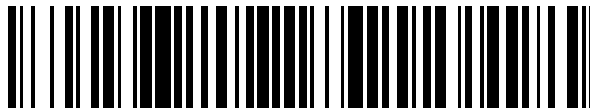


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 623 396**

51 Int. Cl.:

G01N 33/28 (2006.01)

G01N 25/08 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **15.09.2005 PCT/US2005/033247**

87 Fecha y número de publicación internacional: **30.03.2006 WO06034072**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **15.09.2005 E 05796893 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **22.02.2017 EP 1797423**

54 Título: **Procedimiento de análisis de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos**

30 Prioridad:

17.09.2004 US 611050 P
17.09.2004 US 611002 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
11.07.2017

73 Titular/es:

BP OIL INTERNATIONAL LIMITED (100.0%)
CHERTSEY ROAD
SUNBURY-ON-THAMES TW16 7BP, GB

72 Inventor/es:

VOELKENING, JOACHIM y
HODGES, MICHAEL

74 Agente/Representante:

SALVA FERRER, Joan

ES 2 623 396 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Procedimiento de análisis de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos.

5 **ANTECEDENTES DE LA INVENCION****Campo de la descripción.**

10 [0001] La descripción se refiere, en general, a un procedimiento para obtener un ensayo determinativo de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos, tal como crudos, "sincrudos" (crudos sintéticos), productos intermedios de refinado y biocomponentes, a partir de una información limitada sobre la carga de alimentación

Breve descripción de la tecnología relacionada.

15 [0002] Una carga de alimentación que contiene hidrocarburos, tal como el petróleo crudo, consiste en una mezcla compleja de hidrocarburos y compuestos orgánicos heteroatómicos con diversos pesos moleculares y polaridades. El petróleo crudo rara vez se emplea en la forma en la que se obtiene del pozo; en lugar de ello, se suele transformar en una amplia gama de combustibles aptos para ser utilizados, mediante una combinación de procesos físicos y químicos, conocidos en su conjunto como refinado. Los crudos varían mucho en cuanto a sus características de refinado y valor comercial. Las negociaciones de ventas y el procesamiento químico en los que entran en juego cargas de alimentación que contienen hidrocarburos, como por ejemplo las cargas de alimentación de refinería, pueden verse beneficiados por la información oportuna y precisa relativa a la composición química y las propiedades físicas y de rendimiento del crudo. No obstante, a menudo, dicha información simplemente no se encuentra disponible en el momento de la adquisición y, por lo tanto, el operador encargado de negociar la adquisición de una carga de alimentación de refinería debe tomar una decisión de compra basándose en la información histórica relativa a la fuente de la carga de alimentación y en la expectativa de que la carga de alimentación presentará sustancialmente las mismas características que las que se han adquirido anteriormente de la misma fuente (o de alguna parte del mundo similar). Sin embargo, con más información oportuna acerca de la carga de alimentación, el operador cuenta con la ventaja de saber si la carga de alimentación que está considerando adquirir es mejor o peor que el producto que normalmente esperaría obtener de dicha fuente y, por tanto, puede negociar mejor un precio en función de la composición química y las propiedades físicas y de rendimiento reales del producto concreto, en lugar de basarse en información histórica y expectativas. Además, en la medida en la que sea posible encontrar componentes inesperados en la carga de alimentación (componentes que podrían, por ejemplo, dañar un proceso de refinería o resultar perjudiciales de cualquier otro modo), el operador se beneficia de la información completa y precisa acerca de la carga de alimentación en el momento de la negociación de la venta. No obstante, hasta la fecha, no resultaba práctico obtener información oportuna y precisa acerca de la carga de alimentación en el momento de la negociación y la posible venta, ya que se deben determinar numerosas propiedades de la carga de alimentación de refinería y transmitir las al operador. Tradicionalmente, dichos análisis requieren un gran volumen de muestras de la carga de alimentación y un periodo de una o dos semanas para llevarlos a cabo. Por tanto, lo habitual es que el operador que adquiere una carga de alimentación de refinería cuente con una información de ensayo incompleta (o no determinativa) acerca de la carga de alimentación adquirida.

45 [0003] De forma similar, un ensayo de carga de alimentación de refinería, como, por ejemplo, un ensayo de crudo, constituye un importante análisis que se debe llevar a cabo antes de refinar los crudos. Normalmente, una refinería de petróleo refina un gran número de crudos diferentes (y mezclas de los mismos), cada uno de los cuales puede diferir en diversas propiedades físicas y de rendimiento importantes, para obtener una fracción de destilación concreta destinada a la fabricación de productos o a la venta. De nuevo, se deben analizar numerosas propiedades de la carga de alimentación de refinería antes de que los ingenieros de la refinería puedan determinar las condiciones óptimas de los procesos de refinado para refinar cada carga de alimentación y evaluar los posibles efectos que pueda tener cada carga de alimentación sobre los equipos de la refinería (por ejemplo, corrosión, deposición, etc.). Estos ingenieros determinan las proporciones de mezcla concretas y otras etapas de procesamiento basándose en los perfiles de datos históricos sobre los componentes y las propiedades de cada tipo de crudo en función de su fuente. Sin embargo, los componentes y las propiedades generales del crudo pueden cambiar con el transcurso del tiempo y durante el transporte de la fuente a la refinería. De este modo, cuando la carga de alimentación de refinería llega a la refinería, a menudo posee unas características diferentes a las que se determinaron cuando se produjo el crudo en la fuente. Estas diferencias pueden afectar enormemente a las proporciones de mezcla necesarias para obtener la fracción de destilación deseada. Al adquirir una carga de alimentación basándose en información incompleta, es necesario llevar a cabo análisis previos al refinado para obtener información de ensayo determinativo. Como se indica anteriormente, estos análisis requieren un gran

volumen de muestras del producto y un periodo de una a dos semanas para llevarlos a cabo. Si tras haber obtenido los resultados de los análisis, la carga de alimentación de refinería no posee la composición química y las propiedades físicas y de rendimiento esperadas, los ingenieros de la refinería se ven obligados a modificar el proceso para ajustarlo, lo cual da lugar a otras deficiencias.

5

[0004] Existen programas informáticos disponibles en el mercado, como, por ejemplo, ciertos productos de Spiral Software Ltd. (Reino Unido), capaces de proporcionar datos de ensayo determinativo para una carga de alimentación de refinería basándose en una información limitada de la carga de alimentación (por ejemplo, perfil de ebullición, contenido de azufre, contenido de nitrógeno, densidad, rendimientos de producto, etc. reales) y una base de datos exhaustiva que contiene ensayos completos (o determinativos) de cientos (preferentemente, miles) de crudos, sincrudos, productos intermedios de refinado o biocomponentes conocidos. Para utilizar de forma correcta dichos programas informáticos, la base de datos debe ser de alta calidad y contener información acerca de diversos crudos y otras cargas de alimentación de refinería basada en el tipo y la fuente. Estos programas informáticos pueden tomar la información limitada y llevar a cabo complejas operaciones matemáticas para relacionar la carga de alimentación (basándose en la limitada información que se conoce) con el ensayo de un crudo conocido que presenta los atributos más similares. Como otra posibilidad, estos programas informáticos pueden tomar la información limitada y llevar a cabo complejas operaciones matemáticas para construir o reconstruir un ensayo determinativo de un crudo, sincrudo, producto intermedio, etc., conocidos, basándose en las interrelaciones de las diversas propiedades y en los diversos crudos, sincrudos, productos intermedios de refinado, etc., presentes en la base de datos. Por lo tanto, estos programas informáticos requieren la entrada de información de ensayo limitada obtenida a partir de un volumen de muestra de una carga de alimentación de refinería, y una base de datos exhaustiva. Al margen de la utilidad de los programas informáticos, están la velocidad y precisión de las pruebas realizadas para obtener la información de ensayo limitada, así como el valor de la información de ensayo limitada a la hora de predecir con precisión la información de ensayo determinativo de la carga de alimentación de refinería.

