



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

***Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου***  
***Ζωής Προϊόντων Βιοδιυλιστηρίου***  
***Βασισμένα στη Μοριακή τους Δομή***



**ΓΕΩΡΓΙΑ ΤΣΑΓΚΑΡΟΠΟΥΛΟΥ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ : ΑΝΤΩΝΗΣ ΚΟΚΟΣΗΣ**

**ΤΟΜΕΑΣ II: ΑΝΑΛΥΣΗ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ & ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ**

**ΑΘΗΝΑ**  
**ΙΟΥΛΙΟΣ 2014**

## Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στην σχολή Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ και στο Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH Ζυρίχης).

Οφείλω να ευχαριστήσω:

Αρχικά τον επιβλέποντα της εργασίας, τον καθηγητή κ. Αντώνιο Κοκόση, για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον θέμα, για την στήριξη και την καθοδήγησή του καθ'όλη την διάρκεια της εκπόνησης.

Τον επικεφαλής του Safety and Environmental Technology Group του ETH, Dr. Konrad Hungerbühler για την ευκαιρία συνεργασίας με το ETH, το ενδιαφέρον και τη στήριξή του.

Τον Δρ.Στάυρο Παπαδοκωνσταντάκη (Senior Research Assistant, Lecturer, ETH), για την αμέριστη βοήθειά του, τις συμβουλές και την εμπιστοσύνη που έδειξε στο πρόσωπό μου κατά την παραμονή μου στο ETH.

Την υποψήφια διδάκτορα Παρασκευή Κάρκα για την βοήθεια και κατανόηση που έδειξε σε όλο το διάστημα μέχρι την ολοκλήρωση της εργασίας. Η στήριξή της ήταν καθοριστικής σημασίας τόσο στο ΕΜΠ όσο και στο ETH.

Την διδάκτορα Cecilia Pereira και την υποψήφια διδάκτορα Sara Badr, για τις πολύτιμες πληροφορίες και την βοήθεια που μου παρείχαν.

Όλα τα μέλη του Safety and Environmental Technology Group του ETH, για την φιλοξενία και την ευχάριστη ατμόσφαιρα που αποτέλεσε πηγή έμπνευσης.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φίλους μου και την οικογένειά μου για την υπομονή και την ηθική στήριξη που μου προσέφεραν, όπως πάντα.

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η βιομάζα αποτελεί μία από τις πιο διαδεδομένες μορφές ανανεώσιμης ενέργειας σήμερα σε παγκόσμιο επίπεδο. Χάρη στην τεχνολογική πρόοδο των τελευταίων ετών, διαθέτει εξαιρετικές προοπτικές ώστε να καλύψει μελλοντικά ένα σημαντικό κομμάτι της ενεργειακής παραγωγής.

Ο περιβαλλοντικός αντίκτυπος των προϊόντων από βιομάζα είναι δυνατόν να ποσοτικοποιηθεί και να εκτιμηθεί μέσω της Ανάλυσης Κύκλου Ζωής (ΑΚΖ), η οποία είναι μια μεθοδολογία που υπολογίζει μεγέθη όπως η κατανάλωση ενέργειας και η εκπομπή διοξειδίου του άνθρακα. Η εφαρμογή της στην βιομηχανία γίνεται ολοένα και ευρύτερη καθώς προσφέρει πολύτιμες πληροφορίες σχετικά με τις επιπτώσεις ενός συστήματος στο περιβάλλον. Στα βιοδιυλιστήρια, ο μεγάλος αριθμός διεργασιών και η έλλειψη πληροφοριών δεν επιτρέπει την αναλυτική μελέτη κάθε διεργασίας ξεχωριστά, με αποτέλεσμα να δημιουργείται ανάγκη εκτίμησης των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε ένα ευρύ φάσμα διεργασιών για την αποτελεσματικότερη διαχείρισή τους.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύσσεται ένα μαθηματικό μοντέλο, στο οποίο γίνεται εκτίμηση περιβαλλοντικών μεγεθών (Αθροιστική Απαίτηση Ενέργειας (Cumulative Energy Demand (CED), Δυναμικό Παγκόσμιας Υπερθέρμανσης (Global Warming Potential (GWP), Δείκτης Eco-Indicator99), που σχετίζονται άμεσα με την Ανάλυση Κύκλου Ζωής. Σκοπός είναι να συσχετιστούν τα μεγέθη αυτά με χαρακτηριστικά της μοριακής δομής των προϊόντων, π.χ μοριακό βάρος, αριθμός ατόμων κλπ., ώστε γνωρίζοντας το προϊόν και κάποια βασικά στοιχεία της διεργασίας, να είναι δυνατό να γίνει σε πρώιμο στάδιο μία γρήγορη εκτίμηση των επιπτώσεών της στο περιβάλλον.

Τα αποτελέσματα που παράγονται από το μοντέλο συγκρίνονται με αντίστοιχα από βάσεις δεδομένων (π.χ EcoInvent), οι οποίες διαθέτουν τιμές για τα περιβαλλοντικά μεγέθη που εκτιμώνται από το μοντέλο. Ακολουθούν αξιολόγηση και συμπεράσματα σχετικά με τα αποτελέσματα και της αξιοπιστία τους, αλλά και την σημασία της συσχέτισης μεταξύ μοριακής δομής και περιβαλλοντικών επιπτώσεων.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν αποδεικνύουν την ύπαρξη συσχέτισης ανάμεσα στις δομικές και τις σχετικές με την διεργασία πληροφορίες και τα εξεταζόμενα μεγέθη ΑΚΖ, κάτι που ανοίγει τον δρόμο για μια γρήγορη και αξιόλογη εκτίμηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε ένα σύστημα. Το μοντέλο που κατασκευάστηκε προσφέρει την δυνατότητα πρόβλεψης των μεγεθών ΑΚΖ για ένα μεγάλο εύρος διεργασιών από βιομάζα, συμβάλλοντας στην εξοικονόμηση χρόνου και στην έυστοχη λήψη αποφάσεων στον σχεδιασμό.

## ABSTRACT

Biomass is one of the most widespread forms of renewable energy in the world today. Thanks to the latest technological advancements, it has an excellent potential to cover a substantial percentage of the total energy production.

The environmental footprint of the biomass-based products can be quantified and estimated via the Life Cycle Analysis, which is a methodology that calculates impacts such as the cumulative energy demand and the environmental releases. The use of the methodology in industry is becoming more popular, as it provides valuable information about the effect of a system on the environment. In biorefineries, the large amount of processes and lack of information don't allow the systematic analysis of each process separately, which leads to the need of prediction of the environmental impacts of a wide range of processes for a more efficient approach.

In the present thesis a mathematical model is developed, which estimates environmental impacts such as the Cumulative Energy Demand (CED), the Global Warming Potential (GWP) and the EcoIndicator99, which are directly related to the Life Cycle Analysis. The ultimate purpose is to correlate those impacts with characteristics of the molecular structure of the bioproducts, e.g. the molecular weight, the number of atoms etc, so that by knowing the product and some basic elements of the process, it will be possible to generate in an early stage, a quick prediction of the product's environmental effect.

The results that are produced by the model, are compared to corresponding values from relevant databases (e.g. Ecolnvent). The model is evaluated and conclusions are reached about the results and their credibility, as well as the significance of the connection between the molecular structure and the LCA impacts.

The outcome proves the existence of a linear correlation between the molecular structure and the process elements with the LCA impacts, which creates an opportunity for a quick and reliable prediction of the environmental impacts in a system. The generated model offers the ability to predict the LCA impacts for a wide range of biomass-oriented processes, thus contributing to quicker and more accurate decisions in the process design.

## Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή.....	5
1.1	Βιβλιογραφική Επισκόπηση.....	5
1.2	Σκοπός και Πλαίσιο Αναφοράς .....	7
2	Θεωρητικό μέρος.....	9
2.1	Βιοδιυλιστήρια και Περιβάλλον.....	9
2.2	Η Μέθοδος Ανάλυσης Κύκλου Ζωής (AKZ) .....	12
3	Μεθοδολογικό πλαίσιο.....	18
3.1	Προέλευση δεδομένων .....	18
3.2	Εύρεση Δεικτών (Descriptors).....	22
3.3	Υπολογισμός μεγεθών AKZ.....	27
3.4	Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Multilinear regression).....	28
3.5	Αλγόριθμος Παλινδρόμησης και Τεχνική Cross-Validation .....	29
4	Αποτελέσματα .....	35
4.1	Βασικό μοντέλο.....	35
4.2	Εναλλακτικά μοντέλα .....	40
4.3	Περιβαλλοντική αξιολόγηση βιομάζας και ορυκτών καυσίμων.....	43
5	Σχολιασμός και Συμπεράσματα .....	47
5.1	Επιλογή δεικτών .....	47
5.2	Στατιστική αξιολόγηση .....	49
5.3	Περιβαλλοντικές επιπτώσεις βιοπροϊόντων.....	52
5.4	Συνεισφορά και Προοπτικές.....	53
6	Βιβλιογραφία.....	55
	Παράρτημα Α: Πίνακες.....	58
	Παράρτημα Β: Σχήματα .....	73

## 1 Εισαγωγή

Σκοπός της εργασίας είναι η κατασκευή μοντέλου για την πρόβλεψη περιβαλλοντικών επιπτώσεων σχετικών με την Ανάλυση Κύκλου Ζωής (ΑΚΖ) σε προϊόντα βιοδιυλιστηρίου με βάση την μοριακή τους δομή. Το μοντέλο αξιολογείται με στατιστικούς δείκτες και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με παρόμοια σε βάσεις δεδομένων αλλά και με χρήση άλλων εργαλείων. Επίσης τα προϊόντα της βιομάζας αξιολογούνται έναντι των αντίστοιχων από ορυκτά καύσιμα, σκιαγραφώντας έτσι το περιβαλλοντικό τους προφίλ σε ενεργειακή κατανάλωση και εκπομπές ρύπων.

### 1.1 Βιβλιογραφική Επισκόπηση

Η Ανάλυση Κύκλου Ζωής είναι μια μεθοδολογία που αναφέρεται στον κύκλο ζωής ενός προϊόντος, από την επεξεργασία των πρώτων υλών μέχρι την χρήση και απόρριψή του στο περιβάλλον. Αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο για την βιομηχανία σήμερα (Capello et al, 2009), παρέχοντας σημαντικές πληροφορίες για τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις μιας διεργασίας ή ενός συστήματος γενικότερα, επιτρέποντας έτσι την καλύτερη ενεργειακή και περιβαλλοντική διαχείρισή του.

Η εφαρμογή της μεθόδου ΑΚΖ είναι ευρεία στην βιομηχανία. Ενδεικτικά, έχουν πραγματοποιηθεί μελέτες για τον υπολογισμό περιβαλλοντικών επιπτώσεων (Αθροιστική Απαίτηση Ενέργειας (Cumulative Energy Demand (CED)), Δυναμικό Παγκόσμιας Υπερθέρμανσης (Global Warming Potential (GWP)), Δείκτης Eco-Indicator99 (EI99)) στην φαρμακευτική βιομηχανία για την παραγωγή δραστικών συστατικών με δεδομένα από την παραγωγή (Wernet et al, 2010). Η έλλειψη συμπληρωματικών δεδομένων αντισταθμίστηκε από βάσεις δεδομένων και με τη χρήση σχετικών μοντέλων, συνθέτοντας τελικά μια βιβλιοθήκη για τον κύκλο ζωής όλης της παραγωγικής διαδικασίας. Η ΑΚΖ έχει εφαρμοστεί και για την αξιολόγηση του περιβαλλοντικού αποτυπώματος των ενζύμων στην βιομηχανία (Jegannathan et al, 2013), σε σχέση με τις αντίστοιχες μη ενζυμικές διεργασίες. Μια ακόμη σημαντική εφαρμογή της μεθόδου ΑΚΖ είναι για την περιβαλλοντική αξιολόγηση των πλαστικών βασισμένων σε βιοανανεώσιμες πρώτες ύλες, (Álvarez-Chávez et al, 2012) και την μελέτη της βιώσιμότητάς τους έναντι των πλαστικών που παράγονται από τα ορυκτά καύσιμα.

Η διαθεσιμότητα πληροφοριών για τον κύκλο ζωής αρκετών προϊόντων είναι συνήθως περιορισμένη- συνήθως λόγω απορρήτου ή έλλειψης δεδομένων, καθιστώντας έτσι αδύνατη την αξιολόγησή τους (Wernet et al, 2009). Τα κενά αυτά είναι δυνατό να καλυφθούν με εκτιμήσεις

υπολογιστικών μοντέλων, αντικαθιστώντας τις μη διαθέσιμες πληροφορίες από αντίστοιχες βάσεις δεδομένων. Η εκτίμηση των επιπτώσεων του κύκλου ζωής μπορεί να γίνει μέσω μοντέλων πρόβλεψης, παρέχοντας έτσι την δυνατότητα μελέτης πολλών διεργασιών των οποίων οι πληροφορίες και η δομή δεν είναι διαθέσιμες.

Στο πεδίο πρόβλεψης περιβαλλοντικών επιπτώσεων, οι μελέτες συνοψίζονται στην πετροχημική βιομηχανία (Capello et al, 2009), με τα “molecular-structured models”, που βασίζονται στην μοριακή δομή των προϊόντων με σκοπό την εκτίμηση μεγεθών AKZ σε έναν αριθμό διεργασιών. Οι Wernet et al (2009) ανέπτυξαν ένα τέτοιο μοντέλο με δεδομένα από 103 οργανικές ενώσεις που ποικίλλουν από βασικά χημικά ως σύνθετοι διαλύτες, με ένα ποσοστό από τα δεδομένα να προέρχεται από βάσεις δεδομένων και τα υπόλοιπα από σχετικούς υπολογισμούς. Ως τεχνικές χρησιμοποιήθηκαν τα νευρωνικά δίκτυα και η γραμμική παλινδρόμηση. Τα αποτελέσματα επιβεβαίωσαν την συσχέτιση μεταξύ μοριακής δομής και περιβαλλοντικών επιπτώσεων, με τα νευρωνικά δίκτυα να έχουν καλύτερη απόδοση στην εκτίμηση των περιβαλλοντικών μεγεθών σε σχέση με την γραμμική παλινδρόμηση.

#### **Εργαλείο Finechem Tool (Wernet et al, 2009)**

Μια πιο συστηματική προσέγγιση στα μοντέλα με βάση τη μοριακή δομή, έγινε με το Finechem Tool - ένα εργαλείο που αναπτύχθηκε στο ΕΤΗ Ζυρίχης με σκοπό μία εκτίμηση σε πρώιμο στάδιο των περιβαλλοντικών επιπτώσεων της AKZ (Αθροιστική Απαίτηση Ενέργειας (Cumulative Energy Demand (CED)), Δυναμικό Παγκόσμιας Υπερθέρμανσης (Global Warming Potential (GWP)), Δείκτης Eco-Indicator99 (EI99)) για την παραγωγή προϊόντων σε διυλιστήριο με φυσικό αέριο ως τροφοδοσία. Για την κατασκευή του μοντέλου συλλέχθηκαν 392 δεδομένα υψηλής ποιότητας από την πετροχημική βιομηχανία, από τα οποία τα 296 βασίζονται σε πραγματικές τιμές. Η αρχή λειτουργίας του βασίζεται στην έρεση συσχέτισης, με χρήση νευρωνικών δικτύων, ανάμεσα σε πληροφορίες που σχετίζονται με την μοριακή δομή του παραγόμενου χημικού (όπως το μοριακό βάρος και ο αριθμός δακτυλίων) και τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις του κύκλου ζωής του προϊόντος.

Η μέθοδος αφορά μόνο πετροχημικά προϊόντα και υπόκειται σε περιορισμούς, π.χ για το εύρος του μοριακού βάρους των ενώσεων, την μη εφαρμογή σε πολυμερή κλπ. Παρ’όλα αυτά είναι μία σημαντική εξέλιξη στο πεδίο της AKZ και αποτελεί ένα εύχρηστο εργαλείο που απαιτεί πληροφορίες που εντοπίζονται εύκολα και παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα.

## 1.2 Σκοπός και Πλαίσιο Αναφοράς

Οι προσεγγίσεις μέχρι τώρα που αφορούν έναν συστηματικό τρόπο πρόβλεψης μεγεθών ΑΚΖ, βασίζονται στην παραγωγή προϊόντων διυλιστηρίων με συμβατικές μεθόδους, με τα νευρωνικά δίκτυα να επικρατούν ως η πιο αποδοτική τεχνική συσχέτισης της μοριακής δομής πετροχημικών προϊόντων με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις τους.

Στο πεδίο των βιοδιυλιστηρίων, τα διαφορετικά είδη βιομάζας και τα διαφορετικά χημικά μονοπάτια των παραγόμενων προϊόντων συνθέτουν ένα μεγάλο αριθμό συνδυασμών, με αποτέλεσμα το σύνολο των πιθανών διεργασιών να είναι υπερβολικά μεγάλο για τον αναλυτικό υπολογισμό μεγεθών ΑΚΖ κάθε διεργασίας ξεχωριστά. Επίσης, πληροφορίες όπως π.χ. ενδιάμεσα προϊόντα, καταλύτες, κινητικές αντιδράσεων είναι συχνά είτε αδύνατο να υπολογιστούν είτε είναι απόρρητες, άρα και μη διαθέσιμες. Η δημιουργία ενός μοντέλου πρόβλεψης λύνει αυτό το πρόβλημα, εκτιμώντας τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις για οποιαδήποτε διεργασία σε ελάχιστο χρόνο.

Στην εργασία αυτή γίνεται προσπάθεια κατασκευής ενός μοντέλου πρόβλεψης που να υπολογίζει τις ίδιες περιβαλλοντικές επιπτώσεις (Αθροιστική Απαίτηση Ενέργειας (Cumulative Energy Demand (CED)), Δυναμικό Παγκόσμιας Υπερθέρμανσης (Global Warming Potential (GWP)), Δείκτης Eco-Indicator99 (EI99)) για προϊόντα από βιομάζα. Η βασική αρχή κατασκευής του μοντέλου στηρίζεται στην αρχή λειτουργίας του Finechem Tool, όπου χαρακτηριστικά της μοριακής δομής των προϊόντων συσχετίζονται με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις που αναφέρθηκαν, και τα δεδομένα προέρχονται ως επί το πλείστον από την βιομηχανία. Η βασική λειτουργική διαφορά μεταξύ του Finechem Tool και του μοντέλου που θα αναπτυχθεί εδώ είναι η τεχνική συσχέτισης· στο μοντέλο θα προτιμηθεί η γραμμική παλινδρόμηση λόγω απλότητας και περιορισμένου αριθμού δεδομένων.

Η βιομάζα ως τροφοδοσία διαφοροποιεί το είδος των προϊόντων σε σχέση με τα ορυκτά καύσιμα ως πρώτη ύλη, με την πλειοψηφία τους να είναι πολυμερή και αλκοόλες, αντί για κυκλικές ενώσεις ή βαρείς υδρογονάνθρακες που συνήθως παράγονται από τα ορυκτά καύσιμα. Η μοριακή δομή θα αποτελέσει την βάση για την συσχέτιση αλλά θα αναζητηθούν και επιπλέον πληροφορίες προκειμένου να εκφράσουν την διαφοροποίηση στον τύπο των προϊόντων.

Η μέθοδος αποτελείται από τα εξής βήματα:

- 1) Σε αρχικό στάδιο συλλέγονται δεδομένα από πραγματικές διεργασίες, από τα αντίστοιχα διαγράμματα ροής – δηλαδή προϊόντα, συστατικά, ενεργειακή κατανάλωση κλπ.. Έπειτα πραγματοποιείται πλήρης μελέτη κάθε διεργασίας, καθορίζοντας παραμέτρους όπως τα όρια του συστήματος, ταξινόμηση ρευμάτων εισόδου και εξόδου, ωφέλιμων ρευμάτων και παραπροϊόντων κλπ.



- 2) Τα μεγέθη AKZ υπολογίζονται με βάση την μεθοδολογία AKZ, βασισμένη στις πληροφορίες που παρέχουν τα διαγράμματα ροής και θα συμβάλλουν στην εκπαίδευση του μοντέλου.
- 3) Τα μεγέθη AKZ που υπολογίστηκαν με την μεθοδολογία AKZ συχετίζονται μέσω ενός αλγόριθμου με χαρακτηριστικά της μοριακής δομής των προϊόντων των διεργασιών. Λόγω απλότητας, η συσχέτιση που αναζητείται είναι γραμμική.
- 4) Το μοντέλο αξιολογείται και ακολουθούν συμπεράσματα και παρατηρήσεις.

## 2 Θεωρητικό μέρος

### 2.1 Βιοδιυλιστήρια και Περιβάλλον

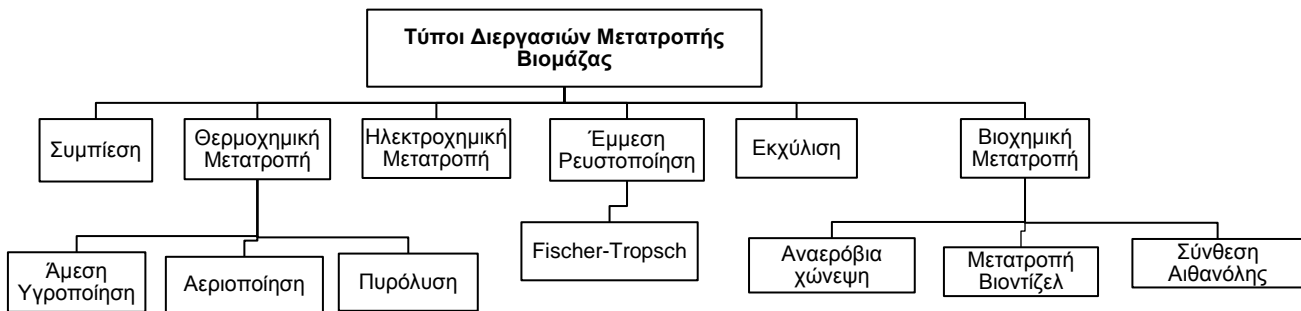
Τα βιοδιυλιστήρια είναι μονάδες αξιοποίησης της βιομάζας και αναπτύσσονται ραγδαία τις τελευταίες δεκαετίες. Η έλλειψη συμβατικών καυσίμων και ορυκτών αποθεμάτων δημιούργησε την ανάγκη για νέες πηγές ενέργειας και παραγωγή χημικών προϊόντων υψηλής προστιθέμενης αξίας από εναλλακτικές πρώτες ύλες (Demirbaş, 2009).

Ως βιομάζα ορίζεται η βιοδιασπώμενη οργανική ύλη που προέρχεται από φυτά, ζώα και μικροοργανισμούς. Η συνήθης σύσταση είναι 75% υδρογονάνθρακες, 20% λιγνίνη και 5% πρωτεΐνη και έλαια και γενικά μπορεί να αποτελείται από παραπροϊόντα όπως υπολείμματα δημητριακών ή αστικά απόβλητα έως απλά φυτικά προϊόντα όπως η κυτταρίνη και το ξύλο (Demirbaş, 2009). Στον Πίνακα 1 καταγράφονται τα κυριότερα είδη τροφοδοσίας βιομάζας ανάλογα με την προέλευσή τους (Demirbaş, 2009):

Πίνακας 1: Είδη βιομάζας

<b>Δασικά προϊόντα</b>	Ξύλο Δέντρα, θάμνοι και υπολείμματα ξύλου Πριονίδια, ρίζες και φλοιοί ξύλου
<b>Ανανεώσιμα απόβλητα</b>	Γεωργικά απόβλητα και αγροτικά υπολείμματα Αστικά οργανικά απόβλητα και Δημοτικά στερεά απόβλητα Οικιακά στερεά απόβλητα και Αστικά απόβλητα ξύλου
<b>Σοδειά για ενέργεια (Energy Crops)</b>	Ξυλώδη φυτά (Short-rotation & herbaceous crops) Γρασίδι (Grasses) Σιτηρά με άμυλο (Starch Crops), σάκχαρα (Sugar Crops), Έλαια (Oilseed Crops), για βοσκή (Forage Crops)
<b>Υδρόβια φυτά</b>	Άλγη, Φυτό <i>elodea canadensis</i> Υάκινθος νερού, Καλάμια
<b>Σοδειά προορισμένη για τρόφιμα</b>	Σιτηρά Έλαια
<b>Υγειονομική ταφή αποβλήτων</b>	
<b>Βιομηχανικά οργανικά απόβλητα</b>	
<b>Φύκια και λειχήνες</b>	

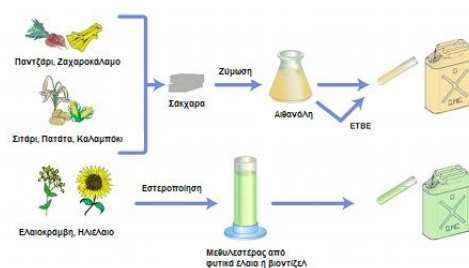
Η βιομάζα είναι η 4<sup>η</sup> μεγαλύτερη πηγή ενέργειας σήμερα, πίσω από τον άνθρακα, το πετρέλαιο και το φυσικό αέριο. Είναι μία ελκυστική πηγή ενέργειας λόγω του ότι υπάρχει σε πλεονότητα ανά τον κόσμο και μπορεί να θεωρηθεί ως μια ανανεώσιμη πηγή ενέργειας, είναι θεωρητικά πιο φιλική προς το περιβάλλον και είναι οικονομικά ανταγωνιστική, δεδομένης της αύξησης των τιμών των ορυκτών καυσίμων (Demirbaş, 2009) (Bjorn Sanden et al, 2013). Η μετατροπή μπορεί να γίνει σε χημικά, καύσιμα, ισχύ ή θερμότητα και υπάρχουν διάφοροι τρόποι, όπως φαίνεται από το παρακάτω διάγραμμα (Σχήμα 1).



