

行政院及所屬各機關出國報告  
(出國類別：實習)

## 線上分析儀技術應用

服務機關：中國石油公司煉製研究所  
出國人職稱：化學師  
姓名：樊汝麗  
出國地區：歐洲  
出國期間：89年11月22日 ~ 89年12月5日  
報告日期：90年1月20日

I5/  
C08906399

# 線上分析儀技術應用

## 出國報告

### 目 錄

一. 前言:.....	1
二. 出國目的.....	3
三. 出國行程.....	3
四. 心得	
英國 BP Coryton 煉油廠重組工場 On-line NM 應用.....	3
德國 BASF 公司輕裂工場 NMR 應用.....	6
BP 法國 Lavera 煉油廠 TOPNIR 軟體研發應用.....	8
法國 Naphthachimie 石化廠輕裂工場 NIR 應用.....	19
五. 結論與建議.....	22

## 一、前言

近紅外光譜(NIR)因其波峰很寬、而且經常重疊，不適合直接用在定性或定量分析，曾經被認為是一段多餘的光譜帶，毫無用處可言。但它卻有一個很好的特性，即吸光係數小，約為一般紅外光譜(Mid-IR)的 1/10-1/100，因而可以使用較大光徑的樣品槽，而且比較不受樣品中微量雜質與大氣中水氣的影響。近年來，隨著電子科技快速發展，NIR 光譜儀搭配快速成熟的電腦軟硬體支援，結合多變量統計，已大大擴展其性能(如訊號/雜訊、穩定性、再現性等)與應用範圍(食品、材料、太空及煉油業等)。簡單地說，NIR 分析是一種結合光譜及統計技術的分析方法，屬於二級方法。此方法應用前，首先要建立欲測項目的檢量線，建立檢量線過程所需的樣品數據，必須具有充份的代表性，而且是由高準確度與精密度的分析實驗產生，才能使 NIR 檢量線在實際應用時的預測誤差縮減到最小；方法建立以後，若有應用範圍異動，則須適當修正檢量線，才能確保方法的準確性。由於 NIR 具備快速及高精密度的優點，且可同時測定油品多項物、化性質，目前已被國際油公司廣泛用來取代傳統儀器分析方法，以較高的時效和精密度協助提昇煉製操作效益。其中最主要是用在汽油摻配系統，做為汽油摻配最適化及實驗室品管之工具，縮小辛烷值變異範圍，提昇摻配效益；其次，NIR 亦被應用在製程上，做為追蹤進料與成品組成變化的工具，協助製程操作最適化。由目前 NIR 發展的速度，應用 NIR 提昇煉油

效益已經成為必然的趨勢。

本所分析部門近年積極投入 NIR 技術的開發與應用研究：應用實驗室型 NIR 發展出適合中油汽油之辛烷值(ROK)、苯(Bz)、芳香烴(A)、甲基第三丁基醚(MTBE)、烯烴(O)、環烷烴(N)及烷烴(P)等特性的快速預測模式，以這些模式來預測上述各性質，只需 3 分鐘即可完成一支樣品分析，而且分析結果的準確度與重覆度也與這些標準方法相當。

另外配合大林廠汽油摻配工場引進線上 NIR 分析儀，亦積極協助建立 NIR 系統之資料庫模式，並進行 NIR 檢量線更新及維護工作，協助摻配調整。

Foxboro 為使 APC 在石油石化製程應用能發揮功效，四年多前推出線上 NMR 分析儀來監控進出料品質，目前已陸續應用於汽油摻配、重組、輕油裂解、原油蒸餾等製程。

Foxboro NMR 是 60MHz pulsed H NMR，觀察油料中 proton NMR 的變化，其應用原理與 NIR 類似，是二級分析方法。先建 NMR 光譜和標準分析方法的資料庫，再利用 Gram32 PLS 建立檢量線。NMR 的優點是不怕水份、雜質，在黑油分析方面有其利基優勢，如原油、RFCC 進料的品質預測，也可以預測油料中的水份含量(ppm - %)。由於 NMR 不怕水份、雜質，Foxboro 強調 Sampling system 相對也簡單許多，維護工作也簡便。

## 二、出國目的：

前往英國與德國石油石化廠參觀討論線上 NMR 之應用及其取樣系統設計與維護流程，以了解比較 NMR 和 NIR 兩種分析技術之優缺點。另配合高廠輕油工場新購線上 TOPNIR 系統之引進，拜訪 EUTECH 公司，研習汽油摻配線上 TOPNIR 分析軟體之應用。

## 三、出國行程：

起訖日期	天數	到達地點	詳細工作內容
89.10.24~ 89.10.24	1	英國 倫敦	拜訪英國 BP 石油公司 Coryton 煉油廠，參觀討論線上 NMR 分析儀在重組工場之應用，並了解其取樣系統設計及維護流程。
89.10.25~ 89.10.28	4	德國法蘭 克福	拜訪德國 BASF 輕裂工場，參觀討論線上 NMR 分析儀之應用。
89.10.29~ 89.11.3	5	法國 馬賽	拜訪 EUTECH 公司，研習汽油摻配線上 TOPNIR 分析系統軟體之應用。

## 四、心得

### 英國 BP 石油公司 Coryton 煉油廠重組工場 On-line NMR 應用

Coryton 煉油廠的汽油摻配工場 10 年前就已安裝 Bomem FTIR 線上分析儀，用來監測汽油的 RON、MON、苯含量、芳香烴含量等

特性，且與實驗室 FTIR 結果做確認(validation)，其辛烷值白贈值為 0，顯示 on-line FTIR 應用非常良好且累積相當多的經驗。

重組工場原本使用 Monirex RON 分析儀，但故障率高，另外歐洲的汽油苯含量降為 2%，且 2003 年芳香烴含量也要管制，所以需要一套可靠的線上分析儀監測重組油的苯含量在 2%以下，但儘量維持在 2%，而 RON 控制在 102-107 之間，平均為 105。為了要監控 RON、MON、苯含量及芳香烴含量，重組工場原本打算依汽油摻配模式採用 FTIR 系統，且由實驗室負責重組油檢量線的建立與確認，但 Foxboro 公司願意提供其 On-line testing，滿意後再付款。On-line NMR 於 1999 年 3 月安裝，前六個月遇到一些困難，主要是 data system 和 software communication cables 等問題，如作業系統從 DOS 改為 microsoft NT，硬碟須為 dual hard disk drive，以便隨時將數據資料做備份。問題克服後，這一年來使用狀況良好。

