

51  
20)



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



EXAMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUIMICA

SIMULACION DEL PROCESO DE REFORMACION  
CATALITICA DE NAFTAS UTILIZANDO EL  
SIMULADOR HYSIM

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A :  
CRISTINA FLORES ORTIZ



MEXICO, D. F.

1998.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

268448



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

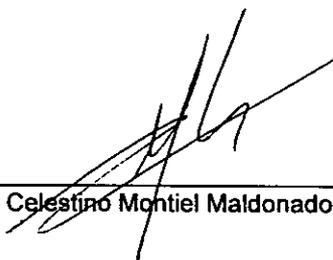
**Jurado Asignado:**

Presidente	Prof. Martín Hernández Luna
Vocal	Prof. Celestino Montiel Maldonado
Secretario	Prof. Rafael Herrera Nájera
1 <sup>er</sup> Suplente	Profa. Ma. Rafaela Gutiérrez Lara
2 <sup>do</sup> Suplente	Prof. Martín Rivera Toledo

Sitio donde se desarrolló el tema:

Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos  
Edificio de Ingeniería Química, Conjunto E  
Facultad de Química  
UNAM

Asesor del tema:



Ing. Celestino Montiel Maldonado

Sustentante:



Cristina Flores Ortiz

**DEDICATORIA:**

*Los sueños se realizan cuando alguien tiene la intención de hacerlos y los crea para convertirlos en realidad.*

**A mi Mamá**

*Por todo el apoyo que me brindaste y por ser un ser muy valioso.*

**A mi hermana Edith**

*Por la confianza y alegría que me has dado siempre.*

**A mi Papá**

*Por la ayuda de llegar hasta aquí.*

**A mis amigos**

*Por una amistad sincera y sin límite.*

**Al Ing. Celestino Montiel**

*Por el apoyo brindado para realizar este trabajo.*

*A todos los que de alguna contribuyeron para mi formación profesional.*

# Indice

---

1.- Introducción	p 3
2.- Generalidades	
Petróleo	5
Reformación Catalítica de Naftas	13
Distribución de Hidrocarburos	15
Descripción de los Procesos de Reformación Catalítica	19
Reactores de Reformación	29
Catalizadores de Reformación	31
Reacciones Químicas que se efectúan el la Reformación	38
Velocidades de Reacción	42
Variables del proceso	43
Objetivo	46
3.- Descripción de la Planta	
Sección de Carga y Reacción	48
Compresión de Hidrógeno	49
Sección de Estabilización	50

**4.- Modelos Cinéticos**

Smith	52
Krane	55
Hennigsen y Bungaard-Nielson	58
Ramage, Graziani y Krambeck	60
Marin y Froment	64
Padmavathi-Chaudhuri	67

**5.- Modelado del Reactor**

Balance de Materia	71
Balance de Energía	81
Estructura del programa REFCRIS	87

**6.- Simulación de la Planta** 90

**7.- Análisis de Resultados y Conclusiones** 99

**8.- Bibliografía** 117

# 1.- Introducción

---

El campo de la Ingeniería Química es muy variado, va desde el área de Operaciones de una Industria, así como el área de Procesos, Diseño de Maquinaria y Equipo, Planeación y Realización de Proyectos de Nuevas Plantas y Procesos, Investigación y Desarrollo de Nuevos Productos, etc.

La meta principal en la Ingeniería Química es buscar la eficiencia en el diseño y operación de procesos.

La Reformación Catalítica de Naftas es uno de los procesos más importantes dentro del sistema de refinación del petróleo.

Una forma de realizar el análisis de una planta es con la ayuda de un simulador de proceso el cual es una herramienta que facilita y reduce el tiempo de cálculo, con el que se obtiene un estimado del comportamiento del proceso. De tal manera que se pueda realizar un análisis de sensibilidad de las variables del mismo , para identificar las de mayor importancia dentro del proceso.

En la actualidad los modelos de proceso - que no son otra cosa que herramientas matemáticas , usualmente en forma de software - los cuales nos permiten predecir el comportamiento del proceso , una de sus mayores aplicaciones se encuentra dentro de las refinerías. Estos estudios dan una base para el dimensionamiento y selección de nuevas unidades de proceso, modificación de las unidades ya existentes , así como parámetros para el desarrollo de estrategias de proceso a seguir dentro de la planta.

En el capítulo 2, Generalidades, se presenta una descripción detallada del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas y el objetivo del presente trabajo.

En el capítulo 3, Descripción de la Planta, se da una descripción de la Planta Reformadora de Naftas No.1 de Tula Hidalgo, su estructura y condiciones de operación.

En el capítulo 4, Modelos Cinéticos, se describen los modelos cinéticos del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas estudiados.

En el capítulo 5, Modelado del Reactor, se describe la cinética seleccionada para el reactor y se presentan los Balances de Materia y Energía.

En el capítulo 6, Simulación de la Planta, se describe como se llevó a cabo la simulación de la Planta Reformadora de Naftas No. 1 de Tula Hidalgo.

En el capítulo 7, Análisis de Resultados y Conclusiones, se presentan los resultados obtenidos y las conclusiones del trabajo desarrollado.

En el capítulo 8, Bibliografía, se presenta una lista de referencias utilizadas para la realización de este trabajo.

## 2.- Generalidades

---

### Petróleo

#### **Origen**

Proveniente del latín petroleum ( Petra-piedra y oleum-aceite), la palabra petroleum significa aceite de piedra. Es un compuesto de hidrocarburos, básicamente una combinación de carbono e hidrógeno.

El petróleo corresponde a un grupo de sustancias bituminosas muy abundantes en la naturaleza, que se encuentran en variadas formas y reciben diversas denominaciones como petróleo en bruto, aceite de piedra, nafta, asfalto, o bien se halla mezclado con materias minerales, como ocurre en las pizarras bituminosas.

A medida que se perfeccionaron las técnicas del análisis geológico y se acumuló información al respecto, se ha dado paso a teorías de formación orgánica que determinan que el petróleo es producto de la descomposición de organismos vegetales y animales que existieron en ciertos períodos del tiempo geológico y que fueron sometidos a enormes presiones y elevadas temperaturas.

## **Composición básica**

Al analizar petróleo de procedencias diversas, de manera general puede decirse que lo forman los siguientes elementos químicos: de 76 a 86% de carbono y de 10 a 14% de hidrógeno.

A veces contiene algunas impurezas mezcladas como oxígeno, azufre y nitrógeno. También se han encontrado huellas de compuestos de hierro, níquel, vanadio y otros metales.

El petróleo se encuentra en el subsuelo, impregnado de formaciones de tipo arenoso y calcáreo. Asume los tres estados físicos de la materia: sólido, líquido y gaseoso, según su composición y la temperatura y presión a que se encuentran.

Su color varía entre el ámbar y el negro; su densidad es menor que la del agua en estado gaseoso .

En el subsuelo se encuentra por lo general encima de una capa de agua, hallándose en la parte superior una de gas.

Es necesario que concurren cuatro condiciones para dar lugar a un yacimiento donde se acumule petróleo y gas:

- Una roca almacenadora porosa y permeable, en forma tal que bajo presión, el petróleo pueda moverse a través de sus poros de tamaño microscópico.
- Una roca impermeable que funcione como sello para que evite el escape del petróleo a la superficie.

- El yacimiento debe tener forma de "trampa"; es decir, que las rocas impermeables se encuentren dispuestas en tal forma que el petróleo no pueda moverse hacia los lados.
- Deben existir rocas cuyo contenido orgánico se haya convertido en petróleo por efecto de la presión y de la temperatura.

### **Importancia**

El petróleo empezó a utilizarse comercialmente a mediados del siglo XIX como lubricante y materia prima para alumbrado hasta el fin de la Primera Guerra Mundial. En ese entonces los principales centros de producción se encontraban en Rusia y los EUA, aunque ya comenzaba a desarrollarse la producción del Medio Oriente.

La expansión del automóvil favoreció el surgimiento de la producción, con lo que comenzó su carrera hacia la condición de principal fuente de energía primaria. Después de la Segunda Guerra Mundial completó sus aplicaciones con las de materia prima de la industria petroquímica.

De esta manera, el petróleo se vinculó estrechamente a los sectores productivos de la economía mundial, constituyendo una de las bases más importantes para la recuperación industrial durante la postguerra.

Por otro lado, a partir de 1970 la acción mancomunada de los principales productores árabes produjo un fuerte aumento de precios que se combinó con una serie de nacionalizaciones de los yacimientos petroleros, lo que supuso un aumento significativo de las rentas económicas de los productores. En este sentido, el petróleo no sólo se constituyó como el motor del crecimiento de

los países capitalistas, sino que también se erigió como una de las principales fuentes de ingresos de los países productores, en su mayoría países en vías de desarrollo.

### **Procesos a los cuales se somete el petróleo**

- Refinación

Es una serie de procesos físicos y químicos a los que se somete el petróleo crudo, la materia prima, para obtener de él por destilación, los diversos hidrocarburos o las familias de hidrocarburos con propiedades físicas y químicas bien definidas.

Después de la separación se aplican a los derivados así obtenidos diversos procesos de conversión para obtener de ellos productos más valiosos y éstos se someten finalmente a tratamientos con ácidos, álcalis, solventes extractivos, catalíticos con hidrógeno y reactivos químicos en general, a fin de eliminar las impurezas que los hacen impropios para su empleo comercial.

El aceite crudo, de muy diversa constitución según el origen (de base asfáltica, nafténica o mezclada), tiene rendimientos variables en el proceso de destilación y de fraccionamiento, a determinadas condiciones de presión y temperatura.

- Destilación del petróleo crudo

El petróleo crudo está formado por varios hidrocarburos que comprenden desde el gas licuado hasta el asfalto. El procedimiento utilizado consiste en calentar el petróleo crudo a una temperatura en que los componentes más ligeros se evaporan, para ser enseguida condensados a diferentes temperaturas.

- **Procesos de desintegración**

El residuo de la destilación del petróleo crudo se somete a una nueva destilación al alto vacío para separar componentes menos volátiles, que de acuerdo con las propiedades del petróleo crudo de que se trate serán destinados a lubricantes o a ser desintegrados catalíticamente.

Los destilados al vacío que no se dedican a lubricantes, se desintegran catalíticamente para convertirse en productos comerciales; gas licuado, gasolinas de alto índice de octano y combustible diesel.

- **Procesos de purificación**

Estos procesos eliminan de los productos obtenidos por destilación o por desintegración, algunos compuestos que les causan propiedades inconvenientes. Los principales contaminantes en estos procesos son los compuestos derivados del azufre.

### **El petróleo mexicano en el mercado internacional**

Durante el período 1976-1981, la economía mexicana experimentó un proceso acelerado de expansión que se evidenció en tasas de crecimiento promedio anual de 7.4% del PIB. Paralelamente a este crecimiento acelerado de la economía, se impulsa el desarrollo del sector de hidrocarburos, en especial la extracción y exportación de petróleo crudo.

Después de registrar exportaciones marginales de petróleo crudo entre 1938, año de la expropiación petrolera, y 1965, y cancelarias entre 1966 y 1973, a

partir de 1975 se inicia un aumento gradual y significativo de las exportaciones que las llevó de un promedio de casi 95 mil barriles diarios en 1975 a un máximo de 1,500 miles de barriles diarios en 1983.

A partir de ese año y hasta 1995, el volumen de exportación de crudo mexicano redujo gradualmente en la medida en que el consumo interno, a través del sistema de refinación nacional, fue aumentando. No fue sino hasta 1996 y 1997 en que las exportaciones retomaron nuevamente un nivel de alrededor de 1,500 miles de barriles diarios, gracias a los esfuerzos en las actividades de exploración y producción emprendidos en esos años.

### **Tipos de petróleo y la producción en México**

A nivel mundial el petróleo crudo producido se clasifica de acuerdo a su densidad API, escala tradicionalmente utilizada en la industria petrolera mundial para expresar la densidad de los hidrocarburos líquidos, calculada de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$\text{Grados API} = 141.5 / \text{densidad relativa} - 131.5$$

La densidad relativa de la fórmula corresponde al cociente de la densidad del líquido y la densidad del agua, medidas ambas a una temperatura de 60 grados Fahrenheit.

Igualmente, en la clasificación se considera el contenido de azufre del petróleo crudo. El crudo se considera habitualmente como una categoría de bajo azufre si contiene menos de 0.5% de azufre. En la industria petrolera los crudos con bajo contenido de azufre se denominan tradicionalmente como "dulces" y los de alto contenido como "amargos".

En general existen dos tipos de crudo: ligero y pesado, considerando que a mayor gravedad y menor densidad es más ligero el crudo y, por el contrario, a menor densidad es más pesado. De esta manera la gama de tipos de crudo se amplía de forma significativa, utilizándose categorías que giran en torno a los dos tipos genéricos: extraligero, ligero dulce, ligero amargo y extrapesado, entre otros.

En el caso de México el petróleo producido se considera pesado o ligero según los siguientes criterios:

**Pesado:** Petróleo crudo con densidad API igual o inferior a 27°. La mayor parte de la producción de este tipo de petróleo proviene de yacimientos de la Sonda de Campeche.

**Ligero y otros:** Petróleo crudo con densidad API superior a 27°. Este tipo de crudo se produce tanto en la Sonda de Campeche como en otros yacimientos en explotación en el país.

Para el mercado de exportación se preparan tres variedades de petróleo crudo con las siguientes calidades típicas:

**Istmo.** Petróleo crudo ligero con densidad de 33.6° API y 1.3% de azufre en peso.

**Maya.** Petróleo crudo pesado con densidad de 22° API y 3.3% de azufre en peso.

**Olmeca.** Petróleo crudo muy ligero con densidad de 39.3° API y 0.8% de azufre en peso.

### Usos de los principales productos

Es por la aplicación de los procesos de refinación que se pueden poner a disposición del consumidor una amplia gama de productos comerciales:

a) Energéticos: Combustibles específicos para los transportes, la agricultura, la industria, la generación de corriente eléctrica para uso doméstico.

b) Productos especiales: Lubricantes, parafinas, asfaltos, grasas para vehículos, construcción y uso industrial.

c) Materias primas para la industria petroquímica básica.

La gasolina automotriz es una mezcla de cadenas de hidrocarburos de cinco a nueve átomos de carbono, de relativa volatilidad, con o sin pequeñas cantidades de aditivos, los cuales están mezclados para formar un combustible conveniente para uso en motores automotrices de combustión interna.

En forma general, la gasolina se obtiene a partir del petróleo, a través de las siguientes etapas:

- Proceso de destilación (separación física) de los componentes del petróleo, uno de los cuales es la gasolina.
- Proceso de desintegración de los componentes pesados del petróleo, para convertirlos en gasolina y gas licuado.
- Procesos que se emplean para mejorar las características de las gasolinas como el de **reformación catalítica**, isomerización, alquilación y adición de compuestos oxigenantes como el metil-terbutiléter y metil-teramiléter.
- Procesos de purificación, para que su calidad cumpla con las normas de calidad y las normas ecológicas, tales como la hidrodesulfuración.

## Reformación Catalítica de Naftas

El objetivo principal del proceso de la reformación catalítica es la transformación de nafta virgen con bajo octanaje a alto octanaje de las gasolinas incrementando las concentraciones de aromáticos e isoparafinas . El número de octano de una gasolina se incrementa linealmente con el incremento de la concentración de los aromáticos.

La reformación catalítica es un proceso en el que los hidrocarburos comprendidos en el intervalo de temperatura de 44 a 190 °C al pasar a través de varias camas catalíticas bajo condiciones de alta temperatura y presión moderada sufren cambios en su estructura molecular sin cambio en el número de carbonos hacia los compuestos de mayor número de octano como son los aromáticos e isoparafinas. La carga de alimentación al proceso proviene de las unidades de destilación primaria; esta nafta debe ser previamente hidrotratada para reducir la concentración de contaminantes a niveles tales que no envenenen la función hidrogenante-deshidrogenante del catalizador el que está constituido por pequeños cristales de platino (mezclado con otros metales nobles) soportados en alúmina activada con compuestos halogenados.

El proceso de Reformación Catalítica fue desarrollado durante 1947-1949; sin embargo desde 1935 ya se tenía estudiado este proceso por el profesor V.N Ipatief y Gustavo Egloff. Las primeras unidades fueron instaladas en 1939 tanto en Alemania como en Estados Unidos, ya para 1956 habían sido comercializados 13 nuevos procesos licenciados por compañías petroleras y firmas de ingeniería. La tecnología de proceso y de catalizador ha tenido avances significativos en el transcurso de los años contribuyendo notablemente en el desarrollo del proceso Platforming el Dr. Vladimir Haensel. Entre los avances más significativos se encuentran la formulación de los catalizadores monometálicos de platino en 1949, bimetálicos platino-renio en 1960 y el de la

tecnología en el que el catalizador se mueve continuamente a través de los reactores hasta transportarse al recipiente de Regeneración Continua de Catalizador CCR en 1971.

El proceso de reformación catalítica fue usado inicialmente para reemplazar el proceso de reformación térmica. El mejoramiento de la calidad de las gasolinas fue el resultado del cracking de las parafinas de bajo número de octano para producir olefinas con alto número de octanaje.

Los primeros reformadores en los años 40 y principios de los 50 eran unidades que trabajaban a alta presión, con un deterioro rápido de catalizador; para prevenir la rápida desactivación del catalizador por el coke, el rango de presión que se manejaba en los reactores era de 400 a 700 psig, con una relación de hidrógeno/hidrocarburo de 6 a 10 moles.

### **La Reformación Catalítica en México**

De los 165 mil b/d de gasolina Magna Sin producida en Pemex-Refinación, aproximadamente el 36% volumen está integrado por gasolina de Reformación Catalítica de Nafta. El alto volumen utilizado en la formulación de gasolina Magna Sin oxigenada, Magna Sin y Nova se explica por su alto índice de octano (87 unidades) y su baja concentración de azufre (menor de 0.2 ppm). En base a lo anterior este proceso es estratégico en el esquema de refinación para formulación de gasolinas limpias por lo que Pemex, ha integrado tecnología de punta en sus seis refinerías al hacer la conversión de las unidades Semerregenerativas a sistemas de Regeneración Continua de Catalizador (CCR). A nivel internacional el proceso de Platforming CCR ha tenido una gran demanda en el mercado por la alta calidad de los productos y por el incremento de la capacidad de producción La UOP ha instalado 127 unidades Platforming

CCR y ha licenciado más 600 unidades Semirregenerativas, con tecnología innovativa para la producción de combustibles limpios que cumplan con las especificaciones actuales en Índice de octano, Presión de Vapor Reid (PVR), Olefinas, concentración de benceno y Oxigenados.

### **Distribución de Hidrocarburos**

La carga de alimentación más apropiada al proceso de reformación catalítica es aquella que es rica en estructuras nafténicas; sin embargo cuenta con estructuras parafinicas las cuales pueden ser parafinas normales e isoparafinas y baja concentración de compuestos aromáticos en la carga a reformación y reducir la velocidad de desactivación del catalizador por formación del carbón en la superficie activa del mismo.

Debido a las estrictas especificaciones dictaminadas por la Environmental Protection Agency (EPA), California Air Resource Board (CARB) y Clean Air Act en cuanto al contenido de benceno actualmente a nivel internacional se está incrementando la temperatura inicial de ebullición a 87 °C para eliminar precursores del benceno en la carga de alimentación como el metilciclopentano y de esta manera reducir su concentración en el reformado con el objetivo de bajar la concentración valores menores al 1% volumen en pool de gasolinas.

**Composición de la carga de alimentación al Proceso de Reformación  
Catalítica**

Componente	Parafinas, % vol	Naftenos, % vol	Aromáticos, % vol
C5	0	0	0
C6	5.2	2.2	0.2
C7	64.9	18.8	8.7
Total	70.1	21	8.9

**Destilación de la carga de alimentación a Reformadoras**

% Volumen ASTM-D-86	Temperatura, °C
TIE	87
10	92
30	110
50	122
70	146
90	170
TFE	191

En Pemex-Refinación la carga de alimentación a reformación tiene un intervalo de temperatura de 44 a 190 °C, con un número de octano RONC de 44. El valor promedio de su composición es el siguiente:

Hidrocarburos	% volumen
Parafinas	32
Isoparafinas	36
Olefinas	1
Naftenos	21
Aromáticos	10

El octanaje en la gasolina es la medida de su calidad antidetonante, es decir, su habilidad para quemarse sin causar detonación en los motores de los automóviles.

Existen tres métodos para medir esta propiedad: Número de Octano en Motor (MON), Número de Octano Investigado (RON) y Número de Octano en Marcha.

El MON es tomado normalmente como una indicación de la habilidad del Combustible para prevenir la detonación en motores de altas velocidades, mientras que el RON mide la tendencia de detonación a bajas velocidades. Sin embargo, el Número de Octano en Marcha es el que muestra realmente cómo se comporta el combustible en el motor de un automóvil, en cuanto a sus características de detonación.

Los números de octano de hidrocarburos puros y cuales son los hidrocarburos más deseados para el incremento de octano son:

Hidrocarburo	Motor (MON)	Investigación (RON)
<b>Parafinas</b>		
n-Butano	89.6	93.8
n-Pentano	62.6	61.7
n-Hexano	26.0	24.8
n-Heptano	0	0
n-Octano	-	-
<b>Isoparafinas</b>		
2-Metilciclopentano	46.4	42.4
2,2 Dimetilbutano	93.4	91.8
2,3-Dimetilbutano	94.3	100.3
2,2-Dimetilpentano	95.6	92.8
2,2,3-Trimetilbutano	100.1	101.8
<b>Naftenos</b>		
Metilciclopentano	80	91.3
1,1-Dimetilciclopentano	89.3	92.3
Ciclohexano	77.2	83.0
Etilciclohexano	40.8	45.6
Metilciclohexano	71.1	74.8
<b>Aromáticos</b>		
Tolueno	100.3	105.8
Ortoxileno	100.0	103
Isopropilbenceno	99.1	102.1
1,3,5-Trimetilbenceno	100.6	171

## Descripción de los Procesos de Reformación Catalítica

Las unidades de reformación catalítica de nafta se clasifican en tres categorías : Semirregenerativas , Cíclicas y de cama móvil. Esta clasificación refleja la manera y la frecuencia con la que el reactor es regenerado.

### - Unidades Semirregenerativas

La carga de alimentación al proceso se combina con una corriente rica en hidrógeno proveniente del compresor de recirculación, la mezcla intercambia calor con los productos de reacción con la finalidad de aprovechar su energía térmica y disminuir el consumo de combustible en el primer horno de calentamiento en donde la temperatura de mezcla se incrementa entre 480 a 520 °C, este incremento va a estar en función de la actividad del catalizador , el tipo de carga de alimentación y del número de octano que se requiera en el reformado. La mezcla hidrógeno/hidrocarburo bajo condiciones óptimas de presión parcial de hidrógeno y temperatura se alimenta al primer reactor que contiene un catalizador bimetalico con bajas concentraciones de Pt-Re y se efectúan las reacciones de deshidrogenación. El tiempo de residencia y la cantidad de catalizador en este reactor son bajos debido a que esta reacción es sumamente rápida. Las consideraciones de diseño del reactor están gobernadas por el balance energético. Como una consecuencia de la reacción, la temperatura del efluente del reactor disminuye aproximadamente 69 °C por lo que se alimenta a un segundo horno de calentamiento para incrementar la temperatura a la de reacción, el número de octano sufre un incremento en el segundo reactor ya que se efectúan reacciones de isomerización. El tercer reactor esta diseñado para optimizar la conversión de aquellas reacciones que son lentas como la deshidrociclización , el espacio velocidad es menor que en los otros dos reactores y la caída de temperatura no es tan drástica ya que se efectúan reacciones exotérmicas como la deshidrodesintegración. El efluente

del último reactor pasa a un intercambiador de calor de carga-producto; el efluente es enfriado por soloaires a una temperatura inferior de 37 °C para lograr un mejor equilibrio en la separación de la fracción líquida en el recipiente de baja presión. Tanto la fracción líquida como gaseosas son transferidas a un separador de alta presión mediante una bomba y el compresor de recirculación respectivamente. La fracción líquida proveniente del separador de alta presión pasa a una torre debutanizadora para eliminar los hidrocarburos ligeros C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>; el gas rico en hidrógeno se recircula a la carga de alimentación para mantener la relación molar hidrógeno/hidrocarburo requerida por el proceso. La presión de operación de las unidades semirregenerativas se encuentran de 14 a 34 kg/cm<sup>2</sup>.

