$, ο ρυθμισμένος χρόνος συγκράτησης ενός σύνθετου A. Εξ ορισμού οι δείκτες συγκράτησης Kovats των n-αλκανίων είναι $100 * N$ (παραδείγματος χάριν, για το n -εξάνιο είναι $I=600$ και για το n-επτάνιο, $I=700$).

Οι δείκτες συγκράτησης Kovats υπολογίζονται από τους ρυθμισμένους χρόνους συγκράτησης που λαμβάνονται από μία αυστηρά ισόθερμη ανάλυση. Οι χρόνοι συγκράτησης Kovats υπολογίζονται από καθορισμένους χρόνους συγκράτησης σε οποιοδήποτε κατάλληλο χρωματογραφικό σύστημα και μπορούν να συγκριθούν άμεσα με εκείνους από οποιοδήποτε κατάλληλο σύστημα εφ' όσον η υγρή φάση και η θερμοκρασία είναι οι ίδιες.

Ο γραμμικός δείκτης συγκράτησης είναι μια επέκταση της έννοιας Kovats στην αέρια χρωματογραφία προγραμματισμένης θερμοκρασίας. Ο γραμμικός δείκτης συγκράτησης μιας διαλυτής ουσίας εξαρτάται όχι μόνο από την υγρή φάση αλλά από άλλες λειτουργούσες παραμέτρους.

Με βάση την προσέγγιση που υπό τις προγραμματισμένες συνθήκες θερμοκρασίας οι πραγματικοί χρόνοι συγκράτησης των μελών μιας ομόλογης σειράς αυξάνουν γραμμικά με τον αυξανόμενο αριθμό άνθρακα, ο γραμμικός δείκτης συγκράτησης είναι ένας αριθμός που δείχνει (σε μια γραμμική κλίμακα) τη συγκράτηση μιας ένωσης σχετικά με τη σειρά n-αλκανίων.

Η εξίσωση που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του γραμμικού δείκτη συγκράτησης (I_{prog}) μιας ένωσης A δίνεται από τη σχέση:

$$I_{prog} = 100 * N + 100 * \left(\frac{t'R(A) - t'R(N)}{t'R(N+1) - t'R(C_N)} \right)$$

Όπου το t'_R είναι ο πραγματικός χρόνος συγκράτησης.

Εξ ορισμού, οι γραμμικοί δείκτες συγκράτησης, των n-αλκανίων είναι $100 * N$ (παραδείγματος χάριν, για το n-οκτάνιο, $I=800$ και για το n-εννιάνιο, $I=900$). Η συνηθισμένη εφαρμογή του γραμμικού συστήματος δεικτών συγκράτησης είναι προγραμματισμένη σε γραμμικές αναλύσεις θερμοκρασίας (ακόμη και στην αρχή της ανάλυσης).

Στον πίνακα 11 παρουσιάζονται οι δείκτες συγκράτησης των πετρελαϊκών συστατικών που υπάρχουν στην βιβλιογραφία. Τα χαρακτηριστικά συγκράτησης των πετρελαϊκών συστατικών προκύπτουν μέσω αναλύσεων συστατικών αναφοράς κάτω από σταθερές συνθήκες ή μέσω αναλύσεων αέριας χρωματογραφίας- φασματοσκοπίας μάζας (GC-MS) των συστατικών αναφοράς κάτω από τις ίδιες συνθήκες.

Πίνακας 11: Τυπικά χαρακτηριστικά συγκράτησης των πετρελαϊκών συστατικών

Συστατικά	Retention time, min	Adjusted retention time, min	Kovats retention index	Linear retention index
Methane	3.57	0.00	100.0	...
Ethane	3.65	0.08	200.0	...
Propane	3,84	0.27	300.0	...
iso-butane	4,14	0.57	367.3	...
n-butane	4,39	0.82	400.0	...
2,2 dimethylpropane	4,53	0.96	415.5	...
iso-pentane	5,33	1.76	475.0	...
n-pentane	5,84	2.27	500.0	...
2,2-dimethylbutane	6,81	3.24	536.2	...
Cyclopentane	7,83	4.26	564.1	...
2,3dimethylbutane	7,89	4.32	565.5	...
2methylpentane	8,06	4.49	569.5	...
3-methylpentane	8,72	5.15	583.4	...
n-hexane	9,63	6.06	600.0	...
2,2-dimethylpentane	11,22	7.65	624.2	...
Methylcyclopentane	11,39	7.82	626.5	...
2,4-dimethylpentane	11,68	8.11	630.3	...
2,2,3-trimethylbutane	12,09	8.52	635.4	...
Benzene	13,29	9.72	649.1	...
3,3-dimethylpentane	13,84	10.27	654.8	...
Cyclohehane	14,19	10.62	658.3	...

2-methylhexane	15,20	11.63	667.8	...
2,3-dimethylpentane	15,35	11.78	669.1	...
....-Dimethylcyclopentane	15,61	12.04	671.4	...
3-methylhexane	16,18	12.61	676.2	...
cis-1,3-dimethylcyclopentane	16,88	13.31	681.8	...
trans1,3-dimethylcyclopentane	17,22	13.65	684.4	...
3-ethylpentane	17,44	13.87	686.1	...
trans1,2-dimethylcyclopentane	17,57	14.00	687.0	...
2,2,4-trimethylpentane	17,80	14.23	688.7	...
n-heptane	19,43	15.86	700.0	...
Methylcyclohexane+cis-1.2-Dimethylcyclopentane	22,53	18.96	718.6 ^A	...
1.1.3—Trimethylcyclopentane+2,2dimethylhexane	23,05	19.48	721.4 ^A	...
Ethylcyclopentane	24,59	21.02	729.3 ^A	...
2,5dimethylhexane+2.2.3-Trimethylpentane	25,12	21.55	731.9 ^A	...
2,4-dimethylhexane	25,47	21.90	733.5 ^A	...
Trans-2,cis-4-Trimethylcyclopentane	26,43	22.86	738.0 ^A	...
3,3dimethylhexane	26,79	23.22	739.6 ^A	...
Trans-2,cis-3-Trimethylcyclopentane	28,01	24.44	744.9 ^A	...
2.2.4-Trimethylpentane	28,70	25.13	747.8 ^A	...
toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	29,49	25.92	751.1 ^A	730.2 ^B
1,1,2-trimethylcyclopentane	31,21	27.64	...	741.7 ^B
2,3-dimethylhexane	31,49	27.92	...	743.6 ^B
2methyl-3ethylpentane	31.69	28.12	...	744.9 ^B
2-methyheptane	33,06	29.49	...	754.1 ^B
4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	33,34	29.77	...	756.0 ^B
3,4-dimethylhexane	33.49	29.92	...	757.0 ^B
1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	33.73	30.16	...	758.6 ^B
1,3-Dimethylcyclohexane	34,45	30.88	...	763.4 ^B
3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	34,64	31.07	...	764.7 ^B
3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	34.83	31.26	...	766.0 ^B
1,1dimethylcyclohexane	35,81	32.24	...	772.5 ^B
...+trans1,3ethylmethylcyclopentane	36,75	33.18	...	778.8 ^B

cis1,3ethylmethylcyclopentane	37,14	33.57	...	781.4 ^B
trans1,2ethylmethylcyclopentane	37.39	33.82	...	783.1 ^B
....methylhexane+1.1-ethylmethylcyclopentane	37.68	34.11	...	785.1 ^B
trans-1,2-Dimethylcyclohexane	38,14	34.57	...	788.1 ^B
1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	39.21	35.64	...	795.3 ^B
trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	39.54	35.97	...	797.5 ^B
n-octane	39.91	36.34	...	800.0
isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	40.76	37.19	...	805.7
unidentified C9-Napthene	40.88	37.31	...	806.5
unidentified C8-Napthene	41.52	37.95	...	810.8
unidentified C9-Napthene	41.88	38.31	...	813.2
cis1,2-ethylmethylcyclopentane+2.3.5-Trimethylhexane	42.55	38.98	...	817.7
2,2-dimethylheptane	43.20	39.63	...	822.0
cis-1,2-dimethylcyclohexane	43.43	39.86	...	823.6
2,2,3-trimethylhexane+9N	43.76	40.19	...	825.8
2,4dimethylheptane	43.88	40.31	...	826.6
4,4-dimethylheptane+9N	44.09	40.52	...	828.0
ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	44.36	40.79	...	829.8
2methyl-4-ethylhexane	44.74	41.17	...	832.4
2,6-Dimethylheptane+9N	44.95	41.38	...	833.8
1,1,3-Trimethylcyclohexane	45.21	41.64	...	835.5
unidentified C9-Napthene	45.56	41.99	...	837.8
2,5dimethylheptane+9P	45.92	42.35	...	840.3
3,5-Dimethylheptane+3,3-dimethylheptane+N	46.09	42.52	...	841.4
unidentified C9-Napthene	46.31	42.74	...	842.9
unidentified C9-Napthene	46.55	42.98	...	844.5
Ethylbenzene	47.15	43.58	...	848.5
unidentified C9-Napthene	47.37	43.80	...	850.0
unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	47.53	43.96	...	851.0
Unidentified Napthenes	47.78	44.21	...	852.7
unidentified Napthene+Paraffin	48.13	44.56	...	855.1
m-xylene	48.49	44.92	...	857.5

p-xylene	48.63	45.06	...	858.4
2,3dimethylheptane	48.93	45.36	...	860.4
3,4-Dimethylheptane ^c +N	49.10	45.53	...	861.6
3,4-Dimethylheptane ^c	49.29	45.72	...	862.8
unidentified Napthene	49.41	45.84	...	863.6
4-ethylheptane+N	49.65	46.08	...	865.2
4-methyloctane	50.10	46.53	...	868.3
2-methyloctane	50.26	46.69	...	869.3
unidentified Napthene	50.41	46.84	...	870.3
unidentified Napthene	50.73	47.16	...	872.5
3ethylheptane+N	50.96	47.39	...	874.0
3-methyloctane	51.15	47.58	...	875.3
unidentified C9-Napthene	51.35	47.78	...	876.6
o-xylene+1,1,2-Trimethylcyclohexane	51.54	47.97	...	877.9
unidentified Napthene+2,4,6-Trimethylheptane	51.74	48.17	...	879.2
unidentified Napthene	52.12	48.55	...	881.8
unidentified Paraffin	52.24	48.67	...	882.6
unidentified Napthenes	52.56	48.99	...	884.7
unidentified Napthene	52.85	49.28	...	886.7
unidentified Napthene+Paraffin	53.06	49.49	...	888.1
unidentified Napthene	53.26	49.69	...	889.4
unidentified Napthene	53.46	49.89	...	890.8
unidentified Napthene	54.02	50.45	...	894.5
unidentified Napthene	54.40	50.83	...	897.1
n-nonane	54.84	51.27	...	900.0
unidentified Napthene	54.98	51.41	...	900.9

^A: Παρεκτειμένος ανάμεσα n-C₆ και n-C₇

^B: Παρεκτειμένος ανάμεσα n-C₈ και n-C₉

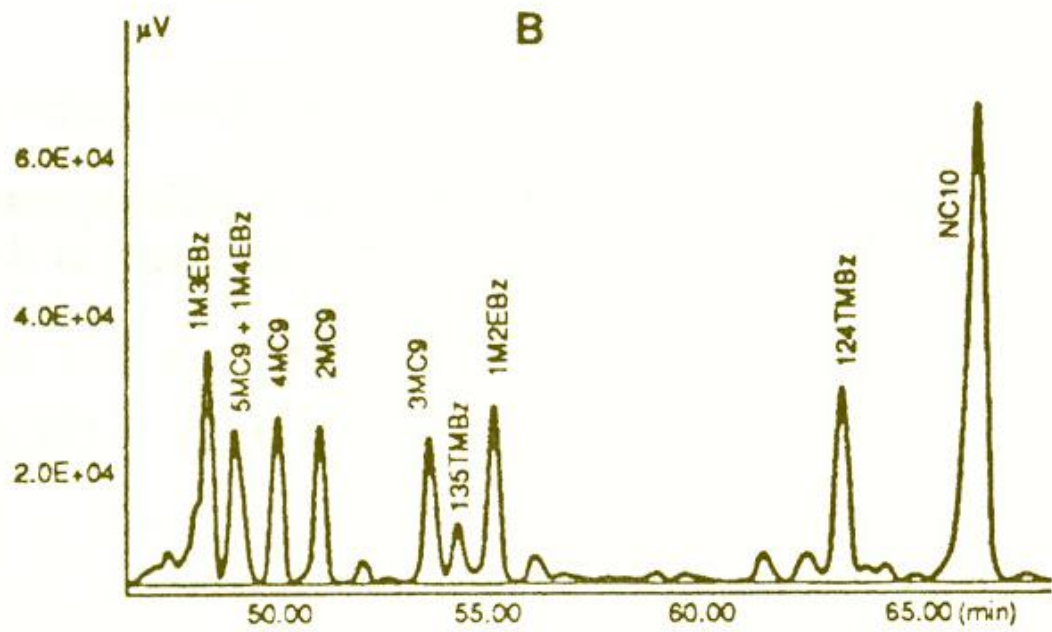
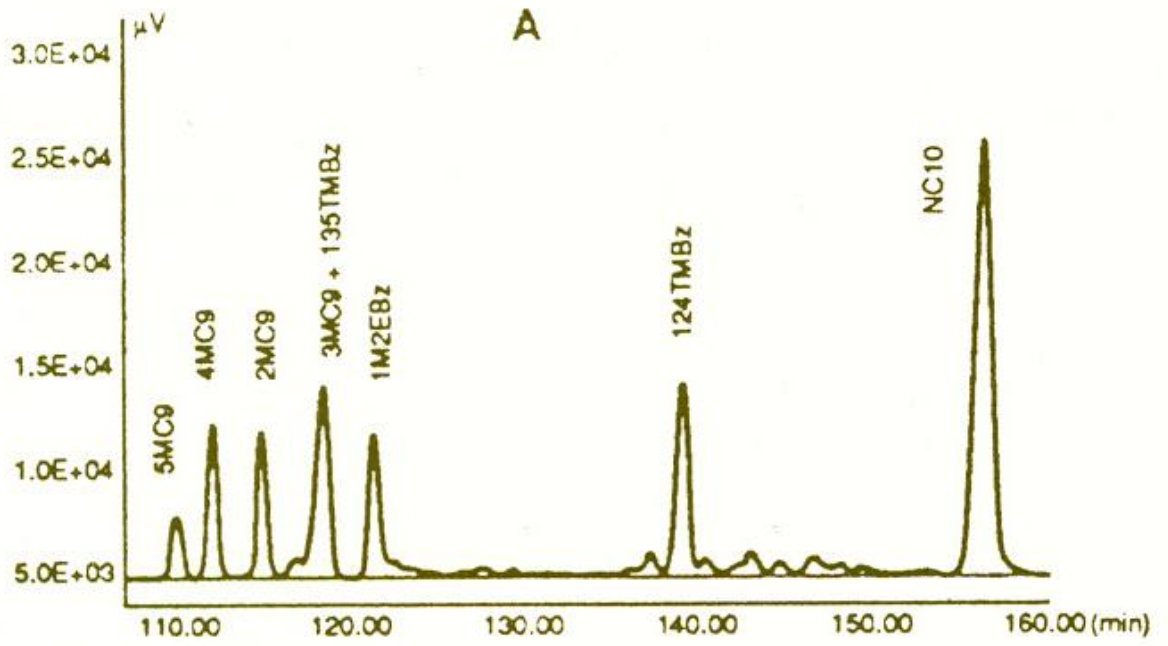
Σημείωση: Οι συντμήσεις N και P αναφέρονται στα μη αναγνωρισμένα ναφθένια και παραφίνες αντίστοιχα [31]

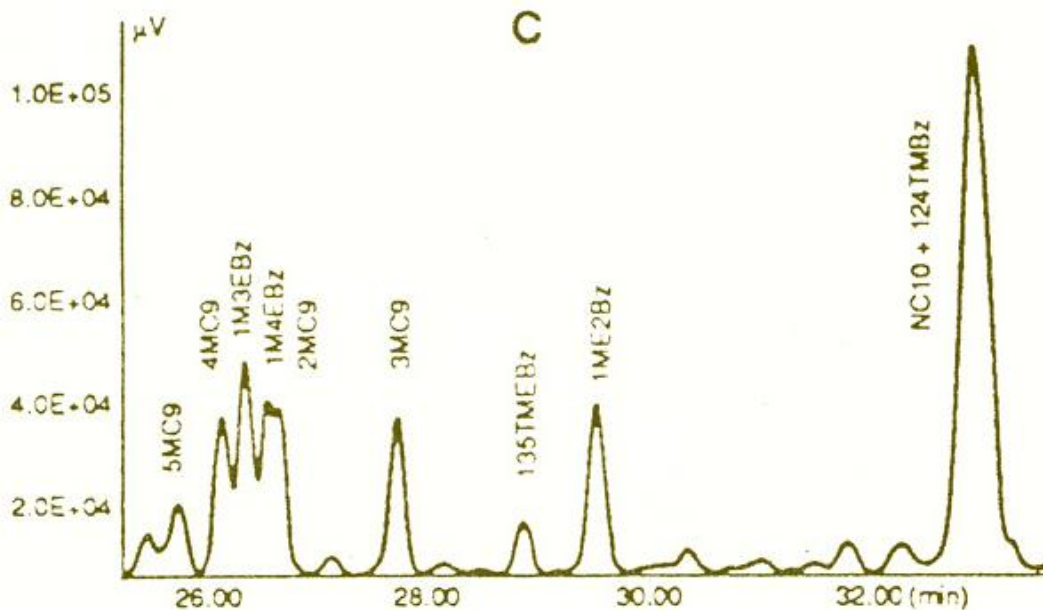
3.2. Βιβλιογραφικές αναφορές για ανάλυση GC σε δείγματα βενζινών

Η βενζίνη είναι ένα σύνθετο μίγμα και περιέχει γύρω στους 500 υδρογονάνθρακες με αλυσίδες τεσσάρων ως δώδεκα ατόμων άνθρακα, γι'αυτό το λόγο και η ταυτοποίηση δειγμάτων της δεν είναι εύκολη διαδικασία. Παρακάτω γίνεται η μία συνοπτική παρουσίαση μιας λέπτομερής ανάλυσης των σύνθετων μιγμάτων όπως οι βενζίνες μέσω της υψηλής απόδοσης τριχοειδούς αέριας χρωματογραφίας (GC) η οποία απαιτεί σύνθετα προγράμματα θερμοκρασίας για να επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα (Experimental Design Optimization of the Analysis of Gasoline by Capillary Gas Chromatography). Η πειραματική διαδικασία της παρούσας εργασία βασίστηκε στην διαδικασία που ακολουθηθηκε στην εν λόγω ανάλυση.

Αναλυτικότερα, στην αέρια χρωματογραφία, η συγκράτηση καθορίζεται από τη χημεία διαλυτών ουσιών και στάσιμων φάσεων καθώς επίσης και από τη θερμοκρασία. Για τα σύνθετα μίγματα το πρώτο βήμα μιας μελέτης διαχωρισμού είναι να αποφασιστεί η σχέση των δεικτών k_{ov} με τη θερμοκρασία. Η επίδραση της θερμοκρασίας στη συγκράτηση των ενώσεων εξαρτάται από τους τύπους ομάδας των υδρογονανθράκων και, ειδικότερα, τις ιδιαίτερα διακλαδισμένες παραφίνες, τα ναφθένια και τις αρωματικές ουσίες όπου η συγκράτηση είναι πιο ευαίσθητη στη θερμοκρασία από ότι στις κανονικές ή μικρής διακλάδωσης παραφίνες. Κατά συνέπεια, ο προγραμματισμός της θερμοκρασίας κατά τη διάρκεια της ανάλυσης αποτελεί το μόνο τρόπο για να βελτιστοποιηθεί ένας διαχωρισμός.

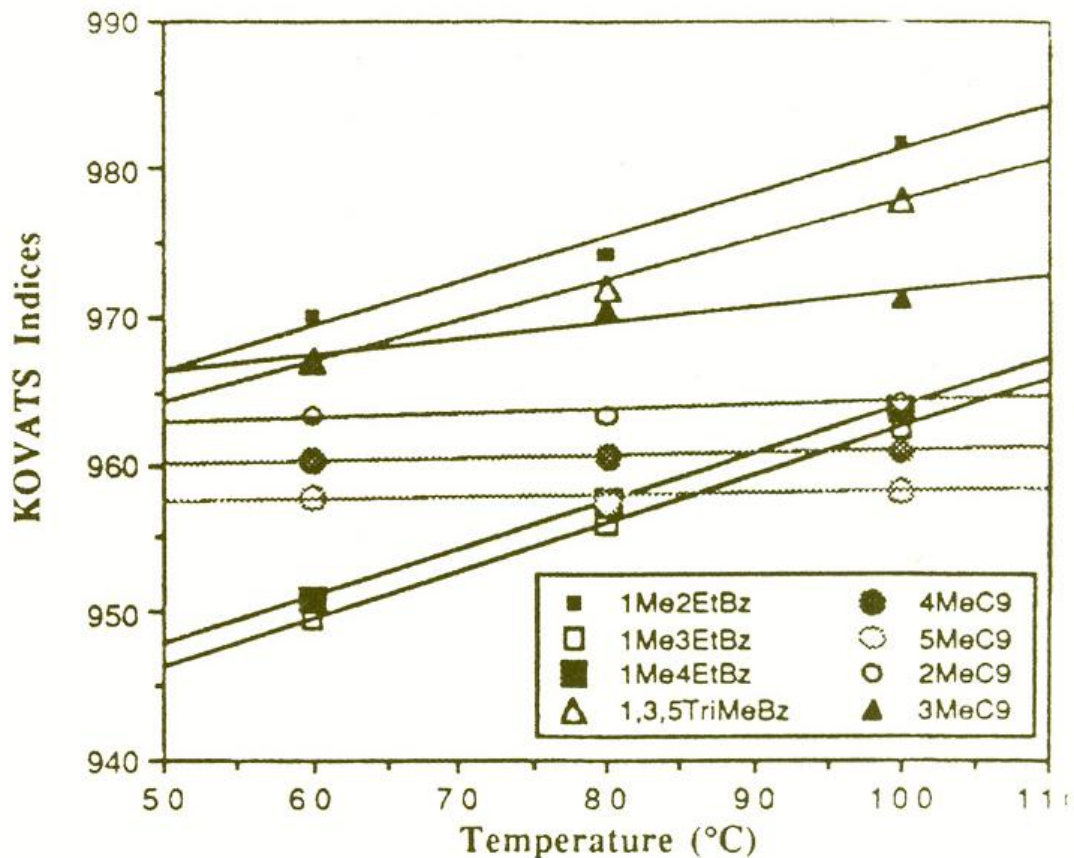
Στην εν λόγω ανάλυση διεξήχθη μια προκαταρκτική ισόθερμη μελέτη σε τρεις τύπους βενζινών. Στο σχήμα 29 φαίνονται τα χρωματογραφήματα που λαμβάνονται υπό τις τρεις διαφορετικές ισόθερμες συνθήκες για τις ενώσεις $C_9 - C_{10}$. Φαίνεται ότι μια αύξηση στη θερμοκρασία καθυστερεί την εκλεκτική προσρόφηση των κανονικών και χαμηλά διακλαδισμένων παραφινών.





Σχήμα 29: Χρωματογραφήματα των ενώσεων C₉- C₁₀ αποκτηθέντα σε τρεις ισόθερμες συνθήκες a) 60 °C, b) 80 °C, c) 100 °C.

Το σχήμα 30 παρουσιάζει τους αντίστοιχους δείκτες Kovats σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία για τις ενώσεις C₉- C₁₀.



Σχήμα 30: Δείκτες Kovats των των ενώσεων C₉- C₁₀ σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία.

Για τη βελτιστοποίηση της ανάλυσης GC της βενζίνης στην τριχοειδή SPB octyl στήλη τρεις παράγοντες μελετώνται: η αρχική ισόθερμη διάρκεια (ID), η κλίση της αύξησης της θερμοκρασίας (S), και η τελική θερμοκρασία (FT).

Προκειμένου να ληφθούν οι αναλυτικές συνθήκες που είναι καταλληλότερες επιλέγεται η πειραματική μήτρα σχεδιασμού που προτείνεται από τον Doehlert. Για τους τρεις παράγοντες, αυτή η μήτρα αποτελείται από ένα σύνολο 13 χωριστών πειραμάτων που σχεδιάζονται όπως αναφέρονται στον πίνακα 12. Το κεντρικό σημείο (η πρώτη γραμμή του πίνακα 12) επαναλαμβάνεται 5 φορές για την εκτίμηση της πειραματικής επανάληψης. Αυτός ο τύπος μήτρας χαρακτηρίζεται από την υψηλή αποδοτικότητά (αριθμός αποδοτικότητας / αριθμός πειραμάτων) για την εκτίμηση των συντελεστών ενός συνόλου

Επιπλέον, ένα πλεονέκτημα αυτής της μήτρας είναι ότι η πειραματική περιοχή μπορεί να επεκταθεί, μετά από μια πρώτη μελέτη, χωρίς ανάληψη υψηλών πειραματικών δαπανών (μερικά πειράματα της πρώτης μήτρας σώζονται στη δεύτερη). Επιπλέον, ο διαφορετικός αριθμός επιπέδων για κάθε παράγοντα που προτάθηκε από αυτήν την μήτρα ήταν ιδιαίτερα χρήσιμος για τη χρωματογραφική βελτιστοποίησή.

Κατόπιν, υπολογίζεται η τιμή D για ολόκληρη την πειραματική περιοχή ως εξής:

$$D = \left(\prod d_i \right)^{1/i}$$

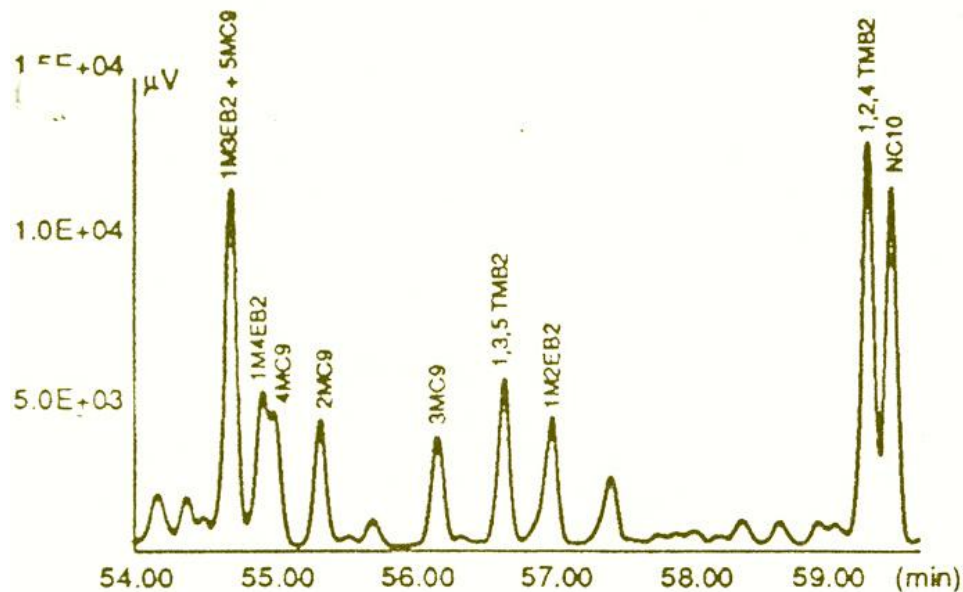
Το D αντιπροσωπεύει το γεωμετρικό μέσο όρο του βαθμού ικανοποίησης d_i για τις δώδεκα μελετηθείσες τιμές και το μέγιστο της λειτουργίας D δίνει τον καλύτερο σφαιρικό συμβιβασμό στη μελετημένη περιοχή και αντιστοιχεί στις βέλτιστες πειραματικές συνθήκες.

Πίνακας 12: Η μήτρα Doehlert για τις τρεις παραμέτρους.

X_1 5 levels	X_2 7 levels	X_3 3 levels
0	0	0
1	0	0
-1	0	0
0,5	0,866	0
-0,5	-0,866	0
0,5	-0,866	0
-0,5	0,866	0
0,5	0,2887	0,8165

-0,5	-0,2887	-0,8165
0,5	-0,2887	-0,1865
0	0,5774	-0,8165
-0,5	0,2887	0,8165
0	-0,5774	0,8165

Στο σχήμα 31 φαίνεται το χρωματογράφημα των ενώσεων C₉ – C₁₀ αποκτηθέντα με τις βέλτιστες συνθήκες, που προέκυψαν από την παραπάνω ανάλυση, ID(min) = 10.5 S(°C/min)=1.7 FT(°C)=214.



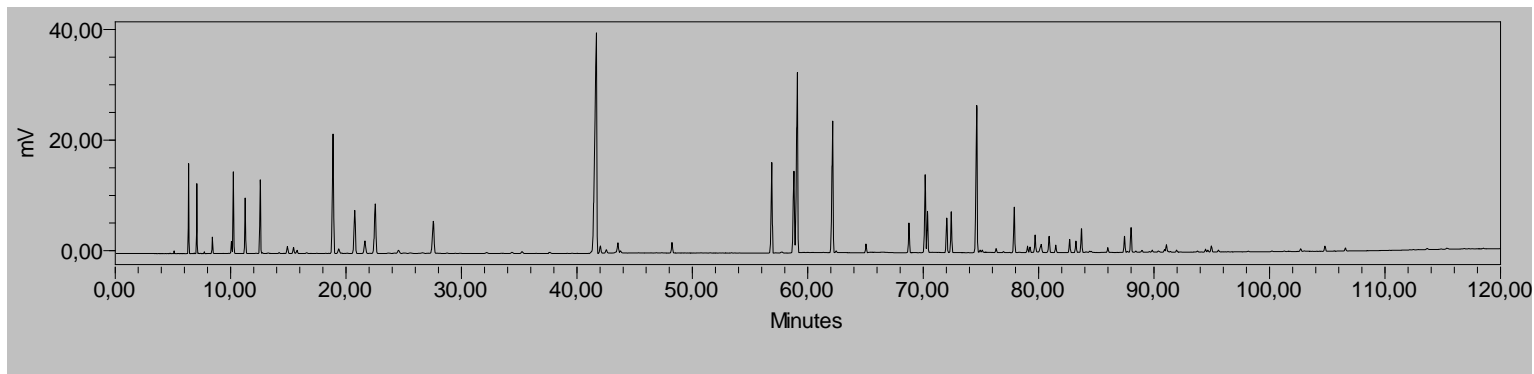
Σχήμα 31: Χρωματογράφημα των ενώσεων C₉ – C₁₀ αποκτηθέντα με τις βέλτιστες συνθήκες. [31], [32]

3.3. Πειραματική διαδικασία

Παρότι έχουν γίνει αρκετές πρόοδοι στην αέρια χρωματογραφία στήλης παραμένει ακόμα δύσκολο να καθοριστεί μία μέθοδος για την ανάλυση μιγμάτων τόσο σύνθετων όσο τα πετρελαϊκά, όπως έχει ήδη αναφερθεί.

Η διαδικασία που ακολουθείται για την λεπτομερή ανάλυση πετρελαϊκών δειγμάτων και των προσδιορισμό των συστατικών τους μέχρι και το κανονικό εννιάνιο περιγράφεται στη συνέχεια. Αντιπροσωπευτικό δείγμα εισάγεται στον αέριο χρωματογράφο, ο οποίος αποτελείται από μία τριχοειδή στήλη. Η εισαγωγή του δείγματος μπορεί να πραγματοποιηθεί είτε από τον ίδιο τον ερευνητή είτε με αυτόματη έγχυση των υγρών δειγμάτων στον εγχυτήρα διαχωρισμού. Στα πειράματα μας η εισαγωγή του δείγματος έγινε με τον πρώτο τρόπο.

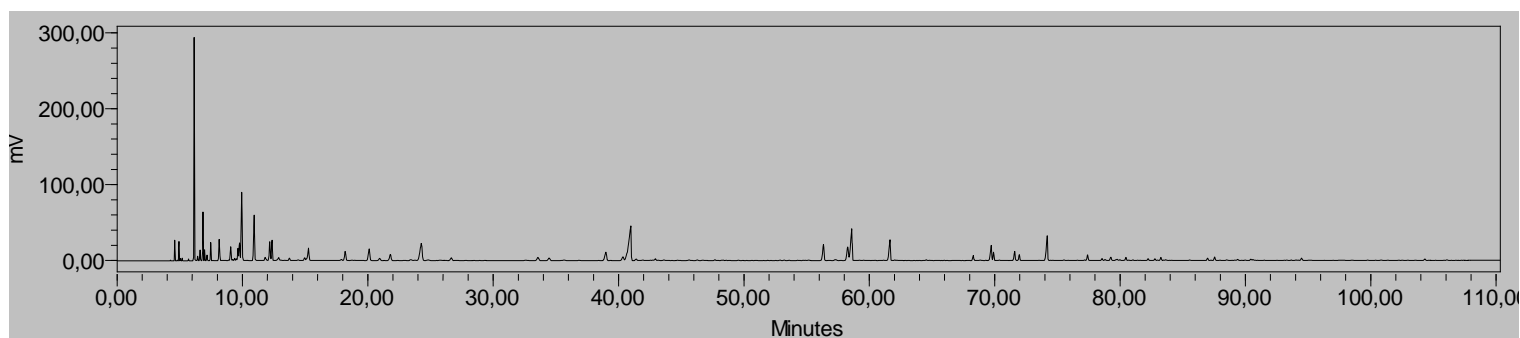
Ήλιο 99,99% καθαρό, λειτουργεί ως φέρων αέριο και μεταφέρει το αεριοποιημένο δείγμα διαμέσου της στήλης όπου και τα συστατικά διαχωρίζονται. Εισάγεται δείγμα αναφοράς (Reformate), που είναι πραγματικό προϊόν καταλυτικής αναμόρφωσης οπότε και προκύπτει το σχήμα 32.



Σχήμα 32: Το χρωματογράφημα του δείγματος αναφοράς (reformate).

Τα συστατικά που διαχωρίζονται εντοπίζονται από έναν ανιχνευτή ιονισμού φλόγας καθώς αυτά διαχωρίζονται στη στήλη. Το σήμα του ανιχνευτή υποβάλλεται σε επεξεργασία από έναν ηλεκτρονικό σύστημα απόκτησης στοιχείων ή από έναν ηλεκτρονικό υπολογιστή.

Κάθε κορυφή προσδιορίζεται μέσω της σύγκρισης του δείκτη συγκράτησης (retention indices) της με αυτούς από τον πίνακα των δεικτών συγκράτησης (βλ. πίνακα 11) και μέσω ενός οπτικού ταιριάσματος με ένα τυποποιημένο χρωματογράφημα (σχήμα 32). Για παράδειγμα για το δείγμα T-782(14/7/2006) το χρωματογράφημα που λαμβάνεται φαίνεται στο σχήμα 33, όποτε συγκρίνοντας αυτό το χρωματογράφημα με το χρωματογράφημα του δείγματος reformate προσδιορίζονται τα περισσότερα συστατικά αυτής της βενζίνης. Στη συνέχεια για τις απροσδιόριστες κορυφές υπολογίζονται οι δείκτες συγκράτησης οι οποίοι και για το συγκεκριμένο δείγμα φαίνονται στον πίνακα 12.



Σχήμα 33: Το χρωματογράφημα του δείγματος T-782(14/7/2006)

Πίνακας 12: Προσδιορισμένες κορυφές με τη χρήση των δεικτών συγκράτησης για το δείγμα T-782(14/7/2006)

	Retention Times	I _{iso}	I _{para}	Συστατικά προσδιορισμένα με τους δείκτες διατήρησης
n-C ₄	4,931	400,0		
	5,041	406,7		
	5,193	415,8		2,2 DIMETHYLPROPANE
	5,695	443,8		
	6,423	480,5		
	6,618	489,6		
n-C ₅	6,849	500,0		
	6,98	503,2		
	7,173	507,8		
	7,468	514,7		
	7,638	518,5		
	8,942	545,2		
	9,06	547,4		
	9,224	550,4		
	9,378	553,3		
	9,512	555,7		
	10,373	570,3		
	11,807	592,3		
n-C ₆	12,179	597,5		
	12,357	600,0		
	12,889	605,2		
	13,062	606,8		
	13,384	609,8		
	13,744	613,1		
	14,441	619,2		
	17,888	645,6		
	25,74	690,4		2,2,4TRIMETHYLPENTANE
	26,085	692,0		
	26,667	694,7		
	26,987	696,2		
n-C ₇	27,833	700,0	700	
	38,992		754,8	3-METHYL-3-ETHYLPENTANE
	40,348		761,4	-
	42,553		772,2	1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE
	42,739		773,1	
	47,685		797,4	TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE+CIS-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE
n-C ₈	48,213		800,0	
	48,342		800,8	
	48,594		802,3	-
	52,889		828,2	4,4-DIMETHYLHEPTANE+9N
	54,271		836,5	1,1,3-TRIMETHYLCYCLOHEXANE
	55,163		841,9	UNIDENTIFIED C9-NAPHTENE
	57,243		854,4	
	57,343		855,0	UNIDENTIFIED C9-NAPHTENE+PARAFFIN
	62,038		883,3	UNIDENTIFIED PARAFFIN
	62,197		884,3	UNIDENTIFIED NAPHTENES
	64,543		898,4	UNIDENTIFIED NAPHTENE
	n-C ₉	64,81		900

Η συγκέντρωση της μάζας κάθε συστατικού προσδιορίζεται από την κανονικοποίηση της περιοχής που καλύπτει η κορυφή του. Οι κορυφές που εμφανίζονται μετά το κανονικό εννιάνιο (n-nonane) αθροίζονται και αναφέρονται ως C₁₀₊. Οπότε τελικά τα εμβαδά των κορυφών για κάθε προσδιορισμένο συστατικό για το δείγμα T-782(14/7/2006) φαίνεται στον παρακάτω πίνακα (πίνακας 13).

Πίνακας 13: Εμβαδά κορυφών των συστατικών του δείγματος T-782(14/7/2006).

	ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	T-782(14/7)
	Density at 15 C	0,7345
	Research Octane Number	95,1
	MON	85
	Induction Period	630
	Lead in Gasoline	0,001
	SULFUR, ppm	42
	Existent Gum	2
	DVPE	60
	Benzene	0,92
	Evaporated at 70 C	36
	Evaporated at 100 C	60
	DISTLL, EVAP 150 C	86
	Distillation, FBP	203
	Distillation Residue	1
	Vapour Liquid Index	
	AROMATICS	25,3
	Oxygenates Content	1,9
	Copper Corrosion	1A
	Oxygen	0,4
	Olefins	14,2
	A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	4958
1	Propane	1441
2	iso-butane	45026
3	n-butane	44492
4	2,2 dimethylpropane	5607
5	iso-pentane	811181
6	n-pentane	177402
7	2,2-dimethylbutane	119819
8	Cyclopentane	71734
9	2,3dimethylbutane	116840
10	2methylpentane	449738
11	3-methylpentane	314279
12	n-hexane	136966
13	2,2dimethylpentane	5882
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	148338
15	Benzene	85743
16	3,3-dimethylpentane	3162
17	Cyclohexane	0

18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	158504
19	3-methylhexane	72211
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	12965
21	trans1,3dimethylcyclopentane	5694
22	3ethylpentane	281090
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	10676
24	2,2,4-trimethylpentane	3985
25	n-heptane	34477
26	2,2dimethylhexane	3786
27	2,5dimethylhexane	43772
28	2,4dimethylhexane	35539
29	3,3dimethylhexane	3275
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	648975
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	4829
32	2,3-dimethylhexane	1539
33	2methyl-3ethylpentane	4386
34	2-methylheptane	16563
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1353
36	3,4dimethylhexane	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	6468
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	1348
40	1,1dimethylcyclohexane	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	6125
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	6324
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	3737
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	6449
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2927
47	n-octane	3690
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	2019
49	unidentified C9-Napthene	3467
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0
51	2,2-dimethylheptane	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1767
53	2,2,3-trimethylhexane	0
54	2,4dimethylheptane	4712
55	4,4-dimethylheptane+9N	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0
57	2methyl-4-ethylhexane	5525
58	2,6dimethylheptane	2711
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0
60	unidentified C9-Napthene	0
61	2,5dimethylheptane	1800
62	3,3-dimethylheptane	1782
63	unidentified C9-Napthene	1069
64	unidentified C9-Napthene	3572
65	Ethylbenzene	161346
66	unidentified C9-Napthene	5546
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	5770
68	unidentified Napthene+Paraffin	0

69	p-xylene	158258
70	m-xylene	367630
71	2,3dimethylheptane	1351
72	4-ethylheptane	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1504
74	3ethylheptane	0
75	3-methyloctane	648
76	unidentified C9-Napthene	2216
77	o-xylene	212692
78	unidentified Paraffin	4744
79	unidentified Napthenes	1278
80	unidentified Napthene	0
81	unidentified Napthene	0
82	n-nonane	6788

Η γνώση των περιεχόμενων υδρογονανθράκων που περιλαμβάνει ένα πετρελαϊκό δείγμα, αναμορφωμένο ή αλκυλιοποιημένο χρησιμοποιείται στην αξιολόγηση των ακατέργαστων πετρελαίων, στην διεργασία της αλκυλοποίησης και αναμόρφωσης καθώς και στην αξιολόγηση της ποιότητας των προϊόντων. Η λεπτομερής σύνθεση των υδρογονανθράκων χρησιμοποιείται επίσης ως είσοδος σε μαθηματικά μοντέλα.

Η πειραματική διάταξη που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της σύνθεσης των υδρογονανθράκων που περιέχονται σε ένα πετρελαϊκό δείγμα και η οποία χρησιμοποιήθηκε και στις αναλύσεις που πραγματοποιήσαμε, παρουσιάζεται παρακάτω. Τα δείγματα είναι κανονική βενζίνη 95 και 100 οκτανίου (95 RON και 100RON αντίστοιχα) καθώς και δείγματα αμόλυβδης βενζίνης. Τα δείγματα συλλέχθηκαν μεταξύ Μαΐου και του Νοεμβρίου του 2006 από δεξαμενές ελληνικών εγκαταστάσεων. Τα πειράματα που πραγματοποιήθηκαν ήταν εννενήντα έξι παρόλο που τα δείγματα ήταν εβδομήντα τλεσερα (κάποια από τα δείγματα ανάλυθηκαν δύο φορές έτσι ώστε να υπάρχει η δυνατότητα σύγκρισης των αποτελεσμάτων και φτιαχτηκαν επίσης δέκα μίγματα από τα υπάρχοντα δείγματα). Πενήντα από τα δείγματα ήταν κανονικής και εικοσιτεσσάρα αμόλυβδης βενζίνης. Τα δείγματα αποθηκεύτηκαν σε γυάλινα φιαλίδια των 40ml στους 4° C πριν από την ανάλυση. Αναλύθηκαν χρησιμοποιώντας ένα Perkin-Elmer 8700 GC, εξοπλισμένο με μια τριχοειδή στήλη Supelco SPB™ OCTYL 60m x 0.25mm x 1.0µm. Η θερμοκρασία του φούρνου του GC προγραμματίστηκε στους 35°C για 30min, ανεβαίνοντας με ρυθμό 2°C/min μέχρι τους 280°C. Ο εγχυτήρας (split/splitless 1/150) τέθηκε στους 250°C και ο ανιχνευτής FID στους 300°C. Το λογισμικό Millennium32® χρησιμοποιήθηκε για τη συλλογή δεδομένων και τη βέλτιστη επεξεργασία. Πενήντα τέσσερα συστατικά προσδιορίστηκαν βασισμένα στο χρόνο συγκράτησης τους χρησιμοποιώντας αναλυτικά πρότυπα reformate από το Supelco.

Επιπλέον, τριάντα τέσσερα συστατικά καθορίστηκαν χρησιμοποιώντας τους δημοσιευμένους δείκτες συγκράτησης Kovats. Η σχετική συγκέντρωση κάθε συστατικού υπολογίστηκε ως η ομαλοποιημένη μέγιστη περιοχή στη συνολική περιοχή των ογδόντα δύο προσδιορισμένων υδρογονανθράκων.

Η θερμοκρασία του φούρνου ρυθμίζεται στους 35⁰ C και εν συνεχεία αφήνεται ο φούρνος να εξισορροπηθεί για τουλάχιστον 15 min και κατόπιν παρατηρείται η θερμοκρασία του. Εάν η ανάγνωση του ανεξάρτητου αισθητήρα θερμοκρασίας είναι διαφορετική από 0,5⁰ C από τους 35⁰ C, ακολουθούνται οι οδηγίες της κατασκευής για να ρυθμιστεί η βαθμολόγηση της θερμοκρασίας του φούρνου του αέριου χρωματογράφου. Έπειτα ανοίγουμε τον ανιχνευτή ιονισμού φλόγας και αφήνουμε το σύστημα να εξισορροπηθεί. Στη συνέχεια τίθενται το ποσοστό ροής αερίου μεταφοράς έτσι ώστε ο χρόνος συγκράτησης του τολουολίου να είναι στους 35⁰ C 29.6±0.2min.

Η υπερφόρτωση της στήλης μπορεί να προκαλέσει την απώλεια διαχωρισμού για μερικά συστατικά και, δεδομένου ότι οι υπερφορτωμένες κορυφές είναι λοξές, οι χρόνοι συγκράτησης ποικίλουν. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένο προσδιορισμό συστατικών. Για να αποφευχθούν οι απώλειες λόγω της αστάθειας, δεν πρέπει να χρησιμοποιείται άλλο αέριο ανάφλεξης εκτός από το n- εξάνιο. Στον πίνακα 14 παρουσιάζονται οι συνθήκες λειτουργίας των πειραμάτων της παρούσας εργασίας.