重組油的 NMR 檢量線建立方式是，先收集代表性油料，分別測其 ASTM 標準分析結果(RON、MON、苯含量、芳香烴含量)與 NMR 光譜，再由 Foxboro 工程師利用 Grams32 Partial Least Square 軟體建立檢量線，目前檢量線維護仍由 Foxboro 公司負責，未來可能交由分析實驗室人員負責。

至於 Sampling System 主要的維護工作為濾網更換，約兩個月更換一次。而 Flowing sample tube 之開關閥曾洩漏一次，將備品更

換即可，因此 Sampling System 及 NMR 儀器本身使用上確實可靠。

NMR 檢量線實用方面，最先從 40 支樣品開始，逐漸增加樣品修正，目前所使用的檢量線為七個月前所建，只要操作變化不大( RON 102~107)，檢量線預測良好。苯的預測誤差約 0.5%，RON 值與實驗室 CFR 引擎及 FTIR 預測值比較，相差在一個 RON 值以內。若能將苯含量維持在 2% 且不超過，則最佳的利潤為每天 3500 元美金。

NMR 預測結果與 DCS 連線做 DMC 控制，反應時間約 30 分鐘，未來考慮接 APC，以使操作控制能更及時。

至於摻配工場已於 10 年前安裝 FTIR(mid-IR)，以 PLS 建立汽油 RON、MON、苯及芳香烴檢量線，協助摻配操作調整，檢量線由分析實驗室研究員維護，目前的辛烷值白贈可以控制在 0 個 RON。最近因不小心含蠟的裂解油料污染到系統，使得檢量線預測較不準確。由於此系統已使用很長的時間，因此考慮安裝一套 on-line NMR 同步比較，以備不時之需及日後取代 FTIR。

汽油摻配時 RVP 監測主要是靠 on-line RVP 分析儀，FTIR 或 NMR 可提供 RVP 變化趨勢，或 RVP 分析儀故障時，暫時取代之。

儀電部門有五位工程師、三位技術員，負責 electric analyzer 及 instrument analyzer 維護工作，工作量相當大，亦包括新儀器技術評估及採購。日常維護著重在預防性保養，每天早上從辦公室電腦的 PI 系統檢查分析儀數據，了解儀器運作是否正常，然後安排當天的工

作，主要是 inspection 及儀器校正，另外濾網更換也是必要的，確保分析儀 95% 以上的時間都正常運作。耗材及儀器零件應有充足的備品以便隨時更換，每人至少負責 30 台分析儀的維護保養。

分析部門雖負責汽滲工場 FTIR 檢量線的維護，主要工作仍著重在實驗室的儀器分析，其與現場 on-line 儀器數據的一致性，仍需加強。目前的走勢傾向分析實驗室也將 on-line 分析儀數據品質確認（準確度與精密度）納入其工作職責，屆時現場 on-line 分析儀與實驗室儀器數據一致性的差異應會降低。

#### 德國 BASF 公司輕裂工場 NMR 應用

德國 Ludwigshafen 的 BASF 有兩座輕裂工場，一座建於 1963 年 (ABB-Lummus)，乙烯年產能 25 萬噸，另一座建於 1980 年 (LINDE)，乙烯年產能 45 萬噸。Dr. Kaiser 負責 SPYRO 軟體應用，對整個工場的操作性能做最適化的建議與調整，這也包括進口 Naphtha 進料的選擇。

Naphtha 進料組成一直利用 Seimens on-line GC 監測 (Capillary Column-Detailed Hydrocarbon Analysis, DHA)，同時也定期取樣送實驗室分析做品質確認。實驗室 PIONA 分析儀為 PE 廠牌，但 GC 層析圖波峰滯留時間若有偏移，則定量結果需手動重新計算。由於 Seimens on-line GC 分析時間較長（~2 小時），且維護較不容易，因此當 Foxboro 公司去年開始推廣 on-line NMR 這個新技術時，就提



供給 Dr. Kaiser 試用，因為 BASF 是 Foxboro 的主要客戶之一。

BASF 的輕裂進料 Naphtha 來源有數種，主要是利用航行於萊茵河的船支運至油槽區存放，目前沒有做進料摻配來降低組成變化，但未來會朝此方向進行。

另一個採用 on-line NMR 的原因是其測量時間約 2~3 分鐘，相較於 on-line GC 的兩小時，較能即時掌握 Naphtha 組成變化，因為 BASF 認為 Naphtha 在油槽中會有分層現象。

on-line NMR 於 2000 年 4 月安裝於輕裂工場監控 Naphtha 品質，先以 100 支左右的樣品建立 NMR 檢量線（每週取樣 5 支，共兩個月），分別以實驗室型 NMR 測量 NMR 光譜，實驗室 GC 分析 Naphtha 詳細組成。初步的 NMR 檢量線建好之後，再進行確認 (validation)。檢量線建立及修正工作大約花了半年時間，到 2000 年 9 月 on-line NMR 已可提供即時的 PIONA 數據，對 SPYRO 軟體運算及結焦指數(coking index)預測很有幫助。

經濟效益方面 BASF 不願說明，只表示 on-line NMR 的 Sampling system 設計簡單，因為 NMR 的特點是不受樣品中水份及雜質影響（鐵銹除外），因此不需要除水器(Coalescer)，管線若含有鐵銹就要加裝濾網過濾。Dr. Kaiser 表示硬體維護簡便，主要是檢量線的維護較為重要，才能確保預測誤差在可接受範圍內。