#### **- Unidades Cíclicas.**

Las unidades cíclicas están diseñadas para operar a menor presión entre 6.8 a 20 kg/cm<sup>2</sup> que las unidades semirregenerativas con el propósito de incrementar el número de octano y el rendimiento de reformado a expensas de un menor ciclo de vida del catalizador ya que al disminuir la presión parcial de hidrógeno se incrementa la velocidad de desactivación del mismo por formación de carbón, esto explica la necesidad de contar con un reactor adicional para remplazar el reactor con el catalizador más agotado y efectuar la regeneración del mismo; en este caso todos los reactores tienen las mismas dimensiones.

#### **- Regeneración continua de catalizador CCR**

El número de unidades de regeneración continua de catalizador se ha incrementado notablemente en la última década ya que se obtiene con este proceso gasolinas con número de octano RON mayor de 98 unidades, más rendimiento de reformado entre 1 a 2 % vol., y un alto beneficio económico. El diseño de lecho móvil toma de las unidades cíclicas el concepto de regeneración

continua de catalizador. Las unidades CCR operan a presiones comprendidas entre 6.8 y 12 kg/cm<sup>2</sup>. Sin embargo de las unidades de la segunda generación con regenerador CicloMax operan a presiones menores de 6.8 kg/cm<sup>2</sup>. La temperatura de operación se encuentra entre 515 a 520 °C, esta temperatura se mantiene durante la operación ya que la actividad catalítica se mantiene compensando la pérdida de catalizador con catalizador fresco. Los reactores en este proceso están sobrepuestos para facilitar el lento movimiento del catalizador a través de los mismos; posteriormente se efectúa la desorción de hidrocarburos al pasar una corriente de hidrógeno caliente en el colector del catalizador, posteriormente el catalizador pasa a una serie de tolvas para inertizar con nitrógeno y eliminar mezclas explosivas, una vez que el catalizador queda libre de hidrocarburo e hidrógeno pasa al regenerador para la eliminación del carbón y para luego alimentarse en la parte superior del primer reactor.

Las unidades de la segunda generación incorporan nuevos avances tecnológicos como el regenerador CicloMax. El diseño del regenerador asegura que el catalizador quede libre de carbón, que se tenga una buena redispersión del platino una mínima pérdida por atracción lográndose una menor producción de finos. Los finos que se producen son removidos eficientemente reduciendo los problemas de circulación.

Las ventajas que se logran al convertir las unidades semirregenerativas a CCR son las siguientes:

- **Incremento en el RON de la gasolina**
- **Incremento en el rendimiento de reformado**
- **Reducción del consumo de catalizador**
- **Mayor beneficio económico**

Los diferentes tipos de unidades usados en los procesos de reformación catalítica están caracterizados por el predominio de la presión. Algunas unidades están diseñadas para operar a altas presiones; y otras son operadas a bajas presiones teniendo corrientes de regeneración.

Los procesos que usan altas presiones de operación son: Platforming, Catforming, Hidroforming, Solvafirming, Proceso Sinclair-Baker.

Desde que los catalizadores de platino son usados , las deposiciones son usualmente pequeñas permitiendo largos usos . Otros procesos regeneran al catalizador estando en operación, algunos de estos procesos tales como el Ultraforming y el Powerforming, usan catalizadores de platino.

#### **- Platforming**

En este proceso los activadores son pequeñas cantidades de fluoruro o cloruro. La alimentación es una corriente de nafta dentro de la cual un excedente de hidrógeno es también alimentado. La alimentación entra a un prefraccionador para remover la fracción de ligeros del domo.

En esta operación el oxígeno disuelto y el agua son removidos. Del prefraccionador sale una corriente que es mezclada con el hidrógeno recirculado antes de entrar al primer horno. A la salida de este se envía al primer reactor, el efluente de este reactor se dirige hacia el segundo horno y posteriormente entra al siguiente reactor.

Del fondo del segundo reactor sale una corriente la cual se envía a un horno para después entrar al tercer reactor. La corriente que sale del fondo de este reactor se envía a un separador, donde los productos son separados en dos corrientes.

Los reactores son cilindros a presión, que en su interior se encuentra la sustancia catalítica. Los vapores se mueven a través de cada reactor haciendo un apropiado contacto con el catalizador para aumentar la velocidad de reacción así como los productos deseados. Debido a que la mayoría de las reacciones absorben calor, los vapores que salen de cada reactor deben ser recalentados, es por esto que los hornos se encuentran entre los reactores.

La corriente que sale del fondo del separador se envía a la torre fraccionadora para separar los componentes en fracción ligera, la cual sale del domo de la columna, y el reformado que sale del fondo de la columna mientras que el ligero sale de una cierta parte de la torre.

El gas que sale del separador se dirige a una torre absorbedora donde se elimina al ácido sulfhídrico de la corriente de hidrógeno, para posteriormente ser recirculado.

El hidrógeno suprime la formación de coke en el catalizador. Los depósitos de coke en el catalizador inhiben la actividad catalítica. Las temperaturas de reacción van de 850 a 950 ° F, y las presiones varían desde 200-750 psig. Las condiciones de presión y temperatura están dictadas por el tipo de alimentación usada y la calidad de el proceso deseado.

La regeneración del catalizador se lleva a cabo cuando la actividad del catalizador decrece hasta cierto nivel, una vez regenerado el catalizador es usado hasta que su actividad decrece por debajo de los límites económicos, en este punto el catalizador es reemplazado por uno fresco. Este proceso puede producir un reformado rico en aromáticos, el cual puede ser utilizado como combustible para aviones, como fuente de aromáticos para la industria petroquímica. Desde que son producidas grandes cantidades de hidrógeno en

este proceso, el hidrógeno en exceso es utilizado como una fuente para las operaciones de hidrogenación.

#### **- Ultraforming**

Este proceso es autorizado por la Standard Oil de California, emplea tres reactores teniendo uno adicional el cual se emplea para la regeneración del catalizador.

El catalizador puede ser regenerado muchas veces sin perder selectividad. En este proceso la conversión alcanzada es muy alta, obteniéndose un producto cuyo número de octano varía de 95-103. Los xilenos de alta pureza pueden ser obtenidos a través del fraccionamiento.

#### **- Houdriforming**

Este proceso está autorizado por Houdry Division of Air Products and Chemicals, emplea dos o más reactores con calentadores entre los reactores.

La carga de nafta es mezclada con el gas de recirculación rico en  $H_2$ , este proceso utiliza un catalizador bimetálico de platino en alúmina. La conversión alcanzada para producir benceno, tolueno y xilenos a partir de naftenos es muy alta. En este proceso la temperatura de operación varía de 900 a 1000 °F y el rango de presión oscila entre 150 y 400 psig.

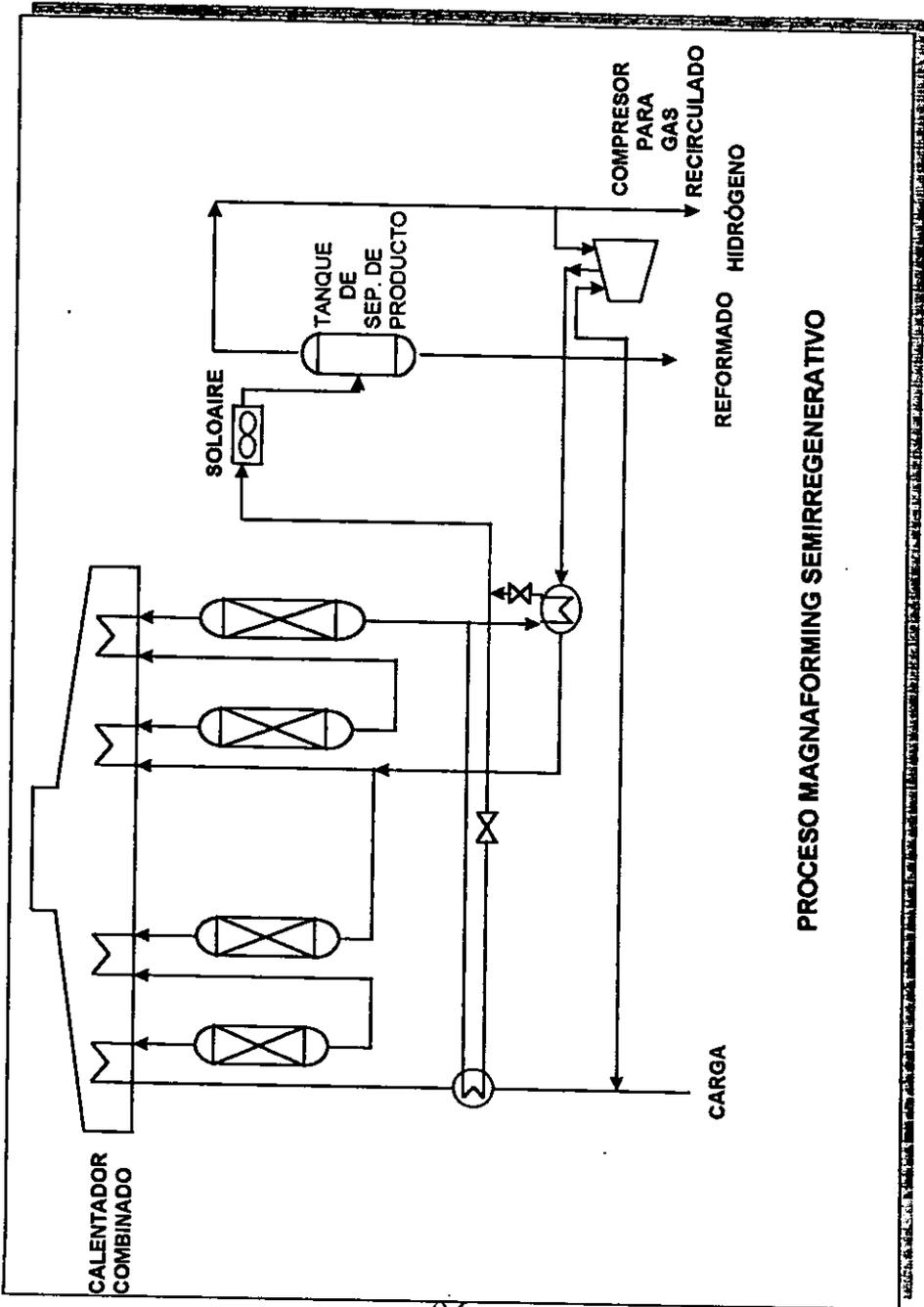
En la tabla siguiente se muestran los procesos que utilizan catalizadores de platino así como el número aproximado de unidades instaladas:

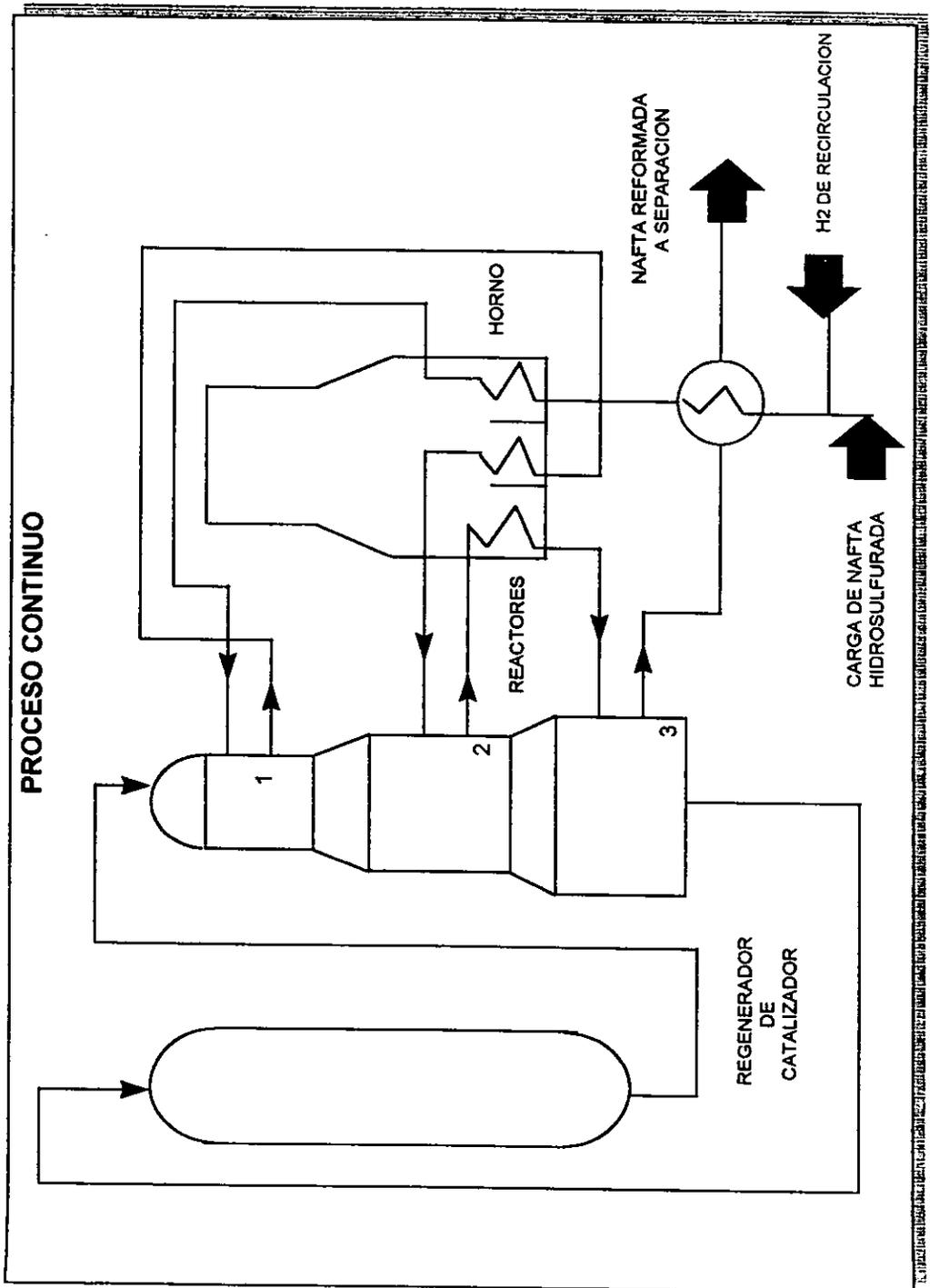
	Nombre del Proceso	Catalizador	Número aproximado de unidades
Semi-regenerador	Catforming	Pt/SiAl	16
	Platforming	Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	275
	Sinclair-Baker	Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	60
	Houdroforming	Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	16
Regenerador	Ultraforming	Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	40
	Powerforming	Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	40

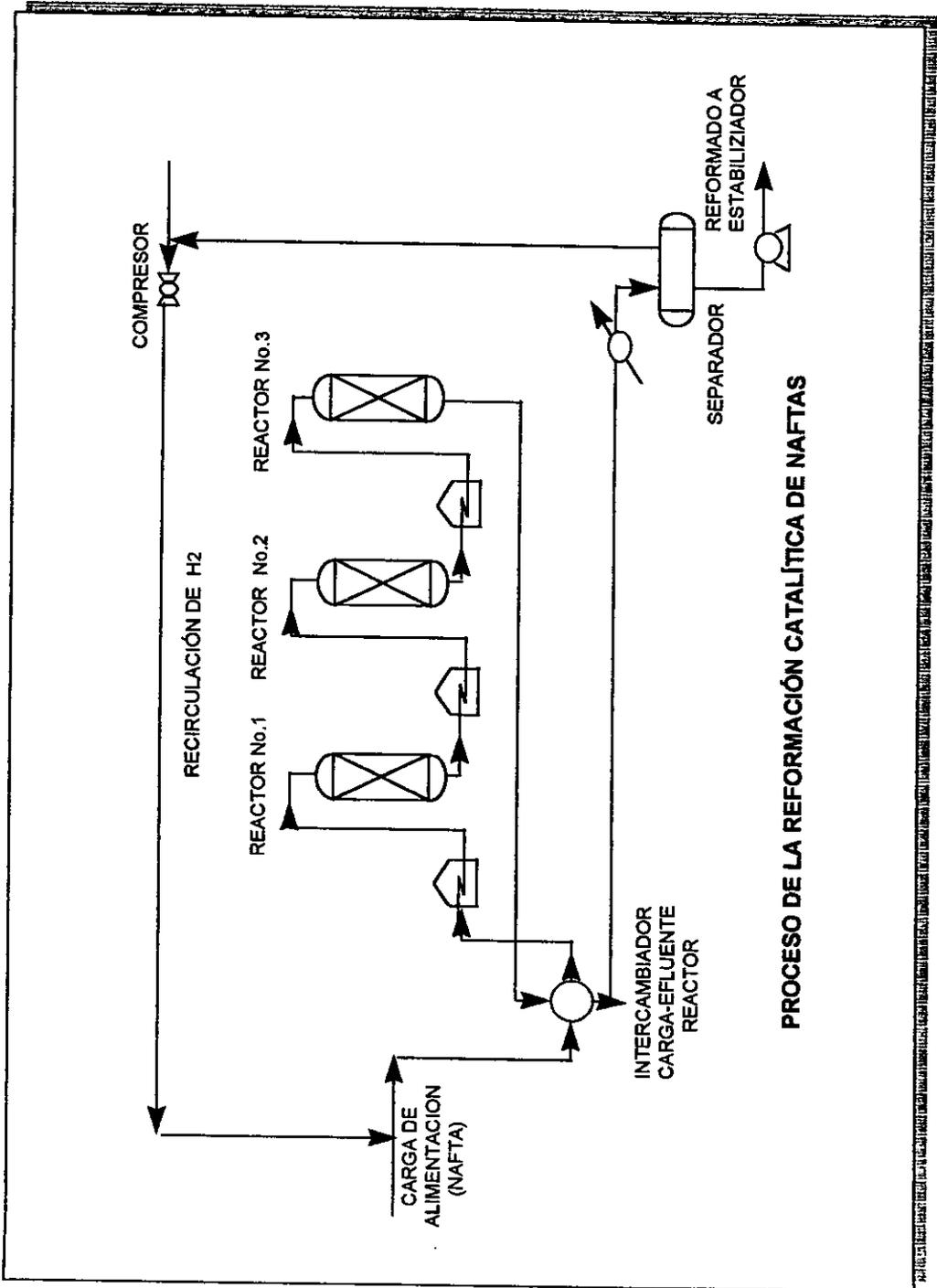
También se utilizan otros tipos de catalizadores como: MoO<sub>3</sub> sobre alúmina en Hydroforming, lecho fijo o fluidicado, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sobre alúmina, en lecho móvil; y Co-Mo sobre sílico-alúmina, en lecho móvil; y Co-Mo sobre sílico-alúmina en Hyperforming.

Los diferentes tipos de procesos fueron desarrollados por las compañías:

Compañía	Tipo de Proceso
Atlantic Richfield	Catforming
Chevron Research	Rheniforming
Exxon Research and Engineering	Powerforming
Houdry Division of Air Products and Chemicals	Houdriforming
Sinclair Research Laboratory and Baker & Company	Sinclair-Baker Reforming
Standard Oil of Indiana	Ultraforming
Standard Oil of New Jersey	Powerforming, Hydroforming, Fluid
Union Oil	Hydroforming
Universal Oil Products	Hyperforming
	Platforming



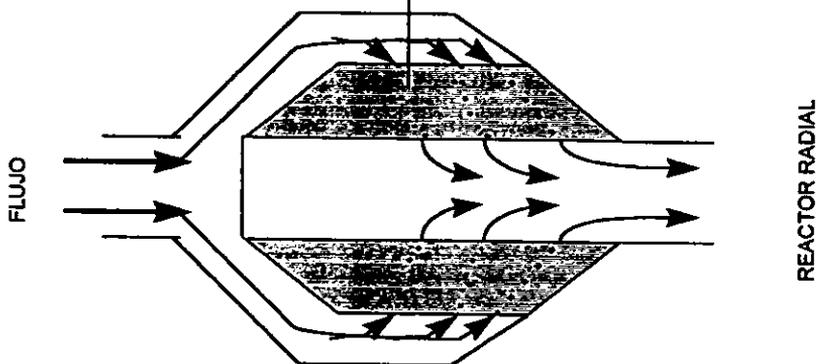
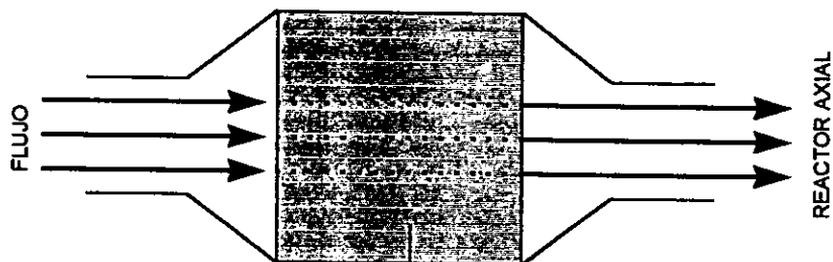




**PROCESO DE LA REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTAS**

## Reactores de Reformación Catalítica

Los reactores de reformación catalítica se clasifican en flujo descendente y flujo radial. En los reactores de flujo descendente la mezcla hidrógeno/hidrocarburo entra a la parte superior del reactor, los productos de reacción fluyen hacia abajo a través de la cama de catalizador y salen por el fondo. En la parte superior se carga alúmina esférica de  $\frac{1}{4}$  de pulgada con la finalidad de atrapar algunos óxidos de tanque y líneas de transferencia que entran con la carga de alimentación. Con la finalidad de lograr una distribución más uniforme de la carga de alimentación y aprovechar más eficientemente el lecho catalítico. En la parte inferior se coloca de manera similar alúmina esférica para soportar el catalizador. En los reactores de flujo radial la carga de alimentación entra por la parte superior y fluye de manera horizontal a través de la cama del catalizador colocada en un espacio anular y los productos de reacción descargan a un tubo colector. Estos reactores son utilizados cuando la carga está completamente vaporizada y ofrecen la ventaja de baja caída de presión debido a que tanto el área de sección transversal como el flujo lineal son pequeños. Este tipo de reactores ofrecen menos resistencia a la obstrucción por óxidos arrastrados con la carga de alimentación, la desventaja que presentan es la canalización por el patrón de flujo lineal cuando no se hace un cargado adecuado (cargado denso).



### REACTORES DE REFORMACION

## Catalizadores de Reformación

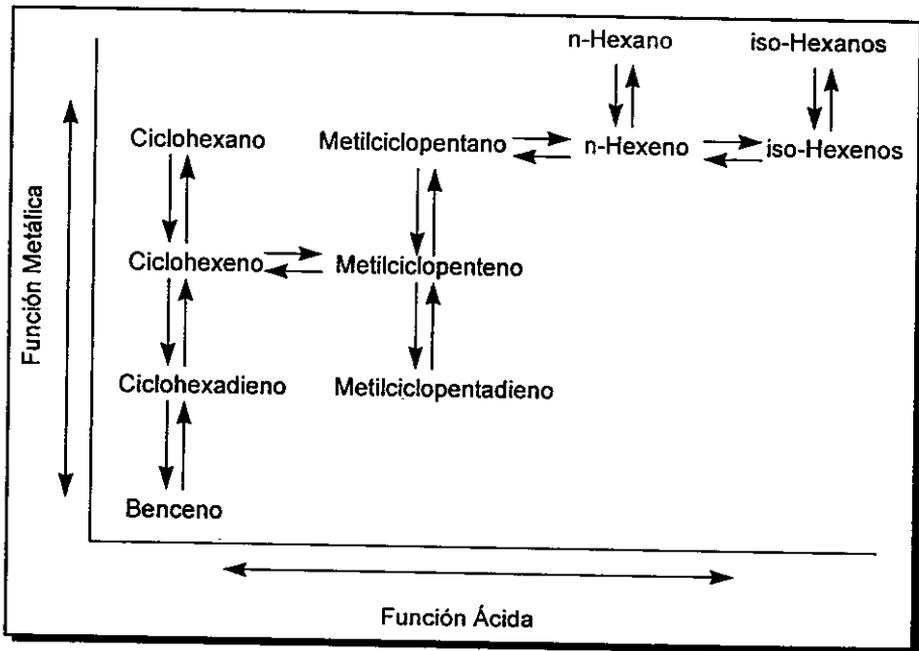
Los primeros catalizadores utilizados en el proceso de reformación de naftas fueron a base de  $\text{MoO}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  y  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  ya que son algunos de los óxidos más activos. Posteriormente se desarrollaron catalizadores con metales con mayor actividad en la función hidrogenante-deshidrogenante como el  $\text{Pt-Al}_2\text{O}_3$  los cuales fueron empleados por un largo periodo hasta 1967 aparecen los catalizadores bimetálicos  $\text{Pt-Re-Al}_2\text{O}_3$ . Actualmente se están utilizando catalizadores monometálicos ultradispersos y bimetálicos Pt-Re no balanceados combinados en diferentes reactores de una misma unidad. A últimas fechas se ha dado un gran impulso al estudio de los catalizadores zeolíticos los cuales se encuentran en evaluación a nivel planta piloto.