Σχήμα 1: Πιθανά μονοπάτια αξιοποίησης βιομάζας

Ανάλογα με την τροφοδοσία, τα βιοδιυλιστήρια χωρίζονται σε 3 κατηγορίες (<http://www.groupes.polymtl.ca/crip/en/index.php>):

- 1<sup>η</sup>ς γενιάς: με προκαθορισμένη δυναμικότητα, με σάκχαρα και φυτικά έλαια ως τροφοδοσίες. Είναι η πιο κλασική μορφή βιοδιυλιστηρίου και βασίζεται σε 2 διεργασίες: σάκχαρα σε βιοαιθανόλη και έλαια σε βιοντίζελ (Σχήμα 2).



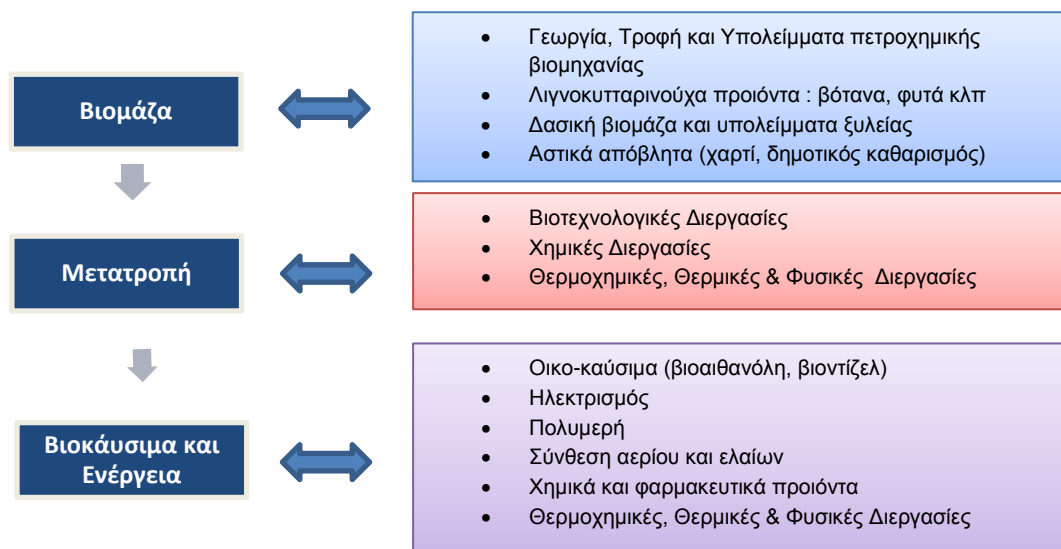
Σχήμα 2: Πρώτες ύλες και προϊόντα βιοδιυλιστηρίου 1<sup>η</sup>ς γενιάς. Τα σάκχαρα μετατρέπονται σε βιοαιθανόλη ενώ τα φυτικά έλαια σε βιοντίζελ.

- 2ης γενιάς: έχει μεγαλύτερη ποικιλία προϊόντων με λιγνοκυτταρινούχο βιομάζα ως τροφοδοσία. Αυτό είναι και το μεγαλύτερο πλεονέκτημα σε σχέση με τα αντίστοιχα της 1ης γενιάς, καθώς αυτά τα

βιοδιυλιστήρια χρησιμοποιούν μία από τις μεγαλύτερες και ανανεώσιμες μορφές άνθρακα στον κόσμο, έχουν βελτιωμένη απόδοση, μικρότερο κόστος και μεγαλύτερη παραγωγή.

- 3<sup>ης</sup> γενιάς: έχουν την δυνατότητα χρήσης γεωργικών υπολειμμάτων καθώς και δασικών, αστικών και πετροχημικών αποβλήτων (Σχήμα 3). Προφανώς τα προϊόντα που μπορούν να παραχθούν είναι πολύ περισσότερα, υπάρχει η δυνατότητα παραγωγής καθαρής ενέργειας και λύνει εν μέρει το πρόβλημα με την επεξεργασία αποβλήτων. Σε ένα πληθυσμό 130.000 κατοίκων παράγονται περίπου 50.000 τόνοι αποβλήτων ετησίως, με 60% ξηρή μάζα ενώ παρόμοια ποσότητα παράγεται και από την βιομηχανία.

Ένα επίσης σημαντικό πλεονέκτημα είναι η εκτιμώμενη μείωση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε σχέση με τις αντίστοιχες διεργασίες που χρησιμοποιούν συμβατικά καύσιμα. Τηρώντας την συνθήκη του Κυότο, η βιομάζα είναι σήμερα η πιο υποσχόμενη πηγή ενέργειας για την ελαχιστοποίηση των εκπομπών των αερίων θερμοκηπίου. Η έρευνα γύρω από την αξιοποίησή της αναπτύσσεται παράλληλα με την τεχνολογική πρόοδο και ένα σενάριο βασισμένο σε αυτήν την προτεραιότητα είναι ότι το 2050 η βιομάζα θα είναι η πηγή για την μισή παγκόσμια παραγωγή ενέργειας. Παρ'όλα αυτά, τα βιοπροϊόντα επηρεάζουν την ισορροπία των οικοσυστημάτων π.χ λόγω του ευτροφισμού στις λίμνες και τα ποτάμια αλλά και την κατάχρηση του εδάφους. Επίσης οι επιπτώσεις περιλαμβάνουν αναπνευστικά προβλήματα και εκπομπές καρκινογόνων ουσιών, με αποτέλεσμα τα πλεονεκτήματα της μείωσης των αερίων του θερμοκηπίου να αντισταθμίζονται από συνολικά περιβαλλοντικά θέματα.



Σχήμα 3: Βιοδιυλιστήρια 3<sup>ης</sup> γενιάς. Διαθέτουν το πλεονέκτημα αξιοποίησης μεταξύ άλλων και αστικών, γεωργικών και δασικών αποβλήτων, οδηγώντας σε μεγαλύτερη ποικιλία προϊόντων (<http://www.groupes.polymtl.ca/crip/en/index.php>).

## 2.2 Η Μέθοδος Ανάλυσης Κύκλου Ζωής (ΑΚΖ)

Η Ανάλυση Κύκλου Ζωής (ΑΚΖ) είναι μία μέθοδος ποσοτικού προσδιορισμού όλων των περιβαλλοντικών, οικονομικών και κοινωνικών επιπτώσεων που προκύπτουν από τον κύκλο ζωής ενός προϊόντος, συστήματος, μιας διεργασίας, υπηρεσίας κλπ. Ο πλήρης κύκλος ζωής ενός π.χ συστήματος παραγωγής μπορεί να περιέχει σε γενικές γραμμές τις φάσεις εξόρυξης/παραγωγής των πρώτων υλών, της παραγωγής, της διάθεσης και χρήσης του προϊόντος, και της τελικής απόρριψης υλών στο περιβάλλον. Στο Σχήμα 4 απεικονίζεται ο κύκλος ζωής ενός προϊόντος από την πρώτη ύλη μέχρι την απόρριψη στο περιβάλλον.



Σχήμα 4: Κύκλος Ζωής ενός προϊόντος

Είναι ένα σημαντικό εργαλείο καθώς επιτυγχάνει την ποσοτικοποίηση του περιβαλλοντικού αντίκτυπου στο περιβάλλον (Frischknecht et al, 2004) (Guinée, 2002). Δίνεται έτσι η ευκαιρία εντοπισμού αδύναμων σημείων σε μια διαδικασία, της βελτίωσης των περιβαλλοντικών ιδιοτήτων των προϊόντων, της σύγκρισης μεταξύ διαφορετικών αποτελεσμάτων και την μελέτη της συμπεριφοράς του κύκλου ζωής των προϊόντων υπό συγκεκριμένες συνθήκες (Guinée, 2002). Επίσης συγκρίνει τις επιμέρους επιπτώσεις που κατανέμονται στα επιμέρους στάδια και συνεπώς είναι πιο εύκολο να αναγνωριστούν τα πιο ενεργειακά απαιτούμενα στάδια σε ένα σύστημα.

Τα πλεονεκτήματα που προσφέρονται είναι σημαντικά τόσο από περιβαλλοντική όσο και από οικονομική σκοπιά: Αφενός η μέθοδος ΑΚΖ ανοίγει τον δρόμο σε μια πιο φιλική προς το περιβάλλον προσέγγιση της παραγωγής, οδηγώντας έτσι σε μειωμένους ρύπους και κατανάλωση ενέργειας, άρα και την επιβάρυνση του περιβάλλοντος. Αφετέρου, μειωμένη κατανάλωση ενέργειας σημαίνει

εξοικονόμηση χρημάτων και μειωμένοι ρύποι οδηγούν σε αποφυγή προστίμων ή ακόμα και επιβράβευση από την πολιτεία.

Η μέθοδος της AKZ αποτελείται από 4 στάδια, που συνοπτικά είναι (Morawicki, 2012 :

### *1) Προσδιορισμός των ορίων του συστήματος*

Τα μεγέθη που θα υπολογιστούν θα αναφέρονται σε συγκεκριμένη φάση ζωής του προϊόντος, η οποία μπορεί να είναι:

- Cradle-to-grave  
Είναι το σύνολο των σταδίων από την εξόρυξη της πρώτης ύλης (cradle) μέχρι την τελική απόρριψη του προϊόντος
- Cradle-to-gate  
Είναι το σύνολο των σταδίων από την εξόρυξη μέχρι την πύλη του εργοστασίου (gate), δηλαδή πριν την παράδοση στον καταναλωτή. Παραλείπεται δηλαδή η φάση χρήσης και απόρριψης της ένωσης και το σύστημα περιορίζεται μέχρι και την παραγωγή της. Είναι η περίοδος που χρησιμοποιείται συνήθως για τον υπολογισμό των μεγεθών AKZ
- Cradle-to-cradle  
Είναι παρόμοια με την Cradle-to-grave, μόνο που στο τέλος αντί για απόρριψη υπάρχει ανακύκλωση του προϊόντος, για παραγωγή του ίδιου ή και διαφορετικών προϊόντων.
- Gate-to-gate  
Αναφέρεται σε συγκεκριμένη διεργασία και την απομονώνει από το σύνολο της αλυσίδας παραγωγής.
- Well-to-wheel  
Είναι η AKZ για καύσιμα μεταφορών και χρησιμοποιείται για την αξιολόγησή τους.

Το στάδιο αυτό περιλαμβάνει επίσης τον προσδιορισμό των μεγεθών AKZ που απαιτούνται για να εκτιμηθούν οι επιθυμητές επιπτώσεις.

### *2) Συλλογή δεδομένων και απογραφή του κύκλου ζωής*

Στο δεύτερο στάδιο συλλέγονται τα απαιτούμενα δεδομένα, καθώς είναι η βάση των υπολογισμών. Ένα σημαντικό στοιχείο που πρέπει να καθοριστεί είναι η έννοια της λειτουργικής μονάδας (functional unit), η οποία είναι η μονάδα αναφοράς ως προς την οποία θα ανάγονται τα δεδομένα, επιτρέποντας την ασφαλή σύγκριση 2 συστημάτων ή προϊόντων .

Επίσης προσδιορίζονται τα πιθανά συμπροϊόντα και διαχωρίζονται ως ωφέλιμα από τα παραπροϊόντα. Στο επόμενο κεφάλαιο θα γίνει ανάλυση του τρόπου αναγωγής των μεγεθών AKZ στα επιμέρους συμπροϊόντα.

### 3) Αξιολόγηση επιπτώσεων του κύκλου ζωής

Ακολουθεί εκτίμηση των επιπτώσεων τόσο στο περιβάλλον όσο και στην ανθρώπινη υγεία. Τα αποτελέσματα ομαδοποιούνται και χωρίζονται σε περαιτέρω κατηγορίες ανάλογα με τον τομέα που επηρεάζουν. Είναι ένα στάδιο εξίσου σημαντικό με την καταγραφή των δεδομένων, καθώς η αξιολόγηση είναι ιδανική για συγκρίσεις.

### 4) Ερμηνεία αποτελεσμάτων

Στο τελικό στάδιο τα αποτελέσματα συνδέονται μεταξύ τους και εκτιμώνται οι πιο σημαντικοί περιβαλλοντικοί παράμετροι. Ελέγχεται η πληρότητα και η συνοχή στο σύνολο των δεδομένων και οι παραδοχές στην οριοθέτηση του συστήματος

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, θα δοθεί έμφαση μόνο στο περιβαλλοντικό σκέλος της μεθόδου, με τα εξής μεγέθη:

- Αθροιστική Απαίτηση Ενέργειας (Cumulative Energy Demand (CED)) (Huijbregts, 2005): αφορά την συνολική ενέργεια που απαιτείται στην διάρκεια του κύκλου ζωής π.χ ενός προϊόντος.

- Δυναμικό παγκόσμιας υπερθέρμανσης (Global Warming Potential (GWP)): είναι μία ένδειξη της θερμότητας που δεσμεύεται από τα εκπεμπόμενα αέρια του θερμοκηπίου και υπολογίζεται σε ισοδύναμη μάζα διοξειδίου του άνθρακα, το οποίο ως σημείο αναφοράς έχει την τιμή 1. Μπορεί να υπολογιστεί με βάση 20,100 ή και 500 χρόνια. Γενικά εξαρτάται από το φάσμα απορρόφησης της εκπεμπόμενης ουσίας, την διάρκεια ζωής της στην ατμόσφαιρα και την απορρόφηση υπέρυθρης ακτινοβολίας.

- Δείκτης Eco-Indicator99: είναι ένα μέγεθος σχετικό με τις επιπτώσεις της διεργασίας στο οικοσύστημα, την ανθρώπινη υγεία αλλά και τους πόρους που χρησιμοποιήθηκαν. Αποτελείται από έναν συνδυασμό δευτερευόντων υπο-δεικτών και ταξινομούνται σε 3 κατηγορίες, οι οποίες είναι:

#### 1) Επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία

- Καρκινογενή (Carcinogens)

Περιλαμβάνει τις επιπτώσεις των ουσιών που αποδεδειγμένα έχουν καρκινική δράση στον άνθρωπο και απελευθερώνονται στο έδαφος, τον αέρα ή το νερό. Η μονάδα μέτρησης είναι Disability adjusted Life Years (DALY) / kg emission, δηλαδή ο χρόνος που «αφαιρείται» λόγω ασθένειας από την προβλεπόμενη διάρκεια ζωής, ανά κιλό εκπομπών.

- Εισπνεόμενα οργανικά σωματίδια (Respiratory Organics)

Αφορά τις οργανικές ουσίες που προκαλούν αναπνευστικά προβλήματα και συγκεντρώνονται ως αιθαλομίχλη τους καλοκαιρινούς μήνες. Η επίδραση μετριέται ως Disability adjusted Life Years (DALY) / kg εκπομπών.

- Εισπνεόμενα ανόργανα σωματίδια (Respiratory Inorganics)

Αφορά τις ανόργανες ουσίες, όπως θείο, σκόνη και οξειδία του αζώτου που συγκεντρώνονται στην ατμόσφαιρα τους χειμερινούς μήνες. Η επίδραση μετριέται ως Disability adjusted Life Years (DALY) / kg εκπομπών.

- Αλλαγή κλίματος (Climate Change)

Μετριέται σε Disability adjusted Life Years (DALY) / kg εκπομπών και αντιπροσωπεύει την αύξηση θανάτων και ασθενειών λόγω της κλιματικής αλλαγής.

- Ακτινοβολία (Radiation)

Είναι η επίπτωση των ραδιενεργών εκπομπών και μετριέται σε Disability adjusted Life Years (DALY) / kg εκπομπών.

- Ζώνη του όζοντος (Ozone layer)

Είναι η επίπτωση της αυξημένης ακτινοβολίας UV λόγω εξασθένησης της στοιβάδας του όζοντος εξαιτίας των ρύπων. Υπολογίζεται σε Disability adjusted Life Years (DALY) / kg εκπομπών.

## 2) Επιπτώσεις στο οικοσύστημα

- Τοξικότητα (Ecotoxicity)

Είναι η αρνητική επίδραση των οικοτοξικών ουσιών στο οικοσύστημα. Η μονάδα μέτρησης είναι Potentially Affected Fraction (PAF)\*m<sup>2</sup>\*year/kg εκπομπών, που αντιπροσωπεύει το σύνολο των ζώων τα οποία επηρέασε η τοξικότητα.

- Ευτροφισμός/ Οξίνιση (Acidification /Eutrophication)

Είναι η αρνητική επίδραση των όξινων ουσιών στο οικοσύστημα. Η μονάδα μέτρησης είναι Potentially Disappeared Fraction (PDF)\*m<sup>2</sup>\*year/kg εκπομπών.

- Χρήση γης (Land use)

Η χρήση του εδάφους από τον άνθρωπο έχει αντίκτυπο στην βιοποικιλότητα ανάλογα με την εκμετάλλευση του εδάφους και το μέγεθος της περιοχής. Η αρνητική επίδραση που πέρχεται από



κατάληψη ή τροποποίηση τμήματος γης μετριέται σε Potentially Disappeared Fraction (PDF)\*m<sup>2</sup>\*year/kg εκπομπών

### 3) Επιπτώσεις στα φυσικά κοιτάσματα

Τα κοιτάσματα εξάντλούνται με την πάροδο του χρόνου, καθιστώντας ολοένα και δυσκολότερη την ανάκτησή τους σε μεγάλες ποσότητες, άρα και απαιτώντας μεγαλύτερη προσπάθεια και ενέργεια. Η επιπλέον προσπάθεια που χρειάζεται για την εξόρυξή τους εκφράζεται σε ενεργειακό πλεόνασμα και αφορά τους παρακάτω 2 δείκτες:

- Μεταλλικά (Minerals)

Η επιπλέον ενέργεια που χρειάζεται για την εξόρυξη των ορυκτών πρώτων υλών εκφράζεται σε MJ/kg ή ανά ράβδο πρώτης ύλης.

- Ορυκτά Καύσιμα (Fossil Fuels)

Η επιπλέον ενέργεια που χρειάζεται για την εξόρυξη των ορυκτών καυσίμων εκφράζεται σε MJ/kg ή ανά m<sup>3</sup> καυσίμου.

### Βάσεις Δεδομένων για την Ανάλυση Κύκλου Ζωής

Η συγκέντρωση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την μεθοδολογία σε μια ενιαία βάση δεδομένων είναι ένα δύσκολο εγχείρημα καθώς:

- Τα δεδομένα των παραγωγικών σταδίων μιας διεργασίας συχνά είναι απόρρητα ή μη διαθέσιμα
- Ο πλήρης υπολογισμός των μεγεθών AKZ είναι χρονοβόρος και οικονομικά επιβαρυντικός

Θα ήταν λοιπόν χρήσιμο να γίνει μια μελέτη με συγκέντρωση όσο το δυνατόν περισσότερων δεδομένων από εταιρείες και βιομηχανίες, ώστε να παρέχει τις απαραίτητες πληροφορίες για τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις καθώς και να αποτελεί σημείο αναφοράς και σύγκρισης σε μελλοντικούς υπολογισμούς.

Η EcoInvent (Frischknecht et al, 2004) (Althaus et al, 2007) είναι μία βάση δεδομένων AKZ που αναπτύχθηκε το 2000 στο ΕΤΗ με σκοπό την συλλογή δεδομένων AKZ και την ταξινομημένη ομαδοποίησή τους σε μια ενιαία βάση. Ο σκοπός ήταν η παροχή δεδομένων υψηλής ποιότητας που θα είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν σε περιβαλλοντικές μελέτες, για την εκτίμηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε διεργασίες και ως θεμέλιο για την μέθοδο Ανάλυσης Κύκλου Ζωής. Τα δεδομένα αφορούν ποικίλους βιομηχανικούς τομείς (γεωργία, υλικά, μεταφορές, ενέργεια κλπ) και έχουν συλλεχθεί από εταιρείες και επιστημονικούς συνεργάτες, ενώ είναι διαθέσιμη η

αναλυτική περιγραφή των παραγόντων που συμβάλλουν στον υπολογισμό των μεγεθών. Κάθε καταγεγραμμένη διεργασία έχει συγκεκριμένες παραμέτρους, όπως τροφοδοσία, όρια συστήματος, κλπ, με αποτέλεσμα να υπάρχουν π.χ. πολλές διεργασίες με το ίδιο προϊόν και ως μόνη διαφορά την τροφοδοσία ή κάποιο επιπλέον παραπροϊόν. Γενικά αποτελεί ένα αρχικό μέτρο σύγκρισης με τα μεγέθη AKZ που εκτιμώνται από ένα μοντέλο ή άλλους υπολογισμούς και θα χρησιμοποιηθεί στην αξιολόγηση του μοντέλου.

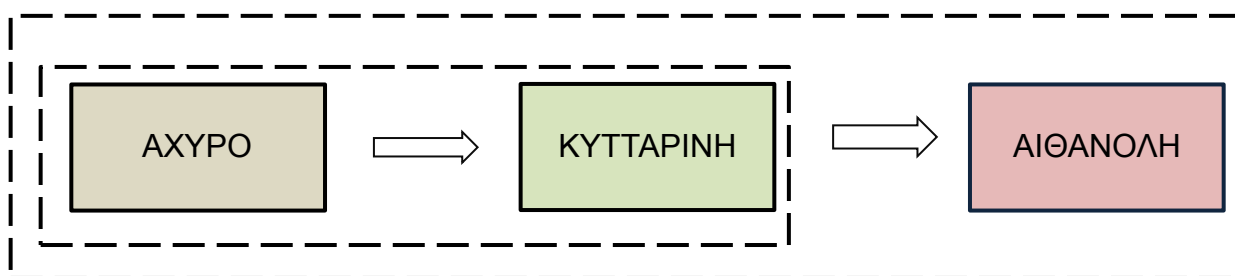
### 3 Μεθοδολογικό πλαίσιο

#### 3.1 Προέλευση δεδομένων

Οι διεργασίες που είναι διαθέσιμες προς επεξεργασία έχουν τα εξής χαρακτηριστικά:

- Τροφοδοσία: Είναι τύποι βιομάζας, όπως ξύλο, καλαμπόκι, άχυρο, τα οποία μετατρέπονται διαδοχικά σε προϊόντα, δημιουργώντας αλυσίδες παραγωγής. Η βιομάζα δυσχεραίνει τον υπολογισμό των μεγεθών ΑΚΖ καθώς δεν είναι μία συγκεκριμένη ένωση και δεν παρέχονται επιπλέον πληροφορίες.
- Τύπος Προϊόντων: Τα παραγόμενα προϊόντα ποικίλλουν από ενώσεις που προέρχονται αποκλειστικά από βιομάζα, πχ κυτταρίνη και λιγνίνη, μέχρι προϊόντα καθαρά χημικά που συνήθως παράγονται στα διυλιστήρια, όπως αιθανόλη, ακετόνη και προπυλένιο.
- Πρόσθετα δεδομένα: για κάθε διεργασία παρέχονται αναλυτικά οι ροές όλων των ρευμάτων εισόδου και εξόδου, καθορίζεται ποιο είναι το βασικό ρεύμα εξόδου και τα παραπροϊόντα, οι συστάσεις τους καθώς και συνθήκες, όπως θερμοκρασία και πίεση. Επίσης παρέχονται αναλυτικά τα ενεργειακά φορτία για κάθε τμήμα του εξοπλισμού.

Για κάθε διεργασία υπάρχει διαθέσιμο το αντίστοιχο διάγραμμα ροής και κάποιες αποτελούν τμήμα μίας συνεχούς γραμμής παραγωγής, με αποτέλεσμα τα δεδομένα για κάθε διεργασία να αφορούν την μέχρι τότε εξέλιξη των διαδοχικών αντιδράσεων από την αρχική βιομάζα μέχρι το προϊόν της διεργασίας που μελετάται. Για παράδειγμα στο Σχήμα 5, φαίνεται ένα τμήμα της αλυσίδας:



Σχήμα 5: Τμήμα της αλυσίδας παραγωγής. Για κάθε εξεταζόμενη διεργασία, το σύστημα οριοθετείται από την αρχική πρώτη ύλη μέχρι το αντίστοιχο προϊόν της διεργασίας

Στο Σχήμα 5 οι 2 διαδοχικές αντιδράσεις (άχυρο-κυτταρίνη και κυτταρίνη-αιθανόλη) αποτελούν τμήμα μιας παραγωγικής αλυσίδας. Ο υπολογισμός μεγεθών ΑΚΖ σε κάθε διεργασία περιλαμβάνει και την επίδραση της ένωσης προς μετατροπή σε κάθε στάδιο, που με την σειρά της είναι το προϊόν του προηγούμενου σταδίου μετατροπής. Άρα τα μεγέθη ΑΚΖ που υπολογίζονται για ένα προϊόν σε μια παραγωγική αλυσίδα, λειτουργούν αθροιστικά έχοντας συμπεριλάβει και τα μεγέθη ΑΚΖ των

προηγούμενων σταδίων. Οπότε για τους υπολογισμούς, τα όρια κάθε διεργασίας περιλαμβάνουν τα στάδια από την παραγωγή της διαθέσιμης βιομάζας (π.χ. άχυρο εδώ), μέχρι το επιθυμητό προϊόν, συνυπολογίζοντας και τα ενδιάμεσα στάδια. Συνεπώς οι 2 διεργασίες που απεικονίζονται στο Σχήμα 5 είναι οι άχυρο-κυτταρίνη και άχυρο-αιθανόλη.