## BP 石油公司法國 Lavera 煉油廠 TOPNIR 軟體研發應用：

1975 年 BP 生產 PU 泡棉時，發現其 hardness 很難控制恰當，試過以 NMR、GC、IR 等分析方法都沒有找到很好的品管方法，但有一位技術員發現在 NIR 可以有效品管 PU 泡棉的 hardness，而當時使用的定量方式是最原始的波峰面積稱重。BP 從這個成功案例，逐步將 NIR 應用到其他製程領域，並改進、發展好的定量工具而完成 TOPNIR 軟體商品。

1980-1985 將實驗室型 NIR 應用於汽油中 RON、MON 預測，利用 MLR(Multiple linear Regression)、PCR(Principle Component Regression)、PLS(Partial Least Square)等化學計量法，預測結果良好，基於在實驗室應用成功，因此考慮往 on-line 系統發展，協助製程操作。

1986-1989 在開發 on-line 分析技術時，遇到許多困難

硬體方面：— Sampling System 設計

- NIR cell (樣品槽) 設計
- Multiplexer 設計以便可同時監測多股油料。
- 硬體與軟體方面的整合。

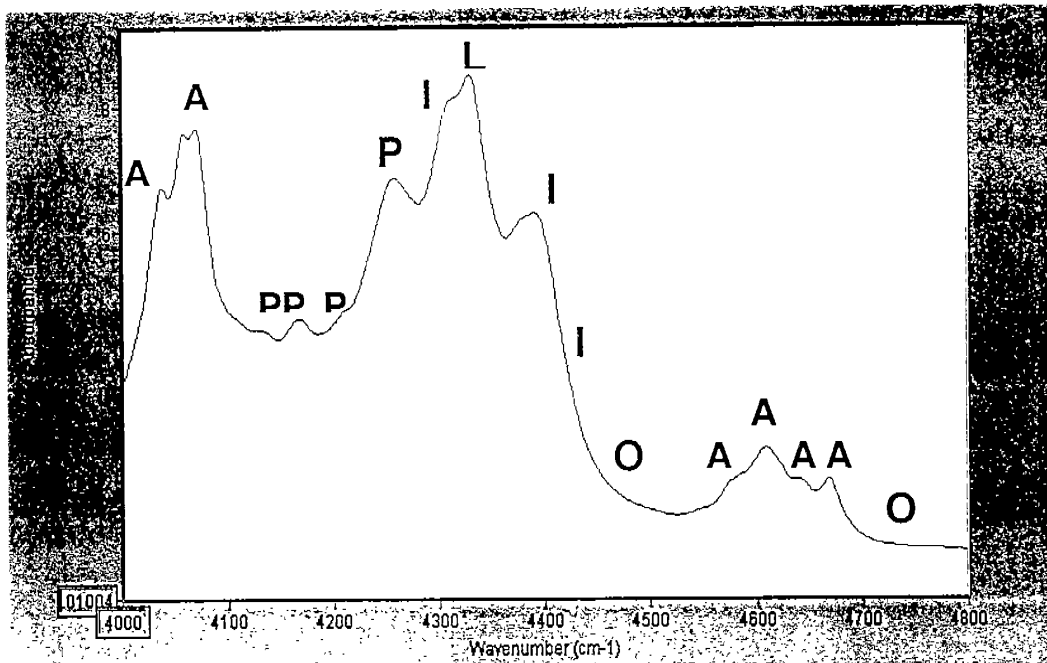
軟體方面：— Sampling System 的控制軟體(AS 300)

- 光譜儀控制軟體(Bomem Gram32)
  - MLR、PCR、PLS 等統計迴歸軟體
- 不夠完善，(1)檢量線維護成平高(2)當預測 RON、MON、D86、RVP 等特性時，會遇到非線性情況(3)迴歸軟體完全基於數學模式，與油料組成之化學結構、摻配配方沒有關連。

- |           |  |
|-----------|--|
| 1989-1990 | 開始發展 Topology 技術   |
| 1991      | TOPNIR(Topology)應用於輕裂工場  |
| 1991-1994 | 將 TOPNIR 技術應用於其他製程   |
|           | 汽油摻配   |
|           | 原油蒸餾   |
|           | 煤裂   |
|           | 重組   |
| 1995      | BP 開始 TOPNIR 技術的商業化  |
| 1999      | EUTECH 公司買下 BP TOPNIR 技術，目前 TOPNIR 小組成員 7 人。全世界大約有 40 套 TOPNIR 應用於煉油及石化業，其中有 4 套安裝於輕裂工場。 |

1988 年至 1990 年選取 49 種單一碳氫化合物建立 NIR 光譜資料庫，再利用 PCA(Principle Component Analysis)將 PIONA 類別分

類(discriminate)，其對應之 NIR 光譜吸收區段，可以在圖譜上標明出來。



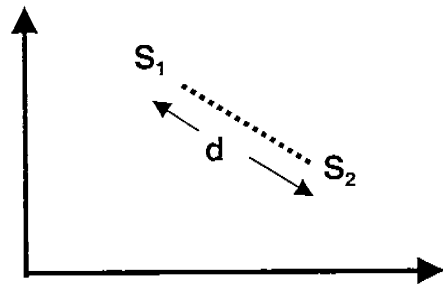
另外根據成品汽油及其摻配油源 (FCC、Isomate、Reformate、Alkylate、SRG.....) 的 NIR 光譜建立光譜資料庫，以其 PIONA 特性及含量畫出 Spectral aggregates，並參照摻配配方變化的歷史資料，定義出 Spectral boxes。

TOPNIR 技術的假設為相同的 NIR 光譜表示為相同的樣品，則有相同的品質特性。但每一台儀器設備重複多次測出的樣品光譜吸收不會完全一樣，即儀器的再現性，因此同一樣品重複測量多次所得之變異範圍稱之為 Identity Sphere (IS)，當比較兩支油料樣品 NIR 光譜的相似性時，需要利用數學公式定義出兩光譜的相異距離 (Distance)

$$S_1=(A_1, A_2, A_3, A_4, \dots, A_n)$$

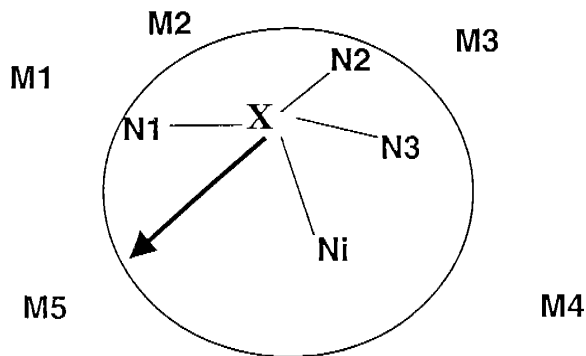
$$S_2=(A'_1, A'_2, A'_3, A'_4, \dots, A'_n)$$

