



NORGE

(12) PATENT

(19) NO

(11) 300027

(13) B1

(51) Int Cl⁶ G 01 N 21/35

Patentstyret

(21) Søknadsnr	883670	(86) Int. inng. dag og søknadsnummer	
(22) Inng. dag	17.08.88	(85) Videreføringsdag	18.08.87, FR, 8711679
(24) Løpedag	17.08.88	(30) Prioritet	01.06.88, FR, 8807304
(41) Alm. tilgj.	20.02.89		01.06.88, FR, 8807305
(45) Meddelt	17.03.97		

(73) Patenthaver	BP Oil International Ltd, Britannic House, Moor Lane, London EC2Y 9BU, England, GB
(72) Oppfinner	Alain Espinosa, Lavera, FR Didier Charles Lambert, Lavera, FR Andre Martens, Chateauneuf les Martigues, FR Antoine Pasquier, London, England, GB Gilbert Ventron, Lavera, FR
(74) Fullmektig	Lars Brevig, Bryns Patentkontor AS, 0106 OSLO

(54) Benevnelse Fremgangsmåte og apparat for direkte bestemmelse av fysikalske egenskaper til hydrokarbonblandingsprodukter

(56) Anførte publikasjoner US 4236076, WO 84/04594

(57) Sammendrag

Egenskapene til en flytende hydrokarbonblanding bestemmes fra NIR (nær infrarødt) -spekteret til komponentene i blandingen ved en fremgangsmåte som innbefatter følgende trinn:

(a) bestemmelse med et IR-spektrometer av absorbansen ved et visst antall frekvenser i spektralområdet 16667 - 3840 cm^{-1} , fortrinnsvis 12500 - 3840 cm^{-1} , mest foretrukket 4760 - 4000 cm^{-1} for komponentene eller vilkårlige blandinger, ved å starte fra en definert basislinje, fortrinnsvis tilsvarende null absorbans,

(b) bestemmelse for hver komponent I og hver egenskap J av en spektralblandingsindeks SMI_I^J ved anvendelse av en korrelasjon med de målte absorbansverdiene, idet denne korrelasjonen bestemmes eksperimentelt ved multivariat-regresjon, avhengig av typen av benyttet spektrometer, den ønskede egenskap og de benyttede frekvenser,

(c) beregning av den søkte ønskede egenskap ved anvendelse av et lineært uttrykk,

$J = f_a \text{SMI}_a^J + f_b \text{SMI}_b^J \dots + f_o \text{SMI}_o^J$ hvori hvert uttrykk er produktet av spektralblandingsindeksen til en komponent med den ønskede egenskap og volumfraksjonen av komponenten i sluttblandingen.

Foreliggende oppfinnelse vedrører en fremgangsmåte og apparat for bestemmelse av fysikalske egenskaper til hydrokarbon-blandingsprodukter, spesielt ikke-additive egenskaper for blandinger av petroleumfraksjoner, ved utførelse av NIR (nær infrarødt) -spektroskopiske analyser av komponentene i blandingen og korrelering av disse med blandingens fysikalske egenskaper.

Callis et al, Analytical Chemistry, vol. 59, nr. 9, s. 624A-636A (mai 1987) nevner muligheten av å bestemme oktantalet til en blyfri bensin ved NIR-spektroskopi og påpeker i dette spesielle tilfellet eksistensen av en forbindelse mellom andre egenskaper til produktene og produktenes NIR-spektra.

Når et produkt fremstilles ved blanding av forskjellige komponenter, som ofte i seg selv er blandinger, møtes imidlertid betydelige problemer med hensyn til å forutsi egenskapene til sluttblandingen. Dette skriver seg fra det faktum at flere egenskaper ikke følger den lineære lov for blandinger som følges av majoriteten.

For eksempel, i bensiner overholder eller følger ikke oktantalet den lineære lov; i dieseloljer følger ikke sløringspunkt, flammepunkt, hellepunkt, cetantalet, filtrerbarhet osv.; og ikke brennoljer følger ikke viskositet, densitet osv.

Blandetabeller har blitt satt opp, men dette er en tidskrevende og tungvint prosedyre hvorved det er vanskelig, om ikke mulig, å dekke alle mulige kombinasjoner.

I praksis er formulering av slike blandinger forbundet med problemet med regulering av egenskapene til sluttblandingen, som vanligvis må tilfredsstille strenge spesifikasjoner på grunn av variabiliteten til komponentene i blandingen. Dette gjelder spesielt når komponentene har sin opprinnelse fra oljeraffineri-prosessenheter.

I WO 84/04594 omtales et spektrometer og en datamaskin beregnet for bruk i forbindelse med blanding vanligvis av kull, men olje og diesel er også nevnt. Målingene foretas imidlertid på den sluttelige blandingen og ikke på tilførs-
5 lene. Fig. 1 i WO-referansen viser IR-analyse på en jernblanding med prosessering av data ved hjelp av en datamaskin for å regulere de relative mengder av tilførsler til en blander. Videre, i US 4.236.076 beskrives et infrarød-
10 spektrometer for bestemmelse av oppbygningen av en prøve og det refereres til prosentandelen av et spesifikt kjemisk stoff i en prøve og denne verdien oppnås fra summen av de optiske densitetene multiplisert med kalibreringsfaktoren. En prosessor behandler dataene. Dette representerer også den
15 konvensjonelle bruk av et spektrometer for å måle egenskapene til en prøve ved analyse på prøven. Verken WO- eller US-skriftene beskriver således analyse av tilførselen for å oppnå egenskaper hos produktet. I foreliggende oppfinnelse er spektrometeret forbundet med tilførselen (og ikke produktet).

20 Det er formål med foreliggende oppfinnelse å eliminere de ovenfor omtalte ulemper og spesielt unødvendiggjøre bruken av blandetabeller ved tilveiebringelse av en fremgangsmåte som muliggjør at egenskapene til en enkel eller kompleks blanding
25 kan forutsies ved bestemmelser utført utelukkende på komponentene i blandingen.

Ifølge foreliggende oppfinnelse er det således tilveiebragt en fremgangsmåte for bestemmelse av en eller flere fysikalske
30 egenskaper til et flytende hydrokarbonblandingsprodukt, og denne fremgangsmåten er kjennetegnet ved følgende trinn:

- (a) bestemmelse av absorbansen med et infrarødt spektrometer ved et visst antall frekvenser i spektral-
35 området $16667 - 3840 \text{ cm}^{-1}$ for komponentene i blandingen eller vilkårlige blandinger, ved å starte fra en definert basislinje,

(b) bestemmelse av en spektralblandingsindeks $(SMI)^J_I$ for hver komponent I og hver egenskap J ved anvendelse av en korrelasjon med de målte absorpsjonsverdiene, idet denne korrelasjonen bestemmes eksperimentelt ved

(c) beregning av den aktuelle egenskap J til produktet ved anvendelse av et lineært uttrykk,

$$J = f_a \cdot SMI^J_a + f_b \cdot SMI^J_b + f_c \cdot SMI^J_c \dots + f_o \cdot SMI^J_o$$

hvor hvert ledd er produktet av spektralblandingsindeksen $(SMI^J_a \dots)$ til egenskapen J ved en komponent (a ...) og volumfraksjonen $(f_a \dots)$ av denne komponent.