Πίνακας 14: Συνθήκες Λειτουργίας

Πρόγραμμα θερμοκρασίας στηλών	
Αρχική θερμοκρασία	35 °C±0,5 °C
Προ-έγχυση χρόνος ισορρόπησης	5 min
Αρχικός χρόνος λαβής	30 min
Ποσοστό προγράμματος	2 °C/min
Τελική θερμοκρασία	200 °C
Τελικός χρόνος λαβής	10 min
Εγχυτήρας	
θερμοκρασία	200 °C
Διασπασμένη αναλογία	200:1
Μέγεθος δειγμάτων	0,2 έως 1,0 µL
Ανιχνευτής	
Τύπος	ιονισμού φλόγας
Θερμοκρασία	250 °C
Αέριο καυσίμων	υδρογόνο (~30mL/min)
Φέρων Αέριο	
Τύπος	Ήλιο
Μέση γραμμική ταχύτητα	~23cm/s @35 °C

Εφόσον έχουν ρυθμιστεί τα όργανα στη συνέχεια εγχύεται δείγμα από 0,2 έως 1,0μL και αρχίζει η ανάλυση.

Έχει ήδη σημειωθεί ότι κάθε κορυφή προσδιορίζεται με οπτικό ταίριασμα με το αντίστοιχό του στο χρωματογράφημα του προτύπου δείγματος (σχήμα 32). Οι κορυφές μετά από το n-εννιάνιο δεν προσδιορίζονται χωριστά. Κάθε κορυφή μπορεί επίσης να προσδιοριστεί με το ταίριασμα του δείκτη συγκράτησης της με αυτόν των ενώσεων που απαριθμούνται στις εξισώσεις και οι δείκτες συγκράτησης δίνονται στο πίνακα 11. Οι δείκτες συγκράτησης των ενώσεων που διαχωρίζονται με εκχύλιση κατά τη διάρκεια της αρχικής ισόθερμης πρέπει να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας την εξίσωση Kovats. Οι δείκτες συγκράτησης όλων των άλλων συστατικών πρέπει να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας την εξίσωση των γραμμικών δεικτών. Οι διαφορές από τις τιμές στον πίνακα πρέπει να επιτραπούν λόγω των μικρών διαφορών στις στήλες, τη θερμοκρασία και τη ροή. Οι χρόνοι συγκράτησης και επομένως οι δείκτες συγκράτησης ποικίλλουν επίσης ως αποτέλεσμα της υπερφόρτωσης των στηλών. Αθροίζονται όλες οι κορυφές που διαχωρίζονται με εκχύλιση. Μετά από το n-εννιάνιο, η ομάδα των κορυφών αυτών θα αντιμετωπιστεί ως ενιαίο συστατικό, C₁₀₊. Υπολογίζεται η επί τοις εκατό μάζα κάθε συστατικού (συμπεριλαμβανομένου C₁₀₊) σύμφωνα με την ακόλουθη εξίσωση:

$$\text{Μάζα \% συστατικού } i = \left(\frac{A_i * B_i}{\sum (A_i * B_i)} \right) * 100$$

Όπου:

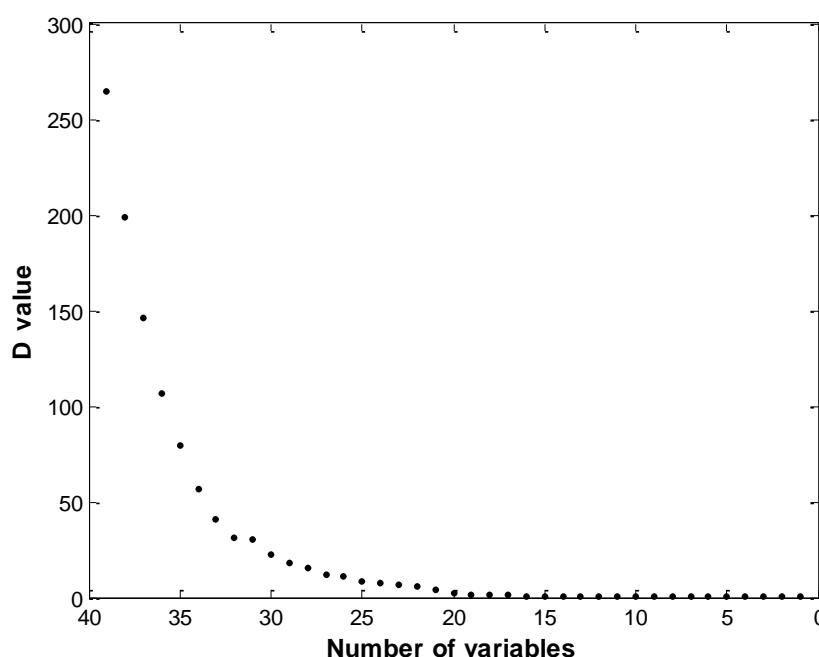
A_i= εμβαδόν της κορυφής που αντιπροσωπεύει το συστατικό i, και

B_i= σχετικός παράγοντας μαζικού εμβαδού για το συστατικό i. Χρησιμοποιείται ένας σχετικός παράγοντας ίσος με 1,00 για όλα τα συστατικά εκτός από το βενζόλιο (0,90) και το τολουόλιο (0,95). Ακολουθώς οι επί τοις εκατό μάζες εκτίθενται και προσδιορίζεται κάθε συστατικό μέσω του n- εννιανίου στο κοντινότερο 0.01%. [12]

Η πειραματική διαδικασία και οι υπολογισμοί που πραγματοποιήθηκαν για το δείγμα T-782(14/7/2006) έγιναν και για όλα τα άλλα δείγματα, τα αποτελέσματα των οποίων φαίνονται στους πίνακες του παραρτήματος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: «Συζήτηση - Αποτελέσματα»

Περίπτωση 1. Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η αξιολόγηση της απόδοσης ταξινόμησης της προτεινόμενης χημειομετρικής μεθοδολογίας και η σύγκριση των αποτελεσμάτων της με αυτά που λήφθηκαν από τους Doble et al όταν εφαρμόζονται στο ίδιο σύνολο στοιχείων. Όλος ο υπολογισμός πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας το λογισμικό Matlab®. Ο στόχος της ταξινόμησης ήταν η επιτυχής άμεση κατηγοριοποίηση των δειγμάτων σε έναν από τους τέσσερις εμπορικούς τύπους της βενζίνης. Αρχικά, μετά από τη διαδικασία της μεταβλητής μείωσης, ο αρχικός αριθμός μεταβλητών (σε αυτήν την περίπτωση, σαράντα τέσσερα) μειώθηκε σε δέκα. Η εισαγωγική παράμετρος K ορίζεται ως ο αριθμός των κύριων συστατικών που απαιτούνται για να υπολογιστεί το 90% της διαφοράς από την αρχική μήτρα των στοιχείων. Εδώ, αυτή η παράμετρος ήταν ίση με πέντε ($K = 5$). Δέκα μεταβλητές επιλέχθηκαν βασισμένες στο μέτρο D . Αυτή η ποσότητα σχεδιάζεται στο σχήμα 34 ως η συνάρτηση του αριθμού των μεταβλητών που αποκλείστηκαν από το πλήρες σύνολο στοιχείων. Ο αριθμός q καθορίστηκε από την οπτική εξέταση της καμπύλης στην τιμή όπου το D συγκλίνει ασυμπτωτικά στον άξονα των X .



Σχήμα 34. Η τιμή D παρουσιάζεται ως η συνάρτηση του αριθμού των μεταβλητών για την πρώτη ομάδα των δειγμάτων. Σημειώνεται ότι ο αριθμός abscissa (τριάντα εννέα) είναι ο συνολικός αριθμός των εναπομεινάντων μεταβλητών μετά την επιλογή του k .

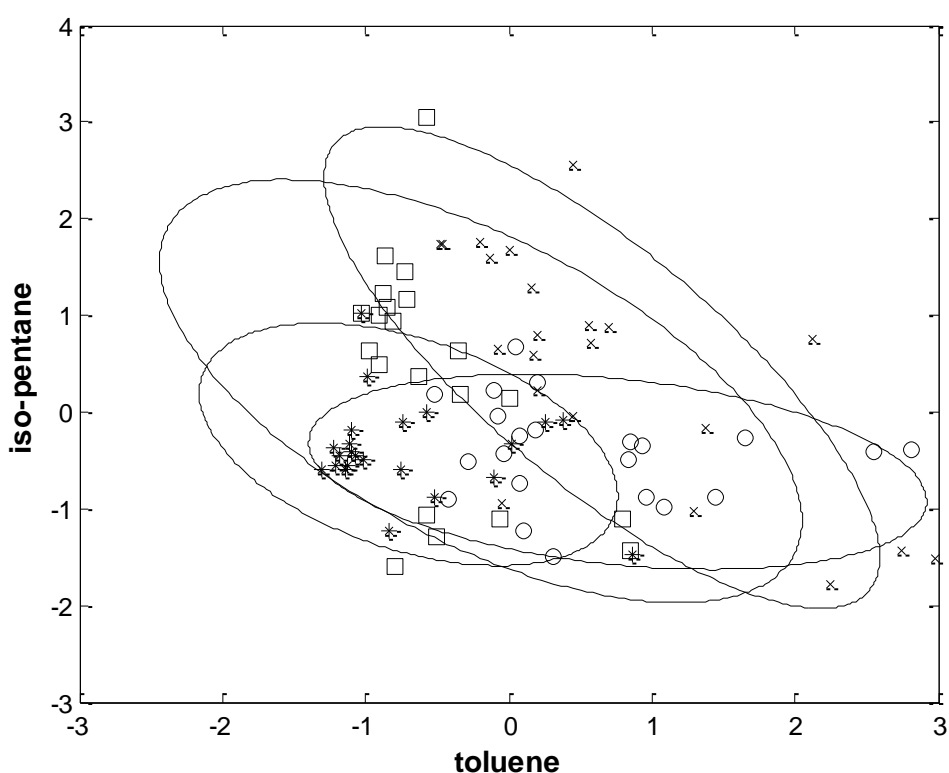
Οι μεταβλητές που παρουσιάζονται στον πίνακα 15 θεωρήθηκαν ως οι πιο πληροφοριακές δεδομένου ότι διατηρούν αποτελεσματικά τη δομή των δεδομένων στο πρώτο set των πέντε κύριων συστατικών.

Πίνακας 15. Λίστα των επιλεγμένων μεταβλητών και για τις δύο περιπτώσεις ανάλυσης.

Number	Case 1	Case 2
1	2,2,4-trimethylpentane	toluene
2	pentane	3-ethylpentane
3	isopentane	methylcyclopentane
4	toluene	2-methylpentane
5	butane	iso-pentane
6	1,2,4-trimethylbenzene	iso-butane
7	m-xylene	m-xylene
8	2-methylhexane	n-butane
9	o-mylene	cyclopentane
10	2,3,4-trimethylpentane	3-methylpentane

Το προκύπτον σύνολο στοιχείων των υποσυνόλων (88x10) εισήχθη έπειτα στον αλγόριθμο EM (με τυποποιημένη μορφή) για να καθορίσει τις παραμέτρους κάθε κατηγορίας ξέροντας εκ των προτέρων τον αριθμό των κατηγοριών ($v = 4$, σε αυτήν την περίπτωση). Ο αλγόριθμος, που παρουσιάστηκε από τους Vlassis και Likas χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των στατιστικών πρότυπων των παραμέτρων (μ και Σ). Όταν ολοκληρωσ ο πληθυσμός των δειγμάτων περιλήφθηκε στο σχέδιο της ταξινόμησης, ο αλγόριθμος ήταν σε θέση "να προσδιορίσει" το συνεταιρισμό της ομάδας κάθε δείγματος χωρίς οποιαδήποτε λάθος ταξινόμησης. Προκειμένου να ελεγχθεί η προφητική δυνατότητα των γκαουσιανών προτύπων στα "απαρατήρητα" δείγματα, 20% του πληθυσμού κάθε ομάδας (δηλ., 5 δείγματα από κάθε κατηγορία) επιλέχτηκαν τυχαία ως σύνολο δοκιμής. Τα πρότυπα εφαρμόστηκαν στο υπόλοιπο 80% των δειγμάτων και στη συνέχεια εφαρμόστηκαν στο σύνολο δοκιμής, δηλ. οι παράμετροι μ και Σ χρησιμοποιήθηκαν για να υπολογιστεί η μέγιστη πιθανότητα του υπολοίπου των στοιχείων. Μια λάθος ταξινόμηση εμφανίστηκε κατά τη διάρκεια αυτής της δοκιμής. Αυτή η διαδικασία εφαρμόστηκε αρκετές φορές χρησιμοποιώντας διαφορετικά υποσύνολα έτσι ώστε να εξασφαλιστεί η ευρωστία της διαδικασίας ταξινόμησης. Όλες οι

δοκιμές οδήγησαν σε εξίσου επιτυχείς ταξινομήσεις δίνοντας ένα ποσοστό που δεν μειώθηκε κάτω από 95%. Αυτό το ποσοστό είναι περίπου 30% υψηλότερο από αυτό που αναφέρεται από τους Doble et al, για την απαιτητική περίπτωση να ταξινομηθούν ταυτόχρονα και οι τέσσερις ομάδες. Το σχήμα 35 παρουσιάζει την διασπορά δύο από τις επιλεγμένες μεταβλητές (τολουόλιο και iso-pentane) σε τυποποιημένη μορφή. Οι ελλείψεις που φαίνονται πάνω από τα στοιχεία είναι οι δισδιάστατες προβολές των πολλών μεταβλητών των γκαουσιανών προτύπων (δέκα διαστάσεις σε αυτήν την περίπτωση) επάνω στο δισδιάστατο μεταβλητό χώρο. Αυτές οι δύο μεταβλητές επιλέχθηκαν τυχαία για να επεξηγήσουν με μια γρήγορη ματιά τη δυσκολία του στόχου ταξινόμησης.



Σχήμα 35. Διάγραμμα των 2 επιλεγμένων μεταβλητών (τολουόλιο – ισοπεντανίο) για την περίπτωση 1. Σημεία: 'x', αμόλυβδη- χειμώνα; 'o', αμόλυβδη - καλοκαίρι; '□', απλή χειμώνα; '*', απλή καλοκαίρι.

Ένας διαχωρισμός μπορεί να γίνει αντιληπτός μεταξύ των τεσσάρων ομάδων χωρίς οποιαδήποτε σαφή όρια σε αυτήν την διάσταση. Προκειμένου να είμαστε σε θέση να γίνονται διακρίσεις επιτυχώς μεταξύ των κατηγοριών, περισσότερες πληροφορίες δίνονται από τις πρόσθετες μεταβλητές που προσθέτουν την διαστατικότητα του προτύπου. Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο οι μεταβλητές πρέπει να επιλέγονται προσεκτικά έτσι ώστε να μπορούν

να δώσουν το απαραίτητο χαρακτηριστικό γνώρισμα που μπορεί να οδηγήσει το γκαουσιανό πρότυπο να προσδιορίσει την κατάλληλη συστάδα.

Περίπτωση 2. Σε αυτήν την περίπτωση, ο στόχος ταξινόμησης ήταν να κάνει διακρίσεις μεταξύ των δειγμάτων απλής και αμόλυβδης βενζίνης. Η ίδια μεθοδολογία ταξινόμησης υιοθετήθηκε όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Η μεταβλητή διαδικασία μείωσης εφαρμόστηκε στη μήτρα στοιχείων (74x82), και ένας συνολικός αριθμός 10 μεταβλητών (πίνακας 15) προέκυψε με $K = 5$ δίνοντας 95% της συνολικής αρχικής διαφοράς. Ο αριθμός των μεταβλητών καθορίστηκε με παρόμοια διαδικασία όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Όταν ολοκληρωσ ο πληθυσμός των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε, ο αλγόριθμος ήταν σε θέση "να προσδιορίσει" το συνεταιρισμό της ομάδας κάθε δείγματος χωρίς οποιοδήποτε λάθος ταξινόμησης. Στη συνέχεια, τα γκαουσιανά πρότυπα εφαρμόστηκαν σε έναν πληθυσμό 15 δειγμάτων από κάθε ομάδα. Όλες οι δοκιμές οδήγησαν στην τέλεια ταξινόμηση (δηλ., ποσοστό 100%) (εφ' όσον ο αριθμός δειγμάτων ήταν ίσος με ή μεγαλύτερος από τον αριθμό μεταβλητών στο υποσύνολο). [33], [34], [35], [36]

4.1. Συμπεράσματα

Αυτό το πλαίσιο ταξινόμησης, που συνδυάζει τη μεταβλητή μείωσης με την προσδοκία-μεγιστοποίησης, έχει αποδειχθεί ένα επιτυχές εργαλείο που είναι σε θέση να ταξινομήσει τα δείγματα βενζίνης των διαφορετικών εμπορικών τύπων.

Καταδείξαμε ότι η χρήση των πολλών μεταβλητών EM-γκαουσιανών προτύπων θα μπορούσε να υπερνικήσει τους περιορισμούς στην ταξινομητική δύναμη, σε σύγκριση με άλλες μεθόδους όπως η pca ή τα νευρωνικά δίκτυα. Αυτό έχει παρουσιαστεί με την αξιολόγηση της απόδοσης αυτής της τρέχουσας μεθόδου σε άλλα προηγούμενως αναφερόμενα αποτελέσματα.

Η επιλογή ενός περιορισμένου συνόλου σημαντικών μεταβλητών, που εξασφαλίζει αληθινή ταξινόμηση μέσα στον πληθυσμό δειγμάτων, μπορεί να μειώσει σημαντικά τις απαραίτητες πειραματικές μετρήσεις, ειδικά όταν πρέπει οι ιδιότητες των δειγμάτων να μετρηθούν από τις διαφορετικές ανεξάρτητες διαδικασίες.

Τέλος, δεδομένου ότι η προτεινόμενη μέθοδος χρησιμοποιεί ως συνθετικό στοιχείο στην αέρια χρωματογραφία, η οποία είναι μια αποδοτική αναλυτική τεχνική ευρέως διαθέσιμη και χαμηλού κόστους, μπορεί να υιοθετηθεί εύκολα ως στερεότυπη διαδικασία στις εφαρμογές που εξετάζουν την ταξινόμηση ρευστών πετρελαίου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1]: «ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΚΑΥΣΙΜΩΝ ΚΑΙ ΛΙΠΑΝΤΙΚΩΝ» Σ.Στούρνας Καθ. Ε.Μ.Π.,
Ε. Λόης Αν. Καθ. Ε.Μ.Π., Φ. Ζαννίκος Επ. Καθ. Ε.Μ.Π., Αθήνα 2002

[2]:<http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%9A%CE%B1%CF%8D%CF%83%CE%B9%CE%BC%CE%B1>

[3]: <http://engineering.catalysis.gr/crudeOilRefining.html>

[4]:<http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%92%CE%B5%CE%BD%CE%B6%CE%AF%CE%BD%CE%B7>

[5]: <http://www.faqs.org/faqs/autos/gasoline-faq/part2/>

[6]:http://el.wikipedia.org/wiki/%CE%91%CF%81%CE%B9%CE%B8%CE%BC%CF%8C%CF%82_%CE%BF%CE%BA%CF%84%CE%B1%CE%BD%CE%AF%CE%BF%CF%85

[7]: <http://www.gcsf.gr/media/gxk/benzines.pdf>

[8]: Ανακοίνωση της Επιτροπής - Ο πετρελαϊκός εφοδιασμός της Ευρωπαϊκής Ένωσης,
/* COM/2000/0631 τελικό */

[9]:<http://sup.kathimerini.gr/xtra/media/files/kathimerini/pdf/oil020407.pdf>

[10]: <http://www.nah.gr/informing/2009-press/11-06-09-1.html>

[11]: <http://www.qualityclub.gr/gr/technologies/chemometrics.htm>

[12]: «Χημειομετρία» Μ. Σταθερόπουλος, Α. Παππά, Αθήνα 1998, Ε.Μ.Π., Τμήμα
χημικών μηχανικών

[13]: Classification of premium and regular gasoline by gas chromatography/
mass spectrometry, principal component analysis and artificial neural

networks, Philip Doble, Mark Sanderock, eric Du Pasquier, Peter Petozc, claude Roux, Michael Dawson, 2002

[14]: Clustering and Classification of Analytical Data, Barry K. Lavine, Clarkson University, Potsdam, USA

[15]: N. Πασαδάκης, συνοπτική παρουσίαση της PCA

[16]: PSC Analytical Spectroscopy Monographs, Chemometrics In Analytical Spectroscopy, Mike J. Adams, Series editor Neil W. Barnett.

[17]: Dimension reduction and classification using PCA and factor analysis, Dipayan Maiti, 2009

[18]: Linear Algebra :Matrix Eigenvalue Problems, Erwin Kreyszc. “Advanced Engineering Mathematics”, Wiley 8th Edition

[19]: Bartholomew (2002) κεφ.2, Μαγδαληνός (1987) κεφ.7, Σιάρδος (2002) κεφ.5

[20]: N. Πασαδάκης, Προσδιορισμός ομάδων σε πληθυσμούς δειγμάτων (cluster analysis)

[21]: Clustering with dendrograms on interpretation variables, M. Forina, C. Armanino, V. Raggio, 2001

[22]: <http://www.statathens.aueb.gr/~jpan/diatrives/Marouga/chapter7.pdf>

[23]: Διαφοροποίηση του γένους Mastus (Beck ,1837) στην Κρήτη, μεταπτυχιακή διατριβή, Παρμακέλη Α. Πανεπιστήμιο Κρήτης, τμήμα βιολογίας, 1998

[24]: <http://en.wikipedia.org/wiki/Dendrogram>

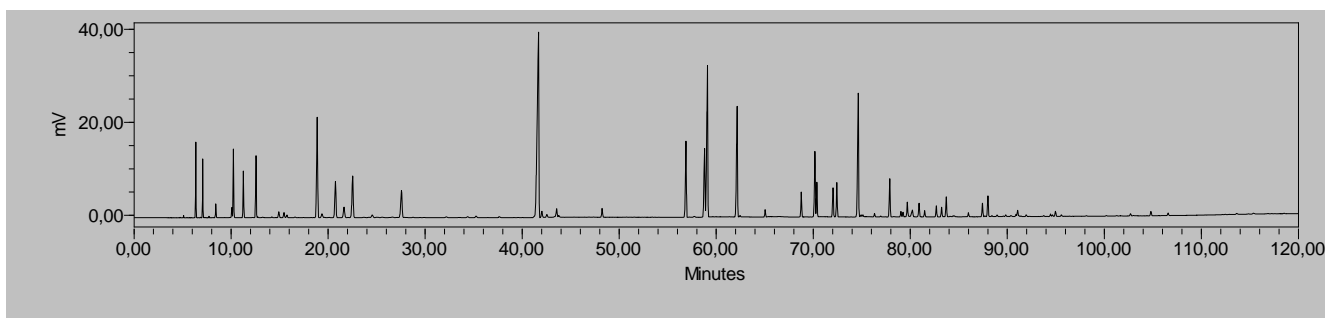
- [25]: http://www.vias.org/tmdatanaleng/cc_dendrograms.html
- [26]: http://portal.tee.gr/portal/page/portal/PUBLICATIONS/SCIENTIFIC_PUBLICATIONS/SEIRA_I/ETOS_1999_I/TAB470406/8SKOPELITI_0.PDF
- [27]: An empirical comparison of four initialization methods for the K-means algorithm, J.M. Pena, J.A. Lozano, P. Larranaga, 1999
- [28]: K-means: A new generalized k-means clustering algorithm, Yiu-Ming Cheung, 2003
- [29]: The global k-means clustering algorithm, Aristidis Likas, Nikos Vlassis, Jakob J. Verbeek, 2002
- [30]: http://students.ceid.upatras.gr/~maurakis/Gene_Expression_Analysis.pdf
- [31]: ASTM, D 5134 -92 (2003) Standard Test Method for Detailed Analysis of Petroleum Naphthas through n-Nonane by Capillary Gas Chromatography
- [32]: Experimental Design Optimization of the Analysis of Gasoline by Capillary Gas Chromatography
- [33]: <http://aibook.csd.auth.gr/include/slides/Chap24.pdf>
- [34]: Classification of gasoline grades using compositional data and expectation – maximization algorithm, Nikos Pasadakis, Andreas A. Kardamakis, Popi Sfakianaki, Mineral Resource Engineering Department, Technical University of Crete, Chania, Greece.

[35]: Doble, P.; Sandercock, M.; Pasquier, E.D.; Petocz, P.; Roux, C.; Dawson, M. Forensic Science International 2003

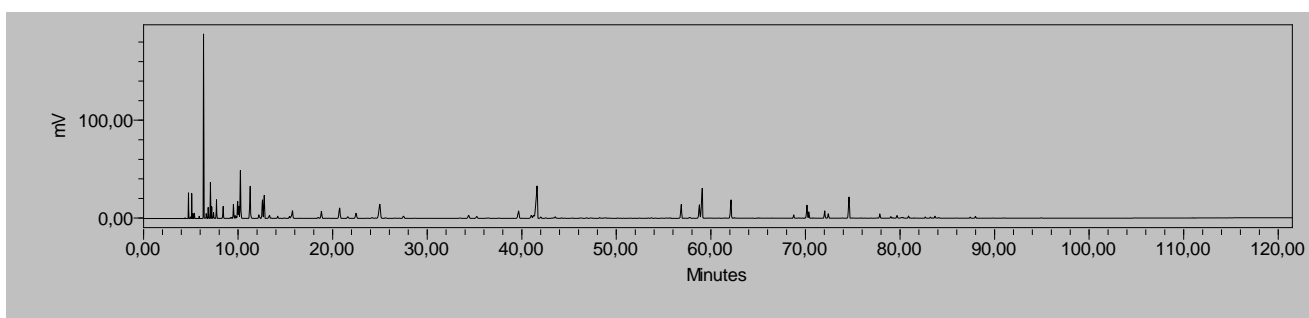
[36]: Vlassis, N.; Likas, A. Neural Processing letters 2002

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

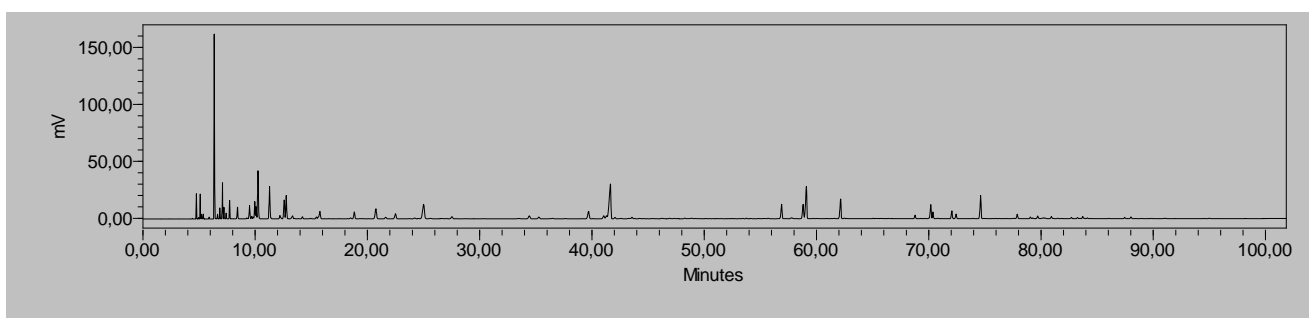
Παρακάτω παρουσιάζονται τα χρωματογραφήματα των δειγμάτων της βενζίνης, τα οποία αναλύθηκαν στην παρούσα εργασία.



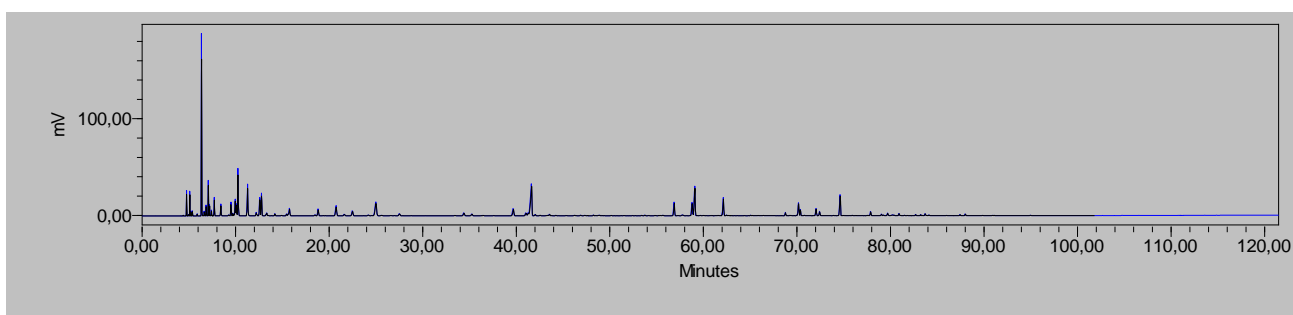
δείγμα: reformate_1



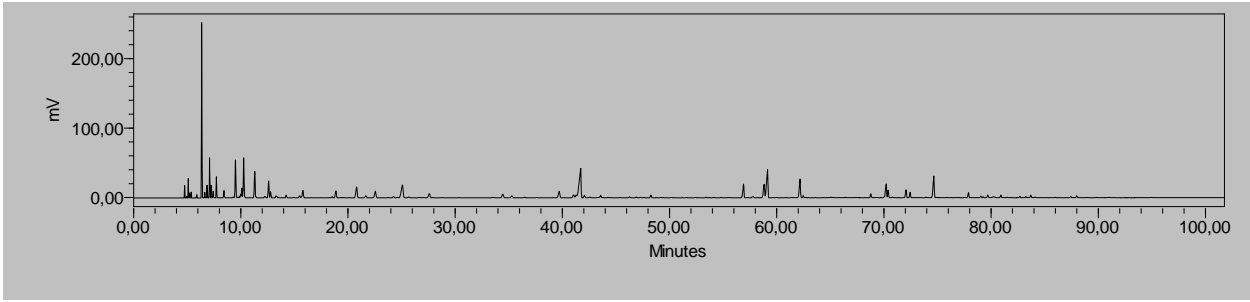
T-703(24_4_2006)



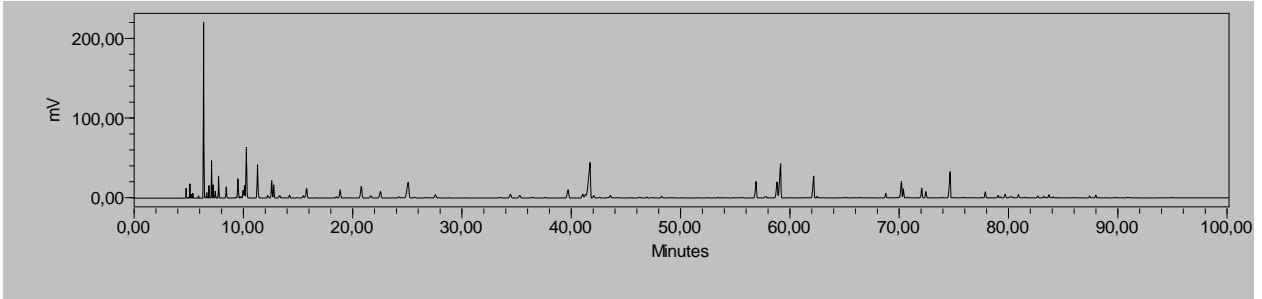
T-703(24_4_2006)rep-new



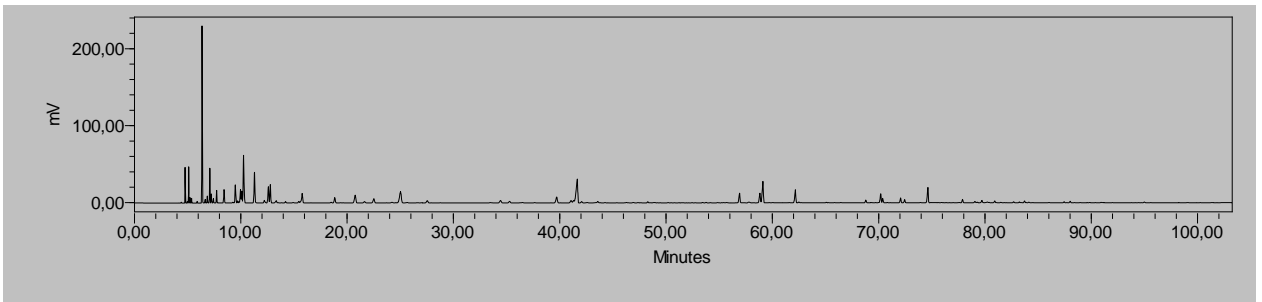
μαυρο: T-703(24_4_2006)rep-new
μπλε: T-703(24_4_2006)



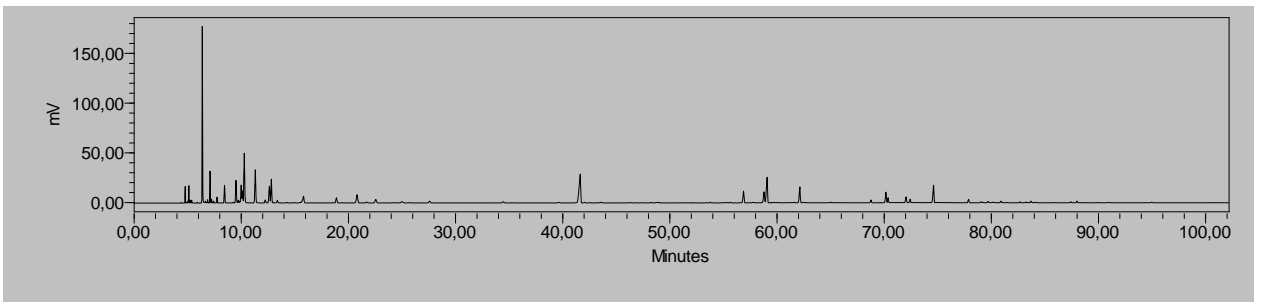
T-783(5_5_2006) ημερομηνία (12/7/2006)



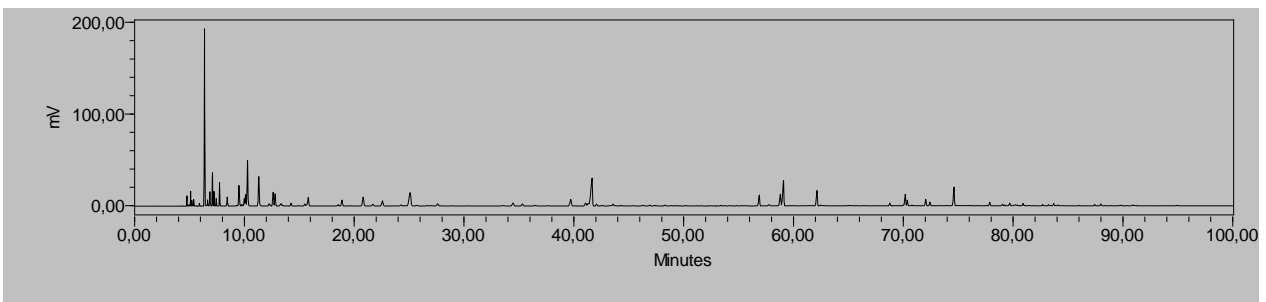
T-782(25_5_2006)



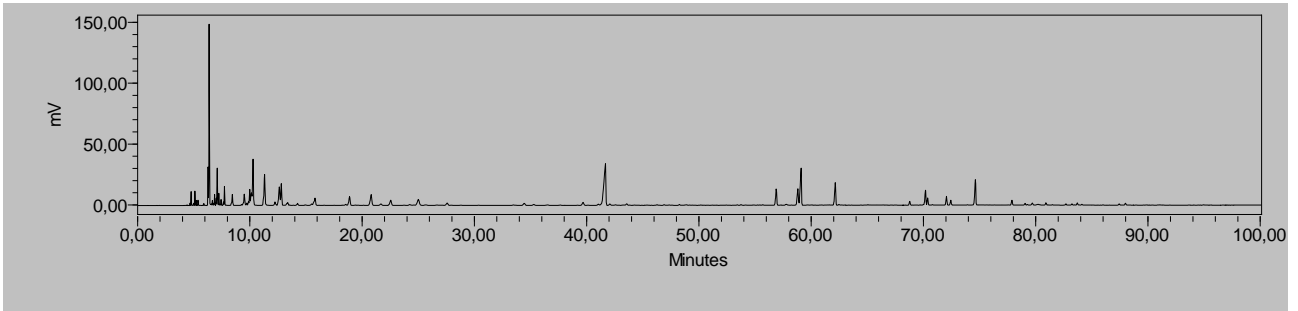
T-783(12_4_2006)



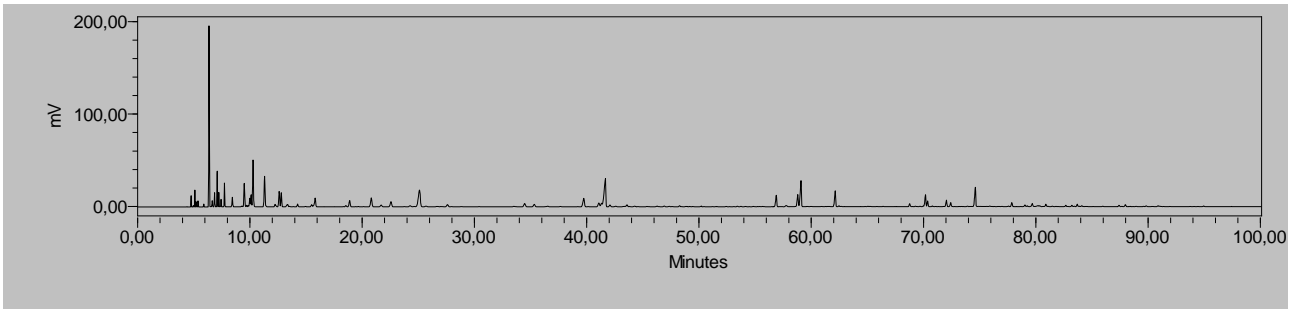
T-2402(20/4/2002)



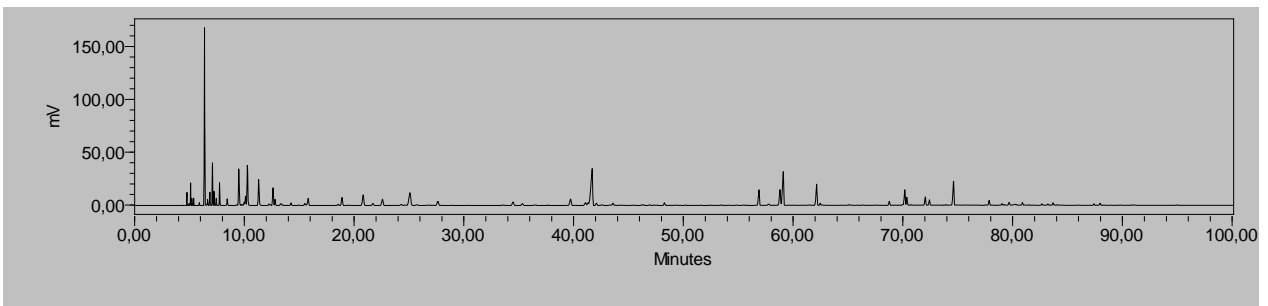
T-782(28/5/2006)



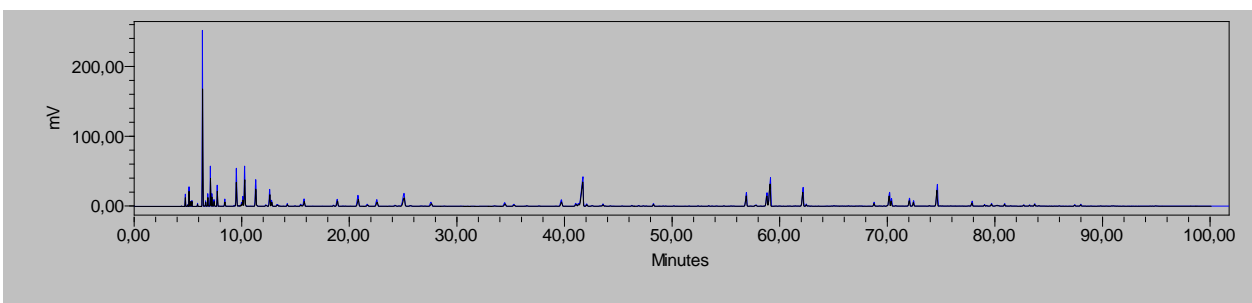
T-703(13/5/2006)



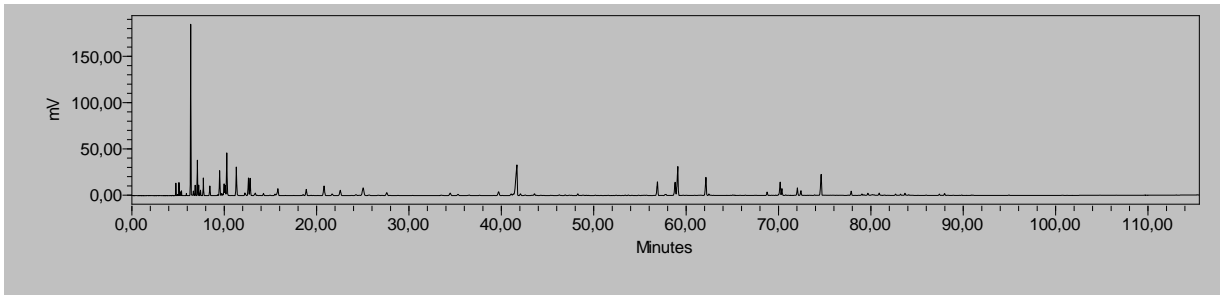
T-783(26/5/2006)



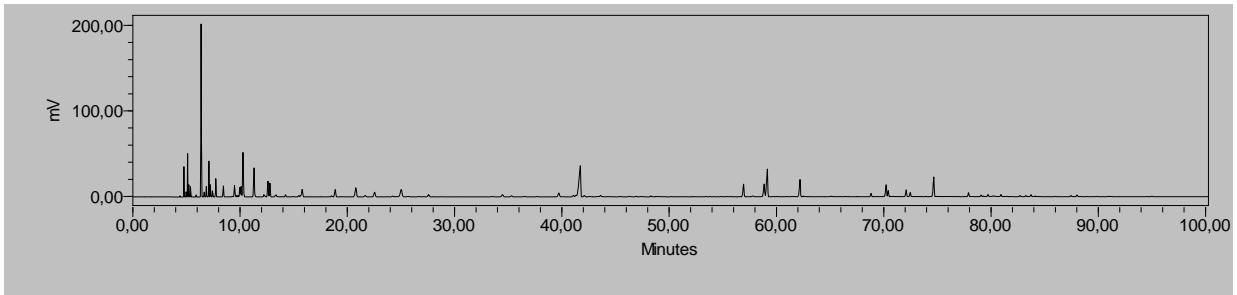
T-783(5/5/2006) ημερομηνία 14/7/2006



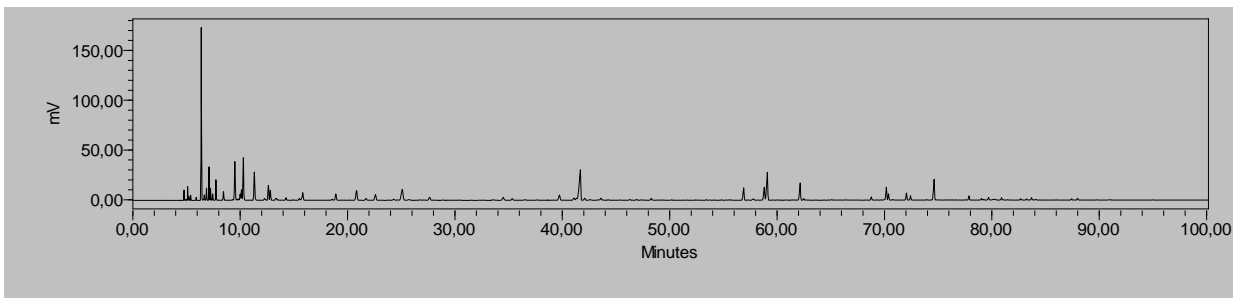
μαυρό: T-783(5/5/2006) ημερομηνία 14/7/2006
μπλε: T-783(5/5/2006) ημερομηνία 12/7/2006



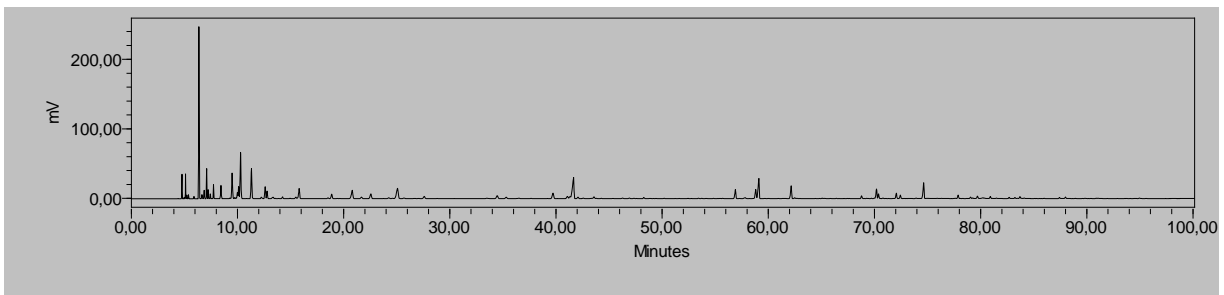
T-782(9/5/2006)