其 Euclidian distance 為



考慮n個dimension

依據 Identity Sphere 觀念及 ASTM 分析方法的再現性可定義出 Calculation Sphere(CS)範圍，以預估樣品特性。



$$\hat{P}_x = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma_i P_{Ni}}{n}$$

CS 若太小，則特性預測準確，但不易在資料庫中找到相鄰類似的油料樣品(neighbors)；CS 若太大，特性預測較不準確，但在資料庫中可以找到較多的相鄰油料樣品計算品質特性，通常 CS 範圍大小的設定以各分析項目 ASTM 再現性(Reproducibility)為最大限制。

Topology 應用困難點在於，如果檢量組數據在 spectral box 中的分佈不夠密集，那就會有空隙(space)存在，而使得預測誤差變大，

也就是說未知樣品光譜必須要在 Spectral box 中找得到相鄰類似的油樣光譜，才能計算出品質特性，因此數據資料庫要非常龐大，另外未知樣品在 Spectral box 中所找到的相鄰類似油樣必須是合理恰當的，因此要有很好的辨識工具(discriminate tool)來達到這個目的。

為解決上述缺失，EUTECH 發展出 Densification 技術以便製造出很多虛擬樣品，使資料庫變得很龐大；同時根據油樣 NIR 光譜之 PIONA 吸收強度定義出 spectral aggregates，依製程進出料品質變化範圍定義出 spectral boxes，spectral aggregates 的定義有下列數種區分：

KARO = 與輕質芳香烴類較有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 Light reformates )

NARO = 與重質芳香烴類較有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 Heavy reformates)

KENE = 與輕烯烴較有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 Light FCC)

NOLEF = 與重烯烴較有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 Heavy FCC)

KISO = 與 Isoparaffins 有關之 NIR 光譜吸收特性(如 Isomerates, Alkylates)

KCY = 與 Naphthenes 有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 Straight run gasolines, Hydrocracker gasolines)

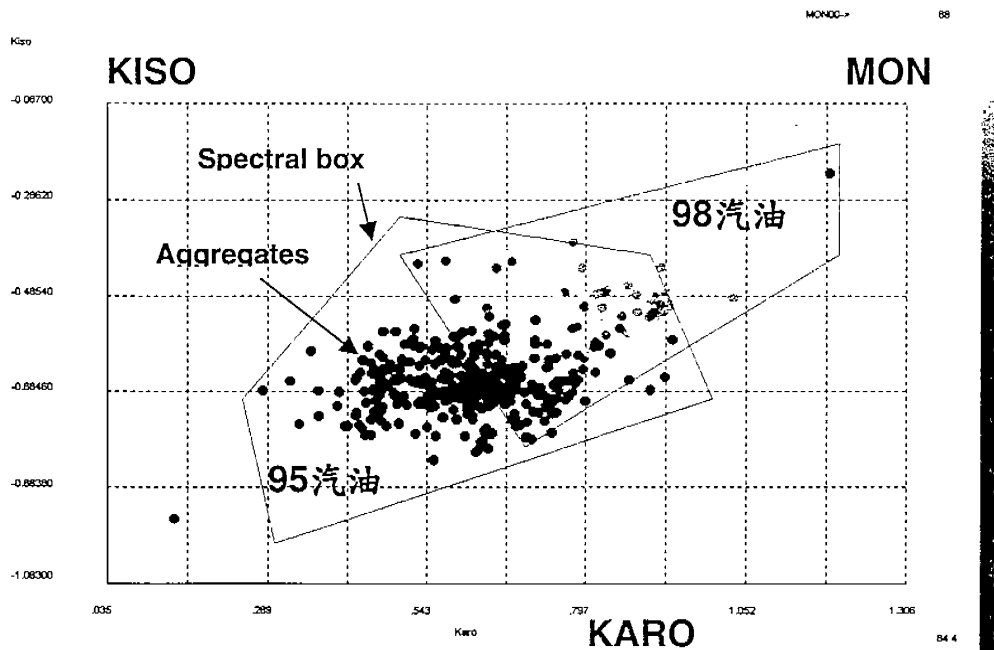
KOX = 與醇類 Oxygenates 有關之 NIR 光譜吸收特性 (如 MeOH、EtOH)

PAROX=與醚類 Oxygenates 有關之 NIR 光譜吸收特性(如 MTBE、TAME)

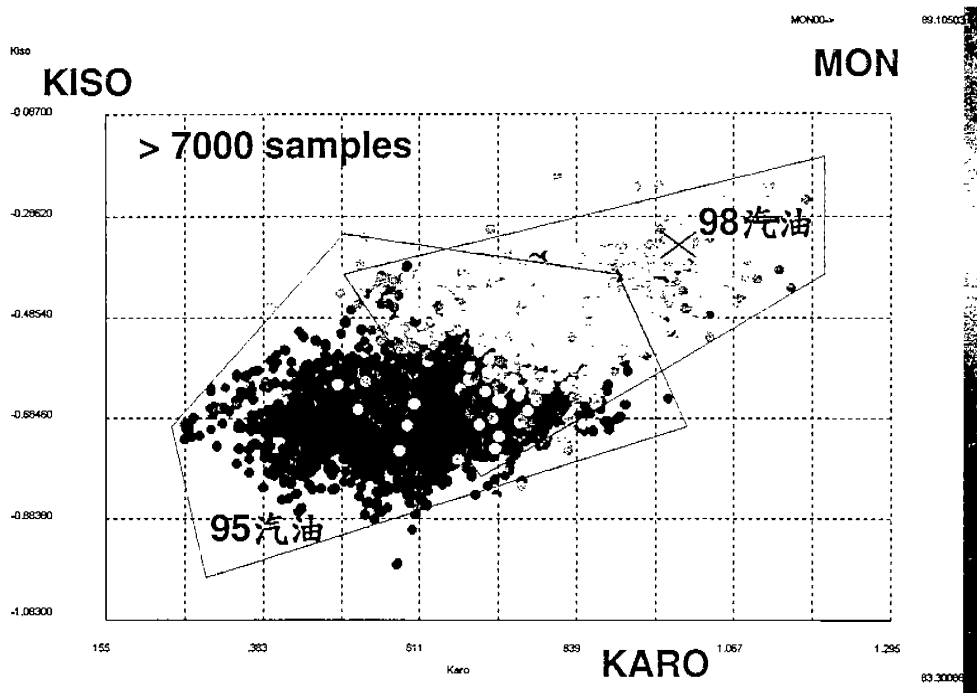
結合 Spectral aggregates, PCA 及摻配配方資料就可以定義出 Spectral boxes。

