



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE LA NUEVA PLANTA CCR DE
LA REFINERÍA ING. ANTONIO M. AMOR, SALAMANCA.**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO**

PRESENTA

OSVALDO MORALES ROMERO



MÉXICO, D.F.

2014



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: MANUEL VÁZQUEZ ISLAS
VOCAL: CELESTINO MONTIEL MALDONADO
SECRETARIO: MARTÍN RIVERA TOLEDO
1er. SUPLENTE: MARIO GONZALO VIZCARRA MENDOZA
2° SUPLENTE: JUAN PABLO AGUAYO VALLEJO

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

**LABORATORIO DE SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE
PROCESOS, CONJUNTO E DE LA FACULTAD DE QUÍMICA,
CIUDAD UNIVERSITARIA.**

ASESOR DEL TEMA:

CELESTINO MONTIEL MALDONADO

SUSTENTANTE:

OSVALDO MORALES ROMERO

SUPERVISOR TÉCNICO:

ILEANA RODRÍGUEZ CASTAÑEDA

Contenido

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.0 INTRODUCCIÓN | 1 |
| 2.0 REFORMACIÓN CATALÍTICA DE LA NAFTA..... | 2 |
| 2. 1 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA. Hidrocarburos..... | 3 |
| 2.2 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA. Compuestos orgánicos heteroatómicos, agua y constituyentes metálicos..... | 5 |
| 2.3 CATALIZADOR..... | 7 |
| 3.0 HIDRODESULFURACIÓN DE LA NAFTA..... | 8 |
| 4.0 EFECTO DE LA COMPOSICIÓN DE LA NAFTA EN EL DESARROLLO DEL PROCESO Y LA CALIDAD DEL PRODUCTO EN LA REFORMACIÓN CATALÍTICA. | 11 |
| 4.1 CALIDAD DE LA GASOLINA..... | 11 |
| 5.0 PROCESO DE REFORMACIÓN CATALÍTICA..... | 14 |
| 5.1 EFECTO DE LA COMPOSICIÓN DE HIDROCARBUROS DE LA NAFTA..... | 15 |
| 5.2 CONFIGURACIÓN TÍPICA DE LAS PLANTAS REFORMADORAS..... | 18 |
| 6.0 SIMULADOR PARA REFORMACIÓN CATALÍTICA..... | 22 |
| 6.1 FUNCIONAMIENTO DEL SIMULADOR..... | 24 |
| 6.2 ABRIR EL SIMULADOR Y ACTIVAR EL MOTOR ASPEN..... | 26 |
| 7.0 ALIMENTACIÓN DE LOS DATOS DE PLANTA AL SIMULADOR..... | 35 |
| 7.1 VARIACIÓN DE LAS MOLES..... | 35 |
| 7.2 CORRER LA SIMULACIÓN..... | 45 |
| 7.3 CARGAR Y GUARDAR ARCHIVOS EN EL SIMULADOR..... | 50 |
| 7.4 ESPECIFICACIÓN DEL CATALIZADOR..... | 53 |
| 7.5 AJUSTE DE LA PRESIÓN..... | 55 |
| 7.5.1 SECCIÓN DE REACCIÓN..... | 55 |
| 7.5.2 ESTABILIZADOR..... | 59 |
| 7.6 AJUSTE DEL FLUJO MÁSSICO DE ALIMENTACIÓN..... | 61 |
| 7.7 AJUSTE DE LA TEMPERATURA. ESTABILIZADOR..... | 61 |
| 7.7.1 TEMPERATURA DE SALIDA DEL PRECALENTADOR..... | 62 |
| 7.7.2 TEMPERATURA DEL CONDENSADOR..... | 62 |
| 7.8 AJUSTE DE A TEMPERATURA. SECCIÓN DE REACCIÓN..... | 63 |
| 7.8.1 FLASH DEL REACTOR..... | 63 |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 7.8.2 TAMBOR DE RECONTACTO | 64 |
| 7.8.3 REACTOR..... | 64 |
| 7.9 REDUCCIÓN DE LA DEPOSICIÓN DE COQUE..... | 65 |
| 8.0 COMPARACIÓN DE RESULTADOS..... | 69 |
| 9.0 AJUSTE DE LA SIMULACIÓN. MODIFICACIONES A LAS CONSTANTES DE ACTIVIDAD DE LAS REACCIONES..... | 75 |
| 10.0 RESULTADOS FINALES DE LA SIMULACIÓN..... | 82 |
| 11.0 ANÁLISIS DE RESULTADOS | 86 |
| 12.0 CONCLUSIONES..... | 87 |
| 13.0 BIBLIOGRAFÍA | 88 |

1.0 INTRODUCCIÓN

Las funciones básicas de PEMEX Refinación son los procesos industriales de refinación, elaboración de productos petrolíferos y derivados del petróleo, su distribución, almacenamiento y venta de primera mano. La Subdirección Comercial de PEMEX Refinación realiza la planeación, administración y control de la red comercial, así como la suscripción de contratos con inversionistas privados mexicanos para el establecimiento y operación de las Estaciones de Servicio integrantes de la Franquicia PEMEX para atender el mercado al menudeo de combustibles automotrices.

La planta de estudio se localizará en la refinería de Salamanca; su función es transformar la Nafta en reformado a través de la reformación catalítica, dicho reformado compone típicamente el 34% del pool de gasolinas. Dicho proceso involucra la reconstrucción de hidrocarburos de bajo octanaje, presentes en la nafta, en gasolinas de alto octanaje con un mayor valor comercial sin cambiar el intervalo de su punto de ebullición.

La composición de la nafta y el reformado es una compleja mezcla de parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos entre C₅ y C₁₂. Las naftas, dependiendo de su origen, contienen pequeñas o altas cantidades de azufre y nitrógeno. Estos elementos afectan el desempeño del catalizador utilizado durante la reformación y deben de ser removidos hasta bajos niveles antes de ingresar la nafta a la unidad reformadora.

2.0 REFORMACIÓN CATALÍTICA DE LA NAFTA.

El rango completo correspondiente a la Nafta es la fracción de destilación del crudo que tiene un punto de ebullición entre 30°C y 200°C, y corresponde generalmente a entre el 15-30% del peso total de éste. La nafta se nombra según el proceso del que provenga. Ej.: Nafta de vacío, Nafta de Desintegración Catalítica, Nafta de Coquizadora; etc.

Si la nafta proviene de procesos como la reductora de viscosidad, la coquizadora, de la torre de vacío; etc. entonces tendrá un alto contenido de azufre, nitrógeno y metales. Cabe añadir que la cantidad de éstos depende también del origen del crudo.

La Nafta proveniente de la destilación atmosférica se subdivide en 3 categorías: la Nafta ligera que es aquella que tiene un punto de ebullición desde 30°C hasta 90°C; la Nafta pesada que es aquella que tiene un punto de ebullición entre 90°C y 200°C, cabe decir que algunas veces a la fracción con un punto de ebullición entre 90°C y 150°C se le denomina Nafta media, y es ésta última fracción la que preferentemente se utiliza como materia prima para la reformación catalítica una vez que ha sido desulfurada.

2. 1 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA. Hidrocarburos

Para poder manejar de manera sencilla los numerosos compuestos que conforman la nafta, se han clasificado en 4 categorías: Parafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos. Cada uno de éstos agrupa distintos compuestos según la descripción siguiente:

Parafinas (P): Cadenas rectas o ramificadas de hidrocarburos saturados. Su fórmula general es C_nH_{2n+2} . Su punto de ebullición se incrementa entre 20-25°C por cada carbono presente en la molécula. Las cadenas rectas tienen un mayor punto de ebullición que sus respectivos isómeros. A medida que aumenta el número de carbonos, aumenta su densidad.

Olefinas (O): Cadenas rectas o ramificadas de hidrocarburos insaturados. Su fórmula general es C_nH_{2n} . Presentan las mismas características que las parafinas en cuanto a incremento en el punto de ebullición, aumento de densidad e isomería.

Naftenos (N): Hidrocarburos cíclicos saturados que poseen al menos un anillo en su estructura. Los más abundantes en la fracción del petróleo son anillos tanto de 5 como de 6 carbonos. Pueden tener una cadena de parafina unida al anillo. Comparados con las parafinas, para un mismo número de átomos de carbono dados, los naftenos poseen un punto de ebullición mayor y una mayor densidad.

Aromáticos (A): Hidrocarburos cíclicos insaturados. Su fórmula general es C_nH_{2n-6} . Los anillos de benceno pueden estar unidos a cadenas de parafinas, naftenos u otros aromáticos. Para un número dado de átomos de carbono en una molécula, el punto de ebullición y la densidad de los aromáticos es mucho mayor que la de las parafinas y los naftenos. La reactividad de los enlaces insaturados de los compuestos aromáticos C_6 , C_7 y C_8 o BTX (Benceno, Tolueno Xileno) los vuelve importantes bloques de construcción para la industria petroquímica. Los aromáticos tienen un alto octanaje.

Tabla 1. Composición de la Nafta según su proceso de origen para un mismo crudo.

| Corriente | Parafinas (%^w/_w) | Olefinas (%^w/_w) | Naftenos (%^w/_w) | Aromáticos (%^w/_w) | Densidad (g/mL) | PEI-PEF (°C) |
|------------------|---------------------------------------------------|--------------------------------------------------|--------------------------------------------------|----------------------------------------------------|----------------------------|-------------------------|
| Ligera DA | 55 | - | 40 | 5 | 0.664 | C ₅ -90 |
| Media DA | 31 | - | 50 | 19 | 0.771 | 90-150 |
| Pesada DA | 30 | - | 44 | 26 | 0.797 | 150-180 |
| DCF | 34 | 23 | 11 | 32 | 0.752 | C ₅ -220 |
| Ligera RV | 64 | 10 | 25 | 1 | 0.667 | C ₅ -90 |
| Pesada RV | 46 | 30 | 16 | 8 | 0.750 | 90-150 |

DA, Destilación Atmosférica. DCF, Desintegración Catalítica Fluidizada.
RV, Reductor de Viscosidad. PEI, punto de ebullición inicial. PEF, punto de ebullición final.

2.2 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA. Compuestos orgánicos heteroatómicos, agua y constituyentes metálicos.

Azufre: Es un importante constituyente del petróleo; su composición va desde prácticamente cero hasta 5% w/w de total de crudo. Los compuestos de azufre presentes en el petróleo son principalmente: mercaptanos, sulfitos, sulfatos, alquiltiofenos, benzotiofenos, ácido sulfúrico y óxidos de azufre. Estos compuestos envenenan el catalizador empleado en la reformación catalítica, por lo que es necesario removerlo por hidrodesulfuración (HDS).

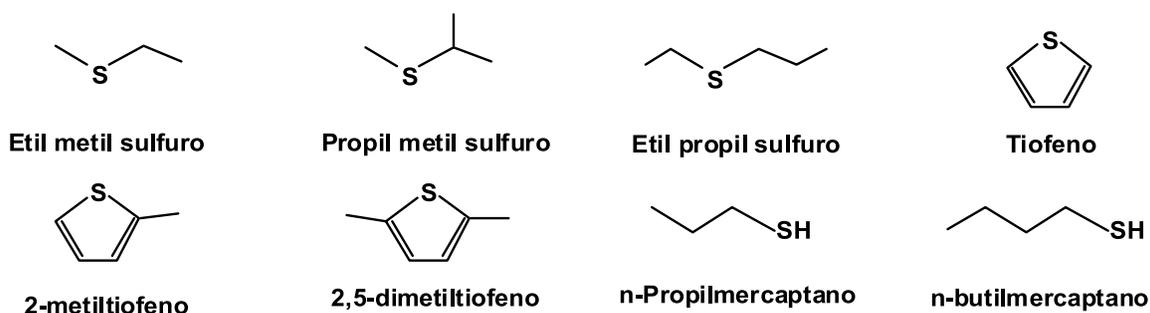


Figura 1. Principales compuestos azufrados presentes en la Nafta.

Nitrógeno: Se encuentra presente en menor proporción que el azufre ($<1\%w/w$) y su mayoría en la fracción pesada del petróleo. Se subdividen en 2 clasificaciones: básicos (piridina, piperidina y derivados de la indolina) y no básicos (derivados del pirrol).

Oxígeno: Éste se encuentra normalmente sólo en las fracciones pesadas del petróleo en fenoles, furanos, ácidos carboxílicos o ésteres.

Agua: Se encuentra presente en el petróleo en pequeñas cantidades, parcialmente disuelta y como una fase acuosa separada. Las fracciones de la nafta absorben humedad, hasta cierto punto, durante su manipulación y su almacenamiento. Resulta contraproducente en la operación de reformación catalítica porque neutraliza los sitios ácidos del catalizador.

2.3 CATALIZADOR

El catalizador empleado en el proceso de reformación catalítica es un catalizador bimetálico con una función ácida (A) y una función metálica (M), la primera favorece preferentemente a las reacciones de isomerización, y la segunda a las reacciones de deshidrogenación. El catalizador está compuesto de platino soportado en alúmina clorada, la función ácida la aporta la alúmina y la metálica el platino. Ambas funciones actúan conjuntamente para llevar a cabo las reacciones:

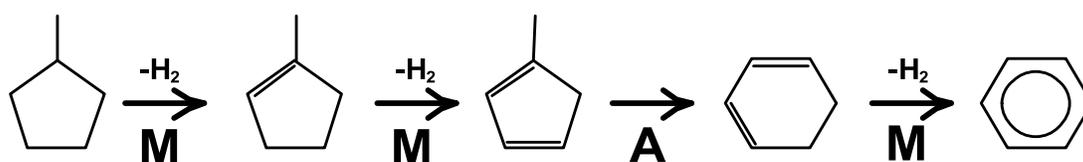


Figura 2. Ejemplo de sinergia entre la función metálica (M) y la función ácida (A)

Para fines industriales se emplean mezclas como Pt-Re ó Pt-Sn dependiendo del tipo de proceso que se vaya a llevar a cabo, de regeneración periódica o continua, respectivamente. Los venenos para estos catalizadores son el azufre, el nitrógeno y el agua, principalmente, mismos que inhiben su actividad. Otro problema que afecta la actividad del catalizador es la paulatina deposición de coque sobre la superficie de éste.

