

**PROPUESTA METODOLÓGICA PARA EL AJUSTE DE CURVAS DE
PROPIEDADES DE CRUDOS**

ANDREA PAOLA MARCIALES RAMÍREZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2010**

**PROPUESTA METODOLÓGICA PARA EL AJUSTE DE CURVAS DE
PROPIEDADES DE CRUDOS**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar el título de Ingeniero
Químico**

ANDREA PAOLA MARCIALES RAMÍREZ

Director

GIOVANNI MORALES MEDINA, Ph.D.

Co director

RAMIRO MARTINEZ REY, Ph.D.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2010**

AGRADECIMIENTOS

A LA UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER POR LA FORMACIÓN ACADÉMICA RECIBIDA DURANTE ESTOS ÚLTIMOS AÑOS.

AL Ph.D. GIOVANNI MORALES Y AL Ph.D. RAMIRO MARTINEZ POR SU COLABORACIÓN DURANTE LA ELABORACIÓN DEL PROYECTO

A MI FAMILIA Y AMIGOS POR EL APOYO INCONDICIONAL QUE ME HAN BRINDADO DURANTE LA REALIZACIÓN DE ESTE PROYECTO.

DEDICATORIA

A DIOS, POR CUIDAR DE MÍ SIEMPRE Y PERMITIRME LOGRAR ESTA META.

*A MI MADRE POR ENSEÑARME A TENER CARÁCTER Y PERSEVERANCIA
CUANDO SE LUCHA POR UN OBJETIVO.*

*A MI PADRE POR ENSEÑARME A SER CREATIVA Y RECORDARME QUE NO
DEBO DEJAR DE SOÑAR.*

*A MI NONITO CAMILO, POR ENSEÑARME A ESTUDIAR Y SEMBRAR EN MÍ EL
ESPÍRITU INVESTIGATIVO.*

*A JESÚS FABIAN POR TENERME PACIENCIA Y APOYARME EN LOS DÍAS
DIFÍCILES.*

*A MI PROFESORA JACKELINE QUE DESDE EL COLEGIO ME INSPIRÓ PARA
SER INGENIERA QUÍMICA.*

*A TODA MI FAMILIA POR DARME LA ESPERANZA DE QUE EL MAÑANA
SIEMPRE ESTARÁ MEJOR.*

*A MIS AMIGOS, LAURA SMITH, SONIA LUZ, LUZ ÁNGELA, LILIBETH,
CARLITOS Y EDUARD, QUE ME OFRECEN SIEMPRE SU AMISTAD SINCERA
Y DESINTERESADA.*

*“HE AQUÍ QUE EL TEMOR DEL SEÑOR ES LA SABIDURÍA, Y EL APARTARSE
DEL MAL, LA INTELIGENCIA”* **JOB 28:28**

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	12
1. GENERALIDADES	13
1.1 OBJETIVO GENERAL	13
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	13
1.3 ALCANCES.....	13
2. MARCO TEÓRICO	14
2.1 CARACTERIZACIÓN DE LOS CRUDOS DEL PETRÓLEO: ASSAY	14
2.2 CLASES DE ASSAY.....	14
2.2.1 Assay de inspección o “ <i>whole crude property measurement/inspection</i> ”	14
2.2.2 Assay de comprensión	14
2.2.3 Full Assay (Roussis 2008).....	15
2.3 CURVA DE DESTILACIÓN TBP- “ <i>TRUE BOILING POINT</i> ”, ASTM Y FRACCIONES DE CRUDOS	16
2.4 REGLAS DE MEZCLA Y PROPIEDADES DE LOS CRUDOS	17
2.5 PROCEDIMIENTOS PARA PREDECIR PROPIEDADES DE CRUDOS	17
2.5.1 Propuesta metodológica utilizando la ley de Kay	19
3. METODOLOGÍA EMPLEADA.....	21
3.1 PROCEDIMIENTO DE AJUSTE DE CURVA TBP	21
3.2 PROCEDIMIENTO AJUSTE DE LAS PROPIEDADES DE CRUDOS	24
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS	27
4.1 RESULTADOS PARA EL AJUSTE DE LAS CURVAS TBP	27
4.2 RESULTADOS PARA EL AJUSTE DE LAS PROPIEDADES DE LOS CRUDOS	28
4.3 PRESENTACIÓN GRÁFICA DE RESULTADOS: AJUSTE DE CURVAS TBP Y DE PROPIEDADES.....	33
4.4 RECORTE DE PROPIEDADES Y COMPARACIÓN DE RESULTADOS	39
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	43
BIBLIOGRAFÍA	44
ANEXOS	47
ANEXO A. FRACCIONES DEL CRUDO ANALIZADAS.....	47
ANEXO B. PROPIEDADES, NORMAS ASTM Y REGLAS DE MEZCLA.....	47
ANEXO C. LOS PSEUDOCOMPONENTES	54

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1. Unidad de destilación atmosférica.....	16
Figura 2. Procedimiento ajuste curva TBP	23
Figura 3. Procedimiento de ajuste de las propiedades de crudos	26
Figura 4. Curvas de rendimiento másico y volumétrico crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	33
Figura 5. Ajuste densidad vs TBP y vs % Vol. para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	34
Figura 6. Ppm Azufre vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent	35
Figura 7. <i>VBI</i> vs TBP y vs % peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	36
Figura 8. <i>FPBI</i> vs TBP y vs %Vol. para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	36
Figura 9. <i>Cloud Point</i> vs TBP y vs %Vol. crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	37
Figura 11. Ppm Ni vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent	38
Figura 12. Ppm V vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent	38
Figura 10. Porcentaje en peso Carbón Conradson vs TBP y vs %Peso para crudos Amna, Arabia Lt y Brent	38

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1. Propiedad, descripción y norma de las fracciones, clase e índice de mezcla de las fracciones de crudos.	20
Tabla 2. Numeración de cortes utilizados para cálculos iterativos	22
Tabla 3. Ajuste de curvas de rendimiento para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent	27
Tabla 4. Ajuste Densidad (Kg/L).....	28
Tabla 5. Ajuste ppm de Azufre	29
Tabla 6. Ajuste RON	29
Tabla 7. Ajuste VBI Refutas	30
Tabla 8. Ajuste Índice Presión de Vapor Reíd (RVPI)	30
Tabla 9. Ajuste Flash Point Blending Index.....	31
Tabla 10. Ajuste Carbón Conradson % w	31
Tabla 11. Ajuste Cloud Point (°R).....	32
Tabla 12. Ajuste ppm Níquel	32
Tabla 13. Ajuste ppm Vanadio	33
Tabla 14. Datos generados por Crude Manager para los porcentajes de rendimiento de las fracciones puras.....	40
Tabla 15. Resultados cálculo de recorte	41
Tabla 16. Datos generados por Crude Manager (C.M.) para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent.....	42
Tabla A 1. Fracciones de la destilación de crudos analizadas.	48
Tabla A 2. Normas ASTM para la Destilación de crudos	50
Tabla B 1. Continuación de la Tabla 1	51
Tabla D 1. Formato tabla de general de cálculo de Excel.....	56

RESUMEN

TÍTULO

PROPUESTA METODOLÓGICA PARA EL AJUSTE DE CURVAS DE PROPIEDADES DE CRUDOS*

AUTOR

Andrea Paola Marciales Ramírez**

PALABRAS CLAVES

Assay de crudos, curvas de propiedades, destilación, recorte.

DESCRIPCIÓN

Se presenta una propuesta metodológica para el ajuste de curvas de propiedades de crudos, la cual es ilustrada en tres crudos que tienen por nombre Amna, Arabia Lt y Brent.

Dicha metodología predice a través de procesos de interpolación y cálculo del valor de la integral media las propiedades de los petróleos crudos, tales como densidad, viscosidad, contenido de azufre, RON, RVP, Flash Point, Cloud Point, contenido de carbón Conradson, Níquel y Vanadio, y los rendimientos másicos y volumétricos de las fracciones de cada uno de ellos, que para este caso se encuentran definidas comercialmente como fuel gas, GLP, Nafta Ligera, Nafta Pesada, Keroseno, Diesel, Gas Oil, Fuel Oil, Residuo Atmosférico y Residuo de Vacío,

Para efecto de realización de los cálculos se partió de la información contenida anteriormente mencionada en los reportes de los datos (discontinuos) de los assays de crudos para cada una de las propiedades y porcentajes de rendimiento mencionados anteriormente, con el objetivo de lograr una representación continua de cada una de estas variables para temperaturas de operación de las unidades de destilación que no se encuentran especificadas y/o reportadas en los datos originales del assay.

Las propiedades y los porcentajes de rendimiento obtenidos a través de la metodología propuesta fueron comparados con los resultados generados por un software comercial existente en el mercado teniendo como resultado valores similares y aproximados a estos últimos, permitiendo validar la metodología.

* Tesis de pregrado

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química.
Director Ph.D. Giovanni Morales Medina. Codirector Ph.D. Ramiro Martínez Rey.

ABSTRACT

TITLE

PROPOSED METHODOLOGY FOR FITTING CRUDE OIL CURVES PROPERTIES*

AUTHOR

Andrea Paola Marciales Ramírez**

KEY WORDS

Crude oil assays, crude oil properties, distillation and cutting.

DESCRIPTION

A methodology for fitting crude oil curve properties that is proposed and illustrated in three crude oils which names are Amna, Arabia Lt and Brent crude oil.

The proposed methodology is able to predict, through interpolation and evaluation of medium integral, the properties for crude oil such as density (and API density), viscosity, sulphur content, RON, RVP, Flash Point, Cloud Point, Carbon Conradson, Nickel and Vanadium content and mass or volume yields percent for each fraction, which for this case are specially defined as Fuel Gas, LPG, Light Naphtha, Heavy Naphtha, Kerosene, Diesel, Gas Oil, Fuel Oil, Atmospheric Residue and Vacuum Residue

By means of calculus realization it was started from the information mentioned above that is contained in the reports of data (which is not continuous) of crude oil assays for each of the properties and yields percents with the objective of achieving a continuous representation for each of this variables in operation temperatures which are not reported and/or specified in the original assay data.

The properties and yields percents obtained through the proposed methodology where compared with the results generated by a trademark software, having as results similar and approximated values to these ones, allowing the methodology validation.

* Undergraduate thesis.

**Physicochemical Engineering Faculty. Chemical Engineering School.
Director Ph.D. Giovanni Morales Medina. Co director Ph.D. Ramiro Martínez Rey.

INTRODUCCIÓN

Los crudos generalmente son caracterizados a través de diferentes curvas de puntos de ebullición, en las cuales se representa la porción en masa o en volumen que estos pueden producir de cada uno de sus destilados. Estas curvas de puntos de ebullición o destilación, adicionalmente, presentan información de las propiedades para cada fracción de corte de tal manera que de los assays se obtienen las propiedades para los diferentes cortes y estas pueden ser correlacionadas utilizando la curva de destilación.

El siguiente trabajo propone una metodología para realizar el ajuste de curvas de propiedades de productos a partir de la curva de destilación del crudo; en los cuales, a través de técnicas de interpolación es posible predecir las propiedades para los pequeños cortes o pseudocomponentes que generalmente no se encuentran reportados en los datos experimentales contenidos en los assays.

Con esta metodología es posible predecir los rendimientos y propiedades obtenidas de los productos de las unidades de destilación (recorte de propiedades) a un nivel de planeación operativa. La metodología propuesta en este trabajo para el ajuste de propiedades y rendimientos es ilustrada en tres crudos: Amna, Brent y Arabia Lt. Los resultados de recorte son comparados con un software comercial.

1. GENERALIDADES

1.1 OBJETIVO GENERAL

Desarrollar una metodología matemática para el ajuste de curvas de propiedades discontinuas reportadas en los assays de crudos del petróleo.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Ajustar la curva de puntos de ebullición y las propiedades de los cortes utilizando trazadores cúbicos.
- Utilizar la ley de Kay para reproducir las propiedades fisicoquímicas experimentales.
- Validar las propiedades de recorte con las curvas ajustadas comparando con software comercial.

1.3 ALCANCES

Representar de forma continua las curvas de propiedades reportadas en los assays de crudos del petróleo y validar las propiedades de recorte con software comerciales.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 CARACTERIZACIÓN DE LOS CRUDOS DEL PETRÓLEO: ASSAY

El assay de un crudo del petróleo es la compilación de datos de laboratorio que define las propiedades de un crudo en específico (Springer 2006). Los resultados de las pruebas de los assays proveen datos e información detallada sobre análisis de los hidrocarburos para las refinerías, comercializadores de crudos y productores, ya que sirve para determinar si un alimento de crudo es compatible con alguna refinería en particular o si el crudo tendrá problemas de rendimiento, calidad, producción, medio ambiente y otros problemas.

2.2 CLASES DE ASSAY

Para obtener la información deseada, hay esquemas analíticos generales comúnmente usados (A.W. Drews. ASTM Manual 2008): Assay de inspección, assay de comprensión y assay completo o full assay.

2.2.1 Assay de inspección o “*whole crude property measurement/inspection*”

Usualmente implican la determinación de propiedades globales del crudo tales como la gravedad API, el contenido en azufre y el punto de vertido, principalmente para determinar cómo ha variado las características de un crudo en una corriente desde el último assay realizado. También constan de análisis adicionales para asegurarse de que las cargas recibidas son como se esperaban; para cuantificar la cantidad de impurezas tales como sales, sedimentos y agua; y para proveer otra información específica de la refinería de manera rutinaria.