Κάποιες διεργασίες παράγουν πάνω από 1 διαφορετικά προϊόντα, οπότε ο υπολογισμός των μεγεθών AKZ πραγματοποιείται σε κάθε προϊόν ξεχωριστά. Επίσης, για ορισμένες διεργασίες υπάρχουν τιμές των μεγεθών AKZ με και χωρίς ενεργειακή ολοκλήρωση, συνεπώς μπορούν να θεωρηθούν και με τις 2 εκδοχές (ολοκληρωμένες και μη-ολοκληρωμένες).

Πληροφορίες για τα ισοζύγια έχουν συλλεχθεί μέσω προσομοιώσεων χρησιμοποιώντας το λογισμικό Aspen, ενώ τα επιμέρους μεγέθη AKZ για τα ρεύματα πρώτων υλών και τα τμήματα εξοπλισμού και βοηθητικών παροχών (νερό, αέριο κλπ) ανακτώνται από αντιστοιχες διεργασίες της EcoInvent, σε όσο τον δυνατό παρόμοιες συνθήκες.

Οι διεργασίες προέρχονται από το σχεδιασμό πιλοτικών μονάδων που προέκυψαν στα πλαίσια ερευνητικών προγραμμάτων (ερευνητικού προγράμματος Biocore, ABC project) και από βιβλιογραφικές πηγές όπου υπήρχαν διαθέσιμα τα διαγράμματα ροής και τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας (Zhang et al, 2003).

Τελικά συγκεντρώνονται 54 διαφορετικές διεργασίες (Πίνακας 2), στις οποίες περιγράφονται αναλυτικά ο τύπος τροφοδοσίας, χαρακτηριστικά (σχεδιαστικές λεπτομέρειες) και τα μεγέθη AKZ (CED, GWP, Eco99) που υπολογίστηκαν εφαρμόζοντας αναλυτικά τη μεθοδολογία AKZ για κάθε διεργασία. Αυτά θα είναι και οι τιμές-στόχοι όπως τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια για να αναπτυχθεί το μοντέλο προβλεψής των παραπάνω μεγεθών (CED, GWP, Eco99).

Πίνακας 2 : Παρουσίαση όλων των διεργασιών με τα αντίστοιχα χαρακτηριστικά και τα μεγέθη ΑΚΖ που υπολογίστηκαν αρχικά. Οι διεργασίες με τον κωδικό Βίο αναφέρονται στο σετ της Bioscore, αυτές με το U στο ABC project και αυτές με το Bd\_ σε βιβλιογραφικές διεργασίες. Όπου παράγονται πάνω από 1 προϊόντα, ονομάζονται με το γράμμα a,b,c κλπ δίπλα στον κωδικό της διεργασίας, πχ Βίο1a, Βίο1b κλπ. Οι διεργασίες με και χωρίς ενεργειακή ολοκλήρωση παρουσιάζονται με πλάγια γράμματα (*italics*) και εισάγονται 2 φορές με το γράμμα i να συμβολίζει την ολοκληρωμένη εκδοχή της διεργασίας.

ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	ΣΥΝΘΕΣΗ	ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑ	ΚΥΡΙΟ ΠΡΟΙΟΝ	ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΙΕΣ	CED (MJ)	GWP (100a, kg CO2 eq)	Eco-Indicator 99 (Pt)
Bio1a	Κλασμάτωση Βιομάζας με οργανικά οξέα	Άχυρο	Ημικυτταρίνη (ξυλόζη, αραβινόζη)		59.2	1.65	0.155
Bio1b	Κλασμάτωση Βιομάζας με οργανικά οξέα	Άχυρο	Κυτταρίνη		59.2	1.65	0.155
Bio1c	Κλασμάτωση Βιομάζας με οργανικά οξέα	Άχυρο	Λιγνίνη		59.1	1.65	0.154
<i>Bio2i</i>	<i>Βιοχημική</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ξυλιτόλη</i>		<i>102.9</i>	<i>3.37</i>	<i>0.291</i>
<i>Bio2</i>	<i>Βιοχημική</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ξυλιτόλη</i>		<i>130.7</i>	<i>5.03</i>	<i>0.401</i>
<i>Bio3i</i>	<i>Κατάλυση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ξυλιτόλη</i>		<i>82.3</i>	<i>2.36</i>	<i>0.218</i>
<i>Bio3</i>	<i>Κατάλυση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ξυλιτόλη</i>		<i>87.6</i>	<i>2.68</i>	<i>0.239</i>
Bio4	Ζύμωση	Άχυρο-Ημικυτταρίνη	Αιθανόλη	Χωρίς ανακύκλωση	251.5	8.71	0.731
<i>Bio5i</i>	<i>Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Αιθανόλη</i>	<i>Με ανακύκλωση</i>	<i>153.4</i>	<i>5.01</i>	<i>0.437</i>
<i>Bio5</i>	<i>Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Αιθανόλη</i>	<i>Με ανακύκλωση</i>	<i>195.9</i>	<i>7.55</i>	<i>0.606</i>
<i>Bio6i</i>	<i>Υδρόλυση - Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Αιθανόλη</i>	<i>Με απόσταξη</i>	<i>211.4</i>	<i>7.11</i>	<i>0.602</i>
<i>Bio6</i>	<i>Υδρόλυση - Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Αιθανόλη</i>	<i>Με απόσταξη</i>	<i>217.1</i>	<i>7.46</i>	<i>0.627</i>
Bio7	Υδρόλυση - Ζύμωση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Αιθανόλη	Χωρίς απόσταξη	252.0	9.91	0.779
Bio8	Υδρόλυση - Ζύμωση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Αιθανόλη		237.6	8.21	0.689
Bio9	Ενζυματική Σακχαροποίηση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Αιθανόλη		224.0	7.12	0.623
Bio10	Πολυμερισμός	Άχυρο-Κυτταρίνη	Bio-PVC		236.0	9.96	0.784
Bio11	Ζύμωση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)		234.9	9.89	0.780
Bio12	Ζύμωση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Αιθυλένιο		285.5	9.80	0.831
<i>Bio13i</i>	<i>Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ιτακονικό Οξύ</i>	<i>Χωρίς ανακύκλωση</i>	<i>152.4</i>	<i>7.60</i>	<i>0.416</i>
<i>Bio13</i>	<i>Ζύμωση</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Ιτακονικό Οξύ</i>	<i>Χωρίς ανακύκλωση</i>	<i>199.3</i>	<i>7.60</i>	<i>0.603</i>
Bio14	Ζύμωση	Άχυρο-Κυτταρίνη	Ιτακονικό Οξύ	Με ανακύκλωση	212.4	8.38	0.656
<i>Bio15i</i>	<i>Πολυμερισμός</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)</i>		<i>25.1</i>	<i>0.74</i>	<i>0.085</i>
<i>Bio15</i>	<i>Πολυμερισμός</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)</i>		<i>25.3</i>	<i>0.75</i>	<i>0.086</i>
<i>Bio16i</i>	<i>Πολυμερισμός</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)</i>		<i>77.9</i>	<i>3.05</i>	<i>0.293</i>
<i>Bio16</i>	<i>Πολυμερισμός</i>	<i>Άχυρο-Κυτταρίνη</i>	<i>Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)</i>		<i>78.4</i>	<i>3.08</i>	<i>0.295</i>

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U1	Έμμεση αεριοποίηση	Ξύλο	Syngas	7.7	0.01	0.002
U2	Σύνθεση	Ξύλο	Μεθανόλη	13.1	0.01	0.003
U3	Ζύμωση	Ξύλο	Αιθανόλη	27.6	0.11	0.019
U4	Αφυδάτωση	Ξύλο	Αιθυλένιο	94.9	2.74	0.191
U5	Ζύμωση	Καλαμπόκι	Αιθανόλη	1.5	0.14	0.014
U6	Ζύμωση	Ξύλο	Αιθανόλη	8.9	0.55	0.080
U7a	Σύνθεση	Ξύλο	Μείγμα Αλκοολών	30.1	0.44	0.030
U7b	Σύνθεση	Ξύλο	Αιθανόλη	30.3	0.44	0.031
U8a	Μεθανόλη σε ολεφίνες	Ξύλο	Αιθυλένιο	42.3	0.03	0.010
U8b	Μεθανόλη σε ολεφίνες	Ξύλο	Προπυλένιο	42.1	0.03	0.010
U9	Αναμόρφωση	Ξύλο	NH <sub>3</sub>	17.7	0.06	0.007
U10	Υδρογόνωση	Ξύλο	Γλυκόλη Προπυλενίου	42.8	5.15	1.477
U11a	Υδρογονόλυση	Ξύλο	Οξειδίο Προπυλενίου	87.7	2.62	0.194
U11b	Υδρογονόλυση	Ξύλο	Γλυκόλη Προπυλενίου	88.6	3.03	0.220
U12	Αναμόρφωση	Αστικά απόβλητα	Syngas	19.3	0.58	0.076
U13	Αναερόβια χώνεψη	Αστικά απόβλητα	Βιοαέριο	9.2	0.50	0.036
U14	Άμεση οξείδωση	Ξύλο	Ακετόνη	58.1	1.37	0.098
U15	Υδροφορμυλίωση	Ξύλο	N-Βουτανόλη	37.4	0.35	0.024
U16a	Εστεροποίηση	Φυτικό λάδι	Biodiesel	21.9	3.23	1.093
U16b	Εστεροποίηση	Φυτικό λάδι	Γλυκερόλη	21.9	3.23	1.094
U17	Αναερόβια χώνεψη	Φυτικό λάδι	Βιοαέριο	35.9	5.00	1.656
U18a	Ζύμωση	Καλαμπόκι	Ακετόνη	16.2	1.00	0.067
U18b	Ζύμωση	Καλαμπόκι	Βουτανόλη	16.3	1.02	0.067
U18c	Ζύμωση	Καλαμπόκι	Αιθανόλη	17.1	1.06	0.071
U19	Άμεση Αεριοποίηση	Ξύλο	Syngas	6.0	0.01	0.001
Bd_1	Κατάλυση	Φυτικό λάδι	FAME (biodiesel)	20.4	2.15	0.102
Bd_2	Κατάλυση	Τηγανόλαδο	FAME (biodiesel)	23.4	2.46	0.125
Bd_3	Κατάλυση	Τηγανόλαδο	FAME (biodiesel)	25.7	2.47	0.132
Bd_4	Εκχύλιση	Τηγανόλαδο	FAME (biodiesel)	31.6	2.32	0.144

### 3.2 Εύρεση Δεικτών (Descriptors)

Η εκτίμηση των μεγεθών ΑΚΖ θα γίνει με βάση την μοριακή δομή των βιοπροϊόντων, συνεπώς θα πρέπει να εντοπιστούν πληροφορίες (δείκτες) σχετικές με την μοριακή τους δομή και να συσχετιστούν με τα μεγέθη ΑΚΖ.

Η ιδέα στηρίζεται στην ευκολία εντοπισμού και υπολογισμού, αφού θα πρέπει να είναι ανιχνεύσιμες σε στοιχεία διαθέσιμα πριν την υλοποίηση της διεργασίας και η μοριακή δομή προσφέρει αυτήν ακριβώς την ιδιότητα- τον εύκολο εντοπισμό των επιθυμητών στοιχείων χωρίς να χρειάζεται αναπαράσταση ή μελέτη της διεργασίας.

Οι δείκτες που χρησιμοποιήθηκαν χωρίζονται σε 2 κατηγορίες:

#### 1) Μοριακοί

Οι μοριακοί δείκτες είναι βασισμένοι στην μοριακή δομή του προϊόντος. Αποτελούν την βασική ιδέα συσχέτισης με τα μεγέθη ΑΚΖ και ως πληροφορία είναι διαθέσιμη εφόσον το επιθυμητό προϊόν είναι γνωστό. Το είδος των μοριακών δεικτών βασίστηκε στις παρακάτω μεθοδολογίες:

#### 1.1) Εργαλείο Finechem Tool (Wernet et al, 2009)

Αν και ως εργαλείο αυτούσιο δεν είναι κατάλληλο για βιοδιυλιστήρια, λόγω του ότι αναφέρεται σε προϊόντα με τροφοδοσία φυσικό αέριο, οι δείκτες μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως πληροφορίες. Στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας 3) παρουσιάζονται οι δείκτες που χρησιμοποιεί το FinechemTool:

Πίνακας 3: Δείκτες του Finechem Tool

#### Δείκτες Finechem Tool

**Μοριακό βάρος ένωσης**

**Αριθμός ατόμων αζώτου στο μόριο**

**Αριθμός ατόμων αλογόνου (Φθόριο, Χλώριο, Βρώμιο) στο μόριο**

**Αριθμός δακτυλίων στο μόριο**

**Αριθμός τριτοταγών και τεταρτοταγών ατόμων άνθρακα στο μόριο**

**Αριθμός ετεροατόμων στους δακτυλίους**

**Αριθμός μοναδικών υποκαταστατών στους δακτυλίους**

**Αριθμός λειτουργικών ομάδων στο μόριο**

**Αριθμός οξυγόνων στις καρβονυλικές ομάδες (πχ αλδεΐδες, κετόνες) στο μόριο**

**Αριθμός όλων των υπόλοιπων ατόμων οξυγόνου**

## 1.2) Μέθοδος λειτουργικών ομάδων (Marcoulaki & Kokossis , 2000)

Μία ακόμα πηγή από την οποία δημιουργήθηκαν δείκτες είναι η μέθοδος των λειτουργικών ομάδων που χωρίζει την χημική ένωση σε ομάδες όπως  $-CH_2-$ ,  $-OH-$ ,  $-CH_3-$  κλπ. (Πρέπει να σημειωθεί ότι η έννοια των λειτουργικών ομάδων διαφέρει από την αντίστοιχη έννοια που αναφέρθηκε στο FinechemTool, όπως και φαίνεται από την εξήγηση της έννοιας του όρου και στις 2 περιπτώσεις). Η μέθοδος βασίζεται στην σύνθεση μορίων με σκοπό να έχουν τις επιθυμητές φυσικές ιδιότητες όπως αυτές προκύπτουν από τον συνδυασμό διαφορετικών λειτουργικών ομάδων.

Ο εντοπισμός των λειτουργικών ομάδων σε κάθε ένωση έγινε με την κωδικοποίηση της κάθε ένωσης σε SMILES (Simplified Molecular-Input Line-Entry System) (O'Donnell, 2008), η οποία είναι μια μορφή γραφής των χημικών ενώσεων με χρήση λατινικών χαρακτήρων και συμβόλων. Με χρήση δοθέντος αλγόριθμου σε γλώσσα Python, τα SMILES κάθε ένωσης επεξεργάζονται και στο τέλος εξάγονται οι λειτουργικές ομάδες κάθε ένωσης, όπως ορίστηκαν παραπάνω.

Ενδεικτικά, ορισμένες από τις λειτουργικές ομάδες παρουσιάζονται στον Πίνακα 4, μαζί με αυτές που επιλέχθηκαν τελικά ως υποψήφιοι δείκτες, των οποίων η επιλογή στηρίζεται στην συχνότητα εμφάνισης.

**Πίνακας 4: Παράθεση ορισμένων λειτουργικών ομάδων της συγκεκριμένης μεθοδολογίας. Με έντονα γράμματα παρουσιάζονται εκείνοι που επιλέχθηκαν ως υποψήφιοι δείκτες.**

Λειτουργικές ομάδες		
-CH <sub>3</sub>	>C<	<b>-OH</b>
>CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> =CH-	>C=C<
>CH-	-CH=CH-	CH <sub>3</sub> -NH <sub>2</sub>
<b>H(C=O)-</b>	HCOO-	

## 1.3) Διάφοροι

Ως διάφοροι θεωρούνται δείκτες που δεν έχουν ως πηγή κάποια μέθοδο αλλά είναι πληροφορίες σχετικές με την δομή της κάθε ένωσης π.χ αριθμός ατόμων, αριθμός ατόμων που δεν είναι υδρογόνα, κλπ.

## 2) Σχετικοί με χαρακτηριστικά της διεργασίας

Όπως αναφέρθηκε, πολλές διεργασίες έχουν την ίδια πρώτη ύλη και το ίδιο προϊόν αλλά διαφορετικό τρόπο παραγωγής και διαφορετικά μεγέθη AKZ. Για να ληφθεί υπόψη αυτό το χαρακτηριστικό, η μοριακή δομή δεν είναι αρκετή, όπως θα φανεί αργότερα στα αποτελέσματα.



Οπότε έγινε προσπάθεια να εξαχθούν περισσότερες πληροφορίες από τα δεδομένα που να διαφοροποιούν τις διεργασίες ανάλογα με τα χαρακτηριστικά τους. Για παράδειγμα παρατηρείται ότι όσες διεργασίες περιλαμβάνουν την χρήση μικροοργανισμών, ενζύμων κτλ στην βασική αντίδραση έχουν υψηλότερες τιμές AKZ, άρα ο κύριος τρόπος μετατροπής της τροφοδοσίας στο προϊόν είναι ένα χρήσιμο στοιχείο. Για να ποσοτικοποιηθεί αυτή η πληροφορία, η εκδοχή που χρησιμοποιήθηκε είναι ότι ο αριθμός 2 αντιπροσωπεύει τις διεργασίες με μετατροπή με χρήση μικροοργανισμών και 1 για όλες τις υπόλοιπες. Με το ίδιο σκεπτικό, ποσοτικοποιούνται στοιχεία όπως ο τύπος της τροφοδοσίας, το αν η διεργασία έχει ολοκληρωθεί ενεργειακά, αλλά και ο αριθμός των σταδίων μετατροπής στα οποία υπόκειται η αρχική τροφοδοσία μέχρι να παραχθεί το εκάστοτε προϊόν. Για παράδειγμα αν η αλυσίδα έχει την μορφή άχυρο-κυτταρίνη- αιθανόλη, ο αριθμός των σταδίων για την κυτταρίνη είναι 1 (άχυρο- κυτταρίνη) και για την αιθανόλη είναι 2 (άχυρο-κυτταρίνη και κυτταρίνη-αιθανόλη).

Η αυθαίρετη χρήση του αριθμού 1 και 2 για μια πληροφορία αντί για πχ 1 και 0 ή οποιεσδήποτε άλλες τιμές, δεν έχει κάποια ουσιαστική διαφορά καθώς μπορεί έτσι να αλλάζουν οι τιμές των συντελεστών της γραμμικής εξίσωσης αλλά τα αποτελέσματα συσχέτισης είναι τα ίδια.

Στον Πίνακα 5 παρουσιάζονται οι δείκτες που συλλέχθηκαν ως υποψήφιοι από όλες τις παραπάνω μεθόδους και θα επεξεργαστούν με την τεχνική της παλινδρόμησης προκειμένου να εντοπιστούν εκείνοι που θα είναι ικανοί να εκτιμήσουν τα αντίστοιχα μεγέθη AKZ. Στον Πίνακα Α του παραρτήματος καταγράφονται όλοι οι δείκτες για όλες τις διεργασίες.

Πίνακας 5 : Λίστα με τους δείκτες που συγκεντρώθηκαν. Παρουσιάζεται η προέλευσή τους, ανάλογα με το εργαλείο ή την μεθοδολογία στην οποία βασίζονται καθώς και λεπτομέρειες για τον υπολογισμό τους. Εκείνοι που προέρχονται από το Finechem tool (Wernet et al. 2009) καθώς και οι διάφοροι αναφέρονται στην μοριακή δομή των ενώσεων, ενώ οι σχετικοί με την διεργασία περιλαμβάνουν πληροφορίες για χαρακτηριστικά όπως την ύπαρξη ή μη ενεργειακής ολοκλήρωσης και το είδος της κύριου τρόπου σύνθεσης του προϊόντος. Το 3<sup>ο</sup> γκρουπ, που είναι η μέθοδος των λειτουργικών ομάδων, βασίζεται στον διαχωρισμό των μορίων σε λειτουργικές ομάδες.

	Δείκτες	ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΙΕΣ	ΠΡΟΕΛΕΥΣΗ
1	Μοριακό βάρος	Για τα πολυμερή υπολογίστηκε το μοριακό βάρος των μονομερών Είναι το άθροισμα των εξής ομάδων: Υδροξύλια, Καρβ. οξέα, Αμίνες, νιτρο-ομάδες, Αιθέρες, Εστέρες, Κετόνες, Αλδεύδες, Ανυδρίτες, Νιτρίλια, Δακτύλιοι, Άτομα φθορίου/χλωρίου, Ισονιτρίλια, Καρβαμικές ομάδες, Σουλφονικά οξέα, 2 φορές τον αριθμό των μη αρωματικών διπλών δεσμών C-C και άλλα πχ S, P, N=N, Br, P=O, S=O, O=S=O	Finechem Tool
2	# Λειτουργικών ομάδων	Όλα τα άτομα οξυγόνου εκτός των Σύνθετων ατόμων Οξυγόνου	Finechem Tool
3	# Απλών ατόμων οξυγόνου	Ο αριθμός των σταδίων σύνθεσης στα οποία υποβάλλεται η αρχική τροφοδοσία μέχρι να μετατραπεί στο επιθυμητό προϊόν π.χ. 1 για άχυρο-κυτταρίνη, 2 για άχυρο-κυτταρίνη-αιθανόλη	Finechem Tool
4	# Χημικών Σταδίων		Σχετικοί με Διεργασία
5	# Όλων των Ατόμων οξυγόνου		Διάφοροι
6	# Όλων των Ατόμων		Διάφοροι
7	# Ατόμων εκτός από H		Διάφοροι
8	(# άτομα C)/(#άτομα H)		Διάφοροι
9	Κύριος Τρόπος Μετατροπής	2 για την παρουσία μικροοργανισμών στον κύρια αντίδραση μετατροπής (π.χ ζύμωση) και 1 για την απουσία τους	Σχετικοί με Διεργασία
10	Πρώτη ύλη	1 αν το είδος τροφοδοσίας είναι άχυρο και 0 για τα υπόλοιπα είδη	Σχετικοί με Διεργασία
11	Ενεργειακή ολοκλήρωση	1 αν η διεργασία έχει ολοκληρωθεί ενεργειακά , διαφορετικά είναι 0	Σχετικοί με Διεργασία
12	# ατόμων N2,F,Cl,Br		Finechem Tool
13	# τριτοταγών και τεταρτοταγών ατόμων C		Finechem Tool

14	# Δακτυλίων		Finechem Tool
15	# Ετεροατόμων στους Δακτυλίους		Finechem Tool
16	# Μοναδικών Αρωματικών Υποκαταστατών		Finechem Tool
17	# Σύνθετων ατόμων Οξυγόνου	Περιλαμβάνει τον αριθμό των οξυγόνων σε αλδεύδες, κετόνες και αιθέρες	Finechem Tool
18	# ομάδων -CH-		Μέθοδος Λειτ. Ομάδων
19	# ομάδων -CH <sub>2</sub> -		Μέθοδος Λειτ. Ομάδων
20	# ομάδων -CH <sub>3</sub> -		Μέθοδος Λειτ. Ομάδων
21	# ομάδων -OH-		Μέθοδος Λειτ. Ομάδων

### 3.3 Υπολογισμός μεγεθών AKZ

Η εκπαίδευση του μοντέλου θα γίνει με τα μεγέθη AKZ (CED, GWP, Eco99) που υπολογίστηκαν αναλυτικά με την μεθοδολογία AKZ. Τα μεγέθη AKZ υπολογίστηκαν εκτός πλαισίου της εργασίας.

Η μέθοδος AKZ που εφαρμόστηκε θα παρουσιαστεί συνοπτικά.

Αρχικά βρίσκονται οι τιμές των μεγεθών AKZ για τις διεργασίες παραγωγής πρώτων υλών (π.χ άχυρο, ξύλο) καθώς και τις βοηθητικές (νερό) και τις ενεργειακές παροχές μέσω της EcoInvent, όσο το δυνατόν πιο κοντά στις συνθήκες που επικρατούν σε κάθε διεργασία. Οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις που υπολογίζονται είναι το άθροισμα αυτών από τις πρώτες ύλες και τις απαιτούμενες ενεργειακές παροχές, αφαιρώντας τις επιπτώσεις που έχουν τα παραπροϊόντα στις περιπτώσεις που αυτά έχουν θεωρηθεί ότι έχουν εμπορική αξία..

Μία σημαντική παράμετρος που επηρεάζει τα αποτελέσματα εκτίμησης μεγεθών στην AKZ είναι η ύπαρξη πολλαπλών προϊόντων σε μια διεργασία (Weidema, 2000). Η τροφοδοσία και οι ενεργειακές παροχές που παρέχονται αφορούν το σύνολο της διεργασίας, άρα και οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις που υπολογίζονται αφορούν το σύνολο των προϊόντων σε κάθε διεργασία, κάτι που δεν εξυπηρετεί το σκοπό του μοντέλου αφού εξετάζει κατά βάση χαρακτηριστικά *προϊόντων*. Άρα είναι σημαντικό τα μεγέθη AKZ που θα υπολογιστούν να αναφέρονται σε *προϊόν*.

Στην προκειμένη περίπτωση, η ύπαρξη πολλαπλών προϊόντων απαιτεί την κατανομή των μεγεθών AKZ στα επιμέρους ρεύματα, κάτι που μπορεί να επιτευχθεί με 2 μεθόδους:

1) Allocation (Brander et al, 2011) (Wardenaar et al, 2012)

Είναι η μέθοδος που κατανέμει τα μεγέθη AKZ που υπολογίζονται σε κάθε διεργασία, στα ρεύματα προϊόντων ανάλογα με μία φυσική ιδιότητα π.χ μάζα, όγκο, κόστος, ενέργεια κλπ. Τα αποτελέσματα διαφέρουν ανάλογα με τον παράγοντα που θα επιλεγεί για την κατανομή αλλά ως μέθοδος συχνά δεν λαμβάνει υπόψιν ευρύτερες λειτουργίες του συστήματος. Επίσης θα πρέπει να συμπεριλάβει κανείς και το μέγεθος των αγορών στις οποίες διατίθενται τα συμπροϊόντα- ειδικά σε παραγωγή μεγάλης κλίμακας.