25

[0005] Tanto si la carga de alimentación de refinería se evalúa en el punto de venta, como si acaba de llegar a una refinería, existe la necesidad de disponer de la información de ensayo más completa (o determinativa), y a la mayor brevedad posible, para tomar decisiones de adquisición y procesamiento pertinentes. La información de ensayo completa o determinativo puede incluir información relativa a la composición química y las propiedades físicas de la carga de alimentación de refinería y sus propiedades de rendimiento. No obstante, con la tecnología conocida, es difícil obtener información de ensayo rápida y determinativa de una carga de alimentación de refinería. Aunque existen programas informáticos para predecir la información de ensayo determinativo basándose en datos de ensayo limitados, es preciso llevar a cabo procesos y análisis que requieren mucho tiempo y trabajo para obtener los datos de ensayo limitados necesarios para utilizar el programa informático. Concretamente, para obtener tan solo los datos necesarios para utilizar el programa informático, se debe destilar el crudo para obtener múltiples fracciones y después analizar cada fracción para obtener datos de numerosas propiedades físicas. Incluso los avances más recientes de la técnica, como, por ejemplo, los que se describen en la publicación internacional de patente n.º WO 00/39561 A1, dan a conocer procedimientos para analizar automáticamente crudos con espectroscopia, pero requieren unas cantidades de crudo de un volumen considerable y equipos de destilación convencionales. Además, siguen requiriéndose aproximadamente dos días para concluir dichos procedimientos. Otros avances de la técnica, como, por ejemplo, los que se describen en la publicación de patente n.º WO 03/048759 A1, requieren la obtención de datos de ensayo de cientos de parámetros antes de poder generar un ensayo determinativo. Por tanto, los procedimientos no suponen una ayuda beneficiosa para el operador que negocia la adquisición de una carga de alimentación de refinería en la fuente o para el ingeniero de refinería cuando la carga de alimentación de refinería llega a la refinería.

45

[0006] Sería conveniente desarrollar pruebas capaces de obtener rápidamente información de ensayo limitada. Además, también sería conveniente determinar qué propiedades de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos son especialmente predictivas de un ensayo preciso y determinativo de la carga de alimentación. Basándose en dicha determinación, de acuerdo con el procedimiento descrito en la presente memoria, solo es necesario llevar a cabo las pruebas que son capaces de proporcionar resultados especialmente predictivos de un ensayo determinativo.

50

RESUMEN DE LA INVENCION

55

[0007] En la presente memoria, se describe un procedimiento para analizar cargas de alimentación que contienen hidrocarburos tales como cargas de alimentación de refinería que incluyen, entre otros, crudos, crudos sintéticos, fracciones intermedias parcialmente refinadas tales como un componente residual o un componente de material de craqueo, biocomponentes o mezclas de los mismos, y muestras de pozos de preproducción de

prospección petrolera, de acuerdo con la reivindicación 1.

- [0008]** Las técnicas se seleccionan entre el grupo formado por: espectroscopia de absorbanza de ultravioleta visible (UV-Vis), espectroscopia de absorbanza de infrarrojo (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, 5 espectroscopia de absorbanza de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbanza de infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF), resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, microespectrometría de masas, microespectrometría de movilidad iónica y microcromatografía de gases.
- 10 **[0009]** Otras características de la descripción pueden resultar evidentes para los expertos en la materia tras examinar la siguiente descripción detallada y las reivindicaciones adjuntas.

DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LA INVENCION

- 15 **[0010]** La presente invención se refiere a un procedimiento para analizar una carga de alimentación que contiene hidrocarburos, que comprende la medición del perfil de ebullición y al menos otra propiedad con al menos dos distintas técnicas de medición externas al laboratorio en las que una técnica predice el perfil de ebullición y la otra técnica predice la otra propiedad, la transmisión de las mediciones a un procesador capaz de reconstruir un ensayo determinativo de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos a partir de las mediciones, en el que la 20 otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: densidad, gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez, viscosidad, contenido de azufre, contenido de metal, contenido de nitrógeno y combinaciones de las mismas. El perfil de ebullición es preferentemente el perfil de ebullición real.

- [0011]** La etapa de medición incluye preferentemente la ejecución de al menos dos técnicas seleccionadas 25 entre el grupo formado por: espectroscopia de absorbanza en ultravioleta visible (UV-Vis), espectroscopia de absorbanza en infrarrojos (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, espectroscopia de absorbanza en infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbanza en infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF), resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, microespectrometría de masas, microespectrometría de movilidad iónica y microcromatografía de gases (GC). En cada caso, la técnica de medición 30 seleccionada según el procedimiento de ensayo es la técnica más predictiva de la propiedad en cuestión. Al realizar dicha selección, el procedimiento de ensayo descrito en la presente memoria permite reconstruir la muestra de hidrocarburos midiendo tan solo un número limitado de propiedades clave, es decir, al menos dos propiedades.

- [0012]** El procedimiento incluye preferentemente la ejecución de al menos dos de las técnicas mencionadas 35 anteriormente con un dispositivo externo al laboratorio, la correlación de datos obtenidos con las técnicas para obtener el perfil de ebullición y al menos otra propiedad del crudo, la transmisión del perfil de ebullición y otra propiedad a un procesador capaz de reconstruir un ensayo determinativo del crudo a partir de las mediciones, y la reconstrucción de un ensayo determinativo del crudo.

- 40 **[0013]** En una realización preferida, la técnica de medición incluye la medición del perfil de ebullición de la muestra con al menos una de entre: espectroscopia de absorbanza en infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbanza en infrarrojo cercano (NIR), resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, y microcromatografía de gases (GC). Los datos espectrales obtenidos mediante estas técnicas espectroscópicas o los 45 datos obtenidos por medio de las técnicas de resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, y microcromatografía de gases (GC) se pueden correlacionar con el perfil de ebullición de la muestra mediante análisis quimiométricos conocidos por los expertos en la materia. Estas técnicas se pueden llevar a cabo con la propia muestra de crudo o, como otra posibilidad, con fracciones destiladas de la muestra de crudo. Por ejemplo, la muestra se puede someter a una separación en diversas fracciones mediante microcromatografía de gases (GC) o microdestilación y, posteriormente, se puede irradiar cada fracción con luz infrarroja media (MIR) y/o luz infrarroja 50 cercana (NIR). Los datos espectrales obtenidos con la irradiación se pueden correlacionar mediante análisis quimiométricos con el perfil de ebullición de un material de referencia cuyos datos espectrales están almacenados en una base de datos, por ejemplo.