Por lo referido anteriormente, para poder llevar a cabo el proceso de reformación catalítica, es necesario someter la nafta a un proceso de hidrodesulfuración que elimine el azufre y nitrógeno presentes en la nafta hasta 0.5 - 1 ppm, y cuidar que durante su manejo y almacenamiento, ésta no absorba humedad del ambiente.

3.0 HIDRODESULFURACIÓN DE LA NAFTA.

Como se mencionó anteriormente, las impurezas también representan una variable importante en el sistema, el azufre es el principal veneno del catalizador, y durante la operación de la planta, su presencia conlleva a una menor eficiencia, por lo que para mantener el RON, se requerirá aumentar la temperatura; para evitar la rápida desactivación del catalizador, es necesario someter la nafta a un proceso de hidrodesulfuración que deje el contenido de azufre entre 0.50 y 1.00 ppm. Las reacciones que se lleva a cabo en este proceso se muestran en la figura 3.

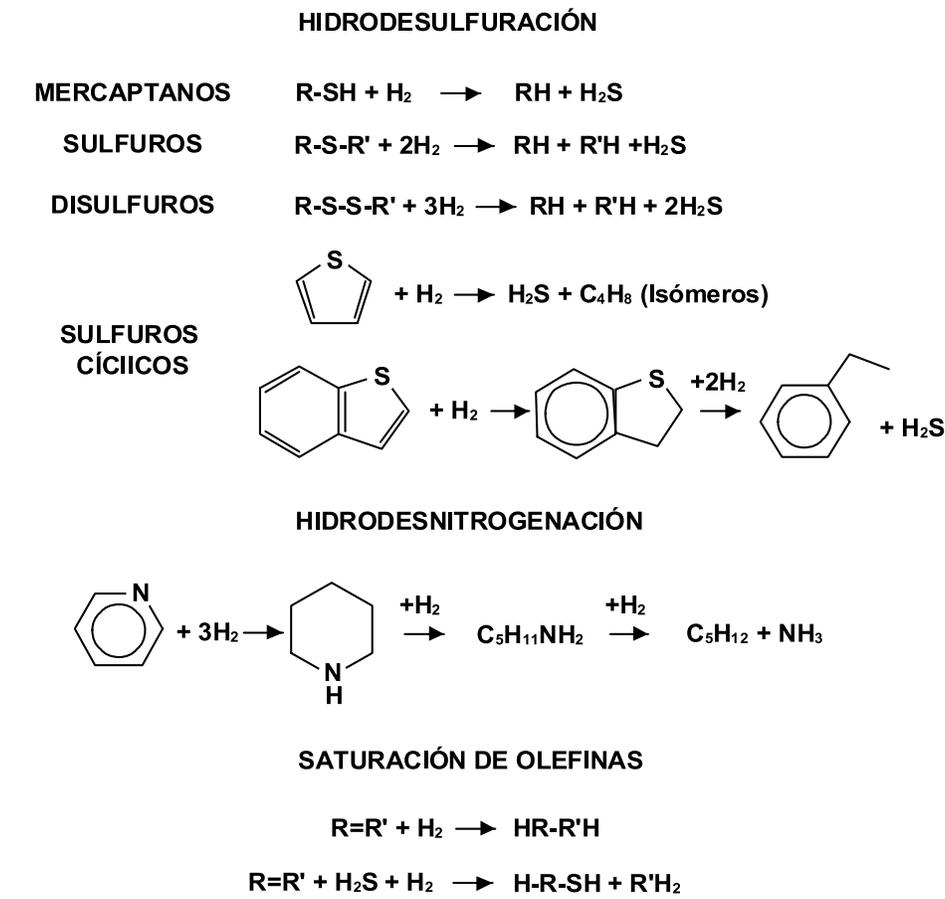


Figura 3. Principales reacciones del proceso de hidrodesulfuración

El proceso de hidrodesulfuración consiste en eliminar los compuestos azufrados haciéndolos reaccionar con hidrógeno para generar ácido sulfhídrico e hidrocarburos más pequeños libres de azufre. El ácido sulfhídrico es posteriormente tratado como se muestra en la figura 4

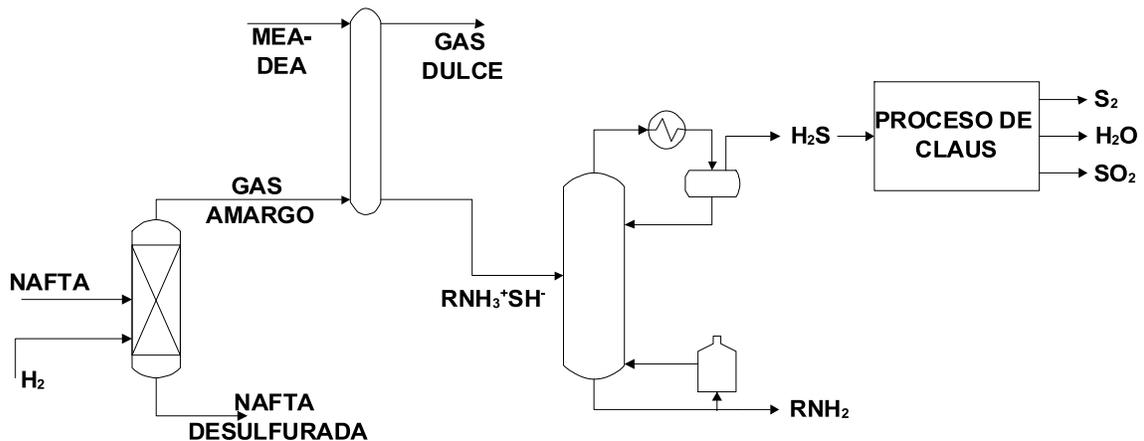
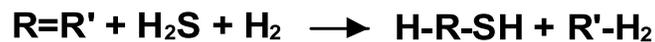


Figura 4. Diagrama del proceso general de hidrodesulfuración.

Si hay alquenos presentes en la Nafta, el H₂S se recombina para formar nuevamente un compuesto azufrado, preferentemente metil mercaptano.



Si la hidrodesulfuración es llevada a cabo a altas temperaturas, se verá favorecida la recombinación de la nafta, esto se debe principalmente a la desintegración térmica. Existen principalmente 2 tipos de catalizadores para este proceso: Co-Mo y Ni-Mo, ambos soportados en alumina, el primero tiene una alta actividad para deshidrodesulfurar, mientras que el segundo tiene una alta actividad para desnitrógeno y saturar olefinas; debido a que la nafta empleada para el proceso de reformación catalítica es baja en nitrógeno, se prefiere emplear el catalizador Co-Mo/Al₂O₃.

En lo referente al envenenamiento, hay 2 factores que afectan el catalizador, la deposición de coque, debido a una baja presión de hidrógeno en el proceso (<3 MPa) o las altas temperaturas (>350°C); y la deposición de impurezas tales como arsénico (1000ppm provocan una reducción del 50% de la actividad del catalizador) y sodio (forma costras que provocan caídas de presión).

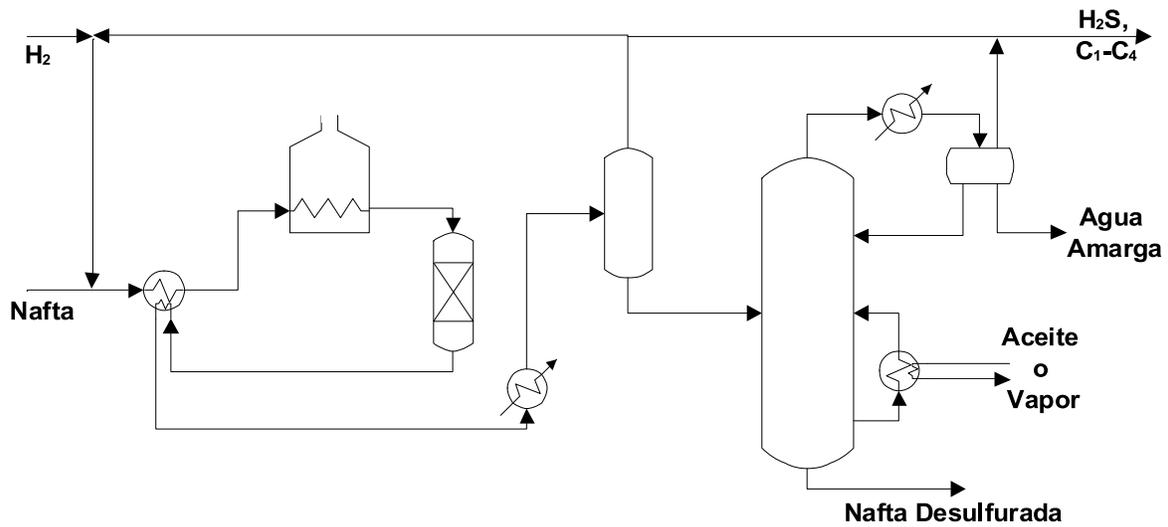


Figura 5. Proceso de Hidrodesulfuración.

4.0 EFECTO DE LA COMPOSICIÓN DE LA NAFTA EN EL DESARROLLO DEL PROCESO Y LA CALIDAD DEL PRODUCTO EN LA REFORMACIÓN CATALÍTICA.

Para poder lograr la calidad de reformado deseada, es importante entender primero cuáles son las variables que más afectan el proceso: Composición de hidrocarburos, Rango de ebullición e Impurezas. Estas 3 variables afectan también el tiempo de vida y el desempeño del catalizador.

4.1 CALIDAD DE LA GASOLINA

En tabla 2 se muestran algunos puntos con los cuales debe cumplir a gasolina en el valle de México, según la normativa mexicana, a través de la NOM-086-SEMARNAT-SENER-SCFI-2005 (1):

Tabla 2. Algunas especificaciones de interés sobre la Gasolina.

| | Gasolina Premium | Gasolina Magna |
|-------------------|------------------|----------------|
| Índice de Octano* | 92 (min) | 87 (min) |
| Olefinas (%V/V) | 10 | 10 |
| Benceno (%V/V) | 1 | 1 |
| Aromáticos (%V/V) | 25 | 25 |
| Azufre (ppm) | 30 – 80 | 30 – 80 |

*(MON+RON)/2

El octanaje mide la capacidad antidetonante de una gasolina para una mezcla combustible-aire al ser comprimida en el cilindro de un motor. Existen dos índices, el RON (Research octane number) y el MON (motor octane number), que difieren el uno del otro en la manera en que se lleva a cabo la prueba de medición. Por definición, el octanaje del n-heptano es 0 y el del i-octano (2,2,4-trimetilpentano) es 100. Para llevar a cabo la medición, se elabora una mezcla de n-heptano e i-octano que iguale el desempeño de la gasolina que está siendo evaluada, de modo tal que el %v/v de i-octano será el octanaje de la gasolina.

Las olefinas, por su parte, tienden a polimerizar en el motor, formando resinas que se van adhiriendo a los cilindros, perjudicando su funcionamiento, razón por la cual se controla la cantidad de estos compuestos.

El benceno es un compuesto aromático cancerígeno, el cual provoca daños severos a la salud, es por ello que la normatividad es tan estricta con los límites de dicho compuesto en las gasolinas.

El azufre se oxida en el motor y forma los llamados SO_x, que reaccionan con el agua del ambiente, dando lugar a la lluvia ácida, por lo mismo es que se regula tan estrictamente la presencia de éste en los combustibles.

Habiendo mencionado los requerimientos de calidad que debe de tener una gasolina típica para el valle del México y las variables más sensibles del proceso de reformación catalítica, ahora es posible mencionar más a fondo las condiciones de operación y las reacciones químicas que ocurren en éste.

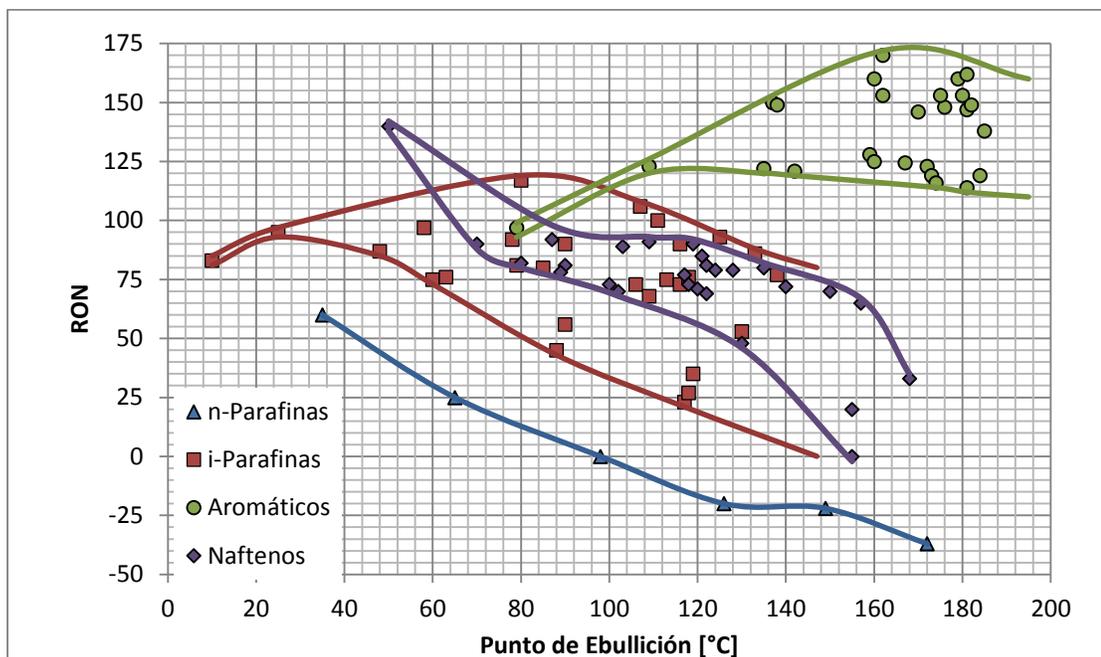


Figura 6. Octanaje vs. punto de ebullición para las familias de hidrocarburos.[Basado en **Antos, George J. y Aitani, Abdullah M. 2004. Catalytic Naphta Reforming..** New York : Marcel Dekker, Inc., 2004, pag. 13]

5.0 PROCESO DE REFORMACIÓN CATALÍTICA

El proceso de reformación catalítica se efectúa a una temperatura de entre 450°C y 520°C, una presión de 4 bares hasta 30 bares, con 3 ó 4 reactores en serie y una alimentación de gas hidrógeno a razón de 4 a 5 moles por cada mol de nafta alimentada al proceso. Por otra parte, la figura 1 muestra las 6 reacciones globales que tienen lugar en los reactores de la planta CCR.