Los catalizadores sobre los cuales se efectúan las reacciones de éste proceso, son de naturaleza dual ya que ellos promueven simultáneamente las reacciones que son específicas de la función metálica y/o de las propiedades ácidas del catalizador. El metal proporciona la actividad de hidrogenación y deshidrogenación del catalizador.

La actividad ácida de los catalizadores promueve o controla todas las demás reacciones de reformación y usualmente se controla a base de halógenados al catalizador.

En la consideración mecanística de las transformaciones que ocurren sobre estos catalizadores bifuncionales es útil hacer la referencia a la figura 2.1. en donde se describe la reformación de hidrocarburos  $\text{C}_6$ . En la trayectoria vertical la reacción tiene lugar en los centros de hidrogenación y deshidrogenación del catalizador y en la trayectoria horizontal las reacciones sobre los centros ácidos.

La conversión del metilciclopentano a benceno primero involucra la deshidrogenación a metilciclopenteno sobre la función metálica del catalizador continuando con la isomerización a ciclohexano sobre la función ácida. El ciclohexano regresa a la función metálica donde puede ya ser hidrogenado a ciclohexano o deshidrogenado hacia benceno, las cantidades relativas de éstos productos dependen de las condiciones de reacción.



Esquema de Reacción

figura 2.1

### - Técnica de preparación

En la formulación de un catalizador se pretende que éste tenga una alta difusión de los reactantes en toda su área superficial, alta actividad y estabilidad química y térmica. La importancia de estas tres propiedades impacta en la selectividad de la reacción, diseño de los reactores, condiciones del proceso y el costo-beneficio. Una buena distribución de flujo en su superficie activa y bajas caídas de presión se logran al hacer un buen diseño del soporte catalítico el que debe tener una forma apropiada para mejorar la transferencia de masa y de calor y el tamaño de partícula que tenga alta resistencia mecánica (ruptura y atracción). Los materiales catalíticos están constituidos por tres componentes importantes. La función metálica (componentes activos), soporte y promotores.

### - Componente activo

Los componentes activos son los responsables de las reacciones hidrogenantes-deshidrogenantes como el Pt el cual es impregnado o intercambiado en un soporte con alta área superficial como puede ser la alúmina o sílicas. La impregnación se realiza con ácido cloroplatínico  $H_2PtCl_2$  el que se debe difundir adecuadamente en toda el área superficial y forma pequeños cristales donde el 80% se encuentran por debajo de 20 Å; la concentración del platino en el catalizador por lo general es baja de 0.22 a 0.30 % peso. La partícula extraída se lava, se seca y se calcina con aire para formar óxidos, posteriormente los óxidos son reducidos con hidrógeno para quedar con una valencia de cero. La técnica de intercambio iónico se aplica en menor proporción pero se logra con una mejor dispersión del metal el que se introduce con hidrógeno al soporte intercambiando un catión complejo como lo es  $(Pt(NH_3)_4)^{2+}$ ; el soporte es lavado con agua desmineralizada hasta remover todas las sales libres, quedando el metal automáticamente disperso en la superficie interna y externa, posteriormente el catalizador es calcinado y reducido.

### **- Dispersión de los metales en el soporte**

Los catalizadores preparados por impregnación e intercambio iónico tienen una alta dispersión metálica en el área superficial del soporte, los cristales son pequeños y están generalmente de 8 a 100 Å de diámetro, esta dispersión metálica depende de la técnica de preparación, de las condiciones de reducción y calcinación.

### **- Venenos del Catalizador**

La nafta que se alimenta al proceso de reformación catalítica puede traer ciertos compuestos indeseables que envenenan en forma temporal o permanente los venenos temporales son azufre, nitrógeno y cloro; los venenos permanente como el plomo y el arsénico producen daños irreversibles en el mismo.

#### **• Azufre**

La especificación de azufre en la nafta que se alimenta al proceso de reformación en las unidades de Pemex es de 0.3 ppm. Generalmente los problemas de desactivación del catalizador por azufre suceden cuando hay una falla en la unidad de deshidrodesulfuración de la nafta amarga este problema puede ser por contaminación al perforarse uno de los tubos del intercambiador carga producto. El azufre afecta la función metálica del catalizador y se refleja en la necesidad de incrementar la temperatura de reacción para alcanzar el número de octano requerido. El comportamiento del envenenamiento por azufre se ve reflejado por el incremento de la producción de gas seco y consecuentemente en la reducción de  $C_{5+}$ , también se manifiesta en la delta T de los reactores, ya que cambia la selectividad de la reacción hacia la hidrodesintegración generando un incremento de la temperatura a lo largo del

lecho catalítico por lo tanto la diferencial de temperatura entre la entrada y salida del reactor se reduce. Una de las medidas que se toman cuando hay una detección de azufre en la alimentación es reducir la temperatura a 480 °C con la finalidad de disminuir la formación de carbón y posiblemente desorber del catalizador este elemento en forma de H<sub>2</sub>S; una vez que el problema de contaminación ha sido eliminado se incrementa la temperatura a las condiciones anteriores al descenso.

- **Nitrógeno**

El nitrógeno afecta la función ácida del catalizador formando amoníaco y cloruro de amonio. Una indicación cuando el catalizador es envenenado con nitrógeno es cuando hay un cambio en la selectividad de la reacción disminuyendo notablemente la isomerización reflejándose en el número de octano por lo que generalmente se tiende a incrementar la temperatura para mantener el octano requerido. Si la contaminación prevalece un periodo de tiempo prolongado el cloruro de amonio puede precipitar en el intercambiador de calor carga-producto, disminuyendo la eficiencia del mismo.

- **Cloro**

El catalizador debe tener una concentración de cloro de 1% peso para tener una buena actividad esta concentración debe mantenerse en equilibrio ya que un exceso del mismo favorece la reacción de hidrodésintegración cambiando la selectividad hacia gas seco por lo tanto se tiene una mayor formación de carbón y se trata de compensar la pérdida de actividad con temperatura. También se refleja en que hay una reducción en la delta T de los reactores y se puede detectar alta concentración de cloro en el gas de recirculación.

- **Plomo**

El plomo envenena el catalizador de manera irreversible afectando principalmente la función hidrogenante-deshidrogenante. El envenenamiento está caracterizado por la pérdida de actividad en el primer reactor se refleja por una disminución de la delta de T en el reactor por lo que es necesario evitar la contaminación para tener que remplazar todo el catalizador de la unidad.

- **Arsénico**

Algunos crudos están contaminados con compuestos de arsénico por lo que hay posibilidades de que esté presente en la nafta a reformadoras. Este elemento presenta un comportamiento similar al del plomo.

- **Sulfhidración**

Los catalizadores bimetálicos generalmente tienen una alta actividad en su estado reducido por lo que es necesario disminuir esta actividad con un compuesto de azufre para evitar que la selectividad de la reacción se origine hacia la hidrodeseintegración y reducir consecuentemente la rápida desactivación del catalizador por formación de carbón, generalmente se utiliza sulfuro de hidrógeno o dimetildisulfuro para efectuar la sulfhidración, la cantidad requerida de azufre debe ser aproximadamente 0.06% peso (basado en el catalizador cargado); después que la inyección de agente sulhdrante se ha realizado en el gas de recirculación se detecta la presencia de ácido sulfhídrico como una indicación de que se ha realizado adecuadamente esta etapa. La sulfhidración es una etapa importante en el ciclo de vida del catalizador ya que normalmente una buena sulfhidración se tiene entre 18 a 24 meses de operación continua y al efectuarse una mala sulfhidración puede durar entre 3 y

6 mese lo que afecta la rentabilidad de la unidad por el tiempo perdido en la regeneración del catalizador.

#### **- Desactivación por carbón**

La rapidez de desactivación de un catalizador esta en función de la calidad de la carga de alimentación, temperatura de operación de la unidad, presión, espacio velocidad y relación molar  $H_2/HC$ . Debido a que las reacciones que se llevan acabo en la reformación catalítica de nafta conducen a la formación sobre la superficie activa del catalizador, las reacciones involucradas son la polimerización y la ciclización de olefinas para compuestos polinucleares de alto peso molecular, estas reacciones son catalizadas por la función ácida. Estas reacciones se realizan rápidamente cuando se tiene baja la presión parcial del hidrógeno y la carga de alimentación tiene alta temperatura final de ebullición.

La deshidrogenación y polimerización se efectúan sobre la superficie del metal y estas reacciones son retardadas por el incremento de la presión parcial de hidrógeno lo que permite cambiar el equilibrio de la función hidrogenante-deshidrogenante hacia la deshidrogenación de especies insaturadas es decir el incremento de la presión parcial de hidrógeno limpia parcialmente la función metálica del catalizador de residuos de carbón. En las unidades semirregenerativas normalmente hay una menor concentración de carbón en el primer reactor y la mayor concentración se localiza en el último reactor. El nivel de carbón continua incrementándose conforme transcurre el ciclo de operación hasta llegar a un punto en donde el número de octano requerido y el rendimiento del producto justifiquen la operación de la unidad. El ciclo de vida del catalizador IMP-RNA-1 en las unidades semirregenerativas es de 18 a24 meses .

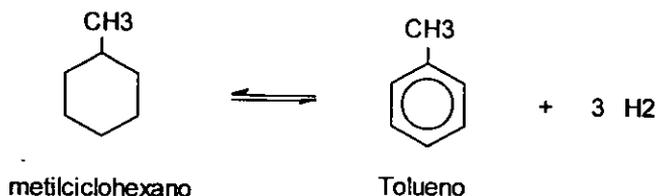
## Reacciones Químicas que se efectúan en la Reformación

### - Reacciones de Deshidrogenación

La reacción más importante en el proceso de reformación catalítica de naftas es la deshidrogenación porque esta produce aromáticos que tienen alto número de octano, por tanto un gran valor petroquímico; además son reacciones esencialmente cuantitativas.

Cuando un nafteno es convertido a aromático se da una disminución en el volumen la cual se compensa con un aumento considerable en el número de octano.

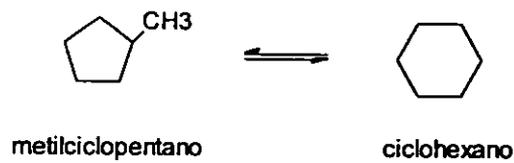
Estas reacciones son endotérmicas por lo que se ven favorecidas por temperaturas de reacción altas y presiones bajas, siendo además reacciones muy rápidas, las cuales son catalizadas por la función metálica del catalizador, su conversión normalmente esta limitada por el equilibrio termodinámico.



### -Reacciones de Isomerización

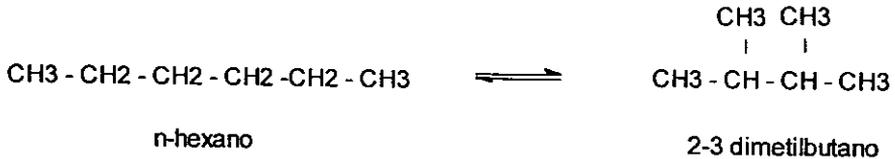
Los naftenos pueden isomerizarse en un reactor de reformación, cuando esto pasa inmediatamente éstos experimentan una deshidrogenación convirtiéndose en aromáticos.

Aparentemente esta reacción involucra la apertura del anillo con una probable formación a parafinas y aromáticos. Esta reacción no es muy cuantitativa pero si ligeramente exotérmica. Los ciclopentano termodinámicamente son favorecidos en éstas reacciones.



En las reacciones de isomerización de parafinas se lleva a cabo un reordenamiento de la molécula con pequeños cambios en el volumen pero con un marcado incremento en el número de octano. Estas reacciones resultan de las reacciones intermedias de los iones de carbonio, son promovidas por la función ácida del catalizador. Dichas reacciones no dependen de la presión de operación.

La reactividad de las parafinas hacia la isomerización se incrementa conforme aumenta el número de átomos de carbono.



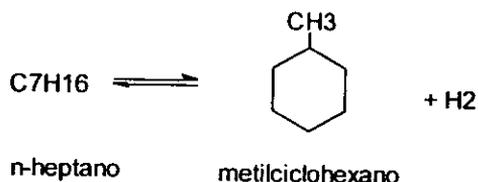
### - Reacciones de Deshidrociclización

Probablemente la reacción más difícil de promover en el proceso de reformación es la deshidrociclización, puesto que consiste en un reordenamiento molecular sumamente difícil de una parafina a un nafteno, esta reacción es requerida para obtener una producción satisfactoria de reformado con un alto número de octano.

Al igual que en la isomerización de naftenos existen pasos intermedios en la conversión de parafinas a aromáticos. Las parafinas de cadenas largas se deshidrociclizan más fácilmente que las cadenas más cortas.

Esta reacción se favorece a altas temperaturas debido a que son reacciones endotérmicas y bajas presiones, se promueve una función ácida y metálica del catalizador y toman lugar predominantemente en el último reactor.

Las reacciones de deshidrociclización son importantes desde el punto de vista rendimiento-número de octano porque representan un medio de convertir hidrocarburos parafínicos con bajo número de octano en hidrocarburos nafténicos y posteriormente en aromáticos. Cuando aumenta el peso molecular se hace más fácil la ciclización ; esta reacción es el paso limitante hacia las siguientes reacciones de aromatización las cuales se llevan a cabo rápidamente.

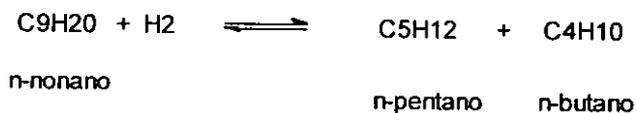


### -Reacciones de Hidrocracking

La ruptura del enlace carbono carbono en operaciones de reformación es llamada hidrocracking, en estas reacciones se puede romper una molécula de parafina en dos moléculas de bajo peso molecular o puede abrirse el anillo de un nafteno.

El corte del enlace C-C inicialmente produce una olefina que es rápidamente hidrogenada; las altas temperaturas y altas presiones aceleran el proceso de hidrocracking el cual toma lugar en sitios ácidos del catalizador, sin embargo se tienen rendimientos reducidos en el reformado, debido a que esta reacción consume hidrógeno. Estas reacciones se consideran sumamente exotérmicas.

El proceso de hidrocracking produce coke o sus precursores los cuales cubren los sitios activos del catalizador inhibiendo así su actividad.



## Velocidades de Reacción

Los parámetros de reacción típicos para las reacciones de reformación se presentan de diferente manera a lo largo del reactor.

Tipo de reacción	Rapidez de reacción relativa	Efecto del incremento en la presión total	Efecto térmico
Hidrocracking	Muy baja	Incrementa la rapidez	Muy exotérmica
Deshidrociclización	Baja	Pequeño o nulo incremento en la rapidez	Endotérmica
Isomerización	Rápida	Disminuye la rapidez	Medianamente exotérmica
Deshidrogenación	Muy rápida	Disminuye la conversión	Muy endotérmica

Las reacciones de las parafinas son críticas en el proceso de reformación, ya que son convertidas a través de tres reacciones que son el cierre del anillo a naftenos de cinco y seis carbonos, isomerización a parafinas ramificadas y el hidrocracking a parafinas de bajo peso molecular.

Las reacciones de cierre del anillo o deshidrociclización incrementan el número de octanaje, debido a que los naftenos producidos rápidamente reaccionan y se convierten a aromáticos, sin embargo la velocidad de reacción de la deshidrociclización es baja acercándose a la del hidrocracking de parafinas.

En general las condiciones de proceso que favorecen la deshidrociclización sobre el hidrocracking y apertura del anillo son deseables. Tales condiciones son a bajas presiones y altas temperaturas.

La mayoría de las reacciones de reformación son reversibles, sin embargo las constantes termodinámicas juegan un papel muy importante en el desarrollo de los modelos.

Para obtener altos rendimientos de aromáticos se requieren bajas presiones y altas temperaturas. La relativa velocidad de envejecimiento del catalizador se incrementa significativamente cuando se reduce la presión.

Muchas de las reacciones de la reformación requieren de la formación de intermediarios olefinicos en su secuencia de reacción elemental, las cuales conducen a la formación de coke y subsecuentemente a la desactivación del catalizador. Por lo tanto, la desactivación del catalizador es causada principalmente por el bloqueo de sitios activos del catalizador debido a la formación del coke.

Las altas presiones del hidrógeno suprimen la formación de diolefinas haciendo una selección entre los intermediarios olefinicos y los productos líquidos más favorables. Sin embargo las altas presiones reducen la selectividad hacia los aromáticos en el producto líquido deseado.

### **Variables del Proceso**

De las reacciones que se realicen en esta planta dependerá la producción suficiente de hidrógeno a las condiciones deseadas y una vida adecuada del catalizador. Por tanto las reacciones de aromatización y las de fragmentación deben controlarse para obtener lo anterior.

#### **- Temperatura**

El aumento de la temperatura favorece tanto a la aromatización como la fragmentación de parafinas. La aromatización se presenta a temperatura relativamente baja a las cuales la fragmentación se realiza plenamente todos los naftenos se han convertido en aromáticos. El aumento de la temperatura incrementa el depósito del carbón . así que la temperatura de operación a la

entrada de los reactores será aquella que optimice la formación de aromáticos y minimice la fragmentación de parafinas. Para modificar la temperatura en el reactor cuando se deseen cambios en el reformado, se aconsejan incrementos de 2 °C a 3°C. Para el descenso de la carga , primero se deberá bajar la temperatura. Como regla general la temperatura requerida para la misma severidad , cuando la carga disminuye será aquella que permita la misma producción de ligeros por barril de carga.

#### **- Presión**

La elevación de la presión favorece las reacciones de fragmentación y disminuye las de aromatización . La coquización es favorecida al disminuir la presión la presión, con lo que el contenido de hidrógeno no es suficiente y la relación de hidrógeno no es suficiente y la relación hidrógeno hidrocarburos es baja. Esto puede presentarse al subir la carga.

#### **- Relación Hidrógeno/Hidrocarburos**

Para evitar la coquización en el reactor es importante conservar una relación Hidrógeno/hidrocarburos de 4.750 PCS de hidrógeno 100% por barril de hidrocarburos .Esta condición debe comprobarse frecuentemente. La disminución en está relación puede deberse a una disminución en el porcentaje de hidrógeno en el gas de recirculación; a un aumento en la caída de presión en la sección de reacción y/o pérdida de eficiencia en el compresor debido a fallas mecánicas.

### **- Espacio Velocidad**

El espacio velocidad del líquido (LHSV). Indica los pies cúbicos de carga en fase líquida por  $\text{ft}^3$  de catalizador en los tres reactores y es un índice de la velocidad de operación; de manera que cuando menos sea el espacio velocidad, el grado de reacción aumenta.

Para esta planta el valor de diseño es 6.99 cuando procese a 30,000 BPD. Este valor se eligió para tolerar temperaturas relativamente altas: que permitan operar los reactores con baja fragmentación de parafinas.

## Objetivo

El presente trabajo propone el desarrollo de un programa en el Simulador Hysim, para la simulación de un sistema de reacción del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas, utilizando un modelo cinético existente.

La simulación se realizará a las condiciones de operación de la Planta Reformadora de Naftas de Tula Hidalgo.

La manera de llevar a cabo un análisis de una planta es con la ayuda de un simulador de proceso, ya que facilita y reduce el tiempo de cálculo, donde se realiza un estimado del comportamiento del proceso.

Los modelos de proceso son herramientas matemáticas que nos permiten predecir el comportamiento del proceso, en donde se encuentra una de las mayores aplicaciones en las refinerías.

Estos estudios dan una base para el dimensionamiento y selección de nuevas unidades de proceso, modificación de las unidades existentes, así como los parámetros para el desarrollo de estrategias de proceso a seguir dentro de una planta.

# 3.- Descripción de la Planta

---

El proceso de Reformación catalítica de naftas, tiene como objetivo la conversión de los componentes de bajo octano tales como parafinas y naftenos, en isoparafinas y aromáticos de mayor índice de octano produciendo una buena cantidad de hidrogeno.

La Unidad Reformadora de Naftas se encuentra diseñada para procesar 30,000 BPD de nafta desisohexanizada, proveniente de los fondos de la Torre Desisohexanizadora de la Planta Hidrodesulfuradora de Naftas de la misma refinería, obteniendo como productos Nafata Reformada, Hidrógeno y Licuables.

El reformado obtenido en este proceso tiene un octanaje de 92 mínimo, empleándose posteriormente como componente de gasolinas para motor. Del hidrógeno producido, una parte de emplea en el proceso de hidrodesulfuración de naftas , y otra parte en los procesos de hidrodesulfuración de destilados intermedios (turbosina, diesel y nafta pesada).

La planta reformadora de naftas se compone de tres secciones:

- **Sección de Carga y Reacción**
- **Sección de Compresión de Hidrógeno**
- **Sección de Estabilización**

## Sección de Carga y Reacción

En esta sección se prepara la carga de alimentación al proceso, se llevan a cabo las reacciones de reformación así como separar los productos en sus fases líquido-gas, para posteriormente enviarse a la sección de compresión.

La carga originada de la unidad Hidrodesulfuradora de Naftas, se mezcla con una corriente de hidrógeno de recirculación para que posteriormente precalentarse en un intercambiador de calor carga-efluente enviándose después a un horno para calentar la corriente hasta obtenerla temperatura necesaria para poder llevarse a cabo las reacciones de reformación.

Las reacciones de reformación catalítica se llevan a cabo en tres reactores en serie con calentamiento del efluente de cada reactor en el horno. Es necesario calentar el efluente de cada reactor en el horno debido a que las reacciones de reformación catalítica son globalmente endotérmicas, esto implica que una vez que la corriente de proceso pasa por cada reactor disminuye su temperatura y como las reacciones de reformación se llevan a cabo a una determinada temperatura, la finalidad de calentar el efluente de cada reactor es aumentar la temperatura del efluente hasta llegar a las condiciones necesarias para que se lleven a cabo las reacciones en el siguiente reactor.

El efluente del último reactor se enfría en dos etapas, primero pasa por el intercambiador carga-efluente y después por un soloaire.

## **Compresión de Hidrógeno**

La mezcla gas-líquido que sale del soloaire se dirige a un tanque separador de baja presión, los gases que salen por el domo pasan por la sección de compresión y los líquidos que salen por el fondo se envían por medio de una bomba a esta misma sección para mezclarse nuevamente con los gases y así de esta manera se logra condensar una buena parte de los hidrocarburos de la corriente gaseosa, esta mezcla es enviada a un enfriador que utiliza agua como enfriamiento.

Una vez que la corriente pasa por el enfriador, se envía a un tanque separador de hidrógeno, por el domo se obtiene una mezcla gaseosa que contienen principalmente hidrógeno, esta corriente se divide en tres, una parte se recircula mezclándose con la corriente de nafta de alimentación a la planta. Otra parte se dirige a la succión del compresor del gas producto. La última parte es el excedente el cual es enviado al sistema de gas combustible.

Los fondos del separador son llevados por medio de una bomba al intercambiador alimentación-fondos de la torre estabilizadora.