- [0014]** En otra realización preferida, la otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: densidad, 55 gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez, viscosidad y combinaciones de las mismas, y la etapa de medición incluye la medición mediante la ejecución de al menos una técnica seleccionada entre el grupo formado por: espectroscopia de absorbanza en ultravioleta visible (UV-Vis), espectroscopia de absorbanza en infrarrojos (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, espectroscopia de absorbanza en infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbanza en infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF), resonancia

magnética nuclear, microoscilación, microdestilación y microcromatografía de gases (GC). Preferentemente, la técnica es al menos una de entre: espectroscopia de absorbancia en infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia en infrarrojo cercano (NIR) y resonancia magnética nuclear.

5 **[0015]** En otra realización preferida, la otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: contenido de azufre y contenido de metal (por ejemplo, contenido de níquel, contenido de vanadio, contenido de hierro, etc.) y combinaciones de las mismas, y la etapa de medición incluye la medición de la propiedad con espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF). En otra realización preferida, la propiedad es el contenido de metal (por ejemplo, contenido de níquel, contenido de vanadio, contenido de hierro, etc.), y la etapa de medición incluye la medición de
10 la propiedad con espectroscopia de absorbancia de ultravioleta visible (UV-Vis).

[0016] Como se indica anteriormente, los procedimientos de ensayo descritos en la presente memoria incluyen generalmente la obtención de al menos dos propiedades: el perfil de ebullición y al menos otra propiedad de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos, por ejemplo, petróleo crudo. Esto se logra llevando a cabo
15 al menos dos de las técnicas mencionadas anteriormente con la muestra de crudo para obtener datos, en las que la técnica de medición siempre se selecciona para determinar la propiedad de la que es más predictiva, y, a continuación, correlacionando los datos obtenidos con el perfil de ebullición y la otra propiedad mediante análisis quimiométricos conocidos por los expertos en la materia. La etapa de correlación incluye la identificación del espectro obtenido, por ejemplo, y la determinación de la propiedad del crudo que se puede predecir mediante los
20 datos. La etapa de correlación también incluye preferentemente la operación en la que se relaciona el espectro o datos obtenidos con la propiedad de un material de referencia cuyo espectro o datos conocidos están almacenados en una base de datos, o mediante análisis quimiométricos para determinar la propiedad de la muestra.

[0017] Por ejemplo, para correlacionar la densidad de un petróleo crudo con un espectro NIR, se debe
25 seleccionar un conjunto de muestras de calibración que cubran toda la escala de la propiedad que se pretenda medir en el futuro. Una correlación para la densidad podría incluir la densidad de muestras distribuidas uniformemente entre 700 kilogramos por metro cúbico (kg/m^3) y 1100 kg/m^3 . A partir de esas muestras, se pueden medir los espectros NIR y la densidad mediante una metodología ASTM convencional (por ejemplo, ASTM 1655-00 para el NIR e IP 365 para la densidad) u otras metodologías estándar bien conocidas. Mediante análisis quimiométricos
30 como, por ejemplo, algoritmos de correlación multilínea como los de mínimos cuadrados parciales, regresión lineal múltiple, redes neuronales o algoritmos genéticos, se puede determinar una correlación matemática entre el espectro NIR y la densidad. Esta correlación matemática se puede utilizar posteriormente para obtener la densidad de muestras desconocidas a partir de sus espectros NIR. A partir de la densidad, se puede calcular la gravedad específica (API) de la muestra. Se pueden llevar a cabo calibraciones similares para otras propiedades del crudo
35 basándose en estándares bien conocidos, tal como se expone en la siguiente tabla 1:

Tabla 1

Propiedad	Estándar
Densidad	IP 365
Perfil de ebullición real	ASTM D2892 ASTM D5236
Contenido de níquel	IP 437
Contenido de azufre	IP 477
Contenido de vanadio	IP 437
Contenido de nitrógeno	IP 379
Acidez	ASTM D664
Punto de fluidez	ASTM D97
Viscosidad	ASTM D445

40 **[0018]** Como se indica anteriormente, las propiedades que se van a medir o correlacionar de acuerdo con los procedimientos descritos se seleccionan entre el grupo formado por: densidad, gravedad específica, perfil de

ebullición, índice de acidez total, índice de alcalinidad total, punto de fluidez, viscosidad, contenido de azufre, contenido de níquel, contenido de vanadio y contenido de nitrógeno. Se pueden medir otras propiedades, si bien se ha descubierto que la información sobre las propiedades seleccionadas es todo lo que debería necesitarse para obtener un ensayo determinativo de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos que se esté considerando.

- 5 Las propiedades químicas pueden incluir, entre otras, las composiciones elemental y molecular. Las propiedades físicas de un crudo pueden incluir, entre otras, densidad, viscosidad, estructura de rendimiento, punto de humo y propiedades de flujo frío tales como el punto de fluidez, punto de turbidez o punto de congelación. Las propiedades de rendimiento de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos pueden incluir, entre otras, el índice de octano y el índice de cetano. Los expertos en la materia del refinado de crudos conocen, en general, otras
10 propiedades químicas, físicas y de rendimiento.

[0019] El procedimiento de ensayo de la presente invención es capaz de reconstruir la carga de alimentación que contiene hidrocarburos a partir de datos limitados de propiedades clave en parte mediante la técnica de medición independiente óptima más predictiva de la propiedad en cuestión. A este respecto, por ejemplo, se podría
15 utilizar la técnica NIR para determinar el perfil de ebullición y la densidad, la técnica XRF para determinar el contenido de níquel, vanadio o azufre, la técnica microrreológica para determinar la viscosidad y la técnica de conductividad para determinar la acidez.

[0020] El procedimiento descrito utiliza una base de datos que contiene una fuente de datos de ensayo actualizados y completos (o determinativos) de cargas de alimentación que contienen hidrocarburos como
20 referencia, tales como cargas de alimentación de refinería entre las que se incluyen crudos, sincrudos, productos intermedios y biocomponentes cuya composición y propiedades físicas y de rendimiento han sido medidas y caracterizadas previamente. Se entiende que un ensayo de crudo "determinativo" hace referencia a una información tan completa como pudiera ser convenientemente necesaria para que un operador o ingeniero tome una decisión de
25 negocios o de procesamiento. La base de datos también puede contener datos de correlación relativos a estos crudos de referencia. Dichos datos de correlación pueden incluir, por ejemplo, datos espectrales y datos de propiedades químicas, físicas y de rendimiento. Un procesador capaz de acceder a la base de datos y que contiene un programa informático que utiliza procedimientos matemáticos avanzados puede generar información de ensayo determinativo para cargas de alimentación que contienen hidrocarburos, tales como crudos, incluido el
30 refraccionamiento preciso y el intercambio de datos flexible con otras aplicaciones. El procesador puede utilizar procedimientos estadísticos avanzados que, preferentemente, forman parte del programa informático para identificar vínculos entre los datos de correlación y una propiedad concreta, construyendo un modelo de crudo que se puede utilizar para reconstruir características completas a partir de la información disponible. Incluso cuando se basan únicamente en unos pocos parámetros clave, estas reconstrucciones abarcan toda la escala de las propiedades
35 físicas y químicas. Las estimaciones de error en todos los valores predichos permiten al usuario (por ejemplo, el operador, el ingeniero de refinería, etc.) evaluar cualquier riesgo en las decisiones de negocios y de procesamiento relacionadas con las mismas. Estos procedimientos estadísticos avanzados, combinados con la información de ensayo limitada que se especifica en la presente memoria, hacen posible la reconstrucción de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos que se desconoce, a partir de mediciones limitadas y con una precisión
40 notable. Por consiguiente, cuando se evalúa una carga de alimentación que contiene hidrocarburos y que se desconoce, mediante dos técnicas de medición descritas en la presente memoria, los datos medidos se pueden correlacionar con los datos existentes para una o más referencias conocidas a fin de generar un ensayo determinativo de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos y que se desconoce. Por ejemplo, Spiral Software Ltd. (Reino Unido) comercializa programas informáticos adecuados. Entre los procesadores adecuados, se
45 incluyen microprocesadores tanto de uso general como especial, tales como los que se encuentran habitualmente en ordenadores industriales, ordenadores personales y asistentes personales digitales (PDA).