2.2.2 Assay de comprensión

Requiere que el crudo sea destilado en fracciones y estas a su vez son caracterizados por análisis apropiados dependiendo de la fracción. Esto es

necesario ya que las refinerías pueden evaluar la cantidad y calidad de productos recuperables para un crudo dado y determinar si el producto económicamente satisface los requerimientos del mercado de una refinería en particular, destilación, los cuales pueden variar desde 4 hasta 24, que generalmente corresponden a gas, nafta ligera, nafta pesada, keroseno, fuel oil, gas oil, y residuo atmosférico.

Como mínimo, este análisis determina la gravedad API y el contenido de azufre. Un assay de inspección más detallado podría consistir en pruebas de gravedad API (densidad o densidad relativa), contenido total de azufre, punto de vertido, viscosidad, contenido de sal, contenido de agua y sedimentos, así como también pruebas de trazas de metales u halógenos orgánicos que pueden ser críticos para sus operaciones. Debido a esto, se hace necesario hacer una correlación entre las curvas de propiedades y las temperaturas de destilación con el objetivo de evaluar los productos a temperaturas de operación que representen las unidades de destilación, ya que de otra manera es necesario llevar a cabo un assay con los cortes necesarios producidos en la refinería. También se caracteriza por ser complejo, costoso y consumidor de tiempo y es normalmente evaluado solo cuando el crudo de un nuevo campo viene hacia una corriente de refinación, o cuando el assay de inspección indica que han ocurrido cambios significativos en la composición de la corriente.

2.2.3 Full Assay (Roussis 2008)

Se lleva a cabo con la combinación de la destilación atmosférica y de vacío, generando una TBP (True Boiling Point Curve), tomando entre 3 a 5 días, permiten la colección de fracciones de destilación que pueden ser utilizados para pruebas. Mientras cada una de estas técnicas de destilación ha sido estandarizada por las normas ASTM. Los esquemas de los cortes tienen a imitar la clasificación de los productos de refinería y no hay estandarización de los formatos de inspección. Cada corporación tiende a llevar a cabo ambos: pruebas físicas y químicas que mejor reúnan las condiciones de operación y producción.

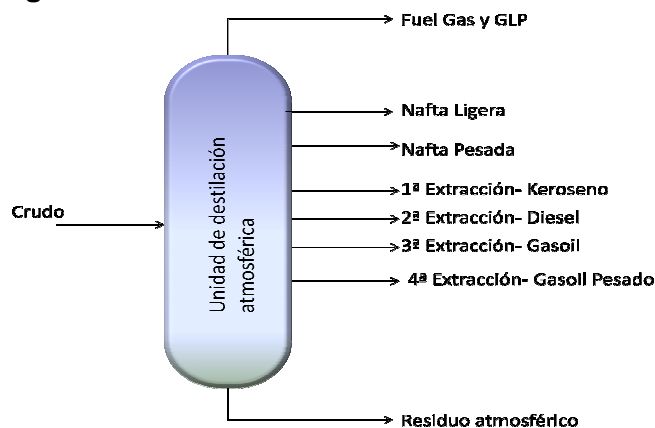
2.3 CURVA DE DESTILACIÓN TBP- “TRUE BOILING POINT”, ASTM Y FRACCIONES DE CRUDOS

Una de las curvas de destilación más ampliamente utilizada es la curva de destilación TBP (o Punto de ebullición verdadero) la cual define la volatilidad característica de las fracciones de los crudos...Figura 1 ... y otras mezclas complejas (American Petroleum Institute 1997). Inicialmente se constituyó como una prueba de destilación batch o por lotes (Springer 2006), llevada a cabo en columnas con 15 a 100 platos teóricos. Actualmente esta curva es producida por técnicas de espectrometría de masas mucho más rápidas y precisas que aquellas producidas por la destilación batch.

Otro tipo de curvas son las denominadas ASTM (Springer 2006), las cuales son usadas como una rutina base para el control de calidad de las plantas. La prueba es llevada a cabo en fracciones de crudo usando un aparato simple diseñado para hervir la muestra líquida y condensar los vapores que esta produce. Las temperaturas son anotadas como el procedimiento de la destilación y son graficadas versus el destilado recuperado. Debido a que se usa el equilibrio en las etapas de destilación y no hay reflujo, la separación de componentes es pobre.

El crudo del petróleo (LLuch Urpí 2008) puede ser fraccionado en la torre de destilación atmosférica en ocho productos, denominados fracciones de crudos, los cuales se identifican en la Figura 1.

Figura 1. Unidad de destilación atmosférica



Fuente: (LLuch Urpí 2008)

2.4 REGLAS DE MEZCLA Y PROPIEDADES DE LOS CRUDOS

Las reglas de mezcla determinan la forma matemática de las ecuaciones utilizadas en la regla de Kay para la predicción de las propiedades resultantes de una mezcla de crudos, definida por W.B. Kay (M.R. Riazi 2006) como:

$$\theta_m = \sum_{i=1}^N y_i \theta_i \quad \text{Ecn. 1}$$

Donde y_i es la fracción del componente i en la mezcla, θ_i es la propiedad del componente puro i y θ_m es la propiedad de la mezcla con N componentes.

Esta regla se aplica directamente para propiedades aditivas linealmente, ya que para propiedades no lineales (e.g la densidad, la viscosidad), es necesario calcular índices de mezcla y luego aplicar la regla de mezcla sencilla y simple sugerida por Riazi, o la específica para según la propiedad. Son aditivas en peso o volumen todas aquellas características medidas en unidades de masa o de volumen como densidad, azufre, contenido en metales, curva TBP, etc. Otras propiedades como viscosidad, características de frío (punto de niebla, cristalización y congelación), presión de vapor, punto de inflamación, etc., se transforman en índices de mezcla lineales para el cálculo de su mezcla (LLuch Urpí 2008). La presenta una descripción de las propiedades medidas a los productos del petróleo junto con la regla de mezcla utilizada (para ampliar la información ver anexos Tabla A 1).

2.5 PROCEDIMIENTOS PARA PREDECIR PROPIEDADES DE CRUDOS

Las propiedades de los crudos reportadas por los assays se encuentran dadas para puntos discretos de las temperaturas de ebullición; y dado que para cálculos ingenieriles es necesario determinar propiedades de interés para puntos diferentes a los reportados, han surgido diferentes metodologías para la predicción de dichas propiedades.

Gaylor y Jones (Gaylor y Jones 1968) desarrollaron un método para la determinación rápida y comprensiva de las propiedades de los crudos que recae sobre seis medidas hechas en todo el crudo tales como gravedad, azufre, nitrógeno, pentanos insolubles, aromáticos condensados y cromatografía de gases, y usando ecuaciones de regresión múltiple, fue posible correlacionar estas 6 propiedades a otras tales como: gravedad de todas las fracciones, el punto de humo el punto de congelamiento del keroseno, contenido parafínico y el índice de viscosidad de aceites lubricantes. En 1997, Robert E. Maples (Maples 1997) propuso ajustar el porcentaje de volumen destilado en función de la temperatura de ebullición (TBP) a un polinomio de tercer orden calculado mediante regresión lineal, y así mismo, correlacionar el porcentaje medio de volumen destilado (como variable independiente) y las propiedades de los cortes o mezclas (la variable dependiente) por medio de regresión lineal simple para determinar las propiedades y rendimientos de cualquier fracción del crudo. Los datos utilizados en el ajuste son los correspondientes a un assay de comprensión. Esta metodología tiene la desventaja de presentar resultados poco satisfactorios cuando los datos de partida eran muy pocos para efectuar dicha regresión. Otra propuesta para modelos de unidades de destilación de refinerías es la utilización de los cortes swing (Hartmann 2002), en la cual, se parte de los datos reportados del assay de las fracciones estándar para calcular los rendimientos o propiedades en otros puntos de corte a través de la interpolación lineal de las propiedades o rendimientos en el punto medio de la temperatura de ebullición de las fracciones originales a otros puntos de temperaturas de interés que se encuentran en el intermedio de las dichas fracciones. Se ha demostrado que esta interpolación puede ser igualmente útil con funciones lineales o no lineales del punto de ebullición, pero presenta la desventaja de no poder utilizar este concepto para calcular la distribución de los residuos, debido a que la extensión de este en el crudo hace que el punto medio de ebullición tenga poca importancia, razón por la cual para estas fracciones se proponen funciones de arquetipo que se ajustan a los rendimientos del crudo y a las propiedades de los residuos teniendo como parámetro la temperatura a la cual vaporiza el 50% del crudo y la pendiente en este punto.

Adicionalmente, en el 2007 se propuso un nuevo método de caracterización (Peter Behrenbruch 2007) basado en la forma de las curvas TBP mediante la utilización de la distribución de la función gamma¹. El método se basa en el ajuste de los parámetros α y β usando la función DISTR.GAMMA en MS Excel. La calidad del método se evalúa usando los coeficientes del mínimo cuadrado (R^2). Las curvas ajustadas mediante este método mostraron un acuerdo visual con los datos experimentales y valores de $R^2 = 0.99$ o mejor en todos los casos. Mediante este método también es posible ajustar la gravedad API, el %peso de azufre y el Pour Point (°C) de los crudos.

Para efectos de programación no lineal (I. Alhajri and A.Elkamel 2008), se propuso calcular el porcentaje de volumen vaporizado de cada una de las fracciones del crudo como una función polinómica de las temperaturas de corte. De la misma forma, se planteó expresar las propiedades de los destilados (e.g °API, contenido de azufre), como función polinómica del porcentaje del volumen medio vaporizado, el cual es calculado a partir del promedio del porcentaje de volumen destilado de la fracción de interés y la fracción inmediatamente anterior calculada a partir de la función polinómica establecida inicialmente.

2.5.1 Propuesta metodológica utilizando la ley de Kay

La ecuación de Kay puede ser ligeramente transformada para efectos de la utilización de la metodología de pseudocomponentes; dando como resultado una ecuación de Kay en términos conocidos por el cálculo integral como la sumatoria de Riemann (Purcell 2007):

$$\theta_m = \sum_{i=1}^n \theta_i(\bar{y}_i) * \Delta y_i \quad \text{Ecn. 2}$$

Donde θ_m es la propiedad de la mezcla, $\theta_i(\bar{y}_i)$ es la propiedad del intervalo de temperatura en función del punto representativo de la variable independiente y Δy_i es el intervalo del que hace parte el punto representativo \bar{y}_i .

¹ La función de la probabilidad de la función gamma se describe usando la siguiente ecuación: $p(x) = \frac{x^{\alpha-1} e^{-x/\beta}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)}$ donde x es variable ($0 \leq x < \infty$), α es parámetro de forma ($\alpha > 0$) y β es parámetro de escala ($\beta > 0$). La función gamma con parámetro α está dada por $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty e^{-u} u^{\alpha-1} du$

Tabla 1. Propiedad, descripción y norma de las fracciones, clase e índice de mezcla de las fracciones de crudos.

PROPIEDAD	DESCRIPCION	NORMA	CLASE DE MEZCLA	INDICE DE MEZCLA
Densidad	-Es una magnitud física que cuantifica la masa de producto contenida en una unidad de volumen, siendo de suma importancia para motores de que tienen sistemas de inyección, ya que la masa de combustible inyectada a la cámara de combustión sí depende de la densidad, con lo que pueden producirse variaciones de la relación aire/combustible, teniendo por tanto, que regularse en los motores.	- Se determina mediante la norma ASTM D 1657. - Si se tiene la composición cromatográfica puede calcularse mediante la norma ASTM D 2598.	Volumétrica	-----
Porcentaje en peso de azufre	- Expresado normalmente en partes por millón en peso, es indicativo de la posibilidad de formación de óxidos de azufre durante la combustión y a partir de los mismos, de ácido sulfúrico que ataca los elementos con los que entra en contacto.	- El azufre total se mide mediante la norma ASTM D 2784. - También se puede medir mediante la norma ASTM D 2622 en las gasolinas.	Másica	-----
Viscosidad	-Se trata de una magnitud física que proporciona una indicación de la resistencia del producto a fluir, siendo una magnitud de importancia en los sistemas de inyección de los motores que producen la atomización del combustible para que forme una mezcla homogénea con el aire en la cámara de combustión.	- La viscosidad cinemática puede calcularse a través de la norma ASTM D 445.	Másica	(VBI) de Refutas: $VBI = 10.975 + 14.535 \ln(\ln(vis\ cSt + 0.8))$ <i>vis cSt</i> Viscosidad en cSt

Fuentes: (Handwerk 1994) (HPI Consultants, INC s.f.) (ASTM 2007) (American Petroleum Institute 1997)

Esta sumatoria de Riemann puede expresarse de forma integral cuando el tamaño del intervalo es muy pequeño ($\Delta y_i \rightarrow 0$), por tal razón, esta Ley de Kay puede re escribirse como una integral definida de la siguiente manera:

$$\int_i^{i+1} \theta_i(\bar{y}_i) dy = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n \theta_i(\bar{y}_i) * \Delta y_i \quad \text{Ecn. 3}$$

Este trabajo propone una metodología que reúne los conceptos básicos de las propuestas de los trabajos anteriores, ya que utiliza la interpolación de datos de los cortes en los intervalos experimentales reportados en los assays... Anexo C..., y calcula los valores medios de la integral. Con esto se logra una representación continua de las propiedades de los crudos con lo cual es posible predecir datos en intervalos de temperatura diferentes a los reportados en los assays. En el siguiente capítulo se profundiza la metodología propuesta.