SMI for en komponent kan bestemmes direkte fra absorpsjonsverdier oppnådd fra denne komponenten alene ved anvendelse av ovennevnte korrelasjon.

SMI-verdien for en komponent blir imidlertid fortrinnsvis bestemt i en vilkårlig blanding av en fraksjon av denne komponenten i en matrise ved oppnåelse av de nære IR-spektra for matrisen og for denne blandingen respektivt, beregning av den teoretiske absorpsjonen ved hver av de valgte frekvenser, ved anvendelse av en lineær formel som en funksjon av absorpsjonene til matrisen og blandingen ved den samme frekvensen, og beregning av SMI^J for denne komponenten ved anvendelse av den ovenfor nevnte korrelasjon til de teoretiske absorpsjoner for komponenten.

Om nødvendig inneholder det korrelative uttrykk ovenfor lineære, kvadratiske og homografiske (dvs. forhold) uttrykk.

De benyttede frekvenser velges fortrinnsvis fra følgende 16:

4670 cm^{-1}

4640 cm^{-1}

4615 cm^{-1}
4585 cm^{-1}
4485 cm^{-1}
4405 cm^{-1}
5 4385 cm^{-1}
4332 cm^{-1}
4305 cm^{-1}
4260 cm^{-1}
4210 cm^{-1}
10 4170 cm^{-1}
4135 cm^{-1}
4100 cm^{-1}
4060 cm^{-1}
4040 cm^{-1}

15

Den tilsvarende frekvens uttrykt i lovmessige enheter (Hz) oppnåes ved å multiplisere disse verdiene med 3×10^{10} lysets hastighet i cm/s.

20

Spektrometeret kan kobles til en signalbehandlingsanordning for å gi adgang for numerisk behandling av spekteret, fortrinnsvis ved Fourier-transformasjon. Spektrometeret har hensiktsmessig en oppløsningsevne 4 cm^{-1} .

25

Ved anvendelse av den klassiske metoden blir absorbanse, dvs. logaritmen til dempingsforholdet mellom den innfallende strålen og strålen etter passasje gjennom produktet, bestemt for hver frekvens.

30

Dette valg er hverken uttømmende eller utelukkende. Valget av andre frekvenser vil ikke endre metoden, men vil kreve bruk av andre koeffisienter i modellene som muliggjør beregning av de ønskede egenskaper fra disse spektra.

35

Tiden som går med for analyse og bearbeidelse av data er mindre enn 1 minutt.

Basislinjen (sett som tilsvarende null absorbans) tas hensiktsmessig ved 4780 cm^{-1} .

Blandingsutstyret kan være datamaskinstyrt ved hjelp av et tilbakekoblet styringssystem for endring av blandingsbetingelser som reaksjon på variasjoner i egenskapen til produktet fra den ønskede verdi, fra bestemmelsen av NIR-spektrene til komponentene.

Det benyttede spektrometeret gir absorbansmålingene for de valgte frekvenser, og de søkte verdier oppnås direkte ved multivariat-regresjon.

Egnede produkter hvis egenskaper skal bestemmes innbefatter motordrivstoff, dieselolje og brennolje.

I tilfellet for et motordrivstoff kan de ønskede egenskaper innbefatte det teoretiske oktantal (RON), motoroktantallet (MON), blyfri eller blytilsatt, ved forskjellige tetraetylbly- eller tetrametylbly-innhold, densiteten, damptrykket og destillasjonsegenskapene.

I dette tilfellet kan de foretrukne frekvenser reduseres til syv, og er:

4670 cm^{-1}
 4485 cm^{-1}
 4332 cm^{-1}
 4305 cm^{-1}
 4210 cm^{-1}
 4100 cm^{-1}
 4060 cm^{-1}

I tilfellet for en dieselolje kan egenskapene innbefatte sløringspunkt, hellepunkt, filtrerbarhet, cetanindeks, destillasjonsegenskaper, flammepunkt og viskositet.

Dieseloljen kan være av den typen som benyttes for bil- eller båt dieselmotorer, spesialitetsgassoljer, oppvarmingsoljer, brennoljer for lavkapasitetskjeler, osv. Oljen som er
 5 sluttproduktet kan formuleres ut fra en rekke hydrokarbonholdige råmaterialer valgt fra følgende ikke-uttømmende liste: nafta, bensin og gassolje. Disse komponentene kan oppnåes fra atmosfæriske eller vakuum-destillasjonsenheter, fra hydrokrakkere eller hydrobehandlingsenheter eller fra termiske eller katalytiske krakkere. Additiver kan også
 10 tilsettes, for eksempel nitrater for forbedring av cetanindeksen.

I tilfellet for en brennolje kan egenskapene være densitet, viskositet, termisk stabilitet, destillasjonsegenskaper, flammepunkt osv.
 15

Igjen kan sluttproduktet formuleres fra flere hydrokarbonholdige råmaterialer. Disse kan innbefatte atmosfæriske eller vakuumdestillasjonsrester, viskositetsnedbrytningsrester, katalytiske krakker-rester eller dampkrakker-rester og gassoljer.
 20

For oppnåelse av den nødvendige egenskap for produktet P kan det utføres en spektralanalyse av blandingen, dvs. absorbanverdiene eller de optiske densitetene D_i , tilsvarende frekvensene F_i kan måles, og den nødvendige egenskap J kan deretter beregnes under anvendelse av et uttrykk av følgende type:

$$J = C + \sum_{i=1}^n p_i D_i + \sum_{i=1}^n q_{ij} D_i \cdot D_j + \sum_{i=1}^n r_{ij} D_i / D_j \quad (2)$$

hvor i en konstant C, lineære uttrykk p, kvadratiske uttrykk q og homografiske uttrykk r, respektivt, kan benyttes.
 35

Tilstedeværelsen av kvadratiske og homografiske uttrykk muliggjør at det tas bedre hensyn til synergiene til bland-

ingene som, i tilfellet for ikke-additive egenskaper, er normale og som forklarer ikke-gyldigheten av den lineære lov for blandinger. Disse kvadratiske og homografiske uttrykkene kan enten benyttes eller ikke avhengig av det presisjonsnivået som er nødvendig.

I tillegg tar oppfinnelsen ikke bare sikte på å bestemme egenskapene til et blandet produkt, men å forutsi dem ut fra komponentene ved bestemmelse av de tilsvarende spektralblandingsindekser SMI for komponentene i blandingen.