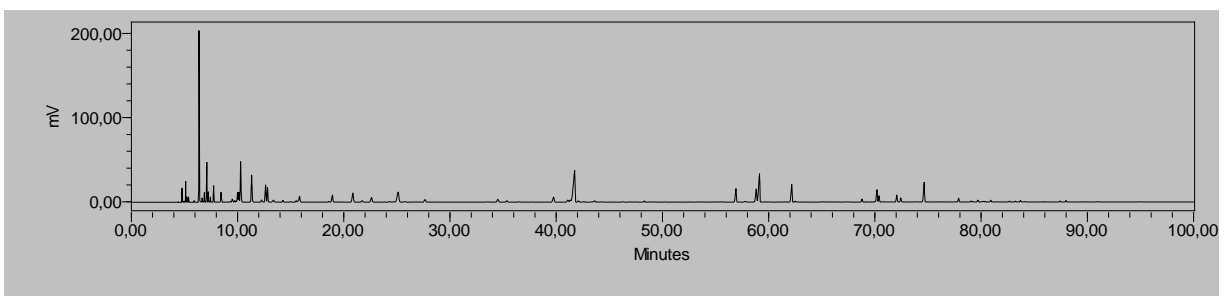
T-783(24/4/2006)



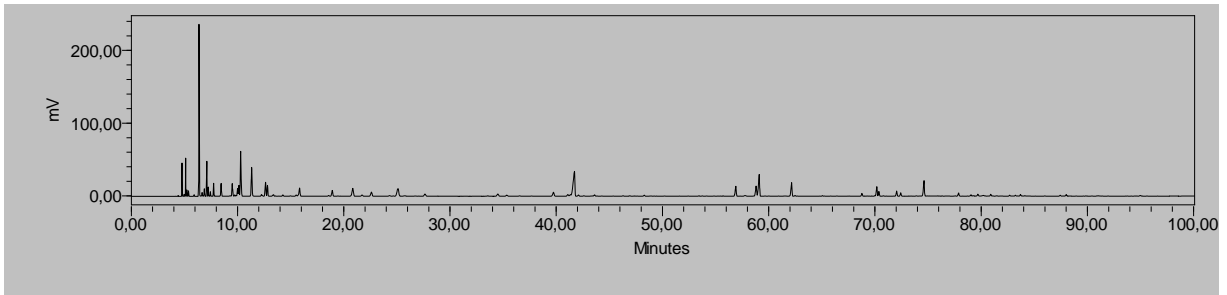
T-783(12/5/2006)



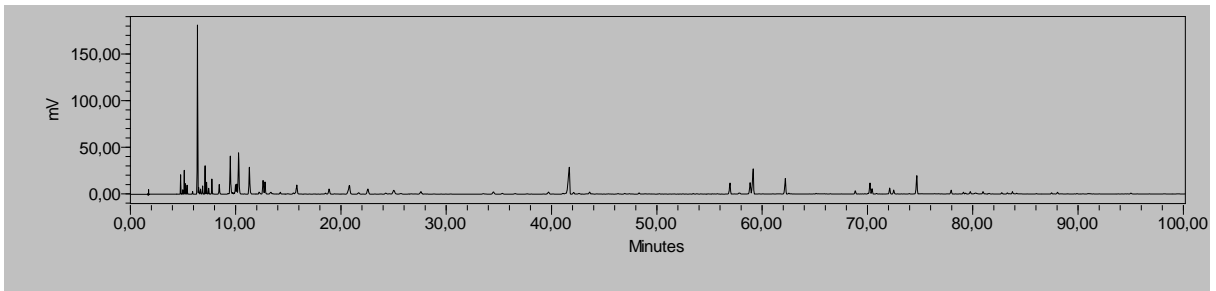
T-782(6/4/2006)



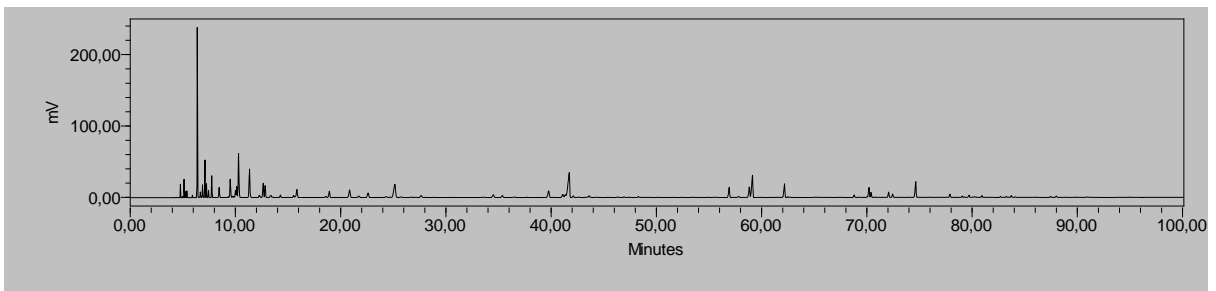
T-782(2/5/2006) (επανάληψη ανάλυσης)



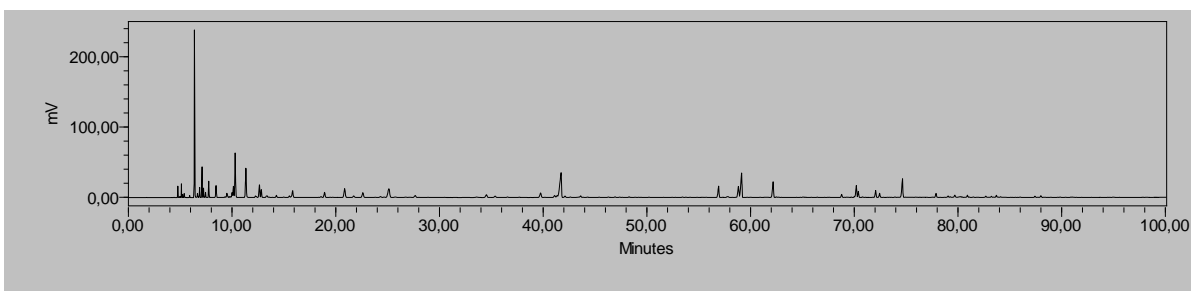
T-782(13/4/2006)



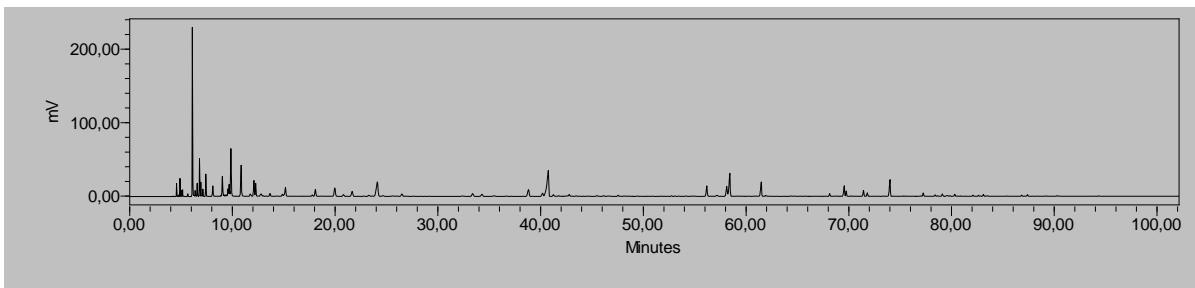
T-703(8/4/2006)



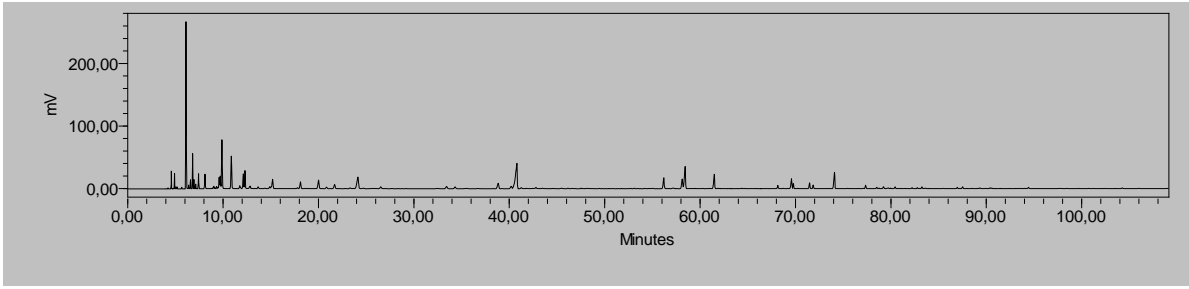
T-783(22/5/2006)



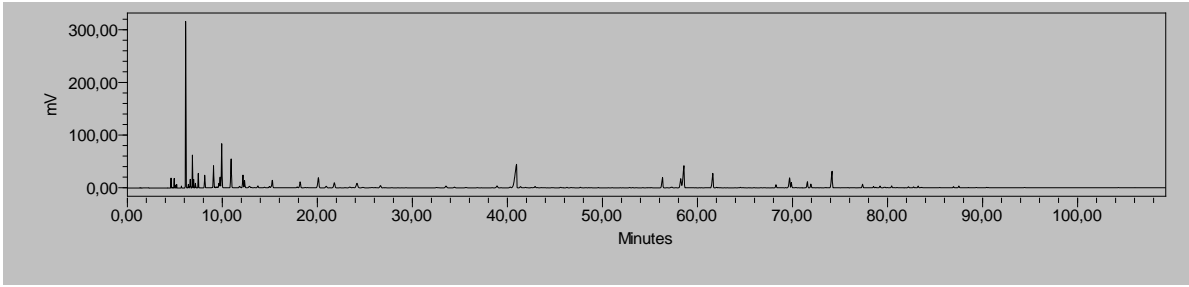
T-782(29/4/2006)



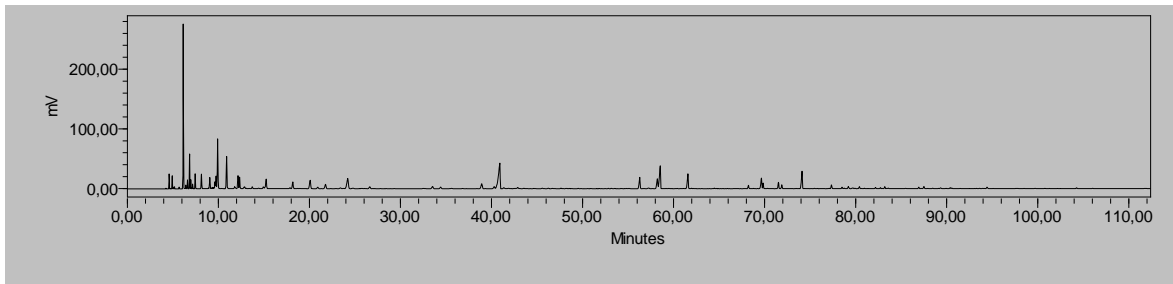
T-783(22/5/2006) (επανάληψη ανάλυσης)



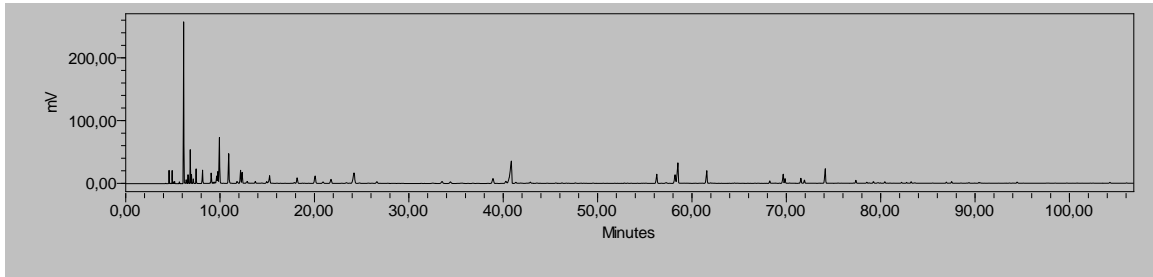
T-703(17/7/2006)



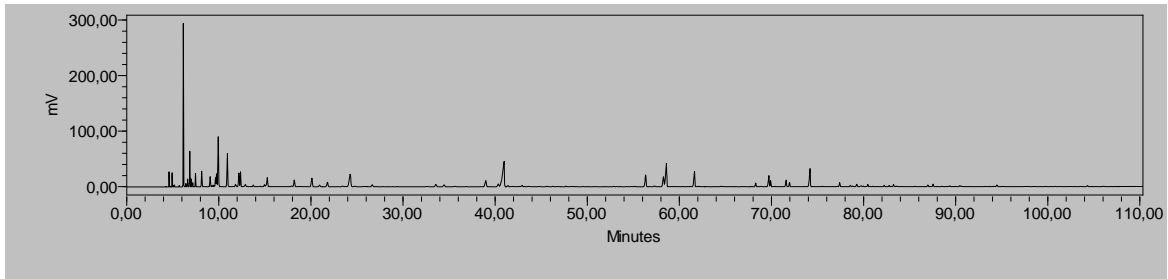
T-703(5/6/2006)



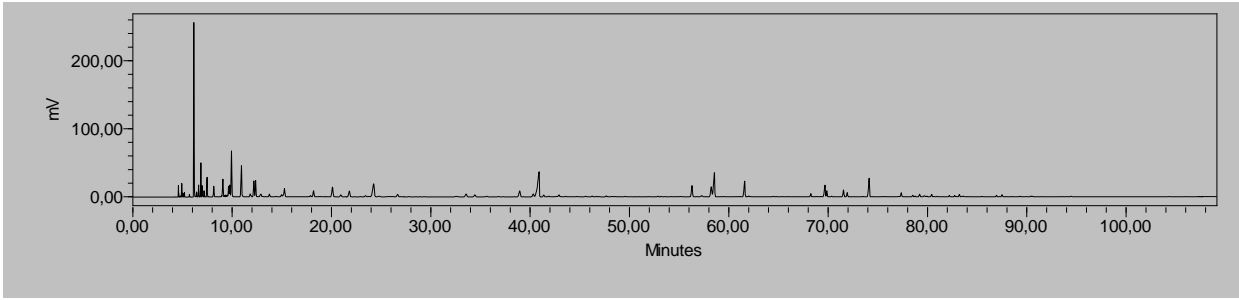
T-782(18/7/2006)



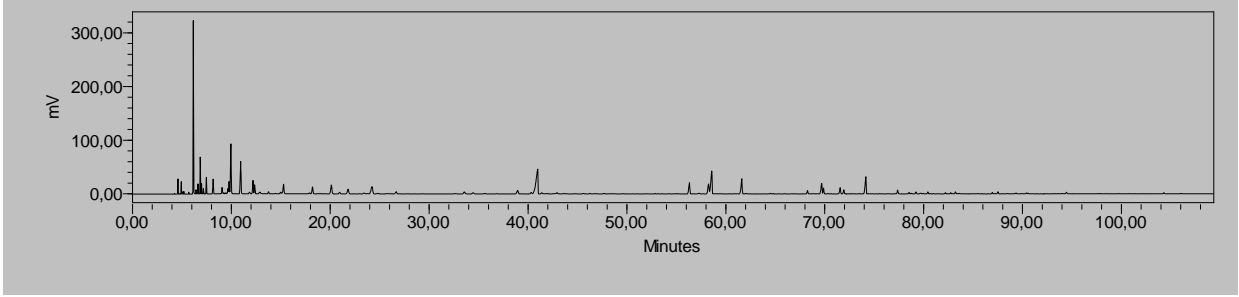
T-783(10/7/2006)



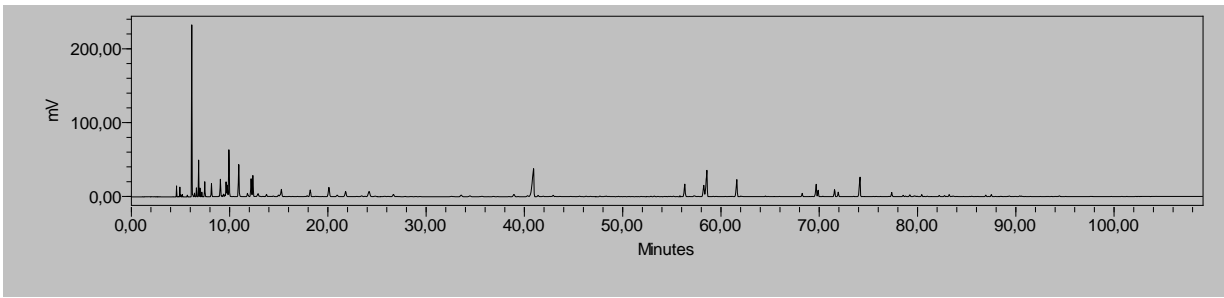
T-782(14/7/2006)



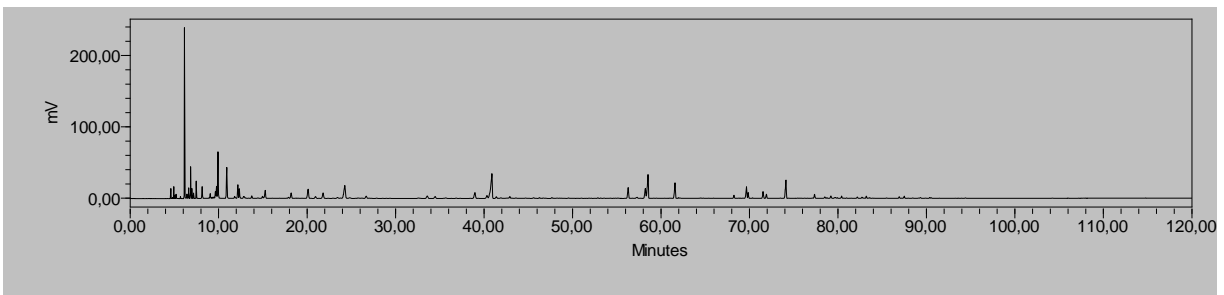
T-783(3/6/2006)



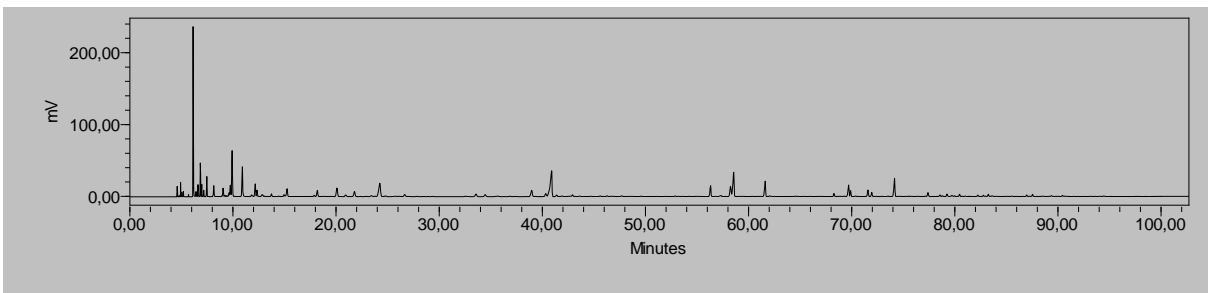
T-703(21/7/2006)



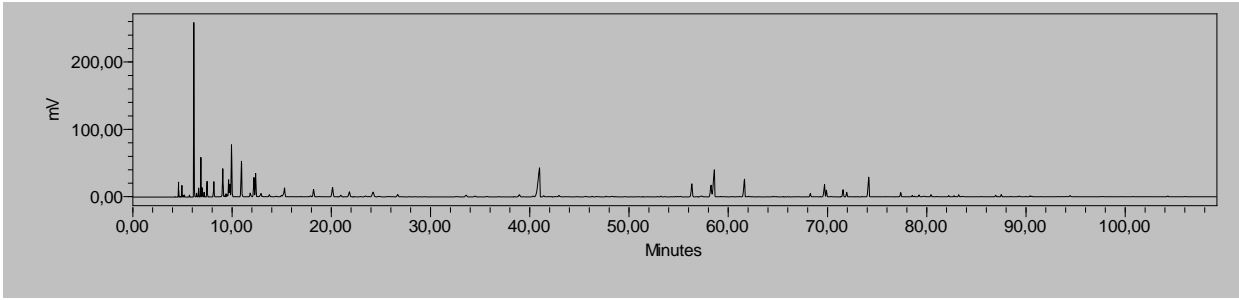
T-703(20/6/2006)



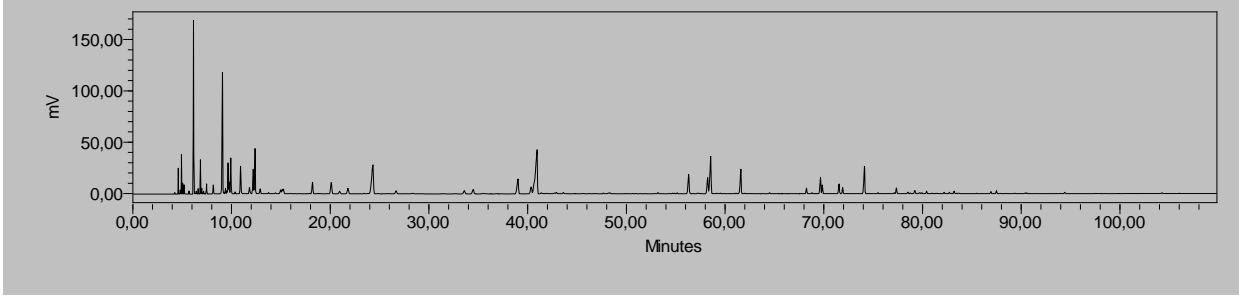
T-783(12/6/2006)



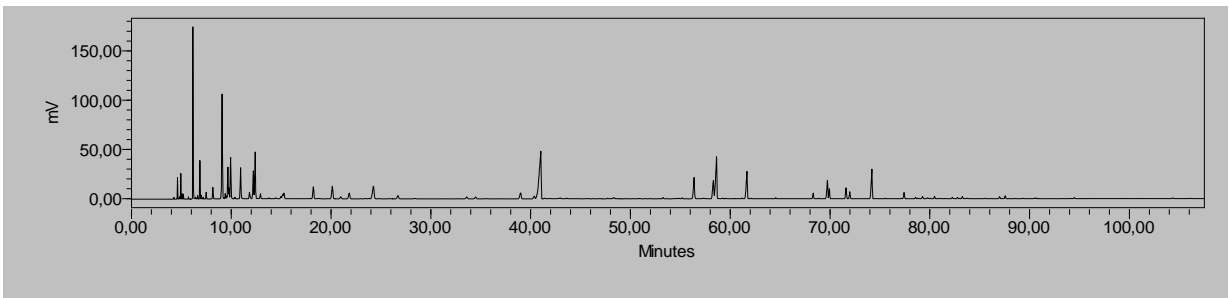
T-783(17/6/2006)



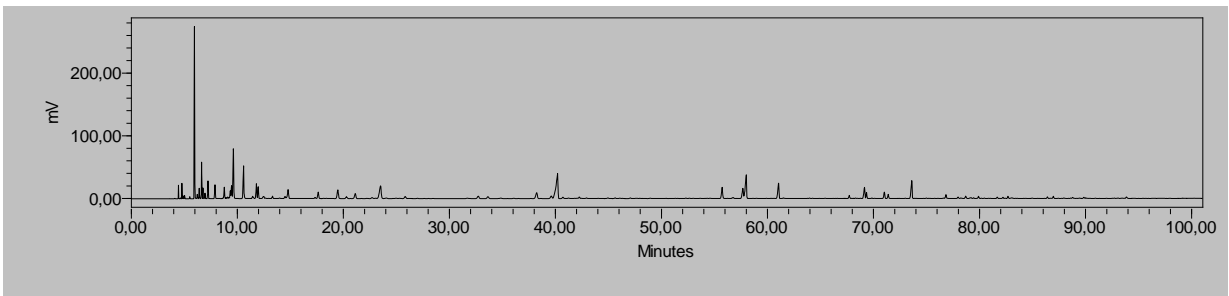
T-703(8/7/2006)



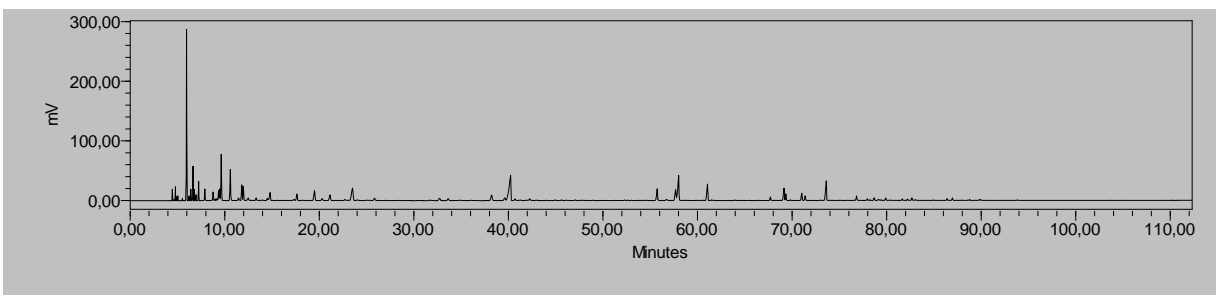
T-2401A(13/7/2006)



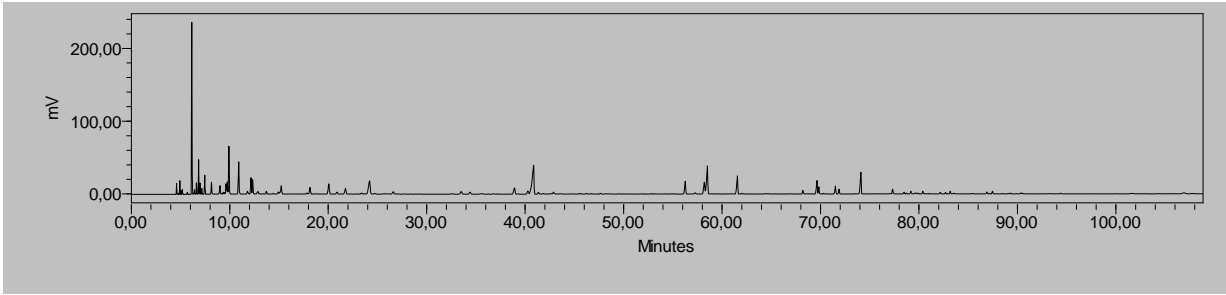
T-2401B(19/7/2006)



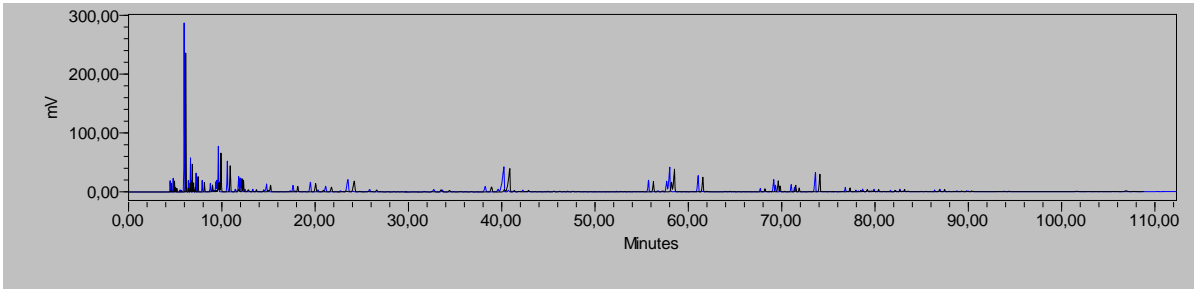
T-782(7/7/2006)rep



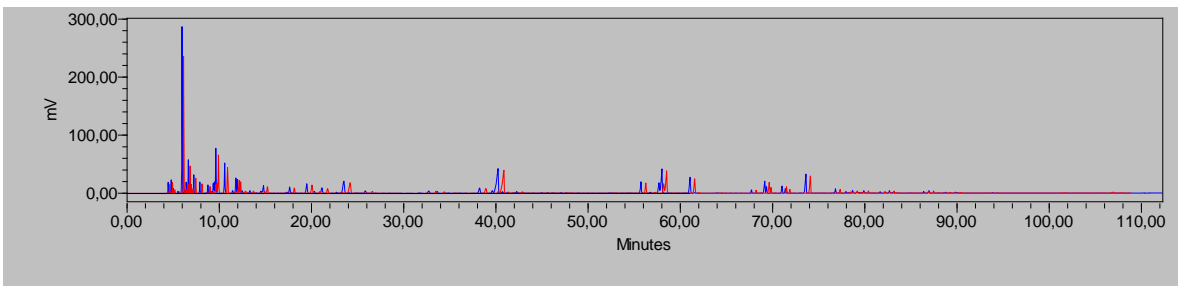
T-782(18/6/2006)rep



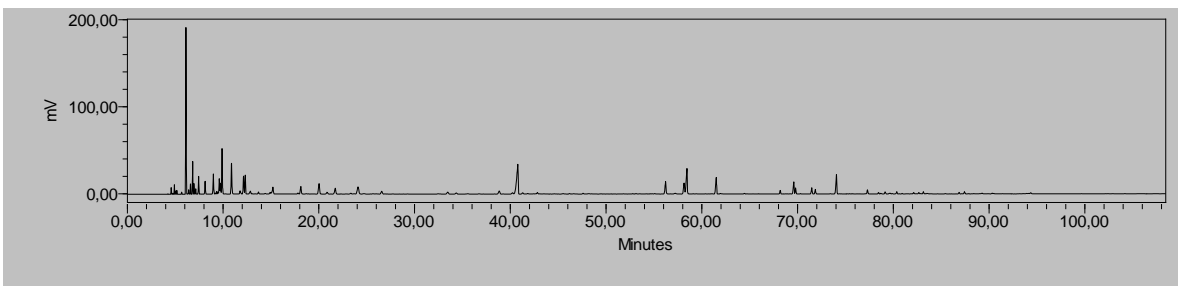
T-782(18/6/2006)



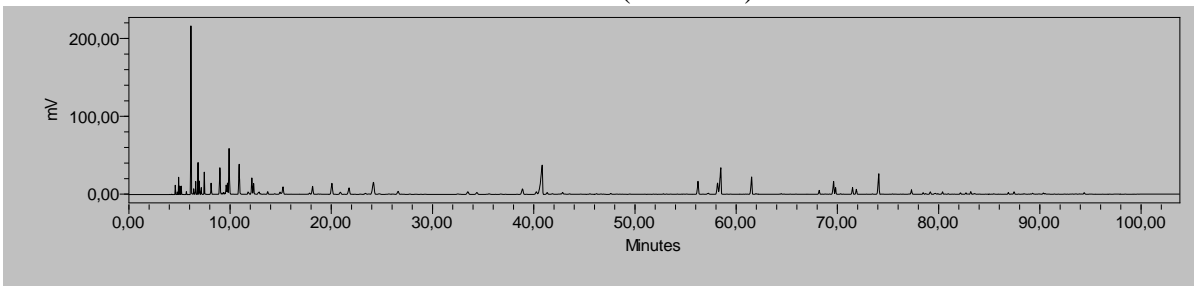
μαυρό: T-782(18/6/2006)
μπλε: T-782(18/6/2006) rep



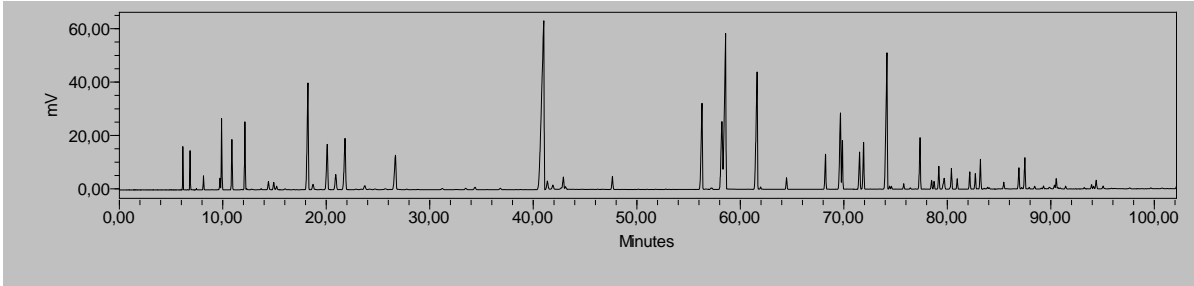
μαυρό: blanc
μπλε: T-782(18/6/2006) rep
κοκκινο: T-782(18/6/2006)



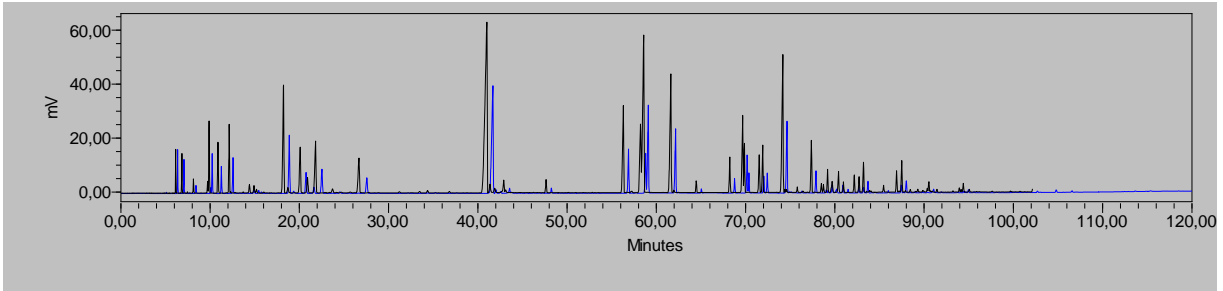
T-2401^A(1/9/2006)



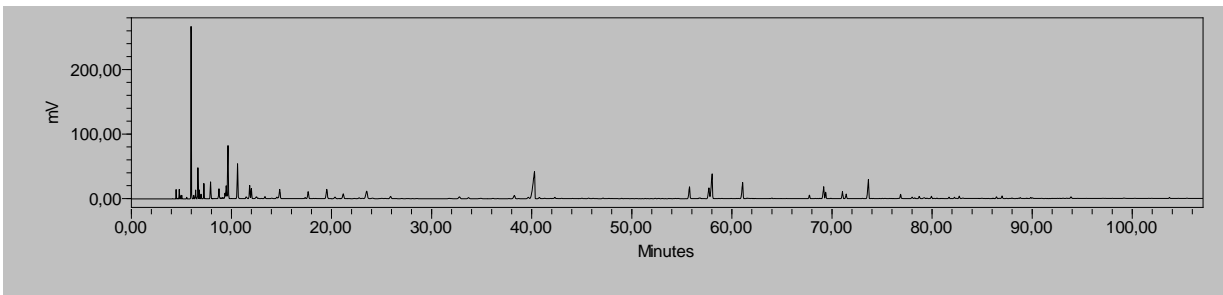
T-704(8/9/2006)



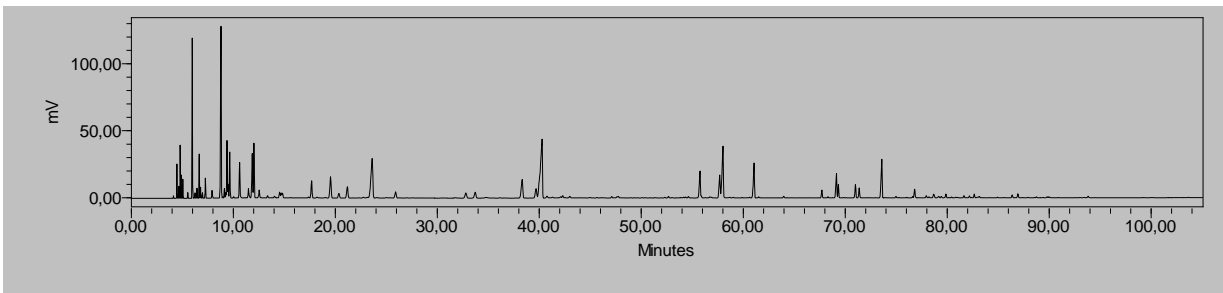
reformate



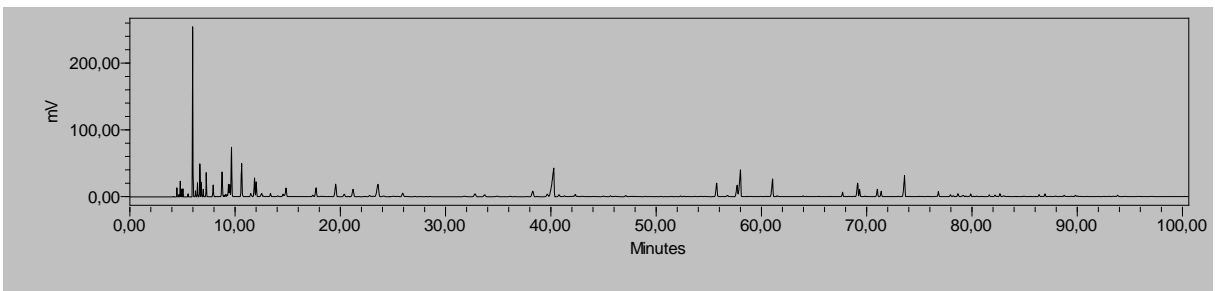
μαυρό:reformate
μπλε:reformate_1



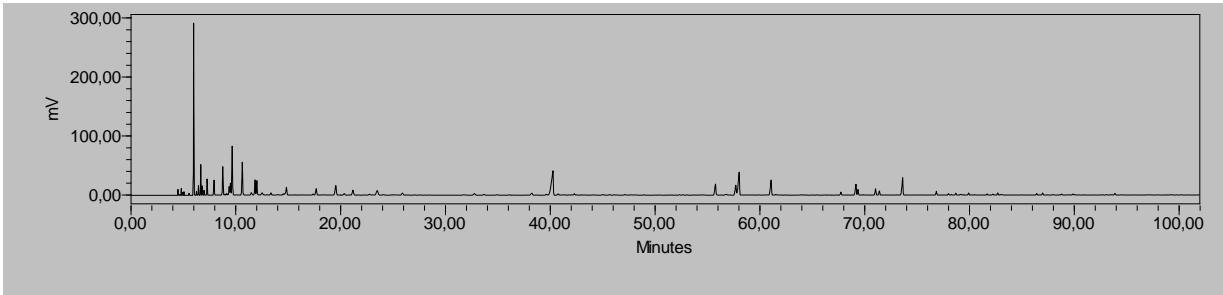
T-703(7/8/2006)



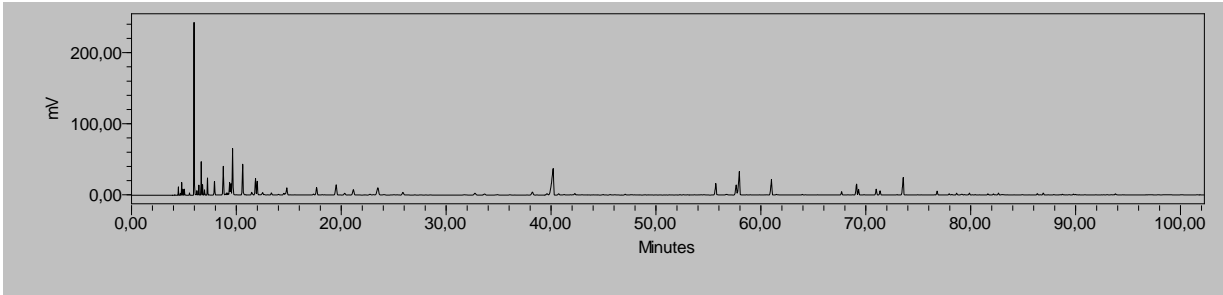
T-2401B(9/9/2006)



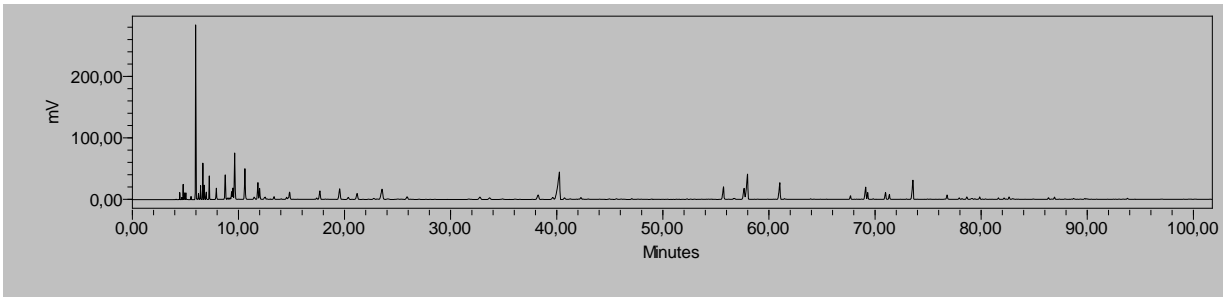
T-782(7/9/2006)



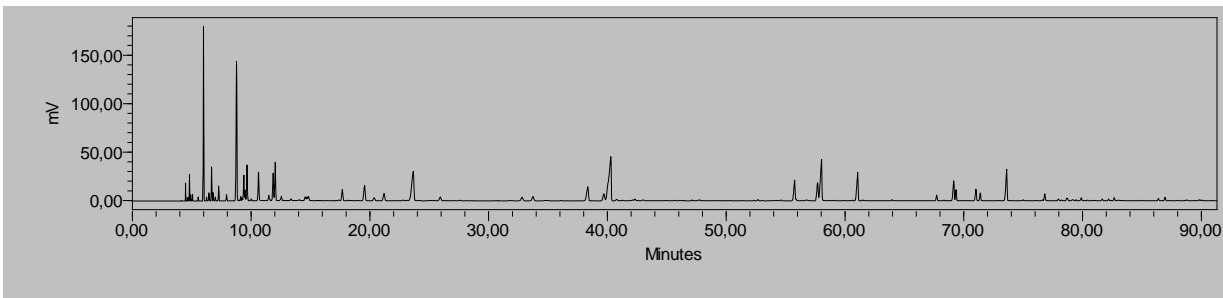
T-703(13/8/2006)



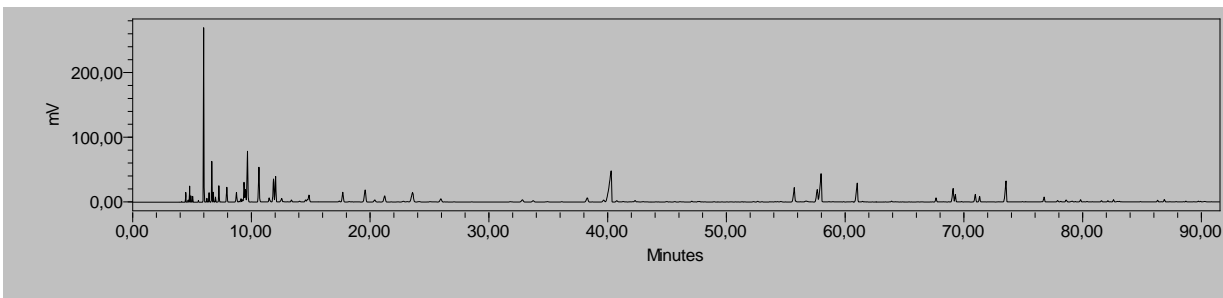
T-2402(8/9/2006)



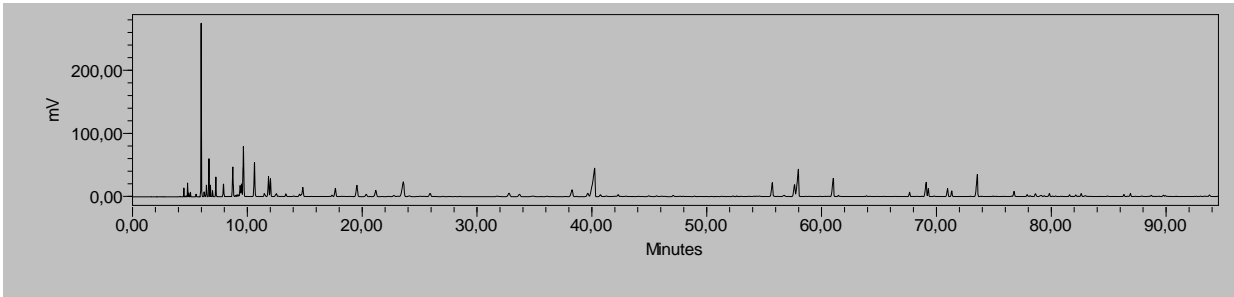
T-704(14/9/2006)



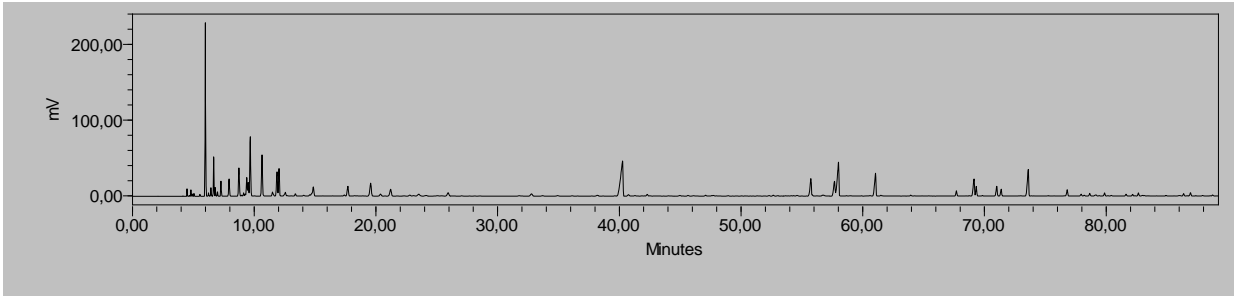
T-2401B(13/8/2006)