Como se observa en la figura 7, la gran mayoría de las reacciones llevadas a cabo favorecen la formación de hidrógeno, pero es importante tener en cuenta que se requiere una presión parcial de hidrógeno en el sistema tal que impida la rápida formación de coque y que a la vez favorezca la saturación de los enlaces dobles de las olefinas. No obstante la gran cantidad de hidrógeno formado durante la reformación, es necesario alimentar parte de éste al reactor para alcanzar la mínima presión parcial requerida para lograr las 2 condiciones antes mencionadas.

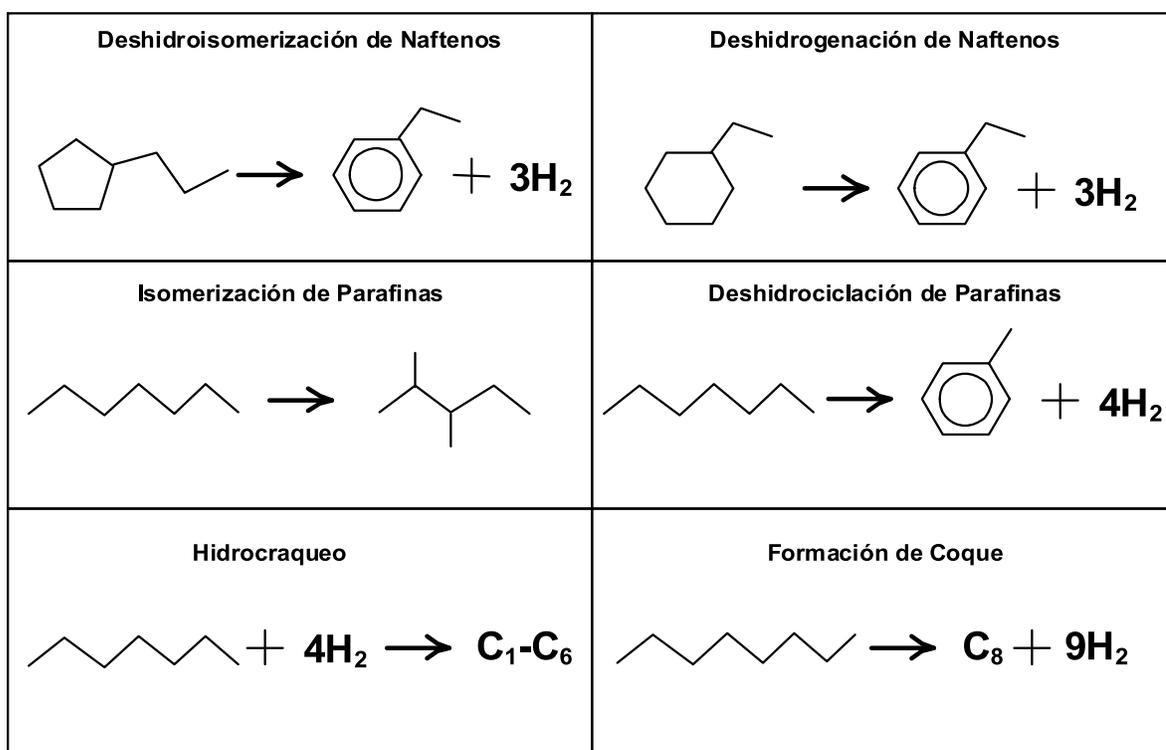


Fig. 7 Principales reacciones en la reformación catalítica.

5.1 EFECTO DE LA COMPOSICIÓN DE HIDROCARBUROS DE LA NAFTA

El efecto de la composición de la nafta se ve reflejado en el reformado obtenido, es decir, una nafta que tenga una mayor proporción de N+A, requerirá una temperatura de reacción menor y se obtendrá un mayor rendimiento, por el contrario, si predomina P+O, entonces se requerirá una mayor temperatura de reacción, lo que conduce a un menor rendimiento.

Un factor clave en la calidad del reformado obtenido es el rango de ebullición de la nafta alimentada, pues éste determinará: la distribución de los compuestos por su número de carbonos, las condiciones y eficiencia de la reacción, y el grado de desactivación del catalizador.

Es importante señalar que depende el uso que se le vaya a dar al reformado, la fracción de la nafta que se empleará, por ejemplo, si se quiere producir benceno, xileno y tolueno, se empleará una nafta que tenga un rango de ebullición de 60°C – 140°C, pues preferentemente se tendrán moléculas con 6, 7 y 8 carbonos. Si se quisiera emplear para gasolina de alto octanaje, el rango de la nafta a elegir sería de 90°C hasta 160°C, pues preferentemente se tienen compuestos con 7 hasta 9 carbonos. También es importante tener en cuenta que la nafta ligera tiende a descomponerse en butano y fracciones ligeras, por otro lado, las fracciones de nafta que tengan un punto final de ebullición mayor a 180°C tenderán a formar más depósitos de carbono sobre el catalizador, por estas dos razones, el rango de ebullición que se usa comúnmente para el proceso de reformación catalítica es entre 85°C y 165°C

Algunos ejemplos de tipos de naftas, además de las de destilación atmosférica, se dan a continuación:

Nafta del Reductor de Viscosidad. Se emplea en pequeñas proporciones para el proceso de CCR debido a su alto contenido de azufre. Posee un octanaje entre 65 – 70

Nafta de la Coquizadora. En características es muy similar a la nafta del reductor de viscosidad, sin embargo la cantidad de reformado que se obtiene a partir de esta es de 4 a 5 veces mayor, es por ello que las refinerías con coquizadora añaden más de esta nafta al proceso de reformado.

Nafta del craqueo catalítico. Esta nafta se obtiene del gasóleo de vacío y del residuo atmosférico tratados mediante el proceso de desintegración catalítica. Aporta el 98% del azufre presente en la gasolina, por tan alto contenido en azufre, no es viable someter esta nafta al proceso de reformación catalítica, pues el aumento en el octanaje no justifica los costos del hidrotratamiento, no obstante, se agrega directamente al pool de gasolinas, mismo del cual conforma el 30% - 40% del volumen total.

Nafta de hidrocraqueo. Esta nafta al provenir de tratar el gasóleo de vacío, es baja en azufre y rica en naftenos, lo que la convierte en una nafta ideal para el proceso de reformación catalítica.

A pesar de que no todas las naftas son apropiadas para emplearse como alimentación para la CCR, algunas pueden agregarse al "pool" de gasolinas en pequeñas proporciones. La tabla 3 muestra la composición típica del pool de gasolinas.

Tabla 3. Típica composición del pool de Gasolinas

| | %v/v | Azufre %w/w del total |
|-------------------------|------|--------------------------|
| Nafta de la FCC | 36 | 98 |
| Reformado | 34 | - |
| Alquiladora | 12 | - |
| Isomerizador | 5 | - |
| Butanos | 5 | - |
| Nafta Primaria Ligera | 3 | 1 |
| Nafta de Hidrocraqueo | 2 | - |
| MTBE | 2 | - |
| Nafta de la coquizadora | 1 | 1 |

*MTBE. Metil Tertbutil Éter

5.2 CONFIGURACIÓN TÍPICA DE LAS PLANTAS REFORMADORAS.

Debido a las diferentes naftas que pueden ser trabajadas en la planta CCR, la operación de la planta está hecha de forma tal que la regeneración del catalizador pueda realizarse de 3 formas distintas: semiregenerativa, cíclica y continua.

El proceso semiregenerativo consiste en detener la operación de la planta, vaciar los reactores y llevar a cabo la regeneración *in situ*. Debido a que el catalizador se regenera de forma simultánea, la operación con este sistema sólo es adecuado para naftas con muy bajo contenido de azufre y nitrógeno, y con una baja proporción de parafinas.

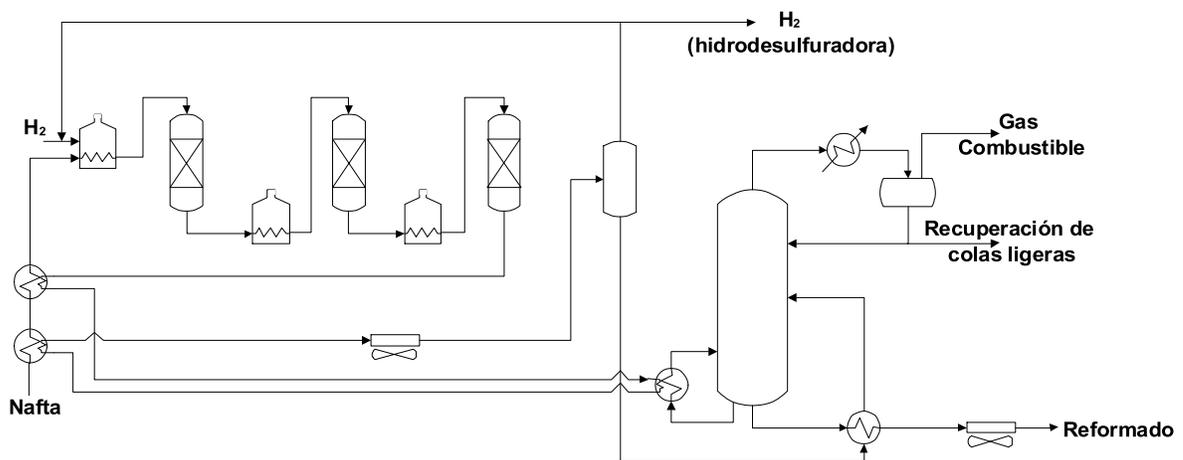


Figura 8. Proceso de reformación catalítica semiregenerativo.

El proceso de regeneración cíclica soporta condiciones de operación más severas que el proceso semiregenerativo, por ende naftas con un mayor contenido de parafinas. Para la regeneración del catalizador, existe un *bypass* entre cada reactor, lo que permite regenerar el catalizador de un solo reactor a la vez, evitando parar la operación de la planta.

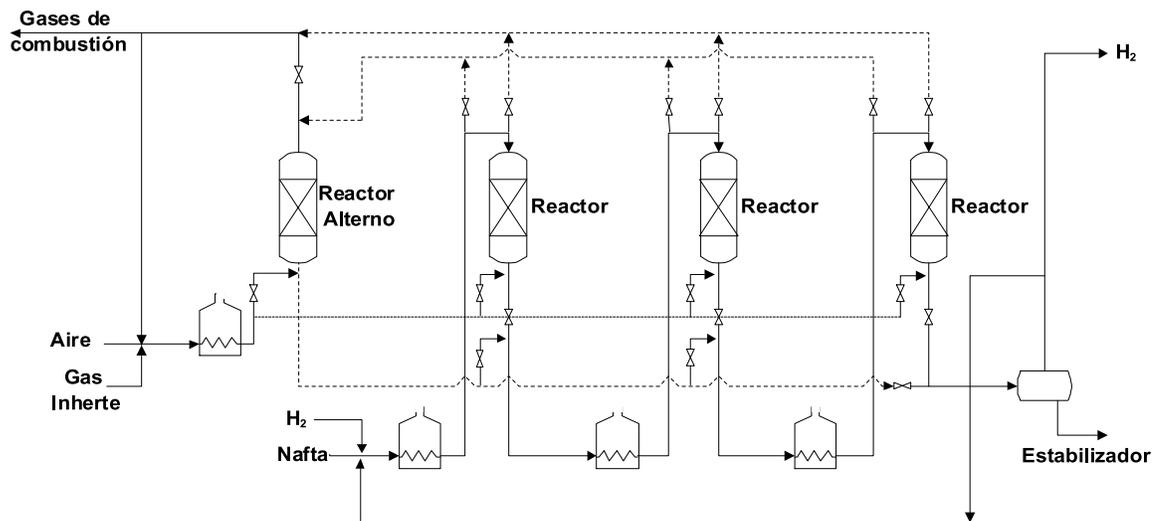


Figura 9. Proceso de reformación catalítica con regeneración cíclica

El proceso de regeneración continua admite las condiciones de operación más severas pues la cama de catalizador es móvil y está en continua regeneración. El catalizador viejo abandona el reactor por la parte inferior y se dirige a la unidad de regeneración, en donde el coque depositado es quemado, el azufre es desorbido con ayuda de nitrógeno y la alúmina es clorada nuevamente, posteriormente el catalizador abandona la unidad de regeneración para ser alimentado al reactor desde la parte superior. Para tener una operación adecuada, no se permite que el coque depositado sobre el catalizador sobrepase el 7% w/w.