I tilfellet for en hydrokarbonkomponent A, B eller C, som utgjør en del av blandingen, kan spekteret for komponenten alene oppnåes enten ved en linje for linje måling gitt for denne komponent i blandingen M, eller ved en standardiseringsmåling av dette spekteret dersom denne komponenten er veldefinert og konstant produkt.

Spektralblandingsindeksen oppnåes deretter for egenskapen J til produktet SMI_A^J - ved anvendelse av formel (2) ovenfor med absorptionsene D_i for spekteret A.

Ifølge en foretrukket utførelse blir spekteret for en komponent A fortrinnsvis oppnådd ved utførelse av spektral-målinger ikke på det rene produktet A, men på en vilkårlig blanding inneholdende en fraksjon f, beregnet på volum, av A i en komplementær fraksjon 1-f, beregnet på volum, i en matrise S, hvor f er mellom 0 og 1, fortrinnsvis mellom 0,1 og 0,5.

Spekteret til matrisen S blir deretter bestemt, hvor S alene kan være en blanding og som muliggjør bestemmelsen av absorptionsene D_{im} ved det valgte frekvensene F_i , og også spekteret for den forutgående vilkårlige blanding hvilket muliggjør at de tilsvarende absorptionser D_{im} ved de valgte frekvenser F_i kan bestemmes.

For hver frekvens F_i blir en teoretisk absorbans for blandingen D_{ia} beregnet ved anvendelse av følgende uttrykk:

$$D_{ia} = \frac{D_{im} - (1-f)D_{is}}{f} \quad (3)$$

Formel (2) anvendes deretter på de således oppnådde verdier D_{im} for å oppnå spektralblandingsindeksen SMI til bestanddelen A i matrisen S.

I tilfellet for et oksygenholdig additiv, f.eks. tertiær butylalkohol, metyl-tertiær-butyleter, metanol eller andre alkoholer, estere, ketoner, fenoler osv., blir sistnevnte metode fortrinnsvis benyttet ved en volumfraksjon av oksygenat mellom 0,02 og 0,15. I tilfellet for et nitrogenholdig additiv av nitrattypen blir sistnevnte metode fortrinnsvis benyttet med en additivfraksjon mellom 0,02 og 0,15 beregnet på volum.

Når først spektralblandingsindeksen SMI^J_I er oppnådd for hver av egenskapene J til bestanddelene I i en blanding, så kan egenskapene for en ny blanding bestemmes ved enkel anvendelse av en lineær blandingslov anvendt på disse SMI^J_I -verdiene.

For eksempel, dersom en gitt motordrivstoffblanding M med oktantal ON skal endres ved tilsetting av komponenter A og B, hvis respektive volumfraksjoner er definert som F_a og F_b respektivt, uttrykkes oktantalet ON' til den således oppnådde nye blandingen M' som en funksjon av oktantalet ON til M, ved følgende formel:

$$ON' = ON.(1 - f_a - f_b \dots) + f_a SMI_a + f_b SMI_b$$

Fraksjonene f kan ligge mellom 0 og 1, og fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

Dersom på den annen side en blanding M skal dannes fra fraksjoner f_a av A, f_b av B, f_c av C ..., f_o av O, oppnåes oktantallet til blandingen ved hjelp av følgende formel:

$$ON = f_a.SMI_a + f_b.SMI_b + f_c.SMI_c \dots + f_o.SMI_o$$

idet fraksjonene også her ligger mellom 0 og 1, og fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

Alternativt, dersom det er nødvendig å modifisere sløringspunktet til en gitt gassoljeblanding M ved tilsetning av komponenter slik som A og B hvis volumfraksjoner, henholdsvis F_a og F_b , er definert, uttrykkes sløringspunktet CP' for den således oppnådde nye blanding M' som en funksjon av sløringspunktet CP til M, ved følgende formel:

$$CP' = CP (1-F_a-f_b \dots) + f_a SMI_a^{PT} + f_b SMI_b^{PT} \quad (4)$$

Fraksjonene f kan være mellom 0 og 1, fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

I det omvendte tilfellet hvor det er nødvendig å tilveiebringe en blanding M fra fraksjoner fra f_a av A, f_b av B, f_c av C ... f_o av O, oppnåes blandingens sløringspunkt fra følgende formel:

$$CP = f_a.SMI_a^{PT} + f_b.SMI_b^{PT} + f_c.SMI_c^{PT} \dots + f_o.SMI_o^{PT} \quad (5)$$

idet fraksjonene denne gang er mellom 0 og 1, fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

Den ovenfor angitte metode benyttet for sløringspunktet, kan anvendes for andre egenskaper benyttet i formuleringen og karakteriseringen av gassoljer.

Dersom det, som et ytterligere eksempel, er nødvendig å modifisere viskositeten ved 100°C for en gitt blanding M ved

tilsetting av komponenter slik som A og B hvis volumfraksjoner, henholdsvis F_a og F_b , er definert, uttrykkes viskositeten ved 100°C V100' for den således oppnådde nye blanding M' som en funksjon av viskositeten V100 til M, ved følgende formel:

$$V100' = V100(1 - F_a - F_b \dots) + f_a \text{SMI}^{V000}_a + f_b \text{SMI}^{V100}_b$$

Fraksjonene f kan være mellom 0 og 1, fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

I det motsatte tilfellet der det er nødvendig å tilberede en blanding M fra fraksjoner f_a av A, f_b av B, f_c av C ... f_o av O, oppnåes blandingens viskositet fra følgende formel:

$$V100 = f_a \cdot \text{SMI}_a + f_b \cdot \text{SMI}_b + f_c \cdot \text{SMI}_c \dots + f_o \cdot \text{SMI}_o$$

idet fraksjonene denne gang er mellom 0 og 1, fortrinnsvis mellom 0 og 0,5.

Fremgangsmåten ovenfor benyttet for viskositet kan anvendes for andre egenskaper, spesielt for egenskapene som benyttes for bestemmelse av brennstoffets stabilitet:

- PSR: oppløsningsmiddelevne for resten tilsvarer restens R evne til å holde dens asfaltener i oppløsning.
- PSFF: oppløsningsmiddelevne for fortynningsmiddelet F som definerer peptiseringskapasiteten for fortynningsmiddelet vis-a-vis asfaltenene.
- CR: utfellingsevne for asfaltenene i resten R som kan defineres som innledende utfellingsevne eller utfellingsevne ved lagring.

Stabiliteten til det blandede brennstoffet defineres ved:

$$S = \sum_{i=1}^n \text{IPSR}_i fR_i + \sum_{j=1}^m \text{IPSF}_j fF_j - \sum_{i=1}^n \text{ICR}_i \quad (6)$$

hvor: f_{Ri} , f_{Fi} er de respektive andeler av hver av bestanddelene, idet disse er rester (R_i) eller fortynningsmidler (F_i).