La corriente que se envió a la succión del compresor, una vez comprimida se dirige hacia el separador de alta presión, en el cuál se separa una pequeña cantidad de hidrocarburos líquidos los cuales son mezclados con los fondos del separador de hidrógeno, para posteriormente enviarse al intercambiador de la torre estabilizadora.

El efluente gaseoso del separador de alta presión se divide mandándose una parte a la Unidad Desulfuradora de naftas y, la otra se envía a la segunda etapa del compresor de gas producto en donde se comprime y se manada hacia las unidades Hidrodesulfuradora de destilados intermedios.

## Sección de Estabilización

Esta sección tiene como objetivo obtener nafta reformada mediante destilación fraccionada. La mezcla de hidrocarburos condensados provenientes del separador de hidrógeno de recirculación y del separador de alta presión son enviados como alimentación a la torre estabilizadora previamente pasando por el intercambiador alimentación-fondos en donde se precalienta esta mezcla. El destilado vapor que salen del domo de la torre se enfría en un intercambiador de calor el cual opera con agua de enfriamiento. Posteriormente la mezcla pasa a un tanque acumulador, en donde los incondensables constituidos por hidrógeno e hidrocarburos ligeros, se envían a la red de gas combustible.

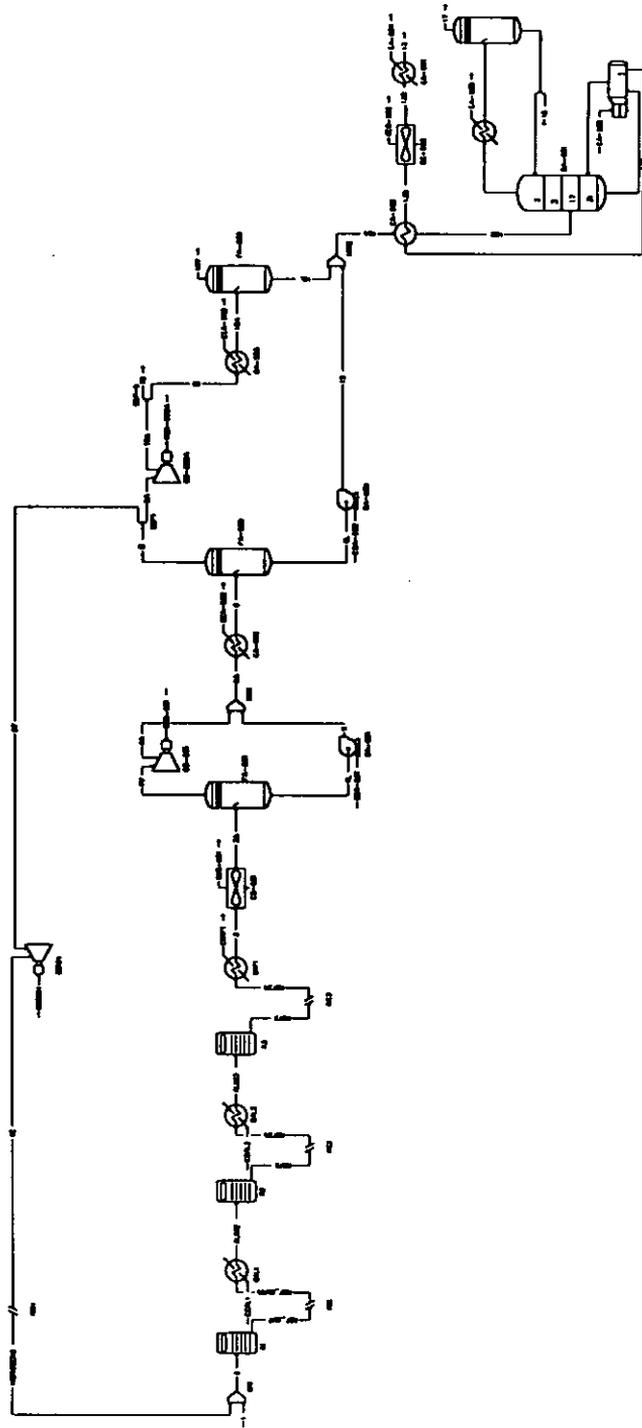
El destilado líquido constituido por propanos y butanos, se divide en dos corrientes, una de las cuales se envía como reflujo a la torre y el exceso se envía a tratamiento cáustico a la Unidad Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos.

Los fondos de la torre estabilizadora de nafta reformada se divide en dos corrientes, una se manda a un rehervidor para mantener las condiciones de temperatura en el fondo y el exceso se envía a almacenamiento pasando previamente por el intercambiador alimentación-fondos, y dos enfriadores de reformado producto.

La nafta reformada se envía a almacenamiento, el LPG se envía como carga a la Unidad Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos, y combustible, cuyo destino es la red general de gas combustible de la refinería.

La planta opera con un catalizador Pt-Re soportado en alúmina.

PLANTA REFORMADORA DE NAFTAS DE LA REFINERIA DE TULA HIDALGO



## 4.- Modelos Cinéticos

---

En este capítulo se realiza una descripción de los aspectos y fundamentos más importantes de los principales modelos cinéticos para la reformación catalítica de naftas.

**SMITH** ( Smith, 1959 )

Este modelo tiene contemplada cuatro reacciones , en donde representa a cada una de las clases que conforman la nafta.



3.- Hidrodesintegración de Naftenos

4.- Hidrodesintegración de Parafinas

La justificación para asumir tal modelo simplificado está en la naturaleza de las reacciones para formar compuestos que poseen el mismo número de átomos de carbono que el de sus precursores . Por ejemplo:



De esta manera es razonable asumir que cada uno de los tres pseudocomponentes posee el mismo número de carbonos. El número de átomos que se presume poseer cada clase se obtiene a partir del peso molecular promedio de la alimentación, basando esto en el hecho que la alimentación tiene una distribución muy estrecha de pesos moleculares, teniendo en cuenta lo anterior se deduce la siguiente fórmula a partir del balance de materia.

$$M_F = n_p M_p + n_N M_N + n_A M_A$$

donde  $n_p$ ,  $n_N$ , y  $n_A$  designan las moles de parafinas ( $C_nH_{2n+2}$ ), naftenos ( $C_nH_{2n}$ ), y aromáticos ( $C_nH_{2n-6}$ ) por mol de alimentación, respectivamente,  $n$  es el número de átomos de carbonos, y  $M_F$  es el peso molecular de la alimentación.

$$M_F = n_p(12n + 2n + 2) + n_N(12n + 2n) + n_A(12n + 2n - 6)$$

o

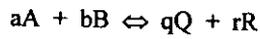
$$14n(n_p + n_N + n_A) = M_F - 2n_p + 6n_A$$

o

$$n = \frac{1}{14}(M_F - 2n_p + 6n_A)$$

Aunque las reacciones químicas son catalizadas de manera heterogénea, Smith obtiene correlaciones que describen el comportamiento de rapidez de reacción satisfactoriamente, tratando el sistema como si fuera homogéneo.

De tal manera que para la reacción pseudo-homogénea reversible:



La ecuación de reacción está dada para la siguiente ecuación general:

$$\frac{dN_A}{d\tau} = k_f (p_A^a p_B^b - \frac{1}{K_{eq}} p_Q^q p_R^r)$$

donde:

$k_f$  = constante de rapidez de reacción directa

$p_x$  = presión parcial del componente X.

$K_{eq}$  = constante de equilibrio de reacción

$N_A$  = moles de A por moles de alimentación fresca

$\tau$  = tiempo espacial

**Krane (Krane, 1960 )**

Este modelo considera tres pseudocomponentes principales para la nafta: aromáticos (A), naftenos (N) y parafinas (P). Se hace la extensión de considerar dentro de cada clase de pseudocomponentes, grupos o *lumps*, en donde la diferencia entre cada uno de ellos es el número de carbonos que posee cada grupo, de tal manera que existen : 10 grupos para los compuestos parafinicos  $C_1-C_{10}$ ; cinco grupos para los nafténicos y aromáticos  $C_6-C_{10}$ .

Se consideran las reacciones para los grupos descritos:

- 1.- Hidrodesintegración de compuestos parafinicos a parafinicos de menor número de carbonos.
- 2.- Ciclización de compuestos parafinicos a nafténicos de igual número de carbonos.
- 3.- Hidrogenación y apertura del anillo nafténico a compuestos parafinicos de igual número de carbonos.
- 4.- Desalquilación de compuestos nafténicos a compuestos nafténicos con menor número de carbonos.
- 5.- Deshidrogenación de compuestos nafténicos a aromáticos de igual número de carbonos.
- 6.- Hidrogenación y apertura de anillo de compuestos aromáticos produciendo parafinas de igual número de carbonos.
- 7.- Desalquilación de aromáticos en aromáticos de menor número de carbonos.

Las reacciones se consideran de pseudo-primer orden con respecto a cada hidrocarburo, de manera que la ecuación de rapidez para cada una de las reacciones que puede sufrir cada grupo posee la forma siguiente:

$$\frac{dN_{G_x}}{d(A/SV)} = -k \cdot N_{G_x}$$

donde:

N= Moles del compuesto reaccionante por moles de alimentación

A= actividad

SV = espacio velocidad

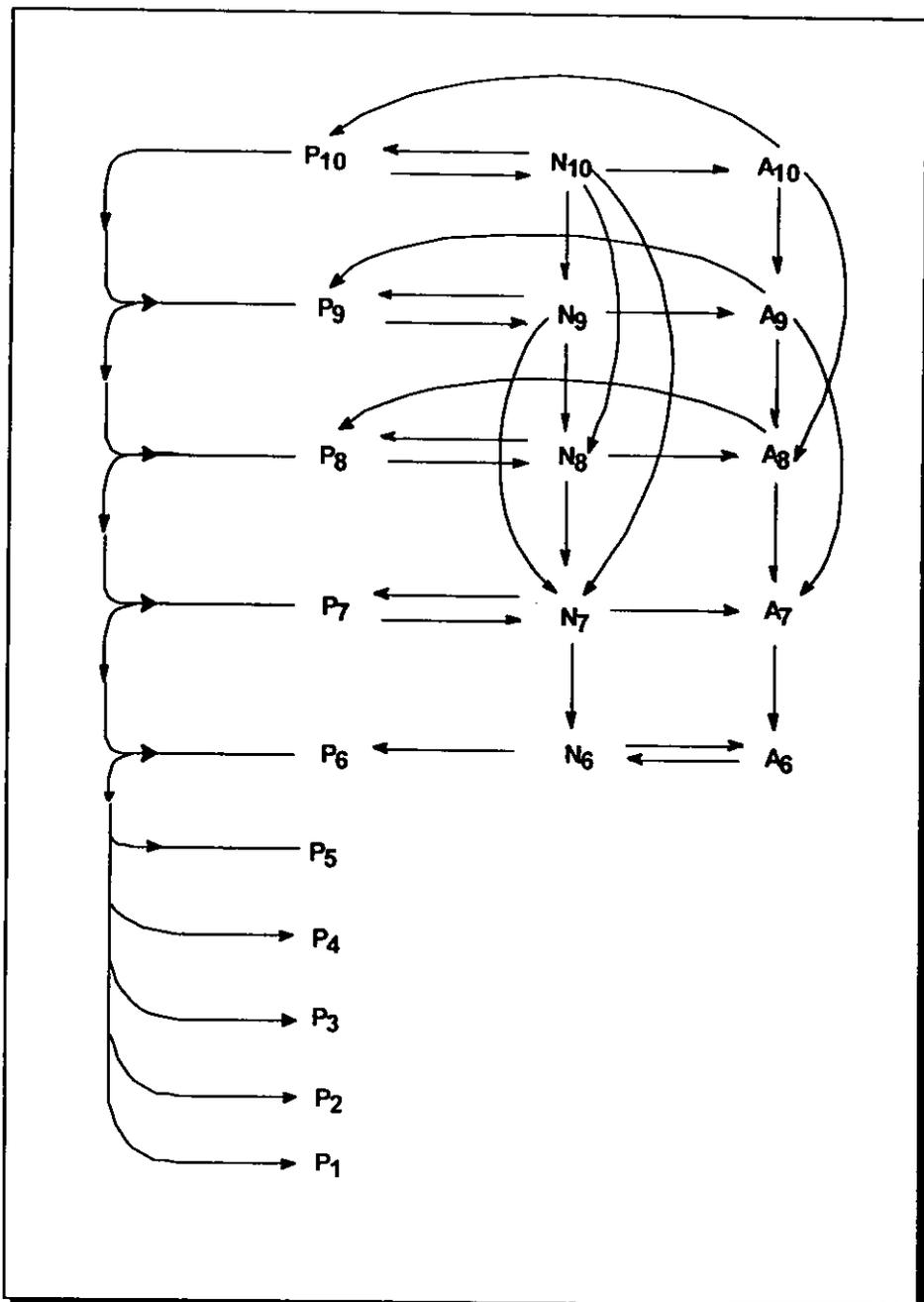
k = cte. de rapidez de reacción

G = grupo ( Aromáticos, Naftenos, Parafinas )

x = número de carbonos del grupo

El intervalo en que se aplica el modelo se encuentra dentro de un rango de temperaturas de 880 a 960 ° F, dentro de este rango se obtuvieron las constantes de rapidez de reacción.

El rango de la presión es de 100 a 450 psig. Los mismos autores recomiendan que para algunas reacciones las constantes deben ser corregidas en función a la presión base, cuyo valor reportado es de 300 psig.



Esquema de Reacción del Modelo propuesto por Krane (1960)

**Henningsen y Bungaard-Nielson (Henningsen and Bungaard-Nielson, 1970)**

En este modelo se representa a la nafta mediante pseudocomponentes, con la diferencia que el grupo nafténico se separa en alquilciclopentanos y alquilciclohexanos. Esto se hace debido a que los alquilciclohexanos presentan mayor reactividad hacia la aromatización en comparación con los alquilciclopentanos.

Para cada clase de pseudocomponente no se hace distinción en base al número de carbonos. El número de carbonos de cada clase para este modelo se eligió a partir de observaciones y datos reportados en la literatura determinándose que la nafta promedio correspondía a ocho carbonos, obteniéndose así los parámetros cinéticos para dicha nafta ideal.

La rapidez de reacción está dada por una cinética simple de primer orden en función de los hidrocarburos.

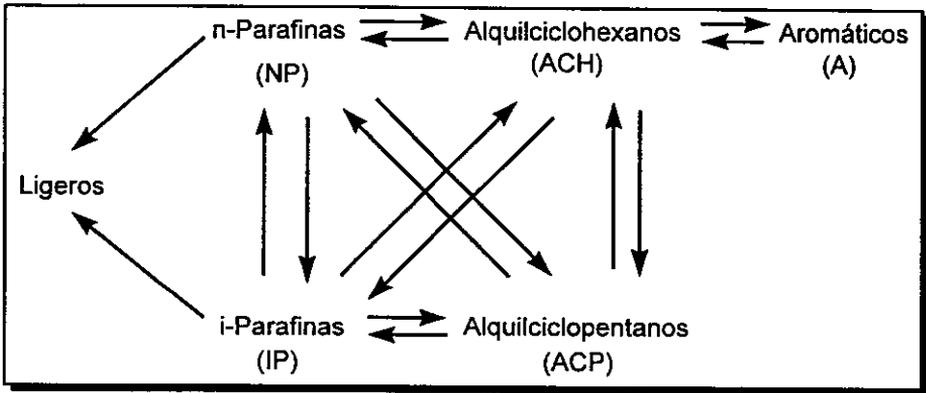
Las constantes de rapidez de reacción presentan la siguiente relación con la temperatura:

$$k = A \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right)$$

Las cuales son utilizadas dentro de las ecuaciones de rapidez que presentan la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}(C_i) = k \cdot C_i$$

donde  $C_i$  es la concentración del pseudocomponente  $i$ .



**Esquema de Reacción del Modelo de Reformación Catalítica propuesto por Henningsen and Bungaard-Nielson (1970)**

**Ramage, Graziani y Krambeck** (Ramage, Graziani y Krambeck , 1980)

Este modelo fue desarrollado para la Mobil y actualmente es usado en el monitoreo de procesos comerciales de reformación , como una guía en investigaciones , diseño de nuevos procesos, planeación y optimización .

Este modelo se desarrolló a partir de la agrupación en *lumps* , conteniendo cerca de 285 componentes observados mediante la cromatografía de gases en un sistema de reacción. El modelo se divide en 13 lumps, los cuales se conforman en:

Número de carbonos	Naftenos con seis carbonos (N <sub>6</sub> )	Naftenos con cinco carbonos (N <sub>5</sub> )	Parafinas (P)	Aromáticos (A)
C <sub>8</sub> <sup>+</sup>	Ciclohexanos C <sub>6</sub> <sup>+</sup>	Ciclopentanos C <sub>5</sub> <sup>+</sup>	Parafinas C <sub>8</sub> <sup>+</sup>	Aromáticos C <sub>8</sub> <sup>+</sup>
C <sub>7</sub>	Metilciclohexano	Ciclopentanos C <sub>7</sub>	Heptano	Tolueno
C <sub>6</sub>	Ciclohexanos	Metilciclopentano	Hexano	Benceno
C <sub>5</sub> <sup>-</sup>			Hidrocarburos C <sub>5</sub> <sup>-</sup>	

La rapidez de reacción para el sistema de reformación es descrito a través de constantes de rapidez pseudo-monomoleculares para cada uno de los 13 lumps. Esto es, el cambio para cada lump es representado por una cinética de acción de masas de primer orden para la cual aplica la misma isoterma de adsorción en cada paso de reacción. El balance de materia en estado estacionario para cada lump de hidrocarburo esta escrito en razón del diferencial del volumen de catalizador ,  $dv$ , de la manera siguiente:

$$\frac{d}{dv}(w) = \Phi \cdot k \cdot w$$

donde :

$$\Phi = \frac{\left( \frac{pV_c}{FRT} \right) \cdot k_\phi}{\left( 1 + K_H P_H + \frac{PG}{F} \cdot K \cdot a \cdot w \right)}$$

P, P<sub>H</sub> = presión total y parcial de hidrógeno

V<sub>c</sub> = volumen total de catalizador

T = temperatura

F = flujo molar total

G = flujo másico de hidrocarburo

K<sub>a</sub>, K<sub>H</sub> = coeficientes de equilibrio de adsorción

w = vector de fracciones masa de hidrocarburo

k = matriz de ctes. de selectividad de rapidez de reacción

k<sub>φ</sub> = constante de rapidez de tiempo-real

Se aplica para un reactor con lecho fijo de catalizador para el cual se asume flujo pistón y sección hueca constante en el lecho catalítico. Se utiliza un modelo

no disociativo del tipo Langmuir-Hinshelwood para el mecanismo de adsorción, el cual se emplea con presiones parciales redefinidas de la forma:

$$P_i = \frac{pG(1-H)w_i}{FM_i}$$

donde:

$P_i$  = presión parcial del hidrocarburo  $i$

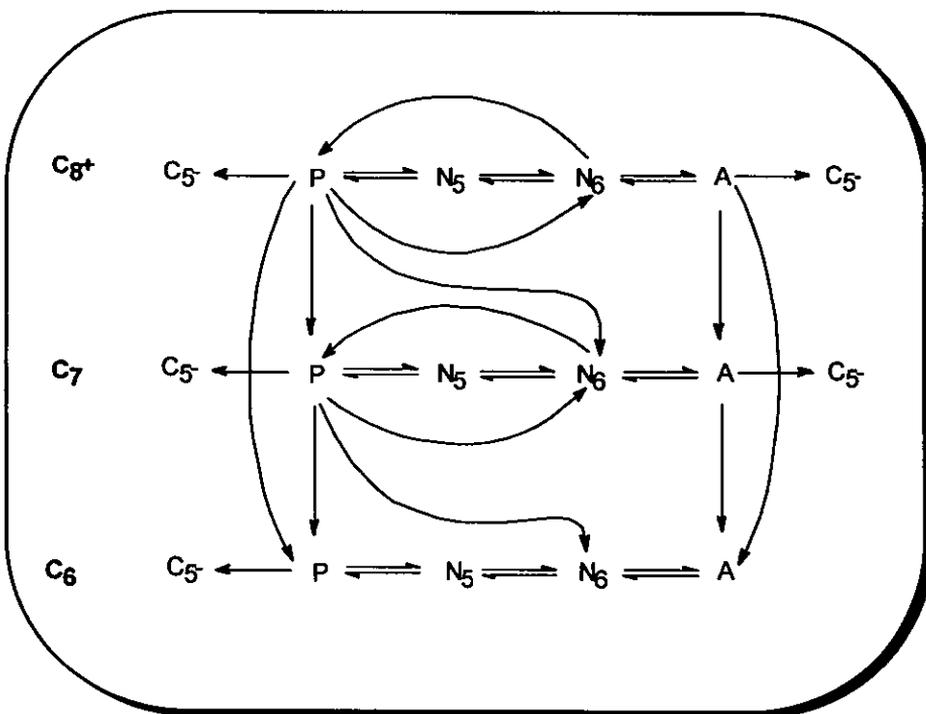
$M_i$  = peso molecular del hidrocarburo  $i$

$w_i$  = fracción masa, libre de hidrógeno, del hidrocarburo  $i$

$H$  = rendimiento en peso de hidrógeno basado en la carga de alimentación del mismo

La fracción masa de hidrocarburos se obtiene para una base libre de hidrógeno.

Esquema de Reacción del modelo propuesto por Ramage (1980)



**Marin y Froment (Marin and Froment, 1982)**

En este modelo se estudia el mecanismo para la desactivación del catalizador y su efecto en las ecuaciones de rapidez de reacción debido a la formación de coque y su depositación sobre el catalizador.

El esquema de reacción para la fracción  $C_6$ , es el resultado de un extenso estudio de los mecanismos que siguen las reacciones de reformación sobre el catalizador de  $Pt/Al_2O_3$ . Estos estudios fueron realizados sobre un reactor de tipo tubular, para rangos de temperatura de 420 y 500 °C; presión de 1.6 a 16 bar y una relación  $H_2$ /Hidrocarburo de 1.5 a 20.

Las ecuaciones de continuidad utilizadas por este modelo, para las reacciones comunes de reformación como para la formación de coque, son de la siguiente manera:

$$\frac{dx}{d\left(\frac{W}{F_{HC_6}}\right)} = r$$

manteniendo  $t$  constante

$$\frac{dC_c}{dt} = r_c$$

manteniendo  $W/F_{HC_6}$  constante

donde:

$x$  = vector de conversión para cada componente independiente

$W$  = masa del catalizador

$F_{\text{HCo}}$  = flujo molar de alimentación fresca de hidrocarburos

$t$  = tiempo

$C_c$  = contenido de coque [=] masa de coque / masa del catalizador

$r$  = vector rapidez de reacción de cada componente independiente

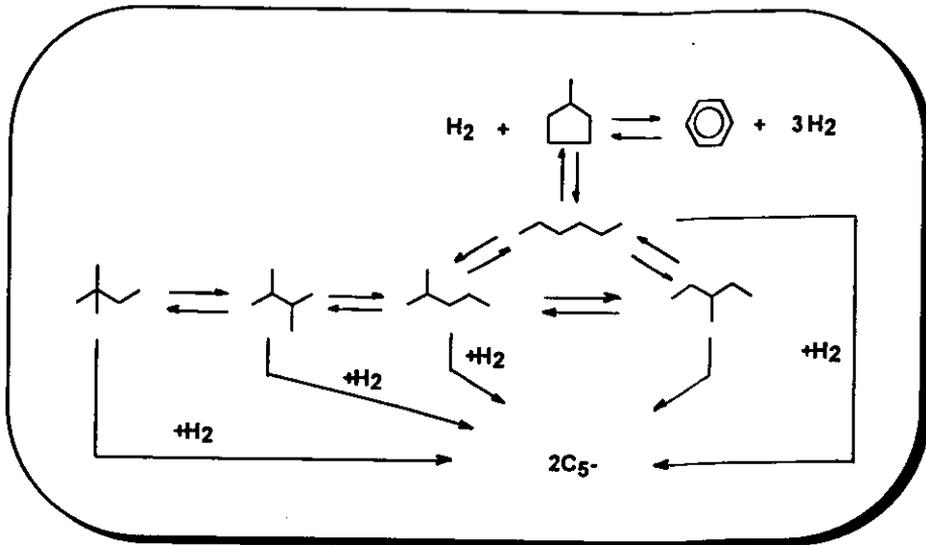
$r_c$  = rapidez de reacción para el coque

Las ecuaciones de rapidez son de tipo Hougen -Watson, en donde se considera la interacción de las especies con el catalizador. El mecanismo de interacción con el catalizador se establece de dos formas: de sitio único, para las reacciones de isomerización , ciclización así como para la expansión del anillo y de doble sitio , mecanismo en el cual posiblemente interviene el  $H_2$  para las reacciones de hidrodésintegración .