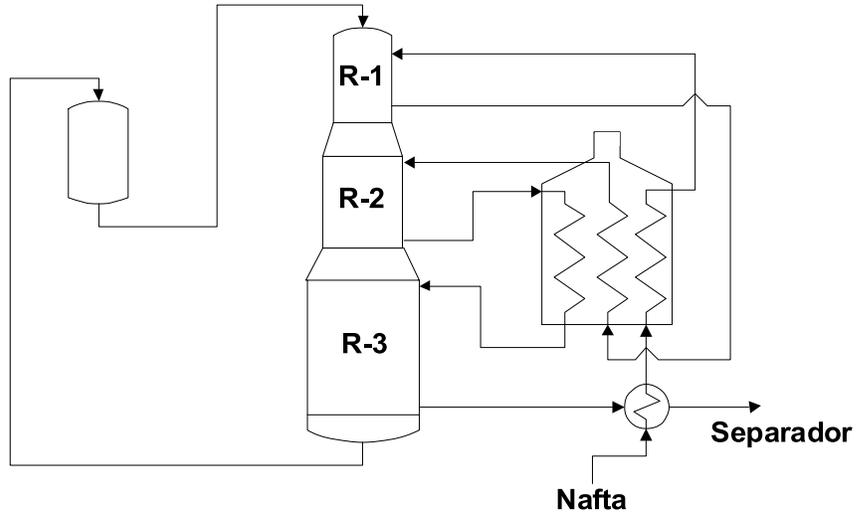


Figura 10. Proceso de reformación catalítica con regeneración continua.

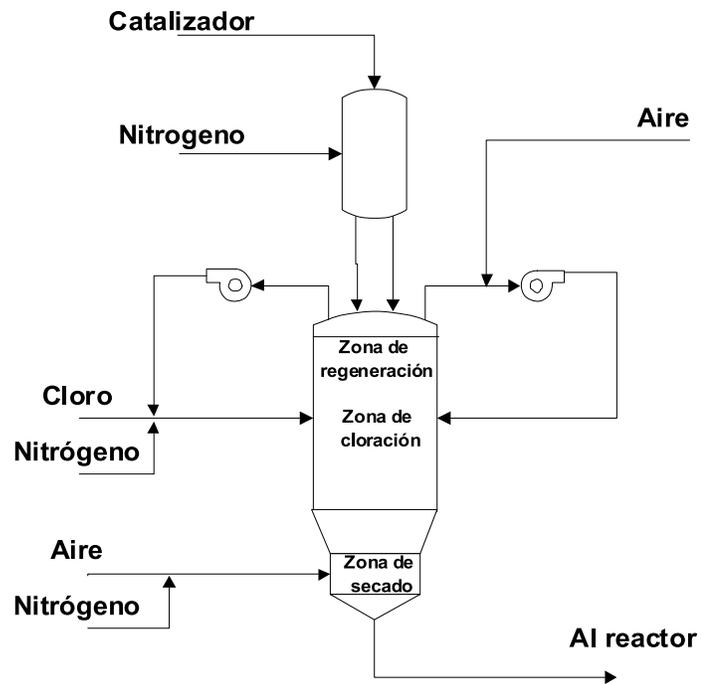
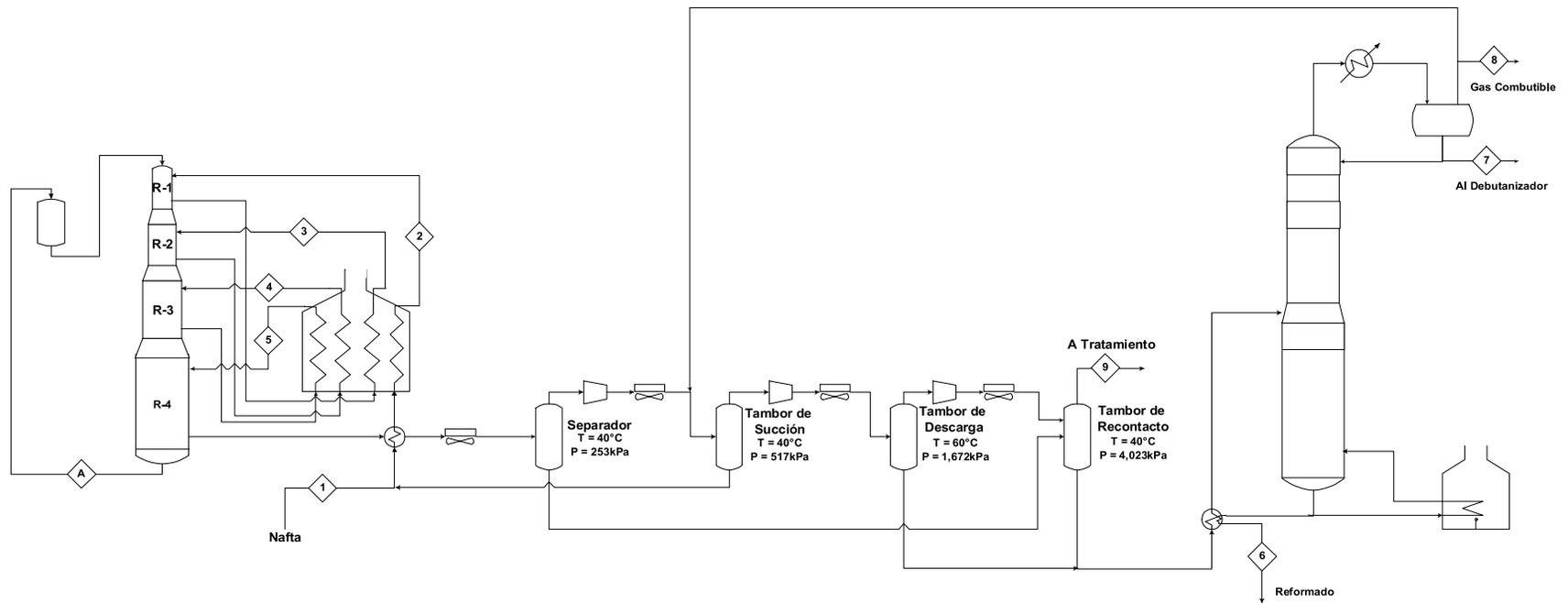


Figura 11. Sección de regeneración del catalizador para una CCR con regeneración continua.

Figura 12. Diagrama de Flujo de Proceso Simplificado de la planta de reformación catalítica de Salamanca.

| Corrientes | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 A | |
|--------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|-------|-----|--------|-------|
| Flujo [Kg/h] | 146,872 | 194,680 | 194,680 | 194,680 | 194,680 | 129,958 | 6,018 | 526 | 16,926 | 1,362 |
| T [°C] | 38 | 549 | 549 | 549 | 549 | 38 | 38 | 27 | 40 | - |
| P [kPa] | 405 | - | - | - | - | 405 | 1,682 | 496 | 4,023 | - |



6.0 SIMULADOR PARA REFORMACIÓN CATALÍTICA

El proceso de reformación catalítica puede ser simulado mediante el uso de la plataforma Aspen Plus Reformer, dicha plataforma se vale de los datos de la alimentación y un modelo de reactor para calcular propiedades y eficiencia.

La operación de reformación catalítica está representada por hornos, el tanque flash y los separadores, esto nos conduce a un diagrama de flujo general, que acoplado con el modelo del reactor y una simulación rigurosa nos lleva a una buena representación de la planta reformadora. El presente trabajo se enfoca en simulación, por lo que es el caso que se tratará de forma detallada, el resto de las aplicaciones que tiene el simulador ASPEN RefCat sólo se mencionan.

El simulador emplea distintas ecuaciones de estado para cada propiedad termodinámica que está calculando, tomando como punto de partida que la reformación catalítica es un proceso "rico en hidrógeno".

Ecuación de Grayson-Streed. Modelo para el cálculo de la fugacidad de componentes puros en estado líquido.

$$\ln \varphi_i = \ln v_i^{(0)} + \omega_i \ln v_i^{(1)}$$

De donde:

$$v_i^{(0)}, v_i^{(1)} = f(T, T_{ci}, P, P_{ci})$$

Ecuación de Scatchard-Hildebrand. Modelo para el cálculo de los coeficientes de actividad para líquidos.

$$\ln \gamma_i = \frac{V_i}{RT} \sum_j \sum_k \varphi_j \varphi_k \left(A_{ji} - \frac{1}{2A_{jk}} \right)$$

Ecuación de estado de Redlich-Kwong.

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a/T^{0.5}}{V_m(V_m + b)}$$

Ecuación de Lee-Kesler

$$Z = Z^{(0)} + \omega Z^{(1)}$$

El orden de reacción que maneja el simulador no está definido, ya que emplea ecuaciones del modelo de reacción catalítico (adsorción – desorción).

Téngase los siguientes ejemplos:

DESHIDROGENACIÓN– Reacción superficial como etapa determinante



$$r_{tot} = \frac{K_s K_{eqA} C_m \left(C_A - \frac{1}{K_{Td}} C_B C_C \right)}{\left[1 + K_{eqA} C_A + K_{eqB} C_B + K_{eqC} C_C \right]^2}$$

ISOMERIZACIÓN – Reacción superficial como etapa determinante



$$r_{tot} = \frac{K_s K_{eqA} C_m \left(C_A - \frac{1}{K_{Td}} C_B \right)}{1 + K_{eqA} C_A + K_{eqB} C_B}$$

6.1 FUNCIONAMIENTO DEL SIMULADOR

El usuario alimenta los datos en una plataforma de Excel, misma que puede ser personalizada con Visual Basic. Una vez que los datos están listos, la plataforma establece contacto con Aspen Plus, este último será el motor de la simulación y mediante su librería de modelos de proceso obtendrá un resultado.

La metodología que emplea el motor para el tratamiento de las ecuaciones es establecerlas en su forma residual, de modo que al menos una de las variables presentes en cada ecuación pueda ser modificada por el simulador para ajustar el valor del residual en 0.

Téngase el siguiente ejemplo:

Las ecuaciones (1) y (2) serán establecidas en forma de residuales

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{y = vz^2} \quad (1) & \longrightarrow & \mathbf{f_{(v,y,z)} = vz^2 - y} \\ \mathbf{y = w - p} \quad (2) & & \mathbf{f_{(p,w,y)} = w - p - y} \end{array}$$

El simulador establecerá un vector x :

$$\mathbf{x = (y,w,p,v,z)}$$

Como siguiente paso, y sustentado en un análisis de grados de libertad, es necesario saber qué variables se conocen y cuáles no. Para que el sistema ejemplificado pueda resolverse como simulación, es requisito indispensable que el número de grados de libertad sea igual a 0.

Grados de Libertad = Variables - Ecuaciones - Variables conocidas

Teniendo en cuenta lo expuesto en el párrafo anterior:

$$0 = 5 - 2 - \text{Variables conocidas}$$

De modo que es necesario conocer y definir 3 de las 5 variables para que el simulador pueda trabajar y llegar a una solución.

Como siguiente paso, las 2 variables sin definir deben de ser escogidas cuidadosamente, esto porque el simulador modifica las variables no definidas para hacer 0 la forma residual de las ecuaciones, esto quiere decir que al menos debe de haber una variable en cada ecuación en forma residual. Para el ejemplo empleado, podrían escogerse las variables de la siguiente forma:

| Variables Modificables | Variables Definidas |
|-------------------------------|----------------------------|
| v,y | p,w,z |
| v,w | p,y,z |
| v,p | w,y,z |
| z,y | v,w,p |
| z,w | p,v,y |
| z,p | v,w,y |
| y,w | p,v,z |
| y,p | v,w,z |

Cada línea representa un arreglo válido de variables. Del mismo modo que se ejemplifica, el simulador establece aquellas variables que pueden ser definidas (CONST), las variables que el simulador modifica (CALC), las variables fijas en el modo "ajuste de parámetros" (MEAS) y las variables libres en el modo "ajuste de parámetros" (PARAM).

El simulador ASPEN RefCat tiene distintas operaciones: simulación, ajuste de parámetros, caso de estudio y vectores LP; todas estas operaciones requieren que los grados de libertad sean 0, sin embargo, para trabajar con la operación de optimización, es necesario que el caso esté sub-especificado (G.L. > 0), para que el simulador pueda optimizar las variables no especificadas.

6.2 ABRIR EL SIMULADOR Y ACTIVAR EL MOTOR ASPEN

El simulador se encuentra en la carpeta

C:\Archivosdeprograma\AspenTech\Process Modeling V7.2\Aspen Plus Based Refinery Reactors

Se puede acceder a dicha carpeta desde el menú de Inicio.

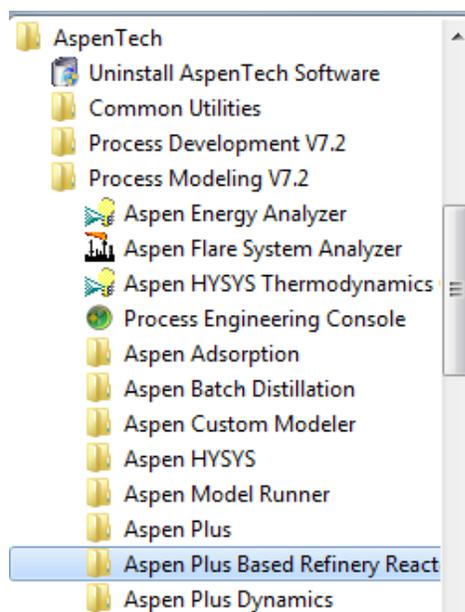


Imagen 1

En la carpeta Aspen Plus Based Refinery Reactors se encuentra el archivo "Aspen Plus Reformer".

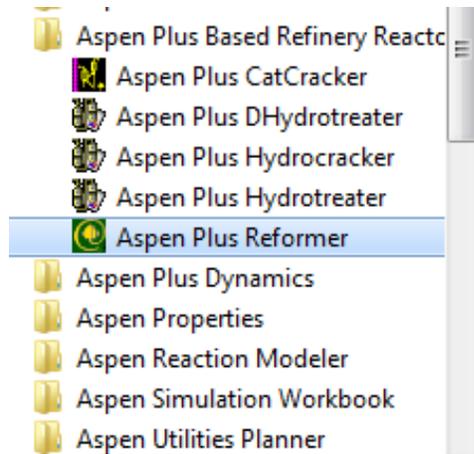


Imagen 2

Al hacer clic en la aplicación se abrirá un archivo de Excel con todas las macros necesarias para llevar a cabo la simulación. El archivo de Excel contiene diversas hojas de cálculo en las cuales se especifican los datos de planta.