5

$IPSR_i$, $IPSF_j$ og ICR_i representerer spektralblandingsindeksen for restens oppløsningsmiddelevne, fortynningsmiddelets oppløsningsmiddelevne og utfellingsevnen for asfaltenene respektivt, for forbindelsene i og j. Brennstoffet er stabilt dersom S er større enn 0.

10

Fremgangsmåten kan bringes on-line og i reell tid ved hjelp av en prosess-datamaskin fra sensorer som analyserer i NIR de spektra som oppnåes fra komponentene som kan skrive seg fra forskjellige kilder. Det er da mulig å optimalisere hydrokarbonblandingen i reell tid.

15

Ved hjelp av et tilbakekoblingsstyringssystem på enheten som tilveiebringer hver komponent er det mulig å påvirke nivået av den ønskede egenskap til denne komponenten, bestemt i reell tid, ved analyse i NIR, on-line, og beregne det med datamaskinen ved fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen.

20

I en datamaskin-assistert blandingsprosess blir således NIR-spekteret for satsene som inkluderes bestemt i reell tid, og behandles som en informasjonsvektor som kontinuerlig kvalifiserer de potensielle egenskapene til tilførslene som benyttes i blandeoperasjonen. NIR-spekterets innhold og den eksperimentelle nøyaktigheten som utledes fra spektralinformasjonen ved hurtig Fourier-transformasjon sikrer at denne informasjonen er pålitelig og relevant med hensyn til de operasjoner som er involvert i blandingen. NIR-spekteret er således en numerisk indikasjon på produktenes egnethet for blandingsoperasjoner.

25

30

35

Videre er det ifølge oppfinnelsen også tilveiebragt et apparat omfattende en datamaskin forbundet med et infrarødt

spektrometer for bestemmelse av spektra i relasjon til en operasjon som innebærer blanding av tilførsler i minst to tilførselsledninger for oppnåelse av et flytende hydrokarbonblandingsprodukt, kjennetegnet ved at spektrometeret er
5 forbundet med tilførselsledningene og datamaskinen er programmert på en slik måte at produktets egenskap kan bestemmes kontinuerlig i sanntid.

Apparatet kan omfatte et tilbakekoblingsstyringssystem, for
10 datamaskinstyring av blandingsutstyret som respons på variasjoner i egenskapen fra den ønskede verdi, fra bestemmelsen av NIR-spekteret til blandingens komponenter.

On-line-analyse kan benytte fiberoptikk som et middel for
15 overføring av lyssignaler eller kan innebære fysisk overføring av en prøve til spektrometerets celle.

I de følgende eksempler er det vist at variasjonene i kvalitet hos den dannede blanding kan korreleres, ved hjelp
20 av en numerisk behandling, med variasjonene i NIR-spektrene til produktene.

Eksempel 1 - Endring av oktantallet for en gitt blanding til en spesifikasjon pålagt ved tilsetning av en hydrokarbonbasis
De målte absorbanse er som følger:

5

Frekvens	Absorbans	
	Blanding M (super)	Komponent A (Hydrogenertdamp- krakkingsbensin)
D ₁ 4670 cm ⁻¹	0,0866	0,1455
D ₂ 4485	0,08040	0,07590
D ₃ 4332	0,75670	0,64380
D ₄ 4100	0,36810	0,36130
D ₅ 4060	0,55560	0,80420
D ₆ 4305	0,6290	0,55240
D ₇ 4210	0,36360	0,33350
RON _{0,4}		
Eksperimentell motor	98,9	100,3

20

25

Den siste linjen angir RON_{0,4} som er det teoretiske oktantal-
tallet ved 0,4% tetraetylbly målt eksperimentelt ved motor-
metoden for M og A respektivt.

30

Oktantallet beregnes ved hjelp av følgende formel utledet fra
ligning (2) og oppnådd ved bruk av numerisk multivariat-
analyseteknikker anvendt på et sett av blandinger M som
tjener til forutgående kalibrering.

$$\text{RON}_{0,4} = 93,29 - 28,46 D_1 - 47,19 D_5 D_6 + 42,78 D_3 - (7) \\ 60,64 D_4 + 60,40 D_5 - 52,05 D_7$$

35

Denne formelen benyttet på blanding M gir verdien for RON_{0,4}
= 99,0.

300027

14

SMI for komponent A beregnes også ved hjelp av ligning (7),
og resultatet er:

$$SMI_1 = 105,0.$$

- 5 Det vil fremgå at denne verdien er høyere enn den på 100,3 i
forutgående tabell, hvilket viser bonuseffekten for A i en
blanding med M.

- 10 Således, ved tilsetning av 20 volum-% av A til M, oppnåes en
beregnet $RON_{0,4}$ -verdi for blanding $M' = 0,2 A + 0,8 M$ på
 $RON_{m'} = 0,2 \times 105 + 0,8 \times 99 = 100,2$, mens eksperimentelt gir
motortesten 100,1.

- 15 Med en blanding som har 10 volum-% av A gir den samme
beregningen 99,6 sammenlignet med en motormåling på 99,3.

20

25

30

35

Eksempel 2 - Fremstilling av et motordrivstoff som innbefatter en ternær blanding

Absorbansene detekteres ved de samme frekvensene som de i eksempel 1.

Absorbans			
Blanding M		Komponent B (Bensin)	Komponent C (Bensin fra krakker med hvirvelsjiktkatalysator) FCC
10	D ₁ : 0,0866	0,0109	0,04770
	D ₂ : 0,08040	0,03840	0,06950
	D ₃ : 0,75670	0,96970	0,8520
	D ₄ : 0,36810	0,58420	0,40180
15	D ₅ : 0,55560	0,36920	0,55140
	D ₆ : 0,6290	0,6838	0,73460
	D ₇ : 0,3636	0,4959	0,44870
	RON _{0,4} motor 98,9	83,5	94,5
20	RON _{0,4} 98,9	83,5	94,5
	SMI 99,0 (Beregnet med ligning (7) i eksempel 1)	83,6	94,9
25		(ingen synergi i blandingen)	(svak bonuseffekt)

Den ternære blanding dannet av:

70 volum-% M

15 volum-% B

15 volum-% C

har en eksperimentell motor RON_{0,4} på RON_{0,4} motor = 96,2, mens den beregnede verdi gir: RON beregnet = 0,7 x 99 + 0,15 x 83,6 + 0,15 x 94,9 = 96,1.

Også her er overensstemmelsen tilfredsstillende og den spektrale metoden gir muligheten av å beregne en kompleks

blanding uten å måtte benytte blandingstabeller som er vanskelige å utarbeide slik at de dekker alle mulige tilfeller.

- 5 Denne fremgangsmåten er anvendbar uansett antall av komponenter i blandingen.

Eksempel 3 - En blanding innbefattende metyl-tert.butyleter MTBE

- 10 En vilkårlig blanding av 0,15 MTBE i 0,85 matrise S (motor-drivstoff) ble fremstilt.