2) Substitution (System Expansion) (Brander et al, 2011)

Είναι η μέθοδος που θεωρεί ότι η παραγωγή των συμπροϊόντων αντικαθιστά την παραγωγή άλλων προϊόντων που θα χρησιμοποιηθούν για τον ίδιο σκοπό- δηλαδή αν π.χ μαζί με το κύριο προϊόν Α παράγεται και το προϊόν Β, το Β θα μπορούσε να αντικαταστήσει ένα προϊόν Γ το οποίο χρησιμοποιείται αυτήν την στιγμή στην αγορά- δηλαδή εξοικονομεί μέρος παραγωγής του Γ κ.ο.κ.

Εφαρμόζεται επεκτείνοντας τα όρια του συστήματος ώστε να συμπεριλάβουν τις πρόσθετες λειτουργίες όλων των συμπροϊόντων.

Σύμφωνα με το πρότυπο ISO 14040-44, η μέθοδος allocation πρέπει να αποφεύγεται όπου αυτό είναι δυνατό (Weidema, 2000) και να εφαρμόζεται η μέθοδος substitution, είτε διαχωρίζοντας επιπλέον κάποιες διεργασίες, είτε διευρύνοντας τα όρια του συστήματος ώστε να εκτιμηθεί πλήρως η επίδραση των συμπροϊόντων (Bjorn Sanden et al, 2013). Στις διεργασίες που είναι διαθέσιμες εφαρμόστηκε substitution εκτός από κάποιες στις οποίες εφαρμόστηκε allocation με βάση την μάζική ροή των ρευμάτων.

### 3.4 Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Multilinear regression)

Σε δεύτερο στάδιο, τα μεγέθη AKZ που υπολογίστηκαν από τα διαγράμματα ροής με βάση την μεθοδολογία AKZ, πρέπει να συσχετιστούν με τους υποψήφιους δείκτες που συγκεντρώθηκαν από τις μεθοδολογίες του προηγούμενου κεφαλαίου.

Η συσχέτιση έχει την εξής μορφή:

$$Y \approx f(X, \beta)$$

Όπου:

Οι δείκτες αποτελούν τις ανεξάρτητες μεταβλητές (X)

Το κάθε μέγεθος AKZ αποτελούν την εξαρτημένη μεταβλητή (Y)

Το  $\beta$  αντιπροσωπεύει επιπλέον άγνωστες παραμέτρους, που δεν υπεισέρχονται στην προκείμενη περίπτωση

Θα χρησιμοποιηθεί η τεχνική της πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης, η οποία είναι ένα στατιστικό εργαλείο εύρεσης γραμμικής σχέσης ανάμεσα σε παραπάνω από μία ανεξάρτητες μεταβλητές και μία εξαρτημένη μεταβλητή (Bingham, 2010). Η επιλογή έναντι άλλων τεχνικών στηρίζεται στο ότι:

1. Η πρόβλεψη μεγεθών AKZ σε βιοδιυλιστήρια αποτελεί μια πρώτη προσπάθεια για προϊόντα από βιομάζα, οπότε το σκεπτικό είναι να εφαρμοστεί η απλούστερη μεθοδολογία και να ταυτοποιηθεί οποιαδήποτε συσχέτιση σε πρώτο στάδιο.

2. Το σύνολο των δεδομένων είναι σχετικά μικρό (54 σημεία), κάτι που δεν θα οδηγήσει σε αξιόπιστα αποτελέσματα σε νευρωνικά δίκτυα, αλλά είναι επιτρεπτό στα πλαίσια παλινδρόμησης. Είναι στατιστικά απαραίτητο να ληφθούν υπόψιν τα εξής σημεία:
- Το πλήθος των δεδομένων
  - Το πλήθος των δεικτών που θα χρησιμοποιηθούν
  - Η αναλογία δεδομένων/ δεικτών ώστε να αποφευχθεί το overfitting, δηλαδή η υπερβολική προσαρμογή στα δεδομένα με αποτέλεσμα το τελικό μοντέλο να μην είναι ικανοποιητικό σε δεδομένα εκτός εκπαίδευσης

Το διάστημα εμπιστοσύνης που επιλέχτηκε είναι 95%, καθώς αποτελεί την συνηθισμένη επιλογή σε εφαρμοσμένα μοντέλα παλινδρόμησης (Chu, 2002).

Θα βρεθεί ο βέλτιστος συνδυασμός δεικτών για τα καλύτερα αποτελέσματα και τέλος, θα επιτραπεί να χρησιμοποιηθεί ένας δείκτης ανά 5 δεδομένα με βάση εμπειρικούς κανόνες (Kleinbaum et al, 2013), δηλαδή σε σύνολο 54 δεδομένων θα μπορούν να επιλεγούν μέχρι και 10 δείκτες.

### 3.5 Αλγόριθμος Παλινδρόμησης και Τεχνική Cross-Validation

Η γραμμική παλινδρόμηση θα γίνει μέσω ενός αλγόριθμου που θα υπολογίζει και θα αξιολογεί τα αποτελέσματα με βάση τους υποψήφιους δείκτες που θα εξετάζει κάθε φορά. Η δομή του αλγόριθμου αποτελείται από τα εξής μέρη:

#### 1) Εκπαίδευση (Training)

Έχοντας υπολογίσει τα μεγέθη AKZ και έχοντας τους αντίστοιχους δείκτες για κάθε προϊόν, χρησιμοποιείται ένα υποσύνολο των δεδομένων στον αλγόριθμο για να κατασκευάσει το μοντέλο. Αυτό το στάδιο ονομάζεται «εκπαίδευση» του μοντέλου, δηλαδή από γνωστά δεδομένα εντοπίζεται μια σχέση η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί μελλοντικά.

#### 2) Επικύρωση (Validation) (El-Shaarawi & Piegorsch, 2001)

Με την ολοκλήρωση της εκπαίδευσης, το μοντέλο έχει κατασκευαστεί. Πρέπει όμως να αξιολογηθεί ιδανικά από δεδομένα που δεν συμπεριλαμβάνονται στην εκπαίδευση, ώστε να εξεταστεί η απόδοσή του από εξωτερικές πηγές, και να αποφευχθεί το overfitting. Η έννοια του overfitting συναντάται σε στατιστικά μοντέλα και είναι ότι το αποτέλεσμα περιγράφει τον θόρυβο των δεδομένων ή ακόμα και τυχαία σφάλματα αντί για την βαθύτερη συσχέτιση. Τότε προβλέπει άριστα

τα δεδομένα με τα οποία έχει εκπαιδευτεί, γιατί τα έχει απομνημονεύσει, αλλά έχει ασήμαντη ισχύ πρόβλεψης σε δεδομένα εκτός του σετ εκπαίδευσης, αφού δεν έχει τάση γενίκευσης. Το φαινόμενο συμβαίνει συνήθως όταν ο λόγος παρατηρήσεων/δεικτών είναι μικρός, δηλαδή αντιστοιχούν πολλοί δείκτες σε λίγα δεδομένα.

Η επικύρωση γίνεται με τα δεδομένα που δεν συμπεριλήφθησαν στην εκπαίδευση. Οι δείκτες εισάγονται στο μοντέλο, το οποίο με βάση τους συντελεστές που προέκυψαν από την εκπαίδευση, υπολογίζει τα αντίστοιχα μεγέθη AKZ τα οποία στη συνέχεια συγκρίνονται με τα ήδη γνωστά μεγέθη AKZ από το σετ επικύρωσης.

Όμως δεν υπάρχουν επιπλέον διαθέσιμα δεδομένα πέρα από τα 54 σημεία που αναφέρθηκαν. Οπότε λόγω έλλειψης επιπλέον τιμών αλλά και ανάγκης χρήσης όλης της βάσης δεδομένων με σκοπό την βέλτιστη στατιστική απόδοση ως λύση επιλέγεται η παρακάτω μεθοδολογία που ονομάζεται leave-one-out cross validation:

### **Τεχνική Leave-one-out Cross-Validation**

Αρχικά τα 54 δεδομένα με τους αντίστοιχους δείκτες χωρίζονται σε σετ εκπαίδευσης (training set) και σετ επικύρωσης (validation set) . Το σετ επικύρωσης, ως εξωτερικός παράγοντας, θα χρησιμοποιήσει τους συντελεστές που προέκυψαν από το σετ εκπαίδευσης, θα εισάγει τις δικές του ανεξάρτητες μεταβλητές (δείκτες) και θα συγκρίνει τα αποτελέσματα με τις τιμές των μεγεθών AKZ από το σετ επικύρωσης. Η έννοια του leave-one-out (El-Shaarawi & Piegorsch, 2001) σημαίνει ότι το σετ επικύρωσης αποτελείται από δεδομένα για 1 διεργασία μόνο ενώ το σετ εκπαίδευσης από τις υπόλοιπα 53. Αυτή η τεχνική εφαρμόζεται ώστε κάθε φορά το σετ επικύρωσης να είναι για διαφορετική διεργασία. Εφόσον υπάρχουν σύνολο 54 δεδομένα, αυτό σημαίνει ότι θα κατασκευαστούν 54 διαφορετικά σετ εκπαίδευσης των 53 δεδομένων και 54 σετ επικύρωσης με την υπολειπόμενη διεργασία κάθε φορά.

Οπότε για να κατασκευαστεί το μοντέλο, η παλινδρόμηση χρησιμοποιεί μόνο το σετ εκπαίδευσης κάθε φορά. Στα αποτελέσματα που θα υπολογιστούν θα είναι και οι συντελεστές της γραμμικής εξίσωσης- ένας για κάθε δείκτη- και μία σταθερά. Οπότε θα είναι μία εξίσωση της μορφής  $y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_0$  με τα  $b_1, b_2, b_3, \dots, b_0$  που είναι οι συντελεστές, γνωστά. Για να αξιολογηθεί το μοντέλο, εισάγονται οι δείκτες από το σετ επικύρωσης στην εξίσωση και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με τα αντίστοιχα μεγέθη AKZ που έχουν υπολογιστεί από την αρχή με την μεθοδολογία AKZ. Έτσι το μοντέλο είναι σαν να αξιολογείται από μία εξωτερική πηγή.

Η τεχνική του leave-one-out εφαρμόστηκε λόγω του μικρού μεγέθους του πλήθους δεδομένων. Συνήθως εφαρμόζεται μέθοδος με 5, 10 ή και παραπάνω δεδομένα στο σετ επικύρωσης, αλλά στην συγκεκριμένη περίπτωση τα δεδομένα στο σετ εκπαίδευσης θα ήταν πολύ λίγα και τα

αποτελέσματα του μοντέλου ακόμα και να ήταν στατιστικά ικανοποιητικά, θα ήταν υπό αμφισβήτηση.

Με σκοπό την αυτοματοποίηση της όλης διαδικασίας, κατασκευάστηκε ένας αλγόριθμος στο Matlab. Ως στοιχείο εισόδου είναι 2 πίνακες : ο ένας περιέχει τα υπολογισμένα μεγέθη AKZ με την μεθοδολογία AKZ για τις 54 διεργασίες και ο άλλος τους αντίστοιχους υποψήφιους δείκτες για κάθε διεργασία. Στον Πίνακα 6 φαίνεται η επιλογή μιας διεργασίας κάθε φορά ως σετ επικύρωσης ενώ τα υπόλοιπα συνθέτουν το σετ εκπαίδευσης κ.ο.κ.

**Πίνακας 6:** Το σετ επικύρωσης αποτελείται από μία σειρά δεδομένων κάθε φορά ενώ οι υπόλοιπες εκπαιδεύουν το μοντέλο. Ενδεικτικά στην αρχή επιλέγεται η σειρά 1, μετά η σειρά 2 κ.ο.κ.

Μέγεθος AKZ	Δείκτης 1 (π.χ. Μοριακό Βάρος)	Δείκτης 2	Δείκτης 3	Δείκτης 4	...
Y1	XA1	XB1	XC1	XD1	Επικύρωση
Y2	XA2	XB2	XC2	XD2	Εκπαίδευση
Y3	XA3	XB3	XC3	XD3	Εκπαίδευση
Y4	XA4	XB4	XC4	XD4	Εκπαίδευση
...	...	...	...	...	...
...	...	...	...	...	...

Μέγεθος AKZ	Δείκτης 1 (π.χ. Μοριακό Βάρος)	Δείκτης 2	Δείκτης 3	Δείκτης 4	...
Y1	XA1	XB1	XC1	XD1	Εκπαίδευση
Y2	XA2	XB2	XC2	XD2	Επικύρωση
Y3	XA3	XB3	XC3	XD3	Εκπαίδευση
Y4	XA4	XB4	XC4	XD4	Εκπαίδευση
...	...	...	...	...	...
...	...	...	...	...	...

### 3) Αξιολόγηση

Για να εξεταστεί η στατιστική αξία του μοντέλου υπολογίζονται τα παρακάτω κριτήρια (Quinn & Keough, 2002), (Bingham, 2010):

- $R^2$  ή συντελεστής προσδιορισμού (coefficient of determination) (Spiess et al, 2010). Εξετάζει πόσο καλά προσαρμόζονται τα δεδομένα στο μοντέλο και ορίζεται από τον τύπο:

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} \quad \text{με } 0 \leq R^2 \leq 1$$



Όπου RSS (Residual Sum of Squares) είναι το άθροισμα τετραγώνων των υπολοίπων και υπολογίζεται από τον τύπο:

$$RSS = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2$$

Όπου  $y_i$  είναι η τιμή του μεγέθους AKZ που υπολογίστηκε με την μεθοδολογία AKZ και  $f(x_i)$  η αντίστοιχη τιμή AKZ που υπολογίζεται από το μοντέλο.

Και όπου TSS (Total Sum of Squares) είναι το συνολικό άθροισμα τετραγώνων και ορίζεται από τον τύπο:

$$TSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

Όπου  $\bar{y}$  είναι η μέση τιμή των μεγεθών AKZ από το αρχικό σετ. Ως μέγεθος υπολογίζει την διασπορά των τιμών από τον μέσο όρο τους.

- Προσαρμοσμένο  $R^2$  ( $R^2$  adjusted) (Wang et al, 2003)  
Ο συντελεστής προδιορισμού  $R^2$  αυξάνεται πάντα όσο αυξάνεται ο αριθμός των δεικτών. Η προσαρμοσμένη εκδοχή του λειτουργεί διαφορετικά και αυξάνεται μόνο όταν ο επιπλέον δείκτης έχει θετική συμβολή στην συσχέτιση. Ορίζεται ως:

$$R^2_{adj} = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-p-1} \quad \text{με } 0 \leq R^2_{adj} \leq 1$$

Όπου  $n$  το πλήθος των δεδομένων και  $p$  ο αριθμός των δεικτών.

- Κριτήριο Akaike (Akaike criteria information) (Akaike, 1974)

Ορίζεται ως :

$$\begin{aligned} AIC &= -2 \ln(\text{maximized likelihood function}) \\ &\quad - 2(\text{number of independently adjusted parameters}) \\ &= N \ln \left( \frac{RSS}{N} \right) - 2k \end{aligned}$$

Και ειδικά για αριθμητικά μικρό σετ δεδομένων (n) ή μεγάλο αριθμό δεικτών(k) (λόγος n/k<40) επιφέρει και έναν παράγοντα διόρθωσης με αποτέλεσμα η τελική του μορφή να είναι η παρακάτω (Sheather, 2009):

$$AICc = AIC + \frac{2k(k+1)}{n-k-1}$$

Η διορθωμένη μορφή λειτουργεί σαν το προσαρμοσμένο R<sup>2</sup>, υπολογίζοντας την συμβολή κάθε δείκτη στο στατιστικό αποτέλεσμα. Ως νούμερο δεν έχει κάποια κλίμακα αλλά εξαρτάται από τις τιμές των δεδομένων, οπότε μόνο του δεν έχει κάποια συγκριτική αξία, παρά μόνο αν συγκριθεί με μία αντίστοιχη τιμή ενός άλλου μοντέλου. Όσο μικρότερη η τιμή, τόσο στατιστικά καλύτερο το μοντέλο.

Οι 3 δείκτες που αναφέρθηκαν εφαρμόστηκαν για όλα τα σετ εκπαίδευσης και για τον μέσο όρο αυτών. Αυτοί οι δείκτες είναι που ενδιαφέρουν πιο πολύ καθώς δείχνουν πως συμπεριφέρεται το μοντέλο όταν επεξεργαστεί ξένο δεδομένο και πόσο κοντά είναι η υπολογιζόμενη τιμή από την πειραματική.

Έχοντας εντοπίσει τους δείκτες που θα μπορούσαν να συσχετιστούν με τα μεγέθη AKZ, πρέπει να επιλεγούν το πολύ 10, ώστε ο λόγος n/k, όπου n=54 σημεία, να μην είναι κάτω από 5.

Η επιλογή έγινε ως εξής: ο αλγόριθμος τρέχει με προσθήκη έναν-έναν δείκτη(sequential analysis). Αρχικά με τον 1<sup>ο</sup>, μετά τον 1<sup>ο</sup> και τον 2<sup>ο</sup> κ.ο.κ. Κάθε φορά σημειώνεται η τιμή του προσαρμοσμένου R<sup>2</sup> για το σετ επικύρωσης. Αν αυξάνεται, σημαίνει ότι ο δείκτης έχει θετική συμβολή στην συσχέτιση, οπότε επιλέγεται.

Για παράδειγμα έστω ότι η τιμή του προσαρμοσμένου R<sup>2</sup>, αν υπάρχει μόνο ένας δείκτης, ο 1, για το σετ επικύρωσης είναι 0.7. Ακολουθεί προσθήκη του 2<sup>ου</sup>, οπότε αν η τιμή του adjusted R<sup>2</sup> είναι μεγαλύτερη από 0.7, ο 2<sup>ος</sup> κρατείται, και με τους δείκτες 1,2 εξετάζεται ο 3<sup>ος</sup>. Αν η τιμή στην προσθήκη του 2<sup>ου</sup> ήταν μικρότερη από 0.7, τότε σημαίνει ότι ο 2 δεν συμβάλλει στην συσχέτιση οπότε παραλείπεται και εξετάζεται έπειτα ο 3<sup>ος</sup>.

Οπότε αν η επιλογή των δεικτών έχει π.χ την μορφή (1,4,5,8,9), τότε οι παραλειπόμενοι δείκτες (2,3,6,7...) δεν είχαν θετική επίδραση στο αποτέλεσμα.

Όμως οι δείκτες μεταξύ τους συνδέονται, με αποτέλεσμα κάποιοι να εμφανίζουν αρνητική επίδραση αρχικά αλλά με την παρουσία κάποιων άλλων, να επιδρούν θετικά, όπως και ισχύει το αντίστροφο. Οπότε ο έλεγχος πραγματοποιείται εξαντλώντας όλους του πιθανούς συνδυασμούς.

Επίσης κατασκευάστηκε και μία εναλλακτική μορφή του αλγόριθμου, χωρίς εκπαίδευση ή επικύρωση, που πραγματοποιεί παλινδρόμηση και των 54 διεργασιών με τα μεγέθη ΑΚΖ, χρησιμοποιώντας μόνο τους δείκτες που επιλέχθηκαν ως οι καλύτεροι από το μοντέλο. Σκοπός είναι ο υπολογισμός, με ακρίβεια, των συντελεστών για κάθε δείκτη.

Οπότε συνοπτικά παρουσιάζονται 3 ειδών αποτελέσματα :

- Για την εκπαίδευση – καθαρά για εσωτερική αξιολόγηση συσχέτισης των δεδομένων
- Για την επικύρωση- αποτελέσματα που προσομοιάζουν την συμπεριφορά του μοντέλου αν εισαχθεί δεδομένο εκτός του σετ εκπαίδευσης. Είναι τα πιο σημαντικά αποτελέσματα καθώς αξιολογούν εξωτερικά το μοντέλο και τα βασικά αποτελέσματα θα αφορούν αυτά τα δεδομένα.
- Για την παλινδρόμηση χωρίς εκπαίδευση/επικύρωση, απλά για να υπολογιστούν με ακρίβεια οι συντελεστές της τελικής εξίσωσης που συμπεριλαμβάνουν και τις 54 διεργασίες.

Από εδώ και παρακάτω όταν αναφέρονται τα αποτελέσματα του μοντέλου θα εννοούνται οι τιμές του σετ επικύρωσης.

## 4 Αποτελέσματα

### 4.1 Βασικό μοντέλο

Ακολουθώντας την παραπάνω μεθοδολογία, παρουσιάζονται στον Πίνακα 7 τα αποτελέσματα για ένα από τα στατιστικά βέλτιστα μοντέλα. Οι δείκτες που αφορούν την εκπαίδευση αναφέρονται στον μέσο όρο των σετ εκπαίδευσης.

Πέρα από τους δείκτες που επιλέχθηκαν, αναφέρεται και οι αντίστοιχοι συντελεστές της γραμμικής εξίσωσης. Για τον υπολογισμό τους, ο αλγόριθμος τροποποιήθηκε ώστε να παραλειφθεί η επικύρωση και να πραγματοποιείται μια απλή παλινδρόμηση με τους βέλτιστους δείκτες που προέκυψαν. Επίσης παρουσιάζεται και η τυπική απόκλιση.

Για το CED οι δείκτες που επιλέχθηκαν είναι : το μοριακό βάρος, ο αριθμός των χημικών σταδίων, ο αριθμός ατόμων εκτός από Η, ο λόγος (ατόμων C/ άτομα Η), η πρώτη ύλη, η ύπαρξη ενεργειακής ολοκλήρωσης , ο αριθμός ομάδων -CH<sub>2</sub>- και ο αριθμός ομάδων -OH-. Η ενεργειακή ολοκλήρωση και ο αριθμός των χημικών σταδίων ήταν αναμενόμενο να επιλεγούν, καθώς η ολοκλήρωση συνεπάγει μειωμένη ενεργειακή κατανάλωση άρα και χαμηλότερες περιβαλλοντικές επιπτώσεις ,ενώ όσο περισσότερα στάδια απαιτούνται για την παραγωγή μιας ένωσης είναι λογικό να αυξάνεται η συνολική ανάγκη σε ενέργεια.

Οι υπόλοιποι δείκτες αποκαλύπτουν μία σχέση ανάμεσα σε σημαντικές πληροφορίες και τα μεγέθη AKZ, καθώς το είδος της πρώτης ύλης και το είδος των ατόμων του μορίου συνδέονται με την ενέργεια που απαιτείται για την επεξεργασία τους. Αυτό όμως δεν αποτελεί γενικό συμπέρασμα καθώς αφορά ένα σύνολο δεδομένων με συγκεκριμένα χαρακτηριστικά: ελάχιστες ενώσεις είναι πολυμερή ή αρωματικά, δεν υπάρχουν ιδιαίτερα πολύπλοκες λειτουργικές ομάδες και οι περισσότερες ενώσεις είναι απλές στην δομή τους. Είναι πολύ πιθανόν τα αποτελέσματα να ήταν διαφορετικά αν υπήρχαν προϊόντα από άλλες χημικές τάξεις (π.χ. νιτρίλια, εστέρες) στο σύνολο που μελετήθηκε. Συνεπώς, είναι δυνατό να ταυτοποιηθεί απλά μια σχέση ανάμεσα στα μεγέθη AKZ και τα δομικά χαρακτηριστικά απλών ενώσεων (κατά βάση αλκοόλες, υδρογονάνθρακες, κετόνες).

**Πίνακας 7:** Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για ένα από τα εξαγόμενα μοντέλα και για τα 3 μεγέθη ΑΚΖ , καθώς και οι δείκτες που επιλέχθηκαν με τους αντίστοιχους συντελεστές και την τυπική απόκλισή τους. Οι δείκτες αξιολόγησης της παλινδρόμησης αναφέρονται ξεχωριστά για την μέση τιμή των σετ εκπαίδευσης του μοντέλου και για το σετ επικύρωσης, αξιολογώντας έτσι το μοντέλο τόσο εσωτερικά όσο και εξωτερικά.

		CED (MJ)	GWP(100a, kg CO2 eq)	Eco99
<b>ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	0.91	0.86	0.16
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.90	0.83	0.11
	Δείκτης Ακαίκε	368.28	43.92	-104.15
<b>ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	0.88	0.80	0.02
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.86	0.76	-0.04
	Δείκτης Ακαίκε	381.67	62.32	-95.96
Δείκτες				
1	Μοριακό βάρος	0.83 ± 0.0384	0.07 ± 0.002	-0.42 ± 0.00
2	# Λειτουργικών ομάδων			
3	# Απλών ατόμων οξυγόνου			
4	# Χημικών Σταδίων	11.07 ± 0.751		
5	# Όλων των Ατόμων οξυγόνου			
6	# Όλων των Ατόμων		-0.25 ± 0.024	
7	# Ατόμων εκτός από Η	-28.74 ± 0.704	-1.27 ± 0.04	
8	(# Άτομα C)/(# Άτομα Η)	81.89 ± 4.626	4.99 ± 0.295	
9	Είδος Παραγωγής		0.73 ± 0.07	
10	Πρώτη ύλη	177.88 ± 2.425	5.64 ± 0.109	0.48 ± 0.015
11	Ενεργειακή ολοκλήρωση	24.81 ± 2.04	0.94 ± 0.082	
12	# Ατόμων N2,F,Cl,Br			
13	# Τριτοταγών και Τεταρτοταγών ατόμων C			
14	# Δακτυλίων			
15	# Ετεροατόμων στους Δακτυλίους			
16	# Μοναδικών Αρωματικών Υποκαταστατών			
17	# Σύνθετων ατόμων Οξυγόνου			
18	# ομάδων -CH-		-0.44 ± 0.034	
19	# ομάδων -CH2-	25.28 ± 0.4	1.46 ± 0.029	0.39 ± 0.003
20	# ομάδων -CH3-			
21	# ομάδων -OH-	-10.27 ± 0.407		

Στοιχεία όπως ο αριθμός των δακτυλίων ή ο αριθμός ατόμων N2/Cl/Br εφαρμόζουν σε ελάχιστα προϊόντα οπότε δεν είναι ικανά για συσχέτιση όλου του συνόλου. Είναι δυνατό να παραληφθούν εξ'αρχής αλλά είναι προτιμότερο η διαλογή να γίνει με βάση τον αλγόριθμο, βλέποντας έτσι στο μεταξύ κατά πόσο συμβάλλουν αρνητικά, αν όχι θετικά.