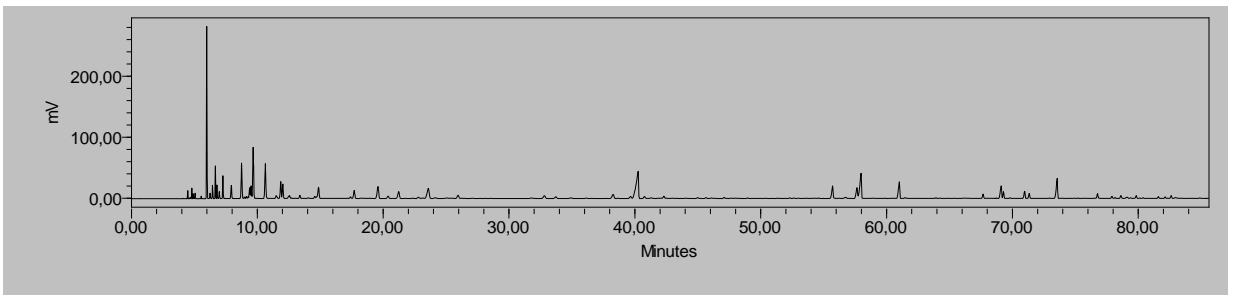
T2401A(13/9/2006)



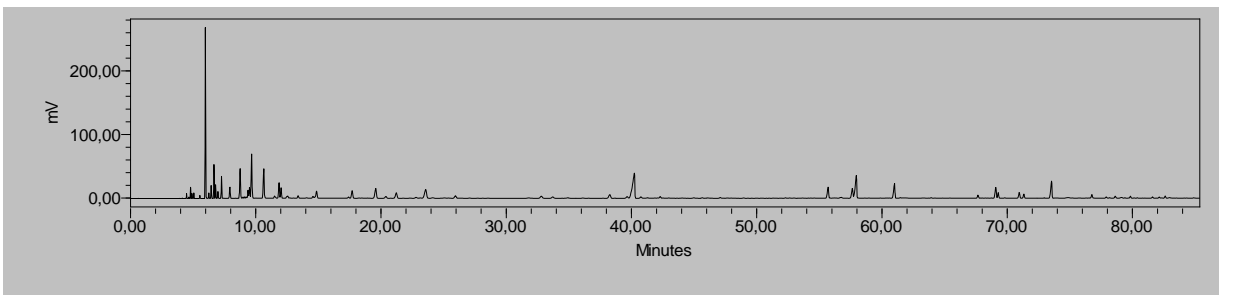
T-704(21/8/2006)



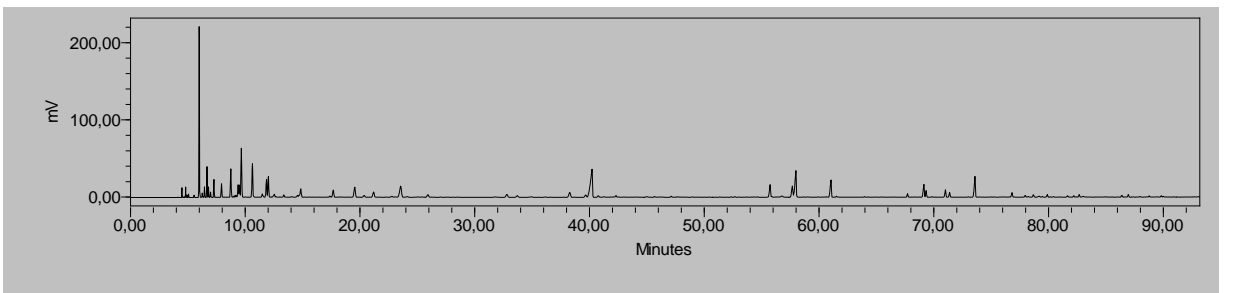
T-2402(23/8/2006)



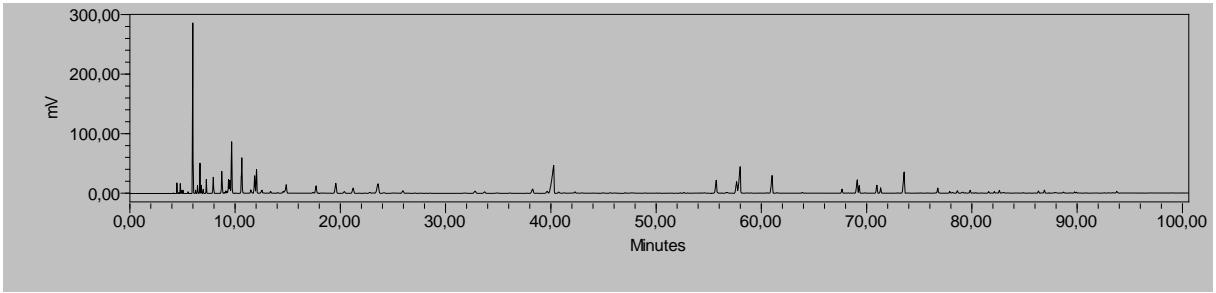
T-782(26/8/2006)



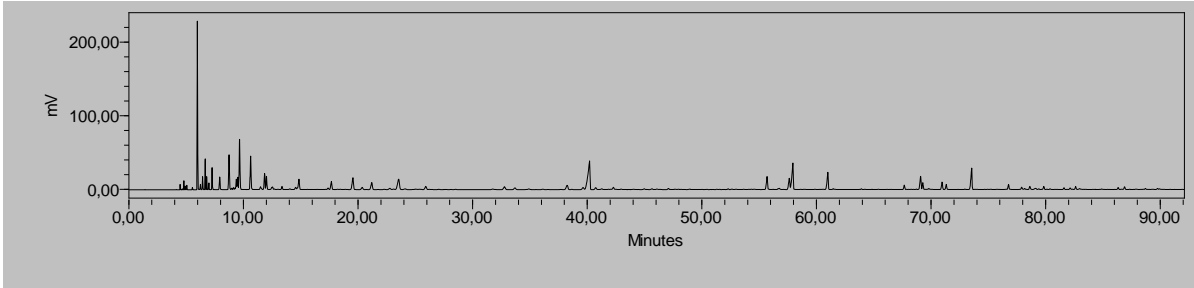
T-782(12/9/2006)



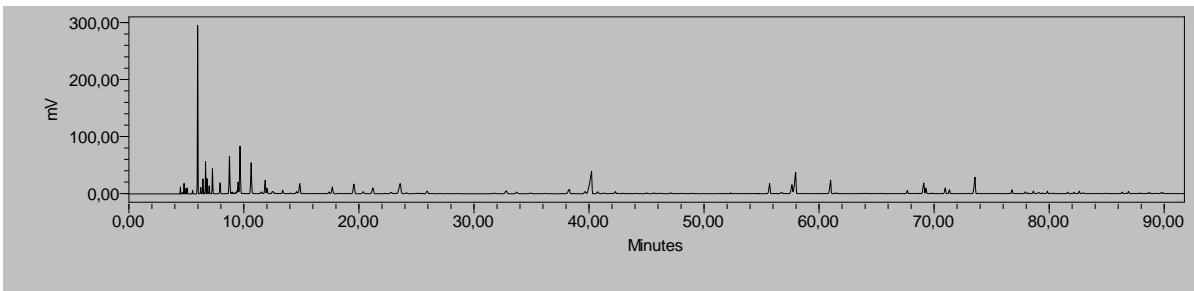
T-704(17/8/2006)



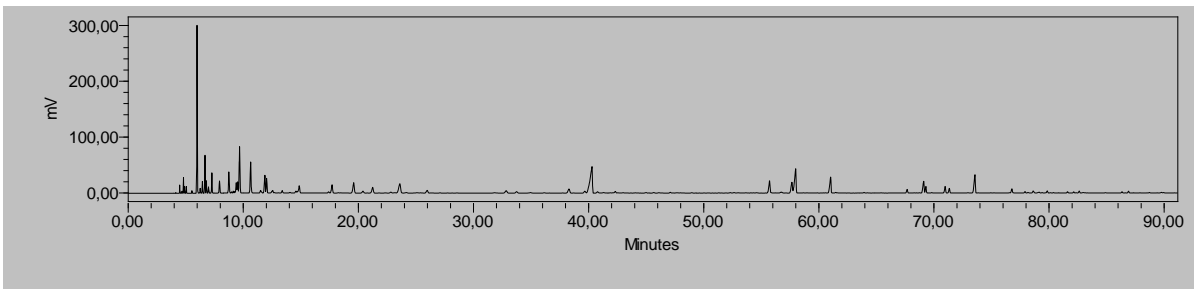
T-2402(8/8/2006)



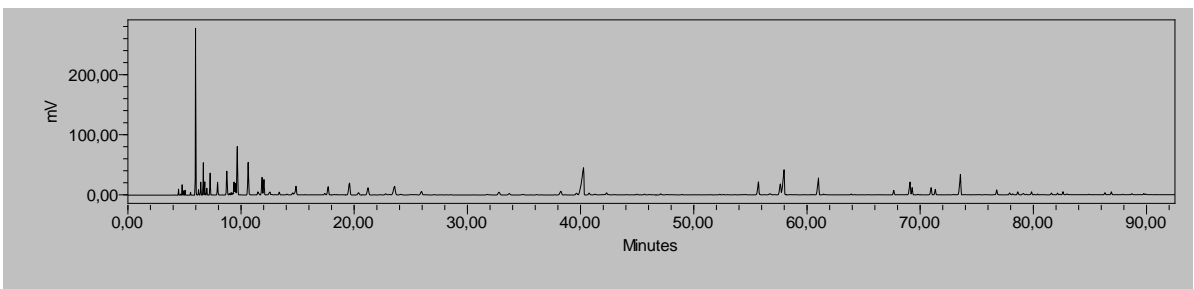
T-704(28/8/2006)



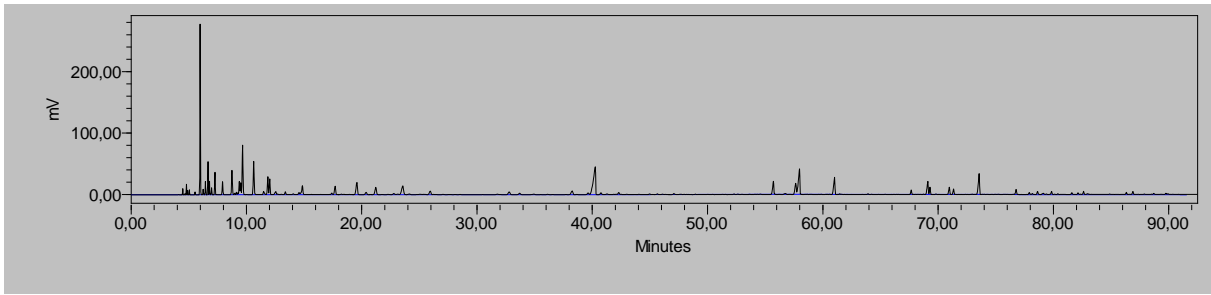
T-704(25/8/2006)



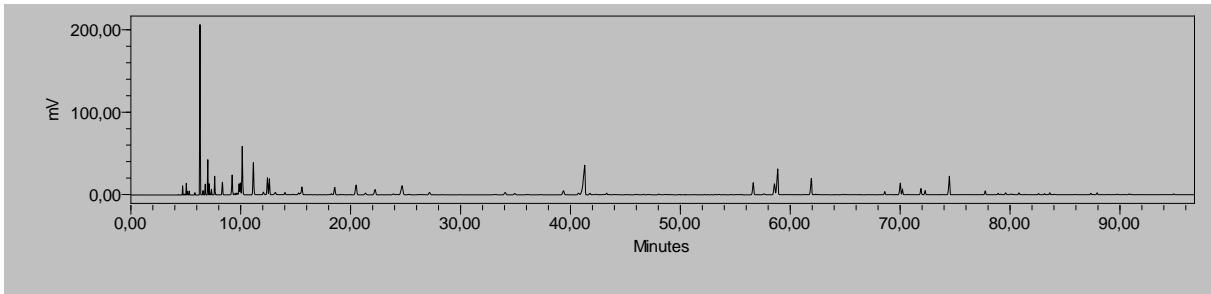
T-2402(17/9/2006)



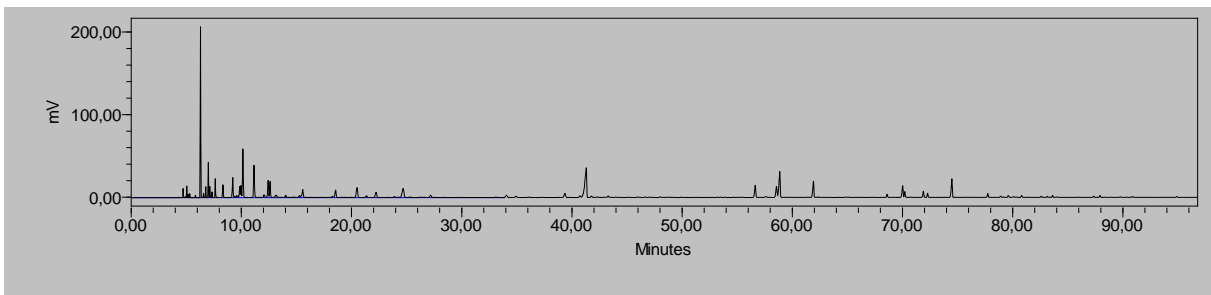
T-704(31/8/2006)



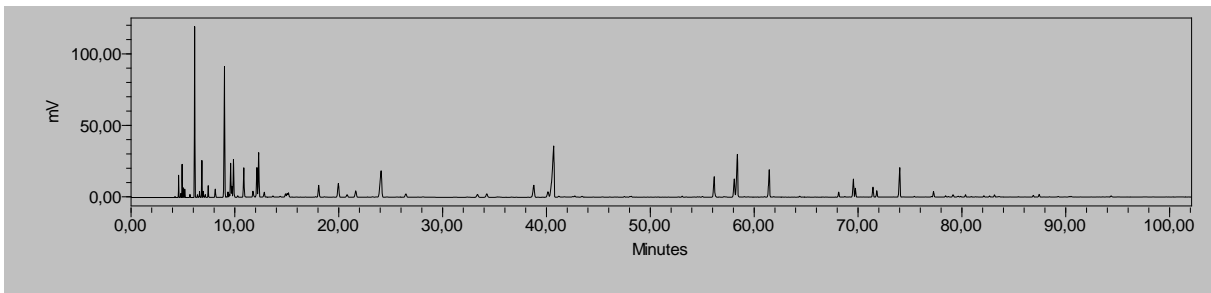
μαυρό: T-704(31/8/2006)
μπλε:blanc



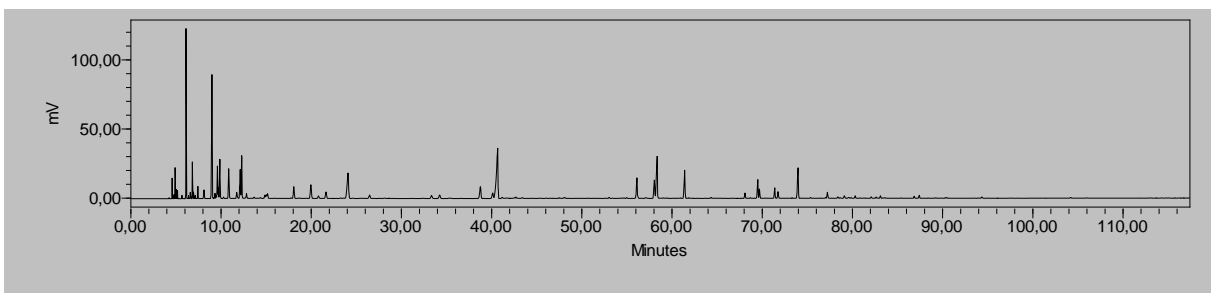
U95



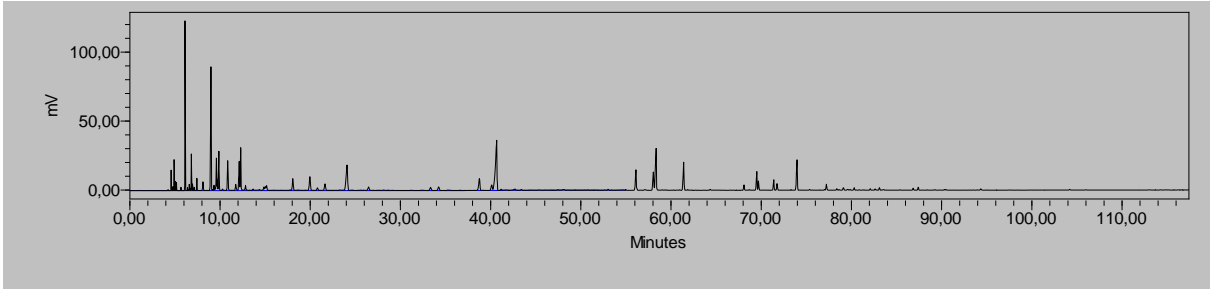
μαυρό:U95
μπλε:blanc



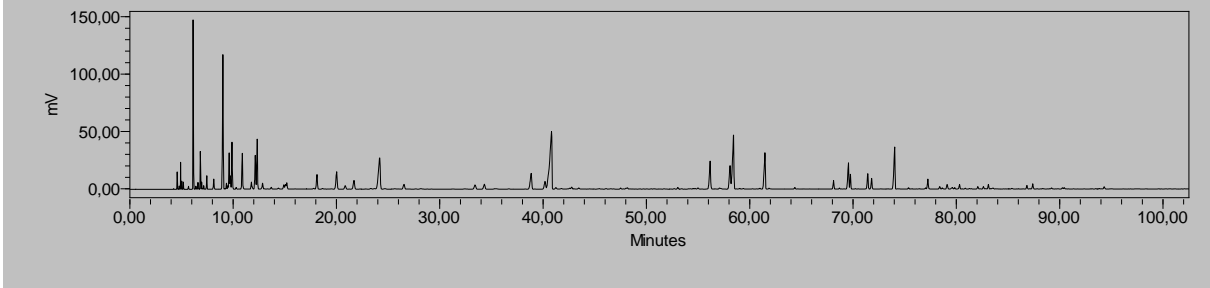
U100



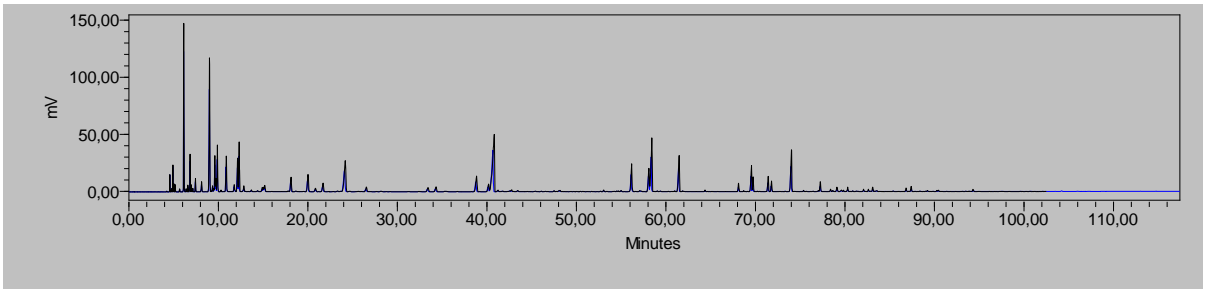
5% U95



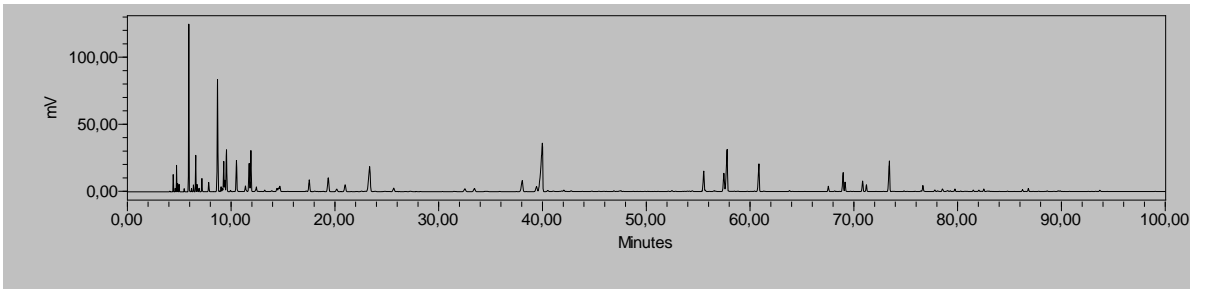
μαυρό:5%U95
μπλε:blanc



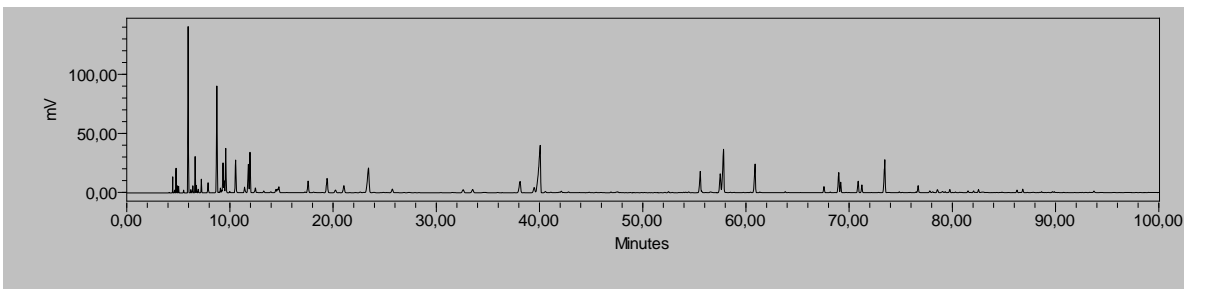
10%U95



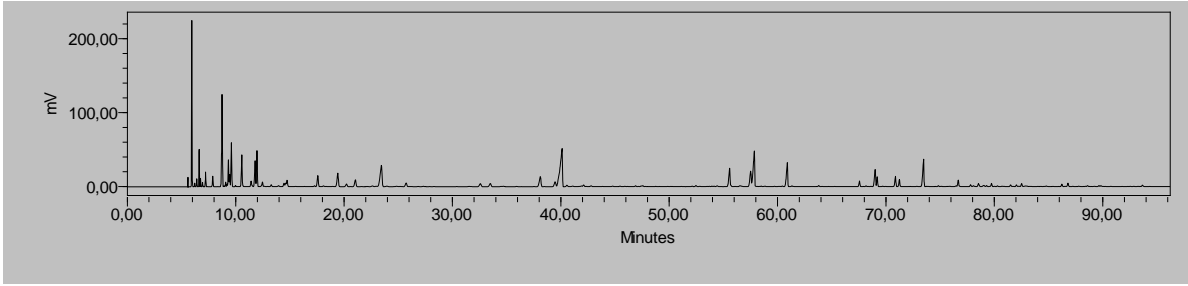
μαυρό:10%U95
μπλε:5%U95



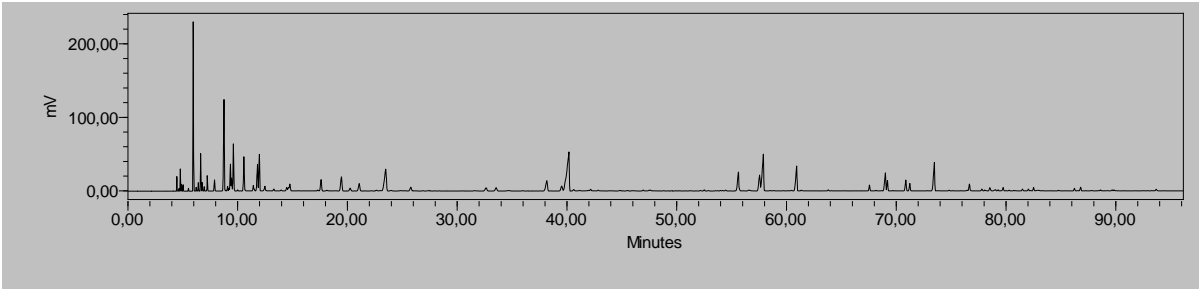
15%U95



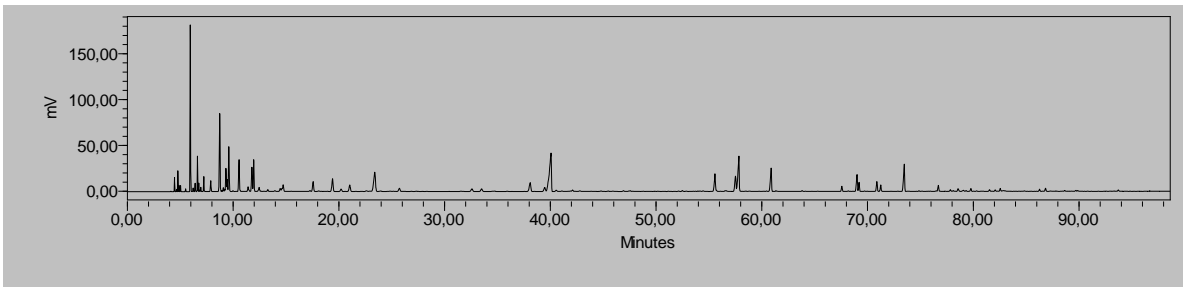
20%U95



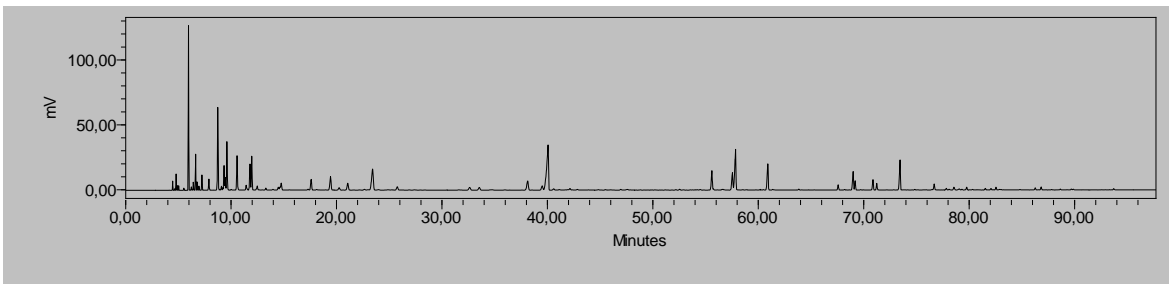
25%U95



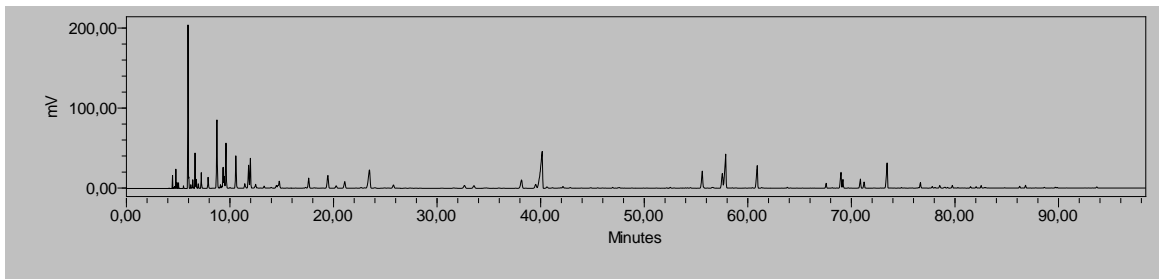
30%U95



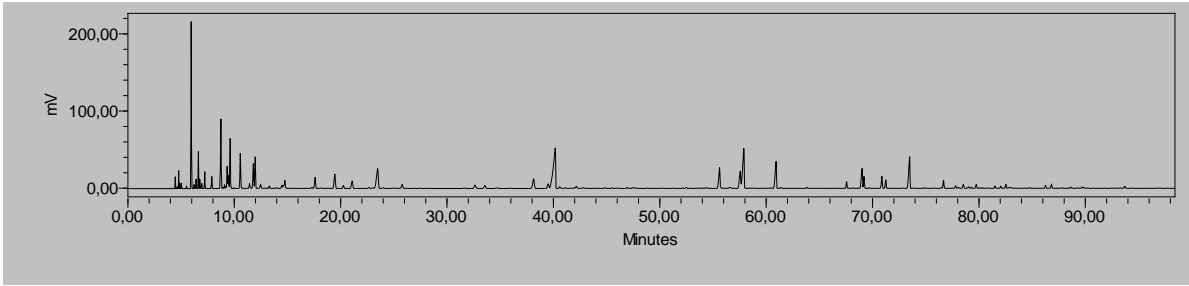
35%U95



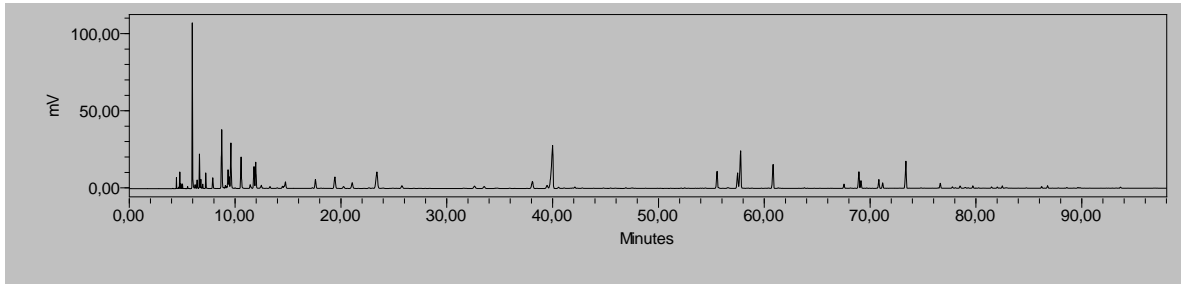
40%U95



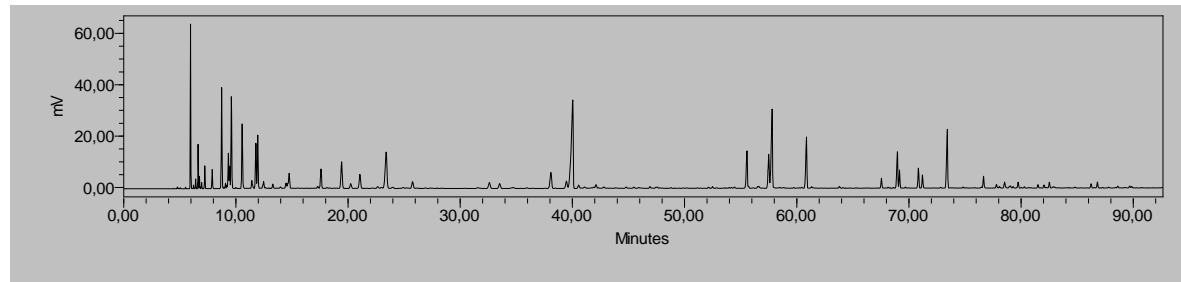
45%U95



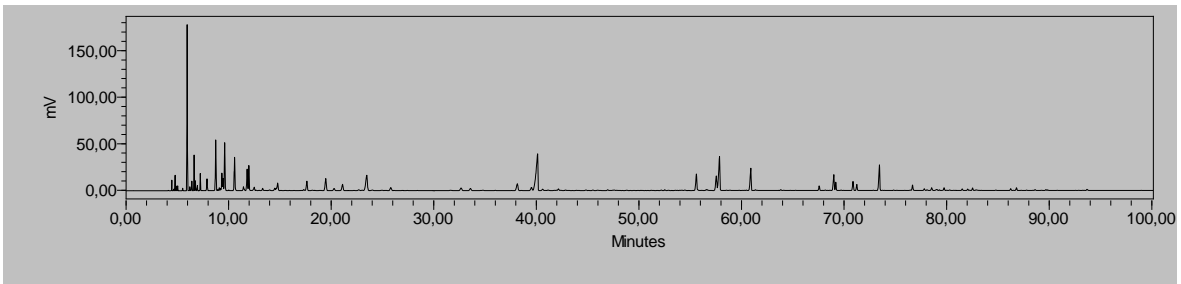
50%U95



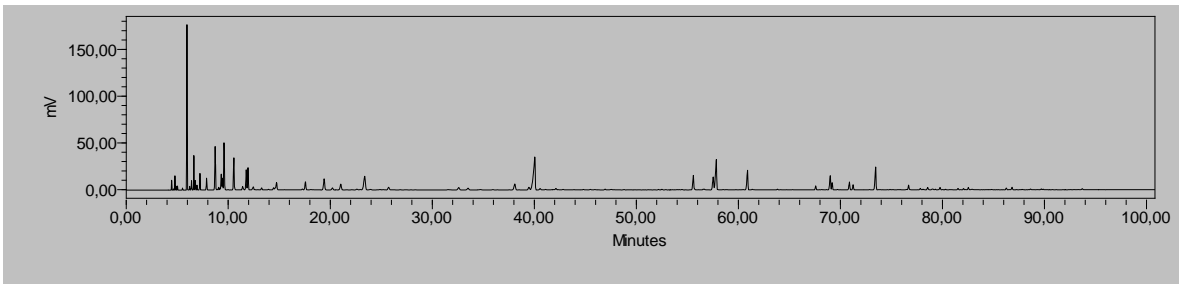
55%U95



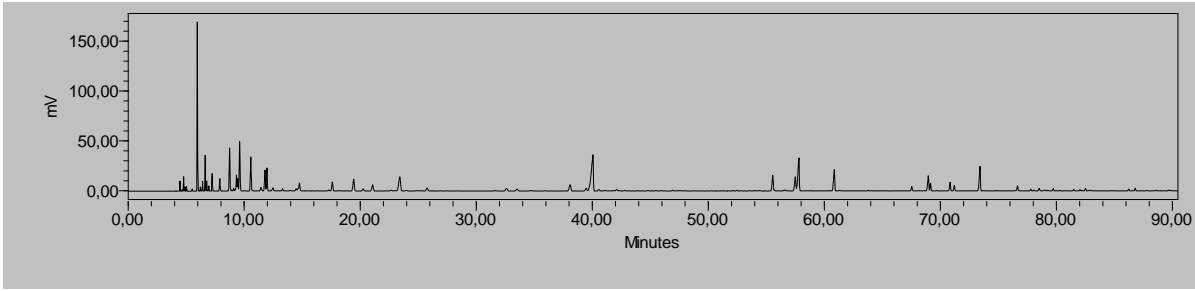
60%U95



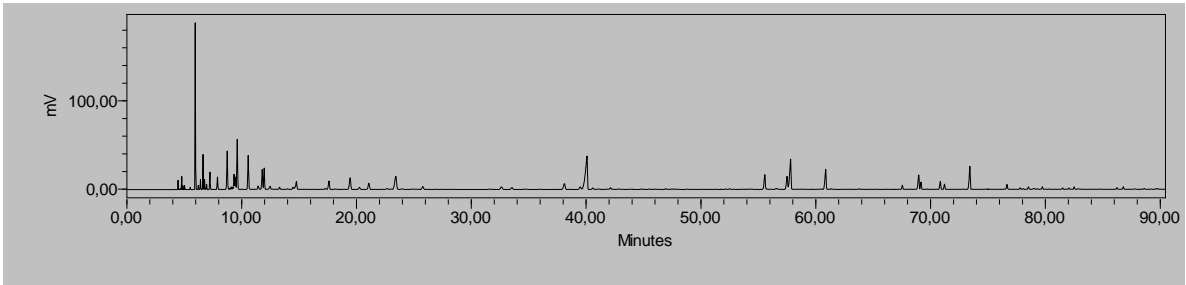
65%U95



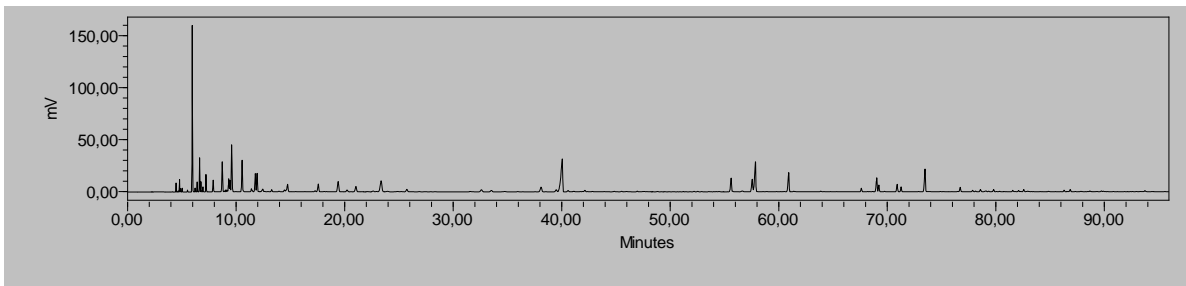
70%U95



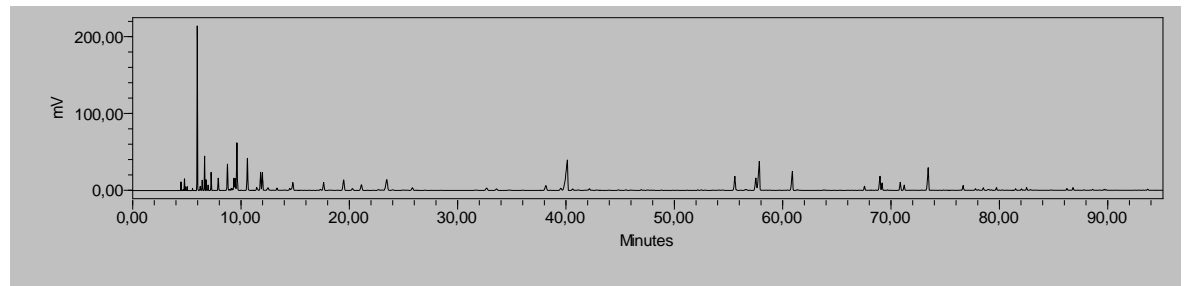
75%U95



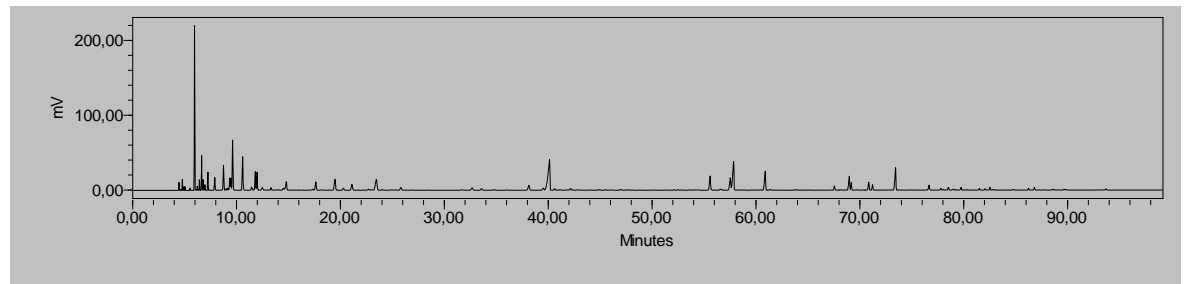
80%U95



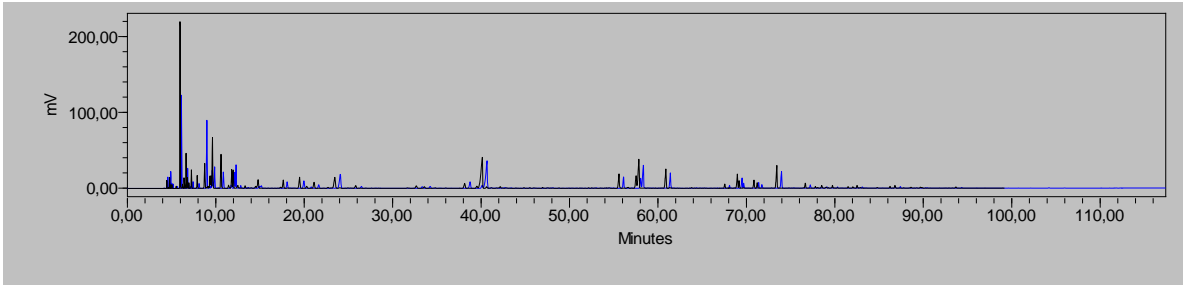
85%U95



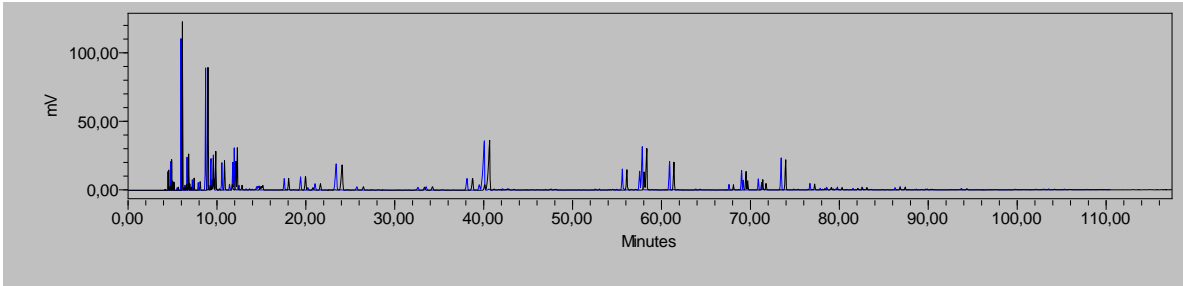
90%U95



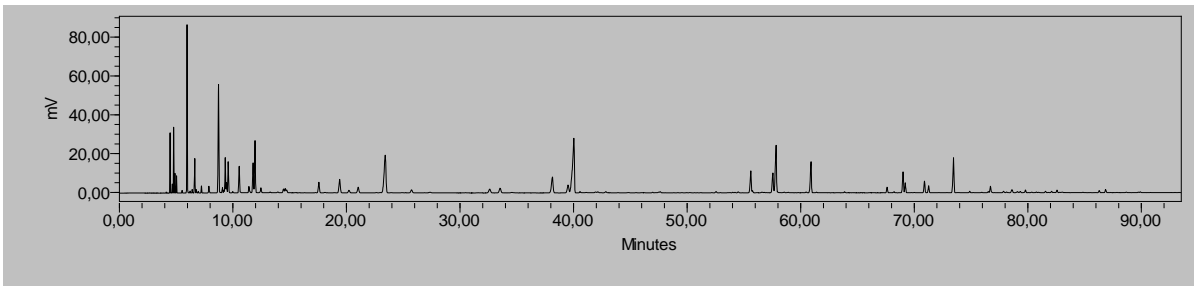
95%U95



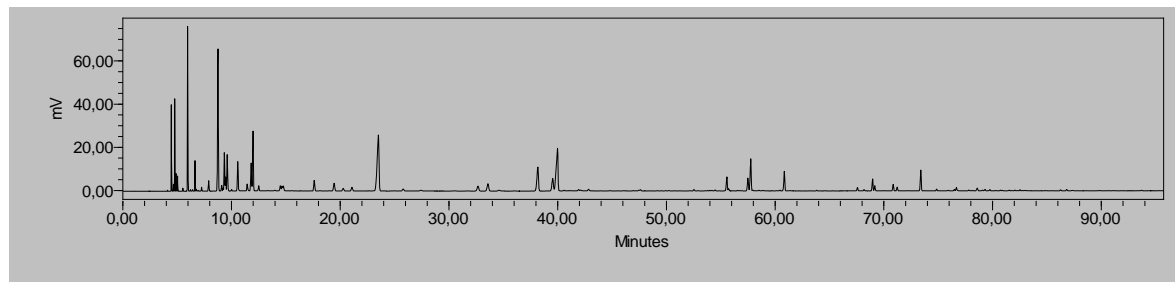
μαυρό:95%U95
μπλε:5%U95



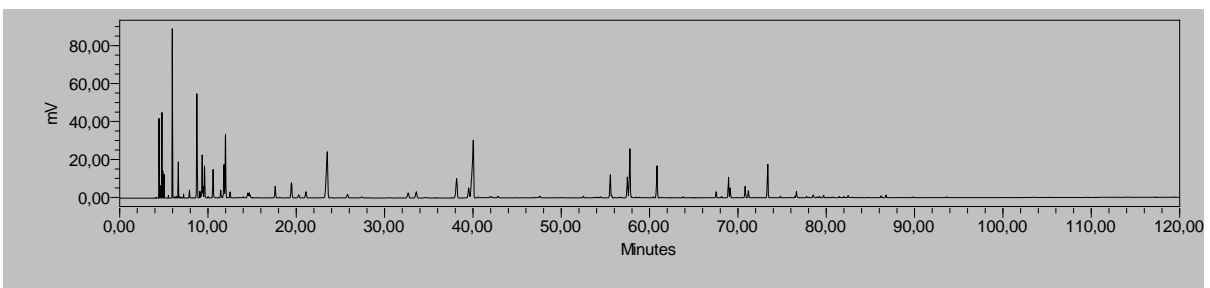
μαυρό:5%U95
μπλε:U100_1



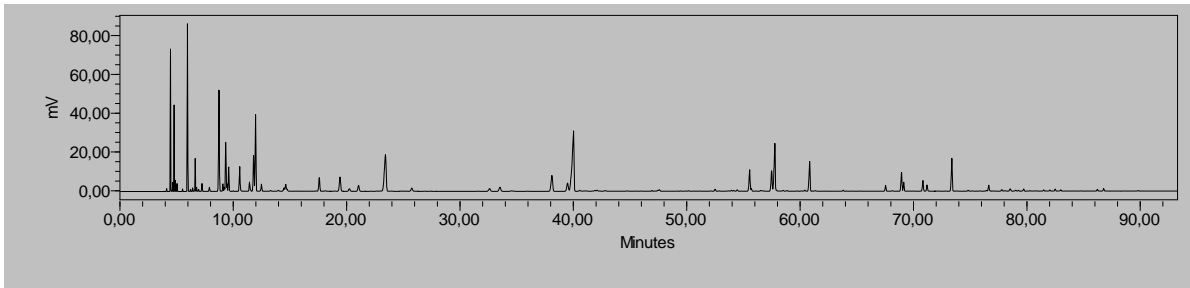
T_8105(19/10/2006)