Los coeficientes de reacción, mantienen una funcionalidad del tipo Arrhenius con la temperatura, se calculan de la manera siguiente:

$$k = A_0 \exp \left[ - \frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right) \right]$$

esto se realiza para facilitar la determinación de la energía de activación, donde  $T_m$  es la temperatura promedio de todos los experimentos.



Esquema de Reacción de la fracción C<sub>6</sub> del modelo propuesto por Marin and Froment (1982)

**Padmavathi - Chaudhuri ( Padmavathi and Chaudhuri, 1997)**

En el presente modelo cinético, la alimentación de la nafta es caracterizada por naftenos ( alquilociclohexanos (ACH) y alquilociclopentanos (ACP) ), parafinas ( parafinas normales (NP) e isoparafinas (IP)) y aromáticos (A) en grupos de número de carbón desde  $C_6$ - $C_9$ . La alimentación es combinada con una recirculación de gas que contiene gases de  $C_1$  a  $C_5$  e hidrógeno haciendo un total de 26 grupos.

La deshidrogenación de cicloparafinas es catalizada por la función metálica del catalizador y es la reacción más rápida de todas las reacciones de reformación. Esta reacción incrementa el número de octano del producto . Es una reacción endotérmica . Un incremento en la masa molar de las cicloparafinas favorece la viabilidad termodinámica de la formación de aromáticos.

La isomerización de alquilociclopentanos a alquilociclohexanos es seguida por la deshidrogenación de aromáticos. La isomerización de parafinas normales a isoparafinas es una reacción muy conveniente, ya que la alimentación de la nafta consiste en un mayor porcentaje de parafinas normales, las cuales son isomerizadas a isoparafinas. Estas reacciones son moderadamente rápidas; son catalizadas por la función ácida; y la velocidad de la reacción se incrementa con un aumento de temperatura y presión.

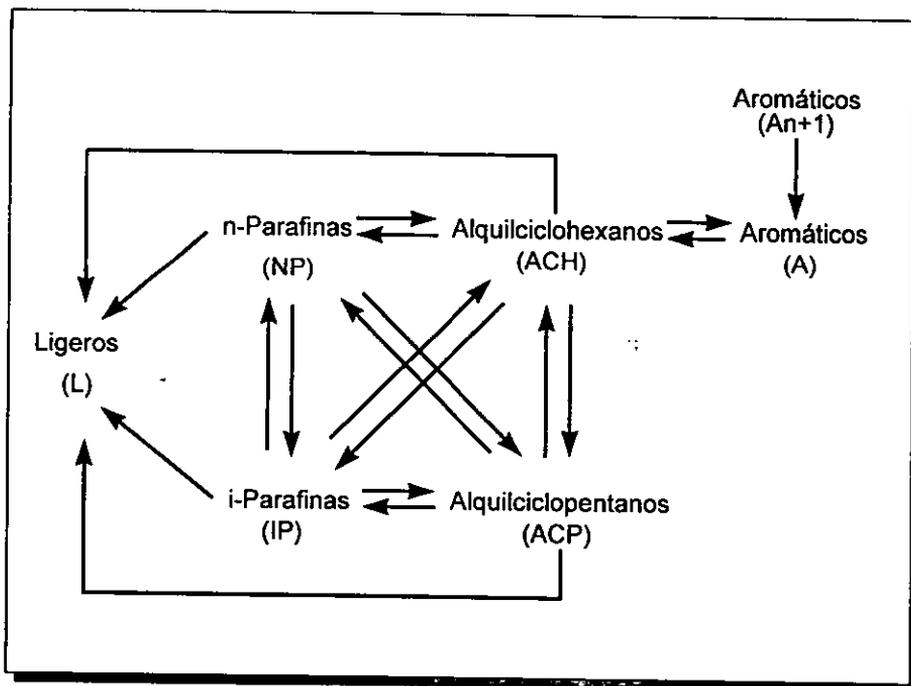
La deshidrociclización de parafinas a naftenos es relativamente lenta. La velocidad se compara con la del hydrocracking. La termodinámica de la reacción se incrementa con un número de carbono mayor. La reacción es favorecida a altas temperaturas y baja presión.

El hydrocracking es una reacción exotérmica y la velocidad de la reacción se incrementa con un aumento en la temperatura , presión y las parafinas de mayor número de carbono. El hydrocracking de naftenos es menor que el de las parafinas. En los naftenos los ciclopentanos son más susceptibles que los ciclohexanos. Las reacciones de cracking de naftenos y parafinas y la hidroalquilación son irreversibles. Todas las demás reacciones son reversibles.

La hidroalquilación es la reacción más lenta de la reformación . La velocidad se incrementa con un número de carbono mayor. Es una reacción exotérmica que es favorecida a altas temperaturas y presiones.

Las ecuaciones de este modelo se describen en el capítulo 5.

## Esquema de Reacción de Padmavathi-Chaudhuri (1997)



## 5.- Modelado del Reactor

---

Los reactores de lecho fijo se refieren a sistemas de dos fases en los que el fluido reaccionante fluye a través de un tubo lleno de partículas o gránulos catalíticos estacionarios .

Estos reactores consisten en uno o más tubos empacados con partículas de catalizador que se operan en posición vertical . Las partículas catalíticas pueden variar de tamaño y forma: granulares, gránulos compactados, cilíndricas, esféricas, etc. En algunos casos, especialmente con catalizadores metálicos tales como el platino , no se emplean partículas de metal , sino que este presenta en forma de mallas de alambre o catalizadores soportados. El lecho del catalizador consiste en un conjunto de capas de este material .

La rapidez total de reacción indica el grado de verificación de la reacción en cualquier punto del reactor, en términos de las concentraciones y temperaturas globales. Para evaluar temperaturas y concentraciones, se generan ecuaciones de conservación de masa y energía para el fluido que se desplaza en el lecho catalítico. La resolución de estas ecuaciones nos proporciona la temperatura y la composición de la corriente de proceso en cualquier punto del reactor.

Uno de los enfoques que se toma en cuenta para la resolución de estas ecuaciones es suponer que el reactor está compuesto por elementos de volumen lo suficientemente pequeños con respecto a la totalidad del reactor , de manera que dentro de éstos la variación en la concentración, temperatura y propiedades de la mezcla reaccionante son considerados como funciones

continuas de la posición en el reactor, dando por resultado la posibilidad de manejar las expresiones de conservación en forma de ecuaciones diferenciales.

Cuando existen gradientes de temperatura en el reactor, no es posible resolver analíticamente las ecuaciones diferenciales. El proceso de diseño requiere soluciones numéricas con procedimientos por etapas.

### Balance de Materia

$$\left( \begin{array}{c} \text{flujo molar} \\ \text{de entrada} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{flujo molar} \\ \text{de salida} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{desaparición} \\ \text{por reacción} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{acumulación} \\ \text{de materia} \end{array} \right)$$

De la ecuación:

$$F_n|_Z = F_n|_{Z+\Delta Z} + V_R(-r_n) \cdot \rho_{CAT} \quad \text{ecuación 1}$$

donde:

$F_n$  = flujo molar del compuesto n

$V_R$  = volumen del reactor

$-r_n$  = rapidez de reacción del compuesto n

$\rho_{CAT}$  = densidad del catalizador

$Z$  = longitud del lecho catalítico

poniendo el flujo molar,  $F_n$ , y el volumen del reactor,  $V_R$ , en función del área transversal del reactor,  $A$ , de la velocidad superficial,  $U_s$  y la concentración molar del componente  $n$ ,  $C_n$ , de tal forma que:

$$F_n = A \cdot U_s \cdot C_n \quad \text{y} \quad V_R = A \cdot \Delta Z$$

sustituyéndolos en la ecuación 1 :

$$A \cdot U_s \cdot C_n \Big|_z = A \cdot U_s \cdot C_n \Big|_{z+\Delta z} + A \cdot \Delta Z \cdot (-r_n) \cdot \rho_{CAT}$$

dividida por  $(A U_s \Delta Z)$  y reordenando:

$$\frac{C_n \Big|_{z+\Delta z} - C_n \Big|_z}{\Delta Z} = \frac{(-r_n) \rho_{CAT}}{U_s}$$

si se consideran los incrementos de  $\Delta Z$  de manera infinitesimal tal que  $\Delta Z \rightarrow 0$ , se obtiene la expresión diferencial:

....

$$-U_s \left( \frac{dC_n}{dZ} \right) = \rho_{CAT} \cdot (-r_n) \quad \text{ecuación 2}$$

La ecuación puede escribirse en términos del volumen del reactor ya que :

$$V_R = A \cdot Z$$

sustituyendo en la ecuación 2, tenemos:

$$U_S \left[ \frac{dC_n}{d(V_R / A)} \right] = \rho_{CAT} \cdot r_n \quad \text{ecuación 3}$$

$$U_S \cdot A \cdot \left[ \frac{dC_n}{dV_R} \right] = \rho_{CAT} \cdot r_n \quad \text{ecuación 4}$$

si la densidad del lecho catalítico viene dada por la relación:

$$\rho_{CAT} = \frac{W_{CAT}}{V_{CAT}}$$

donde  $W_{CAT}$  corresponde al peso del catalizador y  $V_R = V_{CAT}$  por lo que:

$$\rho_{CAT} = \frac{W_{CAT}}{V_R} \quad \text{ecuación 5}$$

sustituyendo ecuación 5 en 4, obtenemos:

$$U_S \cdot A \cdot \left[ \frac{dC_n}{dW_{CAT}} \right] = r_n \quad \text{ecuación 6}$$

si el flujo volumétrico y la concentración del componente n están dadas por :

$$V_0 = U_s \cdot A \quad \text{y} \quad C_n = \frac{F_n}{V_0}$$

la ecuación 6 puede escribirse como:

$$\frac{dF_n}{dW_{CAT}} = r_n$$

la cual si se multiplica por  $F_0 / F_0$ , donde  $F_0$  es el flujo de la alimentación fresca, se obtiene:

$$\frac{1/F_0}{1/F_0} \cdot \frac{dF_n}{dW_{CAT}} = r_n$$

$$\frac{d(F_n / F_0)}{d(W_{CAT} / F_0)} = r_n$$

misma que puede escribirse como:

$$\frac{dN_n}{d(1/SV)} = r_n$$

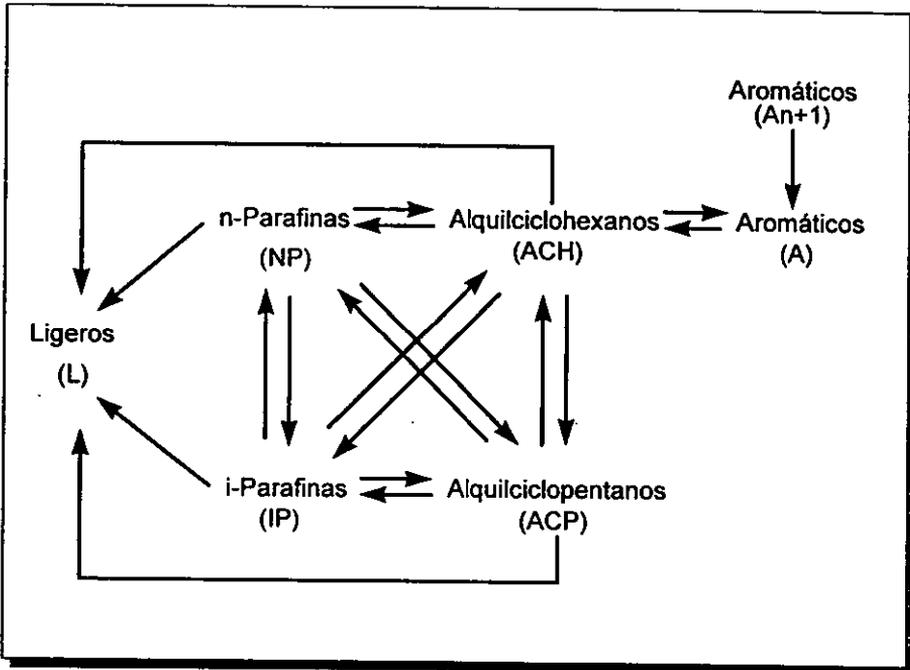
donde:

$V_0$  = flujo volumétrico de alimentación

$N_n$  = moles del componente n por mol de alimentación fresca

SV = espacio velocidad

El modelo cinético en que está basado el programa fue el propuesto por Padmavathi-Chaudhuri (Canadian Journal of Chemical Engineering Vol. 75, pp 930-937, 1997). Este modelo comprende el siguiente sistema reaccionante:

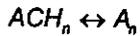


En el presente modelo cinético, la alimentación de la nafta es caracterizada por naftenos (alquilociclohexanos (ACH) y alquilociclopentanos (ACP)), parafinas (parafinas normales (NP) e isoparafinas (IP)) y aromáticos (A) en grupos de número de carbón desde  $C_6$ - $C_9$ . La alimentación es combinada con una recirculación de gas que contiene gases de  $C_1$  a  $C_5$  e hidrógeno haciendo un total de 26 grupos.

Los 26 grupos de hidrocarburos intervienen en el esquema de reacción considerado en este modelo.

El esquema de reacción propuesto en este modelo le corresponden las velocidades de reacción:

Deshidrogenación



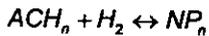
$$\frac{dX_{1n}}{d\theta} = k_{1n} (P_{ACHn} - \frac{P_{An} P_{H_2}^3}{K_{1n}}) = r_{1n}$$

Expansión de Anillo

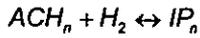


$$\frac{dX_{2n}}{d\theta} = k_{2n} (P_{ACPn} - \frac{P_{ACHn}}{K_{2n}}) = r_{2n}$$

Deshidrociclización



$$\frac{dX_{3n}}{d\theta} = k_{3n} (P_{ACHn} P_{H_2} - \frac{P_{NPn}}{K_{3n}}) = r_{3n}$$



$$\frac{dX_{4n}}{d\theta} = k_{4n}(P_{ACHn}P_{H_2} - \frac{P_{IPn}}{K_{4n}}) = r_{4n}$$

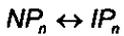


$$\frac{dX_{5n}}{d\theta} = k_{5n}(P_{NPn} - \frac{P_{ACPn}P_{H_2}}{K_{5n}}) = r_{5n}$$



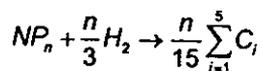
$$\frac{dX_{6n}}{d\theta} = k_{6n}(P_{NPn} - \frac{P_{ACPn}P_{H_2}}{K_{6n}}) = r_{6n}$$

Isomerización

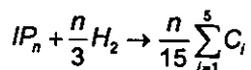


$$\frac{dX_{7n}}{d\theta} = k_{7n}(P_{NPn} - \frac{P_{IPn}}{K_{7n}}) = r_{7n}$$

## Cracking de Parafinas

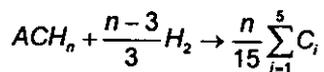


$$\frac{dX_{8n}}{d\theta} = k_{8n} \left( \frac{P_{NPn}}{P_i} \right) = r_{8n}$$

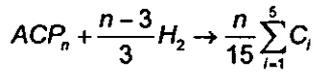


$$\frac{dX_{9n}}{d\theta} = k_{9n} \left( \frac{P_{IPn}}{P_i} \right) = r_{9n}$$

## Cracking de Naftenos

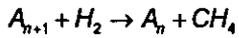


$$\frac{dX_{10n}}{d\theta} = k_{10n} \left( \frac{P_{ACHn}}{P_i} \right) = r_{10n}$$



$$\frac{dX_{11n}}{d\theta} = k_{11n} \left( \frac{P_{ACPn}}{P_i} \right) = r11_n$$

Hidroalquilación



$$\frac{dX_{12n}}{d\theta} = k_{12} P_{A_{n+1}} P_{H_2}^{0.5} = r12_n$$

(n=6-8)

Las ecuaciones del balance de materia son:

Naftenos:

$$\frac{dX_{ACPn}}{d\theta} = -r2_n + r5_n + r6_n - r11_n$$

$$\frac{dX_{ACHn}}{d\theta} = -r1_n + r2_n - r3_n - r4_n$$

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Parafinas:

$$\frac{dX_{NPn}}{d\theta} = r3_n - r5_n - r7_n - r8_n$$

Isoparafinas:

$$\frac{dX_{IPn}}{d\theta} = r4_n - r6_n + r7_n - r9_n$$

Aromáticos:

$$\frac{dX_{A6}}{d\theta} = r1_6 + r12_6$$

$$\frac{dX_{A7}}{d\theta} = r1_7 - r12_6 + r12_7$$

$$\frac{dX_{A8}}{d\theta} = r1_8 - r12_7 + r12_8$$

$$\frac{dX_{A9}}{d\theta} = r1_9 - r12_9$$

Hidrógeno:

$$\frac{dX_{H2n}}{d\theta} = 3r1_n - r3_n - r4_n + r5_n + r6_n - \frac{n}{3}(r8_n + r9_n) - \frac{(n-3)}{3}(r10_n + r11_n) - r12_n$$

### Balance de Energía

$$\left( \begin{array}{c} \text{energía en la corriente} \\ \text{de entrada} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{energía en la corriente} \\ \text{de salida} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{energía transferida} \\ \text{de los alrededores} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{acumulación de} \\ \text{energía} \end{array} \right)$$

$$\frac{dT}{d\theta} = \sum_{n=6}^9 \left( \sum_{i=1}^{12} (-\Delta H_n) r_n \right) \frac{NT}{FTCP}$$

donde la nomenclatura utilizada para el balance de materia y energía es:

NT = Flujo de alimentación , kmol/h

$$FTCP = \left( \sum F_j C_{p_j} \right)$$

F<sub>j</sub> = Flujo del componente j, kmol/h

ΔH = calor de formación, kJ/mol

$r_i$  = velocidad de reacción , kmol/(h.kg cat)

$X_{in}$  = conversión de la reacción  $i$  para el número de carbono  $n$ , kmol/kmol alimentado

$p$  = presión parcial, kPa

$\theta$  = kg del catalizador / (kgmol/h)

$K$  = constante de equilibrio

$r_{in}$  = rapidez de reacción, kmol/(hr kg cat)

$k_{in}$  = constate de rapidez

La solución de las ecuaciones que representan el sistema de reacción del proceso de reformación involucra el cálculo de los parámetros cinéticos y termodinámicos necesarios que definen estas ecuaciones.

La solución de las ecuaciones que representan el sistema de reacción del proceso de reformación catalítica de naftas se realiza utilizando el método de Runge-Kutta de 4° orden.

Este método se utiliza con el fin de recalcular cada uno de los parámetros en cada paso del método a la nueva composición y temperatura.

### Parámetros de estimación del Modelo

Los calores de formación , energías libres de formación y calores específicos a diferentes temperaturas son tomados de los datos del API. Las constantes de equilibrio son calculadas de la relación termodinámica:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K$$

Las constantes de velocidad siguen la relación de Arrhenius:

$$k = A \exp(-E / RT)$$

Los parámetros cinéticos, A y E son tomados de la literatura (Smith, 1959) y desde una planta piloto como una base inicial y después son utilizados los de una planta comercial.

Los valores utilizados para las constantes de equilibrio de las reacciones reversibles se dan en la tabla siguiente:

$K_{eq}=\exp(A' -B'/T)$	$kPa^3$	A'	B'
ACH ↔ A	C <sub>6</sub>	60.4706	25240.9
	C <sub>7</sub>	60.5908	25430.2
	C <sub>8</sub>	60.1909	239973.9
	C <sub>9</sub>	60.7522	23911.6
$K_{eq}=\exp(A' -B'/T)$	$kPa^{-1}$		
ACH ↔ NP	C <sub>6</sub>	-9.3604	-5250.233
	C <sub>7</sub>	-10.4890	-4085.148
	C <sub>8</sub>	-10.5665	-4617.193
	C <sub>9</sub>	-10.4140	-4476.830
ACH ↔ IP	C <sub>6</sub>	-11.3262	-6526.178
	C <sub>7</sub>	-12.9710	-5207.850
	C <sub>8</sub>	-13.5994	-5499.379
	C <sub>9</sub>	-11.2111	-5284.957

Los valores de calor de reacción, energía de activación y el factor pre-exponencial para calcular el modelo del reactor se presentan en la tabla siguiente:

Reacción		DH	E/R	lnA
		(kJ/mol)	(°K)	(kmol/h.kgcat kPa)
Deshidrogenación	C6	-73.52	1.95E+04	18.88
	C7	-71.89	1.95E+04	19.36
	C8	-67.24	1.95E+04	19.53
	C9	-65.23	1.95E+04	20.38
Deshidrociclización				
ACH<---->NP**				
Unidades de A (kmol/hkgcatkPa^2)	C6	45.47	3.31E+04	24.37
	C7	37.26	3.31E+04	24.43
	C8	30.56	3.31E+04	27.61
	C9	41.45	3.31E+04	29.76
ACH<---->IP**				
Unidades de A (kmol/hkgcatkPa^2)	C6	52.17	3.31E+04	26.36
	C7	43.63	3.31E+04	26.76
	C8	47.86	3.31E+04	28.96
	C9	47.39	3.31E+04	29.76
ACP----->NP**				
Unidades de A (kmol/hkgcatkPa^2)	C6	60.16	3.31E+04	24.04
	C7	60.38	3.31E+04	24.24
	C8	60.17	3.31E+04	25.23
	C9	60.37	3.31E+04	27.2
ACP----->IP**				
Unidades de A (kmol/hkgcatkPa^2)	C6	66.87	3.31E+04	24.37
	C7	66.74	3.31E+04	24.43
	C8	66.11	3.31E+04	27.61
	C9	66.36	3.31E+04	29.76
NP----->ACP				
	C6	-60.19	3.31E+04	29.07

	C7	-60.38	3.31E+04	29.13
	C8	-60.17	3.31E+04	31.31
	C9	-60.38	3.31E+04	32.96
IP----->ACP				
	C6	-66.89	3.31E+04	29.07
	C7	-66.74	3.31E+04	29.13
	C8	-66.11	3.31E+04	31.38
	C9	-66.36	3.31E+04	32.96
Cracking				
ACH y ACP*				
Unidades de A (kmol/h.kgcat)	C6	50.91	3.46E+04	42
	C7	47.82	3.46E+04	42.5
	C8	50.07	3.46E+04	43.5
	C9	50.58	3.46E+04	44
NP				
	C6	56.36	3.46E+04	40.3
	C7	55.69	3.46E+04	40.5
	C8	55.23	3.46E+04	40.6
	C9	55.14	3.46E+04	42.5
IP				
	C6	49.66	3.46E+04	40.5
	C7	50.91	3.46E+04	40.6
	C8	51.67	3.46E+04	40.7
	C9	52.17	3.46E+04	42.5
Expansión				
ACP ----> ACH				
	C6	14.6	2.38E+04	26.08
	C7	23	2.38E+04	26.08
	C8	18.4	2.38E+04	26.08
	C9	18.8	2.38E+04	26.08
ACH ----> ACP				
	C6	-14.6	2.60E+04	26.08
	C7	-23	2.60E+04	26.08
	C8	-18.4	2.60E+04	26.08
	C9	-18.8	2.60E+04	26.08

## Isomerización

NP → IP

C6	6.699	2.60E+04	24.48
C7	6.364	2.60E+04	24.48
C8	5.945	2.60E+04	24.88
C9	5.945	2.60E+04	24.88

IP → NP

C6	-6.7	2.60E+04	22.2
C7	-6.3	2.60E+04	22.2
C8	-5.9	2.60E+04	22.2
C9	-5.9	2.60E+04	22.2

## Hidroalquilación+

Unidades de A

(kmol/hkgcatkPa<sup>1.5</sup>)

C7	-47.585	1.79E+04	5.57
C8	-47.585	1.79E+04	5.57
C9	-47.585	1.79E+04	5.57

**Estructura del Programa REFCRIS**

El programa esta conformado por las subrutinas:

**VARALM**

Es un bloque de almacenamiento de los valores que el programa va obteniendo durante su ejecución.