Για το GWP οι δείκτες είναι ελαφρώς διαφορετικοί. Ο κύριος τρόπος μετατροπής, ο αριθμός όλων των ατόμων και ο αριθμός ομάδων –CH έχουν αντικαταστήσει τον αριθμό χημικών σταδίων και τον αριθμό των ομάδων –OH ως πιο αποδοτικοί δείκτες. Η ικανότητα πρόβλεψης δεν είναι τόσο υψηλή όσο με το CED (0.76 έναντι 0.86 για το σετ επικύρωσης), και ενδεχομένως να στηρίζεται στο είδος των δεικτών. Το GWP αφορά εκπομπές CO<sub>2</sub> άρα πληροφορίες σχετικά με τα παραπροϊόντα, το είδος των παράλληλων αντιδράσεων και τις εκπομπές ρύπων θα είναι πιο χρήσιμες για ακριβέστερη πρόβλεψη.

Ο δείκτης Eco99 δεν ήταν δυνατό να συχετιστεί με τα μεγέθη AKZ με τους υπάρχοντες δείκτες. Όπως και με το GWP, χρειάζονται άλλου είδους δείκτες για την πρόβλεψή του. Ο Eco99 είναι ένας περιβαλλοντικός δείκτης, οπότε δεδομένα για τοξικότητα, καρκινογόνα αέρια ή βαρέα μέταλλα να είναι πιο κατάλληλα για μια τέτοιου είδους ανάλυση. Παρόλα αυτά, ο ίδιος ο Eco99 είναι ένα σύμπλεγμα 11 παραμέτρων, με διαφορετική σημασία η καθεμία, οι οποίες εξετάστηκαν ξεχωριστά ώστε να φανεί αν τουλάχιστον μπορεί να ερμηνευθεί κάποια με βάση τους υποψήφιους δείκτες. Στον Πίνακα Β παρουσιάζονται τα βέλτιστα αποτελέσματα για κάθε παράμετρο. Ορισμένες έχουν αποδοθεί αρκετά καλά ενώ άλλες δεν παρουσιάζουν κάποια συσχέτιση.

Από τις 11 παραμέτρους, ικανοποιητική συσχέτιση (Προσαρμοσμένο R<sup>2</sup> επικύρωσης > 0.7) παρουσιάζουν οι:

- Καρκινογενή
- Αλλαγή κλίματος
- Ακτινοβολία

Μέτρια συσχέτιση (0.3 < Προσαρμοσμένο R<sup>2</sup> επικύρωσης < 0.7) εμφανίζουν οι:

- Εισπνεόμενα οργανικά σωματίδια
- Εισπνεόμενα ανόργανα σωματίδια
- Τοξικότητα
- Μεταλλικά
- Ορυκτά Καύσιμα

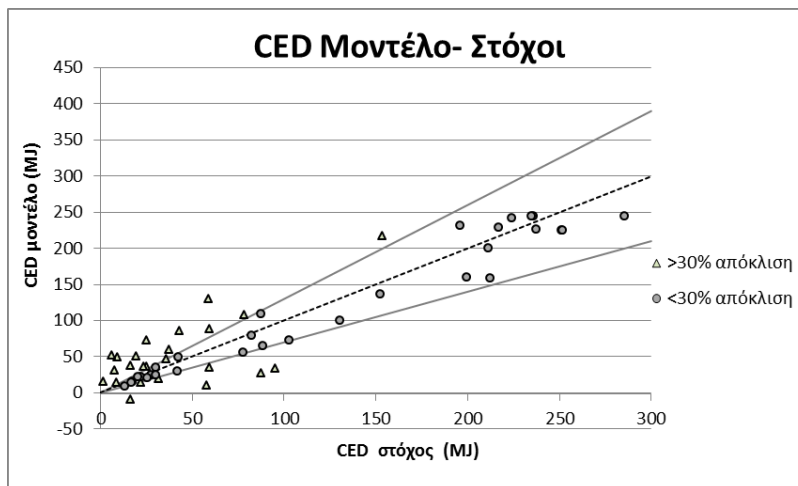
Μηδαμινή συσχέτιση (Προσαρμοσμένο R<sup>2</sup> επικύρωσης < 0.3) προβλέπεται από τις:

- Ζώνη του όζοντος

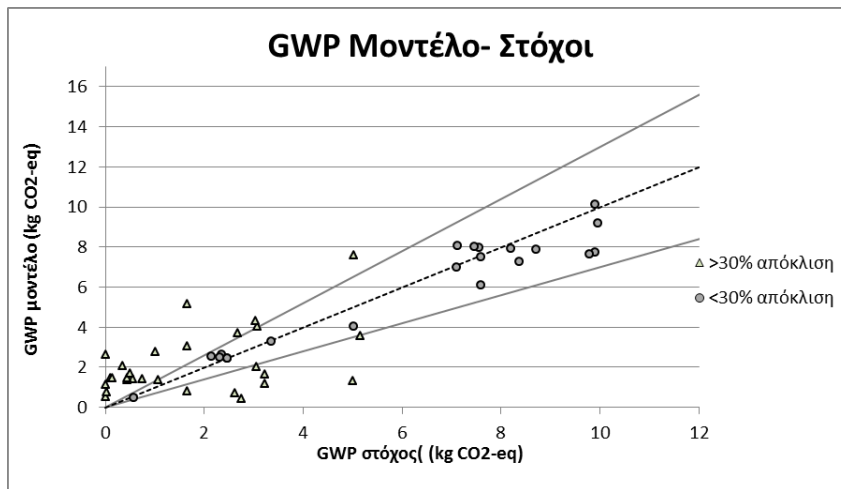
- Ευτροφισμός / Οξίνιση
- Χρήση γης

Η περαιτέρω ανάλυση από εδώ και πέρα θα αφορά ως επί το πλείστον το CED και το GWP, αφού ο δείκτης Eco99 δεν παρουσίασε σημαντικά αποτελέσματα.

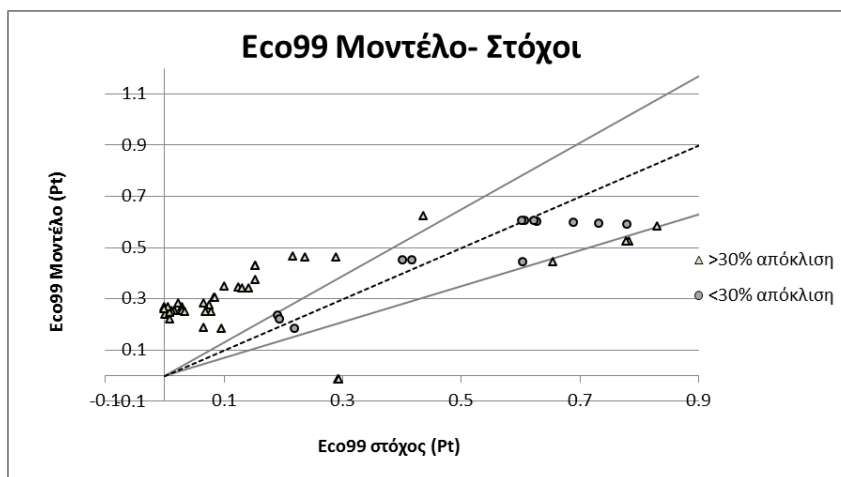
Για μία οπτική απεικόνιση των αποτελεσμάτων παρουσιάζεται στο Σχήμα 6 η σχετική θέση των εκτιμώμενων τιμών για το CED ως προς τις τιμές-στόχους που τέθηκαν στον Πίνακα 2. Ομοίως για το GWP οι τιμές παρουσιάζονται στο Σχήμα 7 και για τον Eco99 στο Σχήμα 8. Οι 2 διακεκομμένες γραμμές οριοθετούν μία περιοχή με απόκλιση  $\pm 30\%$  από τις τιμές-στόχους, που είναι μία καλή εκτίμηση για μία πρώτη μελέτη παλινδρόμησης. Η πλειονότητα των δεδομένων βρίσκεται στην αριθμητικά χαμηλότερη περιοχή και στα 3 σχήματα και είναι κάτι που επηρεάζει την ποιότητα των αποτελεσμάτων, καθώς η γραμμικότητα του μοντέλου βασίζεται στην χαμηλή περιοχή με το 70% περίπου των δεδομένων, ενώ το υπόλοιπο 30% είναι κατανεμημένο στο υπόλοιπο εύρος τιμών.



Σχήμα 6 :Οι τιμές που υπολογίζονται στο σετ επικύρωσης του μοντέλου για το CED συγκρίνονται με αυτές που υπάρχουν στο αρχικό σετ(στόχοι) (Πίνακας 1). Ιδανικά τα σημεία πρέπει να τείνουν προς την διαγώνιο  $x=y$  (διακεκομμένη γραμμή) για την καλύτερη συσχέτιση. Οι 2 αποκλίνουσες γραμμές ορίζουν τον χώρο μέσα στον οποίο τα υπολογισμένα σημεία δεν διαφέρουν πάνω από  $\pm 30\%$  από τα αντίστοιχα σημεία-στόχους, οπότε με αυτό το σχήμα παρέχεται μία γρήγορη εκτίμηση της ακρίβειας των υπολογισμένων τιμών. Τα τριγωνικά σημεία έχουν απόκλιση πάνω από  $\pm 30\%$  ενώ τα κυκλικά εμπίπτουν στον χώρο με απόκλιση μικρότερη από  $\pm 30\%$ .



Σχήμα 7 :Οι τιμές που υπολογίζονται στο σετ επικύρωσης του μοντέλου για το GWPσυγκρίνονται με αυτές που υπάρχουν στο αρχικό σετ(στόχοι) (Πίνακας 1). Ιδανικά τα σημεία πρέπει να τείνουν προς την διαγώνιο  $x=y$  (διακεκομμένη γραμμή) για την καλύτερη συσχέτιση. Οι 2 αποκλίνουσες γραμμές ορίζουν τον χώρο μέσα στον οποίο τα υπολογισμένα σημεία δεν διαφέρουν πάνω από  $\pm 30\%$  από τα αντίστοιχα σημεία-στόχους, οπότε με αυτό το σχήμα παρέχεται μία γρήγορη εκτίμηση της ακρίβειας των υπολογισμένων τιμών.Τα τριγωνικά σημεία έχουν απόκλιση πάνω από  $\pm 30\%$  ενώ τα κυκλικά εμπίπτουν στον χώρο με απόκλιση μικρότερη από  $\pm 30\%$ .



Σχήμα 8 :Οι τιμές που υπολογίζονται στο σετ επικύρωσης του μοντέλου για τον Eco99 συγκρίνονται με αυτές που υπάρχουν στο αρχικό σετ(στόχοι) (Πίνακας 1). Ιδανικά τα σημεία πρέπει να τείνουν προς την διαγώνιο  $x=y$  (διακεκομμένη γραμμή) για την καλύτερη συσχέτιση. Οι 2 αποκλίνουσες γραμμές ορίζουν τον χώρο μέσα στον οποίο τα υπολογισμένα σημεία δεν διαφέρουν πάνω από  $\pm 30\%$  από τα αντίστοιχα σημεία-στόχους, οπότε με αυτό το σχήμα παρέχεται μία γρήγορη εκτίμηση της ακρίβειας των υπολογισμένων τιμών.Τα τριγωνικά σημεία έχουν απόκλιση πάνω από  $\pm 30\%$  ενώ τα κυκλικά εμπίπτουν στον χώρο με απόκλιση μικρότερη από  $\pm 30\%$ .



## 4.2 Εναλλακτικά μοντέλα

Πέρα από το μοντέλο του Πίνακα 7, μπορούν να εξαχθούν και άλλα μοντέλα με διαφορετικό συνδυασμό από δείκτες αλλά με δείκτες που εμπίπτουν σε ικανοποιητικά πλαίσια. Για παράδειγμα στον Πίνακα 8 παρουσιάζονται για το CED εναλλακτικές προτάσεις που στατιστικά είναι ελάχιστα χειρότερες από το μοντέλο του Πίνακα 7:

Τα εναλλακτικά μοντέλα παρουσιάζουν τις εξής διαφορές με το βασικό μοντέλο (μοντέλο 1):

- **Την απουσία του δείκτη για την ολοκλήρωση.** Τα μοντέλα 2 και 3 όπως φαίνονται στον Πίνακα Α δεν περιέχουν αυτήν την πληροφορία και η συμβολή τους δεν είναι ουσιώδης, κάτι που αποδεικνύεται από την σύγκριση των μοντέλων 1 και 2. Το 2 είναι ίδιο με το 1 απλά χωρίς τον δείκτη της ολοκλήρωσης. Η διαφορά μπορεί να φανεί στον δείκτη Akaike για το σετ επικύρωσης, όπου το 1 έχει τιμή 381.67 και το 2 384.35, δηλαδή η διαφορά είναι πρακτικά αμελητέα. Το ίδιο ισχύει και μεταξύ των μοντέλων 3 και 4, με το 3 να είναι η εκδοχή του 4 χωρίς τον δείκτη της ολοκλήρωσης.
- Στο κεφάλαιο της μεθοδολογίας εξηγήθηκε ότι έπρεπε να ποσοτικοποιηθεί με κάποιο τρόπο η πληροφορία της ενεργειακής ολοκλήρωσης. Επιλέχθηκε λοιπόν η χρήση του αριθμού 1 αν η διεργασία δεν έχει ολοκληρωθεί και το 0 αν έχει ολοκληρωθεί. Παρόλα αυτά, η ενέργεια που εξοικονομείται κατά την ολοκλήρωση δεν είναι ένα συγκεκριμένο ποσό, ούτε αποτελεί ένα σταθερό ποσοστό σε κάθε διεργασία. Ενδεικτικά, θα κατασκευαστεί ο Πίνακας 9 για να φανεί το εύρος της ποσότητας της ενέργειας που μπορεί να εξοικονομηθεί. Στον πίνακα αυτόν, παρατίθενται 2 διαφορετικές διεργασίες (Bio5, Bio15) μαζί με τις ολοκληρωμένες εκδοχές τους (Bio5i, Bio15 i) αντίστοιχα. Επιπλέον έχει καταχωρηθεί η ενεργειακή διαφορά μεταξύ ολοκληρωμένων και μη εκδοχών των 2 διεργασιών. Προκύπτει ότι για την Bio5 εξοικονομούνται 42.44 MJ, περίπου το 22% της αρχικής ενέργειας, ενώ για την Bio15 μόλις 0.17 MJ, που αντιστοιχούν στο 0.67% της αρχικής ενέργειας

**Πίνακας 8: Εναλλακτικά μοντέλα με στατιστικά ικανοποιητικούς δείκτες για το CED. Παρουσιάζεται αρχικά το μοντέλο του Πίνακα 7 και ακολουθούν άλλα 3 με ελαφρά διαφορετικούς επιλεγόμενους δείκτες.**

	<b>CED</b>	Μοντέλο 1	Μοντέλο 2	Μοντέλο 3	Μοντέλο 4
<b>ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	0.91	0.91	0.90	0.91
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.90	0.89	0.89	0.89
	Δείκτης Akaike	368.67	370.08	371.1	370.16
<b>ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	0.88	0.88	0.88	0.88
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.86	0.86	0.86	0.86
	Δείκτης Akaike	381.67	384.35	382.55	385.29
<b>Δείκτες</b>					
1	Μοριακό βάρος	✓	✓	✓	✓
2	# Λειτουργικών ομάδων				
3	# Απλών ατόμων οξυγόνου				
4	# Χημικών Σταδίων	✓	✓		
5	# Όλων των Ατόμων οξυγόνου				
6	# Όλων των Ατόμων				
7	# Ατόμων εκτός από H	✓	✓	✓	✓
8	(# άτομα C)/(#άτομα H)	✓	✓	✓	✓
9	Κύριος Τρόπος Μετατροπής				
10	Πρώτη ύλη	✓	✓	✓	✓
11	Ενεργειακή ολοκλήρωση	✓			✓
12	# ατόμων N2,F,Cl,Br				
13	# τριτοταγών, τεταρτοταγών ατόμων C				
14	# Δακτυλίων				
15	# Ετεροατόμων στους Δακτυλίους				
16	# Μοναδικών Αρωματικών Υποκαταστατών				
17	# Σύνθετων ατόμων Οξυγόνου				
18	# ομάδων -CH-				
19	# ομάδων -CH2-	✓	✓	✓	✓
20	# ομάδων -CH3-				
21	# ομάδων -OH-	✓	✓	✓	✓

Πίνακας 9: Διαφορά στο CED μεταξύ ολοκληρωμένων και μη διεργασιών

Διεργασία	Προϊόν	Στόχος CED (MJ)	Διαφορά (MJ)
Bio5i	Αιθανόλη	153.4164348	42.44070875
Bio5	Αιθανόλη	195.8571435	
Bio15 i	Φαινόλη φορμαλδεΰδη (Ρητίνες)	25.09961502	0.170604969
Bio15	Φαινόλη φορμαλδεΰδη (Ρητίνες)	25.27021999	

Αυτή η διαφορά πρέπει να αντιπροσωπευτεί από έναν δείκτη με την επιλογή 1 ή 0. Είναι λογικό, με βάση τέτοιο εύρος τιμών το μοντέλο να εξάγει μία μέση τιμή, άρα οδηγώντας σε μεγάλη απόκλιση και για τις 2 τιμές. Βέβαια αυτό ήταν ένα ακραίο δείγμα από το σύνολο των διεργασιών, με τις υπόλοιπες να εμφανίζουν πιο ομαλές διαφορές, αλλά και πάλι ο συντελεστής που θα υπολογιστεί από τον αλγόριθμο για την ολοκλήρωση θα έχει μία συγκεκριμένη τιμή, οπότε κάποια δεδομένα αναγκαστικά θα αποκλίνουν.

Συνεπώς αν και στατιστικά συμβάλλει στην απόδοση του μοντέλου, είναι ένας παράγοντας που ανάλογα το εύρος τιμών τείνει να ομαδοποιήσει τα αποτελέσματα προς μία μέση τιμή, αγνοώντας έτσι τις ακραίες περιπτώσεις σαν αυτές που αναφέρθηκαν παραπάνω. Ιδανικά, θα έπρεπε η ολοκλήρωση να κωδικοποιείται με ένα εύρος τιμών μεταξύ π.χ 0 και 1, δηλαδή 0.1, 0.2 κλπ που θα αντιπροσωπεύουν το ποσοστό της συνολικής ενέργειας που δύναται να ολοκληρωθεί. Δυστυχώς αυτό αντιπαρέρχεται στο concept του προκαταρκτικού σχεδιασμού, αλλά είναι δυνατό να υπολογιστεί εκ των προτέρων με ένα πρόχειρο σχεδιασμό της διεργασίας και τον εντοπισμό των ρευμάτων και του εξοπλισμού που μπορούν να ολοκληρωθούν.

- **Απουσία του αριθμού των χημικών σταδίων.** Για μία γρήγορη εκτίμηση περιβαλλοντικών επιπτώσεων για την παραγωγή βιοπροϊόντων, είναι πιθανό να μην είναι γνωστή η ακριβής αλληλουχία των σταδίων μετατροπής στα οποία θα υποβληθεί η τροφοδοσία μέχρι να παραχθεί το επιθυμητό προϊόν.

Και οι 2 παράγοντες που αναφέρθηκαν, αποτελούν πληροφορίες σχετικές με την διεργασία και συνήθως δεν είναι γνωστές από την αρχή. Ο σκοπός του μοντέλου είναι καθαρά εκτιμητικός σε ένα πρώιμο στάδιο προτού υλοποιηθεί η διεργασία, οπότε η απουσία των παραπάνω παραγόντων το καθιστούν πιο εύχρηστο.

Γενικά οι δείκτες που σχετίζονται με την διεργασία μπορεί να είναι γνωστοί μπορεί και όχι. Όπως και να έχει είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν με προβλεπτικό χαρακτήρα. Για παράδειγμα αν δεν είναι γνωστός ο αριθμός σταδίων ενώ όλοι οι υπόλοιποι δείκτες είναι γνωστοί, τότε εισάγοντας 1,2,3,4 κλπ υπολογίζονται τα μεγέθη AKZ αν η διεργασία πραγματοποιηθεί σε 1 στάδιο, σε 2 στάδια αντίστοιχα κλπ. Οπότε και μπορεί να εκτιμηθεί π.χ πόση ενέργεια θα εξοικονομηθεί αν μια διεργασία γίνει σε 3 στάδια αντί για 4. Με το ίδιο σκεπτικό, αντίστοιχες εκτιμήσεις μπορούν να γίνουν και με την πρώτη ύλη, τον τρόπο παραγωγής, χρησιμοποιώντας το εργαλείο με σκοπό την ελαχιστοποίηση των μεγεθών AKZ.

### 4.3 Περιβαλλοντική αξιολόγηση βιομάζας και ορυκτών καυσίμων

Σε ένα δεύτερο στάδιο, τα μεγέθη AKZ των προϊόντων από βιομάζα εκτιμώνται με το FinechemTool. Σκοπός δεν είναι η σύγκριση ακρίβειας ή γραμμικότητας, καθώς το FinechemTool έχει διαφορετικές προδιαγραφές και εφαρμόζεται υπό άλλες συνθήκες, αλλά η σύγκριση 2 τρόπων παραγωγής: βιομάζα και φυσικό αέριο. Εφόσον το FinechemTool είναι εργαλείο που προϋποθέτει μόνο κάποια δομικά στοιχεία μιας ένωσης και τα αποτελέσματα αφορούν συμβατική παραγωγή από φυσικό αέριο, η σύγκριση αυτή θα είναι μία πρώιμη ένδειξη του κατά πόσο πιο φιλικά προς το περιβάλλον είναι τα προϊόντα που παράγονται σε βιοδιυλιστήριο, σε σχέση με το αν τα ίδια προϊόντα παράγονταν από φυσικό αέριο. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 10 για το CED, και στο παράρτημα στον Γ1 για το GWP και στον Γ2 για τον Eco99. Επιπλέον, οι τιμές-στόχοι της βιομάζας συγκρίνονται με μεγέθη AKZ από την Ecolnvent, σε όσο το δυνατόν παρόμοιες συνθήκες παραγωγής, ώστε να συγκριθούν δεδομένα ίδιων συνθηκών από διαφορετική πηγή. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται μαζί με αυτά του FinechemTool στους Πίνακες 10 και Γ1, Γ2 του παραρτήματος.

Για οπτική απεικόνιση, τα CED και GWP που εμφανίζουν καλύτερη συσχέτιση παρουσιάζονται έναντι του Finechem Tool και στα σχήματα A,B του παραρτήματος.

Συνοπτικά, για τα προϊόντα από βιομάζα υπάρχουν δεδομένα από:

- Οι τιμές AKZ που υπολογίστηκαν από την αρχή, δηλαδή οι τιμές-στόχοι
- Το μοντέλο- δηλαδή τα εκτιμώμενα μεγέθη AKZ που ιδανικά συγκλίνουν στις τιμές-στόχους
- Την Ecolnvent

Για συμβατικό τρόπο παραγωγής (Φυσικό αέριο ή άλλο ορυκτό καύσιμο) υπάρχουν δεδομένα από:

- Το FinechemTool – τα προϊόντα του βιοδιυλιστηρίου επεξεργάζονται με το FinechemTool και τα αποτελέσματα αφορούν τις ενώσεις αν παραχθούν με φυσικό αέριο ως τροφοδοσία
- Την EcoInvent, για όσες ενώσεις ήταν δυνατό να βρεθούν τα μεγέθη AKZ για συμβατικό τρόπο παραγωγής.

Για να εξεταστούν οι 2 διαφορετικοί τρόποι παραγωγής, επιλέγονται οι πιο αξιόπιστες τιμές. Για την παραγωγή από βιομάζα επιλέγονται οι τιμές στόχοι καθώς βασίζονται σε πραγματικά δεδομένα, ενώ για τον συμβατικό τρόπο παραγωγής επιλέγονται οι τιμές της EcoInvent όπου είναι δυνατόν, ενώ οι υπόλοιπες υπολογίζονται με το FinechemTool.

Συνοψίζοντας, στον Πίνακα Δ του παραρτήματος παρουσιάζονται τα προϊόντα με τις τιμές στόχους για όλα τα μεγέθη AKZ έναντι των συμβατικών όπως εξηγήθηκε παραπάνω.

