

# Mejore la caracterización por puntos de ebullición del crudo utilizando la herramienta de software DVLS PetroReporter para fusionar los datos SimDist y DHA

## Introducción

Reportar datos precisos de destilación simulada (SimDist) en hidrocarburos ligeros del petróleo crudo es un reto debido a los efectos de quenching del disolvente. La solución al problema es combinar los resultados del análisis detallado de hidrocarburos (DHA) con los resultados SimDist tal y como está estandarizado en el método IP 601. Esta nota de aplicación describe la combinación de los resultados DHA y SimDist utilizando la herramienta de software DVLS PetroReporter.

## Nota de Aplicación

### Autores:

Cees Oudijn, Product Manager de Da Vinci Laboratory Solutions

### Análisis preciso del Crudo

Uno de los métodos SimDist más utilizados para determinar los datos de puntos de ebullición en crudos es el método ASTM D7169; método SimDist de alta temperatura aplicado a los residuos atmosféricos y de vacío en las refinerías. Un problema común del método D7169 es la presencia del Disulfuro de Carbono (CS<sub>2</sub>) en el cromatograma y sus efectos de quenching en los hidrocarburos C<sub>5</sub>-C<sub>6</sub>. Como la alta concentración de CS<sub>2</sub> reduce la sensibilidad del detector para los hidrocarburos, los resultados de recuperación de masa para la parte ligera del crudo serán inexactos.

Algunos software de cuantificación utilizan un factor de quenching para corregir la pérdida de señal, sin embargo este factor depende mucho del tipo de crudo. Una mejor aproximación es calcular la curva de puntos de ebullición de la parte ligera del crudo basada en un análisis capilar GC como se describe en el método estándar IP 601. Este método usa la técnica de DHA para calcular la curva de puntos de ebullición para la fracción de nafta del crudo.

Para automatizar la combinación de los datos originales de puntos de ebullición de SimDist con los datos del análisis de la parte ligera de hidrocarburos DHA, Da Vinci Laboratory Solutions (DVLS) desarrolló el software PetroReporter. El software implementa los datos de la fracción de nafta en la curva de puntos de ebullición del crudo y genera un informe de distribución de puntos de ebullición completo basado en dos análisis diferentes, el análisis de DHA y el análisis de SimDist.

## Descripción de la Aplicación

Para determinar los datos de DHA de la parte ligera del crudo, Da Vinci LS ofrece un kit DHA dedicado que cumple con IP 601: método de cromatografía de gases para la determinación de hidrocarburos ligeros en petróleo crudo estabilizado.

Para caracterizar los puntos de ebullición de crudo, DVLS ofrece el kit SimDis D7169 dedicado a cromatografía de gases de alta temperatura.

DHA Light-End IP 601 Kit	High Temp SimDist D7169 Kit
<ul style="list-style-type: none"> <li>50-100 meter Capillary GC column fused silica 0.25 id</li> <li>Pre-column</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Programmable on-column inlet</li> <li>Liners (0.53 mm) incl. flat seal</li> <li>Septa 9.5 mm</li> <li>Adapter-column</li> <li>0.45-0.53mm ID columns 100% Graphite</li> <li>FID High Temp SimDist jet</li> <li>5R-AG-0.63/0.47 ul Syringe</li> <li>High Temp SimDist column 5 m x 0.53 id x 0.09 um</li> </ul>
Calibration samples: <ul style="list-style-type: none"> <li>PIANO-1 Standard</li> <li>PIANO-P, PIANO Paraffins</li> </ul>	Calibration samples: <ul style="list-style-type: none"> <li>Light and heavy calibration samples:               <ul style="list-style-type: none"> <li>Stock SimDist Paraffin Solution C5-C28</li> <li>Polywax 655</li> </ul> </li> <li>D7169 Reference oil samples 5010</li> </ul>
PetroReporter Software	PetroReporter Software

Tabla 1. Contenido Kits DHA y SimDist

PetroReporter utiliza configuraciones de muestras predefinidas, bases de datos de componentes y fórmulas para proporcionar una identificación correcta. La edición en pantalla permite a los analistas personalizar los ajustes, por ejemplo arrastrar y soltar los picos de calibración en el cromatograma en pantalla para optimizar la calibración de n-alcenos. Esto actualizará automáticamente el análisis.