**CONSREF**

Es un bloque de almacenamiento de datos de constantes termodinámicas y cinéticas como coeficientes de velocidad, energías de activación, capacidades caloríficas para ser utilizados en los cálculos pertinentes.

### **CINET\_REF**

En esta subrutina se calcula la rapidez de reacción de acuerdo a la temperatura y composición actual de cada paso de integración. A su vez se realiza el balance de materia para cada componente.

### **TEMPREF**

Esta es una subrutina que calcula el balance de energía.

### **RUK\_REF**

Esta es la subrutina en donde se lleva a cabo el método de integración para el sistema de reacción. Utilizando el método numérico Runge-Kutta de 4º orden para la solución de las ecuaciones diferenciales.

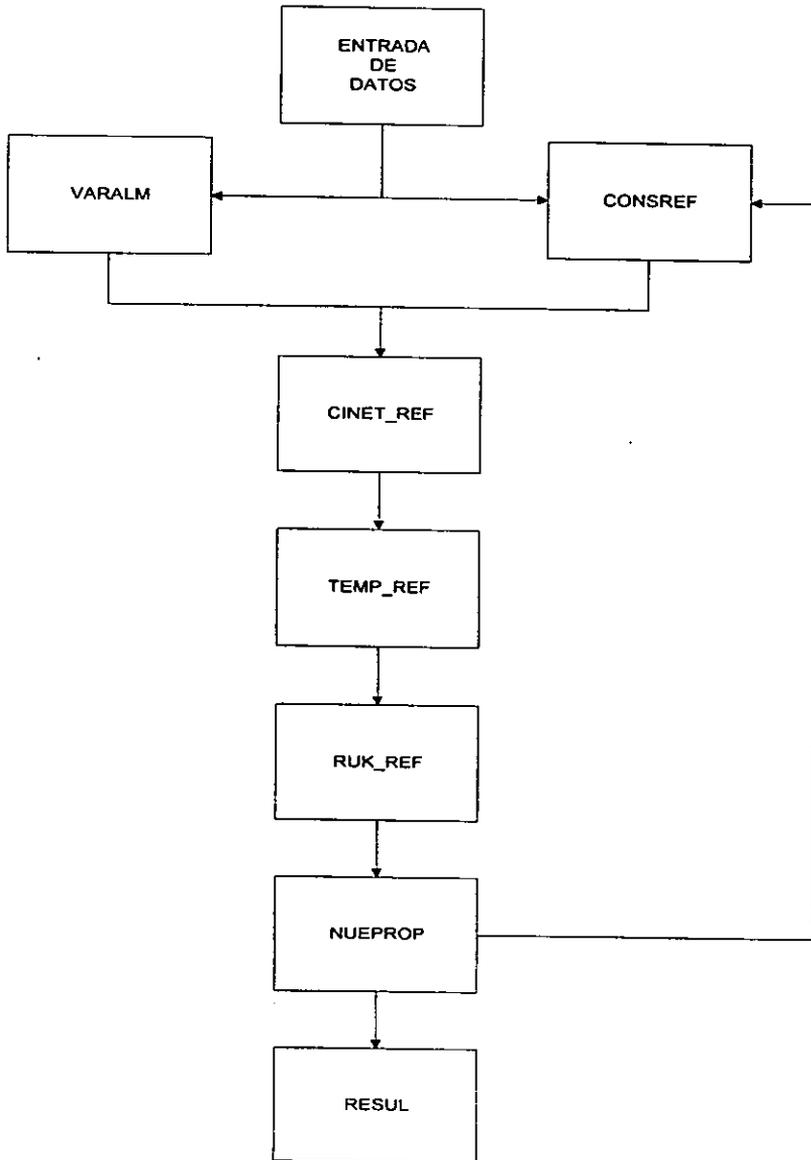
### **RESUL**

En este bloque se mandan los resultados obtenidos al simulador , para ser utilizados en la simulación completa del proceso.

### **NUEPROP**

Esta subrutina calcula las nuevas propiedades a las condiciones obtenidas en ese punto.

### Diagrama de Flujo del Programa REFCRIS



## 6.- Simulación de la Planta

---

La simulación de la Planta se llevó a cabo con el simulador Hysim de la compañía Hyprotech Ltd.

Esta simulación se efectúa de manera integral, todos y cada uno de los equipos se encuentran conectados entre sí, de manera que la simulación representa el comportamiento real de la Planta Reformadoras de Naftas.

Los pasos generales para generar el esquema del proceso de la simulación en Hysim son los siguientes:

- Seleccionar el sistema de unidades.
- Definir los modelos para calcular las propiedades termodinámicas.
- Especificar los componentes químicos presentes.
- Especificar los módulos de cálculo que representarán las operaciones de proceso.

En la tabla siguiente se muestran los módulos que se utilizaron para realizar la simulación:

Módulos que se utilizaron en la simulación	Equipo que representa
Mixer	Mezclador
Heater	Calentador a fuego directo
Cooler	Enfriador
Tee	Divisor
Separator	Tanque Separador
Pump	Bomba
Heater Exchanger	Cambiador de calor proceso a proceso
Comp	Compresor
Column Distillation	Columna de Destilación
Calculator	Módulo de programación

El módulo Calculator de Hysim es el lenguaje de programación que se utiliza para dicho simulador . Este lenguaje de programación es similar a la Notación Inversa Polaca, utilizada para calculadoras HP.

La codificación de los programas se efectúa desde el editor de MS-DOS, en donde los archivos son grabados con la extensión HCO. Por medio de esta extensión los programas son identificados desde el módulo Calculator , para correrlos desde el mismo simulador.

Se realizó la codificación del programa del sistema de reacción del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas, de esta manera desde el módulo Calculator se ejecutó el programa para efectuar la simulación del proceso.

Los datos que necesita el programa para realizarse son la relación W/F que es el peso del catalizador sobre el Flujo de alimentación para cada respectivo reactor.

Para lograr las condiciones de operación , se imponen las especificaciones a los módulos de cálculo .

La composición de alimentación se toma de un PIANO (Parafinas, Isoparafinas, Aromáticos, Olefinas ) que es una muestra tomada desde un cromatógrafo de gases, que presenta en forma desglosada la composición.

Los 26 grupos de hidrocarburos que intervienen en el esquema de reacción, se escogieron considerando a los componentes representativos:

Componente	Nomenclatura
Metano	C1
Etano	C2
Propano	C3
n-Butano	C4
n-Pentano	C5
n-Hexano	NP6
n-Heptano	NP7
n-Octano	NP8
n-Nonano	NP9
2-Metilpentano	IP6
22-Metilpentano	IP7
22-Metilhexano	IP8
3-Moctano	IP9
Ciclohexano	ACH6
Metilciclohexano	ACH7
Etilciclohexano	ACH8
n-Propilciclohexano	ACH9
Metil ciclopentano	ACP6
Etilciclopentano	ACP7
n-Propilciclohexano	ACP8
i-Butilciclopentano	ACP9
Benceno	A6
Tolueno	A7
o-Xileno	A8
n-Propilbenceno	A9
Hidrógeno	H2

La especificación de la alimentación se encuentra diseñada para procesar nafta con las siguientes características:

Densidad, °API 60.86  
 Densidad Relativa, 20/40 °C 0.732  
 Destilación a 760 mm Hg:

<b>TIE</b>	43 °C
10 %	78 °C
20 %	93 °C
30 %	105 °C
40 %	116 °C
50 %	128 °C
60 %	138 °C
70 %	149 °C
80 %	160 °C
90 %	173 °C
95 %	182 °C
<b>TFE %</b>	193 °C
Residuo	0.5 % Vol
Pérdidas	0.5 % Vol

Análisis PONA:

Parafinas	72 % Vol
Olefinas	0 % Vol
Nafténicos	17 % Vol
Aromáticos	11 % Vol

El PIANO que fue utilizado en la simulación presenta las siguientes características:

TIE	°C
0.0	27.0
2.0	34.9
5.0	52.0
10.0	67.4
15.0	71.7
20.0	79.4
30.0	99.3
40.0	106.6
50.0	126.8
60.0	135.6
70.0	144.3
80.0	148.7
90.0	155.1
95.0	158.4
98.0	159.9
100.0	161.0

Análisis PONA:

Parafinas	63.676% Vol
Olefinas	0.135 % Vol
Nafténicos	20.667 % Vol
Aromáticos	13.446 % Vol
Incógnitas	2.077 % Vol

Como se observa los datos de diseño comparándolos con los utilizados no son iguales en un 100% . La diferencia se debe a que los datos que presenta el PIANO, dependen de la composición de cada compuesto.

Datos utilizados en la simulación :

### Composición de la Carga

Compuesto	Fracción Mol
<b>Parafinas</b>	
P <sub>5</sub>	0.0538
P <sub>6</sub>	0.0610
P <sub>7</sub>	0.0731
P <sub>8</sub>	0.0606
P <sub>9</sub>	0.0827
<b>Isoparafinas</b>	
IP <sub>6</sub>	0.0500
IP <sub>7</sub>	0.0606
IP <sub>8</sub>	0.0531
IP <sub>9</sub>	0.1158
<b>Naftenos (ACP)</b>	
ACP <sub>6</sub>	0.0231
ACP <sub>7</sub>	0.0312
ACP <sub>8</sub>	0.0339
ACP <sub>9</sub>	0.0262
<b>Naftenos (ACH)</b>	
ACH <sub>6</sub>	0.0231
ACH <sub>7</sub>	0.0312
ACH <sub>8</sub>	0.0339
ACH <sub>9</sub>	0.0262
<b>Aromáticos</b>	
A <sub>6</sub>	0.0093
A <sub>7</sub>	0.0318
A <sub>8</sub>	0.0512
A <sub>9</sub>	0.0696

Temperatura de entrada al Reactor 1(°C) : 505

Temperatura de entrada al Reactor 2 (°C) : 505

Temperatura de entrada al Reactor 3 (°C) : 505

Relación Molar H<sub>2</sub>/HC: 4.5

Presión de Operación : 10 kg/cm<sup>2</sup>

Distribución del Catalizador

Reactor 1 : 17500 kg

Reactor 2 : 23750 kg

Reactor 3 : 40625 kg

Flujo de la carga : 1287.113 kgmole/hr

Los datos de especificación de los demás equipos que conforman el proceso en general fueron fijados de acuerdo a los datos de operación.

Datos de Operación de la Planta Reformadora de Naftas de Tula Hidalgo

CORR/COM	1	2	3	4	5	6	7	8	9
H2O		0.28	0.37	0.34	0.03	0.37	0.04	0.35	0.29
H2S		0.03	0.04	0.04	0	0.04	0.01	0.04	0.03
H2		14187.88	17778.29	17767.29	11	17778.29	1863.63	17760.8	14187.88
C1		1073.01	1354.14	1348.06	6.08	1354.14	141.79	1343.19	1073.01
C2		1014.86	1317.54	1291.78	25.66	1317.44	134.19	1270.43	1014.86
C3		692.73	980.56	920.46	60.1	980.56	91.54	867.18	692.73
IC4		168.15	274.64	238.55	36.09	274.64	22.35	210.49	168.15
nC4		205.29	365.03	303.8	61.23	365.03	27.25	256.99	205.29
iC5		94.81	237.41	162.01	75.4	237.41	12.41	118.69	94.81
nC5		50.8	145.87	92.34	53.53	145.87	6.65	63.59	50.8
C6		2997.3	2638.97	375.85	2263.12	2638.97	21.3	199.96	159.73
TOT.lbmolel/	2837.57	20485.14	25092.76	22500.52	2592.24	25092.76	2321.16	22091.71	17647.58
lb/hr	328577	480.887	480.887	218335	262552	480887	20034	190667	152310
kg/hr	149015	218089	218089	99018	119071	218089	9086	86470	69075
Ppsig	303	175	143	133.7	228	189	50	188	190
kg/cm2	21.3	12.3	10	9.4	16	13.3	35.2	13.2	13.4
T °F	200	876	1004	120	120	10	99	100	100
°C	93.3	468.9	540	48.9	48.9	37.8	37.2	37.8	32.8

Datos de Operación de la Planta Reformadora de Naftas de Tula Hidalgo

CORR/COM	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
H2O		0.02	0.02				0	0.02	0	0.02
H2S			0				0	0	0	
H2	308.98	1397.22	17.49				11.73	15.92	1.57	1400.31
C1	23.37	104.79	10.95				30.1	6.92	4.03	105.02
C2	22.1	99.06	47.01				247.45	13.88	33.13	99.28
C3	15.1	67.66	113.38				731.3	15.47	97.91	67.81
iC4	3.65	16.3	64.15			0.06	443.97	4.71	59.44	16.34
nC4	4.46	19.95	108.04			0.78	761.78	6.05	101.99	19.99
iC5	2.08	9.37	118.72	118.72	262.4	25.51				9.39
nC5	1.1	5.03	82.28	82.28	181.86	46.86				5.04
C6	3.46	15.44	2439.01	2439.01	5390.84	1170.42				15.47
TOT.lbmolel	348.3	1734.84	3001.05	2640.01	5835.1	1243.63	2226.33	62.97	298.07	1738.67
lb/hr	3317	14746	290221	273589	604702	143900	110271	1868	14764	15006
kg/hr	1504	6688	131620	124077	274241	65261	50010	847	6696	6805
Ppsig	395	935	311	230	351	370	303	50	303	395
kg/cm2	27.8	65.8	21.87	16.2	24.68	26	21.3	3.52	21.3	27.8
T°F	200	220	100	100	486	464	100	77	100	200
°C	93.3	104.4	37.8	37.8	252.2	240	37.8	25	37.8	93.3

## 7.- Análisis de Resultados y Conclusiones

---

Los resultados obtenidos en la simulación de la Planta Reformadora de Naftas se presentan en este capítulo.

La suposición de los componentes de entrada se hizo en base a un análisis desglosado por componente (PIANO), de acuerdo a los porcentajes en peso de entrada de cada parafina, aromático y nafteno se eligieron una serie de componentes los cuales representarían dicha fracción.

Los resultados de la simulación son mucho más completos en lo referente a la composición de los componentes que intervienen, comparándolos con los datos de operación los cuales están de una forma representativa.

La tabla 7.1 muestra los resultados de la simulación y la tabla 6.1 presenta los datos de operación de la planta y se puede observar que los resultados de la simulación se encuentran más completos.

El modelo cinético propuesto se considera que las reacciones que contribuyen a la reformación son:

- 1.- Deshidrogenación .
- 2.- Expansión de anillo.
- 3.- Deshidrociclización
- 4.- Isomerización.
- 5.- Cracking.
- 6.- Hidroalquilación.

En las gráficas 7.1, 7.2, 7.3 se observan los perfiles de temperatura de los tres reactores en donde  $T_0$  se refiere a la temperatura inicial y  $T_f$  a la temperatura final. De acuerdo al comportamiento térmico del sistema de reacción se puede apreciar una mayor disminución de la temperatura en el siguiente orden de posición de los reactores, debido al predominio de las reacciones endotérmicas al inicio del proceso.

En las gráficas del comportamiento de los flujos en los reactores : 7.4, 7.5, 7.6, 7.7 se observa que en el primer reactor, la rápida reacción de deshidrogenación es decir una gran cantidad de naftenos y la naturaleza de la reacción endotérmica presentan una gran desaparición de los naftenos.

En los siguientes reactores la presencia de los naftenos se observa disminuida, por lo que existe una menor disminución de la temperatura de reacción.

La importancia relativa de la reformación de naftas en determinada instancia se traduce en la producción de aromáticos.

En la gráfica 7.8 se observa el perfil de temperaturas de la columna de destilación utilizada en el proceso.

Las composiciones de los resultados obtenidos en el simulador se comparan con los datos del PIANO utilizado en la siguiente tabla 7.2.

	REFORMADO	SIMULADOR
NP6	0.03637	0.0419
IP6	0.08074	0.0332
NP7	0.02178	0.0512
IP7	0.07663	0.0438
NP8	0.00678	0.0426
IP8	0.02899	0.0431
NP9	0.00161	0.0575
IP9	0.0065	0.0586
ACP6	0.002	0.0029
ACH6	0.00203	0.003
ACP7	0.00104	0.00202
ACH7	0.0012	0.00198
ACP8	0.00235	0.00257
ACH8	0.0025	0.002
ACP9	0.0003	0.0004
ACH9	0.00039	0.00046
A6	0.05145	0.0105
A7	0.13209	0.0559
A8	0.17165	0.117
A9	0.13414	0.02396

Los resultados obtenidos en el simulador varían en una proporción considerablemente grande. Esto es debido a que se consideró un componente representativo de cada grupo y no se utilizaron varios componentes del mismo grupo, esto puede verse afectado en el comportamiento de cada componente.

En los grupos C<sub>9</sub> se consideró la composición de los componentes C<sub>10</sub>-C<sub>11</sub> por lo que se observa en los resultados de este grupo se presenta una composición mayor a la debida.

En general las diferencias que se presentan se deben al número de componentes empleados, a la cinética de las reacciones, ya que esta puede ser para ciertos componentes en específico.

En la siguiente tabla 7.3 se compara la temperatura de salida de los reactores:

Tabla 7.3

Reactor	Temperatura de Salida de Planta (°C)	Temperatura de Salida del Simulador (°C)
1	440	431
2	470	465
3	477	471

En esta se presenta una diferencia, la cual se debe al número de componentes que se maneja o al tipo de componentes, ya que cada uno tiene un calor específico y un  $\Delta H$  de reacción.

El RON obtenido en el Reformado es de: 92

Este fue calculado a partir de sus composiciones mol y el valor de las propiedades individuales para cada componente.

Tabla 7.1

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Condiciones	2						
	1	HIDROGENO	REF_OUTR	ALIM2	REFZR	ALIM3	REFZR
Vitrac	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperatura (°F)	941.0000	688.8602	688.8602	941.0000	688.1180	941.0000	688.7489
Presión psia	1.42.2304	1.42.2304	1.42.2304	1.42.2304	1.42.2304	1.42.2304	1.42.2304
Flujo Molar Bromole/hr	2837.5909	18766.4216	18839.8265	18839.8265	18776.8271	378619.8337	21489.4238
Flujo Molesto Br/hr	302997.4883	3.46904.4117	3.46904.4117	3.46904.4117	3.46904.4117	4449384.4118	4449384.4118
Liq Vol	28152.4837	87704.7111	87704.7111	87704.7111	87704.7111	838772.2719	71159.8288
Ensamble Shaft	1.91804E+08	2.56898E+08	2.56898E+08	3.43821E+08	3.43821E+08	3.43821E+08	3.91688E+08
Componentes (femole/hr)							
C1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C4	1.02094	10.7887	20.7883	20.7883	20.5872	20.5872	20.3864
C5	14.2874	48.7177	180.1659	180.1659	186.3520	186.3520	186.7200
NP8	171.3783	181.3471	184.3885	184.3885	178.0381	179.0381	170.3377
IP8	142.0780	20.8582	204.8659	204.8659	151.8644	151.8644	148.9480
IP7	207.2885	7.7889	170.1784	170.1784	198.5401	198.5401	188.8582
NP9	171.8648	13.3612	185.2588	185.2588	174.6419	174.6419	168.4788
IP9	186.4830	2.1584	170.8414	168.8117	158.7283	158.7283	152.8281
NP6	180.7130	4.8731	155.8881	148.8238	154.4928	151.4828	148.4728
IP6	234.8374	1.0578	237.1881	237.1881	224.3728	228.2728	187.2638
AC98	528.8309	300.0887	281.4746	281.4746	231.8884	203.1800	203.1800
AC99	88.4882	88.0783	31.4488	31.4488	22.3628	22.3628	18.8016
AC98	88.4882	88.0783	31.4488	31.4488	22.3628	22.3628	18.8016
AC97	88.4773	88.0674	31.4388	31.4388	22.3528	22.3528	18.7916
AC96	88.4664	88.0565	31.4288	31.4288	22.3428	22.3428	18.7816
AC95	88.4555	88.0456	31.4188	31.4188	22.3328	22.3328	18.7716
AC94	88.4446	88.0347	31.4088	31.4088	22.3228	22.3228	18.7616
AC93	88.4337	88.0238	31.3988	31.3988	22.3128	22.3128	18.7516
AC92	88.4228	88.0129	31.3888	31.3888	22.3028	22.3028	18.7416
AC91	88.4119	88.0020	31.3788	31.3788	22.2928	22.2928	18.7316
AC90	88.4010	87.9911	31.3688	31.3688	22.2828	22.2828	18.7216
AC89	88.3901	87.9802	31.3588	31.3588	22.2728	22.2728	18.7116
AC88	88.3792	87.9693	31.3488	31.3488	22.2628	22.2628	18.7016
AC87	88.3683	87.9584	31.3388	31.3388	22.2528	22.2528	18.6916
AC86	88.3574	87.9475	31.3288	31.3288	22.2428	22.2428	18.6816
AC85	88.3465	87.9366	31.3188	31.3188	22.2328	22.2328	18.6716
AC84	88.3356	87.9257	31.3088	31.3088	22.2228	22.2228	18.6616
AC83	88.3247	87.9148	31.2988	31.2988	22.2128	22.2128	18.6516
AC82	88.3138	87.9039	31.2888	31.2888	22.2028	22.2028	18.6416
AC81	88.3029	87.8930	31.2788	31.2788	22.1928	22.1928	18.6316
AC80	88.2920	87.8821	31.2688	31.2688	22.1828	22.1828	18.6216
AC79	88.2811	87.8712	31.2588	31.2588	22.1728	22.1728	18.6116
AC78	88.2702	87.8603	31.2488	31.2488	22.1628	22.1628	18.6016
AC77	88.2593	87.8494	31.2388	31.2388	22.1528	22.1528	18.5916
AC76	88.2484	87.8385	31.2288	31.2288	22.1428	22.1428	18.5816
AC75	88.2375	87.8276	31.2188	31.2188	22.1328	22.1328	18.5716
AC74	88.2266	87.8167	31.2088	31.2088	22.1228	22.1228	18.5616
AC73	88.2157	87.8058	31.1988	31.1988	22.1128	22.1128	18.5516
AC72	88.2048	87.7949	31.1888	31.1888	22.1028	22.1028	18.5416
AC71	88.1939	87.7840	31.1788	31.1788	22.0928	22.0928	18.5316
AC70	88.1830	87.7731	31.1688	31.1688	22.0828	22.0828	18.5216
AC69	88.1721	87.7622	31.1588	31.1588	22.0728	22.0728	18.5116
AC68	88.1612	87.7513	31.1488	31.1488	22.0628	22.0628	18.5016
AC67	88.1503	87.7404	31.1388	31.1388	22.0528	22.0528	18.4916
AC66	88.1394	87.7295	31.1288	31.1288	22.0428	22.0428	18.4816
AC65	88.1285	87.7186	31.1188	31.1188	22.0328	22.0328	18.4716
AC64	88.1176	87.7077	31.1088	31.1088	22.0228	22.0228	18.4616
AC63	88.1067	87.6968	31.0988	31.0988	22.0128	22.0128	18.4516
AC62	88.0958	87.6859	31.0888	31.0888	22.0028	22.0028	18.4416
AC61	88.0849	87.6750	31.0788	31.0788	21.9928	21.9928	18.4316
AC60	88.0740	87.6641	31.0688	31.0688	21.9828	21.9828	18.4216
AC59	88.0631	87.6532	31.0588	31.0588	21.9728	21.9728	18.4116
AC58	88.0522	87.6423	31.0488	31.0488	21.9628	21.9628	18.4016
AC57	88.0413	87.6314	31.0388	31.0388	21.9528	21.9528	18.3916
AC56	88.0304	87.6205	31.0288	31.0288	21.9428	21.9428	18.3816
AC55	88.0195	87.6096	31.0188	31.0188	21.9328	21.9328	18.3716
AC54	88.0086	87.5987	31.0088	31.0088	21.9228	21.9228	18.3616
AC53	87.9977	87.5878	31.0000	31.0000	21.9128	21.9128	18.3516
AC52	87.9868	87.5769	31.0000	31.0000	21.9028	21.9028	18.3416
AC51	87.9759	87.5660	31.0000	31.0000	21.8928	21.8928	18.3316
AC50	87.9650	87.5551	31.0000	31.0000	21.8828	21.8828	18.3216
AC49	87.9541	87.5442	31.0000	31.0000	21.8728	21.8728	18.3116
AC48	87.9432	87.5333	31.0000	31.0000	21.8628	21.8628	18.3016
AC47	87.9323	87.5224	31.0000	31.0000	21.8528	21.8528	18.2916
AC46	87.9214	87.5115	31.0000	31.0000	21.8428	21.8428	18.2816
AC45	87.9105	87.5006	31.0000	31.0000	21.8328	21.8328	18.2716
AC44	87.8996	87.4897	31.0000	31.0000	21.8228	21.8228	18.2616
AC43	87.8887	87.4788	31.0000	31.0000	21.8128	21.8128	18.2516
AC42	87.8778	87.4679	31.0000	31.0000	21.8028	21.8028	18.2416
AC41	87.8669	87.4570	31.0000	31.0000	21.7928	21.7928	18.2316
AC40	87.8560	87.4461	31.0000	31.0000	21.7828	21.7828	18.2216
AC39	87.8451	87.4352	31.0000	31.0000	21.7728	21.7728	18.2116
AC38	87.8342	87.4243	31.0000	31.0000	21.7628	21.7628	18.2016
AC37	87.8233	87.4134	31.0000	31.0000	21.7528	21.7528	18.1916
AC36	87.8124	87.4025	31.0000	31.0000	21.7428	21.7428	18.1816
AC35	87.8015	87.3916	31.0000	31.0000	21.7328	21.7328	18.1716
AC34	87.7906	87.3807	31.0000	31.0000	21.7228	21.7228	18.1616
AC33	87.7797	87.3698	31.0000	31.0000	21.7128	21.7128	18.1516
AC32	87.7688	87.3589	31.0000	31.0000	21.7028	21.7028	18.1416
AC31	87.7579	87.3480	31.0000	31.0000	21.6928	21.6928	18.1316
AC30	87.7470	87.3371	31.0000	31.0000	21.6828	21.6828	18.1216
AC29	87.7361	87.3262	31.0000	31.0000	21.6728	21.6728	18.1116
AC28	87.7252	87.3153	31.0000	31.0000	21.6628	21.6628	18.1016
AC27	87.7143	87.3044	31.0000	31.0000	21.6528	21.6528	18.0916
AC26	87.7034	87.2935	31.0000	31.0000	21.6428	21.6428	18.0816
AC25	87.6925	87.2826	31.0000	31.0000	21.6328	21.6328	18.0716
AC24	87.6816	87.2717	31.0000	31.0000	21.6228	21.6228	18.0616
AC23	87.6707	87.2608	31.0000	31.0000	21.6128	21.6128	18.0516
AC22	87.6598	87.2499	31.0000	31.0000	21.6028	21.6028	18.0416
AC21	87.6489	87.2390	31.0000	31.0000	21.5928	21.5928	18.0316
AC20	87.6380	87.2281	31.0000	31.0000	21.5828	21.5828	18.0216
AC19	87.6271	87.2172	31.0000	31.0000	21.5728	21.5728	18.0116
AC18	87.6162	87.2063	31.0000	31.0000	21.5628	21.5628	18.0016
AC17	87.6053	87.1954	31.0000	31.0000	21.5528	21.5528	17.9916
AC16	87.5944	87.1845	31.0000	31.0000	21.5428	21.5428	17.9816
AC15	87.5835	87.1736	31.0000	31.0000	21.5328	21.5328	17.9716
AC14	87.5726	87.1627	31.0000	31.0000	21.5228	21.5228	17.9616
AC13	87.5617	87.1518	31.0000	31.0000	21.5128	21.5128	17.9516
AC12	87.5508	87.1409	31.0000	31.0000	21.5028	21.5028	17.9416
AC11	87.5399	87.1300	31.0000	31.0000	21.4928	21.4928	17.9316
AC10	87.5290	87.1191	31.0000	31.0000	21.4828	21.4828	17.9216
AC9	87.5181	87.1082	31.0000	31.0000	21.4728	21.4728	17.9116
AC8	87.5072	87.0973					