**Πίνακας 10: CED: Οι τιμές-στόχοι και οι υπολογισμένες τιμές συγκρίνονται με τις αντίστοιχες αν επεξεργαστούν οι διεργασίες με το FinechemTool και τις καταχωρημένες τιμές στην Ecolnvent. Για την Ecolnvent καταγράφεται και η πρώτη ύλη που επιλέχθηκε (όπου N/A = δεν βρέθηκε τιμή)**

ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	ΚΥΡΙΟ ΠΡΟΙΟΝ	ΠΡΩΤΗ ΥΛΗ	CED-Στόχος(MJ)	CED Μοντέλου (MJ)	Finechem Tool (MJ)	Ecolnvent	Ecolnvent πρώτη ύλη
Bio1a	Ημικυτταρίνη (ξυλόζη, αραβινόζη)	Άχυρο	59.2	88.6	275.0	N/A	
Bio1b	Κυτταρίνη	Άχυρο	59.2	35.5	338.8	6.1	Χαρτί
Bio1c	Λιγνίνη	Άχυρο	59.1	129.5	251.8	N/A	
Bio2i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	102.9	72.9	193.8	N/A	
Bio2	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	130.7	99.3	193.8	N/A	
Bio3i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	82.3	79.6	193.8	N/A	
Bio3	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	87.6	109.1	193.8	N/A	
Bio4	Αιθανόλη	Άχυρο-Ημικυτταρίνη	251.5	225.0	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio5i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	153.4	216.7	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio5	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	195.9	231.1	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio6i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	211.4	200.3	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio6	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	217.1	228.7	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio7	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	252.0	224.9	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio8	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	237.6	226.5	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio9	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	224.0	241.1	85.3	21.8	Καλαμπόκι
Bio10	Bio-PVC	Άχυρο-Κυτταρίνη	236.0	243.7	77.9	52.9	Συμβατική
Bio11	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)	Άχυρο-Κυτταρίνη	234.9	244.0	77.9	N/A	
Bio12	Αιθυλένιο	Άχυρο-Κυτταρίνη	285.5	244.5	68.0	66.8	Συμβατική
Bio13i	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	152.4	136.4	108.4	N/A	
Bio13	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	199.3	160.3	108.4	N/A	
Bio14	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	212.4	158.6	108.4	N/A	
Bio15i	Φαινόλη-φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	25.1	36.0	150.0	N/A	
Bio15	Φαινόλη-φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	25.3	73.1	150.0	N/A	
Bio16i	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	77.9	55.6	180.7	100.2	Συμβατική
Bio16	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	78.4	107.9	180.7	100.2	Συμβατική

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U1	Syngas	Ξύλο	7.7	31.5	84.4	N/A	
U2	Μεθανόλη	Ξύλο	13.1	9.5	86.1	31.9	Συμβατική
U3	Αιθανόλη	Ξύλο	27.6	24.8	85.3	11.0	Ξύλο
U4	Αιθυλένιο	Ξύλο	94.9	33.7	68.0	66.8	Συμβατική
U5	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	1.5	15.1	85.3	21.8	Καλαμπόκι
U6	Αιθανόλη	Ξύλο	8.9	14.4	85.3	11.0	Ξύλο
U7a	Μείγμα Αλκοολών	Ξύλο	30.1	35.5	83.8	N/A	
U7b	Αιθανόλη	Ξύλο	30.3	24.7	85.3	11.0	Ξύλο
U8a	Αιθυλένιο	Ξύλο	42.3	48.9	68.0	66.8	Συμβατική
U8b	Προπυλένιο	Ξύλο	42.1	30.0	67.3	68.3	Συμβατική
U9	NH <sub>3</sub>	Ξύλο	17.7	15.4	93.8	54.7	Συμβατική
U10	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	42.8	85.2	88.3	88.8	Συμβατική
U11a	Οξειδιο Προπυλενίου	Ξύλο	87.7	27.3	3.2	N/A	
U11b	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	88.6	64.9	88.3	88.8	Συμβατική
U12	Syngas	Αστικά απόβλητα	19.3	50.7	86.4	N/A	
U13	Βιοαέριο	Αστικά απόβλητα	9.2	48.8	80.9	N/A	
U14	Ακετόνη	Ξύλο	58.1	10.8	60.9	67.1	Συμβατική
U15	N-Βουτανόλη	Ξύλο	37.4	60.0	82.4	77.0	Συμβατική
U16a	Biodiesel	Φυτικό λάδι	21.9	22.0	91.2	N/A	
U16b	Γλυκερόλη	Φυτικό λάδι	21.9	14.1	78.9	N/A	
U17	Βιοαέριο	Φυτικό λάδι	35.9	47.3	81.4	N/A	
U18a	Ακετόνη	Καλαμπόκι	16.2	-9.0	60.9	67.1	Συμβατική
U18b	Βουτανόλη	Καλαμπόκι	16.3	37.6	82.4	77.0	Συμβατική
U18c	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	17.1	13.6	85.3	N/A	
U19	Syngas	Ξύλο	6.0	51.8	81.9	N/A	
Bd_1	FAME(biodiesel)	Φυτικό λάδι	20.4	22.4	91.2	N/A	
Bd_2	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	23.4	35.7	91.2	N/A	
Bd_3	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	25.7	21.1	91.2	N/A	
Bd_4	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	31.6	19.6	91.2	N/A	

## 5 Σχολιασμός και Συμπεράσματα

### 5.1 Επιλογή δεικτών

Όπως είχε αναφερθεί, η βάση για την κατασκευή της μεθοδολογίας είναι η μοριακή δομή των προϊόντων. Ένα από τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά του μοντέλου είναι η ικανότητα να διακρίνει στοιχεία σε μία διεργασία που την διαφοροποιούν από όλες τις υπόλοιπες, ακόμα και αν παράγεται σε όλες το ίδιο προϊόν. Για παράδειγμα, η αιθανόλη είναι ένα χημικό που αποτελεί το κύριο προϊόν σε 13 διεργασίες, όπως φαίνεται και στον Πίνακα 2. Αν οι δείκτες σχετίζονταν αποκλειστικά και μόνο με την δομή του προϊόντος, τότε το αποτέλεσμα θα ήταν το ίδιο και για τις 13 διεργασίες, οι οποίες όμως παρουσιάζουν μεγάλο εύρος τιμών για τα μεγέθη AKZ.

Η σημασία του διαφορετικού τύπου πληροφορίας γίνεται αντιληπτή στον Πίνακα 11 όπου παρουσιάζεται για παράδειγμα η εκδοχή του μοντέλου του Πίνακα 7 για το CED μόνο με τους δείκτες μοριακής δομής, και ξεχωριστά μόνο με τους δείκτες σχετικούς με την διεργασία.

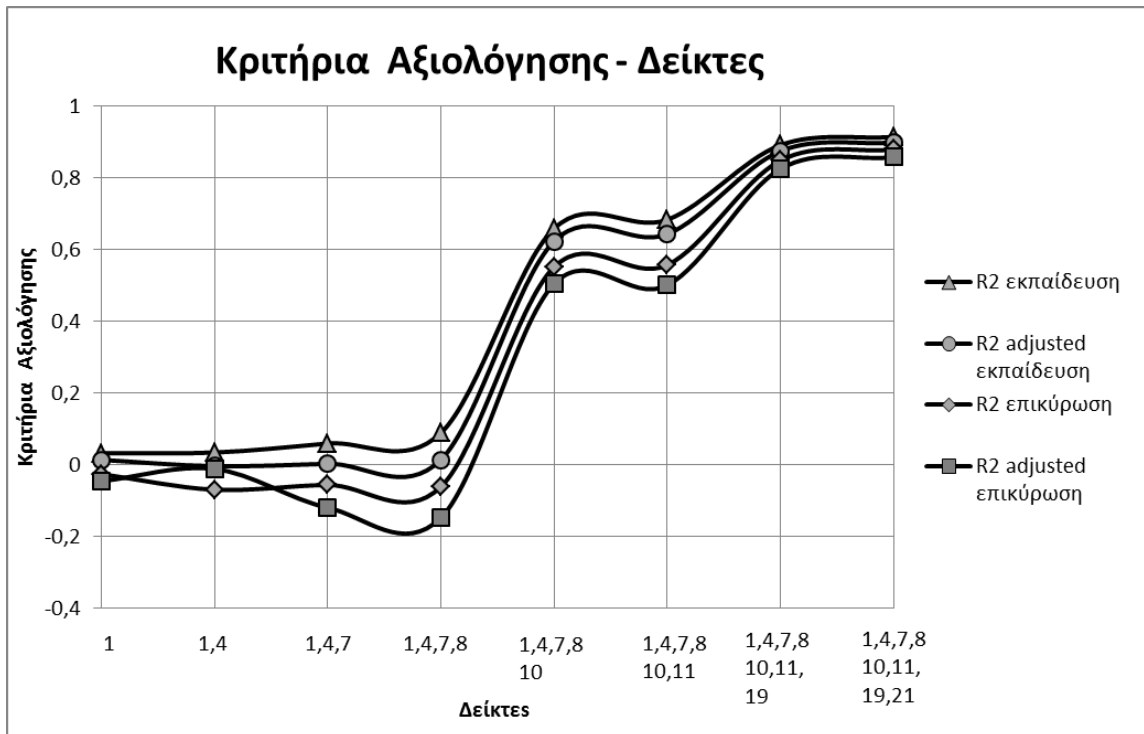
Είναι ενδιαφέρον το ότι μόνο οι μοριακοί δείκτες δεν προβλέπουν τα μεγέθη AKZ καθόλου, ενώ μόνο οι δείκτες σχετικοί με την διεργασία εμφανίζουν καλή συσχέτιση, αλλά όχι τόσο όσο ο συνδυασμός των 2 μαζί.

Στο Σχήμα 9, φαίνεται η εξέλιξη των  $R^2$ , του προσαρμοσμένου  $R^2$  για την εκπαίδευση και των  $R^2$ , προσαρμοσμένου  $R^2$  για την επικύρωση, όσο προστίθενται οι δείκτες. Αρχικά, η επίδραση φαίνεται να είναι αρνητική, άρα συμπεραίνει κανείς ότι οι πρώτοι 4 μάλλον δεν συμβάλλουν στο αποτέλεσμα. Η αλήθεια είναι ότι αν αφαιρεθούν από το τελικό σύνολο – δηλαδή μείνουν μόνο οι 10,11,19,21- τα κριτήρια αξιολόγησης μειώνονται αρκετά – ίσως πιο πολύ από ότι θα περίμενε κανείς, με τα  $R^2$ , προσαρμοσμένο  $R^2$  για την εκπαίδευση και τα  $R^2$ , προσαρμοσμένο  $R^2$  για την επικύρωση να παίρνουν τις τιμές 0.62, 0.59, 0.54, 0.50 αντίστοιχα.



**Πίνακας 11: Εκδοχή του βασικού μοντέλου μόνο με δείκτες μοριακής δομής και μόνο με δείκτες σχετικούς με την διεργασία, για το CED . Στατιστικά δεν είναι τόσο ισχυρό όσο και με τα 2 είδη δεικτών.**

		CED (MJ)	CED (MJ)
<b>ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	0.10	0.60
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.01	0.58
	Δείκτης Akaike	6.91	-41.78
<b>ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ</b>	R <sup>2</sup>	-0.04	0.53
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	-0.15	0.50
	Δείκτης Akaike	14.73	-32.4
<b>Δείκτες</b>			
1	Μοριακό βάρος	X	
2	# Λειτουργικών ομάδων		
3	# Απλών ατόμων οξυγόνου		
4	# Χημικών Σταδίων		X
5	# Όλων των Ατόμων οξυγόνου		
6	# Όλων των Ατόμων		
7	# Ατόμων εκτός από H	X	
8	(# Άτομα C)/(# Άτομα H)	X	
9	Είδος Παραγωγής		
10	Πρώτη ύλη		X
11	Ενεργειακή ολοκλήρωση		X
12	# Ατόμων N <sub>2</sub> ,F,Cl,Br		
13	# Τριτοταγών και Τεταρτοταγών ατόμων C		
14	# Δακτυλίων		
15	# Ετεροατόμων στους Δακτυλίους		
16	# Μοναδικών Αρωματικών Υποκαταστατών		
17	# Σύνθετων ατόμων οξυγόνου		
18	# ομάδων -CH-		
19	# ομάδων -CH <sub>2</sub> -	X	
20	# ομάδων -CH <sub>3</sub> -		
21	# ομάδων -OH-	X	



Σχήμα 9: Εξέλιξη των  $R^2$ ,  $R^2$ adjusted για την εκπαίδευση και την επικύρωση όσο προστίθενται οι δείκτες

Συνοπτικά συμπεραίνεται λοιπόν ότι:

- Σε αντίθεση με το Finechem Tool, η μοριακή δομή με βάση τους δείκτες που ορίστηκαν εδώ, δεν είναι αρκετή για να εκτιμήσει ικανοποιητικά τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις μιας διεργασίας σε ένα βιοδιυλιστήριο.
- Οι δείκτες σχετικοί με την μοριακή δομή του προϊόντος δεν είναι ικανοί να προβλέψουν μόνοι τους τα μεγέθη ΑΚΖ αλλά σε συνδυασμό με τους δείκτες για την διεργασία, συμβάλλουν θετικά σε μεγάλο βαθμό
- Είναι δυνατόν η επίδραση των δεικτών στα αποτελέσματα να μεταβληθεί παρουσία ή απουσία άλλων.

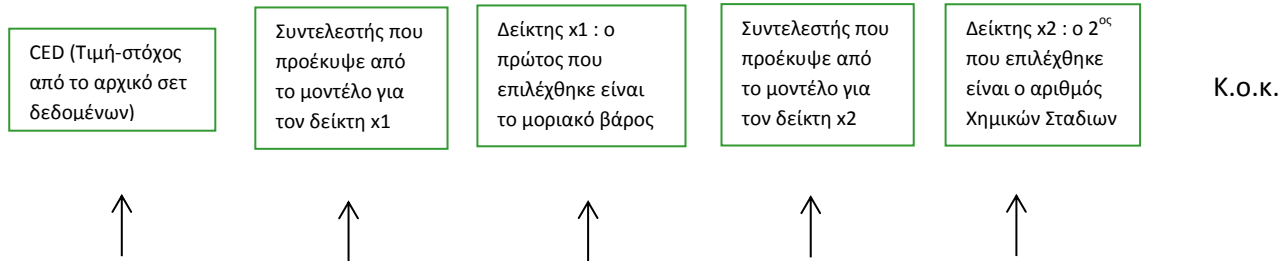
## 5.2 Στατιστική αξιολόγηση

Αξίζει να παρατηρηθεί η σταθερότητα των αποτελεσμάτων που παράγονται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης με τον αλγόριθμο. Εφόσον παραλείπεται ένα δεδομένο κάθε φορά, οι συντελεστές που εξάγονται είναι διαφορετικοί και το εύρος τους είναι ένας δείκτης του κατά πόσο η απουσία ενός δεδομένου επηρεάζει τα αποτελέσματα. Στους Πίνακες E1α και E2α

παρουσιάζονται οι συντελεστές για το CED και στους 9α και 9β για το GWP για κάθε σετ εκπαίδευσης, με τους δείκτες για το καλύτερο μοντέλο. Η μέση τιμή τους από όλα τα σετ είναι σχεδόν ίδια με την τιμή του τελικού συντελεστή όπως έχει καταγραφεί στον Πίνακα 7, που υπολογίστηκε με απλή παλινδρόμηση των 54 σημείων, χωρίς εκπαίδευση ή επικύρωση. Γενικά παρουσιάζουν σταθερότητα, με λίγες τιμές να αποκλίνουν πάνω από 20% της μέσης τιμής και δείχνει ότι δεν υπήρξε κάποιο σημείο που να επηρεάζει πολύ περισσότερο την συσχέτιση.

Η συμβολή του κάθε συντελεστή στην τελική γραμμική εξίσωση δεν είναι δυνατό να εκτιμηθεί μόνο από την αριθμητική τιμή. Αυτό συμβαίνει διότι οι τιμές των ανεξάρτητων μεταβλητών- οι δείκτες δηλαδή- ανάλογα την πληροφορία, έχουν εύρος τιμών από 1 (π.χ δείκτης για ολοκλήρωση) μέχρι 100 (π.χ μοριακό βάρος), οπότε είναι αναμενόμενο οι συντελεστές να μην έχουν όλοι τιμές της ίδιας τάξης μεγέθους. Επίσης οι ανεξάρτητες μεταβλητές αλληλεπιδρούν μεταξύ τους – εξ'ού και οι συντελεστές των μεταβλητών αλλάζουν αν προστεθούν ή αφαιρεθούν δείκτες. Στο Σχήμα 10 απεικονίζεται η μορφή της γραμμικής εξίσωσης για 4 τυχαίες διεργασίες. Φαίνεται ότι η τάξη μεγέθους των δεικτών ποικίλλει, αλλά εξισορροπείται από τον ανίστοιχο συντελεστή.

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 \dots + c$$



ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	CED (MJ)	a1	x1	a2	x2	...
Bio7	252.0	0,83	46,07	11,07	2	
Bio8	237.6	0,83	46,07	11,07	2	
Bio9	224.0	0,83	46,07	11,07	3	
Bio10	236.0	0,83	62,5	11,07	1	

Σχήμα 10: Μορφή τελικής γραμμικής εξίσωσης

### 5.3 Περιβαλλοντικές επιπτώσεις βιοπροϊόντων

Θα περίμενε κανείς ότι τα βιοπροϊόντα θα είχαν χαμηλότερες τιμές για τα μεγέθη AKZ από τα αντίστοιχα προϊόντα παραγόμενα με συμβατικές μεθόδους. Αν και η επεξεργασία της βιομάζας είναι θεωρητικά λιγότερο επιβαρυντική για το περιβάλλον από τα ορυκτά καύσιμα εξαιτίας λιγότερων ρυπογόνων παραπροϊόντων, δεν ισχύει πάντα όπως φάνηκε από τα αποτελέσματα. Αυτό μπορεί να εξηγηθεί ως εξής:

- Προσεγγιστικός υπολογισμός αρχικών μεγεθών AKZ (Πίνακας 2). Όπως αναλύθηκε παραπάνω, τα μεγέθη AKZ δεν λήφθηκαν απευθείας από την βιομηχανία, αλλά είναι υπολογισμένα με βάση τις διεργασίες και τα διαγράμματα ροής τους. Έπρεπε να καθοριστούν παράμετροι όπως τα όρια του συστήματος, τα ρεύματα που μπορούν να θεωρηθούν προϊόντα και να τεθούν τιμές για έννοιες όπως την χρήση ατμού και ηλεκτρισμού και τις πρώτες ύλες από την Ecoinvent όπου υπάρχουν διάφορες τιμές για κάθε ένωση, ανάλογα τις συνθήκες. Επίσης δεν συνυπολογίστηκαν τα απόβλητα, τα οποία συμβάλλουν σε σημαντικό ποσοστό στα αποτελέσματα.
- Οι διεργασίες δεν είναι αριστοποιημένες. Καθώς τα βιοδιυλιστήρια είναι μία νέα τεχνολογία, το ενδιαφέρον επικεντρώνεται αρχικά στην βιωσιμότητά τους και την εφικτότητα των διεργασιών. Το επόμενο στάδιο είναι η βελτιστοποίηση και αποτελεί το σημερινό στάδιο έρευνας. Οπότε δεν είναι ακόμα έγκυρη η σύγκριση των διεργασιών από βιομάζα με τις ήδη βέλτιστες συμβατικές.
- Υπάρχουν πολλοί τρόποι παραγωγής για πολλά προϊόντα. Για παράδειγμα η αιθανόλη παράγεται σε πάνω από 7 διεργασίες και είτε έχει χαμηλότερα μεγέθη AKZ από την αντίστοιχη συμβατική διεργασία, π.χ. στην U3 (Πίνακας Δ) είτε υψηλότερα π.χ. στην Bio4. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει τρόπος να παραχθεί αιθανόλη με λιγότερες περιβαλλοντικές επιπτώσεις, άσχετα αν υπάρχουν και άλλοι τρόποι πιο ενεργοβόροι. Γενικά η αλυσίδα των διεργασιών που περιγράφεται στο διάγραμμα ροής περιλαμβάνει μια σειρά πιθανών προϊόντων· το γεγονός ότι παράχθηκε αιθανόλη με πολύ υψηλά μεγέθη AKZ δεν σημαίνει ότι η αιθανόλη για να παραχθεί από βιομάζα χρειάζεται πολλή ενέργεια και ότι εκπέμπονται πολλοί ρύποι, αλλά ότι για την συγκεκριμένη αλυσίδα, *μπορεί να παραχθεί και αιθανόλη*, απλά είναι δαπανηρή ενεργειακά επειδή έχουν προηγηθεί πολλά στάδια μετατροπής σε άλλα προϊόντα. Οπότε αν μία παραγωγή είναι στοχευμένη σε αιθανόλη, δεν θα προτιμήσει τον τρόπο της Bio4, αλλά της U3.

Συνεπώς η βιομάζα αποτελεί μία *εν δυνάμει* φιλικότερη πηγή ενέργειας από τα ορυκτά καύσιμα, αρκεί να επιτευχθεί αριστοποίηση των διεργασιών της και να αναπτυχθούν χημικά μονοπάτια που θα επιτρέπουν την πιο σύντομη και άρα οικονομικότερη παραγωγή βιοπροϊόντων.

## 5.4 Συνεισφορά και Προοπτικές

Ο κύκλος ζωής είναι μία σημαντική έννοια στην βιομηχανία σήμερα, με τα περιβάλλον να αποτελεί κρίσιμη παράμετρο στον σχεδιασμό. Είναι σημαντικό να μπορεί να γίνει μια πρώιμη εκτίμηση της συνολικής καταναλισκόμενης ενέργειας και εκπομπής ρύπων σε ένα σύστημα ώστε να αξιολογηθεί και να τροποποιηθεί ανάλογα, χωρίς χρονική και οικονομική επιβάρυνση.

Στην παρούσα εργασία, κατασκευάστηκε μοντέλο εκτίμησης μεγεθών του κύκλου ζωής με βάση την μοριακή δομή και χαρακτηριστικά της διεργασίας, με ικανοποιητικά αποτελέσματα που βασίζονται σε γραμμική συσχέτιση. Αν και τα διαθέσιμα δεδομένα ήταν λίγα, η αξιολόγηση από εξωτερικά δεδομένα έδειξε ότι είναι ένα σημαντικό πρώτο βήμα για την εκτίμηση μεγεθών ΑΚΖ από προϊόντα βιομάζας. Με τις διαφορετικές εκδοχές που υπολογίστηκαν με το μοντέλο, είναι δυνατόν να μειωθεί το σύνολο των απαιτούμενων πληροφοριών, ανάλογα με τα δεδομένα που είναι διαθέσιμα από τις διεργασίες, καθιστώντας το εύχρηστο και ευέλικτο στις συνθήκες εφαρμογής.

Παρέχεται έτσι η δυνατότητα πρόβλεψης των περιβαλλοντικών μεγεθών για ένα μεγάλο αριθμό προϊόντων διεργασιών, που είναι πρακτικά αδύνατο να μελετηθούν ξεχωριστά λόγω του μεγάλου αριθμού τους και την ανεπάρκεια πληροφοριών. Επίσης προσφέρει την δυνατότητα εκτίμησης και σύγκρισης περιβαλλοντικών μεγεθών μεταβάλλοντας έναν ή παραπάνω δείκτες, απομονώνοντας έτσι την επίδρασή του στις περιβαλλοντικές επιπτώσεις. Για παράδειγμα, για μια διεργασία που παράγει αιθανόλη σε 5 στάδια, αν ο δείκτης για τον αριθμό των χημικών σταδίων μεταβληθεί σε 2,3,4,6, κλπ, τότε στα αποτελέσματα θα φανεί κατά πόσο η πληροφορία που αντιπροσωπεύει ο δείκτης επηρεάζει τα μεγέθη ΑΚΖ. Τότε το μοντέλο αποκτά συμβουλευτικό χαρακτήρα, παράγοντας συνδυασμούς δεικτών που ελαχιστοποιούν τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις ενός συστήματος και εξετάζοντας την επίδραση κάθε δείκτη ξεχωριστά.

Έτσι το μοντέλο μπορεί να αποτελέσει το πρώτο βήμα για την ανάπτυξη ενός ιδανικού εργαλείου για μια γρήγορη εκτίμηση των μεγεθών ΑΚΖ σε πρώιμο στάδιο, συμβάλλοντας στην εξοικονόμηση χρόνου και συμβάλλοντας σε πιο αποτελεσματική λήψη αποφάσεων κατά τον πρώιμο σχεδιασμό, καλύπτοντας ένα ευρύ φάσμα διεργασιών.

Μελλοντικά υπάρχουν προοπτικές για πιο αποτελεσματική και αξιόπιστη μελέτη πάνω στον κύκλο ζωής, ειδικά για την βιομάζα, ώστε να εκμεταλλευθούν πλήρως οι δυνατότητές της. Πιθανές προτάσεις για εφαρμογή περιλαμβάνουν:

- Την εξέταση μη-γραμμικών τεχνικών όπως π.χ ελάχιστα τετράγωνα, μη-γραμμική παλινδρόμηση κλπ. Επίσης τα νευρωνικά δίκτυα είναι πιο απόδοτικά στα μοντέλα

πρόβλεψης μεγεθών ΑΚΖ με βάση την μοριακή δομή, οπότε θα πρέπει να εξεταστούν και για προϊόντα από βιομάζα, αφού συγκεντρωθεί ο απαραίτητος αριθμός δεδομένων.

- Την συλλογή περισσότερων πειραματικών δεδομένων τα οποία θα ενισχύσουν την αξιοπιστία του μοντέλου και θα διευρύνουν το είδος των προϊόντων που μπορούν να εξεταστούν.
- Την προσθήκη των αποβλήτων στην διαδικασία υπολογισμού μεγεθών ΑΚΖ, καθώς η συμβολή τους επηρεάζει την μεθοδολογία υπολογισμού των περιβαλλοντικών επιπτώσεων και προσομοιώνει καλύτερα τα αποτελέσματα στα βιομηχανικά δεδομένα.
- Την κατασκευή μοντέλων πρόβλεψης για βιοδιυλιστήρια με άλλο είδος τροφοδοσίας ( άλγη, έλαια), τα οποία θα προσαρμόζονται στο εκάστοτε είδος των παραγόμενων προϊόντων. Αναλόγως τις διεργασίες, ίσως να είναι δυνατή και η κατασκευή ενός ενιαίου μοντέλου που να εφαρμόζεται για κάθε διεργασία με βιομάζα ως πρώτη ύλη.