3. METODOLOGÍA EMPLEADA

3.1 PROCEDIMIENTO DE AJUSTE DE CURVA TBP

Para el ajuste de las curvas TBP, se partió de los datos reportados de los assays en la literatura (LLuch Urpí 2008). Inicialmente se modificaron los datos del assay a través del cálculo de rendimientos de componentes ligeros a sustancias puras, ya que la composición de ligeros reportada en los datos iniciales consistían en fuel gas, propano y butano y fue cambiada a metano, etano, propano, i-butano, n-butano, i-pentano y n-pentano según Riazi (Riazi 2005) en % vol. y %peso; este último usando la densidad de cada una de ellas. Luego de esto se procedió con el procedimiento iterativo, que está sintetizado en el diagrama de flujo de la Figura 2. Seguidamente, junto con la regla de Kay modificada (Ecn. 3) se realiza el cálculo de la integral para cada intervalo, es decir, cada $0.01 y_i$, expresado como: $\int_{y_i}^{y_i+1} \theta_i(y_i) * dy_i$ El paso siguiente consiste en el cálculo del Valor Ajustado de la Propiedad (V.A,P) para cada corte o fracción:

$$V.A.P. = \frac{\int_{y_i}^{y_{i+1}} \theta_i(y_i) * dy_i}{y_{i+1} - y_i} \quad \text{Ecn.6}$$

De manera análoga con el ajuste TBP, se debe calcular la Diferencia Porcentual para el Cálculo de Propiedades (D.P.C.P) para cada corte o fracción con la finalidad de evaluar la efectividad del método:

$$D.P.C.P. = 100 * \left| \frac{\theta_i(y_i) - V.A.P.}{\theta_i(y_i)} \right| \quad \text{Ecn. 7}$$

En el primer paso, se define la función de rendimiento del assay $y_1 = f_1(TBP)$ de la curva TBP siendo TBP_i los valores de las temperaturas en °C de cada corte en los datos del assay recién definido.

Seguidamente, se define una función de rendimiento $y_2 = f_2(TBP)$ a partir de la interpolación de los valores de $y_1(TBP)$ para mini cortes en Matlab utilizando el comando *cftool*, teniendo como tamaño de intervalo 0.01°C, desde el punto inicial del assay (-161.5°C) hasta el punto final (FBP =1200°C). Luego, se realiza el cálculo de la integral para cada mini corte, es decir, cada 0.01°C, expresado como $\int f_2(TBP) dTBP$.

A continuación se calcula el valor ajustado mediante la interpolación...V.A.

$$V.A. = \frac{\int_i^{i+1} y_2(TBP) * dTBP}{TBP_{i+1} - TBP_i} \quad \text{Ecn. 8}$$

El cual está definido como la integral para cada fracción del corte...

Tabla 2.. sobre los intervalos de temperatura de cada uno de ellos.

Tabla 2. Numeración de cortes utilizados para cálculos iterativos

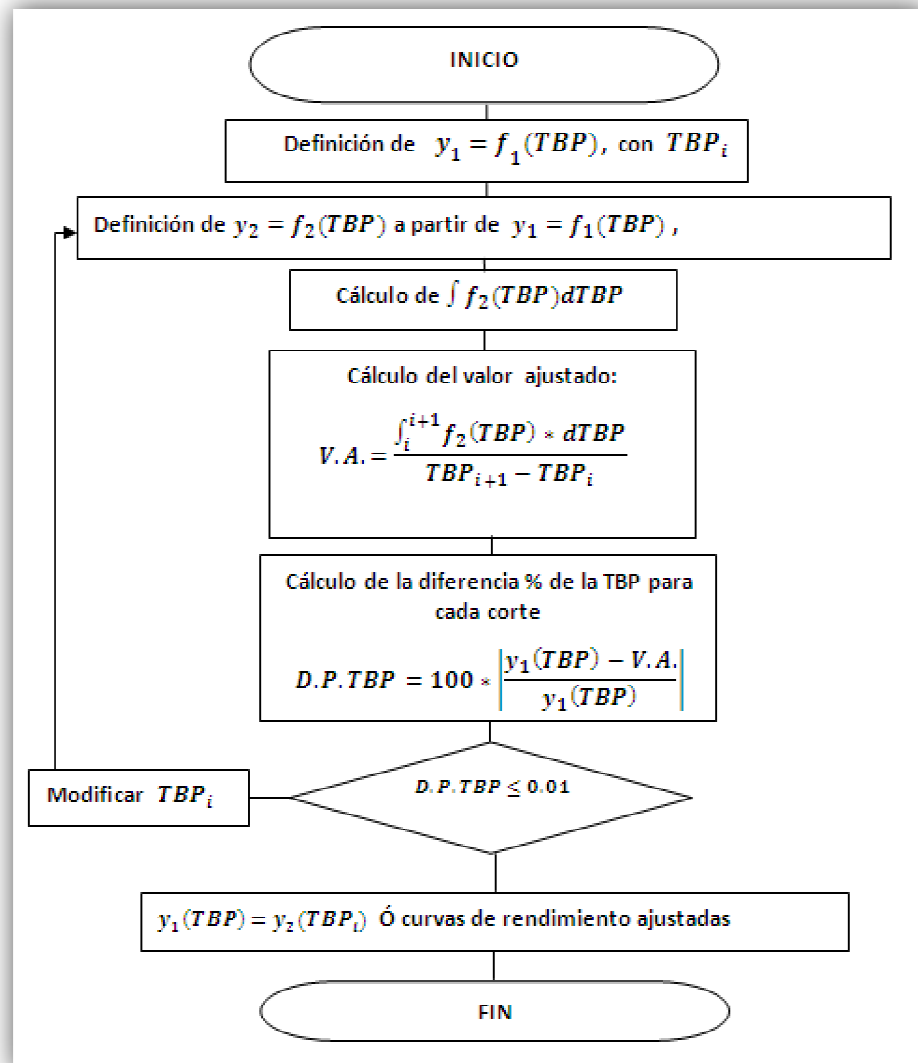
Número de cortes <i>i</i>	Nombre del corte
1	Nafta Ligera
2	Nafta Pesada
3	1ª Extracción
4	2ª Extracción
5	3ª Extracción
6	4ª Extracción
7	Residuo atmosférico
8	Residuo de vacío

En seguida se calcula la diferencia porcentual de la TBP, la cual evalúa la diferencia existente entre la función assay definida inicialmente y la del valor calculado para cada corte obtenida a través de la interpolación

$$D.P.TBP = 100 * \left| \frac{y_1(TBP) - V.A.}{y_1(TBP)} \right| \quad Ecn. 9$$

En consecuencia, el siguiente paso tiene en cuenta el criterio de la diferencia porcentual relativa, ya que si esta es mayor a 0.01, los valores originales de la TBP para $f_1(TBP)$ deben modificarse y así efectuar el procedimiento iterativo a partir del primer paso hasta que la D.P.TBP sea igual o menor a 0.01.

Figura 2. Procedimiento ajuste curva TBP



3.2 PROCEDIMIENTO AJUSTE DE LAS PROPIEDADES DE CRUDOS

Los pasos que deben llevarse a cabo para aplicar la metodología se encuentran especificados en el diagrama de flujo de la Figura 3. El punto de partida del procedimiento comienza con $y_1(TBP)$ ya determinada en el procedimiento anterior de ajuste de la curva TBP, con los valores de las temperaturas de corte interpolados cada 0.01°C . El siguiente paso es definir la propiedad a ajustar como una función de los valores TBP, es decir, $\theta_i = f(TBP_i)$ donde i representa cada corte de acuerdo con la Tabla 2. Luego, es necesario determinar el valor de cada porcentaje de rendimiento y_i para cada corte TBP_i , ya que cada valor y_i será utilizado para definir una nueva función, es decir, cada propiedad se expresará teniendo como variable independiente el porcentaje de rendimiento, o sea, $\theta_i = f(y_i)$.

Posteriormente el procedimiento sugiere que se calcule la propiedad para el punto final de ebullición ($FBP=1200^\circ\text{C}$), a partir de la pendiente de los dos últimos datos para los cortes que se tengan de esa propiedad es decir, $\theta_n = f(TBP_n)$ y $\theta_{n-1} = f(TBP_{n-1})$.

Seguidamente, se interpolan los valores de θ_i con tamaños de intervalos de $0.01y_i$, utilizando la herramienta *cftool* de Matlab, desde $i = \text{nafta ligera}$ hasta el valor correspondiente al 100% de rendimiento. Luego, junto con la regla de Kay modificada (Ecn. 3) se realiza el cálculo de la integral para cada intervalo, es decir, cada $0.01y_i$, expresado como

$$\int_{y_i}^{y_i+1} \theta_i(y_i) * dy_i.$$

El paso siguiente consiste en el cálculo del Valor Ajustado de la Propiedad (V.A.P.), para cada corte o fracción ...Tabla2...partiendo de la Ecn.3

$$V.A.P. = \frac{\int_{y_i}^{y_i+1} \theta_i(y_i) * dy_i}{y_{i+1} - y_i} \quad \text{Ecn. 10}$$

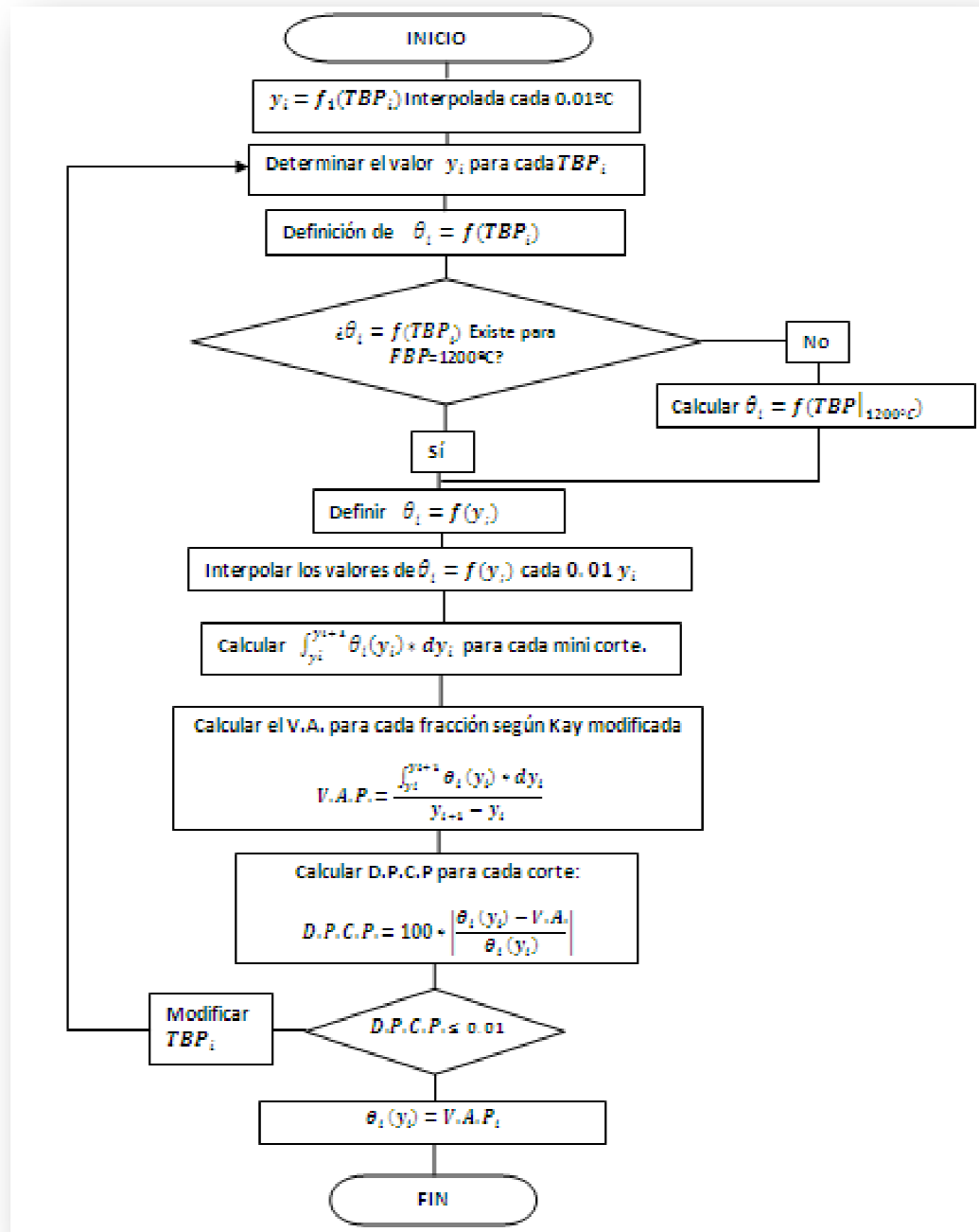
De manera análoga con el ajuste TBP, se debe calcular la Diferencia Porcentual para el Cálculo de Propiedades (D.P.C.P.) para cada corte o fracción con la finalidad de evaluar la efectividad del método:

$$D.P.C.P. = 100 * \left| \frac{\theta_i(y_i) - V.A.P.}{\theta_i(y_i)} \right| \quad Ecn. 11$$

En consecuencia, el siguiente paso tiene en cuenta el criterio de la diferencia porcentual, ya que si esta es mayor a 0.01, los valores originales de la TBP_i deben modificarse, lo que posteriormente modifica $y_i = f_1(TBP_i)$, $\theta_i = f(TBP_i)$ $\theta_i = f(y_i)$, hasta que la D.P.C.P. sea igual o menor a 0.01.

Para el desarrollo de este procedimiento se utilizaron conjuntamente los programas de Excel y Matlab. En la Tabla D 1 de los anexos se presenta el formato de tabulación de los datos en Excel para cada iteración.

Figura 3. Procedimiento de ajuste de las propiedades de crudos



4.RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

4.1 RESULTADOS PARA EL AJUSTE DE LAS CURVAS TBP

En la Tabla 3 se presentan los datos de porcentajes de rendimiento de los crudos Amna, Arabia Lt y Brent, que fueron obtenidos según el procedimiento anterior.