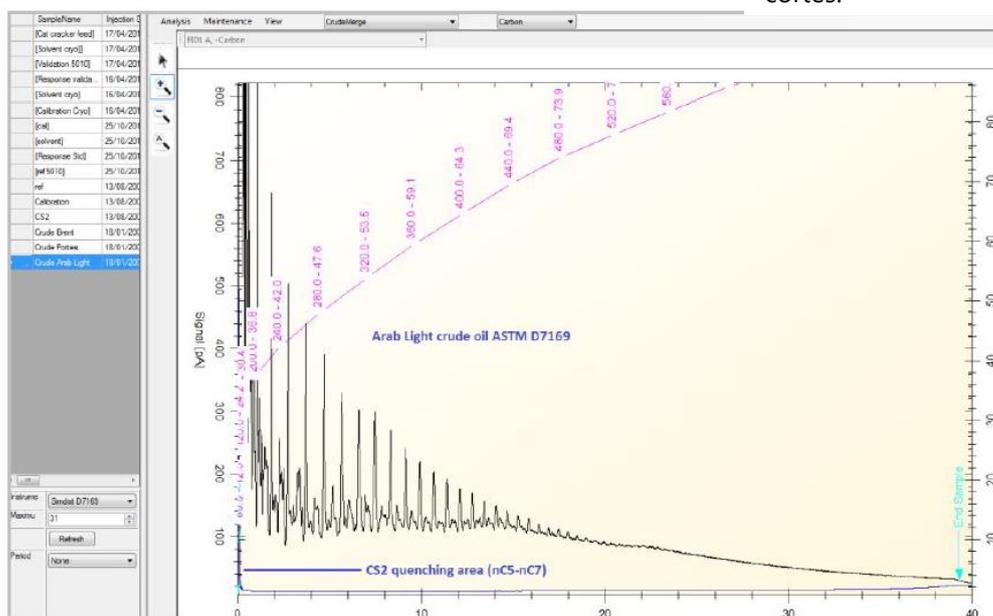
Al hacer click en los datos de análisis en la cuadrícula de propiedades en pantalla y corregir los parámetros, el cromatograma muestra tanto la señal no corregida como la correcta, incluida la curva de BP.

El software PetroReporter ofrece amplias opciones para reportar las propiedades petroquímicas de las aplicaciones SimDist y DHA. La Tabla 2 enumera el rango de opciones del informe de la herramienta de software DVLS PetroReporter.

DVLS PetroReporter es compatible con todos los sistemas de datos cromatográficos (CDS) de los principales proveedores, incluyendo:

- Agilent EZChrom Elite 3.2, 3.3, 3.3.1 and 3.3.2
- OpenLab EZChrom A01.00
- Agilent ChemStation 04.01, 04.02, 04.03
- OpenLab ChemStation A01.00
- Otros sistemas CDS bajo petición

Figura 1: Cromatograma del análisis SimDist D7169 de un crudo ligero árabe



DHA Report Options	SimDist Report Options
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Individual components list</li> <li>• PIONA report in wt %, vol% and mol%</li> <li>• TBP Report in °C or °F in 5°C steps from IBP up to FBP</li> <li>• Chromatogram plot of the peak labels over a user selectable time interval</li> <li>• Properties summary: <ul style="list-style-type: none"> <li>– Reid Vapor Pressure in psi at 100°F</li> <li>– Specific Gravity at 60/60°F</li> <li>– RON and MON</li> <li>– Gross and Nett Heat of Combustion of liquid in Btu/lb at 77°F (25°C)</li> <li>– Bromine Number</li> </ul> </li> <li>• Export of TBP data to merge SimDist results and improve the front-end analysis of crude oil</li> <li>• Export to CSV, XLS or PDF</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• TBP Distillation Percent report</li> <li>• TBP Distillation Boiling Point report</li> <li>• Alkane Profile report</li> <li>• Volume Correlation report for (customizable) ASTM D86, ASTM D86/STP 577 or ASTM D1160</li> <li>• Chromatogram</li> <li>• Flash Point report</li> <li>• MOV report</li> <li>• Noack Evaporation report</li> <li>• Export to CSV, XLS or PDF</li> </ul>

Tabla 2: Opciones de Informe

### SimDist ASTM D7169:

La aplicación SimDist está basada en un método de cromatografía de gases. Una muestra representativa de crudo es introducida en un GC configurado con un portal con control de temperatura programada y una columna capilar.