[0021] Se puede utilizar cualquier técnica multivariante como técnica de correlación (es decir, para correlacionar los datos medidos con los datos de composición y propiedades físicas y de rendimiento existentes para
50 la referencia conocida). Una medición multivariante es aquella en la que se realizan múltiples mediciones en una muestra de interés, dicho de otro modo, se mide más de una variable o respuesta para cada muestra. De este modo, por ejemplo, la utilización de un conjunto de sensores para obtener múltiples respuestas con una muestra de vapor es una medición multivariante. Véase, en general, Beebe y col. "*Chemometrics: A Practical Guide*", 6 (John Wiley & Sons Inc. 1998). Las técnicas de correlación preferidas son técnicas de datos escasos, técnicas quimiométricas tales
55 como, por ejemplo, mínimos cuadrados parciales, regresión lineal múltiple, algoritmos genéticos y redes neuronales. De este modo, los datos obtenidos con técnicas multivariantes se relacionan matemáticamente con una propiedad intrínseca de la composición para producir información acerca de la propiedad.

[0022] Por ejemplo, se pueden utilizar espectros NIR para medir la intensidad de los armónicos de las

vibraciones moleculares de una molécula, como enlaces carbono-hidrógeno, oxígeno-hidrógeno y nitrógeno hidrógeno y la molécula. Las bandas de absorción carbono-hidrógeno (C-H) suelen resultar útiles para mezclas de compuestos orgánicos. Los diferentes tipos de enlaces C-H, por ejemplo, hidrocarburos aromáticos, alifáticos y olefínicos, absorben la luz a diferentes frecuencias características. La magnitud de la banda de absorción es proporcional a las cantidades de los enlaces C-H en la muestra. Por lo tanto, el espectro NIR puede proporcionar una huella digital de la composición de la muestra. Esta huella digital se puede correlacionar empíricamente con las propiedades intrínsecas de la muestra.

[0023] La espectroscopia NIR presenta ciertas ventajas con respecto a otros procedimientos analíticos que se llevan a cabo en las refinerías y puede cubrir un gran número de aplicaciones repetidas de manera rápida y precisa. La región NIR entre los 800 nanómetros (nm) y los 2500 nm contiene la totalidad de la información molecular en forma de combinaciones y armónicos de vibraciones poliatómicas, pero se necesitan técnicas matemáticas para utilizar esta información y para calcular los parámetros deseados. En las patentes de EE. UU. n.º 5.490.085, 5.452.232 y 5.475.612, se describe la utilización de NIR para determinar el índice de octano, rendimientos y/o propiedades de un producto de un proceso químico o proceso de separación a partir de un análisis de los materiales de alimentación introducidos en dicho proceso, y rendimientos y/o propiedades de un producto de una operación de mezcla, de nuevo a partir de un análisis de los materiales de alimentación introducidos en la misma.

[0024] Cuando la luz incide en un fluido, se producen varios fenómenos. Por ejemplo, una parte de la luz se puede reflejar en la superficie, mientras que otra parte penetra en el fluido. La parte de la luz que penetra en el fluido puede transmitirse a través del fluido o experimentar una dispersión o absorción. A menudo, todos estos mecanismos tienen lugar de manera simultánea. La cantidad de luz absorbida en una longitud de onda dada constituye una característica de la sustancia a través de la cual se desplaza la luz. Mientras que la luz que es absorbida no se puede medir directamente, la luz que emerge del fluido sí se puede medir. A consecuencia de la absorción, la intensidad de la luz emergente se reducirá o "atenuará". La medida en que se puede atenuar la luz para cualquier composición dada variará en función de su longitud de onda. Por tanto, para un espectro de una fuente de luz dada, la evaluación de la intensidad de los componentes de la luz emergente en longitudes de onda seleccionadas proporciona información acerca de la composición del fluido.

[0025] La dispersión también provoca la atenuación de la intensidad de la luz. No obstante, mientras que la atenuación resultante de la absorción provoca cambios relativos en la intensidad de la luz en función de la longitud de onda, es decir, se produce un cambio de forma del espectro de banda ancha, la atenuación debida a la dispersión de la luz es mucho menos dependiente de su longitud de onda absoluta; presenta una dependencia lenta y monótona de la longitud de onda. Por lo tanto, la dispersión de la luz da lugar a una caída en la intensidad de la luz en todas las longitudes de onda, de manera que a cualquier longitud de onda dada, la intensidad no cambia de manera apreciable con respecto a la intensidad a otras longitudes de onda. Para fluidos que dispersan y absorben la luz al mismo tiempo, el resultado final es que, aunque la magnitud absoluta de la luz recogida en función de la longitud de onda no esté relacionada únicamente con la composición química, la intensidad de la luz relativa en función de la longitud de onda esté relacionada con la composición química. Debido a que las diferentes longitudes de onda de la luz se comportan de distinto modo, se prefieren múltiples técnicas de medición de acuerdo con los procedimientos de ensayo descritos en la presente memoria.

[0026] Los procedimientos descritos en la presente memoria se llevan a cabo con uno o más dispositivos externos al laboratorio. Tal como se utiliza en la presente memoria para modificar el término "dispositivos", la expresión "externo al laboratorio" hace referencia a dispositivos que son portátiles y, preferentemente, de mano. Además, dichos dispositivos deberían poder ser manejados por una sola persona. De este modo, preferentemente, cada dispositivo tiene un peso total inferior a aproximadamente cinco kilogramos y, más preferentemente, inferior a aproximadamente dos kilogramos. Uno o más dispositivos externos al laboratorio adecuados para llevar a cabo la etapa de medición pueden incluir uno o más de entre: una unidad de microdestilación, una unidad de microoscilación, una unidad de microcromatografía de gases (por ejemplo, un microcromatógrafo de gases bidimensional), un microfotoespectrómetro de ultravioleta visible (UV-Vis), un microespectrómetro de infrarrojos (IR), un microespectrómetro de fluorescencia de UV, un microespectrómetro de infrarrojo medio (MIR), un microespectrómetro de infrarrojo cercano (NIR), un espectrómetro de fluorescencia de rayos X (XRF) portátil, microespectrómetro de masas, microespectrómetro de movilidad iónica, un espectrómetro de resonancia magnética nuclear portátil, microdispositivos de conductividad/capacidad, microdispositivos reológicos y sensores de diapasón. Un dispositivo externo al laboratorio adecuado también puede ser multifuncional, en tanto que un único dispositivo es capaz de llevar a cabo una o más de entre: espectroscopia de absorbancia de ultravioleta visible (UV-Vis), espectroscopia de absorbancia de infrarrojos (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, espectroscopia de

absorbancia de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia de infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF), resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, microespectrometría de masas, microespectrometría de movilidad iónica y microcromatografía de gases (GC).