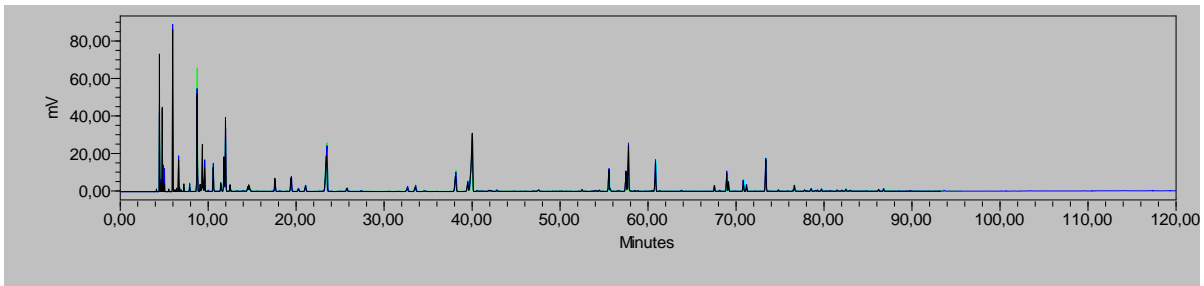
T-2401(20/10/2006)



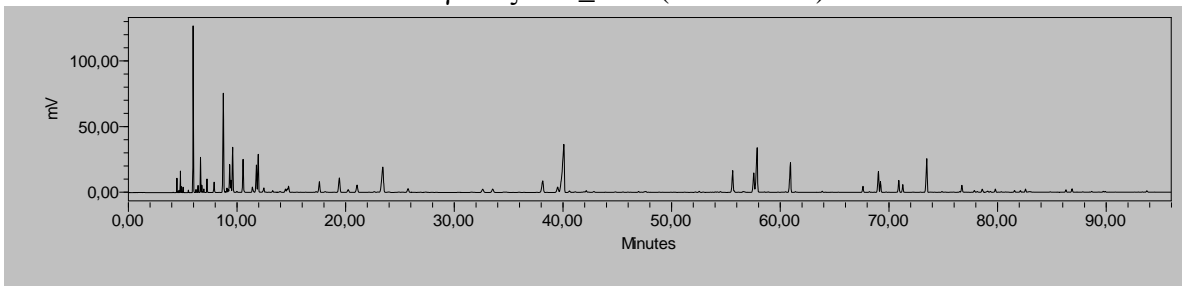
T-2401(14/10/2006)



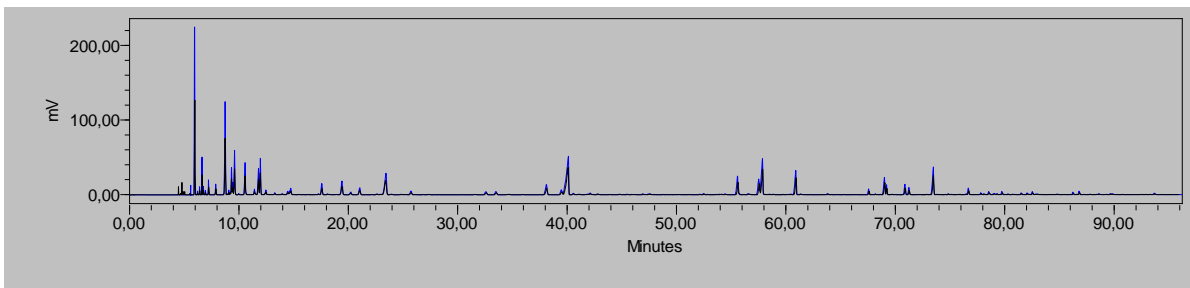
T-2401(29/11/2006)



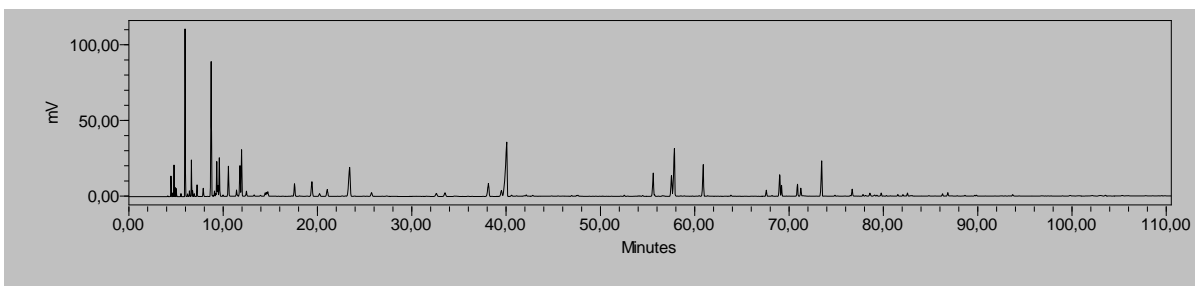
μαύρο: T-2401(29/11/2006)
μπλε: T-2401(14/10/2006)
πράσινο: T-2401(20/10/2006)
γαλάζιο: T_8105(19/10/2006)



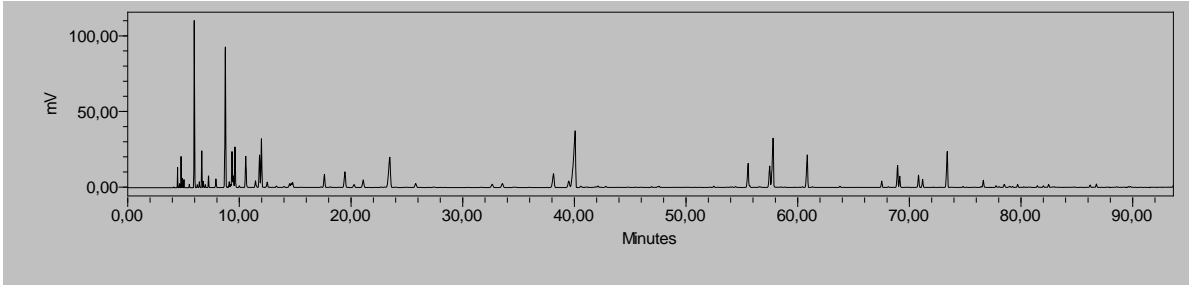
25%U95 ημερομηνία ανάλυσης 6/12/2006



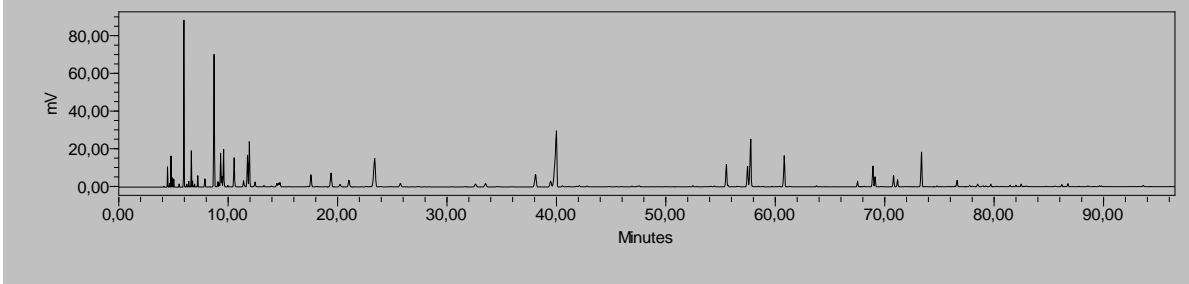
μαύρο: 25%U95 ημερομηνία ανάλυσης 6/12/2006
μπλε: 25%U95 ημερομηνία ανάλυσης 24/11/2006



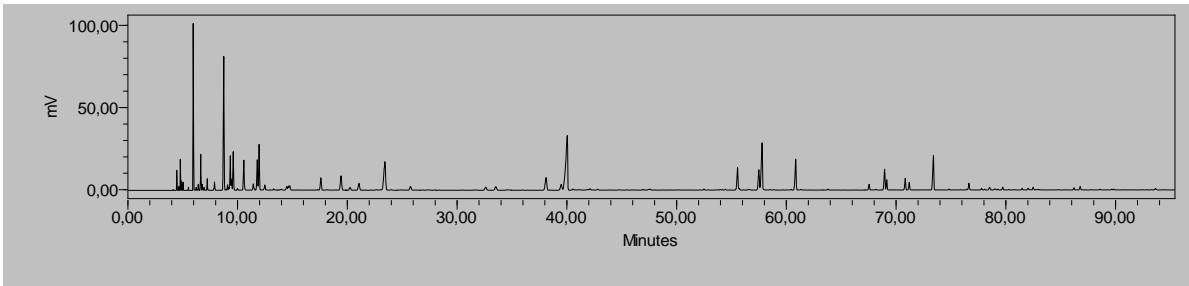
U100_1



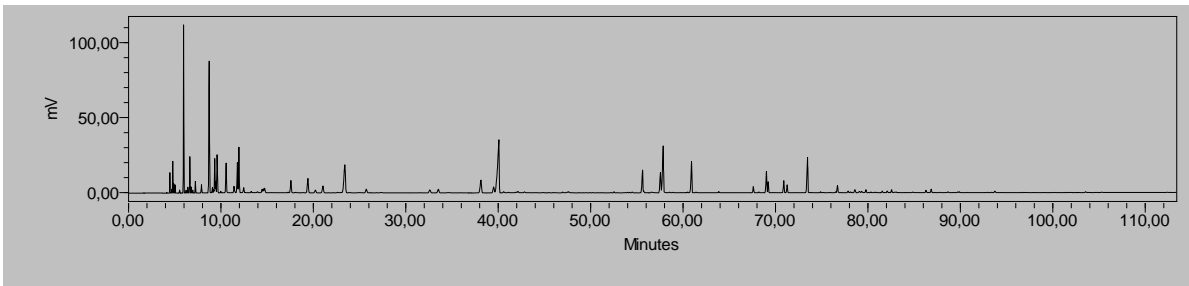
U100_3



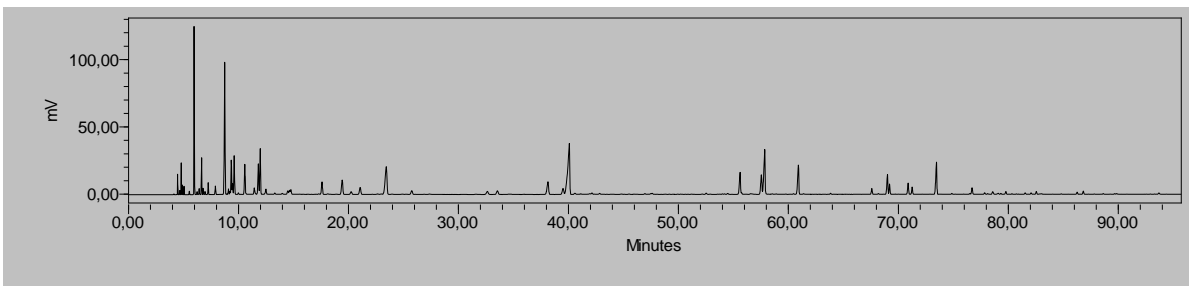
U100_4



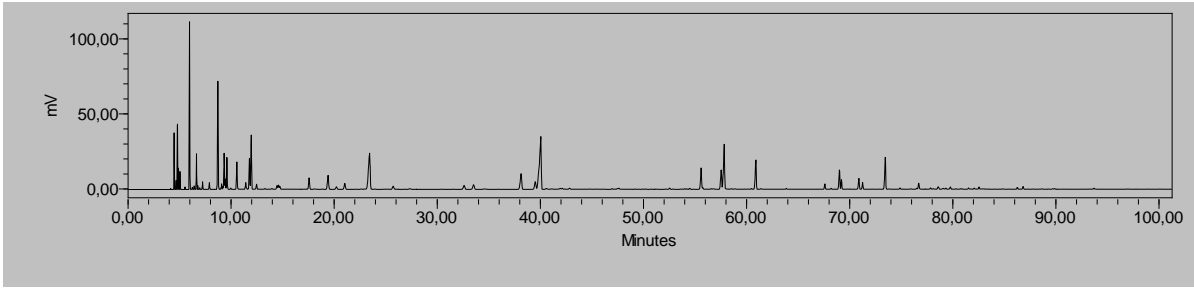
U100_5



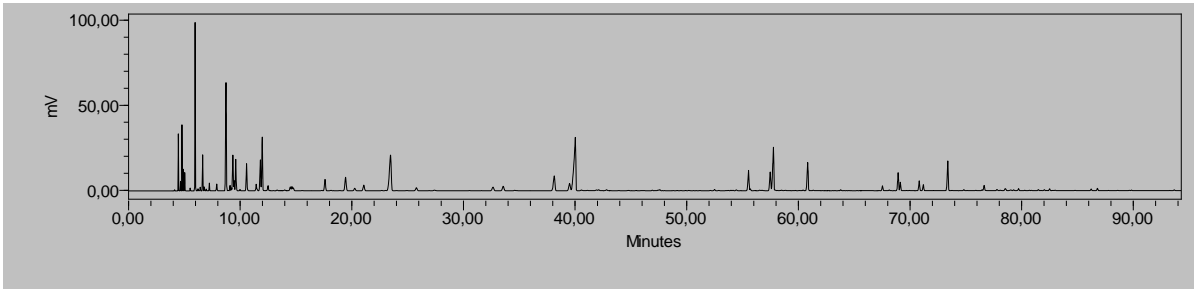
U100_6



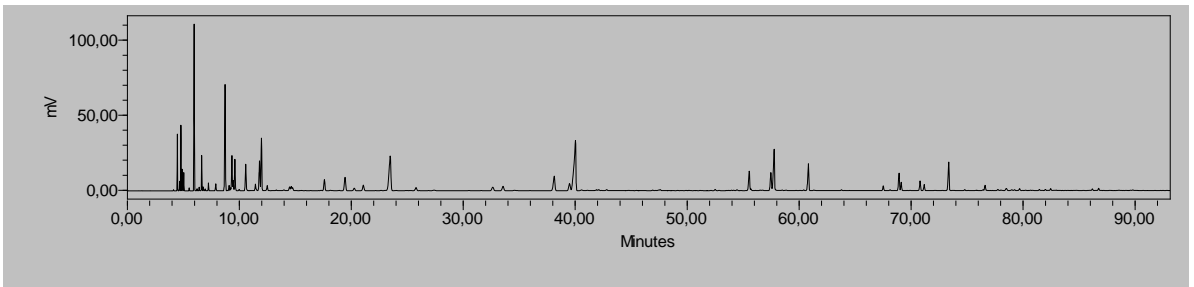
U100_7



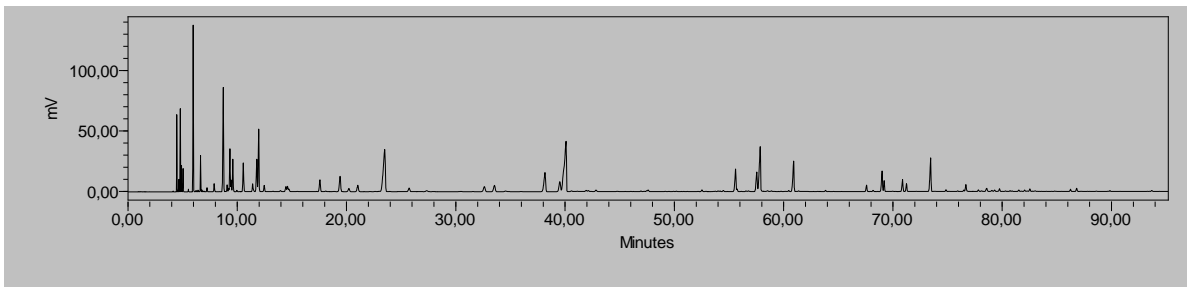
T8105_1(19/10/2006)



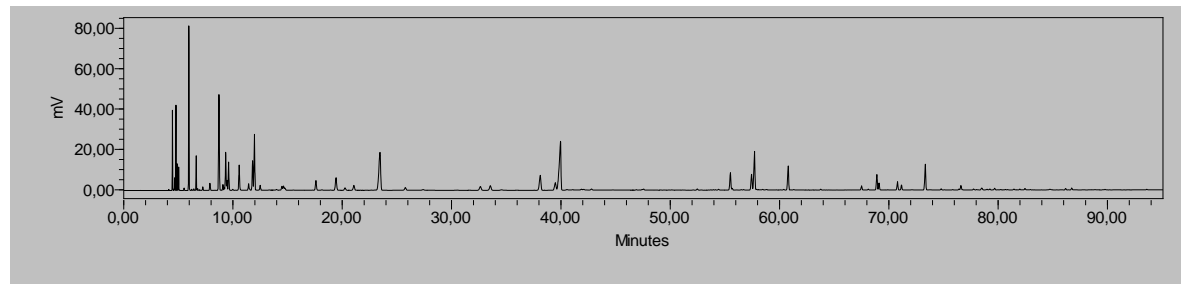
T8105_2(19/10/2006)



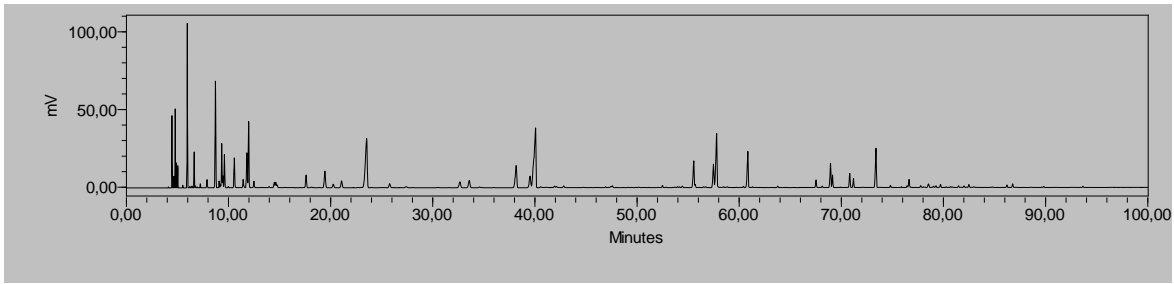
T8105_3(19/10/2006)



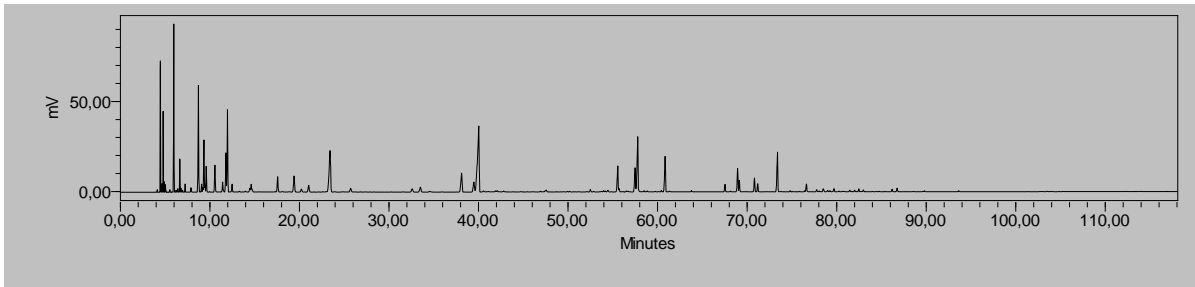
T-2401_B_1(14/10/2006)



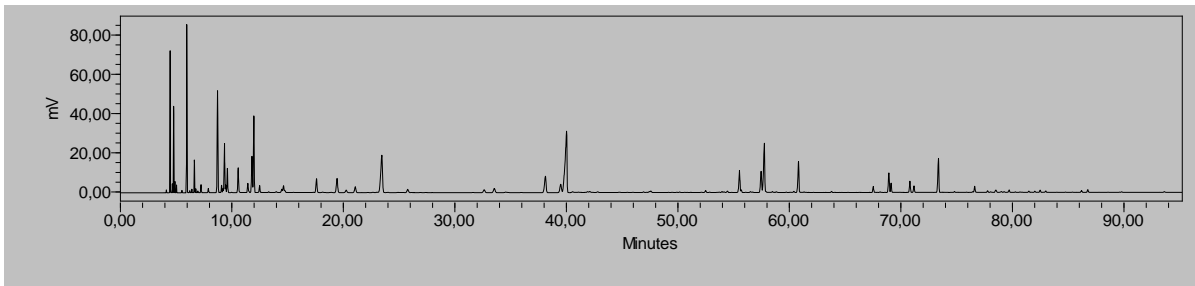
T-2401_B_2(14/10/2006)



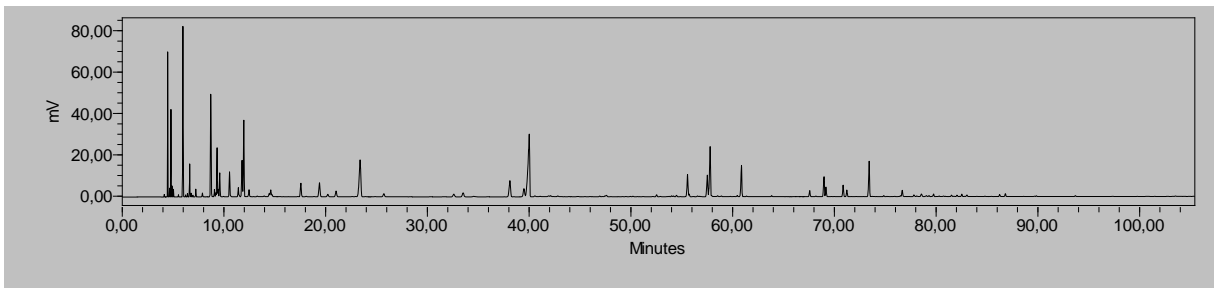
T-2401_B_3(14/10/2006)



T2401_B_3(29/11/2006)



T2401_B_2(29/11/2006)



T2401_B_1(29/11/2006)

Τα δείγματα που αναλύθηκαν ήταν από τέσσερις διαφορετικές δεξαμενές, οι οποίες ονομάστηκαν όπως παρουσιάζει ο πίνακας που ακολουθεί.

Δεξαμενές	Ονομασία δειγμάτων
703	A
782	B
783	C
2401	D
2402	E
704	F
8105	G

Οι ιδιότητες των δειγμάτων φαίνονται στους παρακάτω πίνακες.

Δείγματα

Ιδιότητες	UNLEADED 95									
	A(21/7)	B(18/7)	A(17/7)	B(14/7)	C(10/7)	B(7/7)	C(17/6)	C(12/6)	C(3/6)	C(22/5)
Density at 15 C	0,7385	0,7359	0,7341	0,7345	0,7336	0,7342	0,7339	0,7349		0,7299
Research Octane Number	95	95,1	95,1	95,1	95,1	95,1	95	95	95,1	95,1
MON	85	85	85	85	85	85	85	85	84,7	85
Induction Period	630	640	540	630	630	630	640	600		640
Lead in Gasoline	0,001	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,002	0,001
SULFUR, ppm	45	45	42	42	38	36	48	45	16	33
Existent Gum	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
DVPE	60	62,9	59,7	60	60	60	61,5	61,3		60
Benzene	1	0,98	0,94	0,92	0,89	0,93	1,06	1,05	1	0,95
Evaporated at 70 C	36	37	34	36	35	34	34	33	34	36
Evaporated at 100 C	59	59	59	60	59	58	58	57	58	60
DISTLL, EVAP 150 C	86	86	86	86	86	85	86	86	87	88
Distillation, FBP	204	198	203	203	204	201	191	194	192	188
Distillation Residue	1,3	1,5	1,2	1	1,2	1,2	1,5	1,2	2	1,3
Vapour Liquid Index AROMATICS	30,6	27,7	24	25,3	25,5	23,8	25,5	26,1	24,1	22,1
Oxygenates Content	1	2	0,5	1,9	1,9	1,7	1,5	0,7	2,4	3,7
Copper Corrosion	1A	1A	1A	1 ^A	1A	1A	1A	1A	1A	
Oxygen	0,2	0,4	0,2	0,4	0,4	0,4	0,3	0,1	0,6	0,7
Olefins										
A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	18	11,9	18	14,2	13,8	14,9	14,3	16,5	18	18
	7259	6354	5747	4958	3466	2394	6113	4255	965	7885

**Δείγματα
UNLEADED 95**

Ιδιότητες	C(12/5)	C(26/5)	B(28/5)	B(25/5)	B(29/4)	B(9/5)	B(6/4)
Density at 15 C	0,7365	0,7313	0,7329	0,735	0,7335	0,7369	0,7238
Research Octane Number	96,1	95,1	95,2	95,2	95	96,3	95,2
MON	85,1	85,1	85,1	85	84,9	85,3	85,1
Induction Period	620	640	640	640	630	620	600
Lead in Gasoline	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
SULFUR, ppm	20	10	10	15	25	21	37
Existent Gum	2	2	2	2	2	2	2
DVPE	62,1	60	60	60	64,7	60	76,6
Benzene	1	1	0,94	1	1,05	0,98	0,94
Evaporated at 70 C	35	31	34	32	37	34	42
Evaporated at 100 C	60	56	59	56	60	59	65
DISTLL, EVAP 150 C	88	85	87	86	89	88	90
Distillation, FBP	186	193	191	188	189	191	189
Distillation Residue	1	1,1	1,1	1,1	1,2	1,2	1
Vapour Liquid Index					914		1.060

AROMATICS	25,4	21,1	22,9	26,9	26,2	25,6	21,2
Oxygenates Content	6,4	3,5	3,3	2,7	0,7	4,1	4,5
Copper Corrosion	1A	1A	1A	1A	1A	1A	1A
Oxygen	1,2	0,6	0,6	0,5	0,1	0,9	0,8
Olefins	16,7	18	18	15,4	16,1	17,4	15,6
A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	4594	9683	10150	9312	10143	3162	1970

UNLEADED 100

Ιδιότητες	D-A(13/7)	D- B(19/7)
Density at 15 C	0,7453	0,7497
Research Octane Number	100,1	100
MON	88	87
Induction Period	620	680
Lead in Gasoline	0,001	0,001
SULFUR, ppm	38	35
Existent Gum	2	2
DVPE	60	60
Benzene	1	1
Evaporated at 70 C	31	34
Evaporated at 100 C	59	60
DISTLL, EVAP 150 C	88	88
Distillation, FBP	199	191
Distillation Residue	1	1,5
Vapour Liquid Index		
AROMATICS	22,5	27,3
Oxygenates Content	13,6	12,5
Copper Corrosion	1A	1A
Oxygen	2,7	2,6
Olefins	18	20,3
A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	4611	6764

LRP 96

Ιδιότητες	A(8/7)	A(5/6)	A(24/4)	A(20/6)	A(8/4)	A(13/5)	E(20/4)
Density at 15 C	0,7362	0,7392	0,7328	0,7383	0,73	0,7385	0,7269
Research Octane Number	96,1	96	96,3	96	96	96,1	96
MON	85	85,1	85,3	85	85	85	85
Induction Period	640	620	650	640	630	620	640
Lead in Gasoline	1	1	1	1	1	1	1
SULFUR, ppm	37	20	33	26	47	15	35
Existent Gum	1	2	2	2	2	2	2
DVPE	60,9	60	65,9		77,4	60	73,3
Benzene	0,93	1	0,98	1	0,99	1	0,96
Evaporated at 70 C	40	37	33	36	46	33	43
Evaporated at 100 C	63	60	61	59	66	57	65
DISTLL, EVAP 150 C	87	88	89	86	89	87	87
Distillation, FBP	198	191	189	193	189	188	193
Distillation Residue	1,2	1	1,2	1,1	1,2	1,2	1,2
Vapour Liquid Index			890		1.096	831	1.034

AROMATICS	23	29,4	21,9	24,9	20,4	25,9	19,8
Oxygenates Content	4,3	3,9	1,8	2,8	6,2	2,3	4,8
Copper Corrosion	1A	1A	1A	1A	1A	1A	1A
Oxygen	0,9	0,7	0,5	0,6	1,4	0,5	0,9
Olefins	18	11,1	21,2	18	21,4	18	18
A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	2716	1528	8332	7229	2539	4784	6841

Στον πίνακα που ακολουθεί παρουσιάζονται τα δείγματα για τα οποία έχουμε ελλειπίες ιδιότητες καθώς και οι ιδιότητες τους.

	Δείγματα				
	UNLEADED 95				
Ιδιότητες	B (2/5)	B(13/4)	C(5/5)	C(12/4)	C(24/4)
Density at 15 C	0,7377	0,7258	0,7412	0,7201	0,7323
Research Octane Number	95,5	95,1		95,4	
MON	85	85	85,1	85,1	85,1
SULFUR, ppm	20			52	
Existent Gum					
DVPE	62		61,3		76,7
Benzene			1,05		
Vapour Liquid Index		1.046			
A/A ΔΕΙΓΜΑΤΟΣ	360	4.290	1.606	3.761	8.165

Τέλος στον παρακάτω πίνακα φαίνονται τα προσδιορισμένα συστατικά για κάθε δείγμα (τα 74 δείγματα, τα οποία και επεξεργάστηκαν καθώς και επαναληψεις μετρήσεων σε κάποια από τα δείγματα. Τέλος τα τελευταία 10 δείγματα είναι μίγματα τα οποία φτιαχτηκαν με τις συγκεντρώσεις που φαίνονται).

	1 U95 A(13/8)	2 U95 A(7/8)	3 U95 A(17/7)	4 U95 A(21/7)	5 U95 B(26/8)	6 U95 B(7/9)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ						
1 propane	289	345	2444	2068	587	974
2 iso-butane	15482	23323	47041	46176	20818	22973
3 n-butane	19241	25098	43101	40104	29087	42597
4 2,2 dimethylpropane	7669	9729	5837	8054	9051	22887
5 iso-pentane	786050	737371	734351	879415	745876	714997
6 n-pentane	139754	131860	155277	187569	142506	138146
7 2,2-dimethylbutane	107306	111172	100289	118950	90808	75907
8 cyclopentane	61114	36485	79952	40702	75761	82507
9 2,3dimethylbutane	96845	99804	99483	116226	99075	88226
10 2methylpentane	396527	400666	389539	466474	408791	350464
11 3-methylpentane	287536	278118	274558	320538	293798	258449
12 n-hexane	134720	105236	130850	131510	145186	148084
13 2,2dimethylpentane	14419	15481	4665	6412	7127	25376
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	99244	102312	137263	150634	157094	98288
15 benzene	74567	75398	77072	90927	92831	92283
16 3,3-dimethylpentane	2940	2254	2211	3791	4881	5255
17 cyclohexane	2418	0	0	2265	3664	3047
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	157764	142057	334744	168197	199749	193992

19	3-methylhexane	72859	66111	59213	79046	100946	100007
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	15586	12755	11832	16527	21046	17665
21	trans1,3dimethylcyclopentane	6739	5695	4802	7349	9041	8716
22	3ethylpentane	93075	134764	225116	166136	196882	222990
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	10802	9738	9920	12643	15591	12797
24	2,2,4-trimethylpentane	4744	8870	8756	4888	1359	6305
25	n-heptane	33822	32684	28256	38375	48769	50717
26	2,2dimethylhexane	4748	3890	3359	4894	7333	5955
27	2,5dimethylhexane	29439	31982	38505	40125	51759	46928
28	2,4dimethylhexane	12638	17366	28460	22410	28429	30761
29	3,3dimethylhexane	5678	2914	2558	4182	6782	6365
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	536932	557667	540363	648665	613097	593178
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	5168	4494	3836	5275	8843	7964
32	2,3-dimethyhexane	2054	1656	1348	2255	3516	2766
33	2methyl-3ethylpentane	1897	2187	3162	2870	4550	4624
34	2-methyheptane	17406	14884	13010	17742	28025	25290
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1604	1120	5595	1666	3361	2824
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	3514	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	2810	0	0	3094	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	1488	2172	2172	4501	10349	4848
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	6778	0	1874	11063	2199
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	7647	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	6897	6502	6497	7187	3358	8054
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	7489	2409	5866	7560	0	8909
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	2881	0	2735	4323	0	4155
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	6134	5707	4923	0	0	10210
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	733	2614	3198	6985	1639	1415
47	n-octane	2310	2147	3704	3185	3849	2739
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	3949	3447	1843	2925	3322	4675
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	2924	6840	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	0	3007	4712	0	0
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	1485	1252
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1864	1535	1544	1907	3222	2782
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0	0	1740
54	2,4dimethylheptane	0	0	4299	5120	0	6837
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	2139	4942
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	5256	4576	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	0	3241	5433	3473	7963	3541
58	2,6dimethylheptane	4987	2250	2546	2726	6690	2632
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	3050	0	0	0	4570	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	3133	0
61	2,5dimethylheptane	1907	1789	1464	2010	2640	2245
62	3,3-dimethylheptane	1691	1121	1820	1040	4660	3899
63	unidentified C9-Napthene	1274	2450	1288	1735	5960	0
64	unidentified C9-Napthene	3587	3941	3838	1257	0	5036
65	ethylbenzene	140095	134264	130182	157028	144083	153090

66	unidentified C9-Napthene	5582	4825	4471	5443	8403	7309
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	7440	6524	4590	7496	12456	10783
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	0	0
69	p-xylene	136727	135332	125795	162944	147781	143744
70	m-xylene	342235	331656	293695	377914	374647	357796
71	2,3dimethylheptane	1465	0	1304	0	1435	0
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	0	0	1387	2949	2381
74	3ethylheptane	0	0	1590	0	0	0
75	3-methyloctane	2081	1520	2043	825	1161	979
76	unidentified C9-Napthene	2108	1247	0	1796	2832	1884
77	o-xylene	193827	188321	167562	216610	208407	202964
78	unidentified Paraffin	5366	4531	4085	4947	7551	6894
79	unidentified Napthenes	1517	1310	1129	1540	2353	1820
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	706
81	unidentified Napthene	4705	0	0	0	1092	6474
82	n-nonane	2074	4989	4907	6368	6346	2551

	7 U95 B(7/7)	8 U95 B(25/5)	9 U95 B(6/4)	10 U95 B(2/5)new	11 U95 B(29/4)	12 U95 B(13/4)	13 U95 B(28/5)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ							
1 propane	964	424	697	1050	381	1571	348
2 iso-butane	34165	20398	66705	28035	27980	77543	18410
3 n-butane	41220	32141	70863	44466	36033	94241	28420
4 2,2 dimethylpropane	7083	6907	8105	4152	6357	5018	7035
5 iso-pentane	730393	621368	724008	566439	680135	658327	540956
6 n-pentane	153875	43703	34744	133394	125316	134420	101327
7 2,2-dimethylbutane	91502	60150	85886	49860	74935	76329	43005
8 cyclopentane	52265	41337	39338	49923	29987	45765	34187
9 2,3dimethylbutane	98785	78025	88666	56357	81193	73553	60094
10 2methylpentane	378342	312415	351585	234593	312714	315218	237831
11 3-methylpentane	268583	230129	236282	173152	225963	211063	174476
12 n-hexane	122260	122216	95592	114635	99114	107662	84140
13 2,2dimethylpentane	4446	3716	3657	3019	3607	3432	1973
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	126790	114410	122430	67802	88333	96716	85926
15 benzene	69490	74725	46562	61286	52740	56311	45650
16 3,3-dimethylpentane	2580	1778	1602	0	1431	1420	0
17 cyclohehane	2255	2123	0	0	0	0	0
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	141622	154004	138307	109546	130892	116399	100176
19 3-methylhexane	68418	77322	63011	49646	62221	53048	50577
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	15959	17107	12647	0	11557	8507	10782
21 trans1,3dimethylcyclopentane	6242	6716	3973	6525	4206	3148	1820
22 3ethylpentane	244522	249908	177482	139272	150170	123321	173820
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	11722	13030	9088	4834	8106	5726	7457
24 2,2,4-trimethylpentane	4966	5762	2735	0	8556	0	8386
25 n-heptane	30923	40806	31031	29634	26828	30041	21882
26 2,2dimethylhexane	5046	5539	4079	3298	4041	1866	3921
27 2,5dimethylhexane	42138	48281	43911	32770	40149	30823	31827
28 2,4dimethylhexane	32359	31110	19728	15435	18133	14146	20589
29 3,3dimethylhexane	3445	6338	4953	2662	3008	1787	2947
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	532868	566277	322743	442788	397475	384269	323167
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	5307	7231	5824	0	0	0	4278

32	2,3-dimethylhexane	2111	2619	1166	3069	4641	3874	1541
33	2methyl-3ethylpentane	4068	4752	0	0	1665	0	2813
34	2-methylheptane	17900	24224	16998	0	18831	11197	15021
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1402	2375	1739	0	1491	1764	3789
36	3,4dimethylhexane	5895	0	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0	0	3235	9212	3372	0	0
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	0	1738	2506	0	0	0
40	1,1dimethylcyclohexane	1529	0	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	7813	6135	5532	3225	1914	3552	1643
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	7987	2916	6249	3741	4576	3969	4727
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	3022	8091	3694	0	6294	0	6320
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	5975	9248	2000	1682	3722	2073	3766
47	n-octane	4515	5911	10613	8810	5874	8854	5928
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	2534	1788	2720	3088	1940	2950	1905
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	4536	3089	1768	1702	3325	1951	3352
51	2,2-dimethylheptane	0	1665	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	2089	5097	3497	1361	1636	1184	1757
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	1130	1464	2039	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	3255	0	0	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	1518	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	5886	6776	4625	2548	4444	2776	4445
58	2,6dimethylheptane	4354	4546	2949	2709	2609	2657	2717
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	2805	0	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	2221	3711	2725	1393	2360	1675	2423
62	3,3-dimethylheptane	1609	3129	2070	1316	1451	1261	1757
63	unidentified C9-Napthene	2865	2294	0	0	1906	1240	2066
64	unidentified C9-Napthene	3896	1867	1109	0	0	0	0
65	ethylbenzene	128975	151495	89265	111841	114957	94439	83328
66	unidentified C9-Napthene	5650	7956	5660	3515	5016	3949	4749
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	7896	11335	7695	4641	7525	4608	7300
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	602	0	0	0	0	0
69	p-xylene	132639	167691	94497	117513	119293	99627	90127
70	m-xylene	324955	376811	223627	269010	281501	230543	208264
71	2,3dimethylheptane	0	1900	0	0	0	0	0
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	2056	1549	0	0	0	0	0
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	816	4672	0	0	0	0	0
76	unidentified C9-Napthene	1748	3844	0	0	0	0	0
77	o-xylene	181119	214257	128306	152097	162562	130383	114394
78	unidentified Paraffin	5252	10673	7174	6177	4818	5189	4858

79	unidentified Napthenes	1766	2428	1359	0	1210	0	1343
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	1402	0	0	0	0	0
82	n-nonane	4093	4910	3748	3007	3491	3868	2472

	14 U95 B(9/5)	15 U95 B(18/7)	16 U95 B(14/7)	17 U95 B(12/9)	18 U95 C(5/5)_1	19 U95 C(5/5)_2	20 U95 C(12/4)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ							
1 propane	707	1718	1441	1040	412	557	1854
2 iso-butane	22998	41219	45026	12020	28707	21081	86613
3 n-butane	25564	37867	44492	29576	49220	38737	92599
4 2,2 dimethylpropane	5818	6465	5607	10551	9944	6645	4858
5 iso-pentane	521363	757202	811181	718928	694135	470443	669383
6 n-pentane	109339	159540	177402	141852	160396	114089	131802
7 2,2-dimethylbutane	45309	106079	119819	74271	44895	27228	76275
8 cyclopentane	54479	49403	71734	53742	21458	13261	78269
9 2,3dimethylbutane	52717	103916	116840	81561	70058	42885	75175
10 2methylpentane	221975	410367	449738	328493	276944	180782	319731
11 3-methylpentane	168193	282833	314279	236569	204865	132755	215591
12 n-hexane	107637	116357	136966	125273	130155	88400	121718
13 2,2dimethylpentane	2910	5174	5882	5241	4612	2567	3017
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	71622	138424	148338	101693	98291	61923	109279
15 benzene	48508	80045	85743	81806	73800	54391	49148
16 3,3-dimethylpentane	0	2625	3162	3158	2671	0	0
17 cyclohehane	0	0	0	2374	2233	0	0
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	106074	145402	158504	155627	166586	104948	108363
19 3-methylhexane	52727	65323	72211	76690	86699	54084	48720
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	8951	12871	12965	15219	15714	9323	0
21 trans1,3dimethylcyclopentane	3088	5263	5694	6968	6732	3302	7601
22 3ethylpentane	96247	205638	281090	159341	232082	141599	173913
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	6793	10560	10676	10203	13863	7284	5270
24 2,2,4-trimethylpentane	0	4297	3985	4654	4986	5336	0
25 n-heptane	31172	31017	34477	37222	57428	37597	27817
26 2,2dimethylhexane	2256	3847	3786	4721	5070	2421	3776
27 2,5dimethylhexane	26877	39030	43772	36089	52224	32480	32639
28 2,4dimethylhexane	11995	26728	35539	21434	27563	16665	18942
29 3,3dimethylhexane	2107	3258	3275	3624	4982	2566	2093
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	364470	580433	648975	211483	525878	391873	332553
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0	4426	4829	0	7836	0	0
32 2,3-dimethylhexane	3979	1955	1539	2003	2265	4681	4007
33 2methyl-3ethylpentane	0	3503	4386	3006	4387	0	1377
34 2-methylheptane	12033	15239	16563	19002	24975	12733	12333
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1418	1225	1353	2036	2580	2672	2876
36 3,4dimethylhexane	0	0	0	3326	0	0	0
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	2712	0	0	0
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0	5081	6468	6652	0	0	0
39 3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	2650	1348	6958	0	0	0
40 1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	2881	0	0	0
41 trans1,3ethylmethylcyclopentane	1828	7019	6125	7342	4946	1856	3572

42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	5585	6558	6324	0	2674	6030	3858
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	4972	3629	3737	0	8971	5216	1868
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	6449	0	0	2909	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2748	5749	2927	3516	8403	1068	0
47	n-octane	11818	4410	3690	2156	5086	15706	9377
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	4703	2226	2019	3640	2357	1112	2534
49	unidentified C9-Napthene	0	0	3467	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	1217	3513	0	0	2186	2658	3628
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	2829	1625	1767	1957	2196	0	1819
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	2162	4577	4712	0	4527	2495	1366
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	4094	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	5215	1164	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	3895	4048	5525	3432	6272	3700	2894
58	2,6dimethylheptane	4116	2421	2711	2362	2671	1128	4490
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	2580	0	0	1994	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	1889	1622	1800	1441	3233	2293	2278
62	3,3-dimethylheptane	1450	1364	1782	2676	4227	2666	1228
63	unidentified C9-Napthene	2088	1938	1069	4328	1444	0	1021
64	unidentified C9-Napthene	2177	2082	3572	0	0	0	2738
65	ethylbenzene	103170	140581	161346	119396	147472	102731	86344
66	unidentified C9-Napthene	4913	4725	5546	5118	7298	4735	4458
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	6319	6191	5770	8012	11968	7367	4214
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	1119	0	0
69	p-xylene	104672	140823	158258	120548	157270	109931	89475
70	m-xylene	242043	327854	367630	298548	354251	248990	209208
71	2,3dimethylheptane	0	0	1351	0	0	0	993
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	1384	1504	1659	1345	0	1011
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	626	602	648	768	0	0	0
76	unidentified C9-Napthene	0	1149	2216	1580	0	0	0
77	o-xylene	137996	188411	212692	169074	206864	142906	116929
78	unidentified Paraffin	8929	4422	4744	6112	17277	11269	5760
79	unidentified Napthenes	1266	1316	1278	14105	2527	1544	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	11718	1123	0	0
82	n-nonane	3539	5449	6788	2022	5391	3782	3708

	21 U95 C(22/5)	22 U95 C(24/4)	23 U95 C(26/5)	24 U95 C(12/5)	25 U95 C(22/5)_2	26 U95 C(10/7)	27 U95 C(3/6)	
1	propane	751	2355	351	289	1027	891	531
2	iso-butane	31267	60561	19934	17280	31334	35084	28023
3	n-butane	45843	92294	32166	24626	46384	36710	35112
4	2,2 dimethylpropane	8315	5393	7122	6761	8901	6203	8575
5	iso-pentane	659666	560953	538578	488295	676351	715773	704304