## 6 Βιβλιογραφία

- Akaike H (1974) A new look at the statistical model identification. *Automatic Control, IEEE Transactions on* 19 (6):716-723. doi:10.1109/TAC.1974.1100705
- Akaike, H. (1977). Canonical correlation analysis of time series and the use of an information criterion. *System Identification: Advances and Case Case Studies*, (eds. R. K. Mehra and D. G. Lainiotis), 27–96, Academic Press, New York.
- Althaus H., Doka G., Dones R., Heck T., Hellweg S., Hirschier R., Nemecek T., Rebitzer G., Spielmann M., Wernet G. Overview and Methodology, *Ecoinvent report No. 1*, Dübendorf, December 2007
- Álvarez-Chávez CR, Edwards S, Moure-Eraso R, Geiser K (2012) Sustainability of bio-based plastics: general comparative analysis and recommendations for improvement. *Journal of Cleaner Production* 23 (1):47-56. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2011.10.003
- Bingham NH, Fry JM (2010) *Regression: Linear Models in Statistics*. Springer,
- Bjorn Sanden et al (2013) *Systems Perspectives On Biorefineries*, Göteborg, Chalmers University of Technology
- Brander M, Wylie C (2011) The use of substitution in attributional life cycle assessment. *Greenhouse Gas Measurement and Management* 1 (3-4):161-166. doi:10.1080/20430779.2011.637670
- Capello C, Wernet G, Sutter J, Hellweg S, Hungerbühler K (2009) A comprehensive environmental assessment of petrochemical solvent production. *The International Journal of Life Cycle Assessment* 14 (5):467-479. doi:10.1007/s11367-009-0094-4
- Demirbas A (2009) *Biohydrogen: For Future Engine Fuel Demands*. Springer
- Demirbaş A (2009) *Biorefineries: For Biomass Upgrading Facilities*. Springer London,
- El-Shaarawi AH, Piegorisch WW (2001) *Encyclopedia of Environmetrics*. vol1. Wiley,
- Frischknecht R, Jungbluth N, Althaus H-J, Doka G, Dones R, Heck T, Hellweg S, Hirschier R, Nemecek T, Rebitzer G, Spielmann M (2004) The ecoinvent Database: Overview and Methodological Framework (7 pp). *The International Journal of Life Cycle Assessment* 10 (1):3-9. doi:10.1065/lca2004.10.181.1
- From the Process Engineering To the Biorefinery, <http://www.groupes.polymtl.ca/crip/en/index.php>
- Guan Li Ke Xue Ji Chu (2002) *Data, Models and Decisions: the Fundamentals of Management Science*
- Guinée J (2002) *Handbook on Life Cycle Assessment: Operational Guide to the ISO Standards*. Springer,



- Hischier R, Hellweg S, Capello C, Primas A (2004) Establishing Life Cycle Inventories of Chemicals Based on Differing Data Availability (9 pp). *The International Journal of Life Cycle Assessment* 10 (1):59-67. doi:10.1065/lca2004.10.181.7
- Huijbregts MAJ, Rombouts LJA, Hellweg S, Frischknecht R, Hendriks AJ, van de Meent D, Ragas AMJ, Reijnders L, Struijs J (2005) Is Cumulative Fossil Energy Demand a Useful Indicator for the Environmental Performance of Products? *Environmental Science & Technology* 40 (3):641-648. doi:10.1021/es051689g
- Jegannathan KR, Nielsen PH (2013) Environmental assessment of enzyme use in industrial production – a literature review. *Journal of Cleaner Production* 42 (0):228-240. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2012.11.005
- Jiménez-González C, Kim S, Overcash M (2000) Methodology for developing gate-to-gate Life cycle inventory information. *The International Journal of Life Cycle Assessment* 5 (3):153-159. doi:10.1007/BF02978615
- Kleinbaum D, Kupper L, Nizam A, Rosenberg E (2013) *Applied Regression Analysis and Other Multivariable Methods*. Cengage Learning,
- Marcoulaki EC, Kokossis AC (2000) On the development of novel chemicals using a systematic Σύνθεση approach. Part I. Optimisation framework. *Chemical Engineering Science* 55 (13):2529-2546. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0009-2509(99)00522-9
- Morawicki RO (2012) *Handbook of Sustainability for the Food Sciences*. Wiley,
- O'Donnell T (2008) *Design and Use of Relational Databases in Chemistry*. Taylor & Francis
- Quinn GP, Keough MJ (2002) *Experimental Design and Data Analysis for Biologists*. Cambridge University Press,
- Rebitzer G, Ekvall T, Frischknecht R, Hunkeler D, Norris G, Rydberg T, Schmidt WP, Suh S, Weidema BP, Pennington DW (2004) Life cycle assessment: Part 1: Framework, goal and scope definition, inventory analysis, and applications. *Environment International* 30 (5):701-720. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.envint.2003.11.005
- Sheather S (2009) *A Modern Approach to Regression with R*. Springer
- Spiess A-N, Neumeyer N (2010) An evaluation of R<sup>2</sup> as an inadequate measure for nonlinear models in pharmacological and Βιοχημική research: a Monte Carlo approach. *BMC Pharmacology* 10 (1):6
- Sugiyama H, Fukushima Y, Hirao M, Hellweg S, Hungerbühler K (2005) Using Standard Statistics to Consider Uncertainty in Industry-Based Life Cycle Inventory Databases (7 pp). *The International Journal of Life Cycle Assessment* 10 (6):399-405. doi:10.1065/lca2005.05.211
- Wang GCS, Jain CL (2003) *Regression Analysis: Modeling & Forecasting*. Graceway Pub
- Wardenaar T, Ruijven T, Beltran A, Vad K, Guinée J, Heijungs R (2012) Differences between LCA for analysis and LCA for policy: a case study on the consequences of allocation choices in

- bio-energy policies. *The International Journal of Life Cycle Assessment* 17 (8):1059-1067. doi:10.1007/s11367-012-0431-x
- Weidema B (2000) Avoiding Co-Product Allocation in Life-Cycle Assessment. *Journal of Industrial Ecology* 4 (3):11-33. doi:10.1162/108819800300106366
- Wernet G, Conradt S, Isenring HP, Jiménez-González C, Hungerbühler K (2010) Life cycle assessment of fine chemical production: a case study of pharmaceutical synthesis. *The International Journal of Life Cycle Assessment* 15 (3):294-303. doi:10.1007/s11367-010-0151-z
- Wernet G, Hellweg S, Fischer U, Papadokostantakis S, Hungerbühler K (2008) Molecular-Structure-Based Models of Chemical Inventories using Neural Networks. *Environmental Science & Technology* 42 (17):6717-6722. doi:10.1021/es7022362
- Wernet G, Papadokostantakis S, Hellweg S, Hungerbühler K (2009) Bridging data gaps in environmental assessments: Modeling impacts of fine and basic chemical production. *Green Chemistry* 11 (11):1826. doi:10.1039/b905558d
- Zhang Y, Dubé MA, McLean DD, Kates M (2003) Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment. *Bioresource Technology* 89 (1):1-16. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0960-8524(03)00040-3

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: ΠΙΝΑΚΕΣ

**Πίνακας Α: Οι δείκτες για κάθε διεργασία. Οι αριθμοί ακολουθούν την αντιστοιχία του Πίνακα 5 ενώ στις περιπτώσεις μιγμάτων προϊόντων, η πληροφορία υπολογίζεται με βάση την περιεκτικότητα του ρεύματος σε κάθε προϊόν.**

Διεργασία	Προϊόν	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
Bio1a	Ημικυτταρίνη	150,13	6	4	1	5	20	10	0,50	1	1	1	0	0	1	1	0	1	3	1	0	4
Bio1b	Κυτταρίνη	180,16	7	5	1	6	24	12	0,50	1	1	1	0	0	1	1	0	1	4	1	0	5
Bio1c	Λιγνίνη	150,17	5	2	1	2	21	11	0,90	1	1	1	0	0	1	0	2	0	0	1	0	1
Bio2i	Ξυλιτόλη	152,15	5	5	2	5	22	10	0,42	2	1	0	0	0	0	0	0	0	3	2	0	5
Bio2	Ξυλιτόλη	152,15	5	5	2	5	22	10	0,42	2	1	1	0	0	0	0	0	0	3	2	0	5
Bio3i	Ξυλιτόλη	152,15	5	5	2	5	22	10	0,42	1	1	0	0	0	0	0	0	0	3	2	0	5
Bio3	Ξυλιτόλη	152,15	5	5	2	5	22	10	0,42	1	1	1	0	0	0	0	0	0	3	2	0	5
Bio4	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio5i	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio5	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio6i	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio6	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio7	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio8	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio9	Αιθανόλη	46,07	1	1	3	1	9	3	0,33	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Bio10	Bio-PVC	62,5	3	0	1	0	6	3	0,67	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bio11	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)	62,5	3	0	1	0	6	3	0,67	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bio12	Αιθυλένιο	28,05	2	0	3	0	6	2	0,50	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bio13i	Ιτακονικό Οξύ	130,1	4	4	1	4	15	9	0,83	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0
Bio13	Ιτακονικό Οξύ	130,1	4	4	1	4	15	9	0,83	2	1	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0
Bio14	Ιτακονικό Οξύ	130,1	4	4	1	4	15	9	0,83	2	1	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0
Bio15i	Φαινόλη- φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	200,23	4	2	2	2	27	15	1,08	1	1	0	0	2	2	0	2	0	0	0	0	0
Bio15	Φαινόλη- φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	200,23	4	2	2	2	27	15	1,08	1	1	1	0	2	2	0	2	0	0	0	0	0
Bio16i	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	312,32	4	4	2	4	39	16	0,74	1	1	0	2	2	2	0	2	0	0	0z	0	0
Bio16	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	312,32	4	4	2	4	39	16	0,74	1	1	1	2	2	2	0	2	0	0	0	0	0
U1	Syngas	16,7668	0	0,65	1	0,65	2,39	1,07	0,32	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U2	Μεθανόλη	32,04	1	1	2	1	6	2	0,25	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1		
U3	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
U4	Αιθυλένιο	28,05	2	0	2	0	6	2	0,50	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U5	Αιθανόλη	46,07	1	1	1	1	9	3	0,33	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
U6	Αιθανόλη	46,07	1	1	1	1	9	3	0,33	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
U7a	Μείγμα Αλκοολών	61,75	1	1	2	1	12,387	4,2288	0,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2,125	1	1	
U7b	Αιθανόλη	46,07	1	1	2	1	9	3	0,33	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
U8a	Αιθυλένιο	28,05	2	0	3	0	6	2	0,50	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U8b	Προπυλένιο	42,08	2	0	3	0	9	3	0,50	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	
U9	NH <sub>3</sub>	17,031	1	0	2	0	4	1	0,00	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U10	Γλυκόλη Προπυλενίου	76,09	2	2	3	2	8	3	0,60	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	2	
U11a	Οξειδιο Προπυλενίου	58,08	1	1	2	1	10	4	0,50	1	0	0	0	0	1	1	0	1	0	1	1	1	0	
U11b	Γλυκόλη Προπυλενίου	76,09	2	2	3	2	8	3	0,60	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	2	
U12	Syngas	11,284	0	0,38	3	0,38	2,17	0,69	0,19	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U13	Βιοαέριο	26,9038	0	0,88	3	0,88	4	1,76	0,39	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U14	Ακετόνη	58,08	1	0	3	1	10	4	0,50	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	2	0	
U15	N-Βουτανόλη	74,12	1	1	3	1	15	5	0,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	1	1	
U16a	Biodiesel	280,1076	3	2	1	2	57	21	0,53	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	1	0	
U16b	Γλυκερόλη	50,3454	1,23	1,77	1	1,77	7,46	3,1	0,28	1	0	0	0,05	0	0	0	0	0	0	0	1	2	0	3
U17	Βιοαέριο	27,326	0	0,85	3	0,85	4,1	1,8	0,41	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
U18a	Ακετόνη	58,08	1	0	1	1	10	4	0,50	2	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	
U18b	Βουτανόλη	74,12	1	1	1	1	15	5	0,40	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	1	1	
U18c	Αιθανόλη	46,07	1	1	1	1	9	3	0,33	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
U19	Syngas	22,1296	0	0,82	1	0,82	2,56	1,48	0,61	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
Bd_1	FAME (biodiesel)	280,1076	3	2	1	2	57	21	0,53	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	1	0	
Bd_2	FAME (biodiesel)	280,1076	3	2	2	2	57	21	0,53	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	1	0	
Bd_3	FAME (biodiesel)	280,1076	3	2	1	2	57	21	0,53	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	1	0	
Bd_4	FAME (biodiesel)	280,1076	3	2	1	2	57	21	0,53	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	1	0	

**Πίνακας Β: Οι υπο-δείκτες του Eco99. Αν και στο σύνολο δεν παρουσιάζουν κάποιο ενδιαφέρον, μεμονωμένα κάποιοι ερμηνεύονται αρκετά καλά. Σε αυτόν τον πίνακα παρουσιάζονται οι δείκτες ξεχωριστά για καθεμία από τις 11 παραμέτρους με τους δείκτες που επιλέχθηκαν για τα βέλτιστα αποτελέσματα**

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ	R <sup>2</sup>	0.89	0.52	0.70	0.85	0.86	0.07	0.59	0.03	0.00	0.58	0.81
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.87	0.47	0.67	0.82	0.84	0.05	0.56	0.015	-0.02	0.54	0.78
	Δείκτης Akaike	-548.12	-1073.30	-414.58	-493.30	-927.12	-990.77	-631.96	-540.28	-129.78	-741.25	-275.9
ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ	R <sup>2</sup>	0.84	0.42	0.64	0.80	0.80	0.00	0.50	-0.01	-0.08	0.50	0.73
	Προσαρμοσμένο R <sup>2</sup>	0.81	0.36	0.60	0.77	0.78	-0.02	0.46	-0.03	-0.10	0.44	0.68
	Δείκτης Akaike	-526.64	-1063.40	-405.47	-478.61	-909.53	-986.86	-621.54	-537.93	-125.37	-731.06	-255.91
Δείκτες	Καρκινο-γενή	Εισπνεόμενα οργανικά σωματίδια	Εισπνεόμενα ανόργανα σωματίδια	Αλλαγή κλίματος	Ακτινοβολία	Ζώνη του όζοντος	Τοξικό-τητα	Ευτροφισμός/Οξίνιση	Χρήση γης	Μεταλ-λικά	Ορυκτά Καύσιμα	
1	Μοριακό βάρος	✓	✓	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	
2	# Λειτουργικών ομάδων	✓							✓			
3	# Απλών ατόμων οξυγόνου	✓						✓				
4	# Χημικών Σταδίων											
5	# Όλων των Ατόμων οξυγόνου										✓	
6	# Όλων των Ατόμων											
7	# Ατόμων εκτός από Η	✓	✓	✓	✓	✓						
8	(# Άτομα C)/(# Άτομα Η)	✓	✓	✓	✓	✓			✓			
9	Είδος Παραγωγής								✓		✓	
10	Πρώτη ύλη	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	
11	Ενεργειακή ολοκλήρωση				✓				✓		✓	
12	# Ατόμων N <sub>2</sub> ,F,Cl,Br											
13	# Τριτοταγών και Τεταρτοταγών ατόμων C											
14	# Δακτυλίων											
15	# Ετεροατόμων στους Δακτυλίους											

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου  
Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

16	# Μοναδικών Αρωματικών Υποκαταστατών										
17	# Σύνθετων ατόμων Οξυγόνου					✓				✓	
18	# ομάδων -CH-	✓									✓
19	# ομάδων -CH <sub>2</sub> -	✓	✓		✓	✓			✓	✓	✓
20	# ομάδων -CH <sub>3</sub> -										
21	# ομάδων -OH-	✓				✓			✓	✓	✓

**Πίνακας Γ1: GWP:Οι τιμές-στόχοι και οι υπολογισμένες τιμές συγκρίνονται με τις αντίστοιχες αν επεξεργαστούν οι διεργασίες με το Finechem Tool και τις καταχωρημένες τιμές στην EcoInvent. Για την EcoInvent καταγράφεται και η πρώτη ύλη που επιλέχθηκε (όπου N/A = δεν βρέθηκε τιμή)**

ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	ΚΥΡΙΟ ΠΡΟΙΟΝ	ΠΡΩΤΗ ΥΛΗ	GWP-Στόχος (100a, kg CO2 eq)	GWP Μοντέλου (100a, kg CO2 eq)	Finechem Tool(100a, kg CO2 eq)	EcoInvent	EcoInvent πρώτη ύλη
Bio1a	Ημικυτταρίνη (ξυλόζη, αραβινόζη)	Άχυρο	1.65	3.0448	13.461	N/A	
Bio1b	Κυτταρίνη	Άχυρο	1.65	0.7926	13.785	0.27327	Χαρτί
Bio1c	Λιγνίνη	Άχυρο	1.65	5.1772	7.282	N/A	
Bio2i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	3.37	3.2596	4.362	N/A	
Bio2	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	5.03	4.0183	4.362	N/A	
Bio3i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	2.36	2.6307	4.362	N/A	
Bio3	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	2.68	3.6843	4.362	N/A	
Bio4	Αιθανόλη	Άχυρο-Ημικυτταρίνη	8.71	7.8521	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio5i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	5.01	7.582	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio5	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.55	7.989	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio6i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.11	6.9651	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio6	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.46	8.0003	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio7	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	9.91	7.709	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio8	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	8.21	7.9115	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio9	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.12	8.0406	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
Bio10	Bio-PVC	Άχυρο-Κυτταρίνη	9.96	9.2051	4.307	1.6029	Συμβατική
Bio11	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)	Άχυρο-Κυτταρίνη	9.89	10.1332	4.307	N/A	
Bio12	Αιθυλένιο	Άχυρο-Κυτταρίνη	9.80	7.6161	2.651	1.3998	Συμβατική
Bio13i	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.60	6.1085	4.647	N/A	
Bio13	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	7.60	7.5121	4.647	N/A	
Bio14	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	8.38	7.2728	4.647	N/A	
Bio15i	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.74	-0.0881	4.912	N/A	
Bio15	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.75	1.4134	4.912	N/A	
Bio16i	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	3.05	2.0225	5.295	5.0496	Συμβατική
Bio16	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	3.08	4.03	5.295	5.0496	Συμβατική



Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U1	Syngas	Ξύλο	0.01	1.1409	2.69	N/A	
U2	Μεθανόλη	Ξύλο	0.01	0.5118	2.795	0.26663	Συμβατική
U3	Αιθανόλη	Ξύλο	0.11	1.4613	2.81	0.86339	Ξύλο
U4	Αιθυλένιο	Ξύλο	2.74	0.4041	2.651	1.3998	Συμβατική
U5	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	0.14	1.4586	2.81	0.90117	Καλαμπόκι
U6	Αιθανόλη	Ξύλο	0.55	1.425	2.81	0.86339	Ξύλο
U7a	Μείγμα Αλκοολών	Ξύλο	0.44	1.3442	2.758	N/A	
U7b	Αιθανόλη	Ξύλο	0.44	1.4343	2.81	0.86339	Ξύλο
U8a	Αιθυλένιο	Ξύλο	0.03	0.7646	2.651	1.3998	Συμβατική
U8b	Προπυλένιο	Ξύλο	0.03	-0.3624	2.168	1.4389	Συμβατική
U9	NH3	Ξύλο	0.06	-1.4122	3.301	3.1921	Συμβατική
U10	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	5.15	3.56	3.204	4.5498	Συμβατική
U11a	Οξειδιο Προπυλενίου	Ξύλο	2.62	0.7138	4.152	N/A	
U11b	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	3.03	4.322	3.204	4.5498	Συμβατική
U12	Syngas	Αστικά απόβλητα	0.58	0.476	2.713	N/A	
U13	Βιοαέριο	Αστικά απόβλητα	0.50	1.6963	2.282	N/A	
U14	Ακετόνη	Ξύλο	1.37	-0.8418	1.893	2.2328	Συμβατική
U15	N-Βουτανόλη	Ξύλο	0.35	2.063	2.627	1.799	Συμβατική
U16a	Biodiesel	Φυτικό λάδι	3.23	1.1762	3.551	N/A	
U16b	Γλυκερόλη	Φυτικό λάδι	3.23	1.6623	2.59	N/A	
U17	Βιοαέριο	Φυτικό λάδι	5.00	1.3013	2.391	N/A	
U18a	Ακετόνη	Καλαμπόκι	1.00	-0.0659	1.893	2.2328	Συμβατική
U18b	Βουτανόλη	Καλαμπόκι	1.02	2.7828	2.627	1.799	Συμβατική
U18c	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	1.06	1.3831	2.81	N/A	
U19	Syngas	Ξύλο	0.01	2.6067	2.317	N/A	
Bd_1	FAME(biodiesel)	Φυτικό λάδι	2.15	2.5357	3.551	N/A	
Bd_2	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	2.46	2.4596	3.551	N/A	
Bd_3	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	2.47	2.4568	3.551	N/A	
Bd_4	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	2.32	2.4944	3.551	N/A	

**Πίνακας Γ2: Eco99:Οι τιμές-στόχοι και οι υπολογισμένες τιμές συγκρίνονται με τις αντίστοιχες αν επεξεργαστούν οι διεργασίες με το Finechem Tool, και τις καταχωρημένες τιμές στην Ecolnvent. Για την Ecolnvent καταγράφεται και η πρώτη ύλη που επιλέχθηκε- όποτε ήταν δυνατό επιλέχθηκε συμβατική πρώτη ύλη ενώ στις υπόλοιπες περιπτώσεις όσο πιο κοντά σε αυτήν ύλη που χρησιμοποιήθηκε σε κάθε διεργασία. (όπου N/A = δεν βρέθηκε τιμή)**

ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	ΚΥΡΙΟ ΠΡΟΙΟΝ	ΠΡΩΤΗ ΥΛΗ	Eco99-Στόχος(Pt)	Eco99Μοντέλου(Pt)	Finechem Tool(Pt)	Ecolnvent	Ecolnvent πρώτη ύλη
Bio1a	Ημικυτταρίνη (ξυλόζη, αραβινόζη)	Άχυρο	0.1546	0.4248	0.0958	N/A	
Bio1b	Κυτταρίνη	Άχυρο	0.1547	0.3701	0.0125	0.27327	Χαρτί
Bio1c	Λιγνίνη	Άχυρο	0.1545	0.4247	0.6433	N/A	
Bio2i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.2908	0.4571	0.4105	N/A	
Bio2	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.4013	0.4522	0.4105	N/A	
Bio3i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.2179	0.4603	0.4105	N/A	
Bio3	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.2389	0.4594	0.4105	N/A	
Bio4	Αιθανόλη	Άχυρο-Ημικυτταρίνη	0.7313	0.5945	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio5i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.4375	0.6182	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio5	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6063	0.6046	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio6i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6023	0.6049	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio6	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.627	0.6029	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio7	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.7794	0.5906	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio8	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6887	0.5979	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio9	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6231	0.6032	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
Bio10	Bio-PVC	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.7843	0.5198	0.2505	1.6029	Συμβατική
Bio11	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.7799	0.5201	0.2505	N/A	
Bio12	Αιθυλένιο	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.8314	0.5779	0.2251	1.3998	Συμβατική
Bio13i	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.4163	0.4512	0.3153	N/A	
Bio13	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6031	0.4433	0.3153	N/A	
Bio14	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.6556	0.4411	0.3153	N/A	
Bio15i	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.0852	0.2997	0.4706	N/A	
Bio15	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.0859	0.2996	0.4706	N/A	
Bio16i	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.2934	-0.0181	0.5527	5.0496	Συμβατική
Bio16	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	0.295	-0.0188	0.5527	5.0496	Συμβατική

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U1	Syngas	Ξύλο	0.0017	0.2654	0.2618	N/A	
U2	Μεθανόλη	Ξύλο	0.0029	0.2354	0.2457	0.26663	Συμβατική
U3	Αιθανόλη	Ξύλο	0.0185	0.2488	0.2707	0.86339	Ξύλο
U4	Αιθυλένιο	Ξύλο	0.1913	0.2339	0.2251	1.3998	Συμβατική
U5	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	0.0142	0.2489	0.2707	0.90117	Καλαμπόκι
U6	Αιθανόλη	Ξύλο	0.0803	0.2462	0.2707	0.86339	Ξύλο
U7a	Μείγμα Αλκοολών	Ξύλο	0.0304	0.2651	0.2956	N/A	
U7b	Αιθανόλη	Ξύλο	0.0306	0.2483	0.2707	0.86339	Ξύλο
U8a	Αιθυλένιο	Ξύλο	0.0098	0.2429	0.2251	1.3998	Συμβατική
U8b	Προπυλένιο	Ξύλο	0.0097	0.2158	0.2312	1.4389	Συμβατική
U9	NH <sub>3</sub>	Ξύλο	0.0069	0.2647	0.2198	3.1921	Συμβατική
U10	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	1.477	0.1253	0.263	4.5498	Συμβατική
U11a	Οξειδιο Προπυλενίου	Ξύλο	0.1941	0.2184	0.1635	N/A	
U11b	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	0.2197	0.1826	0.263	4.5498	Συμβατική
U12	Syngas	Αστικά απόβλητα	0.0764	0.2725	0.2482	N/A	
U13	Βιοαέριο	Αστικά απόβλητα	0.0362	0.2438	0.2616	N/A	
U14	Ακετόνη	Ξύλο	0.0975	0.1807	0.2321	2.2328	Συμβατική
U15	N-Βουτανόλη	Ξύλο	0.024	0.2788	0.3118	1.799	Συμβατική
U16a	Biodiesel	Φυτικό λάδι	1.0925	0.1102	0.346	N/A	
U16b	Γλυκερόλη	Φυτικό λάδι	1.094	0.2404	0.2589	N/A	
U17	Βιοαέριο	Φυτικό λάδι	1.6556	0.1627	0.2642	N/A	
U18a	Ακετόνη	Καλαμπόκι	0.0668	0.1824	0.2321	2.2328	Συμβατική
U18b	Βουτανόλη	Καλαμπόκι	0.0675	0.2772	0.3118	1.799	Συμβατική
U18c	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	0.0707	0.2466	0.2707	N/A	
U19	Syngas	Ξύλο	0.0013	0.2549	0.2577	N/A	
Bd_1	FAME(biodiesel)	Φυτικό λάδι	0.1021	0.3461	0.346	N/A	
Bd_2	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	0.1252	0.3406	0.346	N/A	
Bd_3	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	0.1324	0.3389	0.346	N/A	
Bd_4	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	0.1437	0.3362	0.346	N/A	