Tabla 3. Ajuste de curvas de rendimiento para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent

	TBP °C	CRUDO AMNA		CRUDO ARABIA LT		CRUDO BRENT	
		% Peso acum.	% Vol. Acum.	% Peso acum.	% Vol. Acum.	% Peso acum.	% Vol. Acum.
PTO INICIAL	-161.5	0	0	0	0	0	0
CH4	-161.5	0.020	0.10	0.02	0.09	0.04	0.20
	-88.7299	0.020	0.10	0.02	0.09	0.04	0.20
C2H6	-88.73	0.10	0.30	0.09	0.27	0.22	0.60
	-42.1899	0.10	0.30	0.09	0.27	0.22	0.60
Propano	-42.19	0.22	0.50	0.19	0.44	0.46	1.00
	-11.6599	0.22	0.50	0.19	0.44	0.46	1.00
iButano	-11.66	0.48	0.89	0.43	0.80	1.01	1.79
	-0.386299	0.48	0.89	0.43	0.80	1.01	1.79
nButano	-0.3863	0.76	1.29	0.67	1.15	1.58	2.59
	27.8399	0.76	1.29	0.67	1.15	1.58	2.59
iPentano	27.84	0.98	1.58	0.86	1.42	2.04	3.18
	36.299	0.98	1.58	0.86	1.42	2.04	3.18
nPentano	36.23	1.27	1.98	1.12	1.77	2.65	3.98
	76.99	1.27	1.98	1.12	1.77	2.65	3.98
Nafta Ligera	77	6.25	8.23	5.95	8.09	9.35	9.94
Nafta Pesada	160	18.36	22.01	17.18	21.19	23.69	22.38
1ª Extracción	240	28.10	32.41	31.97	37.37	37.91	37.80
2ª Extracción	300	39.29	43.88	41.06	46.79	49.80	46.86
3ª Extracción	360	50.43	55.07	52.47	58.19	60.79	58.28
4ª Extracción	370	51.86	56.49	54.29	60.1	62.29	60.02
Residuo atmosférico	538	77.19	79.86	77.92	81.25	86.42	81.22
Residuo de vacío	1200	100	100	100	100	100	100

4.2 RESULTADOS PARA EL AJUSTE DE LAS PROPIEDADES DE LOS CRUDOS

A continuación se presentan los resultados de los mejores ajustes logrados para cada una de las propiedades. Para cada uno se presenta el número de la mejor iteración, el rango del corte TBP, el nombre de dicha fracción, el valor logrado para la propiedad en cada crudo y la diferencia del valor logrado con el valor experimental.

Tabla 4. Ajuste Densidad (Kg/L)

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	19	2	16
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	56.25	57.6	55.3
	Vir. Propiedad	0.6705	0.6624	0.6775
	Diferencia %	5.51E-05	1.65E-03	1.01E-04
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	116.41	119.5	114.8
	Vir. Propiedad	0.7392	0.7378	0.7752
	Diferencia %	9.84E-05	5.03E-05	1.33E-04
1ª EXTRACCIÓN, TBP (160-240°C)	Vir. TBP °C	200.99	201	202.1
	Vir. Propiedad	0.7879	0.7917	0.802
	Diferencia %	4.40E-05	3.07E-05	4.08E-05
2ª EXTRACCIÓN, TBP (240-300°C)	Vir. TBP °C	269.5	271	268
	Vir. Propiedad	0.8207	0.8339	0.8388
	Diferencia %	1.05E-04	7.59E-04	1.08E-04
3ª EXTRACCIÓN, TBP (300 -360°C)	Vir. TBP °C	327.05	331	331.82
	Vir. Propiedad	0.8369	0.8662	0.8631
	Diferencia %	1.12E-04	2.00E-04	2.08E-05
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.67	366	361
	Vir. Propiedad	0.8472	0.892	0.8775
	Diferencia %	1.42E-04	6.14E-04	8.05E-05
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	425	455	430
	Vir. Propiedad	0.9131	0.9514	0.9322
	Diferencia %	1.03E-03	1.58E-02	6.00E-05
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	750	870	870
	Vir. Propiedad	0.9549	1.0134	1.0037
	Diferencia %	1.71E-03	6.35E-03	2.01E-02

Tabla 5. Ajuste ppm de Azufre

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
		Número de iteración	26	34
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	73.01	72.1	56.615
	Vir. Propiedad	10	350.04	10
	Diferencia %	9.64E-05	1.06E-04	1.78E-16
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	131.9	126.51	159.1
	Vir. Propiedad	80.17	419.94	10
	Diferencia %	2.17E-03	1.46E-04	3.49E-05
1ª EXTRACCIÓN, TBP (160-240°C)	Vir. TBP °C	196.71	216.69	205
	Vir. Propiedad	620.06	1369.87	160.04
	Diferencia %	1.01E-04	9.80E-05	2.62E-04
2ª EXTRACCIÓN, TBP (240-300°C)	Vir. TBP °C	272.1	268.41	277.08
	Vir. Propiedad	1060.01	9379.33	1020.58
	Diferencia %	6.74E-06	7.20E-05	5.69E-04
3ª EXTRACCIÓN, TBP (300 -360°C)	Vir. TBP °C	326.5	328.58	322.93
	Vir. Propiedad	1479.81	17509.47	3659.54
	Diferencia %	1.27E-04	5.41E-04	1.27E-04
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	365.2	364.8	365.09
	Vir. Propiedad	1669.93	21533.52	4549.4
	Diferencia %	4.19E-05	1.56E-03	1.32E-04
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	429.4	428	436.19
	Vir. Propiedad	2873.52	34479.52	8311.14
	Diferencia %	4.73E-03	1.11E-02	1.37E-04
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	780	570	859
	Vir. Propiedad	3790.79	42434.13	12262.89
	Diferencia %	1.28E-02	1.38E-04	2.37E-02

Tabla 6. Ajuste RON

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
		Número de iteración	26	14
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	72.14	59.48	57.49
	Vir. Propiedad	65	63	69.4
	Diferencia %	2.26E-05	4.23E-05	3.88E-05
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	141.15	118.96	119.5
	Vir. Propiedad	39.8	42.5	55.1
	Diferencia %	3.25E-06	8.69E-05	9.01E-05

Tabla 7. Ajuste VBI Refutas

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	11	32	24
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	58.61	59.07	58.01
	Vir. Propiedad	-10.53	-10.44	-15.07
	Diferencia %	5.69E-04	4.23E-04	2.55E-06
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	119.94	120.27	119.54
	Vir. Propiedad	-3.79	-3.58	-6.82
	Diferencia %	2.90E-04	7.90E-04	5.50E-05
1ª EXTRACCIÓN, TBP (160-240°C)	Vir. TBP °C	200.8	200.15	200.12
	Vir. Propiedad	5.1	5.44	4.04
	Diferencia %	6.53E-04	6.22E-04	3.03E-05
2ª EXTRACCIÓN, TBP (240-300°C)	Vir. TBP °C	270.74	269.81	268.88
	Vir. Propiedad	12.55	12.77	12.6
	Diferencia %	7.00E-04	6.60E-05	8.90E-05
3ª EXTRACCIÓN, TBP (300 -360°C)	Vir. TBP °C	327.8	330.45	330.65
	Vir. Propiedad	18.62	18.41	18.71
	Diferencia %	1.70E-03	7.40E-04	1.70E-05
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	365.15	365.2	364.92
	Vir. Propiedad	21.59	22.3	23.11
	Diferencia %	3.00E-04	3.20E-04	4.30E-06
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	424	428.4	438.9
	Vir. Propiedad	35.92	37.1	35.08
	Diferencia %	4.75E-03	6.80E-04	2.55E-04
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	700	546.48	574
	Vir. Propiedad	43.62	45.14	44.63
	Diferencia %	3.76E-03	6.55E-06	1.48E-04

Tabla 8. Ajuste Índice Presión de Vapor Reíd (RVPI)

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	25	16	19
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	58.48	58.88	57.33
	Vir. Propiedad	0.56	0.59	0.58
	Diferencia %	3.53E-05	2.39E-06	3.50E-07
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	119.18	119.4	119.38
	Vir. Propiedad	0.03	0.02	0.02
	Diferencia %	6.38E-05	1.03E-04	7.32E-06

Tabla 9. Ajuste Flash Point Blending Index

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	25	26	20
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	58.42	58.87	57.36
	Vir. Propiedad	422.45	696.17	622.91
	Diferencia %	6.00E-05	6.27E-05	1.26E-04
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	119.45	119.88	119.9
	Vir. Propiedad	290.98	475.12	425.95
	Diferencia %	7.38E-05	8.53E-05	1.20E-04
1ª EXTRACCIÓN, TBP (160-240°C)	Vir. TBP °C	200.99	199.81	199.81
	Vir. Propiedad	117.79	183.83	166.36
	Diferencia %	1.39E-04	4.34E-05	1.01E-04
2ª EXTRACCIÓN, TBP (240-300°C)	Vir. TBP °C	260.88	259.81	260.55
	Vir. Propiedad	16.16	16.24	16.42
	Diferencia %	1.45E-04	2.14E-04	4.80E-04
3ª EXTRACCIÓN, TBP (300 -360°C)	Vir. TBP °C	326.54	326.46	326.27
	Vir. Propiedad	4.11	3.99	4.11
	Diferencia %	3.83E-05	7.54E-04	1.06E-04
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.87	364.9	364.81
	Vir. Propiedad	1.87	1.84	1.84
	Diferencia %	1.55E-03	1.38E-02	1.31E-02

Tabla 10. Ajuste Carbón Conradson % w

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	39	23	20
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.47	364.86	364.8
	Vir. Propiedad	2.62	4.25	1.93
	Diferencia %	4.71E-03	8.53E-05	5.40E-04
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	448.2	442.7	446.7
	Vir. Propiedad	6.49	10.13	5.06
	Diferencia %	1.44E-02	2.92E-06	4.72E-04
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	733	717.47	766
	Vir. Propiedad	13.58	20.42	13.7
	Diferencia %	1.25E-03	1.03E-03	3.76E-05

Tabla 11. Ajuste Cloud Point (°R)

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
		Número de iteración	14	18
NAFTA LIGERA, TBP (36-77 °C)	Vir. TBP °C	58.36	58.8	56.5
	Vir. Propiedad	303.03	266.31	604.79
	Diferencia %	5.90E-04	1.97E-05	6.52E-04
NAFTA PESADA, TBP (77-160 °C)	Vir. TBP °C	119.22	119.4	119.21
	Vir. Propiedad	349.74	323.78	665.93
	Diferencia %	1.01E-04	6.79E-05	3.67E-05
1ª EXTRACCIÓN, TBP (160-240°C)	Vir. TBP °C	200.6	199.4	200.1
	Vir. Propiedad	411.57	399.54	746.87
	Diferencia %	5.61E-06	6.95E-05	5.64E-05
2ª EXTRACCIÓN, TBP (240-300°C)	Vir. TBP °C	271.2	268.88	269
	Vir. Propiedad	466.71	455.66	811.1
	Diferencia %	1.30E-04	2.20E-05	8.20E-05
3ª EXTRACCIÓN, TBP (300 -360°C)	Vir. TBP °C	328	331	331.07
	Vir. Propiedad	517.02	489.6	857.96
	Diferencia %	6.66E-05	1.83E-04	1.96E-04
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.69	364.9	361.7
	Vir. Propiedad	543.31	512.7	885.6
	Diferencia %	3.00E-05	2.84E-04	9.88E-05
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	455.59	452.3	453.05
	Vir. Propiedad	607.38	573.47	956.37
	Diferencia %	2.48E-04	6.39E-05	1.22E-04
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	756	735.1	755.9
	Vir. Propiedad	905.029	857.648	1287.145
	Diferencia %	1.99E-04	9.48E-05	2.47E-04

Tabla 12. Ajuste ppm Níquel

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
		Número de iteración	10	7
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.81	364.81	364.91
	Vir. Propiedad	4.15	3.2	1.06
	Diferencia %	4.80E-05	2.27E-04	7.24E-05
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 -538°C)	Vir. TBP °C	445.86	442.7	447.28
	Vir. Propiedad	10.2	7.6	2.82
	Diferencia %	9.29E-06	2.36E-04	5.97E-05
RESIDUO DE VACÍO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	728.99	712.94	770.67
	Vir. Propiedad	21.01	15	8
	Diferencia %	3.76E-04	6.04E-06	3.68E-06

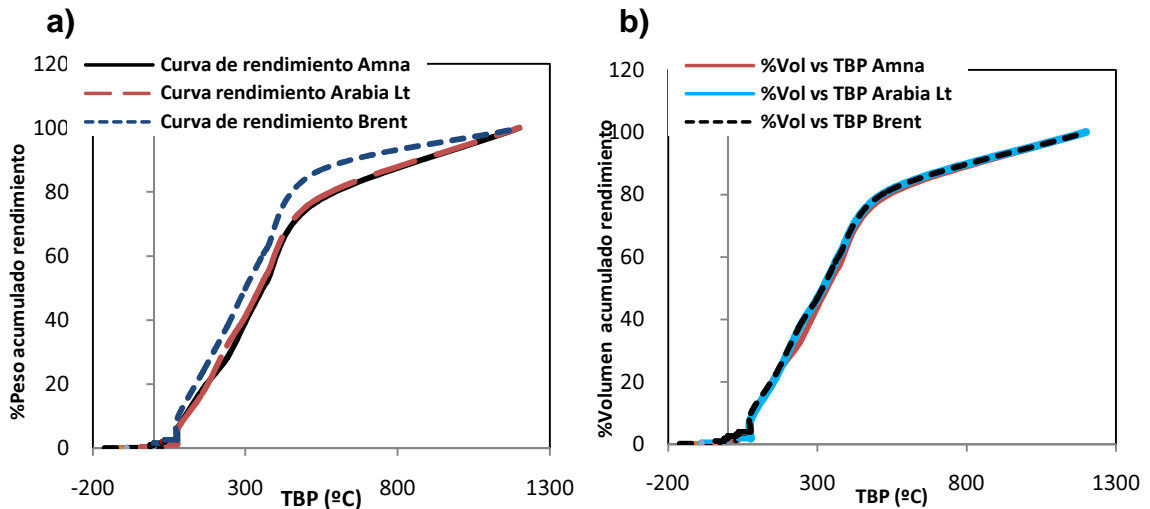
Tabla 13. Ajuste ppm Vanadio

FRACCION CORTE	Nombre crudo	AMNA	ARABIA LT	BRENT
	Número de iteración	14	19	7
4ª EXTRACCIÓN, TBP (360 - 370°C)	Vir. TBP °C	364.81	364.81	363.83
	Vir. Propiedad	0.87	13.88	4.99
	Diferencia %	1.80E-05	3.28E-04	1.21E-04
RESIDUO ATMOSFÉRICO, TBP (370 - 538°C)	Vir. TBP °C	446.27	442.74	446.84
	Vir. Propiedad	2.2	33.19	13.15
	Diferencia %	7.03E-05	2.27E-04	3.84E-05
RESIDUO DE VACIO, TBP (538 - 1200°C)	Vir. TBP °C	748.3	722.5	767.21
	Vir. Propiedad	5	67.99	36
	Diferencia %	2.76E-04	1.99E-04	1.43E-05

4.3 PRESENTACIÓN GRÁFICA DE RESULTADOS: AJUSTE DE CURVAS TBP Y DE PROPIEDADES

En esta sección se presentan de forma gráfica los resultados obtenidos para los ajustes de las curvas de rendimiento y de propiedades para los tres crudos: Amna, Arabia Lt y Brent.