無論是成品汽油或是摻配油源都可繪出適當的 Spectral boxes，此時若資料庫內的數據不夠多，不足以填滿 Spectral box 內的空間，就必須藉助以 Monte Carlo 運算方式發展出的 DENSIFICATION 技術來填滿空間。經由 Densification 可將原本實測的樣品數組合而虛擬出 10 倍以上的虛擬樣品，以便未知樣品可以很容易地找到適當的相鄰類似油樣進行品質特性預測。

Densification 前



Densification 後



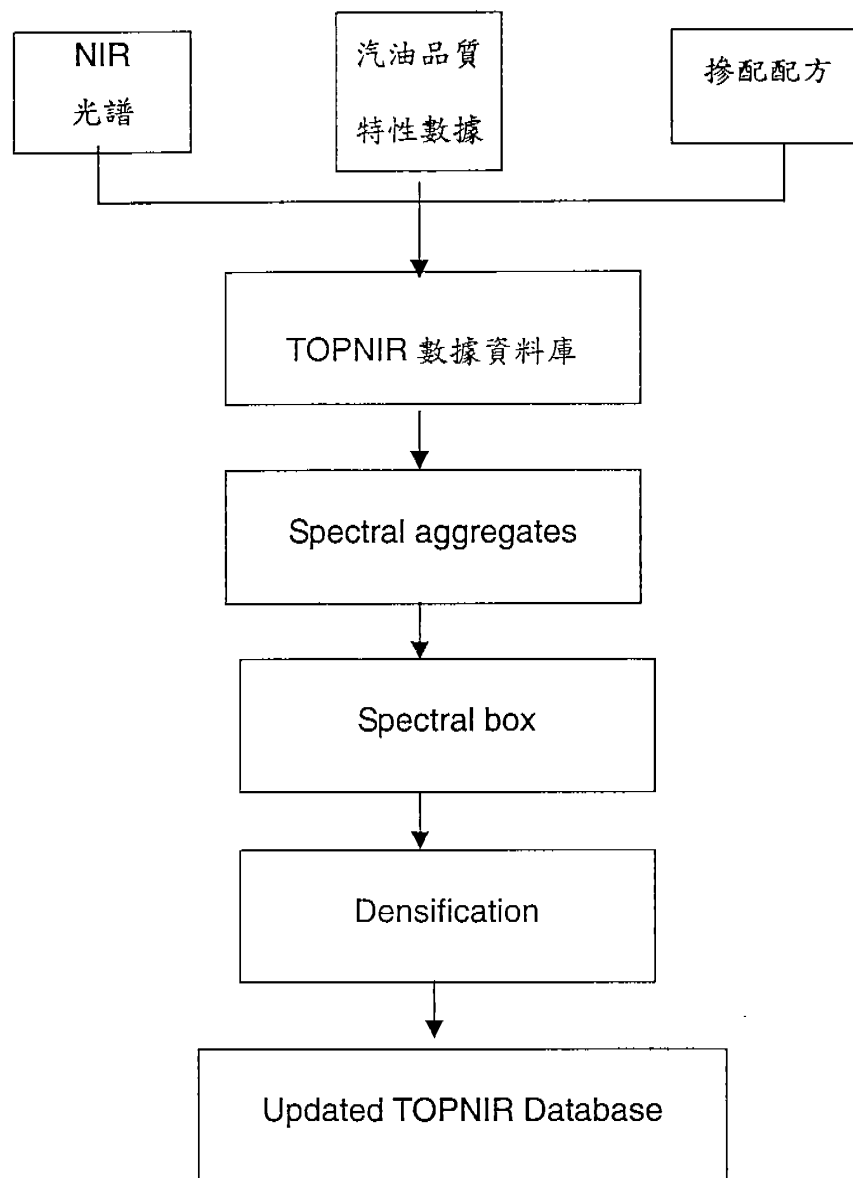
Densification 是 TOPNIR 的關鍵技術，從成品汽油 NIR 光譜和  
摻配油源樣品之 NIR 光譜，可將 densification 方式分為：

1. Internal Densification：成品汽油 NIR 光譜之間的組合。
2. External Densification：成品汽油與摻配油源 NIR 光譜之間的組合。
3. Local Densification：當未知油樣落在 spectral box 內的空間且周遭沒有相鄰類似油樣時，可利用 TOPNIR 自行虛擬出約 4000 筆小區域虛擬樣品(Local Artificial Samples)，以便計算這支所謂 inlier 的未知樣品特性。當未知油樣落在 spectral



box 範圍界限外但接近 box 邊緣時(outbox samples) , TOPNIR 亦可以 Local densification 方式計算此 outbox 樣品特性。Inlier 和 outbox 樣品均應取樣進行 ASTM 標準方法分析品質特性，再將之加入原有的品質數據資料庫中，以便修正預測模式。

- 4.若未知油樣落點在 spectral box 外圍且距離較遠，此樣品稱之為 Outlier 樣品，TOPNIR 就不會計算預測結果，此類樣品需補做 ASTM 品質特性分析，加入原有資料庫後，再一次重覆模式建立步驟。