Absorbansene for henholdsvis matrisen S og denne spesielle blandingen er vist i de to første kolonnene i nedenstående tabell:

Absorbansene detekteres ved de samme frekvensene som de i eksempel 1.

Absorbans		
Motordrivstoff	0,85 S + 0,15 MTBE	MTBE i blanding
D ₁ : 0,06286	0,05343	0,0000
D ₂ : 0,07794	0,07979	0,09027
25 D ₃ : 0,80927	0,88224	1,29574
D ₄ : 0,37732	0,38817	0,44965
D ₅ : 0,53719	0,52851	0,47932
D ₆ : 0,68849	0,65069	0,43649
D ₇ : 0,40019	0,42958	0,59612

30 Den tredje kolonnen i tabellen tilsvarer de teoretiske spektra for MTBE i matrise S oppnådd ved anvendelse, for hver av syv frekvensene, av formel (3) ovenfor med $f = 0,15$. Således,

$$35 \quad D_{ia} = \frac{D_{im} - 0,85 D_{is}}{0,15} \quad (8)$$

Fra det teoretiske spektrum vist i kolonnen ytterst til høyre, beregnet fra formel (8), og ved anvendelse av formel (7), kan SMI for MTBE utledes i relasjon til matrise S.

$$SMI_{MTBE} = 110,1$$

Det er da mulig å beregne de forskjellige blandinger av S + MTBE eller S + MTBE + X.

Således gir 10% av MTBE kombinert med S et oktantall beregnet ifølge oppfinnelsen med følgende verdier:

Blanding S:

RON motor = 97,1

RON beregnet = 97,4

Blanding av 10% MTBE i S:

RON motor = 98,6

RON beregnet = $0,1 \times 110,1 + 0,9 \times 97,4 = 98,67$

Blanding av 5% MTBE i S:

RON motor = 97,9

RON beregnet = $0,05 \times 110,1 + 0,95 \times 97,4 = 98,04$.

Eksempel 4 - En ternær blanding inneholdende et oksygenat

Fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen kan også behandle ternære blandinger som innbefatter et oksygenat.

Således ble blanding X, dannet av: $X = 0,7(S) + 0,1(MTBE) + 0,2(A)$ hvor komponent A er den i eksempel 1, målt i motoren ved hjelp av to suksessive målinger som ga teoretiske oktantall på 99,9 og 100,2, respektivt.

Beregningen ved bruk av foreliggende fremgangsmåte gir: $0,7 \times 97,1 + 0,1 \times 110,1 + 0,2 \times 105 = 99,98$ hvilken verdi ligger mellom de to motormålingene.

Eksempel 5 - Formulering av et motordrivstoff

Fremgangsmåten ifølge foreliggende oppfinnelse anvendes for fremstilling av et motordrivstoff fra forskjellige hydrokarbonbasismaterialer.

5 I eksempelet anvendes fire basismaterialer:

B_1 = en bensin fra en katalytisk hvirvelsjiktkraker

B_2 = et reformat

B_3 = en atmosfærisk destillasjonsbensin

B_4 = en dampkraker-bensin.

10 Absorbansverdiene oppnådd ved de samme frekvensene som før er som følger:

Absorbans

	B_1	B_2	B_3	B_4
15 D_1	0,0475	0,0877	0,0109	0,1972
D_2	0,0681	0,0488	0,0384	0,0682
D_3	0,8471	0,7541	0,9697	0,5278
D_4	0,3791	0,3614	0,5842	0,3252
20 D_5	0,5360	0,5923	0,3692	0,8941
D_6	0,7275	0,6238	0,6838	0,4736
D_7	0,4327	0,3745	0,4958	0,2966
$RON_{0,4}$	95,3	98,8	73,5	101,4
25 SMI	96,6	100	83,6	109

For en blanding M med følgende volumandeler:

30 35% B_1

10% B_2

30% B_3

25% B_4

ved bruk av foreliggende fremgangsmåte, oppnåes et teoretisk oktantall 96,16 som lar seg sammenligne med eksperimentverdiene 96 og 96,2.

For en blanding M' med følgende volumandeler:

30% B₁

10% B₂

40% B₃

5 20% B₄

oppnåes en beregnet verdi på 94,24 sammenlignet med eksperimentverdier på 94,2 og 94,5.

Eksempel 6

10 Cetanverdien for en gassolje bestemmes fra absorbanmålinger oppnådd fra NIR-spekteret til komponentene i blandingen.

De fire komponentene i blandingen har følgende egenskaper:

15 A: gassolje oppnådd fra den atmosfæriske destillasjon av en råolje:

cetanindeks: 50,9

densitet ved 15°C: 0,8615

B: lett gassolje oppnådd fra en katalytisk krakkingsenhet med hvirvelsjikt:

20 cetanindeks: 25,7

densitet ved 15°C: 0,9244

C: forblanding av forskjellige bestandddeler:

cetanindeks: 48,7

densitet ved 15°C: 0,8487

25 D: viskositetsnedbrutt lett gassolje:

cetanindeks: 45,8

densitet ved 15°C: 0,8587

Cetanindekset ble bestemt ifølge standardmetoden ASTM D976.

30

De spektroskopiske målingene utført på hver av komponentene i blandingen, og på en blanding inneholdende følgende volumandeler av hver av komponentene: 20% av A, 30% av B, 40% av C, 10% av D, gir følgende resultater for de fire benyttede
35 frekvenser:

Frekvenser
i cm^{-1}

Absorbans

	Komponent A	Komponent B	Komponent C	Komponent D	
5	$F_1 = 4640$	$D_1 = 0,02211$	$D_1 = 0,08097$	$D_1 = 0,02229$	$D_1 = 0,0241$
	$F_2 = 4485$	$D_2 = 0,04270$	$D_2 = 0,07896$	$D_2 = 0,04282$	$D_2 = 0,05629$
	$F_3 = 4260$	$D_3 = 0,80297$	$D_2 = 0,58219$	$D_2 = 0,78483$	$D_3 = 0,76965$
	$F_4 = 4135$	$D_4 = 0,53053$	$D_4 = 0,36406$	$D_4 = 0,51901$	$D_4 = 0,49267$
10	Målt cetan indeks	50,9	25,7	48,7	45,8
	SMI	50,2	14,6	48,9	45,1

15 SMI er spektralblandingsindekset for bestanddelen betraktet for cetanindekset.

Den oppnåes fra et uttrykk av type (2) som i tilfellet for cetanindekset er:

$$20 \quad \text{SMI} = 25,0093 - 182,349 D_1 - 437,405 D_2 + (9) \\ 193,148 D_3 - 202,099 D_4$$

25 Den lineære kombinasjon av SMI ifølge andelene av de forskjellige komponentene, ifølge en ligning av type (5) gir følgende uttrykk:

Cetanindeks beregnet for blandingen,
 $(0,2 \times 50,2) + (0,3 \times 14,6) + (0,4 \times 48,9) + (0,1 \times 45,1) = 38,5.$