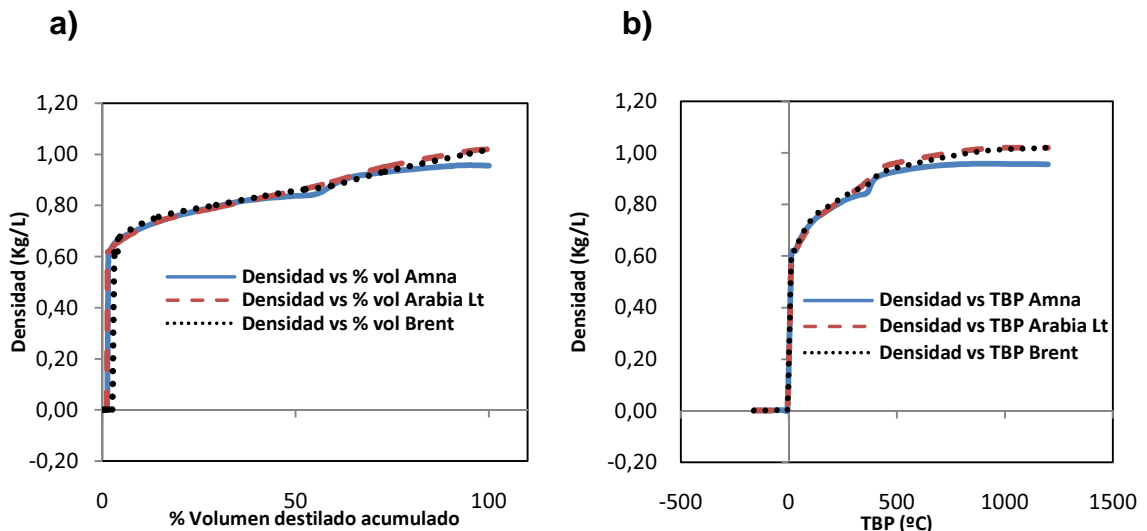
Figura 4. Curvas de rendimiento másico y volumétrico crudos Amna, Arabia Lt y Brent



En la Figura 4 (a y b) se pueden observar los porcentajes de rendimiento másico y volumétrico en función de la temperatura de corte de cada fracción para los tres

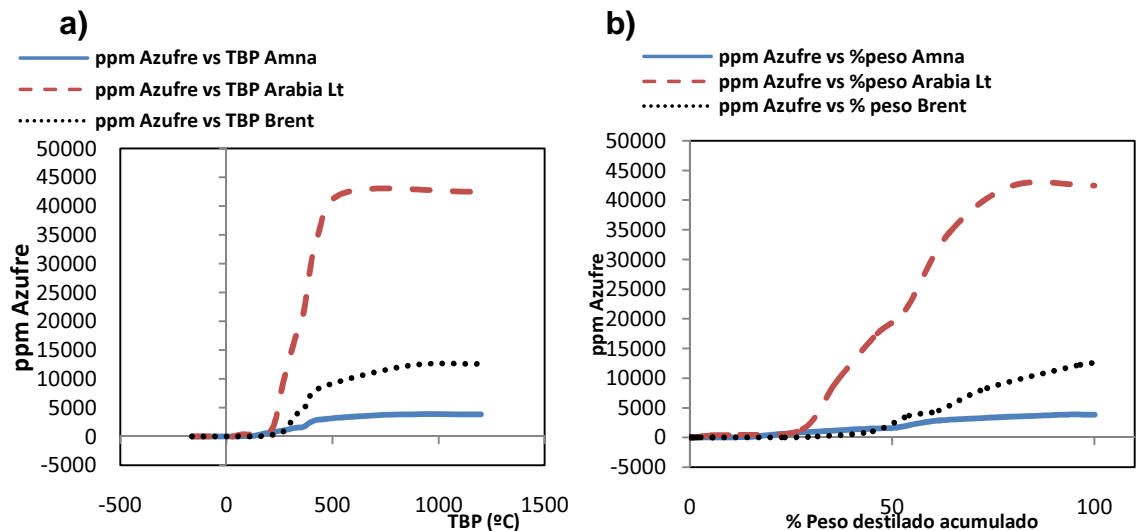
crudos en cuestión. Debido a que la relación entre ambas clases de rendimientos es la densidad, se podría esperar que ambas presenten formas parecidas. Otro detalle que puede ser observado de dichas gráficas es la forma “rectangular” que tienen estas curvas de rendimiento debido a los compuestos puros reportados en los assays (antes del corte nafta liviana), los cuales tienen temperaturas de ebullición definidas. En la Figura 5 (a y b), se representa el ajuste de la variación de la densidad con las temperaturas de ebullición y el porcentaje de volumen destilado del crudo. Se puede notar que para los tres crudos las densidades son bajas para compuestos ligeros, es decir, aquellos cuyo punto de ebullición está por debajo de los 0°C, mientras que para las fracciones más pesadas, estos valores se encuentran alrededor de 1 (Kg/L). De la ilustración se puede inferir que las densidades de las fracciones de los crudos se encuentran cercanas a la del agua en condiciones normales. También se puede inferir que aproximadamente 50°C, siendo este último el punto cercano a la temperatura de ebullición de la nafta ligera, la densidad aumenta bruscamente, representando el paso de compuestos puros a mezclas de hidrocarburos de mayor peso molecular, es decir, cuando el punto de ebullición de la fracción aumenta, su densidad también.

Figura 5. Ajuste densidad vs TBP y vs % Vol. para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent



La Figura 6 (a y b) presenta el ajuste de la variación del azufre en partes por millón en función de las temperaturas de ebullición y el porcentaje en peso destilado acumulado. Según los resultados obtenidos, el crudo Arabia Ligero contiene una mayor cantidad de azufre; seguido de los crudos Brent y Amna. Las formas de las curvas del contenido de azufre suponen una relación proporcional entre su densidad o temperatura de corte y la cantidad de azufre presente en la fracción, ya que en las fracciones ligeras el contenido de este es despreciable, hasta antes de temperaturas de destilación cercanas a los 250°C, cuando se ha destilado aproximadamente el 30 ó 40% en volumen o en peso de los crudos en estudio. Su mayor valor se encuentra cerca a los 1200°C, en las fracciones correspondientes a los residuos, los cuales, correspondiendo con la literatura, son las fracciones con mayor contenido.

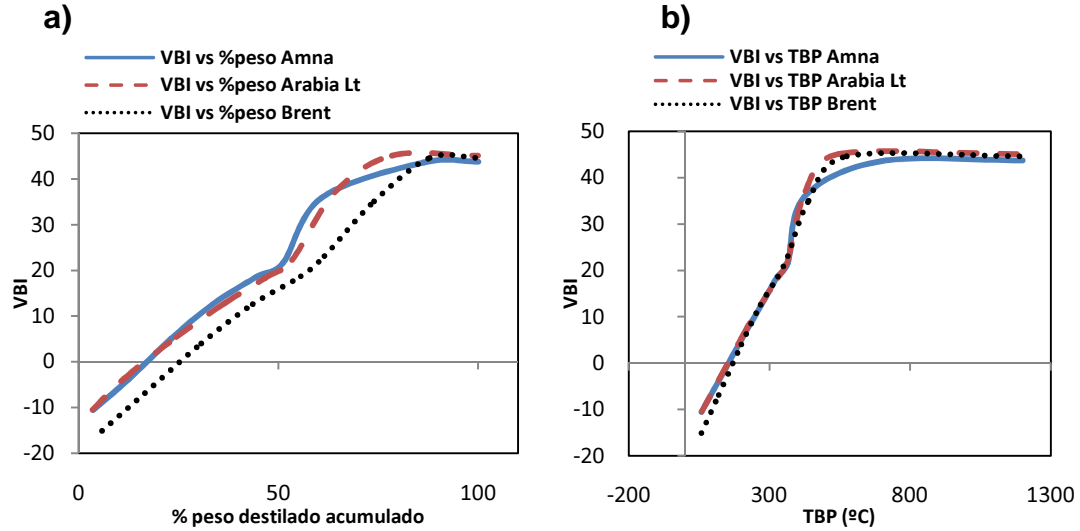
Figura 6. Ppm Azufre vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent



A continuación en la Figura 7 (a y b) se muestran el ajuste de la variación del índice de mezcla de la viscosidad (VBI) con la temperatura y el porcentaje en peso de destilado acumulado. Todas las curvas presentan formas parecidas: el índice aumenta linealmente desde 0°C hasta 400°C o desde 0% hasta 50% destilado en peso. Luego aumentan parabólicamente hasta aproximadamente 700°C u 80%

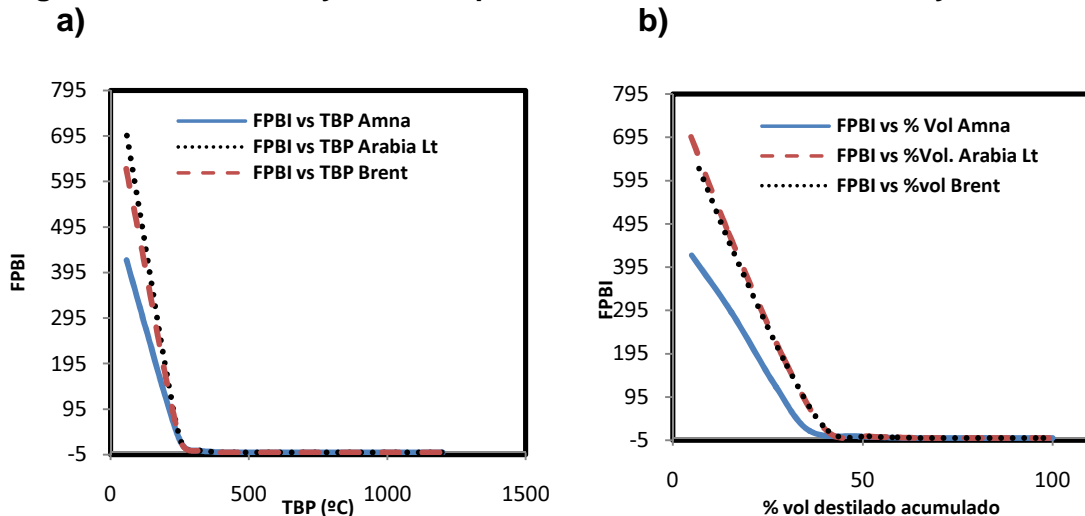
destilado y seguidamente permanece constante. Siendo más viscoso el crudo Amna para las fracciones ligeras y el Arabia Lt para las fracciones pesadas.

Figura 7. VBI vs TBP y vs % peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent



En la Figura 8 (a y b) el comportamiento del índice de mezcla del punto de inflamación (FPBI) concuerda con el descrito en la literatura, ya que las fracciones ligeras presentan una mayor probabilidad de inflamarse o encenderse porque son vapores o tienen mayor facilidad de desprenderlos; luego, el FPBI permanece prácticamente constante, debido a la complejidad o peso molecular mayor de las fracciones más pesadas.