5 **[0027]** Existen espectrómetros adecuados disponibles comercialmente que son conocidos por los expertos en el campo del refinado de petróleo. Por ejemplo, Axsun Technologies Inc. (Massachusetts, EE. UU.) comercializa microespectrómetros NIR, con el nombre de AXSUN NIR-APS Analyzer. Siemens (con el nombre de MicroSAM) y SLS (con el nombre de Micro-technology) comercializan microcromatógrafos de gases. Oxford Instruments (Reino Unido) comercializa espectrómetros XRF. En la patente de EE. UU. n.º 5.827.952, se describen en general unidades de microoscilación adecuadas. En la patente de EE. UU. n.º 6.393.895, se describen en general sensores de diapasón adecuados.

15 **[0028]** Aunque cualquiera de estas unidades o espectrómetros es capaz de proporcionar datos que se pueden correlacionar con múltiples propiedades, se ha descubierto que, a menudo, ciertos parámetros se podrían detectar mejor con una unidad o espectrómetro que con otro. Por ejemplo, en una realización preferida, la propiedad que se va a detectar se selecciona entre el grupo formado por: densidad, gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez y viscosidad; y la etapa de irradiación incluye la irradiación de la muestra de carga de alimentación que contiene hidrocarburos con al menos una de entre luz infrarroja cercana (NIR) y luz infrarroja media (MIR). De este modo, preferentemente, el dispositivo externo al laboratorio incluye más de una de las unidades o espectrómetros mencionados anteriormente (por ejemplo, el dispositivo es multifuncional), de manera que se utilizan diferentes unidades o espectrómetros para obtener datos acerca de diferentes propiedades.

25 **[0029]** Tal como se menciona anteriormente, ciertas técnicas de medición predicen ciertas propiedades con mayor precisión que otras técnicas de medición. Los procedimientos de ensayo descritos en la presente memoria pueden incluir la selección de una técnica de medición predictiva del perfil de ebullición y otra técnica de medición predictiva de otra propiedad de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos, tal como: densidad, gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez, viscosidad, contenido de azufre, contenido de metal y contenido de nitrógeno. Tal como se emplea en la presente memoria, el término "predictivo" pretende englobar generalmente técnicas cuyas mediciones están dentro de un margen aceptable de error en comparación con los procedimientos estandarizados (por ejemplo, ASTM) para medir la misma propiedad. Un margen de error aceptable puede ser el 15 por ciento, preferentemente el 10 por ciento y, más preferentemente, el 5 por ciento o menos del valor medido mediante procedimientos estandarizados (por ejemplo, ASTM). De este modo, si una técnica de medición posee un margen de error que excede un 15 por ciento con respecto a un procedimiento estandarizado, dicha técnica no se consideraría predictiva de la propiedad que se pretende medir. Por el contrario, si otra técnica de medición posee un margen de error de un 15 por ciento o menos con respecto a un procedimiento estandarizado, dicha técnica se consideraría predictiva de la propiedad que se pretende medir. Los criterios para seleccionar una técnica de medición incluyen, entre otros, una alta precisión (tal como se explica anteriormente), la velocidad a la que se puede llevar a cabo la técnica (se prefieren técnicas rápidas), el coste relativo para llevar a cabo la técnica (se prefieren técnicas que no resulten costosas), la facilidad para llevar a cabo la técnica (se prefieren técnicas que no requieran técnicos cualificados), y la falta de sensibilidad de una técnica a los cambios en las condiciones ambientales.

45 **[0030]** Preferentemente, cada dispositivo externo al laboratorio tiene un peso de aproximadamente cinco kilogramos o menos, y, más preferentemente, de aproximadamente dos kilogramos o menos. Además, preferentemente, cada dispositivo externo al laboratorio requiere únicamente una cantidad de crudo de pequeño volumen para llevar a cabo el procedimiento descrito. Por consiguiente, cada dispositivo externo al laboratorio, preferentemente, requiere aproximadamente 100 mililitros o menos de una muestra de crudo, más preferentemente aproximadamente 10 mL o menos, y más preferentemente 1 mL o menos de la muestra. Con tales requisitos de cantidad de pequeño volumen y el pequeño tamaño y peso de cada dispositivo externo al laboratorio, los dispositivos pueden convertirse en portátiles y llevarlos al lugar en el que se encuentra el crudo que aún no se ha evaluado, como por ejemplo, al pozo petrolífero o al buque del que se descarga la mercancía. Ventajosamente, debido al tamaño relativamente pequeño de los componentes del dispositivo externo al laboratorio, los requisitos de energía también deberían ser relativamente bajos. De este modo, el dispositivo se puede poner en funcionamiento con una batería adecuada como, por ejemplo, una batería recargable, sin añadir peso al conjunto del dispositivo de manera que resulte perjudicial.

55 **[0031]** Normalmente, el dispositivo o dispositivos utilizados para llevar a cabo el presente procedimiento proporcionan un análisis en menos de dos horas y, preferentemente, proporcionan un análisis en menos de 30 minutos, por ejemplo en menos de 2 minutos.

[0032] Cuando el dispositivo o dispositivos portátiles se utilizan para llevar a cabo el procedimiento descrito en la presente memoria para el análisis de un producto de un proceso de una refinería, el producto puede ser un flujo intermedio en el proceso de refinería global, un betún, un producto del proceso de refinería global que se utiliza posteriormente como carga de alimentación química, o un producto del proceso de refinería global que se utiliza
5 posteriormente como componente de mezcla para un combustible o lubricante.

[0033] Los dispositivos analíticos presentes en el aparato portátil se pueden microfabricar de manera adecuada, y pueden presentarse en forma de sensores. Los dispositivos microfabricados son dispositivos en los que la parte analítica o detector crucial del dispositivo se fabrica mediante técnicas compatibles con la industria del
10 microchip y produce un espectro o una simple señal eléctrica como respuesta al contacto con una sustancia de prueba. Se puede introducir una simple señal eléctrica en un conjunto de elementos electrónicos asociado que o bien convierte la señal de entrada en un valor para la propiedad que se está midiendo o bien continúa procesando la señal mediante técnicas quimiométricas. Un espectro se puede utilizar directamente o tratarlo matemáticamente antes de someterlo a técnicas quimiométricas para dar lugar a la propiedad o propiedades deseadas. En cualquier
15 caso, se puede introducir el valor o espectro en un modelo generado a partir de la relación entre valores o espectros medidos y determinar la composición o propiedades conocidas de dichas muestras mediante mediciones analíticas previas.