根據 Beer's Law，NIR 光譜吸收之間的組合是線性加成的，但汽油摻配結果的品質特性則是非線性加成的。如 x% A 與 (100-x) % B 混合成 M

$$P_M = xP_A + (1-x)P_B + \delta$$

此  $\delta$  是非線性係數，必須考慮摻配配方及摻配指數(Blending Index, BI)：

$$\text{即 } P_M = xBI_A + (1-x)BI_B$$

例如：95 無鉛之 RON 為 95.0，當添加 10% 的重組油(RON=98.0)後，測得之 RON 值為 95.2，則重組油的 RON 摻配指數為何？

$$0.9 \times 95.0 + 0.1 \times BI_{REF} = 95.2$$

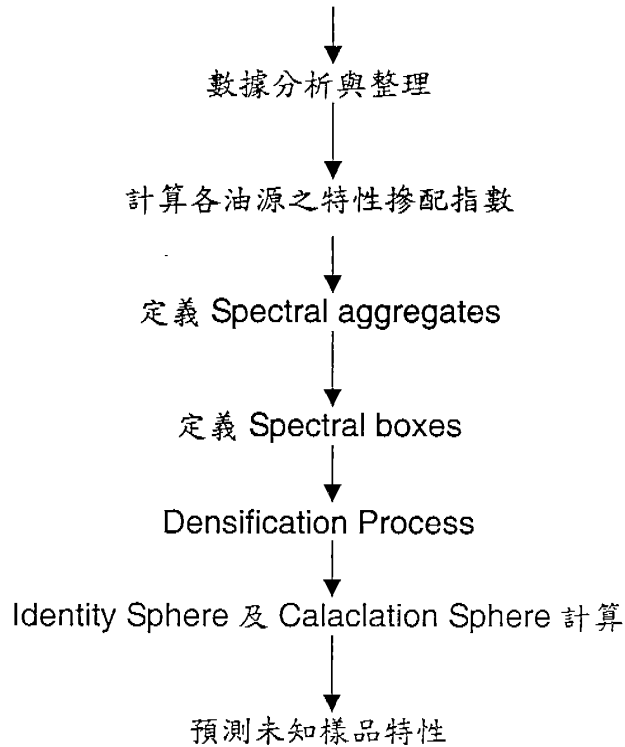
$$BI_{REF} = \frac{95.2 - 95 \times 0.9}{0.1} = 97.0$$

BP 公司現有之摻配配方資料庫龐大，利用其自行發展的軟體，可計算不同摻配油源在不同摻配比例下的摻配指數。一旦摻配指數確定後，就可以開始 Densification 步驟，一般建立 TOPNIR 模式步驟如下：

摻配配方歷史資料

成品汽油品質特性及 NIR 光譜

摻配油源品質特性及 NIR 光譜



TOPNIR 技術與一般 PLS 技術不同之處為：

- 1.考慮摻配配方變化
- 2.考慮摻配油源之摻配指數
- 3.從摻配配方變化定義出 Spectral boxes 範圍
- 4.從 NIR 光譜吸收特性定義出 Spectral aggregates
- 5.Densification 計算虛擬樣品品質特性

由於 TOPNIR 分析系統是在 BP 石油公司的法國 Lavera 煉油廠

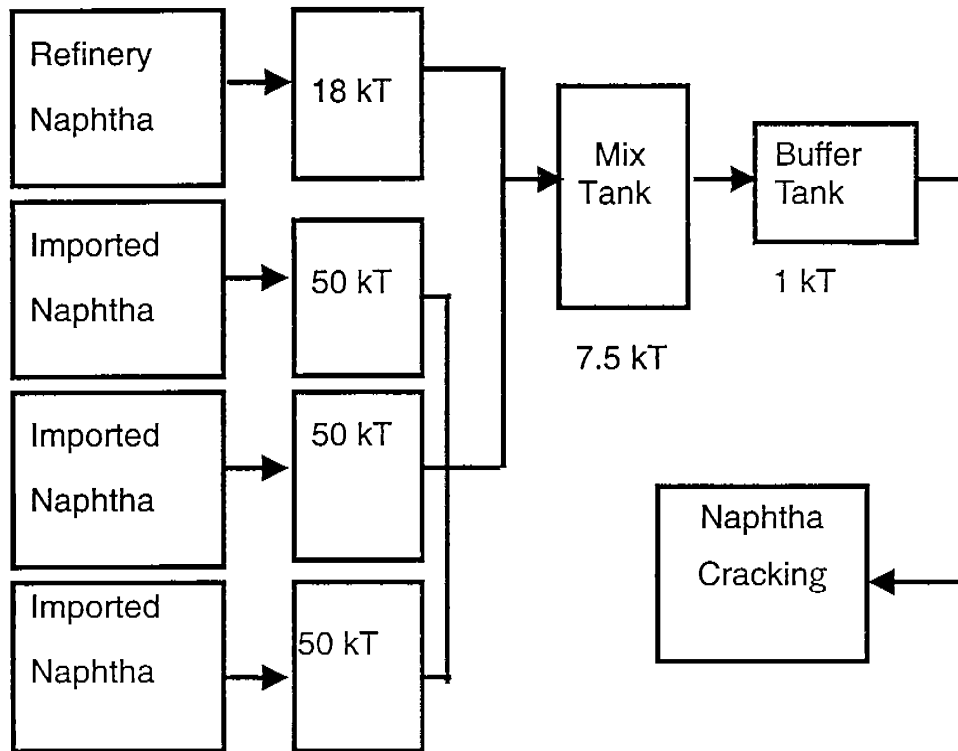
研發成功的，因此在這個煉油廠安裝了多套 TOPNIR 系統。1992 年開始應用於汽油摻配工場，並陸續使用於原油蒸餾(1994 年)，重組工場、FCC 工場及柴油摻配工場。汽油摻配 TOPNIR 模式經持續不斷地修正，已可將 RON 白贈值降為零，每月節省 10 萬美金。在原油蒸餾方面，因 Lavera 進口原油每年約 30 種，大部份來自中東，其次是俄羅斯，少量來自北海及西非，原油槽有 7 座(60~80 K Tons)，靜置時間兩小時至兩天不等，其後再經摻配儲存於較小容量油槽(20 K Tons)作為原油蒸餾工場進料(日煉 20 萬桶)。由於原油槽切換頻繁(約每 15 小時切換一次)，因此在蒸餾工場安裝兩套 TOPNIR 分析系統，可監測原油及蒸餾餾份品質。