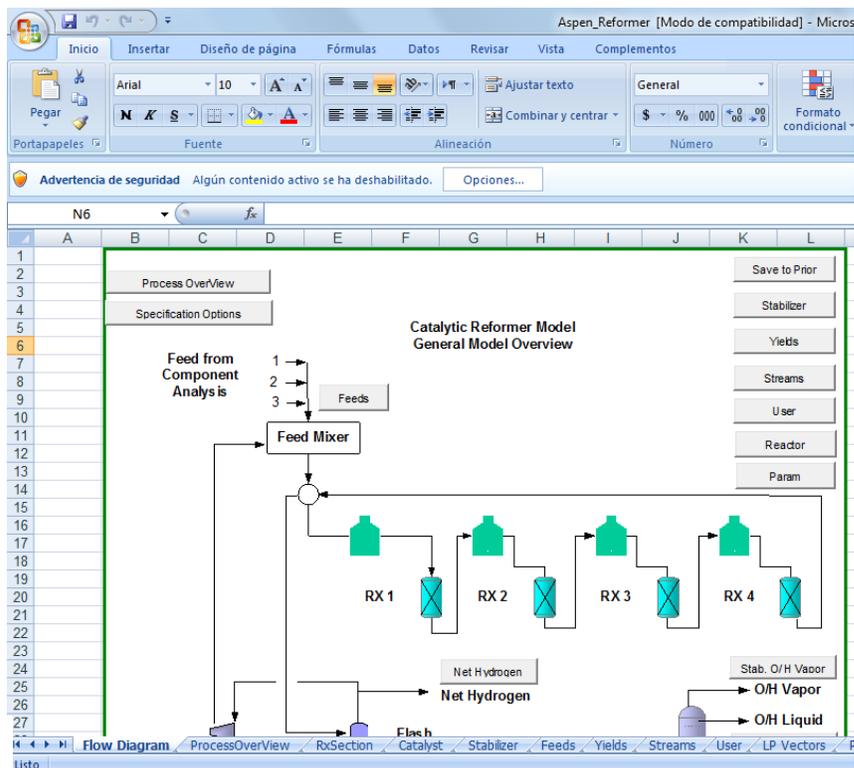


Imagen 3

Una vez abierto el archivo aparecerá una advertencia de seguridad

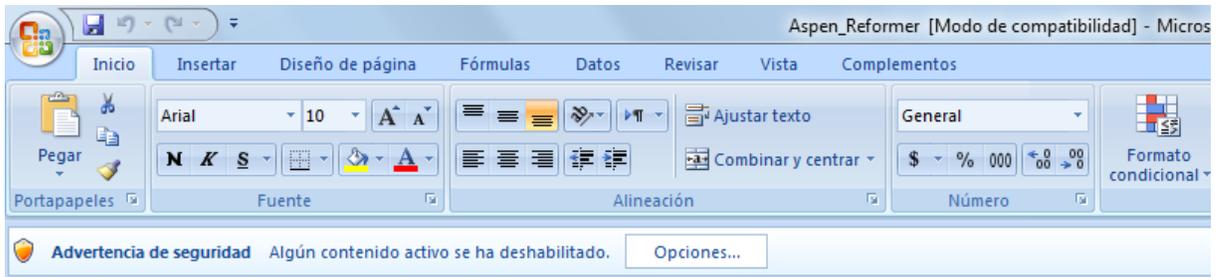


Imagen 4

Dar clic en opciones, esto desplegará una ventana.

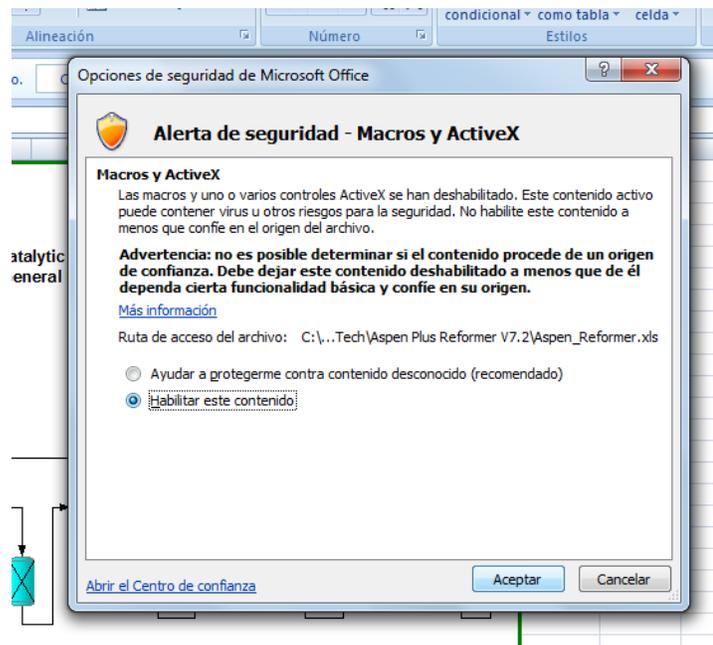


Imagen 5

Seleccionar la opción "Habilitar este contenido" y posteriormente hacer clic en el botón "Aceptar", esto habilitará las macros.

Cuando se abre el archivo de Excel, aún no se ha establecido conexión con el servidor, esto debe de realizarse de forma manual. En la barra principal aparece en la pestaña "complementos" el menú "AspenReformer", al desplegarlo varias de las opciones están inhabilitadas.

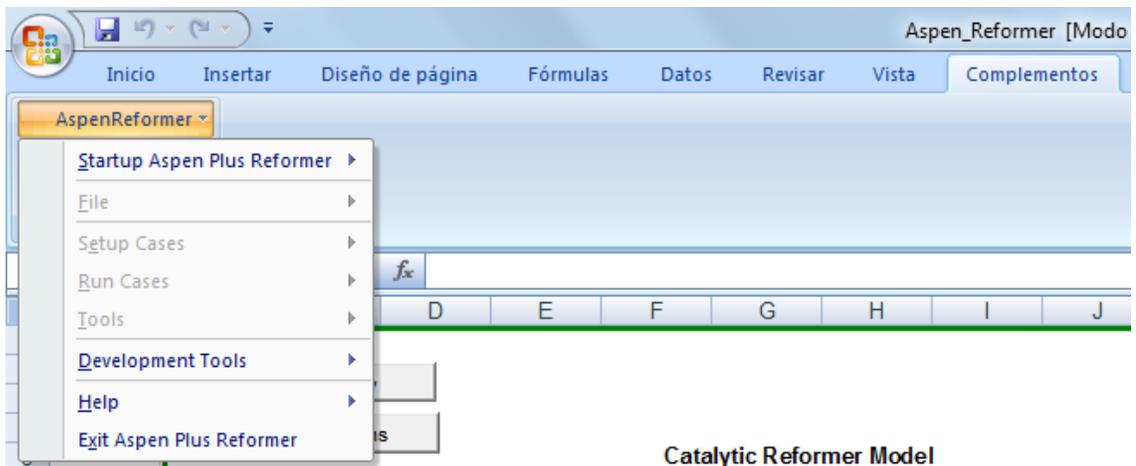


Imagen 6

Catalytic Reformer Model

Seleccionar "Startup Aspen Plus Reformer" y la opción "Load Reformer Flowsheet"

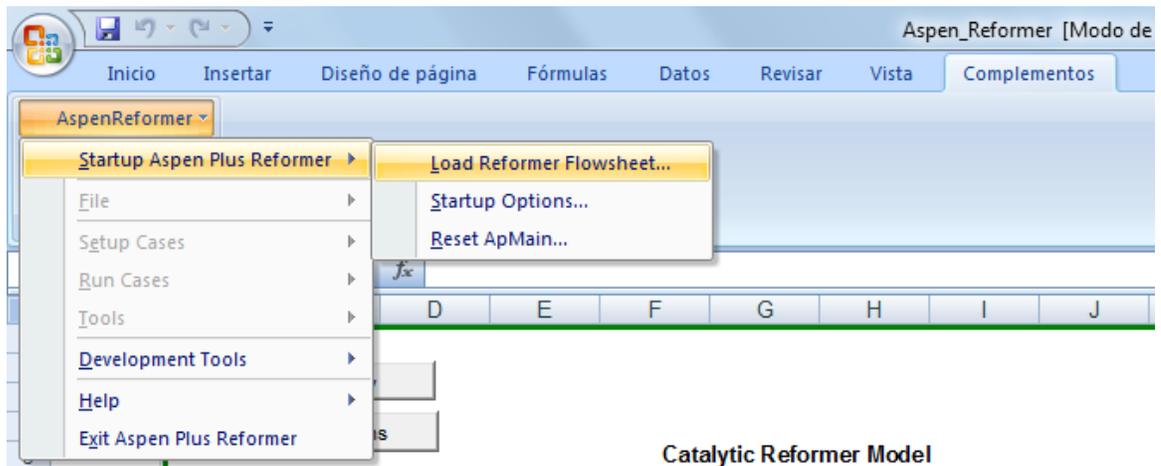


Imagen 7

Catalytic Reformer Model

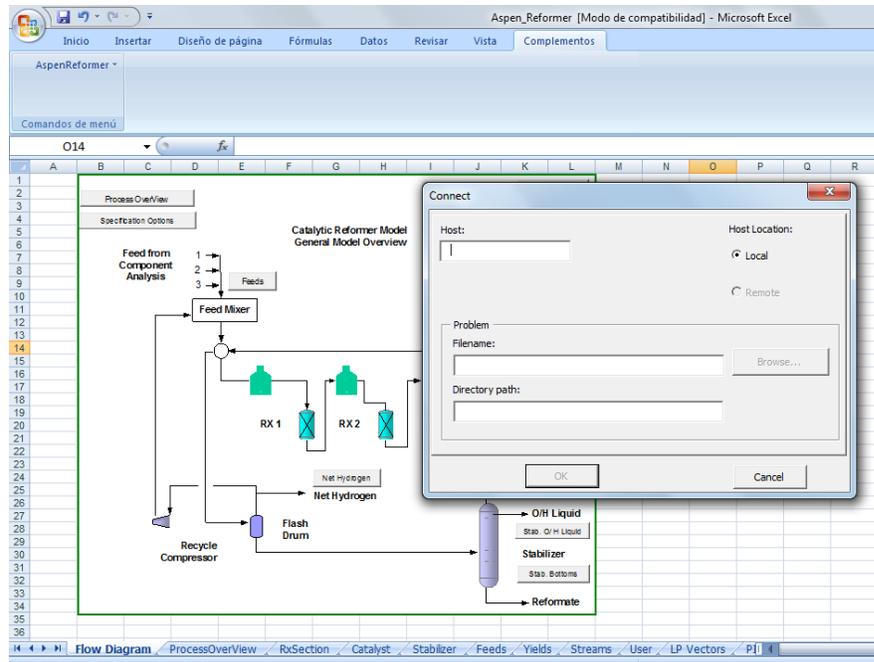


Imagen 8

Se desplegará una ventana en la que se debe colocar el nombre del equipo en el campo "Host", esto habilitará el botón "Browse"

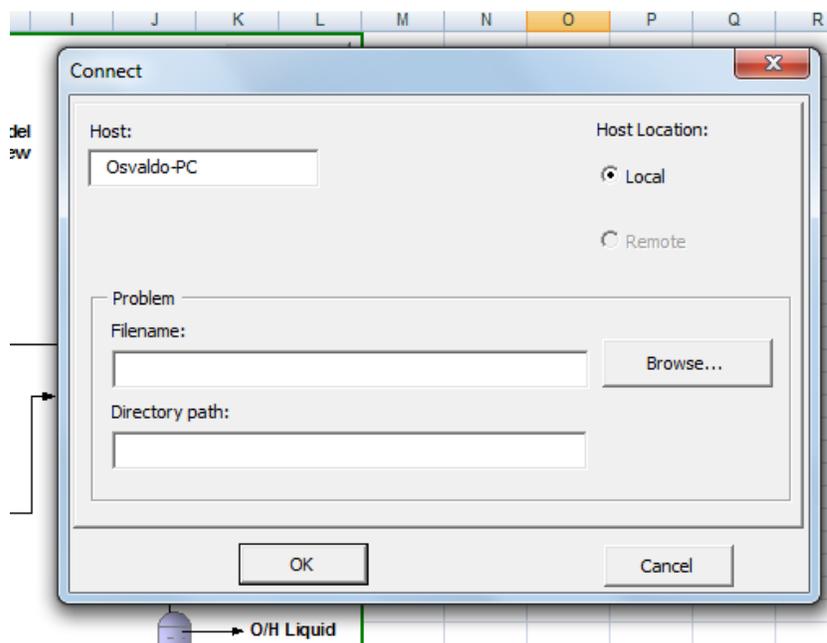


Imagen 9

Al hacer clic sobre éste se abrirá una ventana en la cual se encuentra la carpeta apinit, al entrar en ésta se encuentra el archivo "catref"