[0034] Cuando está presente, el dispositivo de microdestilación o microfraccionamiento puede ser cualquier dispositivo adecuado que se utilice para destilar o fraccionar una muestra con el fin de obtener fracciones similares a las logradas mediante una destilación convencional. Por ejemplo, la microdestilación o microfraccionamiento puede destilar o fraccionar un crudo u otra carga de alimentación de refinería para dar fracciones similares a las que se logran mediante una destilación de refinería convencional en una unidad de destilación de crudos (CDU). El dispositivo de microdestilación también puede ser un dispositivo micromodificado que comprende un microcalentador
25 para vaporizar la muestra (por ejemplo, petróleo crudo), un canal adecuado, por ejemplo un capilar, a través del cual pasa la muestra vaporizada para lograr una separación de vapor y líquido, una zona de condensación adecuada (normalmente una zona refrigerada, tal como un microrrefrigerador) en la que se condensa la muestra vaporizada que ha pasado por el canal, y un microsensar para medir la condensación de la muestra en la zona de condensación. El microsensar puede ser un sensor óptico. Preferentemente, el dispositivo de microdestilación es un
30 dispositivo de separación microfabricado, por ejemplo, sobre una oblea de silicio. El dispositivo de microdestilación puede ser desechable. Si el dispositivo de microdestilación proporciona una serie de fracciones similares a las logradas mediante una destilación convencional, estas fracciones podrán ser analizadas por otro u otros dispositivos de análisis.

[0035] Cuando está presente, el dispositivo de microoscilación es preferentemente un dispositivo o sensor acústico-óptico. Los dispositivos de microoscilación se basan en la medición de la frecuencia de oscilación del dispositivo, que cambia con la masa de material colocada en el oscilador. De este modo, si el material se evapora o se condensa en el dispositivo, la frecuencia cambia. Además de la información sobre el TBP (perfil de ebullición real), los dispositivos acústico-ópticos pueden proporcionar información acerca de la viscosidad, propiedades de flujo
40 frío, contaminantes volátiles y formación de depósitos. En las patentes de EE. UU. n.º 5.661.233 y 5.827.952, se describen microosciladores adecuados.

[0036] Cuando está presente, el micro-NIR se puede utilizar, por ejemplo, para proporcionar información sobre TBP y para generar una curva de destilación simulada, así como para proporcionar información sobre la densidad y cantidades de sustancias saturadas y aromáticas en la muestra en su conjunto y/o en fracciones obtenidas mediante una etapa de separación adecuada, tal como un dispositivo de microdestilación. También se pueden medir propiedades de azufre y/o flujo frío, tales como el punto de turbidez y el punto de congelación, acidez (TAN), índice de octano experimental (RON), índice de octano de motor (MON), índice de cetano y punto de humo. Entre los analizadores micro-NIR adecuados, se incluye el Axsun NIR-APS Analyser producido por Axsun
50 Technologies Inc., Massachusetts (EE. UU.).

[0037] El dispositivo para medir la densidad puede ser un sensor oscilatorio, y el dispositivo para medir el TAN puede ser un sensor electroquímico.

[0038] Cuando está presente, el micro-GC puede proporcionar una curva de destilación simulada y puede proporcionar una especiación de hidrocarburos, tal como hidrocarburos C1-C9. Entre los dispositivos de micro-GC, se incluyen GC de proceso MicroSAM de Siemens o GC de SLS Microtechnology.

[0039] Cuando está presente, la microespectrometría de movilidad iónica/movilidad diferencial se puede

utilizar para proporcionar información acerca de tipos moleculares específicos y, en particular, de las moléculas polares de la muestra, por ejemplo contaminantes tales como cloruros orgánicos o metanol, así como sulfuros y compuestos nitrogenados. Además, la microespectrometría de movilidad iónica/movilidad diferencial combinada con un micropirrolizador, puede ofrecer un análisis de nitrógeno y azufre mejorado. La microespectrometría de movilidad iónica/movilidad diferencial se aplica mejor combinada con un microdispositivo de GC y/o prefraccionamiento/preconcentración. Entre los microespectrómetros de movilidad iónica/movilidad diferencial adecuados, se incluye el Sionex microDMx.

10 **[0040]** Para su utilización en el presente procedimiento, se pueden disponer varios dispositivos en un único aparato portátil. El aparato puede incluir al menos 3 dispositivos de análisis diferentes, lo que permite determinar varias propiedades de una muestra (o sus fracciones) mediante el aparato, y proporciona una cantidad considerable de datos para el análisis, tanto directamente como a través de un modelo adecuado de base de datos, tal como se describe más adelante.

15 **[0041]** Debido a su facilidad de transporte, el aparato utilizado para llevar a cabo el procedimiento se puede llevar al lugar en el que se encuentra la muestra que se va a analizar, y se puede obtener un rápido análisis de la muestra obtenida. Por ejemplo, para el análisis (ensayo) de crudos, el aparato se puede utilizar para obtener una rápida estimación/evaluación de crudos "in situ", por ejemplo en un buque cisterna de crudo o un tanque de almacenamiento de crudo en tierra, o en un sitio de perforación de prospección petrolera, lo que permite determinar rápidamente el valor del crudo para un posible comprador. En un sitio de perforación de prospección petrolera, el aparato se puede utilizar en la "boca del pozo" de la obra de perforación, para proporcionar un rápido análisis de un crudo, por ejemplo, para proporcionar rápidamente información de retorno acerca de las propiedades de un crudo en un pozo de prueba, lo que permite evaluar dicho crudo.

25 **[0042]** Preferentemente, el aparato que se puede utilizar con el presente procedimiento de ensayo es al menos compatible con comunicaciones inalámbricas tales como una red inalámbrica de malla y, más preferentemente, con medios para la comunicación remota, tales como la comunicación de datos vía satélite, de manera que los resultados de los análisis se pueden comunicar inmediatamente al posible comprador, con lo que se vuelve a reducir el periodo de tiempo necesario para poner los datos a disposición del posible comprador.

30 **[0043]** En especial cuando no hay microdispositivos adecuados disponibles, el aparato que se puede utilizar para llevar a cabo el presente procedimiento se puede utilizar combinado con otros analizadores portátiles, particularmente aquellos que proporcionan datos elementales, como la espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF) portátil y la espectroscopia de descomposición inducida por láser (LIBS) para mejorar la amplitud del ensayo.

35 **[0044]** La XRF, por ejemplo, puede proporcionar un análisis del contenido de azufre y metales de una muestra, por ejemplo de fracciones de petróleo crudo. Entre los analizadores XRF portátiles adecuados, se incluyen aquellos que comercializa OXFORD Instruments.

40 **[0045]** En general, el aparato utilizado para llevar a cabo el procedimiento de ensayo de la presente invención, opcionalmente en combinación con otros analizadores cualesquiera generarán datos relativos a al menos dos y, preferentemente, relativos a al menos 10 propiedades clave de la muestra que se va a analizar.