TOPNIR 同時應用於操作工場製程控制及實驗室品管，整廠進出料品質數據具一致性，因此製程控制軟體所需檢驗數據與線性規劃軟體(PIMS LP)數據都來自 TOPNIR 模式預測結果，Optimization 的可靠度提高，去年 Lavera 煉油廠的利潤為一億美元(100 million)今年(2000 年)預期會更好。

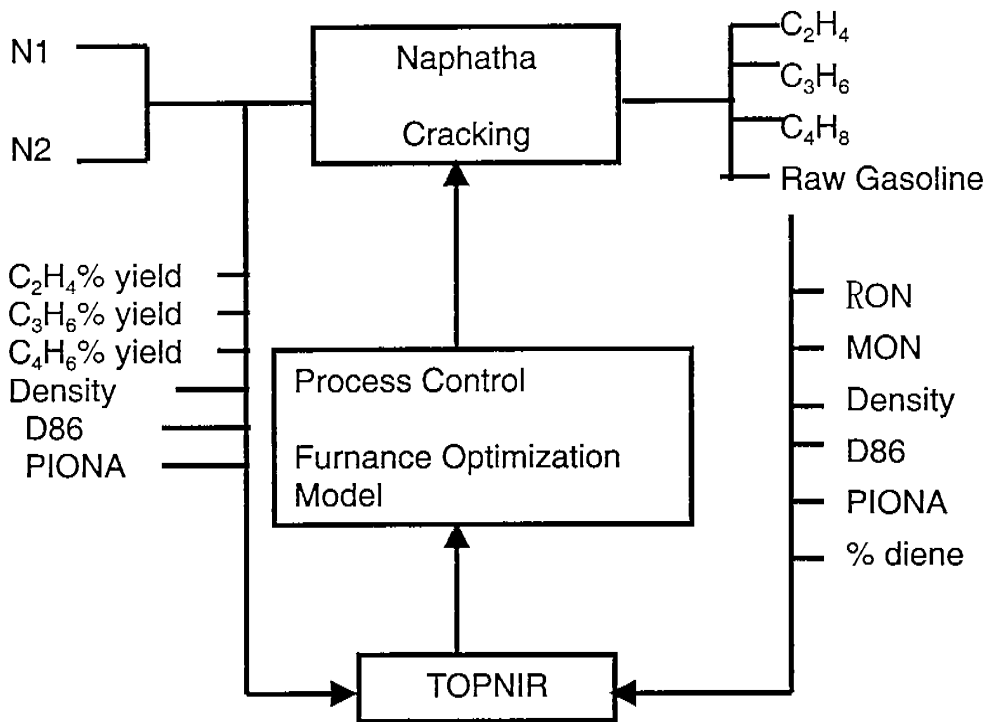
#### 法國 Naphthachimie 石化廠輕裂工場 NIR 應用

法國 Lavera 的 Naphthachimie 石化廠由 BP 50%和 TOTAL-FINA-ELF 50%合資，其輕裂工場進料來源有二，一為來自煉油廠的 naphtha(18K Ton)，存放於一個油槽，另一為進口 naphtha(50K Ton)共分三座油槽存放。兩股 naphtha 於一容量 7.5k Ton 的油槽混合，再

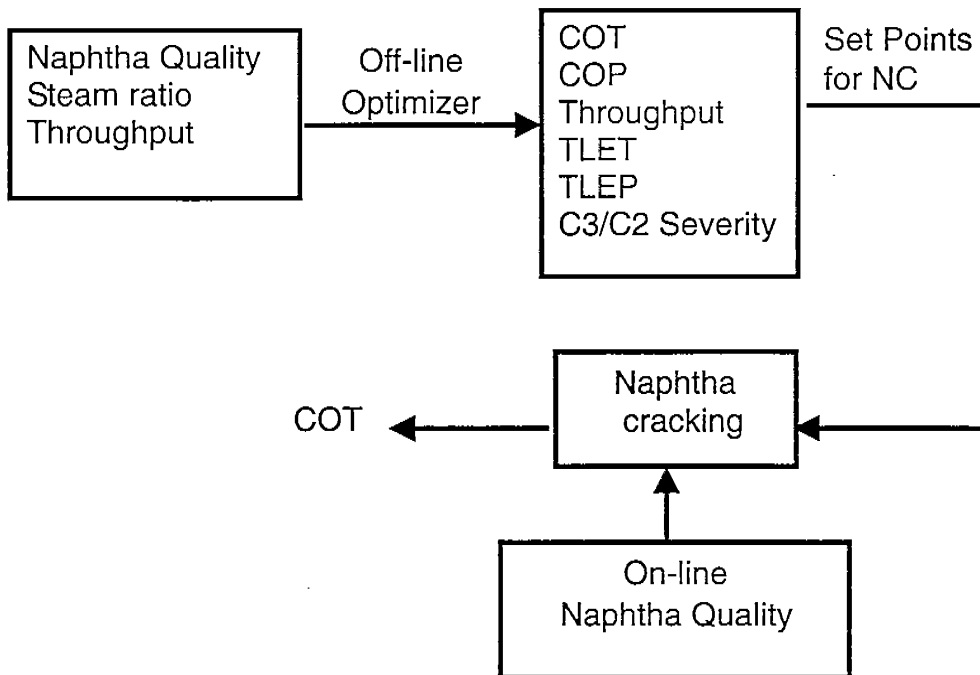
經一座 1000 公噸的緩衝油槽 (Buffer tank) 進入輕裂工場反應。