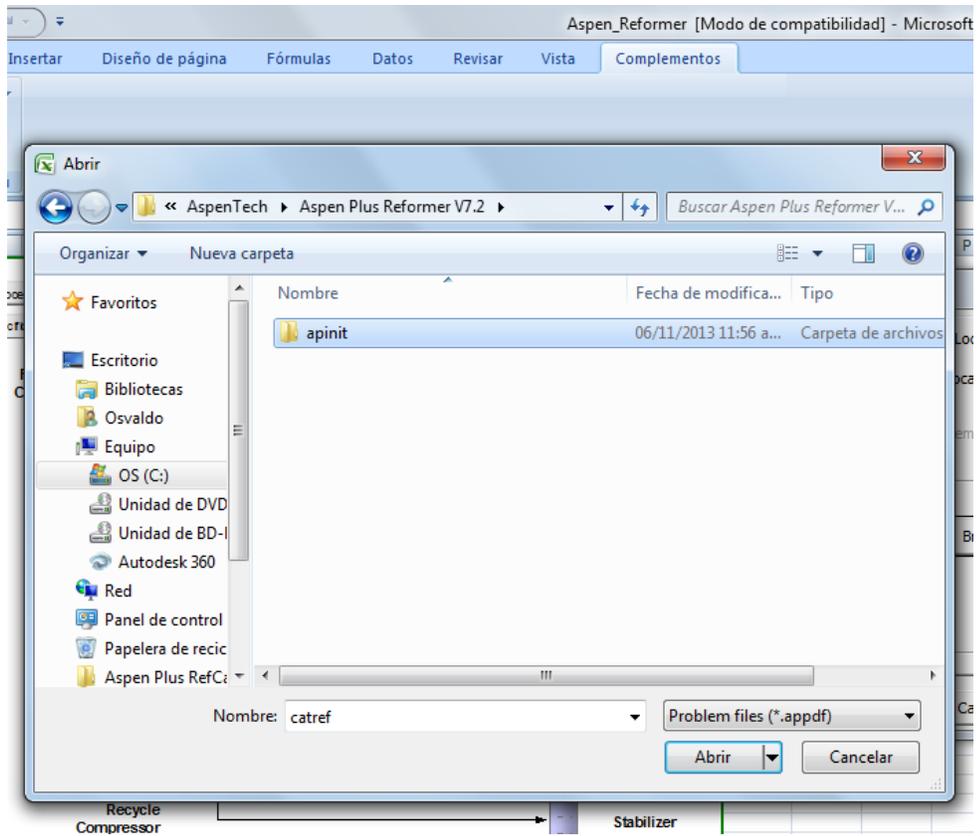


Imagen 10

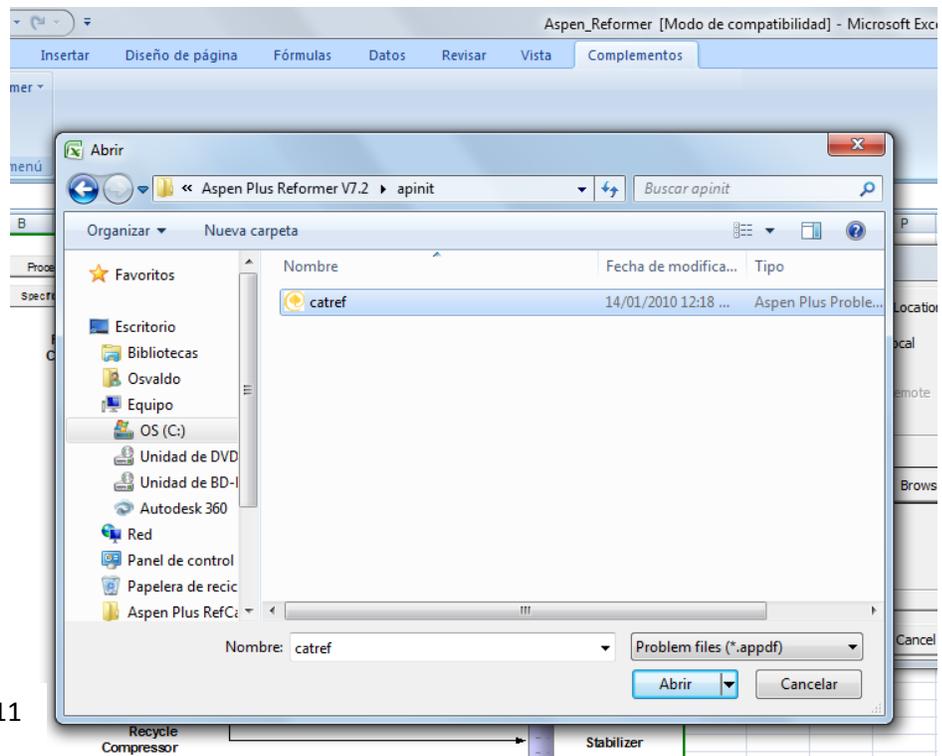


Imagen 11

El programa volverá a la ventana previa, y ahora aparecerá el directorio en que se encuentra el archivo "catref". Se procede a hacer clic en "OK"

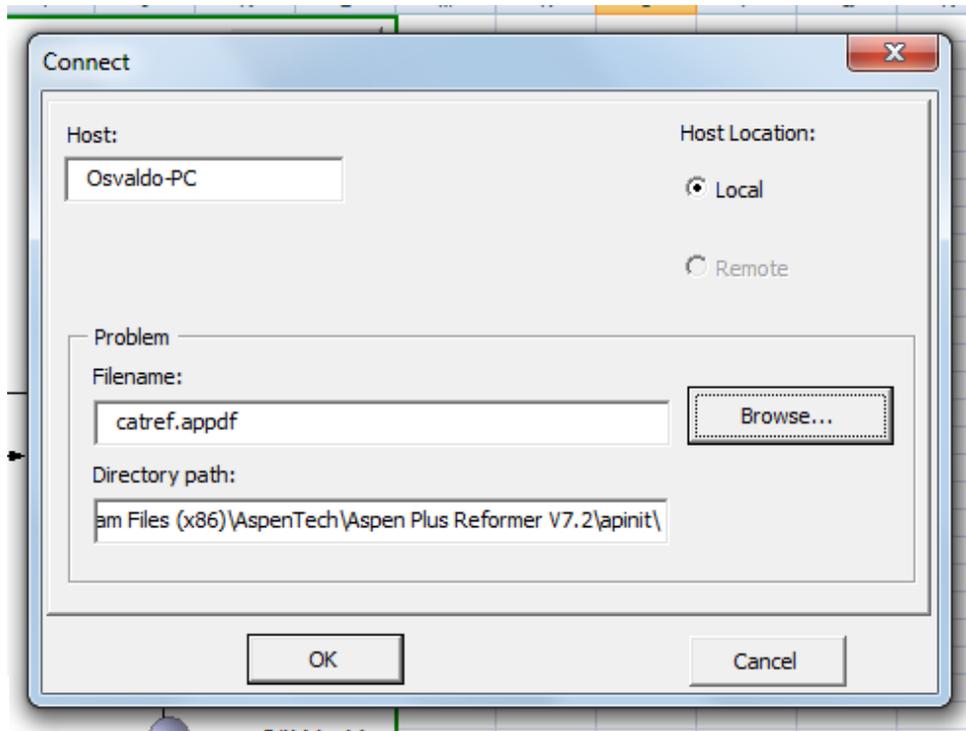


Imagen 12

Esto establecerá la conexión con el motor ASPEN y se podrá iniciar la simulación. La operación de conexión toma de 2 a 3 minutos.

Una vez que la conexión esté hecha, aparecerá una barra de menú con botones de acceso directo para guardar, cambiar caso de estudio y correr la simulación.

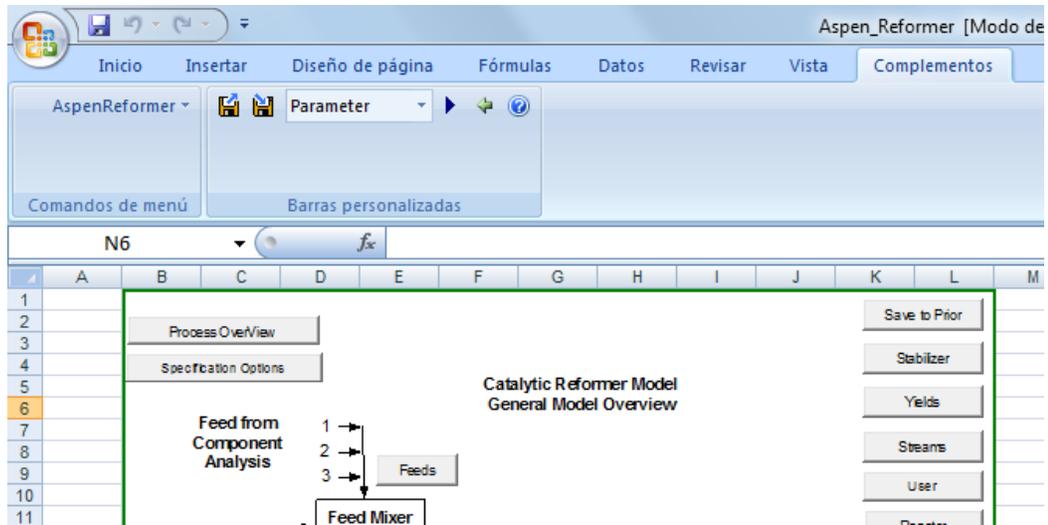


Imagen 13

En el menú principal del simulador se encuentra el siguiente diagrama. Dando clic en los diferentes botones permite acceder a distintas hojas de cálculo, en las cuales se pueden especificar los datos de planta del proceso como ver los resultados de la simulación.

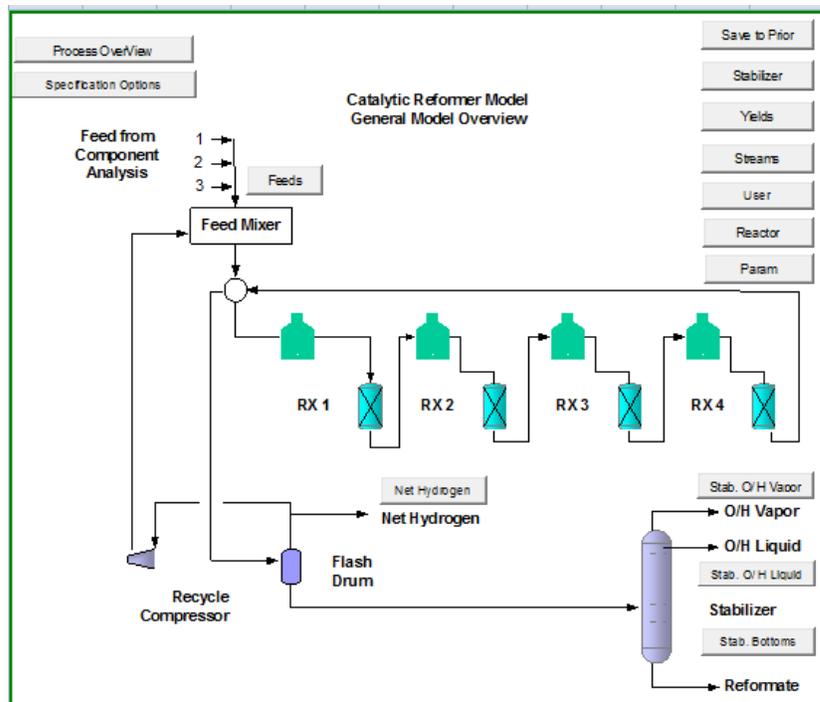


Imagen 14

Los botones "Feeds", "Stablizer", "Yields" y "Reactor" dan acceso a las hojas de cálculo en las cuales se alimentan los datos de planta al simulador, mientras que los botones "Streams", "Net Hydrogen", "Satb. O/H Vapor", "Satb. O/H Liquid" y "Stab. Bottoms" corresponden a hojas de cálculo que muestran los resultados de la simulación.

7.0 ALIMENTACIÓN DE LOS DATOS DE PLANTA AL SIMULADOR

El simulador Aspen RefCat trae predeterminado un caso resuelto, es a partir de éste que se trabaja la simulación, los datos predeterminados se van cambiando paulatinamente hasta llevar todos los elementos a las condiciones de planta requeridas para la simulación. Es necesario para la correcta convergencia del programa que las variaciones de las constantes sea paulatino y no mayor a un 15% de diferencia respecto al valor predeterminado originalmente entre cada simulación.

Para lograr llevar el simulador a las condiciones de planta fue necesario variar las moles, el flujo de catalizador, la presión y la temperatura de los equipos, y el flujo de alimentación al reactor, en ese orden, cualquier modificación que no respetara esta secuencia no llevaba a resultados satisfactorios, por lo que como primer punto importante cabe señalar que el orden de los factores sí altera la convergencia del simulador.

7.1 VARIACIÓN DE LAS MOLES

Para poder variar las moles es necesario acceder a la hoja de cálculo "Feeds", dando click en el botón correspondiente en el diagrama de flujo principal.