Un detector de ionización de llama convierte la masa en señal eléctrica. El software acumula la señal en modo de cortes.

Se utiliza una muestra de calibración para desarrollar la curva de tiempos de retención frente a puntos de ebullición. Se utiliza un aceite de referencia para determinar el factor de respuesta del detector. La señal del disolvente se resta del cromatograma de muestra para calcular la cantidad de muestra recuperada. Después de convertir los tiempos de retención de los cortes de muestra a temperatura, la distribución del punto de ebullición puede calcularse hasta la cantidad recuperada.

### DHA IP 601:

Una muestra representativa de petróleo crudo es introducida en el cromatógrafo de gases (GC) equipado con una columna capilar y una precolumna. La parte de hidrocarburo ligero hasta n-Nonano es introducida en la columna capilar, la precolumna hace retroceder los componentes de mayor punto de ebullición para venteo. El gas portador transporta la parte ligera vaporizada de la muestra a través de la columna, en la cual se separa en los componentes individuales.

Al final de la columna los componentes son detectados por un detector de ionización de llama (FID). Cada pico se identifica utilizando los índices de retención de Kovats (RI). Los RI de picos desconocidos se calculan a partir de:

- el tiempo de retención del pico desconocido
- el tiempo de retención de la n-parafina eluyendo antes y después del pico desconocido

El RI calculado se compara con una base de datos del software para identificar el componente. La concentración de cada componente en % masa se determina mediante la normalización de las áreas de los picos después de la corrección con factores de respuesta del detector. Los componentes desconocidos son reportados como %masa total desconocida.

## Resultados Analíticos

Los dos primeros minutos del análisis del SimDist D7169 (como se muestra en la Figura 1) son utilizados en el análisis DHA IP 601 para identificar los componentes individuales hasta n-Nonano (se muestra en la Figura 4).

Los componentes individuales son identificados utilizando una muestra de referencia y una base de datos de hidrocarburos. El punto de ebullición se calcula hasta e incluido n-Nonano.

El punto de fusión Simdist-DHA puede ser elegido utilizando el tiempo de elución comúnmente utilizado del n-Nonano o diferente utilizando el software PetroReporter. El informe combinado mostrará las recuperaciones SimDist, DHA y el resultado de su combinación.

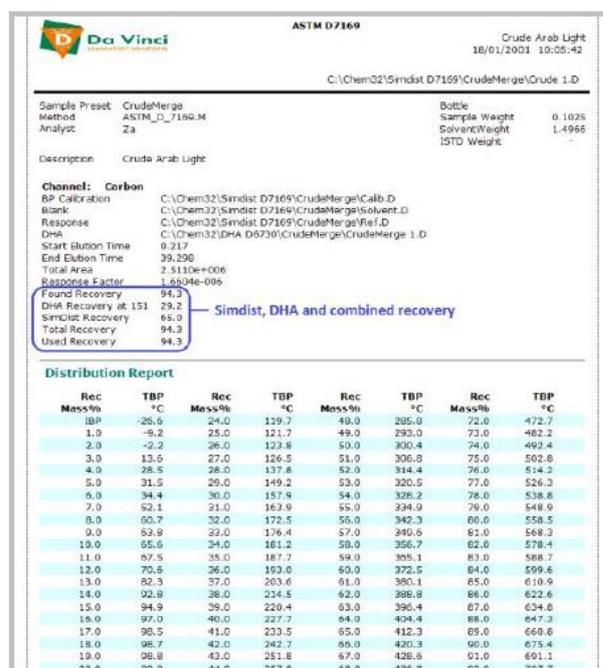


Figura 2: Informe de los análisis combinados SimDist y DHA de un petróleo crudo ligero árabe

Figura 3: PetroReporter proporciona acceso directo al punto de fusión e información del archivo de datos