45 **[0046]** Gracias al rápido análisis que se puede obtener mediante el procedimiento de ensayo de la presente invención, es posible obtener análisis más a menudo y/o se pueden utilizar para la optimización de procesos. Por ejemplo, el procedimiento se puede utilizar en una refinería y se pueden llevar a cabo análisis regulares de mezclas de cargas de alimentación de refinería, tales como mezclas de crudos, producidas (a partir de dos o más fuentes disponibles) en la refinería, para garantizar una configuración óptima de la refinería para la mezcla. Además, el procedimiento también se puede utilizar para comprobar la uniformidad y/o calidad de cargas de alimentación a su llegada a una refinería o puesto de mezcla y/o se puede utilizar para proporcionar una determinación en línea (*on-line*) o a pie de línea (*at-line*) de la calidad de la carga de alimentación y datos de propiedades para introducirlos en modelos de mezcla y optimización de procesos de refinería.

50 **[0047]** Cuando el procedimiento de la presente invención se utiliza en la "boca del pozo" de un sitio de perforación, se pueden poner en funcionamiento varios aparatos en diferentes bocas de pozo que utilicen un mecanismo de transporte común, por ejemplo un oleoducto común, para proporcionar el análisis del crudo desde cada pozo. El análisis de los crudos individuales y una planificación apropiada pueden permitir obtener una composición más optimizada de la mezcla final de crudos de cada pozo. Además, debido a la repetición del análisis de los crudos procedentes de diversas bocas de pozo, con el tiempo se pueden utilizar los cambios en los crudos

individuales para predecir el efecto sobre la mezcla de crudos producida, o influir en la mezcla para mantener una mezcla de crudo de calidad constante.

5 **[0048]** El procedimiento también puede comprender un análisis de la carga de alimentación de refinería con uno o más analizadores portátiles, la comunicación de los resultados de los análisis a un posible comprador, y/o una combinación de la información de análisis obtenida con un modelo de base de datos como el descrito anteriormente.

10 **[0049]** Como otra posibilidad, o como añadido, se pueden incorporar otras herramientas analíticas, como sensores específicos para una especie, sensores adaptados al pH, sensores acústicos, micromáquinas de conductividad/capacidad o micromáquinas reológicas, al dispositivo externo al laboratorio utilizado en el procedimiento. Se pueden utilizar micromáquinas de conductividad/capacidad y sensores adaptados al pH para determinar la acidez de una muestra, por ejemplo. También se pueden utilizar micromáquinas reológicas y sensores acústicos para determinar la viscosidad de una muestra, por ejemplo. También se pueden utilizar sensores acústicos para determinar el punto de fluidez de una muestra, por ejemplo.

15 **[0050]** Preferentemente, el dispositivo externo al laboratorio incluye unos medios para comunicaciones remotas tales como la comunicación de datos vía satélite, o al menos es compatible con los mismos, de manera que los resultados de los análisis se pueden comunicar inmediatamente al operador, ingeniero o usuario del dispositivo externo al laboratorio.

20 **[0051]** Los procedimientos de ensayo descritos en la presente memoria se pueden llevar a cabo en diversos lugares, como, por ejemplo, en un pozo petrolífero, en una plataforma de extracción de petróleo en la que se mezclan crudos procedentes de diferentes pozos, en oleoductos que transportan un crudo (o mezclas del mismo) de un lugar a otro, en el punto de carga/descarga de un buque/tanque petrolero, en un punto de entrada a una refinería de petróleo, o en cualquier flujo intermedio de una refinería de petróleo.

EJEMPLO

30 **[0052]** Este ejemplo demuestra el procedimiento de la invención. Se obtuvo el espectro NIR de una muestra de crudo mediante un espectrómetro Bomem FTNIR. Se tomaron espectros NIR en la primera región de armónicos (6300-5700 números de onda), con una longitud de trayectoria de 1 mm y una temperatura de 40 °C.

35 **[0053]** Se utilizaron las primeras derivadas de los espectros para construir los modelos de calibración y para las mediciones.

40 **[0054]** Se construyeron modelos de calibración para datos de TBP y densidad utilizando aproximadamente de 40 a 60 muestras. Esas muestras de calibración se escogieron de tal manera que presentaban diversas propiedades del crudo en los márgenes deseables. Se midieron datos de referencia para la calibración de los crudos, mediante los procedimientos ASTM y otros procedimientos apropiados tal como se recoge en la tabla 1. Se construyeron modelos mediante el procedimiento de mínimos cuadrados parciales ("PLS"). Los modelos se construyeron mediante una herramienta de escritorio de procesamiento y gestión de datos de espectroscopia GRAMS/A1 comercializada por Thermo Electron Corporation. La precisión de los modelos se comprobó mediante un conjunto independiente de muestras de crudo.

45 **[0055]** Se midieron espectros NIR para las muestras utilizando los mismos parámetros. Los espectros obtenidos se introdujeron después en los modelos de calibrado y se calcularon los datos de TBP y densidad. En la siguiente tabla 2, se exponen los resultados de la TBP y la densidad determinados por los modelos.

50 **[0056]** Además, se utilizó espectroscopia de fluorescencia de rayos X (procedimientos IP 437 y 477) para determinar los contenidos de azufre, níquel y vanadio de la muestra de crudo. Estos datos también se exponen en la tabla 2 que se muestra más adelante.

55 **[0057]** De acuerdo con el procedimiento de la invención, se correlacionaron los datos de TBP, densidad, azufre, níquel y vanadio mediante el programa informático CrudeManager comercializado por Spiral Software Ltd., para generar un ensayo determinativo reconstruido. En la tabla 3 que se muestra más adelante, se expone el ensayo reconstruido y se compara con ciertos valores de ensayo reales determinados mediante técnicas analíticas de ensayo convencionales. Como se pone de manifiesto, el procedimiento de la invención proporciona un ensayo determinativo relativamente preciso del crudo partiendo de una información de ensayo limitada.

[0058] CrudeManager es una herramienta para calcular (reconstruir) un conjunto definido de propiedades de un crudo entero, propiedades de fracciones individuales de un crudo, o un ensayo de crudo completo, a partir de un conjunto de datos clave del crudo. Normalmente, este conjunto de datos incluye datos de TBP y otros datos. Estos otros datos pueden ser, entre otros, la densidad, el azufre, el níquel o el vanadio. Para la reconstrucción de datos de 5 crudo o del ensayo de crudo completo a partir de un número limitado de datos, se han dado a conocer previamente a CrudeManager los datos procedentes de un gran conjunto de ensayos de crudos. Resulta conveniente que este conjunto de calibración cubra los diversos crudos, que se reconstruirán.