Figura 8. FPBI vs TBP y vs %Vol. para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent



En la Figura 9 (a y b) el punto de nube aumenta cuando la complejidad de la fracción aumenta. Ya que el punto de nube implica la aparición de fases debido a la aparición de parafinas en un crudo, de la gráfica se puede inferir que el Brent podría contener mayor cantidad de parafinas que los crudos Amna o Arabia Lt. A partir de la Figura 10 a la Figura 12 aparecen propiedades de interés para las fracciones pesadas y residuos de crudos. Por esta razón, las gráficas muestran tendencias de contenidos despreciables de Carbón Conradson, contenido de níquel y vanadio, para las temperaturas TBP inferiores a 400°C o 40% peso destilado acumulado. Debido a que estas tres últimas propiedades del crudo son considerados contaminantes para los catalizadores de procesos en refinerías (unidades FCC, de hidrot ratamiento, entre otros), esta propiedad fue considerada dentro del análisis y su presencia en los crudos aumenta al aumentar los valores de la TBP o el porcentaje de masa destilado. Porcentaje en peso Carbón Conradson vs TBP y vs %Peso para crudos Amna, Arabia Lt y Brent

Figura 9. Cloud Point vs TBP y vs %Vol. crudos Amna, Arabia Lt y Brent

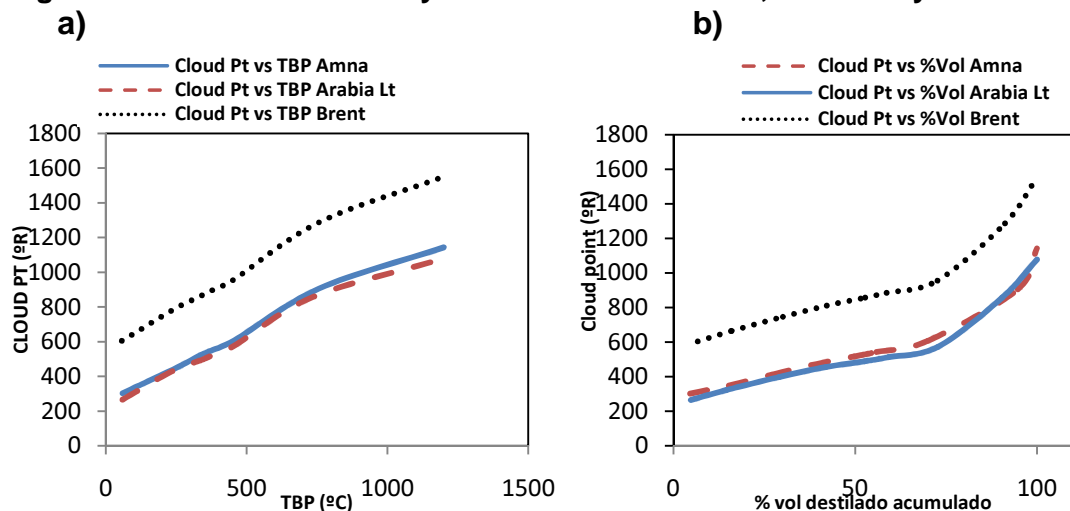


Figura 10. Porcentaje en peso Carbón Conradson vs TBP y vs %Peso para crudos Amna, Arabia Lt y Brent

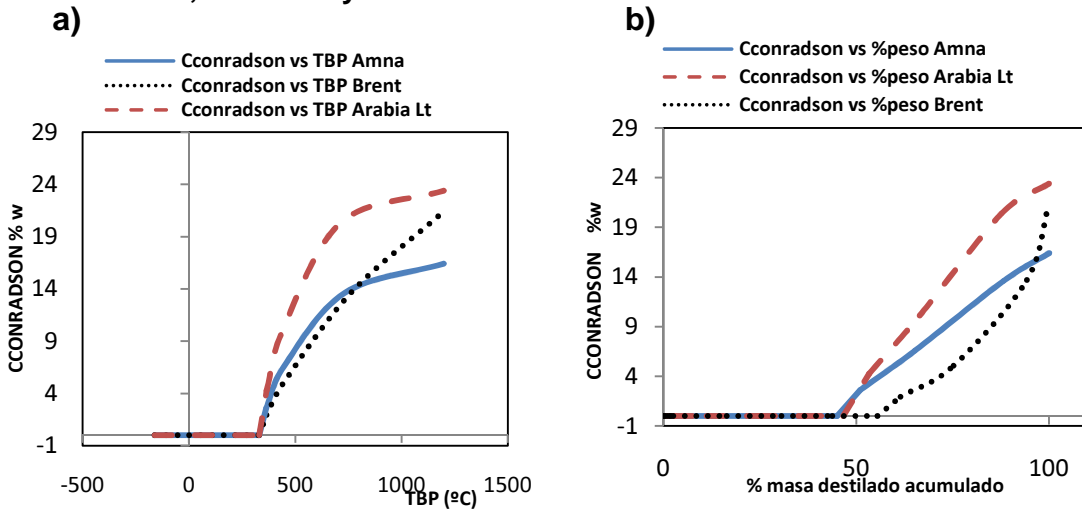


Figura 11. Ppm Ni vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent

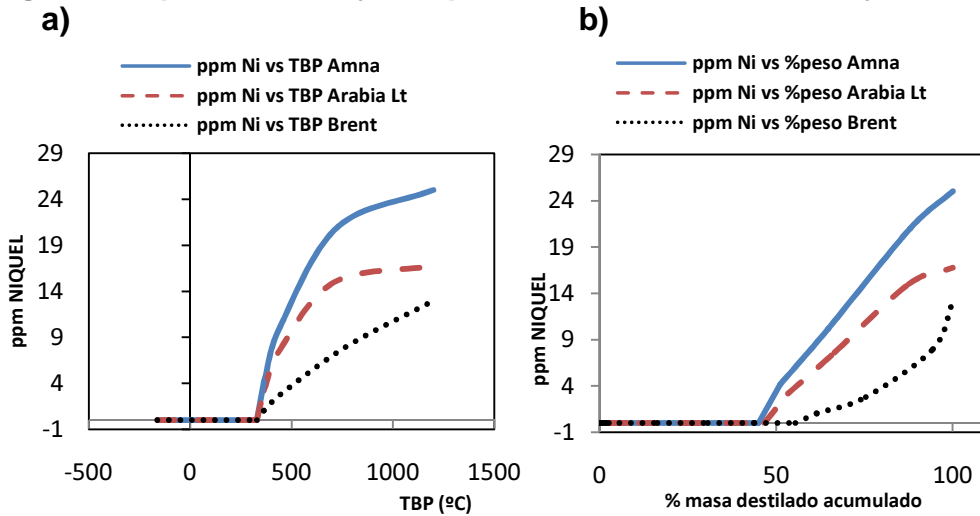
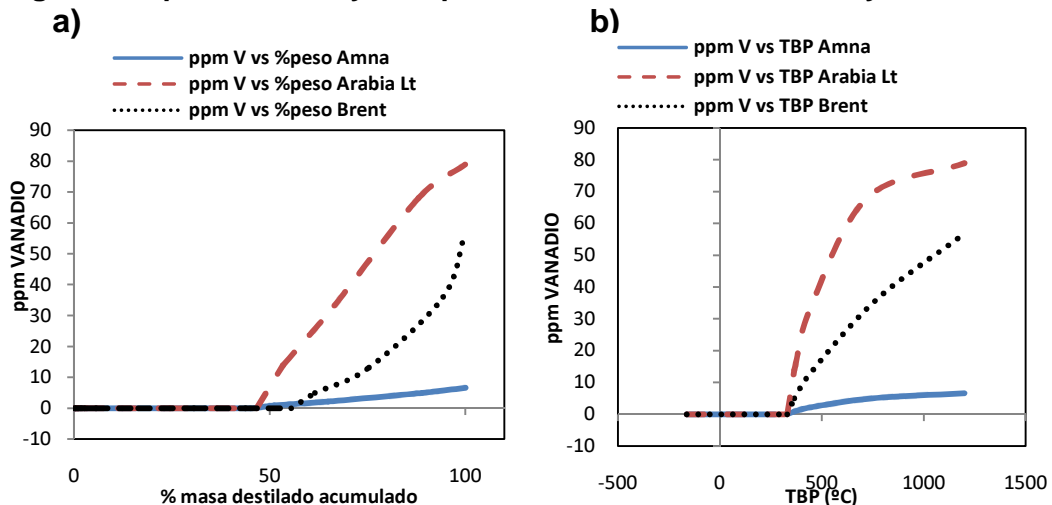


Figura 12. Ppm V vs TBP y vs %peso crudos Amna, Arabia Lt y Brent



4.4 RECORTE DE PROPIEDADES Y COMPARACIÓN DE RESULTADOS

Crude manager es una herramienta útil para la administración y manipulación de información de crudos de petróleos, permitiendo que los nuevos crudos se reconstruyan a partir de mediciones escasas con una exactitud notable (Spiral s.f.). Con la finalidad de evaluar la metodología, se realizó la comparación de los cálculos de los recortes² de propiedades para las diferentes fracciones de esta propuesta con un software comercial (el cual fue obtenido a través de la página de "Spiral") (Spiral s.f.), presentando los resultados en la Tabla 15, siendo N.L la Nafta Ligera, N.P. la nafta pesada, D.L. Destilado Liviano, D.P. Destilado Pesado y C.R. Crudo Reducido. Para este caso, el recorte fue efectuado utilizando la *Ecn. 4*, empleando los rangos de temperatura y porcentajes de rendimiento definidos en esta tabla.

De acuerdo a los datos obtenidos, se puede observar que los valores de los porcentajes de rendimiento (másico y volumétrico) de las fracciones obtenidas por Crude Manager y la metodología empleada tienen valores muy similares para los tres crudos, de la misma forma se encuentran la densidad, la viscosidad, el *flash point* y los valores del porcentaje de azufre.

También se puede notar que en el caso del *cloud point* del crudo Brent, los valores fueron los únicos significativamente diferentes. Del mismo modo, también fueron diferentes las propiedades medidas en el crudo reducido, las cuales tienen como TBP la *FBP* (Punto final de ebullición), valor utilizado por *Crude Manager*, del cual se tiene desconocimiento debido a razones de secrecía industrial.

En la Tabla 14 se muestran los datos de las propiedades de las fracciones de los crudos y en la Tabla 15 los generados por Crude Manager para los porcentajes de rendimiento de las fracciones puras para la reproducción de los datos experimentales reportados en los assays usados como caso de estudio para el ajuste de las propiedades de este trabajo. Si se comparan los anteriores valores

² El recorte de una propiedad de un crudo consiste en la evaluación del valor medio de dicha propiedad para una fracción definida en el crudo a través del intervalo específico dado de porcentaje de rendimiento (másico o volumétrico), o valores de temperatura de la curva de destilación.

con los obtenidos para los ajustes de las curvas de rendimiento de la Tabla 3 y los valores de las propiedades contenidas en las Tabla 4 a la Tabla 13, se puede notar que los datos producto del ajuste son similares a los generados por Crude Manager, lo cual contribuye al logro del objetivo del presente trabajo.

Tabla 14. Datos generados por Crude Manager para los porcentajes de rendimiento de las fracciones puras.

RENDIMIENTO COMPONENTES PUROS						
Fracciones	Rendimientos en %peso			Rendimientos en % Vol.		
	AMNA	ARABIA LT	BRENT	AMNA	ARABIA LT	BRENT
Metano	0.030	0.026	0.060	0.096	0.087	0.194
Etano	0.084	0.073	0.172	0.198	0.177	0.403
Propano	0.119	0.104	0.244	0.197	0.177	0.403
iButano	0.263	0.231	0.541	0.394	0.355	0.806
nButano	0.273	0.239	0.561	0.394	0.355	0.806
iPentano	0.220	0.192	0.451	0.296	0.267	0.606
nPentano	0.295	0.258	0.606	0.394	0.355	0.806

Tabla 15. Resultados cálculo de recorte

		CRUDO AMNA					CRUDO ARABIA LT					CRUDO BRENT				
		N.L	N.P.	D.L.	D.P.	C.R.	N.L	N.P.	D.L.	D.P.	C.R.	N.L	N.P.	D.L.	D.P.	C.R.
Caracterización corte	IBP °C	-0.5	121.1	171.1	287.8	343.3	-0.5	121.1	171.1	287.8	343.3	-0.5	121.1	171.1	287.8	343.3
	FBP °C	121.1	171.1	287.8	343.3	FBP	121.1	171.1	287.8	343.3	FBP	121.1	171.1	287.8	343.3	FBP
Rto % (peso)	Método	11.94	7.07	17.17	10.65	52.50	10.92	7.43	20.08	10.17	50.74	15.32	8.73	21.79	10.54	42.05
	R.C.M.	12.44	6.74	16.98	11.04	52.30	11.33	7.36	19.84	10.22	50.82	13.13	9.09	20.50	10.76	45.50
Rto % (vol.)	Método	14.39	7.86	17.97	10.77	47.73	13.68	8.45	21.52	10.17	45.03	13.74	8.03	20.57	10.21	44.87
	R.C.M.	15.11	7.48	17.78	11.16	47.59	14.27	8.35	21.30	10.32	44.96	15.66	9.66	21.08	10.53	41.26
Densidad (Kg/L)	Método	0.69	0.72	0.77	0.78	0.84	0.69	0.76	0.80	0.83	0.91	0.70	0.78	0.82	0.86	0.94
	R.C.M.	0.69	0.76	0.80	0.83	0.93	0.69	0.76	0.81	0.86	0.98	0.70	0.79	0.82	0.86	0.93
Azufre ppm	Método	18.68	182.87	843.36	1394.36	3146.79	21.36	149.84	703.86	1391.58	3185.33	8.33	11.18	455.69	3093.21	8970.32
	R.C.M.	12.16	200.67	837.25	1392.36	3175.56	458.71	178.47	3980.22	15542.94	35757.33	7.28	33.22	408.11	2978.43	9352.30
Viscosidad (Cst) a 122°F	Método		0.77	1.57	3.92	616.51		0.76	1.49	3.75	943.91		0.66	1.45	3.83	370.55
	R.C.M.	0.52	0.77	1.56	3.96	639.83	0.53	0.81	1.48	3.79	969.45	0.43	0.69	1.41	3.83	446.14
RON	Método		28.325	2.475	0.000	0.000		29.001	3.737	0.000	0.000		49.240	30.271	8.443	0.000
	R.C.M.	57.07	28.50	-4.85	-28.87	-30.00	57.54	32.80	5.18	-26.85	-30.00	67.55	48.57	19.24	-15.67	-29.94
Flash Point °F	Método		129.44	166.21	251.35	376.84		128.72	160.41	250.83	369.01		119.08	151.13	250.72	363.26
	R.C.M.	43.82	105.26	171.65	250.06	382.85	7.08	88.41	154.76	251.76	372.37	8.81	93.43	159.30	250.19	368.39
Cloud Point °R	Método		371.55	438.57	505.83	726.83		348.08	420.98	481.12	688.74		691.28	771.18	845.73	1086.08
	R.C.M.	337.56	370.45	445.87	505.84	599.95	328.76	364.09	427.67	482.29	597.73	309.21	346.17	422.71	488.22	593.64
C. Conradson(% peso)	Método					9.23					13.95					7.50
	R.C.M.				0.42	9.41				0.65	14.09			0.39	7.92	
Ni (ppm peso)	Método					14.37					10.33					4.29
	R.C.M.					9.20					6.51					2.97
V (ppm)	Método					0.12					46.19					19.62
	R.C.M.				0.00	2.19					45.73					13.37

Tabla 16. Datos generados por Crude Manager (C.M.) para los crudos Amna, Arabia Lt y Brent.