Tabla 7.1 continuación

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Componentes (líquido)	3	3 A	4L	4V	4 A	6 A	6	6
<b>Condiciones</b>								
Vitac	0.9040	0.9386	0.0000	1.0000	1.0000	0.8413	0.0000	0.8319
Temperatura (°F)	248.0000	120.0000	120.0000	120.0000	192.0655	148.3049	0.0000	100.0000
Presión psia	151.8960	135.0000	135.0000	135.0000	183.7000	193.7000	228.0000	190.7000
Flujo Molar lbmole/hr	21590.4099	3484.0018	3484.0018	18108.4078	18106.4078	21590.4099	3484.0018	21590.4099
Flujo Mássico lb/hr	448384.4111	382260.4782	63123.9802	37869.3333	63123.9802	448384.4111	382260.4782	448384.4111
Liq Vol	71156.9358	37869.3333	37869.3333	37869.3333	37869.3333	71156.9358	37869.3333	71156.9358
Ensalpía Btu/hr	1.26609E+08	8.51720E-07	-1.05231E+06	8.82349E-07	7.58694E+07	7.50108E+07	-878554.2226	5.72319E-07
<b>Componentes (líquido)</b>								
C1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C4	20.3894	5.7882	14.6012	84.7847	14.6012	20.3894	5.7882	20.3894
C5	186.7230	101.9383	37.8633	170.3377	37.8633	186.7230	101.9383	186.7230
NP6	170.3377	132.3544	41.0628	18.3021	41.0628	170.3377	132.3544	170.3377
IP6	145.9480	104.8954	170.0541	29.0917	104.8954	145.9480	104.8954	145.9480
NP7	188.9582	169.4758	140.3842	148.7838	169.4758	188.9582	169.4758	188.9582
IP7	169.4758	157.2636	145.1878	12.0846	157.2636	169.4758	157.2636	169.4758
NP8	157.2636	203.7768	200.8289	2.9487	203.7768	157.2636	203.7768	157.2636
IP8	208.1800	208.1800	204.2204	3.9587	208.1800	208.1800	204.2204	208.1800
ACP8	15.8016	15.8016	12.6570	3.1446	15.8016	15.8016	12.6570	15.8016
ACP6	23.6356	23.6356	19.7801	3.8555	23.6356	23.6356	19.7801	23.6356
ACP7	18.4356	18.4356	15.1951	1.2408	18.4356	18.4356	15.1951	18.4356
ACP7	38.2832	38.2832	34.8241	3.4591	38.2832	38.2832	34.8241	38.2832
ACP8	16.1687	15.7965	0.3922	0.3922	16.1687	16.1687	15.7965	16.1687
ACP8	50.1582	48.3944	1.7638	0.2981	50.1582	50.1582	48.3944	50.1582
ACP8	14.2560	13.9589	0.2981	0.2981	14.2560	14.2560	13.9589	14.2560
ACP9	25.3825	24.8691	0.5134	0.5134	25.3825	25.3825	24.8691	25.3825
A8	41.8381	41.8381	33.8603	7.9778	41.8381	41.8381	33.8603	41.8381
A8	200.3481	200.3481	189.3415	13.8660	200.3481	200.3481	189.3415	200.3481
A8	415.6324	407.0883	1294.1287	8.5642	415.6324	415.6324	407.0883	415.6324
A9	1307.6820	1307.6820	1294.1287	13.7534	1307.6820	1307.6820	1294.1287	1307.6820
A9	17818.7120	17818.7120	17787.7657	17787.7657	17787.7657	17818.7120	17787.7657	17818.7120

Tabla 7.1 continuación

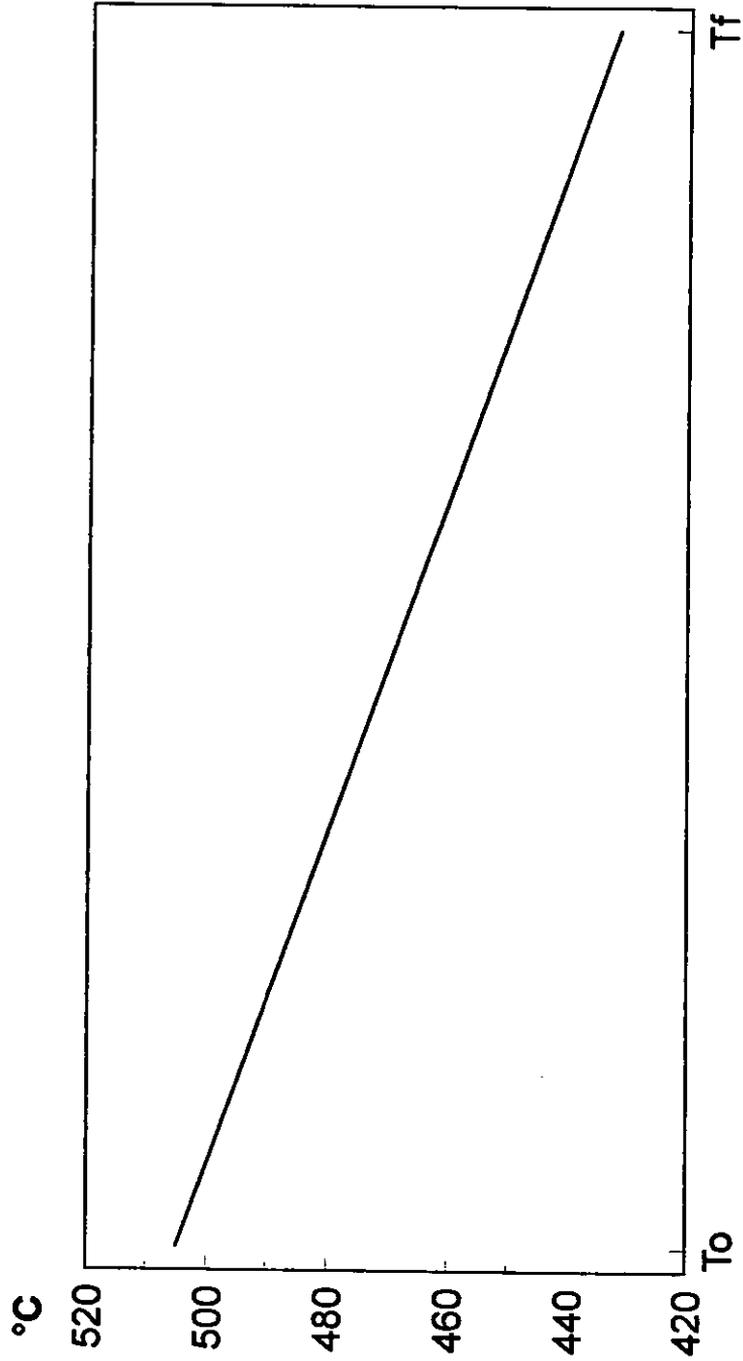
		RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN										
Corriente:		8 L	8	12	8 A	10 A	10	10	10	10 A	19 A	19 A
Condiciones												
Veloc	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.9090
Temperatura (°F)	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	257.7020	257.7020	257.7020	257.7020	257.7020	257.7020	100.0000
Presión psia	180.0000	180.0000	180.0000	180.0000	180.0000	385.0000	385.0000	385.0000	385.0000	385.0000	385.0000	380.0000
Flujo Molar Bromoethr	30250.8804	30250.8804	30250.8804	30250.8804	30250.8804	59250.9700	59250.9700	59250.9700	59250.9700	59250.9700	59250.9700	1736.8700
Flujo Molar Nitro	3369223.2810	3369223.2810	3369223.2810	3369223.2810	3369223.2810	4255.1726	4255.1726	4255.1726	4255.1726	4255.1726	4255.1726	4894.3241
Liq Vol	346335.8474	346335.8474	346335.8474	346335.8474	346335.8474	710.1758	710.1758	710.1758	710.1758	710.1758	710.1758	2546.0680
Entalpia Bruhtr	-4.531058E+06	-4.531058E+06	-4.531058E+06	-4.531058E+06	-4.531058E+06	7.117604E+06	7.117604E+06	7.117604E+06	7.117604E+06	7.117604E+06	7.117604E+06	5.86023E+06
Componentes (lbmole/hr)												
C1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C4	8.7192	11.6702	8.7192	1.3561	1.3561	1.3561	1.3561	1.3561	1.3561	1.3561	1.3561	1.1297
C5	132.0260	54.8637	132.0260	4.3653	4.3653	4.3653	4.3653	4.3653	4.3653	4.3653	4.3653	1.6246
NPH	150.0000	20.2376	150.0000	2.3516	2.3516	2.3516	2.3516	2.3516	2.3516	2.3516	2.3516	1.6804
IPR	122.9900	23.0577	122.9900	2.8804	2.8804	2.8804	2.8804	2.8804	2.8804	2.8804	2.8804	2.2331
IPV	160.2517	6.7048	160.2517	1.0114	1.0114	1.0114	1.0114	1.0114	1.0114	1.0114	1.0114	0.8428
IPW	140.0000	14.8820	154.0000	1.7265	1.7265	1.7265	1.7265	1.7265	1.7265	1.7265	1.7265	0.9428
NPB	151.8515	1.8750	161.8515	0.8073	0.8073	0.8073	0.8073	0.8073	0.8073	0.8073	0.8073	1.4407
IPB	200.8500	1.8246	1.8246	0.2600	0.2600	0.2600	0.2600	0.2600	0.2600	0.2600	0.2600	0.2339
ACP6	14.1474	1.8542	14.1474	0.1874	0.1874	0.1874	0.1874	0.1874	0.1874	0.1874	0.1874	0.5363
ACH6	21.8621	1.8735	21.8621	0.2200	0.2200	0.2200	0.2200	0.2200	0.2200	0.2200	0.2200	0.1146
ACP7	18.8618	0.5741	15.8618	0.0867	0.0867	0.0867	0.0867	0.0867	0.0867	0.0867	0.0867	0.1573
ACH7	36.8348	1.5684	36.8348	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1910
ACP8	48.3787	0.1852	16.0224	0.0182	0.0182	0.0182	0.0182	0.0182	0.0182	0.0182	0.0182	0.0258
ACH8	14.1274	0.1280	14.1274	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009	0.0160
ACP9	25.1688	0.1800	25.1688	0.0186	0.0186	0.0186	0.0186	0.0186	0.0186	0.0186	0.0186	0.0757
AS	37.4835	3.5047	37.4835	0.4537	0.4537	0.4537	0.4537	0.4537	0.4537	0.4537	0.4537	0.0125
A7	190.8888	6.3003	190.8888	0.7391	0.7391	0.7391	0.7391	0.7391	0.7391	0.7391	0.7391	0.0161
A8	412.0577	3.5740	412.0577	0.4154	0.4154	0.4154	0.4154	0.4154	0.4154	0.4154	0.4154	0.0180
A9	1302.3863	5.4646	1302.3863	0.6385	0.6385	0.6385	0.6385	0.6385	0.6385	0.6385	0.6385	0.3461
AZ	26.8680	17790.0445	26.8680	2087.1609	2087.1609	2087.1609	2087.1609	2087.1609	2087.1609	2087.1609	2087.1609	0.5319
												1722.1688
												344.8840

Tabla 7.1 continuación

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

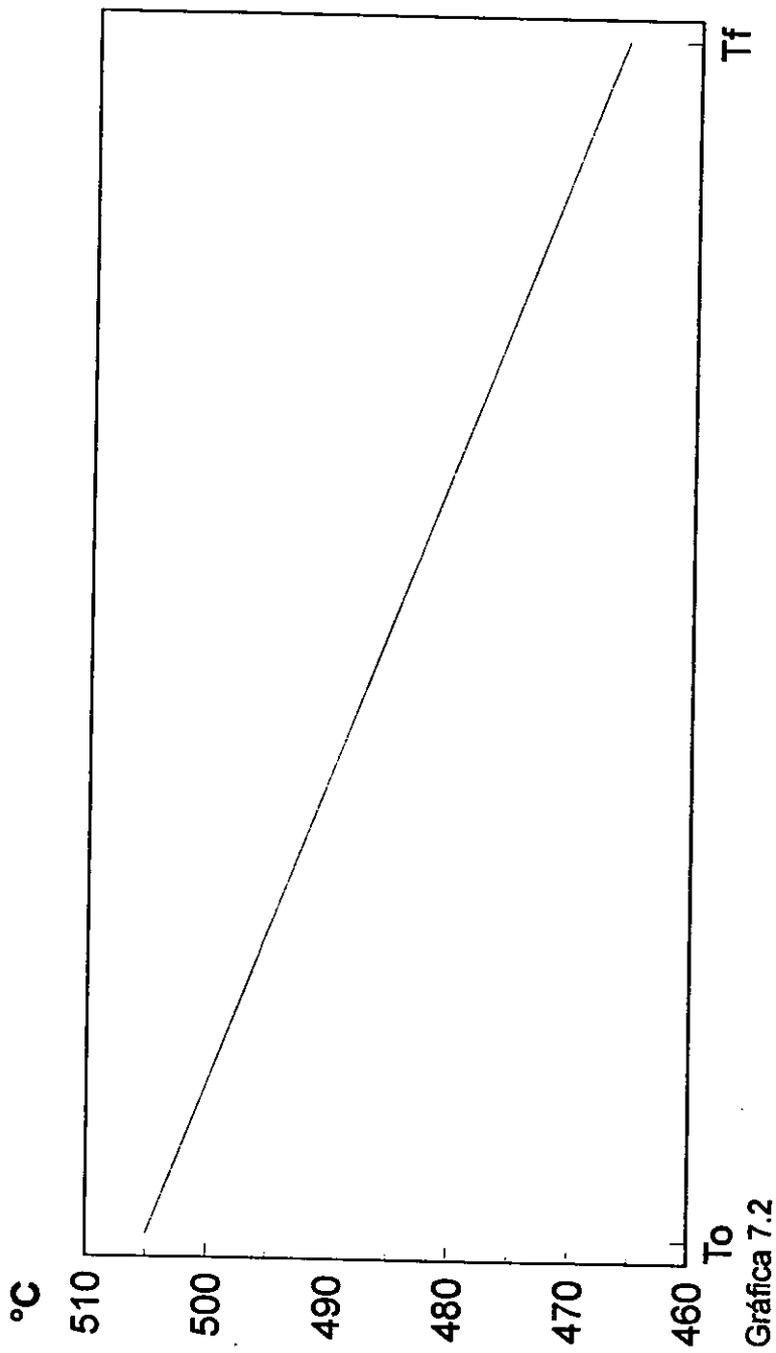
Condiciones	19 L	19 V	12 A	13 A	13 B	13 C	18	17	13
<b>Condiciones</b>									
Vitac	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
Temperatura (°F)	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	340.0000	293.0000	100.0000	100.0000	100.0000
Presión psia	300.0000	300.0000	311.0000	311.0000	290.3000	290.3000	300.0000	300.0000	224.3000
Flujo Molar (mole/hr)	1.0000	1736.7269	3031.8215	3031.8215	3031.8209	3031.8212	77.6440	3031.8209	3031.8209
Flujo Moleco (lb/hr)	187.1611	4987.1842	3091.264549	3091.264549	3037.65002	3091.264549	5540.6696	211.2804	3037.65002
Liq Vol	17.9462	3037.1467	34653.8677	34653.8677	30378.7036	34653.8677	803.3934	71.8325	30378.7036
Entradas Bluh	-2046.2359	6.95227E+06	-4.28942E+06	-4.28942E+06	4.98004E+07	4.13110E+07	-26578.4400	115467.8374	-4.02274E+06
<b>Componentes (lbmole/hr)</b>									
C1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
C4	0.0006	1.1339	8.7280	0.0737	0.0737	8.0780	8.0161	0.6982	0.0737
C6	0.1303	5.1643	132.1598	71.5399	71.5399	132.1598	59.0980	1.5218	71.5399
NP	0.1399	1.8195	152.9878	147.0314	116.9704	152.9878	2.9954	0.0227	147.0314
NP6	0.1478	0.1058	122.9878	161.3960	161.3960	161.3960	5.9598	0.0707	116.9704
NP7	0.1424	1.3020	154.7249	150.0299	150.0299	150.0299	0.0206	0.0015	154.4620
NP8	0.0903	0.1409	150.0299	151.8028	151.8028	151.8028	0.0000	0.0000	150.0299
NP9	0.1164	0.4200	151.8102	151.8028	151.8028	151.8102	0.0000	0.0000	151.8028
NP9	0.0725	0.0400	202.8954	202.8954	202.8954	202.8954	0.0000	0.0000	202.8954
NP9	0.0695	0.0987	202.8954	202.8954	202.8954	202.8954	0.0000	0.0000	202.8954
ACH6	0.0127	0.1474	14.1602	14.0036	14.0036	14.1602	0.1295	0.0001	14.0036
ACH6	0.0186	0.1722	21.8610	21.6575	21.6575	21.8610	0.0403	0.0003	21.6575
ACH7	0.0438	1.9735	15.8734	15.8734	15.8734	15.8735	0.0001	0.0000	15.8734
ACH7	0.0290	0.3620	36.6603	36.6603	36.6603	36.6603	0.0000	0.0000	36.6603
ACH7	0.0278	14.0312	16.0000	16.0000	16.0000	16.0312	0.0000	0.0000	16.0312
ACH8	0.0292	0.0465	48.4295	49.4295	49.4295	48.4295	0.0000	0.0000	48.4295
ACH8	0.0095	0.0059	14.1340	14.1340	14.1340	14.1340	0.0000	0.0000	14.1340
ACH8	0.0096	0.0064	25.2002	25.2002	25.2002	25.2002	0.0000	0.0000	25.2002
AI	0.0058	0.3454	37.6260	37.6260	37.6260	37.6260	0.4249	0.0040	37.6260
AI	0.1424	0.4704	187.0312	187.0299	187.0299	187.0312	0.0014	0.0000	187.0299
AI	0.1614	0.1647	412.2391	412.2391	412.2391	412.2391	0.0000	0.0000	412.2391
AI	0.0989	1.1620	1302.7674	1302.7674	1302.7674	1302.7674	0.0000	0.0000	1302.7674
AI	0.0020	172.1340	26.7038	0.0000	0.0000	26.7038	1.0469	27.6699	0.0000