30 Cetanindekset for blandingen bestemt ifølge standardmetoden er 38,3.

Eksempel 7

35 Som i eksempel 6 beregnes cetanindekset for en blanding fra NIR-spekteret til komponentene:

A: Viskositetsnedbrutt lett gassolje:
 cetanindeks: 45,7

densitet: 0,8587

B: tung gassolje fra en katalytisk krakkingsenhet med
hvirvelsjikt:

cetanindeks: 28,2

densitet: 0,9731

C: forblending av gassoljer:

cetanindeks: 48,8

densitet: 0,8487

De spektroskopiske målingene utført på hver av komponentene i
en blanding bestående av likt volum av hver komponent gir
følgende resultater:

Frekvenser i cm^{-1}	Absorbans		
	Komponent A	Komponent B	Komponent C
$F_1 = 4640$	0,0241	0,08111	0,02229
$F_2 = 4485$	0,05629	0,07515	0,04282
$F_3 = 4260$	0,76965	0,61857	0,78483
$F_4 = 4135$	0,49267	0,40121	0,51901
Målt cetanindeks	45,7	28,2	48,7
SMI	45,1	15,7	48,9

SMI for hver komponent oppnåes fra ligning (9).

Cetanindekset (CI) for blandingen oppnåes fra uttrykket som
forbinder SMI-verdiene og andelen av hver komponent i denne
blanding:

$$CI = (1/3 \cdot 45,1) + (1/3 \cdot 15,7) + (1/3 \cdot 48,9)$$

dvs. 36,5. Cetanindekset til blandingen bestemt ved standard-
metoden er 37,0.

Eksempel 8

Sløringspunktet for en gassolje bestemmes fra absorbans-

målingene utført ved NIR-spektroskopi på komponentene i blandingen.

Komponentene i blandingen har følgende egenskaper:

- 5 A: tung gassolje fra en katalytisk krakkingsenhet med
hvirvelsjikt:
sløringspunkt: +4°C.
- B: lett gassolje fra en enhet for atmosfærisk destillasjon
av råolje:
10 sløringspunkt: -20°C.
- C: gassolje fra en vakuumdestillasjonsenhet:
sløringspunkt: +15°C.

Blandingen består av 20 volum-% av A, 50 % av B og 30% av C.

- 15 Absorbansen for hver av bestanddelene og for blandingen
bestemmes ved de seksten nedenfor angitte frekvenser.

SMI-verdien tilsvarende sløringspunktet (CP) beregnes fra
følgende uttrykk:

- 20
$$\text{SMI (CP)} = -35,98 + 270,495 \text{ D4210} - 124,15 \text{ D4135} - 98,78 \text{ D4100}$$

25

30

35

	Frekvenser i cm^{-1}	Absorbans		
		A	B	C
5	F ₁ 4670	0,05230	0,01689	0,01522
	F ₂ 4640	0,08731	0,0264	0,02803
	F ₃ 4615	0,0987	0,0354	0,03562
	F ₄ 4585	0,08897	0,03576	0,03461
	F ₅ 4485	0,0781	0,04582	0,0461
10	F ₆ 4385	0,44065	0,48046	0,4648
	F ₇ 4332	0,77412	0,95276	0,94117
	F ₈ 4305	0,61996	0,65619	0,64443
	F ₉ 4260	0,59625	0,78596	0,78001
	F ₁₀ 4210	0,4214	0,5382	0,53771
15	F ₁₁ 4170	0,42882	0,56386	0,56222
	F ₁₂ 4135	0,38635	0,51699	0,51842
	F ₁₃ 4100	0,37511	0,49663	0,49375
	F ₁₄ 4060	0,44674	0,54552	0,53138
	F ₁₅ 4040	0,35102	0,42414	0,41762
20	F ₁₆ 4405	0,35392	0,37502	0,35613
	Målt sløringspunkt	+4°C	-20°C	+15°C
	SMI	-7	-3,6	-3,7

Sløringspunktet for blandingen oppnåes fra SMI-verdiene til bestanddelene ved bruk av uttrykket:

$$\text{Sløringspunkt} = 0,2 \times (-7) + 0,5 \times (-3,6) + 0,3 \times (-3,7) = -4,3^{\circ}\text{C}$$

Sløringspunktet for blandingen, målt ifølge standard NFT 60105 er -4°C .

Eksempel 9

En brennolje ble formulert fra en restblanding oppnådd fra viskositetsnedbrytningen av et arabisk tungt råmateriale og et fortynningsmiddel F1 (gassolje oppnådd ved destillasjon ved atmosfæretrykk). Egenskapene til den viskositetsnedbrutte

oljen er som følger: densitet 1,0801, viskositet 500 cSt ved 125°C.

Blandingen fremstilles i følgende mengdeforhold: 60 volum-% rest (bestanddel A) og 40% fortynningsmiddel (bestanddel B).

Spektrene til produktene gir følgende verdier for absorban- sene:

10	Frekvenser i cm^{-1}	Absorbans	
		Komponent A	Komponent B
	F ₁ 4670	0,00876	0,01109
	F ₂ 4640	0,02443	0,02091
15	F ₃ 4615	0,03194	0,02669
	F ₄ 4585	0,03234	0,02731
	F ₅ 4485	0,02736	0,04104
	F ₆ 4385	0,29355	0,46874
	F ₇ 4332	0,58201	0,96016
20	F ₈ 4305	0,40189	0,65164
	F ₉ 4260	0,45314	0,80883
	F ₁₀ 4210	0,29417	0,55592
	F ₁₁ 4170	0,2807	0,58335
	F ₁₂ 4135	0,24544	0,53974
25	F ₁₃ 4100	0,20957	0,51335
	F ₁₄ 4060	0,24392	0,5507
	F ₁₅ 4040	0,17575	0,43174
	F ₁₆ 4405	0,21313	0,35756

Spektralblandingsindekset for oppløsningsmiddelevnen til IPSR-resten bestemmes ved bruk av følgende uttrykk:

$$\text{IPSR} = 315,37 + 1823 D_1 - 1676,95 D_3 - 432,65 D_7 + 370 D_5 \quad (10)$$

hvor: D_1 er absorbanse ved de betraktete frekvenser F_1 .

Blandingsindeksen for oppløsningsmiddelevnen oppnådd for komponent A er 104,8.

Spektralblandingsindeksen for oppløsningsmiddelevnen til fortynningsmiddelet (IPSF) bestemmes ved bruk av følgende ligning (11):

$$\begin{aligned} \text{IPSF} = & 218,59 + 548,31 D_2 - 1104,74 D_3 + 470,06 D_4 - \\ & 50,65 D_5 - 26,26 D_6 - 77,65 D_9 - 165,56 D_{10} - \\ & 959,48 D_{11} - 351,95 D_{12} + 1042 D_{13} + 487,7 D_{14} - \\ & 378,2 D_{15} - 2011,4 D_{13} \cdot D_{14} + 905,5 D_{10} \cdot D_{13} + \\ & 1285,5 D_{10} \cdot D_{14} + 1500,8 D_3 \cdot D_{10} \end{aligned}$$

Blandingsindeksen for oppløsningsmiddelevnen oppnådd for komponent B ifølge ligning (11) er 41,1.