6	n-pentane	146962	116996	107930	95163	150073	149568	137598
7	2,2-dimethylbutane	61378	55341	45055	37941	63169	91593	66842
8	cyclopentane	42509	47475	40341	26315	43972	50356	67752
9	2,3dimethylbutane	76401	59184	63170	51239	79638	92686	83570
10	2methylpentane	305645	255891	243370	207027	317875	357117	320895
11	3-methylpentane	219142	181457	179444	152867	226998	249734	241340
12	n-hexane	22238	102818	93057	83066	116461	111256	126752
13	2,2dimethylpentane	2545	2813	2022	2384	2926	4078	4519
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	105574	77864	89756	70140	111226	110480	116767
15	benzene	62834	60753	48833	45087	66110	62003	62224
16	3,3-dimethylpentane	1243	0	0	0	1570	1906	2555
17	cyclohehane	0	0	0	0	0	0	2873
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	112769	111339	100890	101215	117671	119456	149185
19	3-methylhexane	57595	48647	50735	51658	60587	56981	76396
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	12941	0	10708	9825	14754	11313	17502
21	trans1,3dimethylcyclopentane	4087	7778	1009	3119	5152	4596	7191
22	3ethylpentane	227813	98519	224480	127386	238799	200370	233245
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	9250	5116	8602	7284	11137	8880	12779
24	2,2,4-trimethylpentane	3858	0	7822	0	4606	8582	5754
25	n-heptane	28573	24220	23532	29355	30829	26561	35342
26	2,2dimethylhexane	4254	4357	3905	2813	4537	3162	5795
27	2,5dimethylhexane	38364	26602	35780	28520	40737	32864	43633
28	2,4dimethylhexane	26956	11106	26134	14857	28695	25230	29383
29	3,3dimethylhexane	3393	1869	3002	2605	3736	2370	4584
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	394386	419812	324399	321658	444250	449300	471127
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	4946	0	4582	0	5470	3983	6588
32	2,3-dimethylhexane	1743	3367	1540	4331	2100	1206	2436
33	2methyl-3ethylpentane	4022	0	3504	0	4032	2837	4267
34	2-methylheptane	17306	10343	15332	12624	18030	13066	21955
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1559	0	4888	2341	1530	4865	2284
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0	0	5075
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	2296	2573
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	5029	0	1895	1284	4813	0	7751
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	1946	0	0	0	1727	0	0
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	5373	3112	4879	4911	6895	5888	8488
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	6650	4439	6292	5328	7373	5762	6098
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	4330	2358	3880	3009	4003	2926	2631
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2063	0	0	0	9241	4807	8533
47	n-octane	2899	5970	7147	11574	3448	4065	6833
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	2842	3344	2810	0	2251	1862	3455
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	3914	0	3396
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	1872	2044	1812	0	0	3109	5383
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	2130	0	3457	2763	2248	1367	1094

53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	3859	993	1936	2179	5315	4168	2723
55	4,4-dimethylheptane+9N	2107	0	0	0	0	0	1104
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	4659	2873	4618	3750	3625	3432	5492
58	2,6dimethylheptane	3202	2819	3244	2061	2588	2190	3775
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	2690	2222	2734	2325	2536	1582	2270
62	3,3-dimethylheptane	2177	1540	1816	2325	1179	1201	2038
63	unidentified C9-Napthene	1311	0	1320	0	2083	1677	2717
64	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	1188	1697	3077
65	ethylbenzene	99012	101034	85605	85483	101545	105021	120542
66	unidentified C9-Napthene	5039	3919	5361	4538	5509	4106	6842
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	7880	4766	7223	7285	8259	5682	11126
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	0	0	0
69	p-xylene	107330	110363	92097	91337	110696	111210	126619
70	m-xylene	243024	255286	212702	212332	251016	257464	294826
71	2,3dimethylheptane	0	0	0	0	0	0	1056
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	0	2256	0	1464	0	2021
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	564	0	0	0	977	1165	984
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	1811	696	1529
77	o-xylene	133455	142443	118567	120592	137708	146371	167234
78	unidentified Paraffin	6699	4178	5944	8507	7144	3879	6831
79	unidentified Napthenes	1494	0	1466	1254	1584	1134	1896
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0	888
82	n-nonane	2898	3155	2420	2966	2941	3567	4952

	28 U95 C(12/6)	29 U95 C(17/6)	30 U95 E(23/8)	31 U95 F(21/8)	32 U95 F(8/9)	33 U95 F(14/9)	34 U95 F(28/8)	
1	propane	199	222	270	853	968	1001	469
2	iso-butane	22576	23843	17647	23032	18949	17601	11399
3	n-butane	28713	35764	16086	38334	38290	41159	20277
4	2,2 dimethylpropane	6327	7103	6096	9669	19460	10658	6988
5	iso-pentane	645171	653380	696259	752955	583503	744824	602830
6	n-pentane	120838	129046	158284	164887	111425	157082	111219
7	2,2-dimethylbutane	70401	65408	104404	84889	60855	77147	71752
8	cyclopentane	39247	21119	114286	76418	49587	52793	59645
9	2,3dimethylbutane	80595	77415	90095	96401	69787	88338	78700
10	2methylpentane	310116 8	302484	387066	377932	279217	354070	321701
11	3-methylpentane	224868	214641	289579	279378	202231	257915	231702
12	n-hexane	99969	90885	179475	170946	109409	140865	112486
13	2,2dimethylpentane	4315	3399	6465	25932	19270	22230	5905
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	100370	97670	114310	110494	71269	88837	121501
15	benzene	53916	59996	91460	89992	72267	95267	74439
16	3,3-dimethylpentane	2347	1434	3474	3739	2765	3394	3872
17	cyclohehane	2363	2179	0	3005	0	2642	2900

18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	134604	121504	170795	184868	146412	175307	163526
19	3-methylhexane	68690	62371	80207	87662	73871	85519	83153
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	14349	13954	12762	18632	12515	17043	17222
21	trans1,3dimethylcyclopentane	5771	5338	6128	7831	5986	7670	7572
22	3ethylpentane	220241	225260	29339	289447	183993	196025	167660
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	10734	10730	9182	13872	8636	11666	11972
24	2,2,4-trimethylpentane	2775	5005	4204	6267	9502	5712	6019
25	n-heptane	29839	27494	41997	48898	36976	41555	40560
26	2,2dimethylhexane	4938	4604	4098	6416	4071	5157	5591
27	2,5dimethylhexane	36755	36218	32988	59400	35497	42759	41535
28	2,4dimethylhexane	26498	27387	6229	38397	24264	26247	24116
29	3,3dimethylhexane	3688	3460	3374	5371	3287	6209	4807
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	427563	450246	640298	633863	476125	21332	501795
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	5535	5163	0	7404	5706	6718	7217
32	2,3-dimethylhexane	2086	2345	4900	2828	1858	2346	2775
33	2methyl-3ethylpentane	3848	3929	1580	5516	3341	3625	3839
34	2-methyheptane	18943	17769	15156	23919	18656	22034	23066
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1731	1425	1425	2469	1829	2413	2657
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	5933	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	2613	2618	0	4330	3464
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	4143	4345	7606	9855	3808	1858	2201
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	2270	2015	6815	9801	1171	0	8230
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	2089	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	6795	6557	7077	6928	5223	7186	8793
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	7475	7646	0	3261	6330	8105	4815
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	4529	4493	0	12867	3664	3691	8900
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	8385	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	6487	0	5062	3599	7542	4043	0
47	n-octane	3695	5794	6460	3616	3768	2467	5353
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	2527	2601	2215	3146	2097	4247	2980
49	unidentified C9-Napthene	0	0	3162	1045	3367	0	4914
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	4324	0	0	5273	0	0	0
51	2,2-dimethylheptane	0	0	2483	1357	0	1136	1193
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1120	4103	1963	3609	1805	2423	2510
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	1915	0	0	1660
54	2,4dimethylheptane	2236	1149	0	0	0	1416	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	934	1878	5355	0	0	6054	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	978	9243	7508	0	0	6502
57	2methyl-4-ethylhexane	5710	5481	3924	7512	4910	3982	4540
58	2,6dimethylheptane	3532	2312	2370	4768	3040	2918	3493
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	2911	0	0	3609	2592	2367	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	1912	0	2421
61	2,5dimethylheptane	1782	2706	1935	2984	1718	1726	1658
62	3,3-dimethylheptane	1132	1986	3719	5452	1383	2893	1612
63	unidentified C9-Napthene	1909	1779	4753	0	0	0	3884
64	unidentified C9-Napthene	1424	0	7543	6885	0	3643	0

65	ethylbenzene	107315	107364	178841	156354	120435	152784	118923
66	unidentified C9-Napthene	6019	5059	6654	0	5408	6690	6842
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	8546	8769	6978	8242	7465	9562	9629
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	9167	12212	0	0	0
69	p-xylene	116288	119096	168889	158877	118068	150646	121036
70	m-xylene	272927 5	273169	418367	402743	279906	369509	309053
71	2,3dimethylheptane	0	0	2916	1760	0	0	0
72	4-ethylheptane	0	0	1395	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1593	0	2519	3313	0	1968	2372
74	3ethylheptane	0	0	0	2914	0	0	0
75	3-methyloctane	1054	1409	0	1082	1181	884	1016
76	unidentified C9-Napthene	1738	957	3911	3649	718	1468	1449
77	o-xylene	157612	154291	241889	227803	162004	208251	173624
78	unidentified Paraffin	5321	4730	4985	10488	0	6467	6133
79	unidentified Napthenes	1777	1638	0	2296	1323	1634	1926
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	773	0	954	4936	5744	799
82	n-nonane	4315	4155	9872	6360	4929	2379	5407

	35 U95 F(25/8)	36 U95 F(17/8)	37 LRP A(8/7)	38 LRP A(24/4)_1	39 LRP A(8/4)	40 LRP A(24/4)_2	
1	propane	350	636	998	709	713	1186
2	iso-butane	18693	20085	36255	36261	35999	44719
3	n-butane	30241	22797	29335	37927	46743	46130
4	2,2 dimethylpropane	12654	6402	6071	3743	6683	4987
5	iso-pentane	775104	599398	706173	443998	509271	521589
6	n-pentane	148749	107817	160237	86972	85704	103206
7	2,2-dimethylbutane	80311	74490	96397	43569	43574	52483
8	cyclopentane	18046	68691	110641	64821	42823	76495
9	2,3dimethylbutane	98700	75025	90007	49935	52718	59528
10	2methylpentane	396933	299398	375296	203776	234206	238346
11	3-methylpentane	279401	223152	278074	152158	158993	178278
12	n-hexane	118542	120830	159844	93697	83173	110031
13	2,2dimethylpentane	4756	15533	5215	1993	2337	2794
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	148031	86501	121299	64627	82305	78445
15	benzene	81182	63937	77029	41751	39460	50315
16	3,3-dimethylpentane	4188	1819	2688	0	0	0
17	cyclohehane	3316	0	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	172112	130797	139899	89164	115491	107051
19	3-methylhexane	90253	60507	67508	38385	50016	46509
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	23542	11874	12050	0	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	8259	4466	4934	5758	8670	7211
22	3ethylpentane	214066	167081	81049	146573	48515	171524
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	17035	8137	9065	0	5147	5028
24	2,2,4-trimethylpentane	1663	8329	4025	0	0	0
25	n-heptane	40488	31489	32808	17679	24605	21795
26	2,2dimethylhexane	8616	3429	3588	0	0	2096
27	2,5dimethylhexane	54850	39224	25972	52562	5398	31023
28	2,4dimethylhexane	29855	21039	11558	14894	24421	18303
29	3,3dimethylhexane	6948	2866	2954	1703	2025	1922

30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	506944	460762	568042	323152	298579	367132
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	8784	4661	0	0	0	0
32	2,3-dimethylhexane	4142	1297	4047	0	4688	3050
33	2methyl-3ethylpentane	4574	2440	1521	0	0	1088
34	2-methylheptane	28374	14749	15457	9128	13660	10430
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	3114	2643	1562	2461	1297	2749
36	3,4dimethylhexane	4340	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	3725	2318	0	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	11151	7196	1182	7816	0	0
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	12220	6293	0	2072	0	0
40	1,1dimethylcyclohexane	0	2037	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	8206	8064	4930	0	3384	2707
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	3592	2882	6173	2130	4520	4256
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	9407	0	3767	3490	2342	2125
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	1480	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	5680	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	1426	0	4226	963	0	0
47	n-octane	5412	3404	5963	4147	8537	4929
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	5049	2014	2038	2023	3235	2551
49	unidentified C9-Napthene	7554	3290	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	0	3273	3077	2357	3713
51	2,2-dimethylheptane	2135	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	3242	1971	2568	1353	1363	2002
53	2,2,3-trimethylhexane	2421	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	1886	0	0	1018
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	4835	4729	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	8494	5690	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	2685	2901	7383	2340	3448	2948
58	2,6dimethylheptane	4180	2151	3070	3630	2897	4387
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	3458	0	0	0	0	1819
60	unidentified C9-Napthene	974	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	3192	2256	1721	2084	1954	3732
62	3,3-dimethylheptane	3515	3350	3069	2434	2755	1729
63	unidentified C9-Napthene	0	4467	3529	2229	2770	1186
64	unidentified C9-Napthene	0	0	5925	0	1348	2734
65	ethylbenzene	125730	114496	147366	85667	80660	96563
66	unidentified C9-Napthene	8069	4922	5544	3279	5010	3875
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	13219	6319	5042	3547	5804	4115
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	8966	0	0	0	0
69	p-xylene	124770	114738	151494	89712	84884	100635
70	m-xylene	319961	289956	349636	211983	200735	235288
71	2,3dimethylheptane	2162	1652	2289	0	0	1033
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	4964	1964	1853	0	0	1001
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	1565	711	607	747	0	0
76	unidentified C9-Napthene	2025	2317	2772	0	0	0

77	o-xylene	174636	162438	198762	118206	113494	131693
78	unidentified Paraffin	7537	5789	4848	3172	5126	3664
79	unidentified Napthenes	2791	666	1121	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	1295	0	0	0	0	0
82	n-nonane	4581	3965	5087	2501	3544	2978

	41 LRP A(13/5)<i>new</i>	42 LRP A(5/6)	43 LRP A(20/6)	44 LRP D-A(13/9)	45 LRP D-A(1/9)	46 LRP E(17/9)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ						
1 propane	1002	439	354	1442	751	1682
2 iso-butane	19046	30310	23709	25103	11981	24130
3 n-butane	21956	31078	22027	44092	18381	48942
4 2,2 dimethylpropane	3617	8182	5076	6289	7734	10427
5 iso-pentane	420490	860444	630359	736381	512447	823978
6 n-pentane	91433	169603	135272	174087	101686	186138
7 2,2-dimethylbutane	45624	102751	76176	97258	62544	92983
8 cyclopentane	59144	36073	86945	134847	75090	81559
9 2,3dimethylbutane	42305	101649	74449	90480	58727	98632
10 2methylpentane	188368	408528	305943	373079	247131	397728
11 3-methylpentane	162435	287484	230084	279426	182326	289617
12 n-hexane	113845	126110	133884	195072	110788	168459
13 2,2dimethylpentane	1706	7186	4691	20324	10401	6515
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	66445	119873	90796	90567	536553	123778
15 benzene	58422	81138	62560	104381	60105	105078
16 3,3-dimethylpentane	0	4680	2433	4145	2514	4252
17 cyclohehane	0	2621	0	0	0	2786
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	98169	195182	125856	186915	118586	188021
19 3-methylhexane	41779	88336	62585	84141	58598	90111
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0	16151	10422	11134	8216	17142
21 trans1,3dimethylcyclopentane	5577	8147	4378	6906	3915	8158
22 3ethylpentane	58562	103655	82236	172072	93413	197109
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0	11961	7326	8316	803	12091
24 2,2,4-trimethylpentane	0	4979	8371	3449	5308	5633
25 n-heptane	19874	41676	29741	45636	30818	46568
26 2,2dimethylhexane	0	4911	3043	3023	3545	5356
27 2,5dimethylhexane	17612	35157	22459	36713	24750	48261
28 2,4dimethylhexane	7048	14084	10901	22102	12648	26417
29 3,3dimethylhexane	2142	3844	1993	2254	2708	4501
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	429458	605967	468151	691456	397523	676344
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0	6091	0	5102	3611	6697
32 2,3-dimethylhexane	9659	2036	3734	2432	0	2292
33 2methyl-3ethylpentane	2281	2260	1238	0	0	3621
34 2-methyheptane	8095	20063	14306	15960	10670	21760
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	2186	0	1635	1292	2310
36 3,4dimethylhexane	0	0	0	3666	0	0
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0	4463
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0	1567	1804	5078	3140	1912
39 3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	2190	0	0	0	7446

40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	2453	6912	5852	5281	4060	7909
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	3476	7505	5424	1658	3725	4138
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	1272	4341	3084	7604	5633	8843
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	5074	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0	0	3756	4883	2764	3482
47	n-octane	4616	7920	4754	6476	3097	3278
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	4613	2831	1587	1571	1925	2503
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	2527	0	4192
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	1627	2437	2837	0	0	0
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	2595	0	1072
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	4110	1357	1760	0	2326
53	2,2,3-thrimethyllexane	0	0	0	0	0	1110
54	2,4dimethylheptane	0	2129	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	5264	4316	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	4440	0	6196
57	2methyl-4-ethylhexane	2408	3054	6495	8039	3029	6558
58	2,6dimethylheptane	3573	2643	2435	2844	3896	3878
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	1996	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	1036	2390
61	2,5dimethylheptane	2111	1819	1194	1827	1433	2724
62	3,3-dimethylheptane	0	879	2343	3843	1084	3819
63	unidentified C9-Napthene	3219	2296	1792	4430	2886	5173
64	unidentified C9-Napthene	2314	3816	4505	7081	0	0
65	ethylbenzene	94092	146319	125648	176265	101899	168589
66	unidentified C9-Napthene	3370	5535	4955	0	3564	7015
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	3799	8471	4761	6909	3804	10159
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	1357	8849	0	0
69	p-xylene	102346	154305	127187	164841	96403	125236
70	m-xylene	237855	365406	296475	399479	230295	355782
71	2,3dimethylheptane	0	0	1908	2361	954	1398
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	1397	1713	1019	0	2185
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	799	975	0	1984	927	756
76	unidentified C9-Napthene	0	1604	2019	3095	1019	2483
77	o-xylene	131014	211647	171321	230159	133726	225786
78	unidentified Paraffin	3476	5355	4348	4699	3110	6870
79	unidentified Napthenes	0	1662	1122	0	0	1610
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0
82	n-nonane	2422	5481	4230	6852	4142	6358

	47 LRP E(8/9)	48 LRP E(20/4)	49 LRP E(8/8)	50 U100 D-B(9/9)	51 U100 D-A(13/7)	52 U100 D-B(13/8)
1 propane	1180	949	1452	339	2241	605
2 iso-butane	17880	30655	30376	45787	42517	29147
3 n-butane	29317	33851	29977	74783	69691	46175

4	2,2 dimethylpropane	7085	2267	6985	27817	6914	8794
5	iso-pentane	641934	512946	806022	330533	459554	479079
6	n-pentane	123332	93547	143856	92116	91287	93374
7	2,2-dimethylbutane	78969	79208	117236	25424	36967	25582
8	cyclopentane	73689	82322	105609	181485	126996	107952
9	2,3dimethylbutane	72953	58020	106123	45114	51199	48943
10	2methylpentane	308197	257192	421941	147894	159101	158524
11	3-methylpentane	219163	181470	312039	137157	139833	148460
12	n-hexane	119993	99749	160181	183083	135849	154686
13	2,2dimethylpentane	14953	2947	18915	21591	24465	25918
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	75215	61401	119529	22414	53678	50500
15	benzene	70922	37792	87224	89103	77767	77556
16	3,3-dimethylpentane	2944	0	3942	4730	2591	3572
17	cyclohehane	0	0	2094	1521	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	39049	82800	168462	164508	115094	161604
19	3-methylhexane	67479	32495	77943	72697	47593	66409
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	9838	0	14723	4996	0	6535
21	trans1,3dimethylcyclopentane	4718	1891	7202	4726	2482	4533
22	3ethylpentane	114324	14207	187160	377190	361993	391677
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	6676	0	10510	0	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	7225	0	4677	0	0	5503
25	n-heptane	34897	17260	39847	43026	27176	36106
26	2,2dimethylhexane	2167	0	4342	0	0	0
27	2,5dimethylhexane	27244	0	38502	41588	32875	38723
28	2,4dimethylhexane	15179	11640	24724	45727	43962	46132
29	3,3dimethylhexane	3313	0	3595	7344	6478	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	461759	301315	667293	631292	605894	664369
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	5221	5320	7089	3376
32	2,3-dimethyhexane	4532	4672	2007	11855	1916	5414
33	2methyl-3ethylpentane	1483	0	3329	8488	4622	0
34	2-methyheptane	14147	0	17805	0	0	11806
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1191	0	1771	0	0	6896
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	4213	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	4569	4821	1532	2468	8094	0
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	0	7482	0	8300	0
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	7408	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	4729	0	2754	0	1186	2493
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	4885	0	6861	0	0	3294
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	6583	0	0	0	0	3640
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	2555	0	0	6463	3991	5243
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2684	0	4441	6158	4001	4187
47	n-octane	1389	3480	6411	8183	7037	6307
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	2357	2816	2364	0	0	1273
49	unidentified C9-Napthene	0	0	3891	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	4549	0	0	1415	0

51	2,2-dimethylheptane	0	0	1100	986	0	1173
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1155	0	2198	2175	1538	1020
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0	0
54	2,4-dimethylheptane	0	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	5693	3963	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	9726	7754	0	3199
57	2methyl-4-ethylhexane	3754	4771	4329	0	7803	8048
58	2,6-dimethylheptane	3723	0	2646	0	1475	2210
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	1340	0	1947	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0	0
61	2,5-dimethylheptane	1387	1975	3819	1569	3097	3124
62	3,3-dimethylheptane	1392	1590	4792	3823	2500	3398
63	unidentified C9-Napthene	0	3541	7606	4579	5880	3520
64	unidentified C9-Napthene	2780	0	0	7413	0	6252
65	ethylbenzene	108482	80777	166529	156973	144289	162348
66	unidentified C9-Napthene	4184	3439	7687	0	0	0
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	5089	0	7154	1827	1862	4414
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	9747	0	0	2314
69	p-xylene	109448	77244	166856	139546	128784	155853
70	m-xylene	266645	186200	414311	332902	303508	386153
71	2,3-dimethylheptane	0	1608	2984	1986	0	2378
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	1598	1173	0	4017	1248
74	3ethylheptane	0	0	0	0	1083	0
75	3-methyloctane	1272	0	2724	1604	0	1719
76	unidentified C9-Napthene	1543	0	4271	2690	3347	3710
77	o-xylene	154196	107794	236312	19820	178200	228432
78	unidentified Paraffin	3569	2245	6148	3503	0	3550
79	unidentified Napthenes	0	0	15710	0	2498	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0	0
82	n-nonane	4698	2920	6680	6977	5802	6141

	53 U100 D-B(19/7)	54 U100 D-B(20/10)	55 U100 D-B(14/10)	56 U100 D-B_1(14/10)	57 U100 D-B_2(14/10)	
1	propane	2898	569	634	1004	632
2	iso-butane	38695	69242	65994	105851	65940
3	n-butane	48416	77946	75013	120160	73818
4	2,2 dimethylpropane	5476	3306	3043	4768	2864
5	iso-pentane	501511	208674	229450	367616	214572
6	n-pentane	113668	38040	49222	80092	44969
7	2,2-dimethylbutane	50966	19662	16458	27061	14185
8	cyclopentane	139908	73232	91435	147518	77300
9	2,3-dimethylbutane	49650	28327	25448	41769	21360
10	2methylpentane	198491	77116	72122	116146	60681
11	3-methylpentane	168920	68894	74224	119722	61628
12	n-hexane	164451	68145	93455	149935	76610
13	2,2-dimethylpentane	13970	15181	15855	26545	12205
14	methylcyclopentane+2,4-dimethylpentane	63923	27284	23826	39321	18936
15	benzene	86650	31969	39738	65385	31370
16	3,3-dimethylpentane	3377	0	0	3172	0

17	cycloheptane	0	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	129868	38645	79181	128762	60084
19	3-methylhexane	52282	14277	27152	44650	19906
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	2038	0	0	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	1578	0	0	0	0
22	3ethylpentane	147962	313009	291286	458065	215872
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	0	0	0	0	0
25	n-heptane	32022	7850	16231	27087	11467
26	2,2dimethylhexane	0	0	3533	7392	0
27	2,5dimethylhexane	20129	23400	28223	46724	19576
28	2,4dimethylhexane	18135	34177	33174	54420	22861
29	3,3dimethylhexane	0	1588	2294	0	0
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	682890	224629	368492	590395	267889
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	5644	0	0	0	0
32	2,3-dimethylhexane	1582	0	2425	0	0
33	2methyl-3ethylpentane	6374	0	4053	4404	3947
34	2-methylheptane	0	4210	3359	7145	3150
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	0	0	0	0
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	5700	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	3496	2232	5629	9644	2200
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	5473	0	0	3694
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	1953	0	0
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	3445	1037
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	3999	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	4619	2065	2937	4893	1750
47	n-octane	8361	3893	5406	9199	3638
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	0	1028	0
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	1715	0	944	1971	0
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	8823	4139	5574	0	0
58	2,6dimethylheptane	1706	0	2283	9492	3598
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	1581	0
60	unidentified C9-Napthene	1217	0	0	1629	0
61	2,5dimethylheptane	3738	1541	2149	3845	1121
62	3,3-dimethylheptane	3626	1183	4322	3515	2638
63	unidentified C9-Napthene	7027	3085	0	7272	0

64	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
65	ethylbenzene	167832	41678	81935	135793	55723
66	unidentified C9-Napthene	2062	5836	7274	11275	4860
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	965	3002	1270	3574	1125
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	694	3440	1543
69	p-xylene	159683	39864	75858	127342	52793
70	m-xylene	372748	97989	183442	311353	129741
71	2,3dimethylheptane	2883	1786	1560	2775	1346
72	4-ethylheptane	1967	0	0	2132	902
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1142	1024	0	0	0
74	3ethylheptane	0	0	0	1223	0
75	3-methyloctane	0	1918	2492	4515	1621
76	unidentified C9-Napthene	3893	0	0	0	0
77	o-xylene	217931	57079	113465	186562	77621
78	unidentified Paraffin	2471	0	1268	2518	0
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	3247	1377	3327	5908	2145

	58 U100	59 U100	60 U100	61 U100	62 U100	
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	D-B_3(14/10)	D-B(29/11)	D-B_1(29/11)	D-B_2(29/11)	D-B_3(29/11)	
1	propane	664	1947	2053	1822	2043
2	iso-butane	73541	119976	113969	115687	128435
3	n-butane	84976	76044	72042	73632	82217
4	2,2 dimethylpropane	3659	2832	2424	2735	3160
5	iso-pentane	27299	226356	213749	221216	251381
6	n-pentane	60020	43947	41129	43179	49553
7	2,2-dimethylbutane	20842	8598	7622	8399	9984
8	cyclopentane	116598	102457	95587	100953	119586
9	2,3dimethylbutane	32789	16595	15134	16140	19046
10	2methylpentane	91981	52734	48828	51842	61594
11	3-methylpentane	95550	64251	59707	63388	75647
12	n-hexane	121360	99925	93179	98946	118705
13	2,2dimethylpentane	21375	2380	9717	10562	3049
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	32072	22809	25337	27288	27915
15	benzene	53503	46343	43433	46291	56783
16	3,3-dimethylpentane	2478	0	0	0	1413
17	cyclohehane	0	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	107989	69878	64515	69650	86815
19	3-methylhexane	37825	24589	22527	24546	31276
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
22	3ethylpentane	398713	214602	201299	21569	269450
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	0	0	0	0	0
25	n-heptane	23235	14818	13635	14830	19190
26	2,2dimethylhexane	0	0	0	0	0
27	2,5dimethylhexane	40870	14220	12876	14549	19123
28	2,4dimethylhexane	47994	21219	19564	21421	28159

29	3,3dimethylhexane	0	0	0	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	519714	367987	353076	373336	472560
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
32	2,3-dimethylhexane	0	0	0	0	0
33	2methyl-3ethylpentane	0	2678	0	0	0
34	2-methylheptane	3820	2647	2510	2730	3958
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	6397	0	2442	2707	3763
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	5112	3374	3187	3464	4692
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	8518	2165	1911	2211	3210
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0	1914	0	0	0
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	3123	0	1789	1920	2742
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	4404	2918	2764	2952	4122
47	n-octane	8474	5190	4953	5462	7259
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	0	0	0
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	1746	1198	1028	1203	1917
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	0	0	0	0	0
58	2,6dimethylheptane	8761	6758	6303	6800	9382
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	1350	0	0	0	1240
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	1382	3099	3031	3131	4447
62	3,3-dimethylheptane	3571	2520	2441	2550	3477
63	unidentified C9-Napthene	3296	5160	4854	5194	7142
64	unidentified C9-Napthene	6714	0	0	0	0
65	ethylbenzene	122120	73431	71343	75331	99360
66	unidentified C9-Napthene	10905	7297	7096	7726	10321
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	3369	1712	1659	1788	4213
68	unidentified Napthene+Paraffin	3334	0	0	0	1878
69	p-xylene	115290	72970	71184	74923	101336
70	m-xylene	281925	172510	169505	177319	243012
71	2,3dimethylheptane	2521	2183	0	0	3147
72	4-ethylheptane	1898	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	1371	3492	3727	3354
74	3ethylheptane	1046	0	0	0	0
75	3-methyloctane	4170	2973	2955	3089	4311

76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
77	o-xylene	169186	101789	100360	104885	137816
78	unidentified Paraffin	2234	1352	1242	1313	2018
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	5302	2971	2852	3051	4232

	63 U100 G(19/10)	64 U100 G_1(19/10)	65 U100 G_2(19/10)	66 U100 G_3(19/10)	67 B(18/6) 378
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	796	693	976	1144	29898
2 iso-butane	48463	60545	54736	32498	38898
3 n-butane	56193	74023	67090	76583	7860
4 2,2 dimethylpropane	2930	3628	3708	4351	758434
5 iso-pentane	222908	290165	261529	295933	153067
6 n-pentane	45225	61323	55342	62984	80918
7 2,2-dimethylbutane	13569	17409	16064	18597	72013
8 cyclopentane	72627	97129	85591	96627	94657
9 2,3dimethylbutane	22268	28719	25812	29573	361738
10 2methylpentane	68620	91178	80640	91115	267770
11 3-methylpentane	67297	89567	79145	89242	137730
12 n-hexane	80099	109055	95691	107885	5443
13 2,2dimethylpentane	12069	16104	14040	16063	123556
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	21857	28370	25102	28730	74933
15 benzene	35450	49738	43693	49355	3220
16 3,3-dimethylpentane	0	1099	0	1255	0
17 cyclohehane	0	0	0	0	166437
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	67202	88934	77320	87380	82617
19 3-methylhexane	24348	32095	27813	31623	16606
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0	0	0	0	6921
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0	0	0	0	254413
22 3ethylpentane	220692	284656	241950	269488	12913
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	0	0	6129
24 2,2,4-trimethylpentane	0	0	0	0	37791
25 n-heptane	13933	18644	16010	18371	5726
26 2,2dimethylhexane	0	2125	0	1737	43439
27 2,5dimethylhexane	24011	26450	22489	25631	31260
28 2,4dimethylhexane	24061	31370	26472	29999	4596
29 3,3dimethylhexane	0	0	0	0	588745
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	326677	439531	372137	410981	6575
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	2615
32 2,3-dimethylhexane	2717	0	0	0	4746
33 2methyl-3ethylpentane	2835	3627	2740	3384	21968
34 2-methylheptane	3393	3595	2864	3502	2077
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	0	0	0	4838
36 3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	2050
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	3950	4414	3661	4223	8689
39 3-ethylhexane+trans-1,4--	0	5065	4095	4773	0

	dimethylcyclohexane					
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	9194
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	3520
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	1779	0	0	0	7550
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	2160	0	0	0	0
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	2311	1775	2208	6857
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	2913
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0	2921	2235	2720	5193
47	n-octane	4126	5130	4333	4818	0
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	0	0	0
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	1185
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	1275	0	0	0
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	2947
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	1715
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	6885
57	2methyl-4-ethylhexane	0	0	0	0	5675
58	2,6dimethylheptane	4389	5638	4385	5245	3723
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	2332
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	2634
61	2,5dimethylheptane	1657	2051	1654	1937	4340
62	3,3-dimethylheptane	1435	1804	1419	1723	5587
63	unidentified C9-Napthene	3304	4098	3287	3856	0
64	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	147564
65	ethylbenzene	74600	96888	79274	87908	7490
66	unidentified C9-Napthene	5698	6936	5763	6500	11329
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	4676	1317	1013	1209	0
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	1208	867	1139	152648
69	p-xylene	70852	92532	75781	83740	381573
70	m-xylene	173336	223538	183248	201581	1377
71	2,3dimethylheptane	0	1653	1190	1484	0
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	2692
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1165	0	0	0	0
74	3ethylheptane	0	0	0	0	1004
75	3-methyloctane	2035	2560	2047	2375	2400
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	211671
77	o-xylene	106603	135349	110477	121782	6977
78	unidentified Paraffin	1264	1686	1254	1471	2025
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	1133
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	4936
82	n-nonane	3030	3554	2909	3258	

	ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	68 F(31/8)	69 B(18/6)rep	70 U95	71 U100	72 U100_1
1	propane	876	276	486	974	729
2	iso-butane	16368	24883	18542	25120	21573
3	n-butane	30174	32753	25041	40408	35846

4	2,2 dimethylpropane	10487	6337	6212	4771	4287
5	iso-pentane	758324	663484	578201	322922	300113
6	n-pentane	146339	132734	35897	69842	64787
7	2,2-dimethylbutane	90517	69881	66543	23332	21941
8	cyclopentane	94902	61896	58270	99213	94541
9	2,3dimethylbutane	93733	82248	70634	33768	32281
10	2methylpentane	381947	316887	284451	118468	113137
11	3-methylpentane	280696	233716	206550	105285	100795
12	n-hexane	154837	119949	111932	113122	108988
13	2,2dimethylpentane	8674	4583	3780	15039	14618
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	132984	106629	90081	35481	34376
15	benzene	97306	64353	63099	56702	55343
16	3,3-dimethylpentane	6140	2736	1346	1854	1725
17	cyclohehane	3163	2574	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	203614	144865	120799	95359	93837
19	3-methylhexane	105358	71970	56985	38815	38741
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	18437	15111	10122	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	9339	6402	3960	1541	1529
22	3ethylpentane	166435	224333	127908	217749	215518
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	13407	10919	6263	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	6824	5356	6706	0	0
25	n-heptane	54687	32372	27357	21712	21894
26	2,2dimethylhexane	6541	4823	3005	0	0
27	2,5dimethylhexane	48312	37607	28514	20221	20548
28	2,4dimethylhexane	24644	27100	16023	23453	24075
29	3,3dimethylhexane	5775	3786	2226	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	625446	518211	425182	440800	452801
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	8407	5708	13031	0	0
32	2,3-dimethyhexane	3155	2237	3904	0	0
33	2methyl-3ethylpentane	0	4024	1185	5265	5332
34	2-methyheptane	26090	19336	12478	2377	2268
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	3176	1930	2435	0	0
36	3,4dimethylhexane	3420	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	2472	4263	2112	5733	5936
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	8615	2098	0	3953	4270
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	9425	6777	0	0	0
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	5320	7733	4804	0	0
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	10972	4622	4886	2819	3044
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	2725	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	4210	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	4392	6596	5249	2873	3004
47	n-octane	4089	5935	4507	4435	4864
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	3692	2651	1618	0	0
49	unidentified C9-Napthene	5794	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	4339	2628	0	0

51	2,2-dimethylheptane	1174	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	2785	2266	0	0	0
53	2,2,3-trimethylhexane	1763	0	0	0	0
54	2,4-dimethylheptane	0	1076	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	5936	1242	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	6862	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	6555	4855	3729	0	0
58	2,6-dimethylheptane	3993	2984	3617	4656	5010
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	2767	0	2040	0	0
61	2,5-dimethylheptane	2596	1900	1173	1771	2144
62	3,3-dimethylheptane	4377	1861	1017	1458	2308
63	unidentified C9-Napthene	5804	2510	663	3432	4356
64	unidentified C9-Napthene	0	2746	1891	0	0
65	ethylbenzene	163981	129335	105204	103716	106604
66	unidentified C9-Napthene	7469	6359	4191	0	5552
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	10825	8541	5157	4650	1208
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	0
69	p-xylene	151306	138148	105924	95713	102688
70	m-xylene	379409	332460	245620	229058	248922
71	2,3-dimethylheptane	1381	1173	0	1193	1435
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	2714	2047	0	1848	794
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	952	890	0	0	2235
76	unidentified C9-Napthene	2662	1110	615	0	0
77	o-xylene	217585	186081	140929	134840	146985
78	unidentified Paraffin	6954	5889	3522	1757	1996
79	unidentified Napthenes	1967	1895	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	800	888	0	0	0
82	n-nonane	7462	4855	4138	3665	4277

	ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	73 U100_3	74 U100_4	75 U100_5	76 U100_6	77 U100_7
1	propane	909	511	848	756	981
2	iso-butane	22931	16648	20681	21353	24219
3	n-butane	10814	27370	33834	35342	39759
4	2,2 dimethylpropane	5057	3659	4533	4469	5510
5	iso-pentane	316820	229102	277233	292870	328824
6	n-pentane	69239	49664	60273	63813	72408
7	2,2-dimethylbutane	24319	17109	20955	21851	25768
8	cyclopentane	102046	72601	86988	92995	105435
9	2,3-dimethylbutane	34358	24387	29506	31422	36214
10	2methylpentane	121226	86600	103571	110829	125715
11	3-methylpentane	108161	77510	92181	99088	112558
12	n-hexane	116772	87910	99493	107344	121559
13	2,2-dimethylpentane	15781	11186	13548	14672	16716
14	methylcyclopentane+2,4-dimethylpentane	37636	26045	31496	34308	39221
15	benzene	59651	41923	50281	54906	62140
16	3,3-dimethylpentane	2152	0	1352	2002	2508
17	cyclohehane	0	0	0	0	0

18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	101762	71491	85471	93320	106219
19	3-methylhexane	42216	29426	35127	38563	44170
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	2015	0	1558	2062	2152
22	3ethylpentane	230764	164977	197767	212746	238687
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	0	0	0	0	0
25	n-heptane	24122	16709	20017	21724	25583
26	2,2dimethylhexane	0	0	0	0	0
27	2,5dimethylhexane	22756	15494	18554	20804	23889
28	2,4dimethylhexane	26336	18251	21934	24256	28005
29	3,3dimethylhexane	0	0	0	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	479396	344455	403213	446350	493162
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
32	2,3-dimethylhexane	0	0	0	0	0
33	2methyl-3ethylpentane	5871	3892	4751	5433	6282
34	2-methylheptane	1004	1649	2203	2628	1591
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	0	0	0	0
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	2889	0	0	0	2955
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	6570	4323	5400	6105	6887
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	4366	2904	3723	4182	4848
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	0
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	3255	2141	2728	3051	3504
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	3183	2155	2717	2948	3427
47	n-octane	5267	3477	4285	4977	5560
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	0	0	0
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	1256
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	0	0	0	0	1981
58	2,6dimethylheptane	5530	3776	4428	5139	5856
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	2330	1421	1748	2167	2568
62	3,3-dimethylheptane	2465	1312	1676	2334	2650
63	unidentified C9-Napthene	4565	2858	3632	4300	4793
64	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0

65	ethylbenzene	111282	79407	93791	105678	114885
66	unidentified C9-Napthene	6063	4488	5241	5707	6168
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	1292	4522	1098	1246	1431
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	0
69	p-xylene	106940	75856	89149	102108	110838
70	m-xylene	259480	182956	214435	247309	266824
71	2,3dimethylheptane	1550	988	1191	1497	1631
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	857	0	0	838	912
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	2318	1559	1947	2266	2414
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
77	o-xylene	152488	110445	129875	146243	157034
78	unidentified Paraffin	1991	1379	1714	1990	2185
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	4354	3095	3767	4334	4616
	ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	78	79	80	81	82
		5%U95	10%U95	15%U95	20%U95	25%U95
1	propane	1068	966	793	513	370
2	iso-butane	24740	27283	21124	22805	16909
3	n-butane	39739	45504	34636	37817	27287
4	2,2 dimethylpropane	5360	6542	5268	5470	4268
5	iso-pentane	332966	435718	340926	403176	336255
6	n-pentane	72489	97601	73945	87372	71150
7	2,2-dimethylbutane	26179	38710	29124	36039	32058
8	cyclopentane	98864	138868	94331	106472	87148
9	2,3dimethylbutane	35862	53355	37961	46302	41346
10	2methylpentane	126880	189759	138714	170563	153314
11	3-methylpentane	111005	165772	117890	142591	127345
12	n-hexane	114636	169763	113618	131264	111741
13	2,2dimethylpentane	15527	24204	15361	17966	15820
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	38130	60645	41222	50453	45063
15	benzene	58338	90461	58693	67290	54457
16	3,3-dimethylpentane	1946	3706	2073	3295	4269
17	cyclohehane	0	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	99040	158022	101448	120366	108422
19	3-methylhexane	41097	67687	42877	51858	47839
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0	4917	0	0	0
21	trans1,3dimethylcyclopentane	2213	3095	3264	4387	4115
22	3ethylpentane	215248	344248	209848	243524	221161
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
24	2,2,4-trimethylpentane	0	0	0	0	0
25	n-heptane	22893	38994	23769	28677	26071
26	2,2dimethylhexane	1475	0	0	0	0
27	2,5dimethylhexane	22562	38550	22606	27508	25873
28	2,4dimethylhexane	24495	42441	24066	28343	25944
29	3,3dimethylhexane	0	0	0	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	451237	749152	456718	533331	469355
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	5854	0	0	0	0
32	2,3-dimethyhexane	1280	0	0	0	0

33	2methyl-3ethylpentane	2606	0	0	0	2229
34	2-methyheptane	6399	11128	6447	8420	2676
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	3503	1486	2278	0
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	4564	2424	3019	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	4151	11846	7025	8926	8690
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	7793	4044	4846	4478
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0	1686	0	0	1703
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0	3068	1246	2062	2236
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0	0	0	0	4133
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	3166	6004	3379	4247	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2944	5380	2981	3458	3279
47	n-octane	4696	8628	4576	5557	5024
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	0	0	0
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	1487	0	0	0
51	2,2-dimethylheptane	0	1603	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	3233	0	0	0
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	9780	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	2506	0	0	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	0	1551	1486	2020	2145
58	2,6dimethylheptane	5126	2358	5074	6076	5299
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	2179	4176	2144	2576	2416
62	3,3-dimethylheptane	2168	4427	2379	2917	2621
63	unidentified C9-Napthene	4017	7966	4214	5230	4613
64	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
65	ethylbenzene	108742	198165	105892	130001	117463
66	unidentified C9-Napthene	0	0	5553	6158	2361
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	1128	2351	1233	1590	1478
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0	0
69	p-xylene	100832	182591	102533	125359	114202
70	m-xylene	241260	435656	249110	305601	277493
71	2,3dimethylheptane	0	0	1411	1797	1637
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1986	5549	0	0	1127
74	3ethylheptane	0	1763	877	1268	0
75	3-methyloctane	0	4022	2169	2637	2387
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
77	o-xylene	141976	259101	145775	179282	162477
78	unidentified Paraffin	1978	4082	2156	2789	2695
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0

80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	4023	7943	4189	5196	4759

	83 30%U95	84 35%U95	85 40%U95	86 45%U95	87 50%U95
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	979	911	152	741	823
2 iso-butane	33064	25331	11779	24721	24312
3 n-butane	53805	40054	22141	39451	38799
4 2,2 dimethylpropane	8849	6974	3986	6763	7610
5 iso-pentane	638997	500493	350802	536224	570530
6 n-pentane	141253	107306	76341	121621	126223
7 2,2-dimethylbutane	64724	49751	35636	59715	64411
8 cyclopentane	157712	107750	78999	115238	120733
9 2,3dimethylbutane	79463	59574	43451	72168	76500
10 2methylpentane	292693	223121	167825	270762	292548
11 3-methylpentane	239886	178726	134018	213060	232589
12 n-hexane	204910	143413	107045	161800	176092
13 2,2dimethylpentane	29755	19882	14313	22375	25615
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	88226	64523	47106	79406	88919
15 benzene	107009	74088	54736	88635	99773
16 3,3-dimethylpentane	7225	4277	3000	3197	4086
17 cyclohehane	0	0	0	0	0
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	164526	138221	101865	161683	186126
19 3-methylhexane	121238	61495	45081	72852	85919
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	10309	7186	0	9622	12033
21 trans1,3dimethylcyclopentane	6687	4229	4547	5499	6799
22 3ethylpentane	373263	249496	182566	274298	315893
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	7983	4379	0	7425	9376
24 2,2,4-trimethylpentane	3373	0	0	7353	4250
25 n-heptane	48318	32974	23661	38776	46405
26 2,2dimethylhexane	1690	0	0	1924	3913
27 2,5dimethylhexane	48208	32785	23060	38693	48082
28 2,4dimethylhexane	46768	29912	20960	33435	41099
29 3,3dimethylhexane	0	0	0	0	7227
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	824016	568873	428704	659067	808984
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
32 2,3-dimethylhexane	4915	3372	2001	4374	5707
33 2methyl-3ethylpentane	5103	3171	2006	3466	1434
34 2-methylheptane	16660	11500	8255	14103	19637
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	1456	5174	3438	5678	1935
36 3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	8088	0	0	0	0
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	5453	3482	0	4752	7399
39 3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	0	0	0	2631
40 1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41 trans1,3ethylmethylcyclopentane	5153	0	0	0	7767
42 cis1,3ethylmethylcyclopentane	5691	3557	1968	4737	6570
43 trans1,2ethylmethylcyclopentane	7756	3803	2246	4963	2129