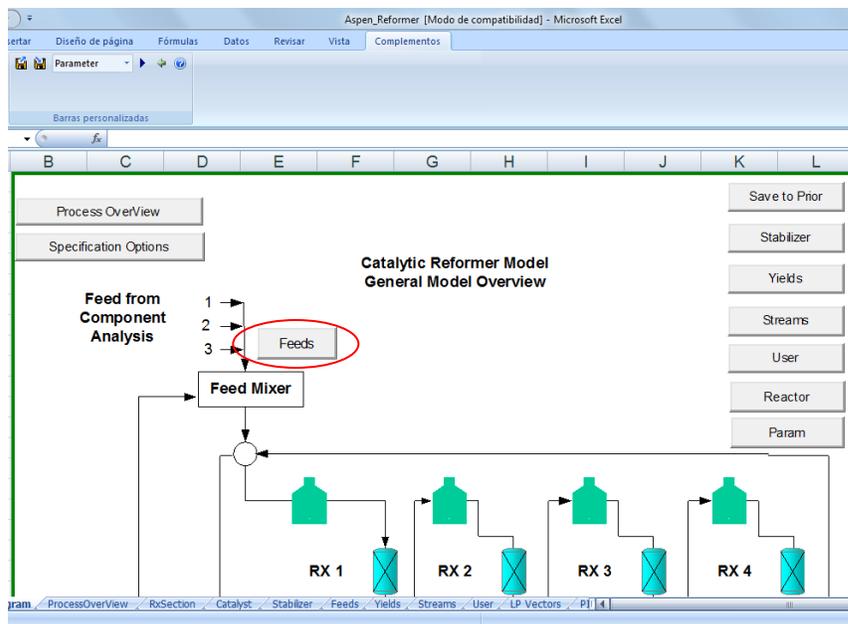


Imagen 15

Esto nos llevará a una hoja de cálculo en la que podemos especificar hasta 3 alimentaciones y definir sus componentes en %peso, %masa y %volumen. Es preciso señalar que el simulador trabaja con familias de compuestos y no compuestos individuales; las abreviaturas a las que hace referencia cada una de éstas se especifica en la Tabla 4

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | |
|----|------------------------|------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|------------|
| 1 | FEEDS | | | | | | | | | | | |
| 2 | | | | | | | | | | | | |
| 3 | | | | | | | | | | | | |
| 4 | Feeds | | Feed1 | | | Feed2 | | | Feed3 | | | Con |
| 5 | Feed Basis | | Mass Basis | | | Volume Basis | | | Volume Basis | | | |
| 6 | Feed Definition | | Weight % | | | Weight % | | | Weight % | | | F |
| 7 | Description | UoM | Value | Spec | Prior | Value | Spec | Prior | Value | Spec | Prior | Val |
| 8 | FEED1.BLK.MASS | KG/HR | 75000 | CONST | 75000 | 0.743898 | CALC | 0.743887 | 0.743898 | CALC | 0.743887 | 75000 |
| 9 | FEED1.BLK.VOLUME | CUM/HR | 101.7494 | CALC | 101.7509 | 0.001 | CONST | 0.001 | 0.001 | CONST | 0.001 | 101.7494 |
| 10 | FEED1.BLK.STDVOL | CUM/HR | 101.7494 | CALC | 101.7509 | 0.001 | CALC | 0.001 | 0.001 | CALC | 0.001 | 101.7494 |
| 11 | FDANV1.BLK.MOLES | KMOL/HR | 737.6942 | CALC | 737.7053 | 0.006644 | CALC | 0.006644 | 0.006644 | CALC | 0.006644 | 737.6942 |

Imagen 16

Hasta 3 naftas distintas pueden manejarse en la alimentación. Si sólo se desea trabajar con una alimentación, es necesario que las otras dos alimentaciones tengan valores de alimentación pequeños y mayores a 0. (Ej. 0. 1000)

En el caso base se observa que la alimentación 1 tiene 75000 kg/h, mientras que las otras 2 están establecidas con 0.743858 kg/h, son prácticamente 100,000 veces más pequeñas que la alimentación de interés, pero no valen 0, esto es indispensable tenerlo en cuenta, pues el simulador no puede trabajar con dicho valor de alimentación.

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | |
|----|------------------------|------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|------------|
| 1 | FEEDS | | | | | | | | | | | |
| 2 | | | | | | | | | | | | |
| 3 | | | | | | | | | | | | |
| 4 | Feeds | | Feed1 | | | Feed2 | | | Feed3 | | | Con |
| 5 | Feed Basis | | Mass Basis | | | Volume Basis | | | Volume Basis | | | |
| 6 | Feed Definition | | Weight % | | | Weight % | | | Weight % | | | F |
| 7 | Description | UoM | Value | Spec | Prior | Value | Spec | Prior | Value | Spec | Prior | Val |
| 8 | FEED1.BLK.MASS | KG/HR | 75000 | CONST | 75000 | 0.743898 | CALC | 0.743887 | 0.743898 | CALC | 0.743887 | 75000 |
| 9 | FEED1.BLK.VOLUME | CUM/HR | 101.7494 | CALC | 101.7509 | 0.001 | CONST | 0.001 | 0.001 | CONST | 0.001 | 101.7494 |
| 10 | FEED1.BLK.STDVOL | CUM/HR | 101.7494 | CALC | 101.7509 | 0.001 | CALC | 0.001 | 0.001 | CALC | 0.001 | 101.7494 |
| 11 | FDANV1.BLK.MOLES | KMOL/HR | 737.6942 | CALC | 737.7053 | 0.006644 | CALC | 0.006644 | 0.006644 | CALC | 0.006644 | 737.6942 |

Imagen 17

Tabla 4. Clasificación de los compuestos en el simulador Aspen Plus Reformer.

| | | | |
|------|-----------------------------------------------------|------|------------------------------------------------|
| H2 | Hidrógeno | IP9 | parafinas ramificadas de 9 carbonos |
| P1 | Metano | NP9 | n-nonano |
| P2 | Etano | 5N9 | naftenos de 9 carbonos y anillo de 5 carbonos |
| P3 | Propano | A9 | aromáticos con 9 carbonos |
| P4 | parafinas de 4 carbonos | 6N9 | naftenos de 9 carbonos y anillo de 6 carbonos |
| P5 | parafinas de 5 carbonos | IP10 | parafinas ramificadas de 10 carbonos |
| 5N5 | ciclopentano | NP10 | n-decano |
| MBP6 | parafinas de 6 carbonos con más de una ramificación | 5N10 | naftenos de 10 carbonos y anillo de 5 carbonos |
| SBP6 | parafinas de 6 carbonos con sólo una ramificación | A10 | aromáticos con 10 carbonos |
| NP6 | n-hexano | 6N10 | naftenos de 10 carbonos y anillo de 6 carbonos |
| 5N6 | naftenos de 6 carbonos y anillo de 5 carbonos | IP11 | parafinas ramificadas de 11 carbonos |
| A6 | aromáticos con 6 carbonos | NP11 | n-undecano |
| 6N6 | naftenos de 6 carbonos y anillo de 6 carbonos | 5N11 | naftenos de 11 carbonos y anillo de 5 carbonos |
| MBP7 | parafinas de 7 carbonos con más de una ramificación | A11 | aromáticos con 11 carbonos |
| SBP7 | parafinas de 7 carbonos con sólo una ramificación | 6N11 | naftenos de 11 carbonos y anillo de 6 carbonos |
| NP7 | n-heptano | P12 | parafinas de 12 carbonos |
| 5N7 | naftenos de 7 carbonos y anillo de 5 carbonos | N12 | naftenos de 12 carbonos |
| A7 | aromáticos con 7 carbonos | A12 | aromáticos con 12 carbonos |
| 6N7 | naftenos de 7 carbonos y anillo de 6 carbonos | P13 | parafinas de 13 carbonos |
| MBP8 | parafinas de 8 carbonos con más de una ramificación | N13 | naftenos de 13 carbonos |
| SBP8 | parafinas de 8 carbonos con sólo una ramificación | A13 | aromáticos con 13 carbonos |
| NP8 | n-octano | P14 | parafinas de 14 carbonos |
| 5N8 | naftenos de 8 carbonos y anillo de 5 carbonos | N14 | naftenos de 14 carbonos |
| A8 | aromáticos con 8 carbonos | A14 | aromáticos con 14 carbonos |
| 6N8 | naftenos de 8 carbonos y anillo de 6 carbonos | | |

Para poder alimentar los datos de composición de la alimentación al reactor fue necesario correlacionar los grupos de compuestos presentados en la Tabla 4 con los compuestos individuales. En la Tabla 5 se muestra dicha correlación.

Tabla 5. Correlación de los datos de planta con la clasificación de compuestos de Aspen RefCat.

| Abreviatura | Nombre | Grupo de Clasificación | Flujo [kmol/h] |
|--------------------|-------------------------|-------------------------------|-----------------------|
| I-PENTAN | i-pentano | P5 | 0.8542371 |
| N-PENTAN | n-pentano | P5 | 3.3103382 |
| CP | ciclopentano | 5N5 | 0.7525949 |
| 22DMC4 | 2,2-dimetilbutano | MBP6 | 1.5462998 |
| 23DMC4 | 2,3-dimetilbutano | MBP6 | 5.5234029 |
| 2MC5 | 2-metilpentano | SBP6 | 37.353779 |
| 3MC5 | 3-metilpentano | SBP6 | 34.027179 |
| N-HEXANE | n-hexano | NP6 | 100.57996 |
| MCP | metilciclopentano | 5N6 | 23.848134 |
| BENZENE | benceno | A6 | 17.490309 |
| CH | ciclohexano | 6N6 | 15.562814 |
| 33DMC5 | 3,3-dimetilpentano | MBP7 | 1.6122533 |
| 24DMC5 | 2,4-dimetilpentano | MBP7 | 3.1332556 |
| 23DMC5 | 2,3-dimetilpentano | MBP7 | 9.7611572 |
| 22DMC5 | 2,2-dimetilpentano | MBP7 | 1.5801799 |
| 223TMC4 | 2,2,3-trimetilbutano | MBP7 | 0.8049973 |
| 3EC5 | 3-etilpentano | SBP7 | 3.2629044 |
| 3MC6 | 3-metilhexano | SBP7 | 32.895118 |
| 2MC6 | 2-metilhexano | SBP7 | 26.865317 |
| N-HEPTAN | n-heptano | NP7 | 122.71963 |
| ECP | Etilciclopentano | 5N7 | 14.245547 |
| 11DMCP | 1,1-dimetilciclopentano | 5N7 | 2.3844204 |
| 12DMCP | 1,2-dimetilciclopentano | 5N7 | 2.3844204 |
| 13DMCP | 1,3-dimetilciclopentano | 5N7 | 2.3844204 |
| TOLUENE | tolueno | A7 | 56.279999 |
| MCH | metil-ciclohexano | 6N7 | 45.789032 |

Tabla 5. Correlación de los datos de planta con la clasificación de compuestos de Aspen RefCat.

| Abreviatura | Nombre | Grupo de Clasificación | Flujo [kmol/h] |
|--------------------|--------------------------------------|-------------------------------|-----------------------|
| 33DMC6 | 3,3-dimetilhexano | MBP8 | 5.4226959 |
| 25DMC6 | 2,5-dimetilhexano | MBP8 | 5.4226959 |
| 2233-C4 | 2,2,3,3-tetrametilbutano | MBP8 | 5.4226959 |
| 224TMC5 | 2,2,4-trimetilpentano | MBP8 | 5.4226959 |
| 223TMC5 | 2,2,3-trimetilpentano | MBP8 | 5.4226959 |
| 34DMC6 | 3,4-dimetilhexano | MBP8 | 5.4226959 |
| 234TMC5 | 2,3,4-trimetilpentano | MBP8 | 5.4226959 |
| 233TMC5 | 2,3,3-trimetilpentano | MBP8 | 5.4226959 |
| 2M3EC5 | 2-metil,3-etilpentano | MBP8 | 5.4226959 |
| 23DMC6 | 2,3-dimetilhexano | MBP8 | 5.4225959 |
| 3MC7 | 3-metilheptano | SBP8 | 5.4226959 |
| 2MC7 | 2-metilheptano | SBP8 | 5.4226959 |
| 4MC7 | 4-metilheptano | SBP8 | 5.4226959 |
| 3EC6 | 3-etilhexano | SBP8 | 5.4226959 |
| N-OCTANE | n-octano | NP8 | 114.81194 |
| 1C2T4-CP | 1-cis,2-trans,4-trimetilciclopentano | 5N8 | 2.0863678 |
| 1T2C4-CP | 1-trans,2-cis,4-trimetilciclopentano | 5N8 | 2.0863678 |
| 1T2C3-CP | 1-trans,2-cis,3-trimetilciclopentano | 5N8 | 1.8408807 |
| IC3-CP | isopropilciclopentano | 5N8 | 14.081566 |
| NC3-CP | n-propilciclopentano | 5N8 | 14.081566 |
| E-BZ | etilbenceno | A8 | 10.730545 |
| P-XYLENE | p-xileno | A8 | 10.009574 |
| M-XYLENE | m-xileno | A8 | 29.487028 |
| O-XYLENE | o-xileno | A8 | 12.776007 |

Tabla 5. Correlación de los datos de planta con la clasificación de compuestos de Aspen RefCat.

| Abreviatura | Nombre | Grupo de Clasificación | Flujo [kmol/h] |
|--------------------|----------------------------|-------------------------------|-----------------------|
| C12DM-CH | cis-1,2-dimetilciclohexano | 6N8 | 17.285064 |
| E-CH | etilciclohexano | 6N8 | 17.285064 |
| IC9 | i-nonano | IP9 | 82.023426 |
| N-NONANE | n-nonano | NP9 | 73.865941 |
| NC4-CP | n-butilciclopentano | 5N9 | 28.654171 |
| CUMENE | cumeno | A9 | 3.4819849 |
| NPBZ | n-propilbenceno | A9 | 3.4815331 |
| INDANE | indano | A9 | 1.6926551 |
| 1M2EBZ | 1-metil,2-etilbenceno | A9 | 4.0538833 |
| 1M3EBZ | 1-metil,3-etilbenceno | A9 | 2.9846260 |
| 1M4EBZ | 1-metil,4-etilbenceno | A9 | 6.4426659 |
| 135TMBZ | 1,3,5-trimetilbenceno | A9 | 5.9791842 |
| 124TMBZ | 1,2,4,trimetilbenceno | A9 | 17.149272 |
| 123TMBZ | 1,2,3,trimetilbenceno | A9 | 5.1466338 |
| NPCH | n-propilciclohexano | 6N9 | 27.223518 |
| N-DECANE | n-decano | NP10 | 43.998376 |
| N-DECANE | n-decano | NP10 | 43.998376 |
| DEBZ | dietilbenceno | A10 | 6.3518685 |
| BBZ | butilbenceno | A10 | 3.0663881 |
| MPBZ | metil-propilbenceno | A10 | 3.0663881 |
| QMBZ | - | A10 | 6.3518685 |
| DMEBZ | dimetil-etilbenceno | A10 | 3.0663881 |
| NC4-CH | n-butilciclohexano | 6N10 | 33.291710 |
| C11+ | - | NP11 | 17.584800 |
| N11+ | - | 5N11,6N11 | 7.2000000 |
| A11+ | - | A11 | 6.8761970 |

Una vez que se ha llevado a cabo la correlación de compuestos con su familia respectiva, se procede a sumar los flujos molares de los compuestos que pertenecen a la misma familia para poder alimentar los datos al simulador.