Spektralblandingsindeksen for utfellingsevnen til resten (ICR) bestemmes fra ligning (12).

$$\text{ICR} = 339,35 + 845,7 D_1 - 432,65 D_7 \quad (12)$$

Blandingsindeksen for utfellingsevnen til resten (komponent A) bestemt fra ligning (12) er 94,9.

Beregning av stabiliteten til brennstoffet oppnådd ifølge ligning (6) gir $S = 15,6$.

Det resulterende brennstoff vil ikke være stabilt - hvilket bekreftes eksperimentelt ved HFT-testen utført på sluttproduktet.

Eksempel 10

Et brennstoff skal formuleres fra komponentene benyttet i eksempel 9 og fra et supplerende fortynningsmiddel F_2 (en tung gassolje oppnådd fra en katalytisk krakkingsenhet med hvirvelsjikt).

Absorbansverdiene for de betraktete frekvenser er gitt nedenfor for denne nye komponenten:

	Frekvenser i cm ⁻¹	Absorbans Fortynnings- middel F ₂ Komponent C	Frekvenser i cm ⁻¹	Absorbans Fortynnings- middel F ₂ Komponent C
5	F ₁ 4670	0,06646	F ₉ 4260	0,52437
	F ₂ 4640	0,11133	F ₁₀ 4210	0,37553
	F ₃ 4615	0,12978	F ₁₁ 4170	0,37963
	F ₄ 4585	0,11513	F ₁₂ 4135	0,33693
	F ₅ 4485	0,09335	F ₁₃ 4100	0,33919
10	F ₆ 4385	0,45794	F ₁₄ 4060	0,43509
	F ₇ 4332	0,7056	F ₁₅ 4040	0,33422
	F ₈ 4305	0,63896	F ₁₆ 4405	0,37942

Blandingsandelene er som følger:

- 15
 Komponent A - rest: 60 volum-%
 Komponent B - fortynningsmiddel F₁: 30 volum-%
 Komponent C - fortynningsmiddel F₂: 10 volum-%

20
 Følgende egenskaper bestemmes fra ligningene gitt i eksempel 9:

IPSR (blandingsindeks for oppløsningsmiddelevnen til rest A) = 104,8 (ligning 10)

ICR (blandingsindeks for utfellingskapasiteten til rest A) = 94,8 (ligning 12)

25
 IPSF₁ (blandingsindeks for oppløsningsmiddelevnen til fortynningsmiddelet F₁ - komponent B) = 41,1 (ligning 11)

30
 IPSF₂ (blandingsindeks for oppløsningsmiddelevnen til fortynningsmiddelet F₂ - komponent C) = 128,8 (ligning 11)

Beregning av stabiliteten for brennstoffet ved bruk av ligning (6) gir S = -6,7.

35
 Instabiliteten til brennstoffet oppnådd ved blanding av komponenter A, B og C i de angitte mengdeforhold bekreftes av

resultatet fra HFT-testen som viser at det resulterende produkt er utenfor spesifikasjonen.

Andelen av fortynningsmiddelet F_2 som skal benyttes for oppnåelse av et stabilt sluttprodukt kan bestemmes fra følgende ligninger:

$$\begin{aligned} \text{Uttrykk (S) med } f_R &= 0,6 &&) \\ f_{F1} + f_{F2} &= 0,4 &&) \\ S &\text{ større enn } 0 &&) \end{aligned}$$

så oppnåes: f_{F2} større enn 17,8%.

Stabiliteten beregnet for en blanding inneholdende 18% av fortynningsmiddelet F_2 gir $S = +0,2$.

Eksperimentell bekreftelse ved HFT-testen og det optiske mikroskop er tilfredsstillende.

Eksempel 11

Mengdene som skal blandes for oppnåelse av et produkt av viskositet bestemt fra spektroskopiske data oppnådd ved analyse av komponentene i blandingen skal beregnes.

En rest (komponent D) anvendes, og dens egenskaper er som følger:

densitet = 1,036

viskositet ved 100°C = 598 cSt

Denne blandes med fortynningsmiddelet F_2 i eksempel 10 (bestanddel C) for å oppnå et brennstoff med en viskositet på 80 cSt ved 100°C .

Spekteret for komponent D gir følgende verdier:

	Frekvenser i cm^{-1}	Absorbans Rest Komponent D	Frekvenser i cm^{-1}	Absorbans Rest Komponent D
	F ₁ 4670	0,01284	F ₉ 4260	0,51767
5	F ₂ 4640	0,03023	F ₁₀ 4210	0,34506
	F ₃ 4615	0,03825	F ₁₁ 4170	0,33794
	F ₄ 4585	0,03767	F ₁₂ 4135	0,30178
	F ₅ 4485	0,03565	F ₁₃ 4100	0,26383
	F ₆ 4385	0,32445	F ₁₄ 4060	0,29733
10	F ₇ 4332	0,63721	F ₁₅ 4040	0,22409
	F ₈ 4305	0,45729	F ₁₆ 4405	0,22774

Mengdene av komponentene D og av fortynningsmiddelet F₂ kan bestemmes ved bruk av følgende ligninger hvori SMI (V100)_R og SMI (V100)_F betegner spektralblandingsindeksen for henholdsvis viskositeten ved 100°C, resten og fortynningsmiddelet, oppnådd fra:

$$\text{SMI (V100)}_i = 1031,04 - 4175,9 D_1 + 9201,6 D_4 - 4074,7 D_{14} \quad (13)$$

$$f_R + f_{F2} = 1 \quad (14)$$

$$\text{SMI (V100)}_R f_R + \text{SMI (V100)}_F f_F = 80 \quad (15)$$

Ligning (13) gir:

$$\text{SMI (V100)}_R = 112,5 \quad \text{SMI (V100)}_F = 40$$

Fra ligninger (14) og (15) oppnåes:

$$f_R = 55,5\%$$

$$f_F = 44,5\%$$

Den eksperimentelle bekreftelse gir en viskositet på 79,8 cSt dersom resten og fortynningsmiddelet blandes i mengdene beregnet for en nødvendig viskositet på 80 cSt.

P a t e n t k r a v

1.