44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	5449	3790	6500	8585
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	5923	3803	2701	4293	5890
47	n-octane	8540	5546	3652	5860	7548
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	1312	1358	0	1279	1949
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	2196	1826	0	2253	3229
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1367	1009	0	2356	1088
53	2,2,3-trimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	1862	0	0	1640	2386
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	4715	3417	2071	4147	5937
58	2,6dimethylheptane	10819	6942	4354	7491	10661
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	3574	0	0	2006	4115
60	unidentified C9-Napthene	2028	0	0	1230	2487
61	2,5dimethylheptane	2355	2674	1715	3126	2225
62	3,3-dimethylheptane	4394	2934	1671	3876	4348
63	unidentified C9-Napthene	5190	3390	3438	6320	5466
64	unidentified C9-Napthene	8843	5575	0	0	8827
65	ethylbenzene	214104	139886	102882	166692	221238
66	unidentified C9-Napthene	5546	6254	4450	4887	6666
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	3804	4031	1240	3952	6013
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	2953	0	0	0
69	p-xylene	195664	135407	100557	154447	204761
70	m-xylene	476330	330436	245651	378130	503846
71	2,3dimethylheptane	3056	1857	0	2060	2978
72	4-ethylheptane	1986	0	1202	0	1624
73	4-methyloctane+2-methyloctane	2501	1716	925	1898	2729
74	3ethylheptane	0	0	79	0	0
75	3-methyloctane	0	2780	2117	3379	4786
76	unidentified C9-Napthene	4717	0	0	0	0
77	o-xylene	277737	191843	142672	217885	293195
78	unidentified Paraffin	4844	3445	2418	4051	5707
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	8463	5687	3979	6398	9027

	88 55%U95	89 60%U95	90 65%U95	91 70%U95	92 75%U95	
1	propane	249	166	432	328	386
2	iso-butane	10735	1126	17783	16538	16524
3	n-butane	17796	462	27790	25451	25155
4	2,2 dimethylpropane	2967	1298	5783	5004	5363
5	iso-pentane	298124	172962	471671	473981	467278
6	n-pentane	60241	46836	101247	99156	98405
7	2,2-dimethylbutane	28649	30973	52732	52343	52075
8	cyclopentane	49361	57373	79228	70761	68522

9	2,3dimethylbutane	34450	39912	59344	58308	57854
10	2methylpentane	137333	162928	234651	230549	230404
11	3-methylpentane	104947	128939	179912	174132	173667
12	n-hexane	73533	93145	122095	112032	110859
13	2,2dimethylpentane	9116	13154	16725	14760	14579
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	35948	48858	66419	62743	63872
15	benzene	38800	50460	68002	58629	61279
16	3,3-dimethylpentane	0	1417	2274	2609	1855
17	cyclohehane	0	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	71659	100222	126986	115411	115978
19	3-methylhexane	31589	46403	58474	53276	53929
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0	0	8674	7926	8435
21	trans1,3dimethylcyclopentane	3075	5691	4262	3650	3876
22	3ethylpentane	115788	157644	188400	163919	160236
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0	0	5561	4824	5346
24	2,2,4-trimethylpentane	0	0	2419	4826	5651
25	n-heptane	15792	23842	30265	26741	27261
26	2,2dimethylhexane	0	0	3992	0	3060
27	2,5dimethylhexane	15737	23979	31283	27003	28298
28	2,4dimethylhexane	12515	18892	23327	19346	19670
29	3,3dimethylhexane	0	0	0	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	309748	414666	511145	434673	452694
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
32	2,3-dimethylhexane	0	2604	3569	3107	3335
33	2methyl-3ethylpentane	0	1803	2331	1859	1872
34	2-methylheptane	5966	9514	12198	10976	11320
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0	3089	3945	3156	3140
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	0	0
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	5451	3067	4382	3822	4042
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	1676	0	0	0	0
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	1220	3093	4353	3885	4137
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	1452	2514	4404	3760	3994
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	2593	4301	5498	4803	4995
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0	2484	3217	2468	2463
47	n-octane	3428	3082	3852	3138	3177
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0	0	2174	1755	1843
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0	0	1308	1967	995
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0	0	0	0	0
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	0	0	0	0	0

56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	0	2575	3715	3470	3444
58	2,6dimethylheptane	0	3912	5601	4164	4514
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	1759	0	0
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	1238	1468	1161	1610	2158
62	3,3-dimethylheptane	2529	1512	2296	1634	1689
63	unidentified C9-Napthene	0	0	2910	3246	1559
64	unidentified C9-Napthene	1555	3156	4514	0	3395
65	ethylbenzene	72906	100428	118306	106835	104012
66	unidentified C9-Napthene	2868	3852	4131	3388	3831
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	3836	3229	4327	3614	4023
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	2937	0	3814	0
69	p-xylene	70819	98339	124953	105087	109049
70	m-xylene	174575	242271	304094	258331	268166
71	2,3dimethylheptane	0	1000	1413	1130	1041
72	4-ethylheptane	0	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0	1037	1528	1326	1377
74	3ethylheptane	0	0	0	0	0
75	3-methyloctane	902	1654	2189	1746	1744
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0	0
77	o-xylene	102208	139206	175468	147649	153279
78	unidentified Paraffin	1697	2708	3505	3080	3150
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0	0
82	n-nonane	2602	3785	5016	4050	4188

	93 80%U95	94 85%U95	95 90%U95	96 95%U95	
1	propane	372	282	394	382
2	iso-butane	17194	13174	17326	17554
3	n-butane	25798	19575	25303	25607
4	2,2 dimethylpropane	5901	4124	6212	6626
5	iso-pentane	518542	422172	563575	602697
6	n-pentane	109005	86909	118545	127313
7	2,2-dimethylbutane	60058	46481	66116	72292
8	cyclopentane	72491	51126	67381	70355
9	2,3dimethylbutane	66217	50741	71212	77932
10	2methylpentane	261940	206367	286406	312314
11	3-methylpentane	196253	152567	211817	230234
12	n-hexane	120924	89941	122294	130381
13	2,2dimethylpentane	4293	11558	4316	4604
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	88186	55165	95219	103520
15	benzene	64268	49875	69309	74610
16	3,3-dimethylpentane	3272	0	2223	2419
17	cyclohehane	0	0	0	0
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	128667	94543	134036	144034
19	3-methylhexane	60488	43916	63722	68707
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	9650	0	11091	12689
21	trans1,3dimethylcyclopentane	4431	6357	5111	5862
22	3ethylpentane	171436	16202	160811	165879

23	trans1,2-dimethylcyclopentane	6601	0	8441	9256
24	2,2,4-trimethylpentane	6896	0	3543	3495
25	n-heptane	30294	21198	31309	33509
26	2,2dimethylhexane	1927	0	3080	3724
27	2,5dimethylhexane	31036	21866	33000	35462
28	2,4dimethylhexane	21177	13652	20498	21213
29	3,3dimethylhexane	0	0	0	0
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	471673	364963	507468	531520
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0	0	0	4939
32	2,3-dimethylhexane	3905	2455	4462	1381
33	2methyl-3ethylpentane	1953	0	1962	2646
34	2-methylheptane	12794	8724	14577	16454
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	3361	0	3339	1549
36	3,4dimethylhexane	0	0	0	3362
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0	0	1943	2034
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	4731	2026	6292	6789
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0	0	0	0
40	1,1dimethylcyclohexane	0	0	0	0
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	4807	3228	5874	6428
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	1492	3484	1832	2192
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	5456	2907	6182	6605
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0	0	0	0
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0	0	0	0
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	2704	4111	2825	2895
47	n-octane	3310	3783	3170	3139
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	1350	1481	1691	1854
49	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	2462	0	3062	3289
51	2,2-dimethylheptane	0	0	0	0
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	1244	0	1619	1817
53	2,2,3-thrimethylhexane	0	0	0	0
54	2,4dimethylheptane	0	0	0	0
55	4,4-dimethylheptane+9N	3965	0	4594	0
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0	0	0	0
57	2methyl-4-ethylhexane	4966	2628	5071	4912
58	2,6dimethylheptane	1744	2944	2559	5214
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0	0	0	2563
60	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0
61	2,5dimethylheptane	1272	1019	1635	1744
62	3,3-dimethylheptane	1972	1545	2058	2088
63	unidentified C9-Napthene	2740	2125	2974	3166
64	unidentified C9-Napthene	4168	0	4305	4705
65	ethylbenzene	109637	85098	134842	139490
66	unidentified C9-Napthene	4419	3138	5238	5474
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	4772	3694	6052	6501
68	unidentified Napthene+Paraffin	0	0	0	0
69	p-xylene	115595	88531	129281	134084

70	m-xylene	282890	218021	320318	331019
71	2,3dimethylheptane	1172	0	1215	1294
72	4-ethylheptane	0	0	0	0
73	4-methyloctane+2-methyloctane	1577	1006	1811	1919
74	3ethylheptane	0	0	0	0
75	3-methyloctane	1821	1200	2013	2119
76	unidentified C9-Napthene	0	0	0	0
77	o-xylene	163030	125982	182702	188945
78	unidentified Paraffin	3527	2675	4191	4339
79	unidentified Napthenes	0	0	0	0
80	unidentified Napthene	0	0	0	0
81	unidentified Napthene	0	0	0	0
82	n-nonane	4508	3319	5076	5231

Σημείωση: Στον παραπάνω πίνακα φαίνονται τα πειραματικά δεδομένα από όλα τα δείγματα καθώς και οι επαναληψείς κάποιων εξ'αυτών.

Τέλος στον πίνακα που ακολουθεί φαίνεται η υπολογιζόμενη επί τοις εκατό μάζα κάθε συστατικού (συμπεριλαμβανομένου C₁₀₊) σύμφωνα με την ακόλουθη εξίσωση:

$$\text{Μάζα \% συστατικού } i = \left(\frac{A_i * B_i}{\sum (A_i * B_i)} \right) * 100$$

ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	1 U95 A(13/8)	2 U95 A(7/8)	3 U95 A(17/7)	4 U95 A(21/7)	5 U95 B(26/8)	
1	propane	0,01	0,01	0,06	0,04	0,01
2	iso-butane	0,37	0,57	1,07	0,95	0,44
3	n-butane	0,46	0,62	0,98	0,82	0,62
4	2,2 dimethylpropane	0,18	0,24	0,13	0,17	0,19
5	iso-pentane	18,90	18,09	16,67	18,08	15,89
6	n-pentane	3,36	3,24	3,53	3,86	3,04
7	2,2-dimethylbutane	2,58	2,73	2,28	2,45	1,93
8	cyclopentane	1,47	0,90	1,82	0,84	1,61
9	2,3dimethylbutane	2,33	2,45	2,26	2,39	2,11
10	2methylpentane	9,53	9,83	8,84	9,59	8,71
11	3-methylpentane	6,91	6,82	6,23	6,59	6,26
12	n-hexane	3,24	2,58	2,97	2,70	3,09
13	2,2dimethylpentane	0,35	0,38	0,11	0,13	0,15
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,39	2,51	3,12	3,10	3,35
15	benzene	1,79	1,85	1,75	1,87	1,98
16	3,3-dimethylpentane	0,07	0,06	0,05	0,08	0,10
17	cyclohehane	0,06	0,00	0,00	0,05	0,08
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,79	3,49	7,60	3,46	4,25
19	3-methylhexane	1,75	1,62	1,34	1,62	2,15
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,37	0,31	0,27	0,34	0,45
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,16	0,14	0,11	0,15	0,19
22	3ethylpentane	2,24	3,31	5,11	3,42	4,19
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,26	0,24	0,23	0,26	0,33
24	2,2,4-trimethylpentane	0,11	0,22	0,20	0,10	0,03
25	n-heptane	0,81	0,80	0,64	0,79	1,04
26	2,2dimethylhexane	0,11	0,10	0,08	0,10	0,16
27	2,5dimethylhexane	0,71	0,78	0,87	0,82	1,10
28	2,4dimethylhexane	0,30	0,43	0,65	0,46	0,61

29	3,3dimethylhexane	0,14	0,07	0,06	0,09	0,14
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	12,91	13,68	12,27	13,33	13,06
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,12	0,11	0,09	0,11	0,19
32	2,3-dimethyhexane	0,05	0,04	0,03	0,05	0,07
33	2methyl-3ethylpentane	0,05	0,05	0,07	0,06	0,10
34	2-methyheptane	0,42	0,37	0,30	0,36	0,60
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,04	0,03	0,13	0,03	0,07
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,07	0,00	0,00	0,07
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,04	0,05	0,05	0,09	0,22
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,00	0,17	0,00	0,04	0,24
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,16
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,17	0,16	0,15	0,15	0,07
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,18	0,06	0,13	0,16	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,07	0,00	0,06	0,09	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,15	0,14	0,11	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,02	0,06	0,07	0,14	0,03
47	n-octane	0,06	0,05	0,08	0,07	0,08
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,09	0,08	0,04	0,06	0,07
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,06	0,15
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,07	0,10	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,04	0,04	0,04	0,04	0,07
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,10	0,11	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,13	0,11	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,00	0,08	0,12	0,07	0,17
58	2,6dimethylheptane	0,12	0,06	0,06	0,06	0,14
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,07	0,00	0,00	0,00	0,10
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07
61	2,5dimethylheptane	0,05	0,04	0,03	0,04	0,06
62	3,3-dimethylheptane	0,04	0,03	0,04	0,02	0,10
63	unidentified C9-Napthene	0,03	0,06	0,03	0,04	0,13
64	unidentified C9-Napthene	0,09	0,10	0,09	0,03	0,00
65	ethylbenzene	3,37	3,29	2,96	3,23	3,07
66	unidentified C9-Napthene	0,13	0,12	0,10	0,11	0,18
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,18	0,16	0,10	0,15	0,27
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,29	3,32	2,86	3,35	3,15
70	m-xylene	8,23	8,14	6,67	7,77	7,98
71	2,3dimethylheptane	0,04	0,00	0,03	0,00	0,03
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,00	0,00	0,03	0,06
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,05	0,04	0,05	0,02	0,02

76	unidentified C9-Napthene	0,05	0,03	0,00	0,04	0,06
77	o-xylene	4,66	4,62	3,80	4,45	4,44
78	unidentified Paraffin	0,13	0,11	0,09	0,10	0,16
79	unidentified Napthenes	0,04	0,03	0,03	0,03	0,05
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,11	0,00	0,00	0,00	0,02
82	n-nonane	0,05	0,12	0,11	0,13	0,14

	6 U95 B(7/9)	7 U95 B(7/7)	8 U95 B(25/5)	9 U95 B(6/4)	10 U95 B(2/5)new
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,02	0,02	0,01	0,02	0,03
2 iso-butane	0,51	0,81	0,50	1,93	0,89
3 n-butane	0,95	0,98	0,79	2,05	1,42
4 2,2 dimethylpropane	0,51	0,17	0,17	0,23	0,13
5 iso-pentane	15,92	17,29	15,29	20,96	18,05
6 n-pentane	3,08	3,64	1,08	1,01	4,25
7 2,2-dimethylbutane	1,69	2,17	1,48	2,49	1,59
8 cyclopentane	1,84	1,24	1,02	1,14	1,59
9 2,3dimethylbutane	1,96	2,34	1,92	2,57	1,80
10 2methylpentane	7,80	8,96	7,69	10,18	7,47
11 3-methylpentane	5,75	6,36	5,66	6,84	5,52
12 n-hexane	3,30	2,89	3,01	2,77	3,65
13 2,2dimethylpentane	0,56	0,11	0,09	0,11	0,10
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,19	3,00	2,82	3,54	2,16
15 benzene	2,05	1,65	1,84	1,35	1,95
16 3,3-dimethylpentane	0,12	0,06	0,04	0,05	0,00
17 cyclohehane	0,07	0,05	0,05	0,00	0,00
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	4,32	3,35	3,79	4,00	3,49
19 3-methylhexane	2,23	1,62	1,90	1,82	1,58
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0,39	0,38	0,42	0,37	0,00
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0,19	0,15	0,17	0,12	0,21
22 3ethylpentane	4,96	5,79	6,15	5,14	4,44
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0,28	0,28	0,32	0,26	0,15
24 2,2,4-trimethylpentane	0,14	0,12	0,14	0,08	0,00
25 n-heptane	1,13	0,73	1,00	0,90	0,94
26 2,2dimethylhexane	0,13	0,12	0,14	0,12	0,11
27 2,5dimethylhexane	1,04	1,00	1,19	1,27	1,04
28 2,4dimethylhexane	0,68	0,77	0,77	0,57	0,49
29 3,3dimethylhexane	0,14	0,08	0,16	0,14	0,08
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	13,21	12,62	13,94	9,34	14,11
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0,18	0,13	0,18	0,17	0,00
32 2,3-dimethylhexane	0,06	0,05	0,06	0,03	0,10
33 2methyl-3ethylpentane	0,10	0,10	0,12	0,00	0,00
34 2-methylheptane	0,56	0,42	0,60	0,49	0,00
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,06	0,03	0,06	0,05	0,00
36 3,4dimethylhexane	0,00	0,14	0,00	0,00	0,00
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,11	0,00	0,00	0,09	0,29
39 3-ethylhexane+trans-1,4--	0,05	0,00	0,00	0,05	0,08

	dimethylcyclohexane					
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,04	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,18	0,18	0,15	0,16	0,10
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,20	0,19	0,07	0,18	0,12
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,09	0,07	0,20	0,11	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,23	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,03	0,14	0,23	0,06	0,05
47	n-octane	0,06	0,11	0,15	0,31	0,28
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,10	0,06	0,04	0,08	0,10
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,11	0,08	0,05	0,05
51	2,2-dimethylheptane	0,03	0,00	0,04	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,06	0,05	0,13	0,10	0,04
53	2,2,3-trimethylhexane	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,15	0,03	0,04	0,06	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,11	0,00	0,08	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,08	0,14	0,17	0,13	0,08
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,10	0,11	0,09	0,09
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,05	0,05	0,09	0,08	0,04
62	3,3-dimethylheptane	0,09	0,04	0,08	0,06	0,04
63	unidentified C9-Napthene	0,00	0,07	0,06	0,00	0,00
64	unidentified C9-Napthene	0,11	0,09	0,05	0,03	0,00
65	ethylbenzene	3,41	3,05	3,73	2,58	3,56
66	unidentified C9-Napthene	0,16	0,13	0,20	0,16	0,11
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,24	0,19	0,28	0,22	0,15
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00
69	p-xylene	3,20	3,14	4,13	2,74	3,74
70	m-xylene	7,97	7,69	9,27	6,47	8,57
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,00	0,05	0,00	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,05	0,05	0,04	0,00	0,00
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,02	0,11	0,00	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,04	0,04	0,09	0,00	0,00
77	o-xylene	4,52	4,29	5,27	3,71	4,85
78	unidentified Paraffin	0,15	0,12	0,26	0,21	0,20
79	unidentified Napthenes	0,04	0,04	0,06	0,04	0,00
80	unidentified Napthene	0,02	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,14	0,00	0,03	0,00	0,00
82	n-nonane	0,06	0,10	0,12	0,11	0,10

	11 <i>U95</i> <i>B(29/4)</i>	12 <i>U95</i> <i>B(13/4)</i>	13 <i>U95</i> <i>B(28/5)</i>	14 <i>U95</i> <i>B(9/5)</i>	15 <i>U95</i> <i>B(18/7)</i>
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,01	0,05	0,01	0,02	0,04
2 iso-butane	0,80	2,31	0,66	0,80	0,95

3	n-butane	1,03	2,81	1,01	0,89	0,87
4	2,2 dimethylpropane	0,18	0,15	0,25	0,20	0,15
5	iso-pentane	19,52	19,62	19,26	18,24	17,44
6	n-pentane	3,60	4,01	3,61	3,82	3,67
7	2,2-dimethylbutane	2,15	2,27	1,53	1,58	2,44
8	cyclopentane	0,86	1,36	1,22	1,91	1,14
9	2,3dimethylbutane	2,33	2,19	2,14	1,84	2,39
10	2methylpentane	8,98	9,39	8,47	7,76	9,45
11	3-methylpentane	6,49	6,29	6,21	5,88	6,51
12	n-hexane	2,84	3,21	3,00	3,77	2,68
13	2,2dimethylpentane	0,10	0,10	0,07	0,10	0,12
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,54	2,88	3,06	2,51	3,19
15	benzene	1,51	1,68	1,63	1,70	1,84
16	3,3-dimethylpentane	0,04	0,04	0,00	0,00	0,06
17	cycloheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,76	3,47	3,57	3,71	3,35
19	3-methylhexane	1,79	1,58	1,80	1,84	1,50
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,33	0,25	0,38	0,31	0,30
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,09	0,06	0,11	0,12
22	3ethylpentane	4,31	3,68	6,19	3,37	4,74
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,23	0,17	0,27	0,24	0,24
24	2,2,4-trimethylpentane	0,25	0,00	0,30	0,00	0,10
25	n-heptane	0,77	0,90	0,78	1,09	0,71
26	2,2dimethylhexane	0,12	0,06	0,14	0,08	0,09
27	2,5dimethylhexane	1,15	0,92	1,13	0,94	0,90
28	2,4dimethylhexane	0,52	0,42	0,73	0,42	0,62
29	3,3dimethylhexane	0,09	0,05	0,10	0,07	0,08
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	11,41	11,45	11,51	12,75	13,37
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,15	0,00	0,10
32	2,3-dimethylhexane	0,13	0,12	0,05	0,14	0,05
33	2methyl-3ethylpentane	0,05	0,00	0,10	0,00	0,08
34	2-methylheptane	0,54	0,33	0,53	0,42	0,35
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,04	0,05	0,13	0,05	0,03
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,10	0,00	0,00	0,00	0,12
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,05	0,11	0,06	0,06	0,16
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,13	0,12	0,17	0,20	0,15
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,18	0,00	0,23	0,17	0,08
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,11	0,06	0,13	0,10	0,13
47	n-octane	0,17	0,26	0,21	0,41	0,10
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,06	0,09	0,07	0,16	0,05
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,10	0,06	0,12	0,04	0,08
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,05	0,04	0,06	0,10	0,04
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,08	0,11
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,13	0,08	0,16	0,14	0,09
58	2,6dimethylheptane	0,07	0,08	0,10	0,14	0,06
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,07	0,05	0,09	0,07	0,04
62	3,3-dimethylheptane	0,04	0,04	0,06	0,05	0,03
63	unidentified C9-Napthene	0,05	0,04	0,07	0,07	0,04
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,08	0,05
65	ethylbenzene	3,30	2,81	2,97	3,61	3,24
66	unidentified C9-Napthene	0,14	0,12	0,17	0,17	0,11
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,22	0,14	0,26	0,22	0,14
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,42	2,97	3,21	3,66	3,24
70	m-xylene	8,08	6,87	7,42	8,47	7,55
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,00	0,00	0,00	0,02	0,01
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
77	o-xylene	4,67	3,89	4,07	4,83	4,34
78	unidentified Paraffin	0,14	0,15	0,17	0,31	0,10
79	unidentified Napthenes	0,03	0,00	0,05	0,04	0,03
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,10	0,12	0,09	0,12	0,13

	16 U95 B(14/7)	17 U95 B(12/9)	18 U95 C(5/5)_1	19 U95 C(5/5)_2	20 U95 C(12/4)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,03	0,03	0,01	0,02	0,05
2 iso-butane	0,92	0,33	0,70	0,76	2,56
3 n-butane	0,91	0,82	1,20	1,40	2,74
4 2,2 dimethylpropane	0,11	0,29	0,24	0,24	0,14
5 iso-pentane	16,63	19,98	16,96	17,00	19,79
6 n-pentane	3,64	3,94	3,92	4,12	3,90
7 2,2-dimethylbutane	2,46	2,06	1,10	0,98	2,26
8 cyclopentane	1,47	1,49	0,52	0,48	2,31
9 2,3dimethylbutane	2,40	2,27	1,71	1,55	2,22
10 2methylpentane	9,22	9,13	6,77	6,53	9,45
11 3-methylpentane	6,44	6,57	5,01	4,80	6,37
12 n-hexane	2,81	3,48	3,18	3,19	3,60
13 2,2dimethylpentane	0,12	0,15	0,11	0,09	0,09
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	3,04	2,83	2,40	2,24	3,23
15 benzene	1,76	2,27	1,80	1,97	1,45

16	3,3-dimethylpentane	0,06	0,09	0,07	0,00	0,00
17	cycloheptane	0,00	0,07	0,05	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,25	4,32	4,07	3,79	3,20
19	3-methylhexane	1,48	2,13	2,12	1,95	1,44
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,27	0,42	0,38	0,34	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,19	0,16	0,12	0,22
22	3ethylpentane	5,76	4,43	5,67	5,12	5,14
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,22	0,28	0,34	0,26	0,16
24	2,2,4-trimethylpentane	0,08	0,13	0,12	0,19	0,00
25	n-heptane	0,71	1,03	1,40	1,36	0,82
26	2,2dimethylhexane	0,08	0,13	0,12	0,09	0,11
27	2,5dimethylhexane	0,90	1,00	1,28	1,17	0,96
28	2,4dimethylhexane	0,73	0,60	0,67	0,60	0,56
29	3,3dimethylhexane	0,07	0,10	0,12	0,09	0,06
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	13,31	5,88	12,85	14,16	9,83
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,10	0,00	0,19	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,03	0,06	0,06	0,17	0,12
33	2methyl-3ethylpentane	0,09	0,08	0,11	0,00	0,04
34	2-methylheptane	0,34	0,53	0,61	0,46	0,36
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,03	0,06	0,06	0,10	0,09
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,13	0,18	0,00	0,00	0,00
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,03	0,19	0,00	0,00	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,13	0,20	0,12	0,07	0,11
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,13	0,00	0,07	0,22	0,11
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,08	0,00	0,22	0,19	0,06
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,13	0,00	0,00	0,11	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,06	0,10	0,21	0,04	0,00
47	n-octane	0,08	0,06	0,12	0,57	0,28
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,04	0,10	0,06	0,04	0,07
49	unidentified C9-Napthene	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,05	0,10	0,11
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,04	0,05	0,05	0,00	0,05
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,10	0,00	0,11	0,09	0,04
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,10	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,14	0,03	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,11	0,10	0,15	0,13	0,09
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,07	0,07	0,04	0,13
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,04	0,04	0,08	0,08	0,07
62	3,3-dimethylheptane	0,04	0,07	0,10	0,10	0,04

63	unidentified C9-Napthene	0,02	0,12	0,04	0,00	0,03
64	unidentified C9-Napthene	0,07	0,00	0,00	0,00	0,08
65	ethylbenzene	3,31	3,32	3,60	3,71	2,55
66	unidentified C9-Napthene	0,11	0,14	0,18	0,17	0,13
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,12	0,22	0,29	0,27	0,12
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00
69	p-xylene	3,25	3,35	3,84	3,97	2,65
70	m-xylene	7,54	8,30	8,66	9,00	6,19
71	2,3dimethylheptane	0,03	0,00	0,00	0,00	0,03
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,03	0,05	0,03	0,00	0,03
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,01	0,02	0,00	0,00	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,05	0,04	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	4,36	4,70	5,05	5,16	3,46
78	unidentified Paraffin	0,10	0,17	0,42	0,41	0,17
79	unidentified Napthenes	0,03	0,39	0,06	0,06	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,33	0,03	0,00	0,00
82	n-nonane	0,14	0,06	0,13	0,14	0,11

	21 <i>U95</i> <i>C(22/5)</i>	22 <i>U95</i> <i>C(24/4)</i>	23 <i>U95</i> <i>C(26/5)</i>	24 <i>U95</i> <i>C(12/5)</i>	25 <i>U95</i> <i>C(22/5)_2</i>
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,02	0,08	0,01	0,01	0,03
2 iso-butane	0,92	1,95	0,68	0,66	0,85
3 n-butane	1,34	2,97	1,09	0,95	1,26
4 2,2 dimethylpropane	0,24	0,17	0,24	0,26	0,24
5 iso-pentane	19,35	18,03	18,30	18,75	18,40
6 n-pentane	4,31	3,76	3,67	3,65	4,08
7 2,2-dimethylbutane	1,80	1,78	1,53	1,46	1,72
8 cyclopentane	1,25	1,53	1,37	1,01	1,20
9 2,3dimethylbutane	2,24	1,90	2,15	1,97	2,17
10 2methylpentane	8,97	8,22	8,27	7,95	8,65
11 3-methylpentane	6,43	5,83	6,10	5,87	6,18
12 n-hexane	0,65	3,30	3,16	3,19	3,17
13 2,2dimethylpentane	0,07	0,09	0,07	0,09	0,08
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	3,10	2,50	3,05	2,69	3,03
15 benzene	1,84	1,95	1,66	1,73	1,80
16 3,3-dimethylpentane	0,04	0,00	0,00	0,00	0,04
17 cyclohehane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,31	3,58	3,43	3,89	3,20
19 3-methylhexane	1,69	1,56	1,72	1,98	1,65
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0,38	0,00	0,36	0,38	0,40
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,25	0,03	0,12	0,14
22 3ethylpentane	6,68	3,17	7,63	4,89	6,50
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0,27	0,16	0,29	0,28	0,30
24 2,2,4-trimethylpentane	0,11	0,00	0,27	0,00	0,13
25 n-heptane	0,84	0,78	0,80	1,13	0,84
26 2,2dimethylhexane	0,12	0,14	0,13	0,11	0,12
27 2,5dimethylhexane	1,13	0,85	1,22	1,10	1,11
28 2,4dimethylhexane	0,79	0,36	0,89	0,57	0,78

29	3,3dimethylhexane	0,10	0,06	0,10	0,10	0,10
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	11,57	13,49	11,02	12,35	12,09
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,15	0,00	0,16	0,00	0,15
32	2,3-dimethylhexane	0,05	0,11	0,05	0,17	0,06
33	2methyl-3ethylpentane	0,12	0,00	0,12	0,00	0,11
34	2-methylheptane	0,51	0,33	0,52	0,48	0,49
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,05	0,00	0,17	0,09	0,04
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,15	0,00	0,06	0,05	0,13
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,05
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,16	0,10	0,17	0,19	0,19
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,20	0,14	0,21	0,20	0,20
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,13	0,08	0,13	0,12	0,11
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,25
47	n-octane	0,09	0,19	0,24	0,44	0,09
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,08	0,11	0,10	0,00	0,06
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,05	0,07	0,06	0,00	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,06	0,00	0,12	0,11	0,06
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,11	0,03	0,07	0,08	0,14
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,14	0,09	0,16	0,14	0,10
58	2,6dimethylheptane	0,09	0,09	0,11	0,08	0,07
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,08	0,07	0,09	0,09	0,07
62	3,3-dimethylheptane	0,06	0,05	0,06	0,09	0,03
63	unidentified C9-Napthene	0,04	0,00	0,04	0,00	0,06
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
65	ethylbenzene	2,90	3,25	2,91	3,28	2,76
66	unidentified C9-Napthene	0,15	0,13	0,18	0,17	0,15
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,23	0,15	0,25	0,28	0,22
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,15	3,55	3,13	3,51	3,01
70	m-xylene	7,13	8,20	7,23	8,15	6,83
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,00	0,08	0,00	0,04
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,00	0,00	0,00	0,03

76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05
77	o-xylene	3,92	4,58	4,03	4,63	3,75
78	unidentified Paraffin	0,20	0,13	0,20	0,33	0,19
79	unidentified Napthenes	0,04	0,00	0,05	0,05	0,04
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,09	0,10	0,08	0,11	0,08

	26 U95 C(10/7)	27 U95 C(3/6)	28 U95 C(12/6)	29 U95 C(17/6)	30 U95 E(23/8)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,02	0,01	0,00	0,01	0,01
2 iso-butane	0,94	0,71	0,26	0,67	0,39
3 n-butane	0,98	0,88	0,33	1,01	0,36
4 2,2 dimethylpropane	0,17	0,22	0,07	0,20	0,14
5 iso-pentane	19,14	17,73	7,31	18,42	15,53
6 n-pentane	4,00	3,46	1,37	3,64	3,53
7 2,2-dimethylbutane	2,45	1,68	0,80	1,84	2,33
8 cyclopentane	1,35	1,71	0,44	0,60	2,55
9 2,3dimethylbutane	2,48	2,10	0,91	2,18	2,01
10 2methylpentane	9,55	8,08	35,13	8,53	8,63
11 3-methylpentane	6,68	6,08	2,55	6,05	6,46
12 n-hexane	2,98	3,19	1,13	2,56	4,00
13 2,2dimethylpentane	0,11	0,11	0,05	0,10	0,14
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,95	2,94	1,14	2,75	2,55
15 benzene	1,66	1,57	0,61	1,69	2,04
16 3,3-dimethylpentane	0,05	0,06	0,03	0,04	0,08
17 cyclohehane	0,00	0,07	0,03	0,06	0,00
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,19	3,76	1,52	3,43	3,81
19 3-methylhexane	1,52	1,92	0,78	1,76	1,79
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0,30	0,44	0,16	0,39	0,28
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,18	0,07	0,15	0,14
22 3ethylpentane	5,36	5,87	2,49	6,35	0,65
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0,24	0,32	0,12	0,30	0,20
24 2,2,4-trimethylpentane	0,23	0,14	0,03	0,14	0,09
25 n-heptane	0,71	0,89	0,34	0,78	0,94
26 2,2dimethylhexane	0,08	0,15	0,06	0,13	0,09
27 2,5dimethylhexane	0,88	1,10	0,42	1,02	0,74
28 2,4dimethylhexane	0,67	0,74	0,30	0,77	0,14
29 3,3dimethylhexane	0,06	0,12	0,04	0,10	0,08
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	12,02	11,86	4,84	12,69	14,28
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0,11	0,17	0,06	0,15	0,00
32 2,3-dimethylhexane	0,03	0,06	0,02	0,07	0,11
33 2methyl-3ethylpentane	0,08	0,11	0,04	0,11	0,04
34 2-methylheptane	0,35	0,55	0,21	0,50	0,34
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,13	0,06	0,02	0,04	0,03
36 3,4dimethylhexane	0,00	0,13	0,00	0,00	0,00
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,06	0,06	0,00	0,00	0,06
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,20	0,05	0,12	0,17
39 3-ethylhexane+trans-1,4--	0,00	0,00	0,03	0,06	0,15

	dimethylcyclohexane					
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,16	0,21	0,08	0,18	0,16
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,15	0,15	0,08	0,22	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,08	0,07	0,05	0,13	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,13	0,21	0,07	0,00	0,11
47	n-octane	0,11	0,17	0,04	0,16	0,14
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,05	0,09	0,03	0,07	0,05
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,09	0,00	0,00	0,07
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,08	0,14	0,05	0,00	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,04	0,03	0,01	0,12	0,04
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,11	0,07	0,03	0,03	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,03	0,01	0,05	0,12
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,03	0,21
57	2methyl-4-ethylhexane	0,09	0,14	0,06	0,15	0,09
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,10	0,04	0,07	0,05
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,04	0,06	0,02	0,08	0,04
62	3,3-dimethylheptane	0,03	0,05	0,01	0,06	0,08
63	unidentified C9-Napthene	0,04	0,07	0,02	0,05	0,11
64	unidentified C9-Napthene	0,05	0,08	0,02	0,00	0,17
65	ethylbenzene	2,81	3,04	1,22	3,03	3,99
66	unidentified C9-Napthene	0,11	0,17	0,07	0,14	0,15
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,15	0,28	0,10	0,25	0,16
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20
69	p-xylene	2,97	3,19	1,32	3,36	3,77
70	m-xylene	6,89	7,42	30,92	7,70	9,33
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,03	0,00	0,00	0,07
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,05	0,02	0,00	0,06
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,03	0,02	0,01	0,04	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,02	0,04	0,02	0,03	0,09
77	o-xylene	3,91	4,21	1,79	4,35	5,40
78	unidentified Paraffin	0,10	0,17	0,06	0,13	0,11
79	unidentified Napthenes	0,03	0,05	0,02	0,05	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,02	0,00	0,02	0,00
82	n-nonane	0,10	0,12	0,05	0,12	0,22

	31 U95 F(21/8)	32 U95 F(8/9)	33 U95 F(14/9)	34 U95 F(28/8)	35 U95 F(25/8)
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ					
1 propane	0,02	0,03	0,03	0,01	0,01
2 iso-butane	0,47	0,54	0,46	0,30	0,43

3	n-butane	0,79	1,09	1,08	0,53	0,70
4	2,2 dimethylpropane	0,20	0,55	0,28	0,18	0,29
5	iso-pentane	15,48	16,57	19,47	15,90	17,84
6	n-pentane	3,39	3,16	4,11	2,93	3,42
7	2,2-dimethylbutane	1,75	1,73	2,02	1,89	1,85
8	cyclopentane	1,57	1,41	1,38	1,57	0,42
9	2,3dimethylbutane	1,98	1,98	2,31	2,08	2,27
10	2methylpentane	7,77	7,93	9,25	8,49	9,14
11	3-methylpentane	5,74	5,74	6,74	6,11	6,43
12	n-hexane	3,51	3,11	3,68	2,97	2,73
13	2,2dimethylpentane	0,53	0,55	0,58	0,16	0,11
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,27	2,02	2,32	3,21	3,41
15	benzene	1,85	2,05	2,49	1,96	1,87
16	3,3-dimethylpentane	0,08	0,08	0,09	0,10	0,10
17	cyclohehane	0,06	0,00	0,07	0,08	0,08
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,80	4,16	4,58	4,31	3,96
19	3-methylhexane	1,80	2,10	2,24	2,19	2,08
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,38	0,36	0,45	0,45	0,54
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,16	0,17	0,20	0,20	0,19
22	3ethylpentane	5,95	5,22	5,12	4,42	4,93
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,29	0,25	0,30	0,32	0,39
24	2,2,4-trimethylpentane	0,13	0,27	0,15	0,16	0,04
25	n-heptane	1,01	1,05	1,09	1,07	0,93
26	2,2dimethylhexane	0,13	0,12	0,13	0,15	0,20
27	2,5dimethylhexane	1,22	1,01	1,12	1,10	1,26
28	2,4dimethylhexane	0,79	0,69	0,69	0,64	0,69
29	3,3dimethylhexane	0,11	0,09	0,16	0,13	0,16
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	13,03	13,52	0,56	13,24	11,67
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,15	0,16	0,18	0,19	0,20
32	2,3-dimethylhexane	0,06	0,05	0,06	0,07	0,10
33	2methyl-3ethylpentane	0,11	0,09	0,09	0,10	0,11
34	2-methyheptane	0,49	0,53	0,58	0,61	0,65
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,05	0,05	0,06	0,07	0,07
36	3,4dimethylhexane	0,12	0,00	0,00	0,00	0,10
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,05	0,00	0,11	0,09	0,09
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,20	0,11	0,05	0,06	0,26
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,20	0,03	0,00	0,22	0,28
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,14	0,15	0,19	0,23	0,19
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,07	0,18	0,21	0,13	0,08
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,26	0,10	0,10	0,23	0,22
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,07	0,21	0,11	0,00	0,03
47	n-octane	0,07	0,11	0,06	0,14	0,12
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,06	0,06	0,11	0,08	0,12
49	unidentified C9-Napthene	0,02	0,10	0,00	0,13	0,17

50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,11	0,00	0,00	0,00	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,03	0,00	0,03	0,03	0,05
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,07	0,05	0,06	0,07	0,07
53	2,2,3-trimethylhexane	0,04	0,00	0,00	0,04	0,06
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,16	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,15	0,00	0,00	0,17	0,20
57	2methyl-4-ethylhexane	0,15	0,14	0,10	0,12	0,06
58	2,6dimethylheptane	0,10	0,09	0,08	0,09	0,10
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,07	0,07	0,06	0,00	0,08
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,05	0,00	0,06	0,02
61	2,5dimethylheptane	0,06	0,05	0,05	0,04	0,07
62	3,3-dimethylheptane	0,11	0,04	0,08	0,04	0,08
63	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00
64	unidentified C9-Napthene	0,14	0,00	0,10	0,00	0,00
65	ethylbenzene	3,21	3,42	3,99	3,14	2,89
66	unidentified C9-Napthene	0,00	0,15	0,17	0,18	0,19
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,17	0,21	0,25	0,25	0,30
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,27	3,35	3,94	3,19	2,87
70	m-xylene	8,28	7,95	9,66	8,15	7,37
71	2,3dimethylheptane	0,04	0,00	0,00	0,00	0,05
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,07	0,00	0,05	0,06	0,11
74	3ethylheptane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,03	0,02	0,03	0,04
76	unidentified C9-Napthene	0,08	0,02	0,04	0,04	0,05
77	o-xylene	4,68	4,60	5,44	4,58	4,02
78	unidentified Paraffin	0,22	0,00	0,17	0,16	0,17
79	unidentified Napthenes	0,05	0,04	0,04	0,05	0,06
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,02	0,14	0,15	0,02	0,03
82	n-nonane	0,13	0,14	0,06	0,14	0,11

	36 <i>U95</i> <i>F(17/8)</i>	37 <i>LRP</i> <i>A(8/7)</i>	38 <i>LRP</i> <i>A(24/4)_1</i>	39 <i>LRP</i> <i>A(8/4)</i>	40 <i>LRP</i> <i>A(24/4)_2</i>	41 <i>LRP</i> <i>A(13/5)new</i>
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ						
1 propane	0,02	0,02	0,03	0,03	0,04	0,04
2 iso-butane	0,57	0,87	1,40	1,40	1,50	0,73
3 n-butane	0,64	0,70	1,47	1,82	1,54	0,84
4 2,2 dimethylpropane	0,18	0,14	0,14	0,26	0,17	0,14
5 iso-pentane	16,90	16,86	17,17	19,84	17,46	16,13
6 n-pentane	3,04	3,83	3,36	3,34	3,45	3,51
7 2,2-dimethylbutane	2,10	2,30	1,68	1,70	1,76	1,75
8 cyclopentane	1,94	2,64	2,51	1,67	2,56	2,27
9 2,3dimethylbutane	2,12	2,15	1,93	2,05	1,99	1,62
10 2methylpentane	8,44	8,96	7,88	9,12	7,98	7,23
11 3-methylpentane	6,29	6,64	5,88	6,19	5,97	6,23
12 n-hexane	3,41	3,82	3,62	3,24	3,68	4,37
13 2,2dimethylpentane	0,44	0,12	0,08	0,09	0,09	0,07
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,44	2,90	2,50	3,21	2,63	2,55
15 benzene	1,80	1,84	1,61	1,54	1,68	2,24

16	3,3-dimethylpentane	0,05	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
17	cycloheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,69	3,34	3,45	4,50	3,58	3,77
19	3-methylhexane	1,71	1,61	1,48	1,95	1,56	1,60
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,33	0,29	0,00	0,00	0,00	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,13	0,12	0,22	0,34	0,24	0,21
22	3ethylpentane	4,71	1,93	5,67	1,89	5,74	2,25
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,23	0,22	0,00	0,20	0,17	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,23	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00
25	n-heptane	0,89	0,78	0,68	0,96	0,73	0,76
26	2,2dimethylhexane	0,10	0,09	0,00	0,00	0,07	0,00
27	2,5dimethylhexane	1,11	0,62	2,03	0,21	1,04	0,68
28	2,4dimethylhexane	0,59	0,28	0,58	0,95	0,61	0,27
29	3,3dimethylhexane	0,08	0,07	0,07	0,08	0,06	0,08
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	12,99	13,56	12,50	11,63	12,29	16,47
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,04	0,10	0,00	0,18	0,10	0,37
33	2methyl-3ethylpentane	0,07	0,04	0,00	0,00	0,04	0,09
34	2-methylheptane	0,42	0,37	0,35	0,53	0,35	0,31
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,07	0,04	0,10	0,05	0,09	0,00
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,20	0,03	0,30	0,00	0,00	0,00
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,18	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,23	0,12	0,00	0,13	0,09	0,09
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,08	0,15	0,08	0,18	0,14	0,13
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,00	0,09	0,13	0,09	0,07	0,05
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,14	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,00	0,10	0,04	0,00	0,00	0,00
47	n-octane	0,10	0,14	0,16	0,33	0,16	0,18
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,06	0,05	0,08	0,13	0,09	0,18
49	unidentified C9-Napthene	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,08	0,12	0,09	0,12	0,06
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,06	0,06	0,05	0,05	0,07	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,05	0,00	0,00	0,03	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,14	0,11	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,08	0,18	0,09	0,13	0,10	0,09
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,07	0,14	0,11	0,15	0,14
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,06	0,04	0,08	0,08	0,12	0,08
62	3,3-dimethylheptane	0,09	0,07	0,09	0,11	0,06	0,00

63	unidentified C9-Napthene	0,13	0,08	0,09	0,11	0,04	0,12
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,14	0,00	0,05	0,09	0,09
65	ethylbenzene	3,23	3,52	3,31	3,14	3,23	3,61
66	unidentified C9-Napthene	0,14	0,13	0,13	0,20	0,13	0,13
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,18	0,12	0,14	0,23	0,14	0,15
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,24	3,62	3,47	3,31	3,37	3,93
70	m-xylene	8,18	8,35	8,20	7,82	7,87	9,12
71	2,3dimethylheptane	0,05	0,05	0,00	0,00	0,03	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,06	0,04	0,00	0,00	0,03	0,00
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,01	0,03	0,00	0,00	0,03
76	unidentified C9-Napthene	0,07	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	4,58	4,74	4,57	4,42	4,41	5,03
78	unidentified Paraffin	0,16	0,12	0,12	0,20	0,12	0,13
79	unidentified Napthenes	0,02	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,11	0,12	0,10	0,14	0,10	0,09