	FRACCIONES	IBP °C	FBP °C	Rto % (peso)	Rto % (vol)	Den. (Kg/L)	Azufre ppm	Vis. (Cst) a 122°	RON	Flash Pt °F	RVP (psi)	Cloud Point °R	C. Conradson(%peso)	Ni (ppm)	V (ppm)
AMNA	Nafta Ligera	36.2	77	4.97	6.23	0.67	9.98	0.47	65.03	36.64	0.56	327.44	0	0	0
	Nafta Pesada	77	160	12.08	13.80	0.74	80.02	0.65	39.80	79.44	0.17	356.75	0	0	0
	1ª Extracción	160	240	9.73	10.40	0.79	619.57	1.15	7.77	147.57	0.01	411.36	0	0	0
	2ª Extracción	240	300	11.17	11.47	0.82	1060.76	2.25	-17.78	210.26	0.00	467.87	0	0	0
	3ª Extracción	300	360	11.14	11.21	0.84	1474.72	4.65	-29.89	261.80	0.00	517.57	0.79	0	0
	4ª Extracción	360	370	1.47	1.47	0.85	1675.65	7.16	-30.00	297.98	0.00	542.52	2.04	0	0
	Residuo atmosféri	370	538	25.26	23.35	0.91	2839.92	244.29	-30.00	385.87	0.00	582.88	6.13	0	0
	Residuo de vacío	538 FBP		22.91	20.11	0.96	3826.90	14312.32	-30.00	507.23	0.00	615.19	14.43	21.00	5.00
ARABIA LT	Nafta Ligera	36.2	77	4.82	6.30	0.66	350.06	0.49	63.13	1.72	0.59	319.14	0	0	0
	Nafta Pesada	77	160	11.20	13.14	0.74	419.74	0.67	42.39	54.40	0.17	349.74	0	0	0
	1ª Extracción	160	240	14.78	16.17	0.79	1374.21	1.18	14.79	135.36	0.01	401.45	0	0	0
	2ª Extracción	240	300	9.08	9.43	0.83	9277.07	2.30	-11.97	210.02	0.00	453.70	0	0	0
	3ª Extracción	300	360	11.41	11.41	0.87	17401.30	4.49	-28.89	263.07	0.00	491.18	1.19	0	1.33
	4ª Extracción	360	370	1.88	1.83	0.89	22085.34	8.05	-30.00	298.09	0.00	511.06	2.84	0	5.69
	Residuo atmosféri	370	538	23.64	21.20	0.97	32603.99	411.81	-30.00	376.46	0.00	549.86	7.64	0	21.92
	Residuo de vacío	538 FBP		22.07	18.74	1.02	42579.34	38182.35	-30.00	510.82	0.00	619.94	23.69	15.00	80.83
BRENT	Nafta Ligera	36.2	77	5.61	6.89	0.68	9.96	0.40	69.61	10.03	0.58	300.96	0	0	0
	Nafta Pesada	77	160	12.81	13.91	0.77	10.32	0.58	54.88	65.04	0.15	333.38	0	0	0
	1ª Extracción	160	240	14.52	15.20	0.80	159.86	1.06	30.75	138.07	0.01	387.59	0	0	0
	2ª Extracción	240	300	10.52	10.51	0.84	1025.92	2.26	1.92	209.63	0.00	450.69	0	0	0
	3ª Extracción	300	360	11.39	11.08	0.86	3542.29	4.69	-21.01	262.02	0.00	499.69	0.73	0	0
	4ª Extracción	360	370	1.72	1.64	0.88	4685.66	9.22	-30.00	297.72	0.00	523.60	1.82	0	0
	Residuo atmosféri	370	538	23.89	21.53	0.93	8081.30	189.29	-30.00	372.47	0.00	563.41	5.03	0	0
	Residuo de vacío	538 FBP		16.90	15.20	0.93	12521.83	25396.11	-30.00	503.63	0.00	616.20	13.77	8.00	36.00

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- La metodología propuesta del presente trabajo reproduce los valores experimentales de los crudos y logra una representación continua de los datos discretos de las propiedades consignadas en los assays de crudos.
- Los resultados de las integrales y de los valores interpolados en cada uno de los intervalos experimentales reportados en los assays son dependientes del punto de temperatura tomado como referencia en el intervalo. Cuando el punto de ajuste es cambiado en un intervalo, los resultados afectan a ese intervalo y a los adyacentes a él.
- Una posibilidad para acelerar el algoritmo propuesto en la metodología presentada en este trabajo consiste en realizar una exploración sobre cada intervalo de temperatura antes de proponer el punto para la interpolación en la siguiente iteración. Esta exploración tiene el objetivo de determinar la dirección en la cual el error disminuye, lo cual resulta favorable en las iteraciones posteriores y reduce el número de las mismas.
- Las gráficas de las propiedades versus el porcentaje de rendimiento y temperaturas de ebullición en general, correspondieron con las descritas en la literatura.
- Los valores de las propiedades y porcentajes de rendimiento obtenidos mediante la metodología para el recorte de propiedades de los crudos son similares a los obtenidos por medio de un software comercial experto en la determinación de valores de propiedades de crudos que no están contenidos en los assays.
- Crear una herramienta que sistematice toda la metodología propuesta en este libro.

BIBLIOGRAFÍA

A.W. Drews. ASTM Manual. «"Manual on Hydrocarbon Analysis".» En *"Manual on Hydrocarbon Analysis"*, de A.W. Drews. ASTM Manual, 34- 37. Denver: West Conshohocken. 6ª Edición, 2008.

American Petroleum Institute. *API Technical Data Book -Petroleum Refining*. Washington: API Publishing Services, 1997.

ASTM. *Guide to ASTM Test Methods for the Analysis of Petroleum Products and Lubricants*. Danvers: West Conshohocken, 2007.

Colombia, Ministerio de Minas y Energía. República de. www.minminas.gov.co. 12 de 10 de 2010. [http://www.minminas.gov.co/minminas/kernel/usuario_externo_faq/faq_hidrocarburos.jsp?cabecera=¿Qué es una presión de vapor \(RVP\)?](http://www.minminas.gov.co/minminas/kernel/usuario_externo_faq/faq_hidrocarburos.jsp?cabecera=¿Qué es una presión de vapor (RVP)?) (último acceso: 12 de 10 de 2010).

Egon Eckert, Tomás Vanek. «New approach to the characterisation of petroleum mixtures used in the modelling of separation processes.» *Computers and Chemical Engineering* , 2005: 343-346.

Gaylor, V.F., y C.N. Jones. «"Rapid and Comprehensive Crude Oil Evaluation Without Distillation".» *Ind. & Eng. Chem.Prod.Rs. and Develop*, 1968: 7(3), 191-8.
Handwerk, James H. Gary and Gleen E. *Petroleum Refining, Technology and Economics*. New York: Marcel Dekker Inc., 1994.

Hartmann, Hans. «Cutpoint modellisation in business model.» *Heat and mass transfer*, 2002: 129-135.

HPI Consultants, INC. "*Guide to petroleum product blending*". Half Moon Bay.

I. Alhajri and A.Elkamel, T. Albahri, P.L. Douglas. «A non linear programming model for refinery planning and optimisation with rigorous process models and product quality specifications.» *Ing. J. Oil, Gas and Coal Technology. Vol. 1. No.3*, 2008: 283 - 307.

LLuch Urpí, José. *Tecnología y margen del refino del petróleo*. Madrid: Díaz de Santos, 2008.

M.R. Riazi, and Al-Otaibi G.N. «Estimation of viscosity of liquid hydrocarbon systems.» *Fuel - Elsevier*, 2006: 27-32.

Maples, Robert E. «Linear regression determines crude properties at variable boiling points.» *Oil & Gas Journal* , 1997: 72-74.

MATHWORKS. *Matlab*. 2009.

MICROSOFT. *Microsoft Office Excel*. 2009.

Peter Behrenbruch, Thivanka Dedigama. «Classification and characterisation of crude oils based on distillation properties.» *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2007: 166-180.

Purcell, Varbeg y Rigdon. «Cálculo diferencial e integral.» 224-226. México: Prentice Hall , 2007.

Riazi, M.R. *Characterization and Properties of Petroleum Fractions*. Philadelphia, PA: ASTM, 2005.

Roussis, Murray Watt and Stilignos. «Practical Advance in Petroleum Processing Vol. 2.» En *Practical Advance in Petroleum Processing Vol. 2*, de Murray Watt and Stilignos Roussis, 103 - 105. s.l.: Springer, 2008.

Spiral. *Spiral* *Software*.
<http://www.spiralsoft.co.uk/CrudeManager.asp?Language=English> (último acceso: 20 de 10 de 2010).

Springer. «Handbook of Petroleum Processing.» 6 - 7 p. Netherlands: Springer, 2006.

U.S. Department of Energy . «Strategic Petroleum Reserve Crude Oil Assay Manual.» *Office of Petroleum Reserves*, 2008: 2-4.

ANEXOS

ANEXO A. FRACCIONES DEL CRUDO ANALIZADAS

En la Tabla A 1 se presentan las fracciones de crudo ajustadas para el desarrollo de la metodología de este trabajo, la temperatura de corte TBP°C y una breve descripción de cada una de ellas.

De la misma forma, en la Tabla A2. se presentan las normas ASTM de destilación utilizadas para efectuar el reporte de los análisis de las curvas TBP.

ANEXO B. PROPIEDADES, NORMAS ASTM Y REGLAS DE MEZCLA

En la Tabla B1 se presenta la ampliación de la información correspondiente a las normas ASTM, reglas de mezcla y clasificación de las propiedades ajustadas en la metodología propuesta.

Tabla A 1. Fracciones de la destilación de crudos analizadas.

FRACCIÓN	TEMPERATURA DE CORTE TBP (°C)	DESCRIPCIÓN
Fuel Gas	-180 a -88.73 °C	El producto más ligero de la columna de destilación atmosférica, consiste en una mezcla de metano y etano.
GLP	-88.73 a 36.22°C	También es llamado GLP. Está formado por hidrocarburos de tres y cuatro átomos de carbono, que a temperatura ambiente y a presión atmosférica se encuentran en fase gaseosa pero que pasan a líquido a presiones relativamente bajas. Comercialmente son constituidos por PROPANO Y PENTANO, siendo la composición de estos regulada por las especificaciones de cada país.
Nafta Ligera	36.23 77°C	Los rendimientos de la destilación de crudo se sitúan generalmente entre el 2.1 y 5% en peso, donde la mayoría de veces los contenidos en azufre son bajos. Su propiedad de mayor interés, son los números RON y MON que se encuentran en el intervalo de 63 y 67. El destino final de esta nafta es la formulación de gasolinas, mejorando sus números octano en procesos de isomerización. También pueden usarse para la obtención de monómeros en las unidades de la industria petroquímica llamada <i>Steam cracker</i> .
Nafta Pesada	77.1 a 160 °C	Ya que su número octano es inferior al de la nafta ligera, con rangos entre 40 y 60 y por lo tanto no la hacen apta para su uso directo en la formulación de gasolinas, sometiéndose para ello a proceso de reformado catalítico. Al igual que la nafta ligera, puede ser usada como alimento al <i>Steam cracker</i> .
Primera extracción o Keroseno	160.1 a 240°C	Corresponde a la 1ª destilación lateral de la columna de destilación, teniendo como destino final la composición del keroseno de aviación o el gasóleo de automoción, siendo para esto muy importante sus propiedades de frío e índice cetano

Fuente: (LLuch Urpí 2008)

Tabla A 1. (Continuación)

FRACCIÓN	TEMPERATURA DE CORTE TBP (°C)	DESCRIPCIÓN
Segunda extracción o Diesel	240.1 a 300°C	Corresponde a la 2ª destilación lateral de la columna de destilación atmosférica. Para este corte es de vital importancia el índice cetano, la densidad y el porcentaje en peso de azufre.
Tercera extracción o Gasoil	300.1 a 360 °C	Corresponde a la 3ª extracción lateral de la unidad de destilación atmosférica. Los índices cetano varían bastante en función del tipo de crudo en rangos que van desde 42.5 para crudos nafténicos hasta un valor 59.2 para crudos parafínicos. El punto final de destilación dependerá de las propiedades de frío para cada crudo.
Cuarta extracción o Gasoil Pesado	360.1 a 370 °C	Se emplea para la formulación de fuel oil o como alimento a las unidades de conversión. Ya que tiene un rango de destilación muy estrecho, se introduce en las columnas atmosféricas para poder mejorar las propiedades de frío del Gasoil para mejorar la eficiencia de la columna en esta zona.
Residuo atmosférico	370.1 a 538 °C	Su destino es la formulación de fuel oil o como alimento a las unidades de destilación al vacío para la obtención de destilados a procesar en las unidades de conversión. Sus propiedades importantes son el contenido en azufre y metales y viscosidad.
Residuo de vacío	538.1 a 1200 °C	Es la porción no destilada del crudo proveniente de la torre de vacío.