為監控進料 Naphtha 品質，於 1990 年安裝 UOP Guidedwave NIR, 但於 1991 年改為 Bomem FTNIR, 因為認為 FT 比 Grating NIR 穩定性佳，並以 TOPNIR 模式軟體取代 PLS 模式來預測 Naphtha 品質與裂解汽油品質。進料品質預測項目包括 PIONA、密度、D86 蒸餾溫度、乙烯、丙烯、丁二烯產率及結焦指數(coking index)。裂解汽油品質預測項目為 RON、MON、PIONA、密度、D86、%diene 等。



此座輕裂工場有 20 支爐子，其控制方式如下：



此套 NIR 系統至今已運作 9 年之久，平日的維修包括：(1)每半年更換 NIR 光源，(2) 每兩週定期更換 sampling system 過濾雜質的濾網(10  $\mu$ m)及除水器 (coalescer) 濾網(2  $\mu$ m)，(3)由於 NIR sample cell 溫度控制在 20°C，所以要定期檢查冷卻循環槽溫控是否達到要求，(4)TOPNIR 數據資料庫需定期修正更新(update)，每月取樣分析一次，以確保模式的適用性。

## 五、結論與建議

1.On-line NIR 與 On-line NMR 兩種分析技術均是二級分析方法，利用光譜圖與油品品質特性建立相關模式（檢量線），經持續修正可使未知樣品預測更為準確，由於光譜儀分析快速(~2min)，非常適合製程線上控制之用。線上分析儀要能充份發揮功能，除了分析儀本身穩定性高、分析準確度與精密度佳、分析快速、操作簡便外，Sampling system 的設計與維護更是非常重要的關鍵，線上分析系統 95%以上的故障率起因大多是由於 Sampling system 的零組件故障，因此定期的預防性維護保養非重要。

2.On-line NMR 在英國 BP Coryton 煉油廠的重組工場及德國 BASF 石化廠的輕裂工場應用成功，且因 NMR 儀器不受水份及雜質干擾的特性，使得 Sampling system 設計簡化許多，且不要化費太多資源在維護上，在製程線上應用有其特殊的利基。由於 NMR 技術商業化時間較短（4 年左右），相較於 NIR 20 年的研發應用經驗，使



得 NIR 在煉油及石化領域應用已成為業界的標準(standard)，因此 NMR 檢量線的穩健度與適用性尚需經歷較長時間的考驗。有鑑於此，Foxboro 公司為了打入市場以「先提供設備測試，滿意後再購買」的方式給客戶試用。本公司大林廠也採類似方式，以蒸餾工場進料原油為測試標的，期能即時監控混合原油 API 及 TBP 的變化，協助操作調整；另外原油的黏度低，且含有較多的雜質，因此在 Sampling system 操作與維護簡便的誘因下，探討 on-line NMR 在原油蒸餾的應用可行性。目前正在本所進行第一階段實驗室型 NMR 的原油特性測量以評估原廠 NMR 檢量線模式的實用性，第二階段則以 on-line NMR 驗證檢量線的適用性。

3. on-line TOPNIR 分析系統 1991 年首次應用於輕裂工場，之後陸續應用於汽油摻配及其他重要製程，但仍以在汽油摻配降低 RON 白贈值所獲得的效益最大，除 RON 外，其他環保規範項目如 RVP、苯、芳香煙、烯煙、E200、E300 等也可同時預測，如能結合製程高階控制進行即時最適化調整(APC-Optimization)，摻配作業才有可能在最經濟有利的考量下，生產出符合規範的產品。高雄煉油廠在 2000 年引進 TOPNIR 系統，用來監測成品汽油的各項品質特性，未來可針對品質特性變化較大的摻配油源，也建立 NIR 檢量線進行前饋控制。
4. 本公司三座煉油廠均已引進 on-line NIR 分析系統，協助摻配作業降

低 RON 白贈值，並生產出符合環保要求之產品，各煉油廠結構雖不盡相同，但 NIR/NMR 在其他製程進出料品質監控方面應用也有其優勢，因為一旦檢量線建立就可快速預測進料與產品品質的變化，迅速掌握製程動態。

(1)重組工場

進料：API、D86、PIONA

產品：RON、API、D86、PIONA

(2)輕裂工場

進料：API、D86、PIONA

裂解汽油：RON、API、D86、PIONA

(3)原油蒸餾

進料：API、TBP

餾份：LSR (API、D86、PIONA)

HSR (API、D86、PIONA)

Kerosene (API、D86、Aromatics、Freezing point)

LD & HD (Cetane Index、API、D86、Aromatics、Pour Point、flash Point、Viscosity)

(4)柴油摻配：API、D86、CI、Aromatics、flash point、Pour Point、CFPP

(5)FCC 工場

進料：API、Viscosity

## FCC 汽油：RON、API、PIONA

5. NIR/NMR 檢量線建立是先實驗室型儀器上測量光譜，再利用 PLS 或 Topology 軟體與 ASTM 標準參考方法數據結合，找出相關性以預測未知樣品特性。由於光譜儀本身性能穩定性佳，非常適合作為實驗室的品管工具，取代原來使用之傳統 ASTM 方法，可節省實驗室人力資源，並快速提供檢驗結果給現場操作單位，掌握時效。如果煉製工場人力可彈性調整運用，甚至可以考慮將光譜儀安裝於控制室旁，隨時取樣分析以協助製程調整 (at-line 分析)。
6. 本公司為保障消費者權益，均定期前往各地加油站抽驗汽柴油樣品，以確保油品品質符合規範。近來空污費徵收，使得產品品質控制與監測更為重要，NIR 秉其快速，準確的特性，適合以 mobile lab 的方式快速篩檢加油站汽柴油品質，分析結果落在規範邊緣或不符合規範者再攜回實驗室分析確認。
7. 以 NIR 為實驗室品管及篩檢工具概念，可推廣至油品行銷事業部北中南化驗中心及各油庫之例行性汽柴油品質檢驗，因為一次分析即可預測多項規範項目：
- 汽油：RON、Density、D86、Bz、Aromatics、Olefins、MTBE、RVP
- 柴油：Cetane Index、API、D86、Aromatics、Pour Point、flash Point、Viscosity