	42 <i>LRP A(5/6)</i>	43 <i>LRP A(20/6)</i>	44 <i>LRP D-A(13/9)</i>	45 <i>LRP D-A(1/9)</i>	46 <i>LRP E(17/9)</i>	47 <i>LRP E(8/9)</i>
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ						
1 propane	0,01	0,01	0,03	0,02	0,03	0,03
2 iso-butane	0,67	0,67	0,53	0,35	0,50	0,53
3 n-butane	0,69	0,62	0,93	0,54	1,01	0,87
4 2,2 dimethylpropane	0,18	0,14	0,13	0,23	0,22	0,21
5 iso-pentane	19,06	17,77	15,47	15,10	17,07	19,01
6 n-pentane	3,76	3,81	3,66	3,00	3,86	3,65
7 2,2-dimethylbutane	2,28	2,15	2,04	1,84	1,93	2,34
8 cyclopentane	0,80	2,45	2,83	2,21	1,69	2,18
9 2,3dimethylbutane	2,25	2,10	1,90	1,73	2,04	2,16
10 2methylpentane	9,05	8,63	7,84	7,28	8,24	9,13
11 3-methylpentane	6,37	6,49	5,87	5,37	6,00	6,49
12 n-hexane	2,79	3,77	4,10	3,27	3,49	3,55
13 2,2dimethylpentane	0,16	0,13	0,43	0,31	0,13	0,44
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,66	2,56	1,90	15,81	2,56	2,23
15 benzene	1,80	1,76	2,19	1,77	2,18	2,10
16 3,3-dimethylpentane	0,10	0,07	0,09	0,07	0,09	0,09
17 cyclohehane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	4,32	3,55	3,93	3,49	3,90	1,16
19 3-methylhexane	1,96	1,76	1,77	1,73	1,87	2,00
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0,36	0,29	0,23	0,24	0,36	0,29
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0,18	0,12	0,15	0,12	0,17	0,14
22 3ethylpentane	2,30	2,32	3,61	2,75	4,08	3,39
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0,26	0,21	0,17	0,02	0,25	0,20
24 2,2,4-trimethylpentane	0,11	0,24	0,07	0,16	0,12	0,21
25 n-heptane	0,92	0,84	0,96	0,91	0,96	1,03
26 2,2dimethylhexane	0,11	0,09	0,06	0,10	0,11	0,06
27 2,5dimethylhexane	0,78	0,63	0,77	0,73	1,00	0,81
28 2,4dimethylhexane	0,31	0,31	0,46	0,37	0,55	0,45

29	3,3dimethylhexane	0,09	0,06	0,05	0,08	0,09	0,10
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	13,42	13,20	14,53	11,72	14,01	13,67
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,13	0,00	0,11	0,11	0,14	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,05	0,11	0,05	0,00	0,05	0,13
33	2methyl-3ethylpentane	0,05	0,03	0,00	0,00	0,08	0,04
34	2-methylheptane	0,44	0,40	0,34	0,31	0,45	0,42
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,05	0,00	0,03	0,04	0,05	0,04
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,03	0,05	0,11	0,09	0,04	0,14
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,05	0,00	0,00	0,00	0,15	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,15	0,16	0,11	0,12	0,16	0,14
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,17	0,15	0,03	0,11	0,09	0,14
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,10	0,09	0,16	0,17	0,18	0,19
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,14	0,00	0,00	0,00	0,08
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,00	0,11	0,10	0,08	0,07	0,08
47	n-octane	0,18	0,13	0,14	0,09	0,07	0,04
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,06	0,04	0,03	0,06	0,05	0,07
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,05	0,00	0,09	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,05	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,05	0,00	0,02	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,09	0,04	0,04	0,00	0,05	0,03
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,12	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,09	0,00	0,13	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,07	0,18	0,17	0,09	0,14	0,11
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,07	0,06	0,11	0,08	0,11
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00	0,04
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,03	0,05	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,04	0,03	0,04	0,04	0,06	0,04
62	3,3-dimethylheptane	0,02	0,07	0,08	0,03	0,08	0,04
63	unidentified C9-Napthene	0,05	0,05	0,09	0,09	0,11	0,00
64	unidentified C9-Napthene	0,08	0,13	0,15	0,00	0,00	0,08
65	ethylbenzene	3,24	3,54	3,70	3,00	3,49	3,21
66	unidentified C9-Napthene	0,12	0,14	0,00	0,11	0,15	0,12
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,19	0,13	0,15	0,11	0,21	0,15
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,04	0,19	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,42	3,59	3,46	2,84	2,59	3,24
70	m-xylene	8,09	8,36	8,39	6,79	7,37	7,90
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,05	0,05	0,03	0,03	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,03	0,05	0,02	0,00	0,05	0,00
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,00	0,04	0,03	0,02	0,04

76	unidentified C9-Napthene	0,04	0,06	0,07	0,03	0,05	0,05
77	o-xylene	4,69	4,83	4,83	3,94	4,68	4,57
78	unidentified Paraffin	0,12	0,12	0,10	0,09	0,14	0,11
79	unidentified Napthenes	0,04	0,03	0,00	0,00	0,03	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,12	0,12	0,14	0,12	0,13	0,14

	48 <i>LRP</i> <i>E(20/4)</i>	49 <i>LRP</i> <i>E(8/8)</i>	50 <i>U100</i> <i>D-B(9/9)</i>	51 <i>U100</i> <i>D-A(13/7)</i>	52 <i>U100</i> <i>D-B(13/8)</i>	53 <i>U100</i> <i>D-B(19/7)</i>
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ						
1 propane	0,04	0,03	0,01	0,06	0,02	0,08
2 iso-butane	1,23	0,62	1,28	1,19	0,74	1,04
3 n-butane	1,36	0,61	2,09	1,95	1,18	1,30
4 2,2 dimethylpropane	0,09	0,14	0,78	0,19	0,22	0,15
5 iso-pentane	20,58	16,48	9,25	12,88	12,21	13,42
6 n-pentane	3,75	2,94	2,58	2,56	2,38	3,04
7 2,2-dimethylbutane	3,18	2,40	0,71	1,04	0,65	1,36
8 cyclopentane	3,30	2,16	5,08	3,56	2,75	3,74
9 2,3dimethylbutane	2,33	2,17	1,26	1,44	1,25	1,33
10 2methylpentane	10,32	8,62	4,14	4,46	4,04	5,31
11 3-methylpentane	7,28	6,38	3,84	3,92	3,78	4,52
12 n-hexane	4,00	3,27	5,12	3,81	3,94	4,40
13 2,2dimethylpentane	0,12	0,39	0,60	0,69	0,66	0,37
14 methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,46	2,44	0,63	1,50	1,29	1,71
15 benzene	1,52	1,78	2,49	2,18	1,98	2,32
16 3,3-dimethylpentane	0,00	0,08	0,13	0,07	0,09	0,09
17 cyclohehane	0,00	0,04	0,04	0,00	0,00	0,00
18 2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,32	3,44	4,60	3,23	4,12	3,48
19 3-methylhexane	1,30	1,59	2,03	1,33	1,69	1,40
20 cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,30	0,14	0,00	0,17	0,05
21 trans1,3dimethylcyclopentane	0,08	0,15	0,13	0,07	0,12	0,04
22 3ethylpentane	0,57	3,83	10,56	10,15	9,98	3,96
23 trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,21	0,00	0,00	0,00	0,00
24 2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,10	0,00	0,00	0,14	0,00
25 n-heptane	0,69	0,81	1,20	0,76	0,92	0,86
26 2,2dimethylhexane	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00
27 2,5dimethylhexane	0,00	0,79	1,16	0,92	0,99	0,54
28 2,4dimethylhexane	0,47	0,51	1,28	1,23	1,18	0,49
29 3,3dimethylhexane	0,00	0,07	0,21	0,18	0,00	0,00
30 toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	12,09	13,64	17,67	16,98	16,93	18,28
31 1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,11	0,15	0,20	0,09	0,15
32 2,3-dimethylhexane	0,19	0,04	0,33	0,05	0,14	0,04
33 2methyl-3ethylpentane	0,00	0,07	0,24	0,13	0,00	0,17
34 2-methylheptane	0,00	0,36	0,00	0,00	0,30	0,00
35 4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,04	0,00	0,00	0,18	0,00
36 3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00
38 3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,19	0,03	0,07	0,23	0,00	0,09
39 3-ethylhexane+trans-1,4--	0,00	0,15	0,00	0,23	0,00	0,00

	dimethylcyclohexane						
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,15	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,06	0,00	0,03	0,06	0,00
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,14	0,00	0,00	0,08	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,18	0,11	0,13	0,11
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,00	0,09	0,17	0,11	0,11	0,12
47	n-octane	0,14	0,13	0,23	0,20	0,16	0,22
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,11	0,05	0,00	0,00	0,03	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,18	0,00	0,00	0,04	0,00	0,05
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,02	0,03	0,00	0,03	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,04	0,06	0,04	0,03	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,12	0,11	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,20	0,22	0,00	0,08	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,19	0,09	0,00	0,22	0,21	0,24
58	2,6dimethylheptane	0,00	0,05	0,00	0,04	0,06	0,05
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
61	2,5dimethylheptane	0,08	0,08	0,04	0,09	0,08	0,10
62	3,3-dimethylheptane	0,06	0,10	0,11	0,07	0,09	0,10
63	unidentified C9-Napthene	0,14	0,16	0,13	0,16	0,09	0,19
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,21	0,00	0,16	0,00
65	ethylbenzene	3,24	3,40	4,39	4,04	4,14	4,49
66	unidentified C9-Napthene	0,14	0,16	0,00	0,00	0,00	0,06
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,00	0,15	0,05	0,05	0,11	0,03
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,20	0,00	0,00	0,06	0,00
69	p-xylene	3,10	3,41	3,91	3,61	3,97	4,27
70	m-xylene	7,47	8,47	9,32	8,51	9,84	9,98
71	2,3dimethylheptane	0,06	0,06	0,06	0,00	0,06	0,08
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,06	0,02	0,00	0,11	0,03	0,03
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,00	0,06	0,04	0,00	0,04	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,09	0,08	0,09	0,09	0,10
77	o-xylene	4,33	4,83	0,55	5,00	5,82	5,83
78	unidentified Paraffin	0,09	0,13	0,10	0,00	0,09	0,07
79	unidentified Napthenes	0,00	0,32	0,00	0,07	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,12	0,14	0,20	0,16	0,16	0,09

		54 U100 D-B(20/10)	55 U100 D-B(14/10)	56 U100 D-B_1(14/10)	57 U100 D-B_2(14/10)	58 U100 D-B_3(14/10)
1	propane	0,03	0,03	0,03	0,04	0,02
2	iso-butane	3,97	2,95	2,90	3,77	2,62

3	n-butane	4,47	3,35	3,30	4,22	3,03
4	2,2 dimethylpropane	0,19	0,14	0,13	0,16	0,13
5	iso-pentane	11,96	10,25	10,08	12,25	0,97
6	n-pentane	2,18	2,20	2,20	2,57	2,14
7	2,2-dimethylbutane	1,13	0,74	0,74	0,81	0,74
8	cyclopentane	4,20	4,08	4,05	4,41	4,16
9	2,3dimethylbutane	1,62	1,14	1,15	1,22	1,17
10	2methylpentane	4,42	3,22	3,18	3,47	3,28
11	3-methylpentane	3,95	3,31	3,28	3,52	3,41
12	n-hexane	3,91	4,17	4,11	4,38	4,33
13	2,2dimethylpentane	0,87	0,71	0,73	0,70	0,76
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	1,56	1,06	1,08	1,08	1,14
15	benzene	1,83	1,77	1,79	1,79	1,91
16	3,3-dimethylpentane	0,00	0,00	0,09	0,00	0,09
17	cyclohehane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	2,22	3,54	3,53	3,43	3,85
19	3-methylhexane	0,82	1,21	1,22	1,14	1,35
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
22	3ethylpentane	17,94	13,01	12,56	12,33	14,21
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
25	n-heptane	0,45	0,72	0,74	0,65	0,83
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,16	0,20	0,00	0,00
27	2,5dimethylhexane	1,34	1,26	1,28	1,12	1,46
28	2,4dimethylhexane	1,96	1,48	1,49	1,31	1,71
29	3,3dimethylhexane	0,09	0,10	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	12,88	16,46	16,19	15,30	18,53
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,00	0,11	0,00	0,00	0,00
33	2methyl-3ethylpentane	0,00	0,18	0,12	0,23	0,00
34	2-methyheptane	0,24	0,15	0,20	0,18	0,14
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,23
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,16	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,13	0,25	0,26	0,13	0,18
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,31	0,00	0,00	0,21	0,30
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,09	0,06	0,11
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,12	0,13	0,13	0,10	0,16
47	n-octane	0,22	0,24	0,25	0,21	0,30
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

50	cis-1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,04	0,05	0,00	0,06
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,24	0,25	0,00	0,00	0,00
58	2,6-dimethylheptane	0,00	0,10	0,26	0,21	0,31
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,04	0,00	0,05
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,04	0,00	0,00
61	2,5-dimethylheptane	0,09	0,10	0,11	0,06	0,05
62	3,3-dimethylheptane	0,07	0,19	0,10	0,15	0,13
63	unidentified C9-Napthene	0,18	0,00	0,20	0,00	0,12
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,24
65	ethylbenzene	2,39	3,66	3,72	3,18	4,35
66	unidentified C9-Napthene	0,33	0,32	0,31	0,28	0,39
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,17	0,06	0,10	0,06	0,12
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,03	0,09	0,09	0,12
69	p-xylene	2,29	3,39	3,49	3,02	4,11
70	m-xylene	5,62	8,19	8,54	7,41	10,05
71	2,3-dimethylheptane	0,10	0,07	0,08	0,08	0,09
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,06	0,05	0,07
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,03	0,00	0,04
75	3-methyloctane	0,11	0,11	0,12	0,09	0,15
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	3,27	5,07	5,12	4,43	6,03
78	unidentified Paraffin	0,00	0,06	0,07	0,00	0,08
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,08	0,15	0,16	0,12	0,19

	59	60	61	62	63	
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	U100	U100	U100	U100	U100	
	D-B(29/11)	D-B_1(29/11)	D-B_2(29/11)	D-B_3(29/11)	G(19/10)	
1	propane	0,09	0,10	0,10	0,08	0,04
2	iso-butane	5,73	5,70	6,04	4,92	2,49
3	n-butane	3,63	3,60	3,84	3,15	2,89
4	2,2 dimethylpropane	0,14	0,12	0,14	0,12	0,15
5	iso-pentane	10,81	10,69	11,55	9,63	11,45
6	n-pentane	2,10	2,06	2,25	1,90	2,32
7	2,2-dimethylbutane	0,41	0,38	0,44	0,38	0,70
8	cyclopentane	4,89	4,78	5,27	4,58	3,73
9	2,3-dimethylbutane	0,79	0,76	0,84	0,73	1,14
10	2methylpentane	2,52	2,44	2,71	2,36	3,53
11	3-methylpentane	3,07	2,98	3,31	2,90	3,46
12	n-hexane	4,77	4,66	5,17	4,55	4,12
13	2,2-dimethylpentane	0,11	0,49	0,55	0,12	0,62
14	methylcyclopentane+2,4-dimethylpentane	1,09	1,27	1,42	1,07	1,12
15	benzene	2,21	2,17	2,42	2,18	1,82

16	3,3-dimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,05	0,00
17	cycloheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,34	3,23	3,64	3,33	3,45
19	3-methylhexane	1,17	1,13	1,28	1,20	1,25
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
22	3ethylpentane	10,25	10,06	1,13	10,33	11,34
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
25	n-heptane	0,71	0,68	0,77	0,74	0,72
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
27	2,5dimethylhexane	0,68	0,64	0,76	0,73	1,23
28	2,4dimethylhexane	1,01	0,98	1,12	1,08	1,24
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	17,57	17,65	19,49	18,11	16,78
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,14
33	2methyl-3ethylpentane	0,13	0,00	0,00	0,00	0,15
34	2-methylheptane	0,13	0,13	0,14	0,15	0,17
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,12	0,14	0,14	0,00
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,16	0,16	0,18	0,18	0,20
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,10	0,10	0,12	0,12	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,09	0,00	0,00	0,00	0,11
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,09	0,10	0,11	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,14	0,14	0,15	0,16	0,00
47	n-octane	0,25	0,25	0,29	0,28	0,21
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,06	0,05	0,06	0,07	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
58	2,6dimethylheptane	0,32	0,32	0,36	0,36	0,23
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,05	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,15	0,15	0,16	0,17	0,09
62	3,3-dimethylheptane	0,12	0,12	0,13	0,13	0,07

63	unidentified C9-Napthene	0,25	0,24	0,27	0,27	0,17
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
65	ethylbenzene	3,51	3,57	3,93	3,81	3,83
66	unidentified C9-Napthene	0,35	0,35	0,40	0,40	0,29
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,08	0,08	0,09	0,16	0,24
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00
69	p-xylene	3,48	3,56	3,91	3,88	3,64
70	m-xylene	8,24	8,47	9,26	9,31	8,91
71	2,3dimethylheptane	0,10	0,00	0,00	0,12	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,07	0,17	0,19	0,13	0,06
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,14	0,15	0,16	0,17	0,10
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	4,86	5,02	5,48	5,28	5,48
78	unidentified Paraffin	0,06	0,06	0,07	0,08	0,06
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,14	0,14	0,16	0,16	0,16

ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	64 U100 G_1(19/10)	65 U100 GG_2(19/10)	66 U100 G_3(19/10)	67 B(18/6)	68 F(31/8)	
1	propane	0,03	0,04	0,05	0,01	0,02
2	iso-butane	2,37	2,50	1,34	0,66	0,35
3	n-butane	2,90	3,06	3,15	0,86	0,64
4	2,2 dimethylpropane	0,14	0,17	0,18	0,17	0,22
5	iso-pentane	11,37	11,94	12,19	16,75	16,16
6	n-pentane	2,40	2,53	2,59	3,38	3,12
7	2,2-dimethylbutane	0,68	0,73	0,77	1,79	1,93
8	cyclopentane	3,81	3,91	3,98	1,59	2,02
9	2,3dimethylbutane	1,13	1,18	1,22	2,09	2,00
10	2methylpentane	3,57	3,68	3,75	7,99	8,14
11	3-methylpentane	3,51	3,61	3,68	5,91	5,98
12	n-hexane	4,27	4,37	4,44	3,04	3,30
13	2,2dimethylpentane	0,63	0,64	0,66	0,12	0,18
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	1,11	1,15	1,18	2,73	2,83
15	benzene	1,95	2,00	2,03	1,65	2,07
16	3,3-dimethylpentane	0,04	0,00	0,05	0,07	0,13
17	cyclohehane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,49	3,53	3,60	3,68	4,34
19	3-methylhexane	1,26	1,27	1,30	1,82	2,24
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,37	0,39
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,20
22	3ethylpentane	11,16	11,05	11,10	5,62	3,55
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,29	0,29
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,14	0,15
25	n-heptane	0,73	0,73	0,76	0,83	1,17
26	2,2dimethylhexane	0,08	0,00	0,07	0,13	0,14
27	2,5dimethylhexane	1,04	1,03	1,06	0,96	1,03
28	2,4dimethylhexane	1,23	1,21	1,24	0,69	0,53

29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,10	0,12
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	17,23	17,00	16,93	13,00	13,33
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,18
32	2,3-dimethyhexane	0,00	0,00	0,00	0,06	0,07
33	2methyl-3ethylpentane	0,14	0,13	0,14	0,10	0,00
34	2-methyheptane	0,14	0,13	0,14	0,49	0,56
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,05	0,07
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,11	0,07
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,17	0,17	0,17	0,05	0,05
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,20	0,19	0,20	0,19	0,18
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,20	0,20
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,08	0,11
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,17	0,23
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,09	0,08	0,09	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,09
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,11	0,10	0,11	0,06	0,09
47	n-octane	0,20	0,20	0,20	0,11	0,09
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,05	0,00	0,00	0,03	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,07	0,06
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,04
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,04	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,15
57	2methyl-4-ethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,14
58	2,6dimethylheptane	0,22	0,20	0,22	0,13	0,09
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,08	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,05	0,06
61	2,5dimethylheptane	0,08	0,08	0,08	0,06	0,06
62	3,3-dimethylheptane	0,07	0,06	0,07	0,10	0,09
63	unidentified C9-Napthene	0,16	0,15	0,16	0,12	0,12
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
65	ethylbenzene	3,80	3,62	3,62	3,26	3,49
66	unidentified C9-Napthene	0,27	0,26	0,27	0,17	0,16
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,05	0,05	0,05	0,25	0,23
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,05	0,04	0,05	0,00	0,00
69	p-xylene	3,63	3,46	3,45	3,37	3,22
70	m-xylene	8,76	8,37	8,30	8,43	8,08
71	2,3dimethylheptane	0,06	0,05	0,06	0,03	0,03
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,00	0,00	0,06	0,06
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,10	0,09	0,10	0,02	0,02

76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,05	0,06
77	o-xylene	5,30	5,05	5,02	4,67	4,64
78	unidentified Paraffin	0,07	0,06	0,06	0,15	0,15
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,04	0,04
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,03	0,02
82	n-nonane	0,14	0,13	0,13	0,11	0,16

ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	69 B(18/6)rep	70 U95	71 U100	72 U100_1	73 U100_3	
1	propane	0,01	0,02	0,04	0,03	0,03
2	iso-butane	0,63	0,59	0,99	0,85	0,86
3	n-butane	0,83	0,80	1,59	1,41	0,40
4	2,2 dimethylpropane	0,16	0,20	0,19	0,17	0,19
5	iso-pentane	16,79	18,37	12,71	11,82	11,85
6	n-pentane	3,36	1,14	2,75	2,55	2,59
7	2,2-dimethylbutane	1,77	2,11	0,92	0,86	0,91
8	cyclopentane	1,57	1,85	3,90	3,72	3,82
9	2,3dimethylbutane	2,08	2,24	1,33	1,27	1,29
10	2methylpentane	8,02	9,03	4,66	4,46	4,53
11	3-methylpentane	5,91	6,56	4,14	3,97	4,05
12	n-hexane	3,03	3,56	4,45	4,29	4,37
13	2,2dimethylpentane	0,12	0,12	0,59	0,58	0,59
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,70	2,86	1,40	1,35	1,41
15	benzene	1,63	2,00	2,23	2,18	2,23
16	3,3-dimethylpentane	0,07	0,04	0,07	0,07	0,08
17	cyclohehane	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,66	3,84	3,75	3,70	3,81
19	3-methylhexane	1,82	1,81	1,53	1,53	1,58
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,38	0,32	0,00	0,00	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,16	0,13	0,06	0,06	0,08
22	3ethylpentane	5,68	4,06	8,57	8,49	8,63
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,28	0,20	0,00	0,00	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,14	0,21	0,00	0,00	0,00
25	n-heptane	0,82	0,87	0,85	0,86	0,90
26	2,2dimethylhexane	0,12	0,10	0,00	0,00	0,00
27	2,5dimethylhexane	0,95	0,91	0,80	0,81	0,85
28	2,4dimethylhexane	0,69	0,51	0,92	0,95	0,99
29	3,3dimethylhexane	0,10	0,07	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	13,11	13,50	17,35	17,83	17,93
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,14	0,41	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,06	0,12	0,00	0,00	0,00
33	2methyl-3ethylpentane	0,10	0,04	0,21	0,21	0,22
34	2-methylheptane	0,49	0,40	0,09	0,09	0,04
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,05	0,08	0,00	0,00	0,00
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,11	0,07	0,23	0,23	0,25
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,05	0,00	0,16	0,17	0,16

40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,17	0,00	0,00	0,00	0,00
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,20	0,15	0,00	0,00	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,12	0,16	0,11	0,12	0,12
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,17	0,17	0,11	0,12	0,12
47	n-octane	0,15	0,14	0,17	0,19	0,20
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,07	0,05	0,00	0,00	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,11	0,08	0,00	0,00	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,15	0,04	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,12	0,12	0,00	0,00	0,00
58	2,6dimethylheptane	0,08	0,11	0,18	0,20	0,21
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,05	0,04	0,07	0,08	0,09
62	3,3-dimethylheptane	0,05	0,03	0,06	0,09	0,09
63	unidentified C9-Napthene	0,06	0,02	0,14	0,17	0,17
64	unidentified C9-Napthene	0,07	0,06	0,00	0,00	0,00
65	ethylbenzene	3,27	3,34	4,08	4,20	4,16
66	unidentified C9-Napthene	0,16	0,13	0,00	0,22	0,23
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,22	0,16	0,18	0,05	0,05
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,49	3,36	3,77	4,04	4,00
70	m-xylene	8,41	7,80	9,01	9,80	9,71
71	2,3dimethylheptane	0,03	0,00	0,05	0,06	0,06
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,05	0,00	0,07	0,03	0,03
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,02	0,00	0,00	0,09	0,09
76	unidentified C9-Napthene	0,03	0,02	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	4,71	4,48	5,31	5,79	5,70
78	unidentified Paraffin	0,15	0,11	0,07	0,08	0,07
79	unidentified Napthenes	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,02	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,12	0,13	0,14	0,17	0,16

	74	75	76	77	78
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	U100_4	U100_5	U100_6	U100_7	5%U95
1 propane	0,03	0,04	0,03	0,03	0,04
2 iso-butane	0,86	0,90	0,85	0,86	0,94
3 n-butane	1,42	1,48	1,41	1,42	1,51
4 2,2 dimethylpropane	0,19	0,20	0,18	0,20	0,20

5	iso-pentane	11,89	12,11	11,67	11,72	12,66
6	n-pentane	2,58	2,63	2,54	2,58	2,76
7	2,2-dimethylbutane	0,89	0,92	0,87	0,92	1,00
8	cyclopentane	3,77	3,80	3,70	3,76	3,76
9	2,3dimethylbutane	1,27	1,29	1,25	1,29	1,36
10	2methylpentane	4,49	4,52	4,41	4,48	4,82
11	3-methylpentane	4,02	4,03	3,95	4,01	4,22
12	n-hexane	4,56	4,34	4,28	4,33	4,36
13	2,2dimethylpentane	0,58	0,59	0,58	0,60	0,59
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	1,35	1,38	1,37	1,40	1,45
15	benzene	2,17	2,20	2,19	2,22	2,22
16	3,3-dimethylpentane	0,00	0,06	0,08	0,09	0,07
17	cyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,71	3,73	3,72	3,79	3,77
19	3-methylhexane	1,53	1,53	1,54	1,57	1,56
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,07	0,08	0,08	0,08
22	3ethylpentane	8,56	8,64	8,47	8,51	8,18
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
25	n-heptane	0,87	0,87	0,87	0,91	0,87
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06
27	2,5dimethylhexane	0,80	0,81	0,83	0,85	0,86
28	2,4dimethylhexane	0,95	0,96	0,97	1,00	0,93
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	17,87	17,61	17,78	17,58	17,15
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22
32	2,3-dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05
33	2methyl-3ethylpentane	0,20	0,21	0,22	0,22	0,10
34	2-methylheptane	0,09	0,10	0,10	0,06	0,24
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,11	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,22	0,24	0,24	0,25	0,16
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,15	0,16	0,17	0,17	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,11	0,12	0,12	0,12	0,00
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,11	0,12	0,12	0,12	0,11
47	n-octane	0,18	0,19	0,20	0,20	0,18
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,04	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00
58	2,6-dimethylheptane	0,20	0,19	0,20	0,21	0,19
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5-dimethylheptane	0,07	0,08	0,09	0,09	0,08
62	3,3-dimethylheptane	0,07	0,07	0,09	0,09	0,08
63	unidentified C9-Napthene	0,15	0,16	0,17	0,17	0,15
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
65	ethylbenzene	4,12	4,10	4,21	4,10	4,13
66	unidentified C9-Napthene	0,23	0,23	0,23	0,22	0,00
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,23	0,05	0,05	0,05	0,04
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,94	3,89	4,07	3,95	3,83
70	m-xylene	9,49	9,36	9,85	9,51	9,17
71	2,3-dimethylheptane	0,05	0,05	0,06	0,06	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,00	0,00	0,03	0,03	0,08
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,08	0,09	0,09	0,09	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	5,73	5,67	5,83	5,60	5,40
78	unidentified Paraffin	0,07	0,07	0,08	0,08	0,08
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,16	0,16	0,17	0,16	0,15

	79	80	81	82	83	
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	10%U95	15%U95	20%U95	25%U95	30%U95	
1	propane	0,02	0,03	0,02	0,01	0,02
2	iso-butane	0,65	0,79	0,71	0,60	0,64
3	n-butane	1,08	1,29	1,19	0,98	1,05
4	2,2 dimethylpropane	0,16	0,20	0,17	0,15	0,17
5	iso-pentane	10,37	12,72	12,64	12,02	12,46
6	n-pentane	2,32	2,76	2,74	2,54	2,76
7	2,2-dimethylbutane	0,92	1,09	1,13	1,15	1,26
8	cyclopentane	3,31	3,52	3,34	3,12	3,08
9	2,3-dimethylbutane	1,27	1,42	1,45	1,48	1,55
10	2methylpentane	4,52	5,18	5,35	5,48	5,71
11	3-methylpentane	3,95	4,40	4,47	4,55	4,68
12	n-hexane	4,04	4,24	4,11	3,99	4,00
13	2,2-dimethylpentane	0,58	0,57	0,56	0,57	0,58
14	methylcyclopentane+2,4-dimethylpentane	1,44	1,54	1,58	1,61	1,72
15	benzene	2,15	2,19	2,11	1,95	2,09
16	3,3-dimethylpentane	0,09	0,08	0,10	0,15	0,14
17	cyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3-dimethylpentane	3,76	3,79	3,77	3,88	3,21

19	3-methylhexane	1,61	1,60	1,63	1,71	2,36
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,00	0,00	0,00	0,20
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,07	0,12	0,14	0,15	0,13
22	3ethylpentane	8,20	7,83	7,63	7,91	7,28
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,16
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07
25	n-heptane	0,93	0,89	0,90	0,93	0,94
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
27	2,5dimethylhexane	0,92	0,84	0,86	0,92	0,94
28	2,4dimethylhexane	1,01	0,90	0,89	0,93	0,91
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	17,84	17,04	16,72	16,78	16,07
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethyhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10
33	2methyl-3ethylpentane	0,00	0,00	0,00	0,08	0,10
34	2-methyheptane	0,26	0,24	0,26	0,10	0,32
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,08	0,06	0,07	0,00	0,03
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,11	0,09	0,09	0,00	0,16
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,28	0,26	0,28	0,31	0,11
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,19	0,15	0,15	0,16	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,04	0,00	0,00	0,06	0,10
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,07	0,05	0,06	0,08	0,11
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,15
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,14	0,13	0,13	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,13	0,11	0,11	0,12	0,12
47	n-octane	0,21	0,17	0,17	0,18	0,17
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,04	0,00	0,00	0,00	0,04
51	2,2-dimethylheptane	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,08	0,00	0,00	0,00	0,03
53	2,2,3-thrimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,23	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,06	0,00	0,00	0,00	0,04
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,04	0,06	0,06	0,08	0,09
58	2,6dimethylheptane	0,06	0,19	0,19	0,19	0,21
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,04
61	2,5dimethylheptane	0,10	0,08	0,08	0,09	0,05
62	3,3-dimethylheptane	0,11	0,09	0,09	0,09	0,09
63	unidentified C9-Napthene	0,19	0,16	0,16	0,16	0,10
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,17
65	ethylbenzene	4,72	3,95	4,07	4,20	4,18

66	unidentified C9-Napthene	0,00	0,21	0,19	0,08	0,11
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,06	0,05	0,05	0,05	0,07
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	4,35	3,83	3,93	4,08	3,82
70	m-xylene	10,37	9,29	9,58	9,92	9,29
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,05	0,06	0,06	0,06
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,04
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,13	0,00	0,00	0,04	0,05
74	3ethylheptane	0,04	0,03	0,04	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,10	0,08	0,08	0,09	0,00
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09
77	o-xylene	6,17	5,44	5,62	5,81	5,42
78	unidentified Paraffin	0,10	0,08	0,09	0,10	0,09
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,19	0,16	0,16	0,17	0,17

	84	85	86	87	88	
ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	35%U95	40%U95	45%U95	50%U95	55%U95	
1	propane	0,03	0,01	0,02	0,02	0,01
2	iso-butane	0,70	0,45	0,59	0,49	0,55
3	n-butane	1,10	0,84	0,95	0,79	0,92
4	2,2 dimethylpropane	0,19	0,15	0,16	0,15	0,15
5	iso-pentane	13,75	13,32	12,88	11,60	15,39
6	n-pentane	2,95	2,90	2,92	2,57	3,11
7	2,2-dimethylbutane	1,37	1,35	1,43	1,31	1,48
8	cyclopentane	2,96	3,00	2,77	2,45	2,55
9	2,3dimethylbutane	1,64	1,65	1,73	1,56	1,78
10	2methylpentane	6,13	6,37	6,50	5,95	7,09
11	3-methylpentane	4,91	5,09	5,12	4,73	5,42
12	n-hexane	3,94	4,07	3,89	3,58	3,79
13	2,2dimethylpentane	0,55	0,54	0,54	0,52	0,47
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	1,77	1,79	1,91	1,81	1,86
15	benzene	2,04	2,08	2,13	2,03	2,00
16	3,3-dimethylpentane	0,12	0,11	0,08	0,08	0,00
17	cyclohehane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,80	3,87	3,88	3,78	3,70
19	3-methylhexane	1,69	1,71	1,75	1,75	1,63
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,20	0,00	0,23	0,24	0,00
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,12	0,17	0,13	0,14	0,16
22	3ethylpentane	6,85	6,93	6,59	6,42	5,98
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,12	0,00	0,18	0,19	0,00
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,00	0,18	0,09	0,00
25	n-heptane	0,91	0,90	0,93	0,94	0,81
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,00	0,05	0,08	0,00
27	2,5dimethylhexane	0,90	0,88	0,93	0,98	0,81
28	2,4dimethylhexane	0,82	0,80	0,80	0,84	0,65
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,15	0,00
30	toluene+2,2,3-thrimethylcyclopentane	15,63	16,28	15,82	16,45	15,99
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

32	2,3-dimethylhexane	0,09	0,08	0,11	0,12	0,00
33	2methyl-3ethylpentane	0,09	0,08	0,08	0,03	0,00
34	2-methylheptane	0,32	0,31	0,34	0,40	0,31
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,14	0,13	0,14	0,04	0,00
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,10	0,00	0,11	0,15	0,28
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,05	0,09
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,16	0,06
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,10	0,07	0,11	0,13	0,07
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,10	0,09	0,12	0,04	0,13
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,15	0,14	0,16	0,17	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,10	0,10	0,10	0,12	0,00
47	n-octane	0,15	0,14	0,14	0,15	0,18
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,04	0,00	0,03	0,04	0,00
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,05	0,00	0,05	0,07	0,00
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,03	0,00	0,06	0,02	0,00
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,04	0,05	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,09	0,08	0,10	0,12	0,00
58	2,6dimethylheptane	0,19	0,17	0,18	0,22	0,00
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,05	0,08	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,03	0,05	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,07	0,07	0,08	0,05	0,06
62	3,3-dimethylheptane	0,08	0,06	0,09	0,09	0,13
63	unidentified C9-Napthene	0,09	0,13	0,15	0,11	0,00
64	unidentified C9-Napthene	0,15	0,00	0,00	0,18	0,08
65	ethylbenzene	3,84	3,91	4,00	4,50	3,76
66	unidentified C9-Napthene	0,17	0,17	0,12	0,14	0,15
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,11	0,05	0,09	0,12	0,20
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,72	3,82	3,71	4,16	3,65
70	m-xylene	9,08	9,33	9,08	10,24	9,01
71	2,3dimethylheptane	0,05	0,00	0,05	0,06	0,00
72	4-ethylheptane	0,00	0,05	0,00	0,03	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,05	0,04	0,05	0,06	0,00
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,08	0,08	0,08	0,10	0,05
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	5,27	5,42	5,23	5,96	5,27
78	unidentified Paraffin	0,09	0,09	0,10	0,12	0,09

79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,16	0,15	0,15	0,18	0,13

ΣΥΣΤΑΤΙΚΑ	89 60%U95	90 65%U95	91 70%U95	92 75%U95	93 80%U95	
1	propane	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
2	iso-butane	0,05	0,54	0,55	0,54	0,52
3	n-butane	0,02	0,84	0,84	0,83	0,78
4	2,2 dimethylpropane	0,06	0,17	0,17	0,18	0,18
5	iso-pentane	7,55	14,21	15,71	15,33	15,61
6	n-pentane	2,05	3,05	3,29	3,23	3,28
7	2,2-dimethylbutane	1,35	1,59	1,73	1,71	1,81
8	cyclopentane	2,51	2,39	2,34	2,25	2,18
9	2,3dimethylbutane	1,74	1,79	1,93	1,90	1,99
10	2methylpentane	7,11	7,07	7,64	7,56	7,88
11	3-methylpentane	5,63	5,42	5,77	5,70	5,91
12	n-hexane	4,07	3,68	3,71	3,64	3,64
13	2,2dimethylpentane	0,57	0,50	0,49	0,48	0,13
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,13	2,00	2,08	2,10	2,65
15	benzene	2,20	2,05	1,94	2,01	1,93
16	3,3-dimethylpentane	0,06	0,07	0,09	0,06	0,10
17	cyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	4,38	3,83	3,82	3,80	3,87
19	3-methylhexane	2,03	1,76	1,77	1,77	1,82
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,26	0,26	0,28	0,29
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,25	0,13	0,12	0,13	0,13
22	3ethylpentane	6,88	5,68	5,43	5,26	5,16
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,17	0,16	0,18	0,20
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,07	0,16	0,19	0,21
25	n-heptane	1,04	0,91	0,89	0,89	0,91
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,12	0,00	0,10	0,06
27	2,5dimethylhexane	1,05	0,94	0,89	0,93	0,93
28	2,4dimethylhexane	0,82	0,70	0,64	0,65	0,64
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	18,11	15,40	14,40	14,85	14,20
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
32	2,3-dimethylhexane	0,11	0,11	0,10	0,11	0,12
33	2methyl-3ethylpentane	0,08	0,07	0,06	0,06	0,06
34	2-methylheptane	0,42	0,37	0,36	0,37	0,39
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,13	0,12	0,10	0,10	0,10
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,13	0,13	0,13	0,13	0,14
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,14	0,13	0,13	0,14	0,14
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,11	0,13	0,12	0,13	0,04

43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,19	0,17	0,16	0,16	0,16
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,11	0,10	0,08	0,08	0,08
47	n-octane	0,13	0,12	0,10	0,10	0,10
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,00	0,07	0,06	0,06	0,04
49	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,04	0,07	0,03	0,07
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,04
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,11	0,11	0,11	0,11	0,15
58	2,6dimethylheptane	0,17	0,17	0,14	0,15	0,05
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,05	0,00	0,00	0,00
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,06	0,03	0,05	0,07	0,04
62	3,3-dimethylheptane	0,07	0,07	0,05	0,06	0,06
63	unidentified C9-Napthene	0,00	0,09	0,11	0,05	0,08
64	unidentified C9-Napthene	0,14	0,14	0,00	0,11	0,13
65	ethylbenzene	4,39	3,56	3,54	3,41	3,30
66	unidentified C9-Napthene	0,17	0,12	0,11	0,13	0,13
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,14	0,13	0,12	0,13	0,14
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,13	0,00	0,13	0,00	0,00
69	p-xylene	4,29	3,76	3,48	3,58	3,48
70	m-xylene	10,58	9,16	8,56	8,80	8,51
71	2,3dimethylheptane	0,04	0,04	0,04	0,03	0,04
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,05	0,05	0,04	0,05	0,05
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,07	0,07	0,06	0,06	0,05
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	6,08	5,29	4,89	5,03	4,91
78	unidentified Paraffin	0,12	0,11	0,10	0,10	0,11
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,17	0,15	0,13	0,14	0,14

	94 85%U95	95 90%U95	96 95%U95	
1	propane	0,01	0,01	0,01
2	iso-butane	0,54	0,48	0,46
3	n-butane	0,81	0,71	0,67
4	2,2 dimethylpropane	0,17	0,17	0,17
5	iso-pentane	17,46	15,72	15,83
6	n-pentane	3,59	3,31	3,34
7	2,2-dimethylbutane	1,92	1,84	1,90

8	cyclopentane	2,11	1,88	1,85
9	2,3dimethylbutane	2,10	1,99	2,05
10	2methylpentane	8,54	7,99	8,21
11	3-methylpentane	6,31	5,91	6,05
12	n-hexane	3,72	3,41	3,43
13	2,2dimethylpentane	0,48	0,12	0,12
14	methylcyclopentane+2,4dimethylpentane	2,28	2,66	2,72
15	benzene	2,06	1,93	1,96
16	3,3-dimethylpentane	0,00	0,06	0,06
17	cycloheptane	0,00	0,00	0,00
18	2methylhexane+2,3dimethylpentane	3,91	3,74	3,78
19	3-methylhexane	1,82	1,78	1,81
20	cis-1,3dimethylcyclopentane	0,00	0,31	0,33
21	trans1,3dimethylcyclopentane	0,26	0,14	0,15
22	3ethylpentane	0,67	4,49	4,36
23	trans1,2-dimethylcyclopentane	0,00	0,24	0,24
24	2,2,4-trimethylpentane	0,00	0,10	0,09
25	n-heptane	0,88	0,87	0,88
26	2,2dimethylhexane	0,00	0,09	0,10
27	2,5dimethylhexane	0,90	0,92	0,93
28	2,4dimethylhexane	0,56	0,57	0,56
29	3,3dimethylhexane	0,00	0,00	0,00
30	toluene+2,2,3-trimethylcyclopentane	15,09	14,16	13,96
31	1,1,2-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,13
32	2,3-dimethylhexane	0,10	0,12	0,04
33	2methyl-3ethylpentane	0,00	0,05	0,07
34	2-methylheptane	0,36	0,41	0,43
35	4methylheptane+3-methyl-3-ethylpentane	0,00	0,09	0,04
36	3,4dimethylhexane	0,00	0,00	0,09
37	1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane+1,cis-2,cis-4-trimethylcyclopentane	0,00	0,05	0,05
38	3-methylheptane+ 1,cis-2,trans-3-trimethylcyclopentane	0,08	0,18	0,18
39	3-ethylhexane+trans-1,4--dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00
40	1,1dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00
41	trans1,3ethylmethylcyclopentane	0,13	0,16	0,17
42	cis1,3ethylmethylcyclopentane	0,14	0,05	0,06
43	trans1,2ethylmethylcyclopentane	0,12	0,17	0,17
44	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,00
45	1,cis-2,cis-3-trimethylcyclopentane	0,00	0,00	0,00
46	trans-1,3-dimethylcyclohexane+cis-1,4-dimethylcyclohexane	0,17	0,08	0,08
47	n-octane	0,16	0,09	0,08
48	isopropylcyclopentane+2,2,4-trimethylhexane	0,06	0,05	0,05
49	unidentified C9-Naphtene	0,00	0,00	0,00
50	cis1,2-ethylmethylcyclopentane	0,00	0,09	0,09
51	2,2-dimethylheptane	0,00	0,00	0,00
52	cis-1,2-dimethylcyclohexane	0,00	0,05	0,05
53	2,2,3-trimethylhexane	0,00	0,00	0,00
54	2,4dimethylheptane	0,00	0,00	0,00

55	4,4-dimethylheptane+9N	0,00	0,13	0,00
56	ethylcyclohexane+n-propylcyclohexane	0,00	0,00	0,00
57	2methyl-4-ethylhexane	0,11	0,14	0,13
58	2,6dimethylheptane	0,12	0,07	0,14
59	1,1,3-trimethylcyclohexane	0,00	0,00	0,07
60	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00
61	2,5dimethylheptane	0,04	0,05	0,05
62	3,3-dimethylheptane	0,06	0,06	0,05
63	unidentified C9-Napthene	0,09	0,08	0,08
64	unidentified C9-Napthene	0,00	0,12	0,12
65	ethylbenzene	3,52	3,76	3,66
66	unidentified C9-Napthene	0,13	0,15	0,14
67	unidentified C9-Napthene+2,3,4-trimethylhexane	0,15	0,17	0,17
68	unidentified Napthene+Paraffin	0,00	0,00	0,00
69	p-xylene	3,66	3,61	3,52
70	m-xylene	9,02	8,94	8,70
71	2,3dimethylheptane	0,00	0,03	0,03
72	4-ethylheptane	0,00	0,00	0,00
73	4-methyloctane+2-methyloctane	0,04	0,05	0,05
74	3ethylheptane	0,00	0,00	0,00
75	3-methyloctane	0,05	0,06	0,06
76	unidentified C9-Napthene	0,00	0,00	0,00
77	o-xylene	5,21	5,10	4,96
78	unidentified Paraffin	0,11	0,12	0,11
79	unidentified Napthenes	0,00	0,00	0,00
80	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00
81	unidentified Napthene	0,00	0,00	0,00
82	n-nonane	0,14	0,14	0,14