5 Fremgangsmåte for bestemmelse av en eller flere fysikalske egenskaper til et flytende hydrokarbonblandingsprodukt, k a r a k t e r i s e r t v e d følgende trinn:

(a) bestemmelse av absorbanse med et infrarødt spektrometer ved et visst antall frekvenser i spektralområdet 16667-3840 cm^{-1} for komponentene i blandingen eller vilkårlige blandinger, ved å starte fra en definert basislinje,

10 (b) bestemmelse av en spektralblandingsindeks $(\text{SMI})^J_I$ for hver komponent I og hver egenskap J ved anvendelse av en korrelasjon med de målte absorbanseverdiene, idet denne korrelasjonen bestemmes eksperimentelt ved multivariabel regresjon, avhengig av typen av benyttet spektrometer, den aktuelle egenskap og de benyttede frekvenser, og

20 (c) beregning av den aktuelle egenskap J til produktet ved anvendelse av et lineært uttrykk,

$$J = f_a \cdot \text{SMI}^J_a + f_b \cdot \text{SMI}^J_b + f_c \cdot \text{SMI}^J_c \dots + f_o \cdot \text{SMI}^J_o$$
 hvor hvert ledd er produktet av spektralblandingsindeksen $(\text{SMI}^J_a \dots)$ til egenskapen J ved en komponent (a ...) og volumfraksjonen $(f_a \dots)$ av denne komponent.

25 2.

Fremgangsmåte ifølge krav 1, k a r a k t e r i s e r t v e d at blandingsutstyret datamaskinstyres ved hjelp av et tilbakekoblet styringssystem for endring av blandingsbetingelser som respons på variasjoner i egenskapen til produktet fra den ønskede verdi, fra bestemmelsen av nær-infrarødt spektrere til komponentene.

3.

35 Fremgangsmåte ifølge krav 1 eller 2, k a r a k t e r i s e r t v e d at frekvensene er i spektralområdet 12500-3840 cm^{-1} .

4.

Fremgangsmåte ifølge krav 3, k a r a k t e r i s e r t
v e d at frekvensene er i spektralområdet $4760 - 4000 \text{ cm}^{-1}$.

5 5.

Fremgangsmåte ifølge krav 4, k a r a k t e r i s e r t
v e d at frekvensene som benyttes velges fra følgende
liste:

	4670 cm^{-1}
10	4640 cm^{-1}
	4615 cm^{-1}
	4585 cm^{-1}
	4485 cm^{-1}
	4405 cm^{-1}
15	4385 cm^{-1}
	4332 cm^{-1}
	4305 cm^{-1}
	4260 cm^{-1}
	4210 cm^{-1}
20	4170 cm^{-1}
	4135 cm^{-1}
	4100 cm^{-1}
	4060 cm^{-1}
	4040 cm^{-1}

25

6.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående
krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at basislinjen tas
som 4780 cm^{-1} .

30

7.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående
krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at spektrometeret
kobles til en signalbehandlingsanordning for å gi adgang til
35 numerisk behandling av spekteret.

8.

Fremgangsmåte ifølge krav 7, k a r a k t e r i s e r t
v e d at behandlingen foretas ved Fourier-transformasjon.

9.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående
krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at den er on-line
og i reell tid.

10.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående
krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at spektral-
blandingsindeksen til en egenskap ved en komponent bestemmes
direkte fra absorbansene (D_i) oppnådd for denne komponenten
alene ved anvendelse av uttrykket:

$$J = C + \sum_{i=1}^n p_i D_i + \sum_{i,j=1}^n q_{ij} D_i \cdot D_j + \sum_{i,j=1}^n r_{ij} D_i / D_j$$

hvor J er produktets egenskap, C er en konstant, D_i og D_j er
absorbansverdier eller optiske densiteter, p er lineære
uttrykk, q er kvadratiske uttrykk og r er homografiske
uttrykk.

11.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående
krav 1-9, k a r a k t e r i s e r t v e d at spektral-
blandingsindeksen til en egenskap ved en komponent bestemmes
ved fremstilling av en vilkårlig blanding med en volum-
fraksjon (f) av denne komponenten (a) i en matrise S,
bestemmelse av nærinfrarød-spektrene for matrisen (D_{is}) og
blandingen (D_{im}) respektivt, beregning av en teoretisk
absorbans (D_{ia}) for hver frekvens (F_i) ved hjelp av ut-
trykket:

$$D_{ia} = \frac{D_{im} - (1-f)D_{is}}{f}$$

og anvendelse av disse teoretiske absorbansene i uttrykket:

$$J = C + \sum_{i=1}^n p_i D_i + \sum_{i,j=1}^n q_{ij} D_i \cdot D_j + \sum_{i,j=1}^n r_{ij} D_i / D_j$$

5 hvor J er produktets egenskap, C er en konstant, D_i og D_j er absorbansverdier eller optiske densiteter, p er lineære uttrykk, q er kvadratiske uttrykk og r er homografiske uttrykk.

10 12.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at de beregnede egenskapene er ikke-additive egenskaper ved komponentene.

15 13.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at det flytende hydrokarbonblandingsproduktet ytterligere inneholder et flytende organisk additiv.

20

14.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av de foregående krav, k a r a k t e r i s e r t v e d at produktet er et motordrivstoff og at egenskapene som bestemmes velges fra
25 følgende: teoretisk oktantal og motoroktantal (blyfri og blytilsatt), densiteten, damptrykket og destillasjons-egenskapene.

30

35

15.

Fremgangsmåte ifølge krav 14, k a r a k t e r i s e r t
v e d at frekvensene velges fra følgende:

5 4670 cm^{-1}
 4485
 4332
 4305
 4210
10 4100
 4060

16.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av kravene 1 til
15 13, k a r a k t e r i s e r t v e d at det flytende
hydrokarbonblandingsproduktet er en dieselolje og at
egenskapen som bestemmes velges fra følgende: sløringspunkt,
hellepunkt, filtrerbarhet, cetanindeks, destillasjonsegen-
skaper, flammepunkt og viskositet.

20

17.

Fremgangsmåte ifølge et hvilket som helst av kravene 1 til
13, k a r a k t e r i s e r t v e d at det flytende
hydrokarbonblandingsproduktet er en brennolje og at egen-
25 skapen som bestemmes velges fra følgende: densitet, visko-
sitet, termisk stabilitet, destillasjonsegenskaper og
flammepunkt.

18.

30 Apparat omfattende en datamaskin forbundet med et infrarødt
spektrometer for bestemmelse av spektra i relasjon til en
operasjon som innebærer blanding av tilførsler i minst to
tilførselsledninger for oppnåelse av et flytende hydrokarbon-
blandingsprodukt, k a r a k t e r i s e r t v e d at
35 spektrometeret er forbundet med tilførselsledningene og
datamaskinen er programmert på en slik måte at produktets
egenskap kan bestemmes kontinuerlig i sanntid.

19.

Apparat ifølge krav 18, k a r a k t e r i s e r t v e d
at det innbefatter et tilbakekoblet styresystem for data-
5 maskinstyring av blandingsutstyret som respons på variasjoner
i nevnte egenskap fra den ønskede verdi, fra bestemmelsen av
nærinfrarødspekteret til komponentene i blandingen.

10

15

20

25

30

35