**Πίνακας Δ: Σύγκριση προϊόντων βιομάζας (τιμές-στόχοι) και ορυκτών καυσίμων (EcoInvent ή FinechemTool)**

ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ	ΚΥΡΙΟ ΠΡΟΙΟΝ	ΠΡΩΤΗ ΥΛΗ	CED(MJ)		GWP(100a, kg CO2 eq)		Eco99 (Pt)	
			Βιομάζα	Ορυκτό Καύσιμο	Βιομάζα	Ορυκτό Καύσιμο	Βιομάζα	Ορυκτό Καύσιμο
Bio1a	Ημικυτταρίνη (ξυλόζη, αραβινόζη)	Άχυρο	59.2	275	1.65	13.46	0.16	0.11
Bio1b	Κυτταρίνη	Άχυρο	59.2	338.8	1.65	13.79	0.16	0.01
Bio1c	Λιγνίνη	Άχυρο	59.1	251.8	1.65	7.28	0.16	0.64
Bio2i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	102.9	193.8	3.37	4.36	0.29	0.41
Bio2	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	130.7	193.8	5.03	4.36	0.40	0.41
Bio3i	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	82.3	193.8	2.36	4.36	0.22	0.41
Bio3	Ξυλιτόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	87.6	193.8	2.68	4.36	0.24	0.41
Bio4	Αιθανόλη	Άχυρο-ΗμιΚυτταρίνη	251.5	85.3	8.71	2.81	0.73	0.27
Bio5i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	153.4	85.3	5.01	2.81	0.44	0.27
Bio5	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	195.9	85.3	7.55	2.81	0.61	0.27
Bio6i	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	211.4	85.3	7.11	2.81	0.60	0.27
Bio6	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	217.1	85.3	7.46	2.81	0.63	0.27
Bio7	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	252	85.3	9.91	2.81	0.78	0.27
Bio8	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	237.6	85.3	8.21	2.81	0.69	0.27
Bio9	Αιθανόλη	Άχυρο-Κυτταρίνη	224	85.3	7.12	2.81	0.62	0.27
Bio10	Bio-PVC	Άχυρο-Κυτταρίνη	236	52.9	9.96	1.60	0.78	1.60
Bio11	Βινυλοχλωρίδιο (Μονομερές)	Άχυρο-Κυτταρίνη	234.9	77.9	9.89	4.31	0.78	0.25
Bio12	Αιθυλένιο	Άχυρο-Κυτταρίνη	285.5	66.8	9.8	1.40	0.83	1.41
Bio13i	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	152.4	108.4	7.6	4.65	0.42	0.32
Bio13	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	199.3	108.4	7.6	4.65	0.60	0.32
Bio14	Ιτακονικό Οξύ	Άχυρο-Κυτταρίνη	212.4	108.4	8.38	4.65	0.66	0.32
Bio15i	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	25.1	150	0.74	4.91	0.09	0.47
Bio15	Φαινόλη φορμαλδεΐδη (Ρητίνες)	Άχυρο-Κυτταρίνη	25.3	150	0.75	4.91	0.09	0.47
Bio16i	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	77.9	100.2	3.05	5.05	0.29	5.05
Bio16	Πολυουρεθάνη (Ελαστομερή)	Άχυρο-Κυτταρίνη	78.4	100.2	3.08	5.05	0.30	5.05
U1	Syngas	Ξύλο	7.7	84.4	0.01	2.69	0.01	0.26

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου

Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

U2	Μεθανόλη	Ξύλο	13.1	31.9	0.01	0.27	0.01	0.27
U3	Αιθανόλη	Ξύλο	27.6	85.3	0.11	2.81	0.02	0.27
U4	Αιθυλένιο	Ξύλο	94.9	66.8	2.74	1.40	0.19	1.41
U5	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	1.5	85.3	0.14	2.81	0.01	0.27
U6	Αιθανόλη	Ξύλο	8.9	85.3	0.55	2.81	0.08	0.27
U7a	Μείγμα Αλκοολών	Ξύλο	30.1	83.8	0.44	2.76	0.03	0.31
U7b	Αιθανόλη	Ξύλο	30.3	85.3	0.44	2.81	0.03	0.27
U8a	Αιθυλένιο	Ξύλο	42.3	66.8	0.03	1.34	0.01	1.41
U8b	Προπυλένιο	Ξύλο	42.1	68.3	0.03	1.44	0.01	1.44
U9	NH <sub>3</sub>	Ξύλο	17.7	54.7	0.06	3.19	0.01	3.20
U10	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	42.8	88.8	5.15	4.55	1.48	4.55
U11a	Οξείδιο Προπυλενίου	Ξύλο	87.7	3.2	2.62	4.15	0.19	0.16
U11b	Γλυκόλη Προπυλενίου	Ξύλο	88.6	88.8	3.03	4.55	0.22	4.55
U12	Syngas	Αστικά απόβλητα	19.3	86.4	0.58	2.71	0.08	0.25
U13	Βιοαέριο	Αστικά απόβλητα	9.2	80.9	0.5	2.28	0.04	0.26
U14	Ακετόνη	Ξύλο	58.1	67.1	1.37	2.23	0.11	2.23
U15	N-Βουτανόλη	Ξύλο	37.4	77	0.35	1.80	0.02	1.80
U16a	Biodiesel	Φυτικό λάδι	21.9	91.2	3.23	3.55	1.09	0.35
U16b	Γλυκερόλη	Φυτικό λάδι	21.9	78.9	3.23	2.59	1.09	0.26
U17	Βιοαέριο	Φυτικό λάδι	35.9	81.4	5	2.39	1.66	0.26
U18a	Ακετόνη	Καλαμπόκι	16.2	67.1	1	2.23	0.07	2.23
U18b	Βουτανόλη	Καλαμπόκι	16.3	77	1.02	1.80	0.07	1.80
U18c	Αιθανόλη	Καλαμπόκι	17.1	85.3	1.06	2.81	0.07	0.27
U19	Syngas	Ξύλο	6	81.9	0.01	2.31	0.01	0.26
Bd_1	FAME(biodiesel)	Φυτικό λάδι	20.4	91.2	2.15	3.55	0.10	0.35
Bd_2	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	23.4	91.2	2.46	3.55	0.13	0.35
Bd_3	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	25.7	91.2	2.47	3.55	0.13	0.35
Bd_4	FAME(biodiesel)	Τηγανόλαδο	31.6	91.2	2.32	3.55	0.14	0.35

**Πίνακας Ε1α : Οι συντελεστές για κάθε σετ εκπαίδευσης που εξάγονται από τον αλγόριθμο, με τους δείκτες για το μοντέλο του Πίνακα 4 και στο τέλος υπολογίζεται και ο μέσος όρος αυτών. Οι αντιστοιχίες για κάθε συντελεστή παρουσιάζονται στον Πίνακα Ζ1β.**

Σετ Εκπαίδευσης	Σταθερά	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8
1	10.47	0.81	10.27	-28.23	79.31	176.15	26.86	25.03	-9.75
2	7.25	0.85	11.52	-29.34	84.59	179.94	22.95	25.97	-11.00
3	6.52	0.74	9.76	-27.46	93.92	175.29	28.78	25.02	-9.95
4	9.89	0.83	10.72	-28.81	81.43	174.32	28.91	25.37	-11.26
5	10.30	0.83	10.49	-28.97	82.55	179.39	22.54	25.56	-11.33
6	8.79	0.83	10.97	-28.72	81.65	177.52	25.20	25.44	-10.42
7	7.57	0.82	11.34	-28.54	81.07	176.75	26.42	25.36	-9.66
8	7.61	0.83	10.86	-28.65	84.35	176.45	23.69	25.29	-10.09
9	11.94	0.82	10.86	-29.18	77.56	191.66	14.35	26.20	-11.00
10	10.09	0.82	11.17	-28.80	78.13	179.65	26.37	25.65	-10.67
11	8.11	0.83	11.02	-28.63	82.39	175.40	26.68	25.31	-10.22
12	9.15	0.83	11.05	-28.75	80.50	178.43	25.35	25.51	-10.45
13	7.59	0.83	10.86	-28.65	84.40	176.42	23.67	25.28	-10.09
14	8.23	0.83	10.94	-28.69	82.80	177.25	24.36	25.38	-10.24
15	7.79	0.82	11.77	-28.70	80.26	178.71	25.71	25.57	-10.48
16	8.73	0.84	10.73	-29.05	83.47	178.17	25.07	25.63	-10.37
17	8.74	0.84	10.68	-29.11	83.79	178.23	25.11	25.66	-10.37
18	12.39	0.84	9.12	-28.69	79.73	175.60	23.01	25.02	-9.89
19	8.55	0.83	11.47	-28.64	78.64	175.19	27.43	25.31	-10.24
20	8.80	0.84	11.89	-28.71	75.69	177.91	22.99	25.36	-10.12
21	8.84	0.84	12.22	-28.71	73.42	177.94	22.28	25.33	-10.04
22	7.85	0.79	11.21	-28.10	82.70	178.71	23.46	25.16	-10.43
23	4.46	0.68	12.29	-25.77	84.47	173.73	28.76	23.89	-10.69
24	7.65	0.74	11.08	-27.74	85.45	175.96	27.26	25.69	-9.77
25	9.70	0.94	11.09	-29.86	75.61	175.37	27.81	24.93	-11.07
26	13.42	0.82	9.90	-28.56	78.48	177.16	24.60	25.17	-10.62
27	8.23	0.83	11.01	-28.78	82.36	178.00	24.82	25.50	-10.32
28	8.50	0.83	11.00	-28.73	81.83	177.94	24.84	25.46	-10.34
29	6.98	0.85	11.08	-28.90	77.23	180.24	25.14	25.62	-10.27
30	10.83	0.83	10.42	-28.70	80.64	177.26	24.76	25.34	-10.34
31	9.56	0.83	10.76	-28.71	81.25	177.59	24.81	25.40	-10.34
32	8.82	0.83	11.00	-28.73	81.80	177.64	24.83	25.45	-10.31
33	8.31	0.83	11.00	-28.74	81.99	178.06	24.83	25.47	-10.35
34	8.25	0.82	11.25	-28.67	82.27	177.56	24.86	25.43	-10.34
35	9.27	0.84	10.52	-28.89	81.25	178.43	24.75	25.53	-10.31
36	8.07	0.83	11.02	-28.80	82.87	177.88	24.82	25.52	-10.27
37	-0.64	0.95	12.64	-31.41	101.30	175.58	24.84	26.88	-8.89
38	7.06	0.84	10.93	-28.92	79.14	180.36	24.90	25.65	-10.18
39	13.90	0.76	10.07	-27.21	70.68	179.08	24.84	24.64	-11.15

Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου  
Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

40	11.09	0.80	11.99	-28.01	73.81	177.09	25.06	24.93	-10.86
41	8.13	0.80	12.43	-28.27	80.32	176.40	25.04	25.16	-10.58
42	10.29	0.87	9.11	-29.65	82.44	180.67	24.25	26.05	-10.12
43	6.60	0.83	11.98	-28.91	83.75	177.20	24.92	25.66	-10.15
44	8.68	0.83	10.99	-28.72	81.67	177.82	24.84	25.44	-10.34
45	7.96	0.82	11.31	-28.58	81.18	178.20	24.90	25.39	-10.54
46	8.41	0.82	11.41	-28.61	81.56	177.41	24.89	25.38	-10.40
47	4.89	0.84	12.01	-29.05	83.01	179.33	24.89	25.84	-10.16
48	10.65	0.84	10.21	-29.04	82.85	177.24	24.61	25.59	-10.21
49	8.13	0.83	11.14	-28.72	81.94	177.97	24.86	25.47	-10.34
50	11.07	0.84	9.16	-29.48	92.50	176.24	23.99	25.81	-10.06
51	8.70	0.83	10.98	-28.71	81.64	177.82	24.84	25.47	-10.35
52	7.69	0.82	11.41	-28.66	81.68	177.77	24.96	25.62	-10.40
53	8.62	0.83	11.02	-28.72	81.75	177.85	24.83	25.38	-10.31
54	8.53	0.83	11.07	-28.74	81.88	177.88	24.81	25.28	-10.27
<i>M.O.</i>	<i>8.65</i>	<i>0.83</i>	<i>11.00</i>	<i>-28.71</i>	<i>81.72</i>	<i>177.77</i>	<i>24.89</i>	<i>25.43</i>	<i>-10.35</i>

**Πίνακας Ε1β:** Η λίστα των συντελεστών του Πίνακα 8α που αντιστοιχεί σε κάθε δείκτη:

a1	Μοριακό βάρος
a2	# Χημικών Σταδίων
a3	# Ατόμων εκτός από Η
a4	(# άτομα C)/(#άτομα Η)
a5	Πρώτη ύλη
a6	Ενεργειακή ολοκλήρωση
a7	# ομάδων -CH <sub>2</sub> -
a8	# ομάδων -OH-

**Πίνακας Ε2α : Οι συντελεστές για κάθε σετ εκπαίδευσης που εξάγονται από τον αλγόριθμο για το GWP, με τους δείκτες για το μοντέλο του Πίνακα 4 και στο τέλος υπολογίζεται και ο μέσος όρος αυτών. Οι αντιστοιχίες για κάθε συντελεστή παρουσιάζονται στον Πίνακα Ε2β.**

Σετ Εκπαίδευσης	Σταθερά	b1	b2	b3	b4	b5	b6	b7	b8	b9
1	-0.51	0.07	-0.25	-1.25	4.88	0.69	5.59	1.04	-0.39	1.46
2	-0.59	0.07	-0.25	-1.28	5.02	0.73	5.71	0.88	-0.49	1.48
3	-0.45	0.07	-0.24	-1.19	5.31	0.55	5.66	1.14	-0.50	1.44
4	-0.59	0.07	-0.25	-1.27	4.99	0.72	5.63	0.96	-0.45	1.46
5	-0.47	0.07	-0.25	-1.27	4.98	0.65	5.72	0.87	-0.50	1.47
6	-0.58	0.07	-0.24	-1.27	4.99	0.72	5.68	0.90	-0.43	1.46
7	-0.52	0.07	-0.25	-1.27	4.91	0.69	5.63	1.01	-0.40	1.46
8	-0.62	0.07	-0.25	-1.26	5.05	0.73	5.59	0.91	-0.43	1.46
9	-0.54	0.07	-0.22	-1.31	5.00	0.71	6.22	0.52	-0.46	1.47
10	-0.59	0.07	-0.24	-1.28	4.97	0.73	5.66	0.96	-0.44	1.46
11	-0.60	0.07	-0.25	-1.27	4.99	0.73	5.61	0.97	-0.44	1.46
12	-0.59	0.07	-0.24	-1.28	4.96	0.73	5.67	0.97	-0.45	1.46
13	-0.66	0.08	-0.26	-1.25	5.13	0.73	5.52	0.85	-0.41	1.47
14	-0.61	0.07	-0.25	-1.27	5.01	0.73	5.62	0.93	-0.44	1.46
15	-0.58	0.07	-0.24	-1.28	4.94	0.73	5.69	0.98	-0.45	1.46
16	-0.66	0.07	-0.24	-1.25	4.85	0.79	5.58	0.92	-0.43	1.43
17	-0.63	0.07	-0.25	-1.28	5.06	0.74	5.64	0.95	-0.44	1.47
18	-0.21	0.08	-0.32	-1.17	4.21	0.68	5.53	0.87	-0.50	1.52
19	-0.63	0.07	-0.19	-1.33	5.09	0.68	5.47	1.16	-0.39	1.39
20	-0.60	0.07	-0.24	-1.28	5.01	0.73	5.64	0.94	-0.44	1.46
21	-0.63	0.07	-0.20	-1.33	5.14	0.68	5.70	0.88	-0.40	1.42
22	-0.59	0.08	-0.25	-1.31	4.90	0.75	5.56	1.05	-0.43	1.49
23	-0.61	0.07	-0.24	-1.23	5.03	0.72	5.59	1.00	-0.45	1.44
24	-0.60	0.07	-0.25	-1.22	5.10	0.74	5.56	1.05	-0.41	1.48
25	-0.60	0.08	-0.24	-1.31	4.84	0.73	5.55	1.04	-0.47	1.44
26	-0.29	0.08	-0.27	-1.23	4.65	0.66	5.62	0.94	-0.48	1.49
27	-0.58	0.07	-0.25	-1.26	4.88	0.76	5.60	0.95	-0.45	1.45
28	-0.65	0.07	-0.24	-1.27	4.95	0.81	5.54	0.95	-0.43	1.44
29	-0.53	0.08	-0.31	-1.20	4.32	0.81	5.65	0.97	-0.50	1.52
30	-0.65	0.07	-0.24	-1.27	4.95	0.81	5.54	0.95	-0.43	1.44
31	-0.63	0.07	-0.24	-1.27	4.96	0.78	5.58	0.95	-0.44	1.45
32	-0.47	0.07	-0.25	-1.27	4.95	0.68	5.64	0.94	-0.45	1.47
33	-0.64	0.07	-0.24	-1.27	4.96	0.79	5.57	0.95	-0.44	1.45
34	-0.62	0.07	-0.23	-1.29	5.20	0.70	5.63	0.94	-0.42	1.44
35	-0.57	0.08	-0.26	-1.26	4.86	0.74	5.64	0.95	-0.45	1.48
36	-1.34	0.07	-0.19	-1.39	6.21	0.86	5.66	0.92	-0.32	1.44
37	-0.48	0.07	-0.24	-1.17	4.38	0.74	5.69	0.97	-0.51	1.40
38	-0.75	0.07	-0.25	-1.27	4.87	0.81	5.68	0.95	-0.44	1.47
39	-0.70	0.08	-0.25	-1.36	5.49	0.72	5.60	0.93	-0.39	1.51



Μοντέλα πρόβλεψης Ανάλυσης Κύκλου Ζωής Προϊόντων Βιοδιωλιστηρίου  
Βασισμένα στην Μοριακή τους Δομή

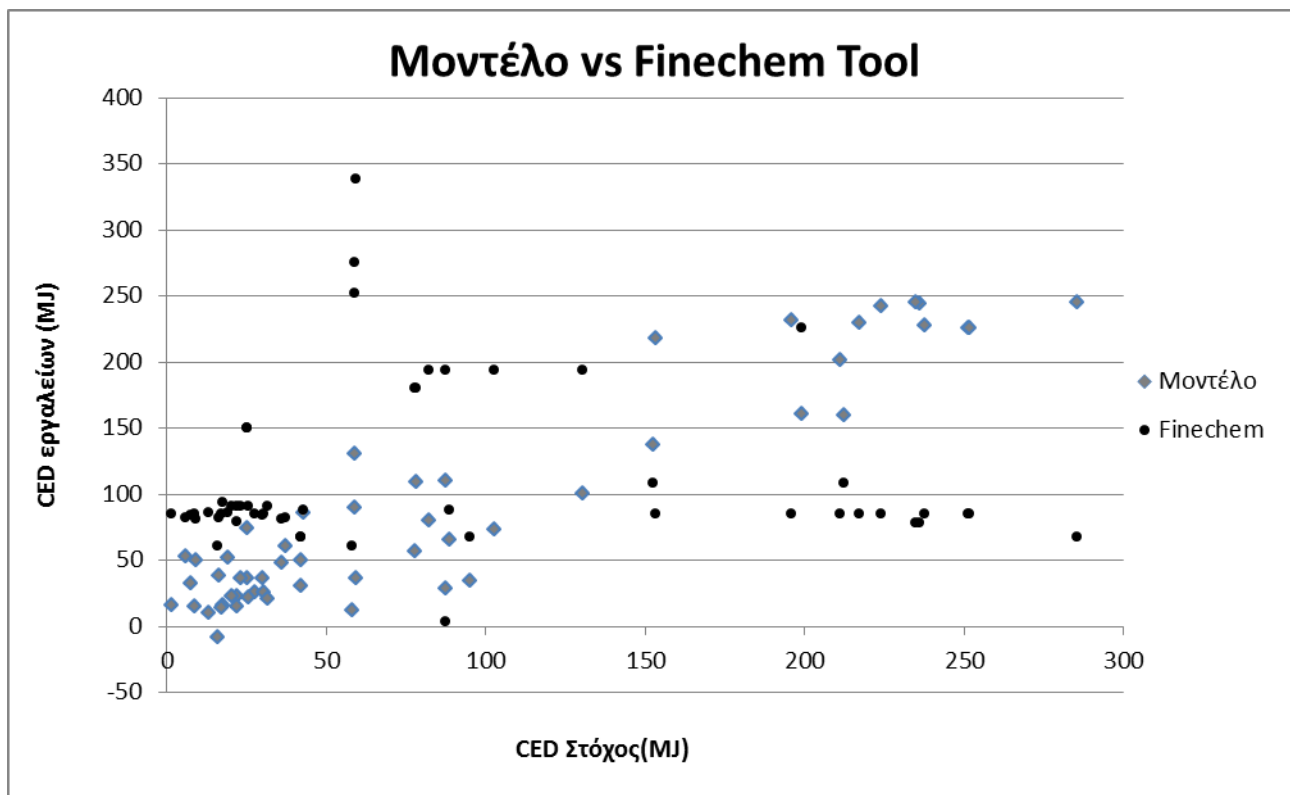
40	-0.64	0.07	-0.24	-1.28	5.05	0.74	5.64	0.94	-0.43	1.46
41	-0.62	0.07	-0.26	-1.25	4.92	0.81	5.54	0.95	-0.44	1.46
42	-0.65	0.08	-0.29	-1.26	4.73	0.79	5.72	0.94	-0.46	1.53
43	-0.39	0.07	-0.24	-1.29	5.02	0.63	5.67	0.93	-0.45	1.48
44	-0.92	0.07	-0.24	-1.28	5.14	0.92	5.54	0.95	-0.40	1.42
45	-1.07	0.07	-0.18	-1.33	5.54	0.82	5.67	0.95	-0.40	1.38
46	-0.46	0.07	-0.22	-1.32	5.04	0.49	5.96	0.93	-0.45	1.48
47	-0.40	0.08	-0.27	-1.26	4.76	0.64	5.75	0.93	-0.47	1.51
48	-0.76	0.07	-0.24	-1.30	5.19	0.82	5.55	0.94	-0.41	1.46
49	-0.61	0.07	-0.24	-1.27	4.98	0.75	5.62	0.95	-0.44	1.46
50	-0.58	0.07	-0.24	-1.32	5.69	0.64	5.61	0.90	-0.40	1.49
51	-0.62	0.07	-0.24	-1.27	5.00	0.74	5.63	0.95	-0.44	1.47
52	-0.60	0.07	-0.25	-1.27	4.99	0.73	5.64	0.94	-0.44	1.46
53	-0.60	0.07	-0.25	-1.27	4.99	0.73	5.64	0.94	-0.44	1.46
54	-0.61	0.07	-0.24	-1.27	5.00	0.73	5.64	0.95	-0.44	1.46
<i>M.O.</i>	<i>-0.61</i>	<i>0.07</i>	<i>-0.24</i>	<i>-1.27</i>	<i>5.00</i>	<i>0.73</i>	<i>5.64</i>	<i>0.95</i>	<i>-0.44</i>	<i>1.46</i>

**Πίνακας Ε2β: Η λίστα των συντελεστών του Πίνακα 9α που αντιστοιχεί σε κάθε δείκτη:**

b1	Μοριακό Βάρος
b2	#Ατόμων
b3	# Ατόμων εκτός Η
b4	(# Ατόμων C)/(# Ατόμων Η)
b5	Τρόπος παραγωγής
b6	Πρώτη ύλη
b7	Ενεργειακή ολοκλήρωση
b8	# ομάδων -CH-
b9	# ομάδων -CH <sub>2</sub> -

## **ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β : ΣΧΗΜΑΤΑ**

Σχήμα Α :Τα αποτελέσματα του μοντέλου για το CED παρουσιάζονται γραφικά με τα αντίστοιχα από το FinechemTool. Φαίνεται ότι τα περισσότερα προϊόντα βιοδιυλιστηρίου έχουν χαμηλότερο CED από τα συμβατικά - η εξαίρεση αφορά την δεξιά περιοχή όπου τα βιοπροϊόντα είναι σαφώς πιο απαιτητικά ενεργειακά.



Σχήμα Β :Τα αποτελέσματα του μοντέλου για το GWP παρουσιάζονται γραφικά με τα αντίστοιχα από το FinechemTool, με τα ίδια χαρακτηριστικά του Σχήματος Δ, δηλαδή τα περισσότερα προϊόντα βιοδιυλιστηρίου έχουν χαμηλότερο GWP από τα συμβατικά εκτός από την δεξιά περιοχή