Tabla 2

10

DATOS DE TBP A PARTIR DE NIR	% de rendimiento en peso
Petróleo crudo entero	
IBP-95	8,91
Nafta ligera (95 - 149 °C)	8,03
Queroseno (149 - 232 °C)	12,05
Gasóleo (232 - 342 °C)	19,28
Gasóleo pesado (342 - 369 °C)	4,67
Gasóleo de vacío/destilado parafínico (369 - 509 °C)	21,64
Gasóleo de vacío/destilado parafínico (509-550 °C)	5,73
Densidad a partir de NIR	g/cc
Densidad de crudo entero	0,8652
Elementos de crudo entero mediante XRF	
% en peso de azufre	1,59
Ppm en peso de níquel	18
Ppm en peso de vanadio	55
Origen del petróleo crudo	Rusia

Tabla 3

	% en peso de rendimientos		Densidad g/cc		% en peso de azufre	
	Determinado	Real	Determinado	Real	Determinado	Real
Fraciones de crudo						
Crudo entero			0,8652	0,867	1,58	1,59
Gas (< 15 °C)	1,9	1,5	0,5561		0,01	
Gasolina (15-95)	7,0	6,4	0,6734		0,02	
Nafta ligera (95 - 149 °C)	7,9	7,5	0,7434		0,03	
Queroseno (149 - 232 °C)	12,2	13,0	0,7936		0,23	
Gasóleo (232 - 342 °C)	19,2	19,3	0,8493		0,98	
Gasóleo pesado (342 - 369 °C)	4,7	4,7	0,8831		1,67	

ES 2 623 396 T3

Gasóleo de vacío/destilado parafínico (369 - 509 °C)	21,7	21,0	0,915		1,75	
Gasóleo de vacío/destilado parafínico (509-550 °C)	5,6	5,4	0,9447		2,18	
Residuo atmosférico (>369 °C)	47,1	47,9	0,9555	0,966	2,72	2,64
Residuo de vacío (>550 °C)	19,9	21,5	1,0075	1,023	3,92	3,17
	% en peso de residuo de carbono		Ppm de níquel		Ppm de vanadio	
Fraciones de crudo	Determinado	Real	Determinado	Real	Determinado	Real
Crudo entero						
Gas (< 15 °C)						
Gasolina (15-95)						
Nafta ligera (95 - 149 °C)						
Queroseno (149 - 232 °C)						
Gasóleo (232 - 342 °C)						
Gasóleo pesado (342 - 369 °C)						
Gasóleo de vacío/destilado parafínico (369 - 509 °C)						
Gasóleo de vacío/destilado parafínico (509-550 °C)						
Residuo atmosférico (>369 °C)	8,4	8,7	38	40	117	115
Residuo de vacío (>550 °C)	19,7	19,2	90	89	277	257

[0059] La anterior descripción se ofrece únicamente para mayor claridad de comprensión y no deberían desprenderse limitaciones innecesarias a partir de la misma, ya que las modificaciones que quedan dentro del alcance de la invención, definida exclusivamente por las reivindicaciones adjuntas, pueden resultar evidentes para los expertos en la materia.

REIVINDICACIONES

1. Procedimiento de análisis de una carga de alimentación que contiene hidrocarburos, comprendiendo el procedimiento:
- 5 (a) medición de un perfil de ebullición y al menos otra propiedad de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos con al menos dos técnicas externas al laboratorio diferentes en las que cada técnica externa al laboratorio se selecciona para que sea predictiva de cada propiedad respectiva, en la que la al menos una de las al menos dos técnicas externas al laboratorio son predictivas del perfil de ebullición y la al menos otra es predictiva de
- 10 al menos otra propiedad;
- (b) transmisión de las mediciones realizadas en la etapa (a) a un procesador capaz de reconstruir un ensayo determinativo de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos a partir de las mediciones; y,
- 15 (c) reconstrucción de un ensayo determinativo de la carga de alimentación que contiene hidrocarburos a partir de las mediciones en el que la otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: densidad, gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez, viscosidad, contenido de azufre, contenido de metales, contenido de nitrógeno y combinaciones de las mismas.
- 20 2. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la etapa (a) comprende la ejecución de al menos dos técnicas externas al laboratorio, en el que las al menos dos técnicas externas al laboratorio se seleccionan entre el grupo formado por: espectroscopia de absorbancia de ultravioleta visible (UV-Vis), espectroscopia de absorbancia de infrarrojos (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, espectroscopia de absorbancia de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia de infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF),
- 25 resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, microespectrometría de masas, microespectrometría de movilidad iónica y microcromatografía de gases (GC).
3. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la etapa (a) comprende además la correlación de los datos obtenidos a partir de las al menos dos técnicas externas al laboratorio con el perfil de ebullición y la al menos
- 30 otra propiedad.
4. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la etapa (a) comprende la medición del perfil de ebullición con al menos una de entre: espectroscopia de absorbancia de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia de infrarrojo cercano (NIR), resonancia magnética nuclear, microdestilación y microcromatografía de
- 35 gases (GC).
5. El procedimiento de la reivindicación 4, en el que la etapa (a) comprende además la correlación, con el perfil de ebullición de la muestra, de (I) espectros obtenidos a partir de la espectroscopia o bien de (II) datos obtenidos a partir de la microdestilación o microcromatografía de gases (GC).
- 40 6. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la al menos otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: densidad, gravedad específica, índice de acidez total, punto de fluidez, viscosidad y combinaciones de las mismas; y la etapa (a) comprende la medición de la otra propiedad llevando a cabo al menos una técnica seleccionada entre el grupo formado por: espectroscopia de absorbancia de ultravioleta visible (UV-Vis),
- 45 espectroscopia de absorbancia de infrarrojos (IR), espectroscopia de fluorescencia UV, espectroscopia de absorbancia de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia de infrarrojo cercano (NIR), espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF), resonancia magnética nuclear, microoscilación, microdestilación, microespectrometría de masas, microespectrometría de movilidad iónica y microcromatografía de gases (GC).
- 50 7. El procedimiento de la reivindicación 6, en el que la etapa (a) comprende además la correlación de datos obtenidos a partir de las al menos dos diferentes técnicas externas al laboratorio con la al menos otra propiedad.
8. El procedimiento de la reivindicación 6, en el que la técnica es al menos una de entre: espectroscopia de absorbancia de infrarrojo medio (MIR), espectroscopia de absorbancia de infrarrojo cercano (NIR) y resonancia magnética nuclear.
- 55 9. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la otra propiedad se selecciona entre el grupo formado por: contenido de azufre, contenido de metal y combinaciones de los mismos, y la etapa (a) comprende la

medición de la propiedad con espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF).

10. El procedimiento de la reivindicación 9, en el que la etapa (a) comprende además la correlación de datos obtenidos a partir de espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF) con la al menos otra propiedad.
- 5
11. El procedimiento de la reivindicación 9, en el que el metal se selecciona a partir del grupo formado por: níquel, vanadio, hierro y combinaciones de los mismos.
12. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que la al menos otra propiedad es el contenido de metal
- 10 y la etapa (a) comprende la medición de la al menos otra propiedad con espectroscopia de absorbanza de ultravioleta visible (UV-Vis).
13. El procedimiento de la reivindicación 12, en el que la etapa (a) comprende además la correlación de datos obtenidos a partir de espectroscopia de absorbanza de ultravioleta visible (UV-Vis) con el contenido de metal.
- 15
14. El procedimiento de la reivindicación 12, en el que el metal se selecciona entre el grupo formado por: níquel, vanadio, hierro y combinaciones de los mismos.
15. El procedimiento de la reivindicación 1, en el que el perfil de ebullición es el perfil de ebullición real.