# Perfil de Temperatura en el Primer Reactor



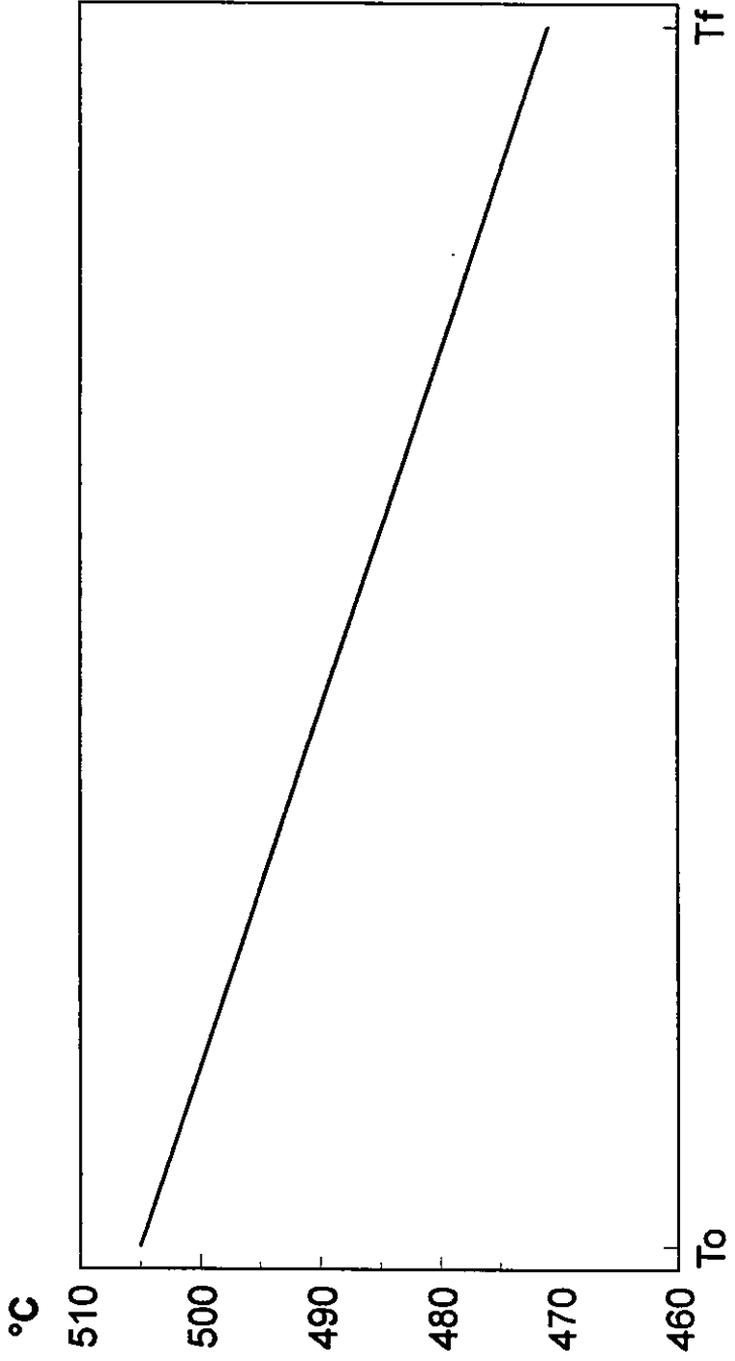
Gráfica 7.1

# Perfil de Temperatura en el Segundo Reactor



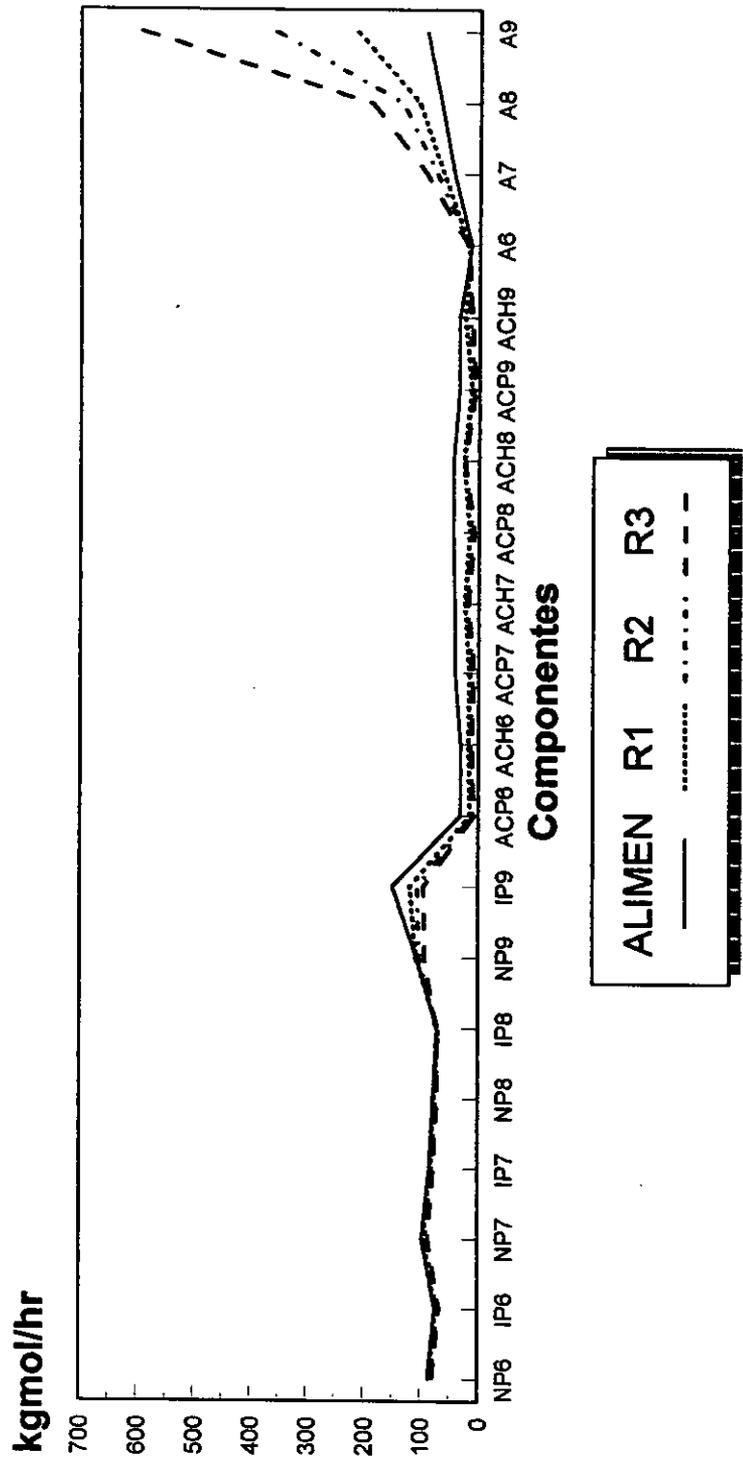
Gráfica 7.2

# Perfil de Temperatura en el Tercer Reactor



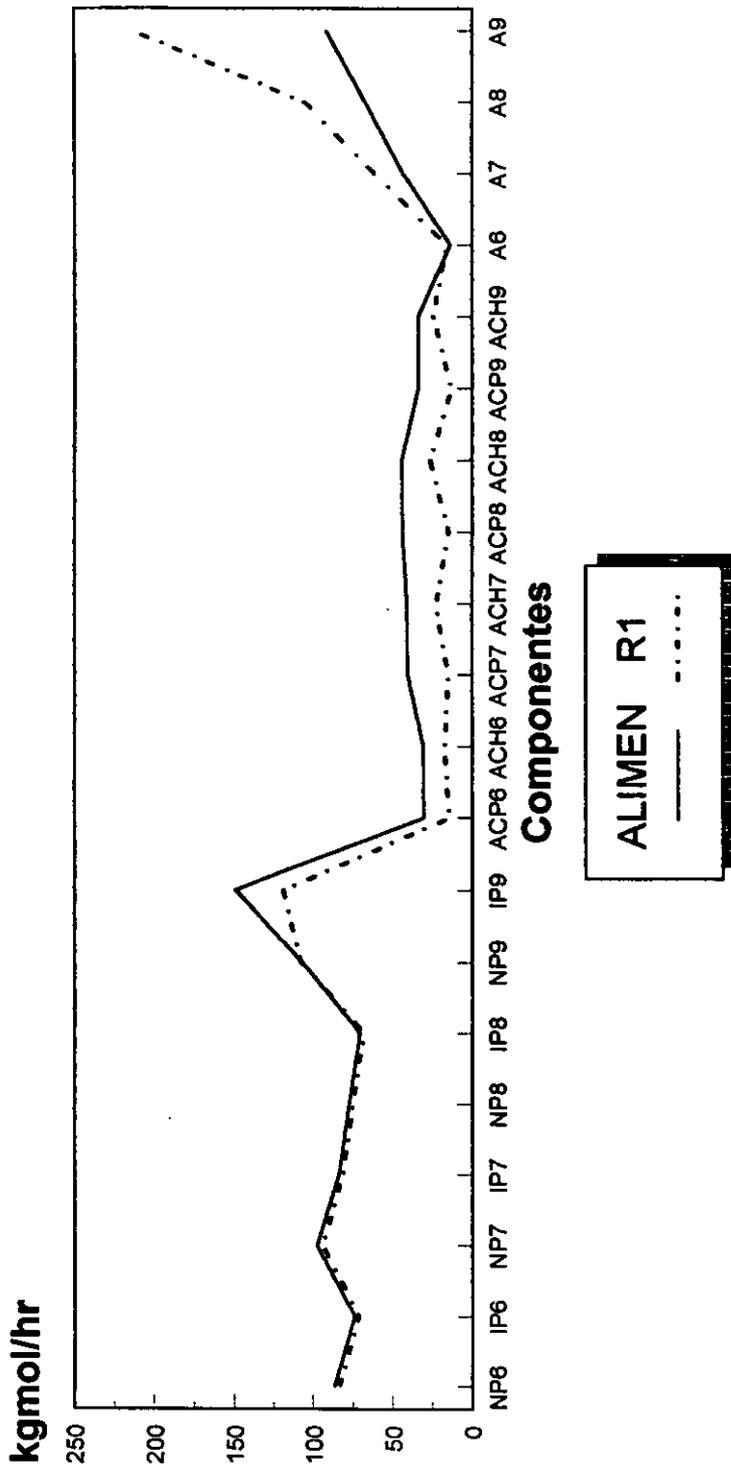
Gráfica 7.3

# Comportamiento de los Flujos en los Reactores



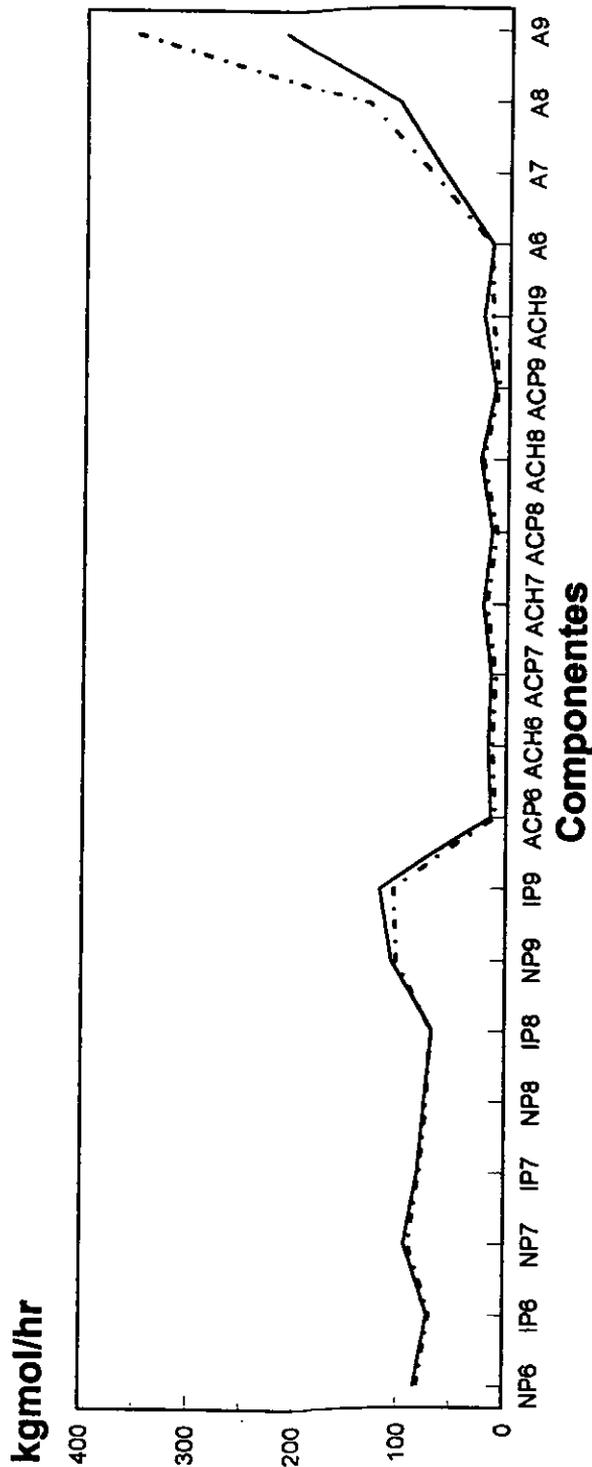
Gráfica 7.4

# Comportamiento de los Flujos en el Primer Reactor



Gráfica 7.5

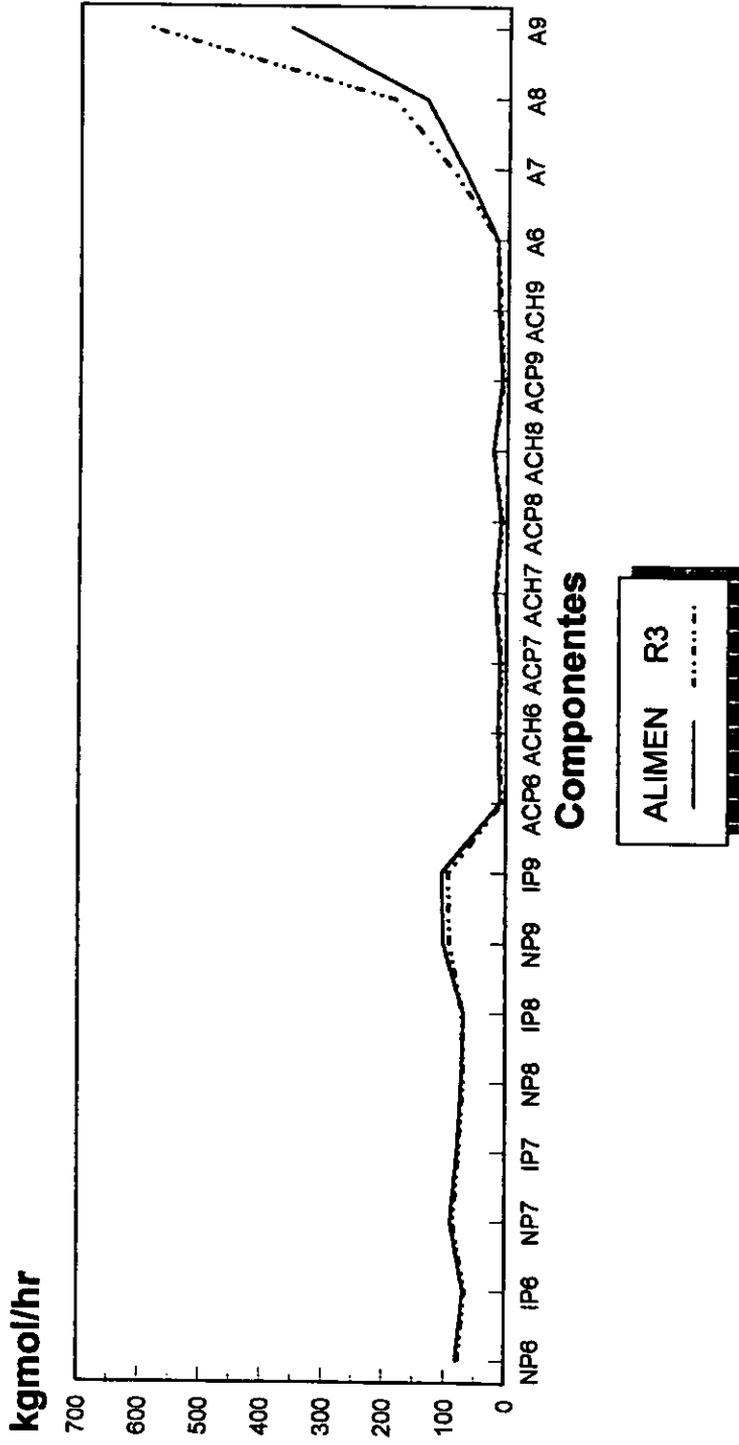
# Comportamiento de los Flujos en el Segundo Reactor



ALIMEN R2  
— — — — —  
- - - - -

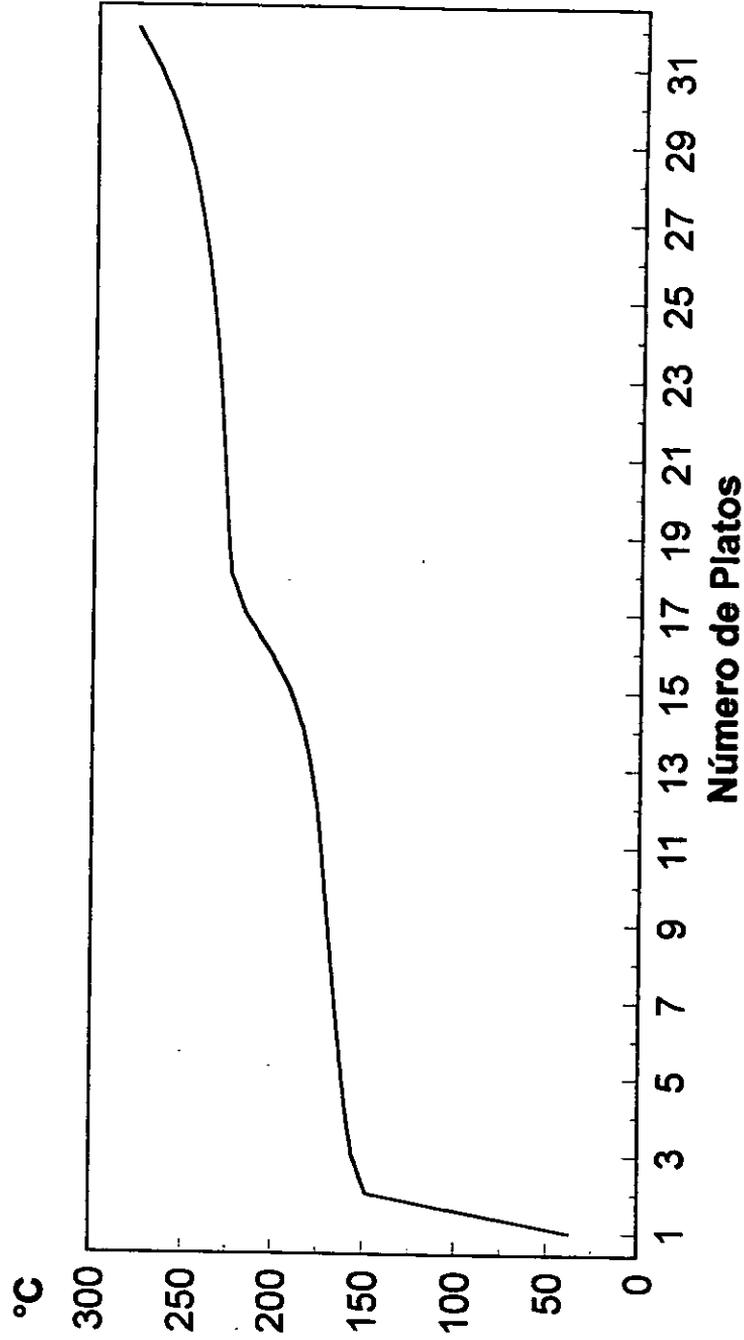
Gráfica 7.6

# Comportamiento de los Flujos en el Tercer Reactor



Gráfica 7.7

# Perfil de Temperatura de la Columna de Destilación



Gráfica 7.8

## Conclusiones

Se cumplió con el objetivo del trabajo: *desarrollar un programa en el Simulador Hysim para la simulación del sistema de reacción del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas, empleando un modelo cinético existente.*

El trabajo realizado muestra la simulación de la planta Reformadora de Naftas, en donde se aprecian las diferencias considerables al comparar los resultados obtenidos con los reportados en planta.

El modelo cinético utilizado, Padmavathi-Chaudhuri es un modelo amplio que nos ayudó a desarrollar el proceso completo de la reformación catalítica de naftas.

Una de las restricciones que encontramos fue que trabajamos a las condiciones de operación de la Planta Reformadora de Tula Hidalgo, es decir que nuestro modelo fue hecho a otras condiciones.

El desarrollo del programa no incluyó la utilización de un modelo de desactivación.

Es importante destacar que una buena simulación está en función de la correcta selección de los modelos de cálculos de propiedades , de los módulos de cada operación.

Cabe mencionar que la cinética utilizada para poder llevar acabo la simulación, se estimo de datos reportados de la literatura, es recomendable continuar con otro estudio que sea más exhaustivo para ajustar los parámetros para obtener mejores resultados.

El presente trabajo nos da una idea de la importancia que tiene dentro de la ingeniería química el desarrollo de modelos de proceso que encaminen al

ingeniero hacia la toma de decisiones entre la elección de un proceso u otro en particular. Además de proporcionar una base para la elección de condiciones de proceso encaminadas al óptimo desempeño de la planta.

Dentro del presente estudio se desarrolla un modelo de proceso que persigue un objetivo particular, sin embargo ejemplifica la manera de solución de un problema que atañe directamente al ingeniero químico, ya que él posee las herramientas y el conocimiento adecuado para formular una solución, a lo que se hace referencia es que no solo se necesita de conocimientos de cinética química sino el desarrollo de modelos de procesos químicos envuelven todas las disciplinas que el ingeniero químico fue encaminado a manejar, desde matemáticas, métodos numéricos, termodinámica, etc. Por lo mismo pienso que el presente trabajo no se limita a una reducida aplicación sino puede ser aprovechado dentro del área didáctica en ingeniería de procesos en la simulación de uno de los procesos más importantes dentro de la reformación del petróleo.

## 8.- Bibliografía

---

Smith, J.M **Kinetics of Analysis of Nafta Reforming with platinum catalyst.**  
Chem.Eng.Progr.55, No6, pp 76-80, 1959

G.B. Marin and G.F Froment **Reforming of C<sub>6</sub> Hydrocarbons on a Pt-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**  
Chemical Engineering Science Vol. 37, No.5, pp 759-773, 1982

H.G. Krane , A.B. Groh, B.I. Schulman and J. H Sinfelt  
**Reactions in Catalytic reforming of Napthas**  
Proc. 5<sup>th</sup> Wold Petroleum Congress, Vol.3, pp.39-53, 1960

Padmavathi & Chaudhuri **Modelling and Simulation of Commercial Catalytic Naphtha Reformers** Canadian Journal of Chemical Engineering Vol.75, pp 930-937, Oct, 1997

J. Henningsen and M. Bungaard-Nielson **Catalytic Reforming**  
British Chemical Engineering Vol.16, pp.1433-1436, Nov,1970

Gates,B. C., Jatzer, J. R., and Schut, G.C.A **Chemistry of Catalytic Processes**  
Mc. Graw Hill

M.P. Ramage, Kenneth R. Graziani and F.J Krambeck  
**Development of Mobil's Kinetic Reforming Model**  
Chemical Engineering Science Vol. 35, pp 41-48, 1980

George J. Aantos, Abdullah M. Aitani, And José M. Parera

**Catalytic Naphtha Reforming**

Science and Technology. Eds., Marcel Dekker, New York 1995

Franco M, Mario.; **Estudio de la reducción de benceno en la Reformación de Naftas, a través de la modelación del reactor;**Tesis Universidad la Salle,1996

Pérez Romo Patricia; **Simulación y propuesta de mejoras a la planta reformadora de naftas de la Refinería de Tula, Hidalgo;** Tesis UNAM, 1994

Muñoz Arroyo, José Antonio; **Ingeniería básica del sistema de reacción de la reformación catalítica de naftas.** Tesis de Maestría, UNAM, 1990

J.H. Jenkins and T.w. Stephens; **Kinetics of cat reforming;** Hydrocarbon Processing; Vol.59; November 1980; pp. 163-167

Hill, Charles; **An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design;** John Wiley & Sons; USA 1977

Maciej Radosz and Jerzy Kramarz; **To predict cat reformer yield;** Hydrocarbon Processing, Jul, 1980; pp. 201-203

Mark E. Davis; **Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers;** John Wiley & Sons

G.F. Froment; **The kinetics of Complex Catalytic Reactions;** Chemical Engineering Science, Vol.42, No.5, pp. 1073-1087, 1987

G.F. Froment, Kenneth B. Bischoff; **Chemical Reactor Analysis and Design;** John Wiley & Sons

**Sinfelt J; Industrial Applications of bimetallic catalysts; ESSO 1983**

**Hyprotech Ltd. Hysim User's Guide**

**PEMEX; Refinería de Tula , Superintendencia de procesos, Planta Reformadora de Naftas, Manual de Operación**

**Smith, J.M.; Ingeniería de la Cinética Química, C.E.C.S.A., México, 1986.**

**L.E; Turpin; Cut Benzene out of Reformate; Hydrocarbon Processing; Jun, 1992  
pp: 81-92**