Tabla A 2. Normas ASTM para la Destilación de crudos

NÚMERO TEST	NOMBRE	CARACTERÍSTICAS
ASTM D 1160	<i>"Distillation at reduced pressure"</i>	Se usa para fracciones de crudos y productos de éste que se pueden descomponer si se destilan a presión atmosférica, donde la muestra es destilada de acuerdo a una presión controlada entre 0.13 y 6.7 KPa (1 y 50 mm Hg) bajo condiciones diseñadas para proveer el fraccionamiento teórico de los platos. Los datos obtenidos contienen una curva de destilación que relaciona el % volumen destilado y el punto de ebullición atmosférico equivalente de temperatura.
ASTM D 2892	<i>"Crude Petroleum Distillation (15 – Theoretical Plate Column)"</i>	Se realiza a presión atmosférica o presiones cercanas a ella y provee el rendimiento de fracciones de varios rangos de ebullición, correspondiendo a la eficiencia de destilación en laboratorio referida como 15/5, empleando una columna fraccionadora teniendo una eficiencia de 14 a 18 platos teóricos operando a ratios de reflujo 5:1. Puede ser usado para cualquier producto de petróleo excepto LGP, naftas muy ligeras y fracciones que tengan punto de ebullición inicial arriba de los 400°C.
ASTM D 5236	<i>"Heavy Hydrocarbon Mixtures Distillation (Vacuum Potstill Method)"</i> .	Describe el procedimiento para destilar mezclas pesadas de hidrocarburos que tengan puntos de ebullición mayores a 150°C (300°F), tales como residuos y mezclas sintéticas, siendo su máxima temperatura lograda de 565°C (9050°F) dependiendo de la tolerancia de la carga. Opera a presiones absolutas entre 6.6 y 0.013 KPa (50 y 0.1 mmHg).
ASTM D 5307	<i>"Boiling range distribution of crude petroleum by gas chromatography"</i> .	Cubre el rango de destilación de petróleo crudo libre de agua hasta 538°C (1000°F). El material con punto de ebullición por encima de este rango es reportado como residuo siendo aplicable a todas las muestras de crudos que pueden ser disueltas en un solvente que permita hacer muestreos usando una micro jeringa. Ya que es mucho más rápido que el ASTM D 2892 puede ser usado cuando solo están disponibles pequeñas muestras de crudo. Los resultados de ambos test son equivalentes.
ASTM D 7169	<i>"Boiling point distribution of samples with residues such as crude oils and atmospheric and vacuum residues by high temperature gas chromatography"</i> .	Con esta norma se obtienen los datos reportados de la destilación HTSD o "High Temperature Simulated Distillation" con los otros datos de la cromatografía de gas. Es usado para análisis de petróleos crudos a de residuos atmosféricos y de vacío usando columnas capilares con películas delgadas, las cuales resultan de la separación incompleta de enlaces $C_4 - C_9$ en la presencia de grandes cantidades de bisulfito de carbono.

Fuentes: (ASTM 2007) (U.S. Department of Energy 2008)

Tabla B 1. Continuación de la Tabla 1.

PROPIEDAD	DESCRIPCIÓN	NORMA	CLASE DE MEZCLA	ÍNDICE DE MEZCLA
Octano: Mon y Ron	<ul style="list-style-type: none"> - Es la principal cualidad de las gasolinas, que se producen a partir de naftas reformadas, que mide la tendencia a la autoignición del combustible sometido a unas determinadas condiciones de compresión y temperatura en la cámara de combustión de los motores. - Debido a que el comportamiento antidetonante depende de las condiciones de funcionamiento se han definido dos números de octano: 			
	<p>MON (Motor Octane Number):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Las condiciones de funcionamiento del MON son de mayor velocidad y temperatura de admisión, junto a un avance variable, que intenta reproducir el comportamiento de los combustibles en tales circunstancias, como es en la conducción en carretera. 	<ul style="list-style-type: none"> - La norma ASTM D 2699 para el RON. - ASTM D 2700 para el MON. 	Volumétrica	-----
	<p>RON (Research Octane Number)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Intenta reproducir las condiciones de circulación en la ciudad. - La definición Clear refiere propiedad como medida del RON y el MON de las fracciones directamente salidas de la unidad de destilación antes de tener algún tratamiento con aditivos que aumenten su valor. 			

Fuentes: (American Petroluem Institute 1997) (HPI Consultants, INC s.f.) (Handwerk 1994)

Tabla B 1. (Continuación)

PROPIEDAD	DESCRIPCION	NORMA	CLASE DE MEZCLA	INDICE DE MEZCLA
Presión de vapor Reid (Colombia 2010)	<ul style="list-style-type: none"> - Indica la tendencia de un hidrocarburo líquido a volatilizarse. - Esta presión de vapor debe ser la necesaria para proporcionar un fácil arranque de los motores a gasolina o jet fuel, pero no demasiado alta como para que pueda darse el efecto de excesivas emisiones por evaporación. 	<ul style="list-style-type: none"> - Su determinación se basa en los métodos establecidos en las normas ASTM D 323 o D 5191. 	Volumétrica	<p>Indice de mezcla es el siguiente (HPI Consultants, INC s.f.):</p> $RVPBI = RVP^{1.25}$ <p>RVPBI Presión de Vapor Blending Index</p> <p>RVP Presión de Vapor Reid del componente en psia.</p>
Flash Point o punto de inflamación	<ul style="list-style-type: none"> - Es la menor temperatura a la cual la aplicación de una llama causa el vapor del espécimen para encenderse a una presión estándar. - Es importante porque da una indicación de la cantidad de componentes ligeros presentes y de las condiciones de seguridad que deben adoptarse en la utilización del combustible para prevenir accidentes. 	<ul style="list-style-type: none"> - Norma ASTM D 93. 	Volumétrica	<p>Flash Point (FPBI) se puede calcular de las siguientes formas:</p> <p>-Según la ecuación de Wickey-Chitteden (American Petroleum Institute 1997)</p> $\log FPBI_i = -6.1188 + \frac{4345.2}{(FP_i + 383.0)}$ <p>FPBI_i Índice de mezcla del punto de inflamación del componente <i>i</i>.</p> <p>FP_i Punto de inflamación del componente, °F.</p>

Tabla B 1. (Continuación)

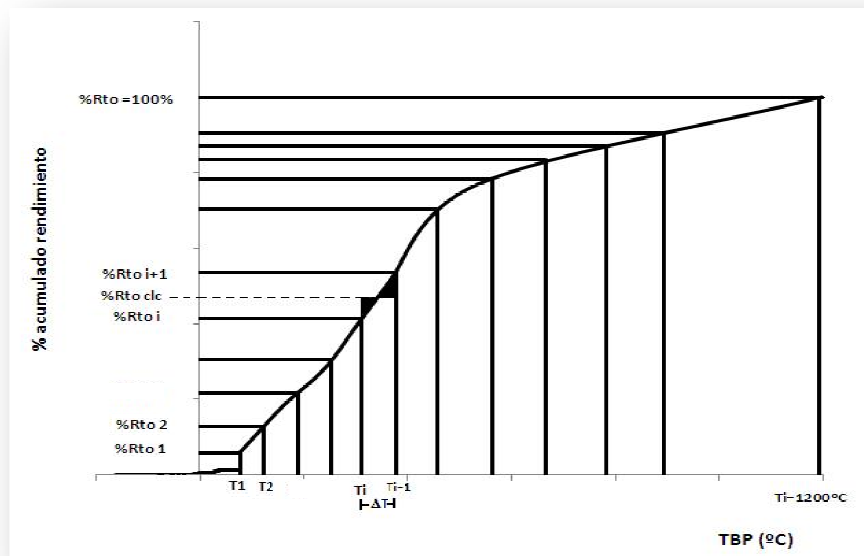
PROPIEDAD	DESCRIPCION	NORMA	CLASE DE MEZCLA	INDICE DE MEZCLA
Punto de nube	<p>· Es la temperatura de una fracción de crudo en la cual el contenido sólido de parafinas comienza a solidificarse y formar cristales haciendo que la fracción se forme una segunda fase tornándose nublosa.</p>	<p>- ASTM D2500. - ASTM D5773.</p>	Volumétrico (American Petroleum Institute 1997)	$T_g^{1/K} = \sum X_{V_i} (T_i)^{1/K}$ <p>T_g punto de nube de la mezcla total (°R)</p> <p>T_i punto de nube del componente i (°R)</p> <p>X_{V_i} Fracción en volumen del componente i.</p> <p>K Constante específica para una refinería dada.</p> <p>- Si no hay suficientes datos, los autores reportaron un valor de $K = 0.05$ para el punto de nube dan los mejores resultados para la amplia base de la industria.</p>
Carbón Conradson (Handwerk 1994)	Es una prueba usada para determinar la cantidad de residuo de carbón luego de la evaporación y pirólisis de un crudo bajo condiciones especificadas.	- ASTM D189	Másico	-----
Contenido de Ni y V	- El contenido de Ni y V pueden desactivar catalizadores durante el procesamiento de crudos en determinadas concentraciones.	- ASTM D5863	Másico	-----

ANEXO C. LOS PSEUDOCOMPONENTES

En modelos rigurosos el crudo es definido por pseudocomponentes (Hartmann 2002). La finalidad de estos pseudocomponentes es caracterizar mezclas complejas de crudos partiendo de los datos reportados por las curvas TBP. Estos se definen (Egon Eckert 2005) cortando la curva TBP en pequeños intervalos de temperatura continuos que no se traslapan entre sí, siendo cada uno de ellos la representación de un pseudocomponente con el punto normal de ebullición dado por la integral media del porcentaje de rendimiento sobre el correspondiente intervalo de temperatura ...Figura A 1

El intervalo de fracción destilado determina al mismo tiempo la contribución de cada pseudocomponente a la mezcla, el cual es usado para definir su composición, y cuando se definen y se equipan con un conjunto de pseudo propiedades, para los propósitos programas de simulación, excepto para reacciones químicas, pueden ser tratados como componentes puros.

Figura A 1. Definición del pseudocomponente y su contenido en la mezcla substituta de la curva TBP



Fuente: (Egon Eckert 2005)

De manera análoga, se pueden hacer caracterizaciones de pseudocomponentes para las propiedades del crudo, teniendo como variable independiente los valores TBP o los porcentajes de rendimiento másico o volumétrico y como dependientes la densidad, el peso molecular, la viscosidad y las demás que sean de interés.

Las propiedades de los cortes estrechos son generadas de tal forma que, cuando se reconstituyen en cortes amplios, dados como datos de entrada en los assays, los errores de las propiedades calculadas son minimizados con mínimos cuadrados. Este procedimiento tiene la ventaja de ser propiamente conservativo; esto es, la propiedad del corte amplio es consistente con las propiedades de cualquier combinación de cortes estrechos de la misma composición. Todo el crudo es considerado como el corte más amplio posible y por lo tanto cualquier partitura de este conserva la masa, azufre y otras propiedades extensivas.

Las propiedades intensivas como la viscosidad y el punto de vertido, las cuales generalmente no se mezclan linealmente, son manipuladas usando índices de mezcla lineales, los cuales también son conservativos.

ANEXO D. FORMATO DE TABULACIÓN DE ITERACIONES

En la Tabla D1 se presenta el formato utilizado en Excel para la tabulación de los datos generados por cada una de las iteraciones como información complementaria, allí aparecen los nombres de los cortes ajustados, las variables independientes TBP, el porcentaje de rendimiento empleado según la propiedad, el valor de la propiedad obtenido experimentalmente y el valor calculado a partir del procedimiento de ajuste de la Figura 3.

Tabla D 1. Formato tabla de general de cálculo de Excel

Nombre	T inicial	T final cort	TBP	% VOL AMNA	CLOUD POINT °R	Rendimientos		Vlr int Ti	Vlr int Tf	Vlr calc	Diferencia %
CH4	----	-161.5	-161.5	0.10							
C2H6	-161.5	-88.73	-125.115	0.30		0.10	0.30				
Propano	-88.73	-42.19	-65.46	0.50		0.30	0.50				
iButano	-42.19	-11.66	-26.925	0.89		0.50	0.89				
nButano	-11.66	-0.3863	-6.02315	1.29		0.89	1.29				
iPentano	-0.3863	27.84	13.72685	1.58		1.29	1.58				
nPentano	27.84	36.23	32.035	1.98	284.2119	1.58	1.98				
NAFTA LIGERA	36.23	77	58.36	4.93541	302.8495	1.98	8.23	0	1893.45	303.02822	0.0590%
NAFTA PESADA	77	160	119.22	15.3791	349.7733	8.23	22.01	1893.45	6713	349.73802	0.0101%
1° EXTRACCIÓN	160	240	200.6	27.1771	411.5700	22.01	32.41	6713	10993.3	411.572308	0.0006%
2° EXTRACCIÓN	240	300	271.2	38.1406	466.6500	32.41	43.88	10993.3	16347.4	466.710636	0.0130%
3° EXTRACCIÓN	300	360	328	49.3364	517.0500	43.88	55.08	16347.4	22136.4	517.015556	0.0067%
4° EXTRACCIÓN	360	370	364.69	55.766	543.3300	55.08	56.50	22136.4	22908	543.313701	0.0030%
RESIDUO ATMOSF	370	538	455.59	70.191	607.2333	56.50	79.86	22908	37096.9	607.384073	0.0248%
RESIDUO DE VACIO	538	1200	756	90.5825	905.2096	79.86	100.00	37096.9	55325.5	905.029219	0.0199%
TEMP FINAL			1200	100	1142.8725			0		1142.87	