Tabla 6. Suma de flujos molares de los compuestos agrupados por familia.

| | kmol/h | %mol |
|------|---------------|-------------|
| H2 | 0.00000 | 0.00000 |
| P1 | 0.00000 | 0.00000 |
| P2 | 0.00000 | 0.00000 |
| P3 | 0.00000 | 0.00000 |
| P4 | 0.00000 | 0.00000 |
| P5 | 4.16458 | 0.31396 |
| 5N5 | 0.75259 | 0.05674 |
| MBP6 | 7.06970 | 0.53297 |
| SBP6 | 71.38096 | 5.38130 |
| NP6 | 100.57996 | 7.58257 |
| 5N6 | 23.84813 | 1.79787 |
| A6 | 17.49031 | 1.31857 |
| 6N6 | 15.56281 | 1.17326 |
| MBP7 | 16.89184 | 1.27345 |
| SBP7 | 63.02334 | 4.75123 |
| NP7 | 122.71963 | 9.25164 |
| 5N7 | 21.39881 | 1.61322 |
| A7 | 56.28000 | 4.24286 |
| 6N7 | 45.78903 | 3.45196 |
| MBP8 | 54.22686 | 4.08808 |
| SBP8 | 21.69078 | 1.63523 |
| NP8 | 114.81194 | 8.65549 |
| 5N8 | 34.17675 | 2.57653 |
| A8 | 63.00315 | 4.74971 |
| 6N8 | 34.57013 | 2.60619 |

| | kmol/h | %mol |
|------|---------------|-------------|
| IP9 | 82.02343 | 6.18362 |
| NP9 | 73.86594 | 5.56864 |
| 5N9 | 28.65417 | 2.16019 |
| A9 | 50.41244 | 3.80052 |
| 6N9 | 27.22352 | 2.05234 |
| IP10 | 43.99838 | 3.31697 |
| NP10 | 43.99838 | 3.31697 |
| 5N10 | 0.00000 | 0.00000 |
| A10 | 21.90290 | 1.65123 |
| 6N10 | 33.29171 | 2.50981 |
| IP11 | 0.00000 | 0.00000 |
| NP11 | 17.58480 | 1.32569 |
| 5N11 | 3.60000 | 0.27140 |
| A11 | 6.87620 | 0.51839 |
| 6N11 | 3.60000 | 0.27140 |
| P12 | 0.00000 | 0.00000 |
| N12 | 0.00000 | 0.00000 |
| A12 | 0.00000 | 0.00000 |
| P13 | 0.00000 | 0.00000 |
| N13 | 0.00000 | 0.00000 |
| A13 | 0.00000 | 0.00000 |
| P14 | 0.00000 | 0.00000 |
| N14 | 0.00000 | 0.00000 |
| A14 | 0.00000 | 0.00000 |
| | | |

El %mol obtenido serán los datos de planta para la composición de la alimentación. Para esta primera modificación se puede sustituir en un solo paso la composición de la nafta alimentada, no obstante, es recomendable no modificar el flujo de alimentación todavía, esto porque si se modifica primero el flujo de alimentación, se requerirá de un mayor número de iteraciones para lograr modificar el %mol posteriormente.

Para especificar el %mol de la alimentación, se despliega el menú "Feed Definition" de la alimentación 1 y se elige la opción "Mole %", esto hará que se marquen en color azul las celdas en las que el usuario puede modificar valores.

| | | | | |
|---|------------------------|------------|--------------------------------|--------------|
| 1 | FEEDS | | | |
| 2 | | | | |
| 3 | | | | |
| 4 | Feeds | | Feed1 | Feed2 |
| 5 | Feed Basis | | Mass Basis | Volume |
| 6 | Feed Definition | | Weight % | Weight |
| 7 | Description | UoM | Weight % Mole % Volume % | Value |
| 8 | FEED1.BLK.MASS | KG/HR | | 0.74389 |
| 9 | FEED1.BLK.VOLUME | CUM/HR | 101.7494 CALC 101.7509 | 0.00 |

Imagen 18

Recorriendo hacia abajo en la hoja de cálculo se encuentran las celdas destinadas a especificar el %mol de los componentes de alimentación.

Tabla 7. Valores predeterminados de %mol y valores de planta.

| %mol | Predeterminado | Planta | %mol | Predeterminado | Planta |
|-------------|-----------------------|---------------|-------------|-----------------------|---------------|
| H2 | 0.0000 | 0.0000 | IP9 | 4.0922 | 6.3348 |
| P1 | 0.0000 | 0.0000 | NP9 | 2.9151 | 5.7048 |
| P2 | 0.0000 | 0.0000 | 5N9 | 0.2784 | 2.2130 |
| P3 | 0.0000 | 0.0000 | A9 | 1.1842 | 3.8934 |
| P4 | 0.0000 | 0.0000 | 6N9 | 5.1335 | 2.1025 |
| P5 | 3.4241 | 0.3216 | IP10 | 0.8554 | 3.3981 |
| 5N5 | 1.7105 | 0.0581 | NP10 | 0.3236 | 3.3981 |
| MBP6 | 0.9225 | 0.5460 | 5N10 | 0.0863 | 0.0000 |
| SBP6 | 5.2035 | 5.5129 | A10 | 0.0000 | 1.6916 |
| NP6 | 8.4556 | 7.7680 | 6N10 | 0.1602 | 2.5712 |
| 5N6 | 4.3513 | 1.8418 | IP11 | 0.0682 | 0.0000 |
| A6 | 1.6659 | 1.3508 | NP11 | 0.0163 | 1.3257 |
| 6N6 | 4.9382 | 1.2019 | 5N11 | 0.0000 | 0.2714 |
| MBP7 | 1.4764 | 1.3046 | A11 | 0.0000 | 0.5184 |
| SBP7 | 3.2087 | 4.8674 | 6N11 | 0.0000 | 0.2714 |
| NP7 | 7.8350 | 9.4779 | P12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N7 | 4.5490 | 1.6527 | N12 | 0.0000 | 0.0000 |
| A7 | 2.6592 | 4.3466 | A12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N7 | 8.8597 | 3.5364 | P13 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP8 | 1.7148 | 4.1880 | N13 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP8 | 2.0447 | 1.6752 | A13 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP8 | 8.4336 | 8.8671 | P14 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N8 | 6.6041 | 2.6395 | N14 | 0.0000 | 0.0000 |
| A8 | 4.1656 | 4.8659 | A14 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N8 | 2.6642 | 2.6699 | | | |

Una vez modificada la composición de la alimentación, se procede a correr la simulación. Como primera aproximación se modifica hasta los compuestos con 10 carbonos, los compuestos de 11 carbonos se considerarán más adelante para facilitar la convergencia.

| | A | B | C | D | E |
|-----|------------------------|---|---------|-------|---------|
| 78 | FDANM1.BLK.P3_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 79 | FDANM1.BLK.P4_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 80 | FDANM1.BLK.P5_MOLPCT | * | 0.32164 | CONST | 3.4241 |
| 81 | FDANM1.BLK.5N5_MOLPCT | * | 0.05812 | CONST | 1.71052 |
| 82 | FDANM1.BLK.MBP6_MOLPCT | * | 0.54601 | CONST | 0.92245 |
| 83 | FDANM1.BLK.SBP6_MOLPCT | * | 5.51289 | CONST | 5.20351 |
| 84 | FDANM1.BLK.NP6_MOLPCT | * | 7.76798 | CONST | 8.45562 |
| 85 | FDANM1.BLK.5N6_MOLPCT | * | 1.84184 | CONST | 4.35132 |
| 86 | FDANM1.BLK.A6_MOLPCT | * | 1.35081 | CONST | 1.66595 |
| 87 | FDANM1.BLK.6N6_MOLPCT | * | 1.20195 | CONST | 4.93818 |
| 88 | FDANM1.BLK.MBP7_MOLPCT | * | 1.30459 | CONST | 1.47639 |
| 89 | FDANM1.BLK.SBP7_MOLPCT | * | 4.86741 | CONST | 3.20875 |
| 90 | FDANM1.BLK.NP7_MOLPCT | * | 9.47787 | CONST | 7.83498 |
| 91 | FDANM1.BLK.5N7_MOLPCT | * | 1.65267 | CONST | 4.54905 |
| 92 | FDANM1.BLK.A7_MOLPCT | * | 4.34661 | CONST | 2.65916 |
| 93 | FDANM1.BLK.6N7_MOLPCT | * | 3.53637 | CONST | 8.85973 |
| 94 | FDANM1.BLK.MBP8_MOLPCT | * | 4.18804 | CONST | 1.71483 |
| 95 | FDANM1.BLK.SBP8_MOLPCT | * | 1.67522 | CONST | 2.04472 |
| 96 | FDANM1.BLK.NP8_MOLPCT | * | 8.86714 | CONST | 8.43358 |
| 97 | FDANM1.BLK.5N8_MOLPCT | * | 2.63953 | CONST | 6.60414 |
| 98 | FDANM1.BLK.A8_MOLPCT | * | 4.86585 | CONST | 4.16559 |
| 99 | FDANM1.BLK.6N8_MOLPCT | * | 2.66992 | CONST | 2.66422 |
| 100 | FDANM1.BLK.IP9_MOLPCT | * | 6.33482 | CONST | 4.09215 |
| 101 | FDANM1.BLK.NP9_MOLPCT | * | 5.70481 | CONST | 2.91509 |
| 102 | FDANM1.BLK.5N9_MOLPCT | * | 2.21302 | CONST | 0.27835 |
| 103 | FDANM1.BLK.A9_MOLPCT | * | 3.89345 | CONST | 1.18419 |
| 104 | FDANM1.BLK.6N9_MOLPCT | * | 2.10252 | CONST | 5.13347 |
| 105 | FDANM1.BLK.IP10_MOLPCT | * | 3.39808 | CONST | 0.8554 |
| 106 | FDANM1.BLK.NP10_MOLPCT | * | 3.39808 | CONST | 0.32358 |
| 107 | FDANM1.BLK.5N10_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0.08625 |
| 108 | FDANM1.BLK.A10_MOLPCT | * | 1.6916 | CONST | 0 |
| 109 | FDANM1.BLK.6N10_MOLPCT | * | 2.57118 | CONST | 0.16018 |
| 110 | FDANM1.BLK.IP11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0.06822 |
| 111 | FDANM1.BLK.NP11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0.01633 |

Flow Diagram ProcessOverView RxSection Catalyst Stabilizer

Ready

Imagen 19

7.2 CORRER LA SIMULACIÓN

En la barra de menú del simulador, seleccionar la opción "Simulate"

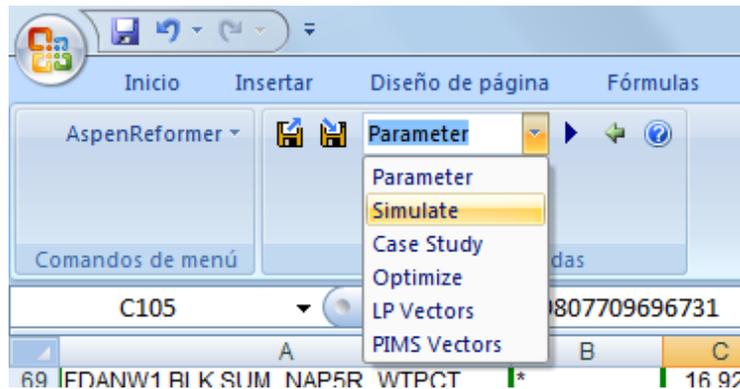


Imagen 20

Y presionar el botón "Run Case" (La flecha azul a la derecha de la barra de especificación de casos)



Imagen 21

El programa automáticamente cambiará a la hoja de cálculo principal, y en ella aparecerá una ventana preguntando si se desean actualizar los reportes de utilidades. Para el caso de la simulación no es necesario llevar a cabo dicha acción, pues no se está realizando una evaluación económica. (Dar clic en Sí o No)

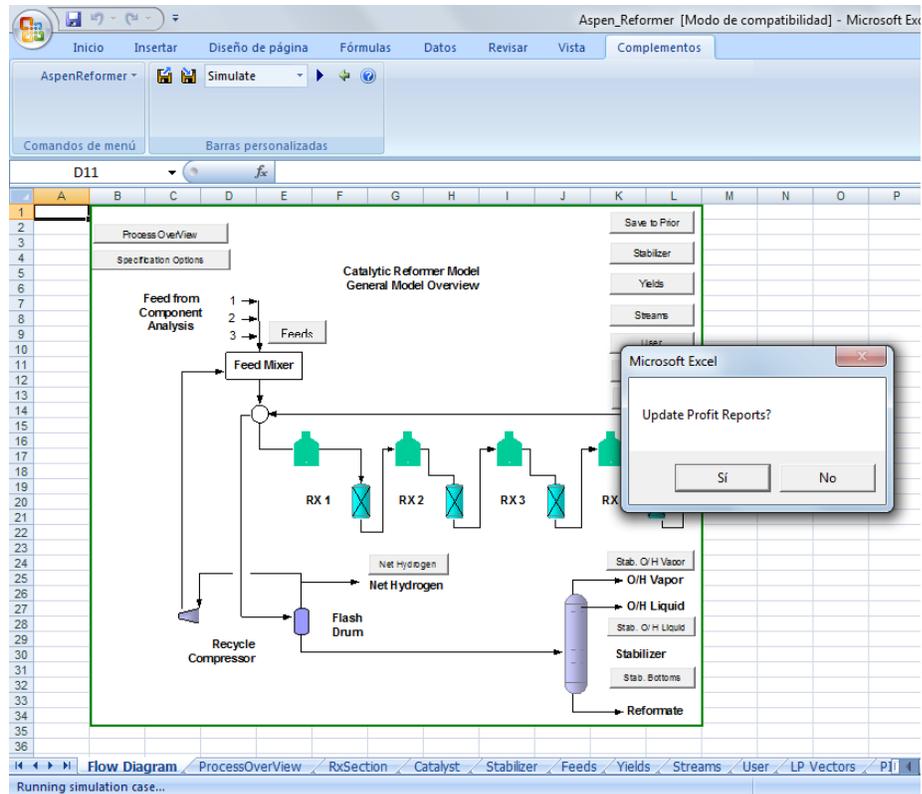


Imagen 22

Mientras el programa busca una solución para las condiciones que hasta el momento se hayan especificado, desplegará la línea de comandos "command line", en la cual se puede observar el progreso de los cálculos del motor.

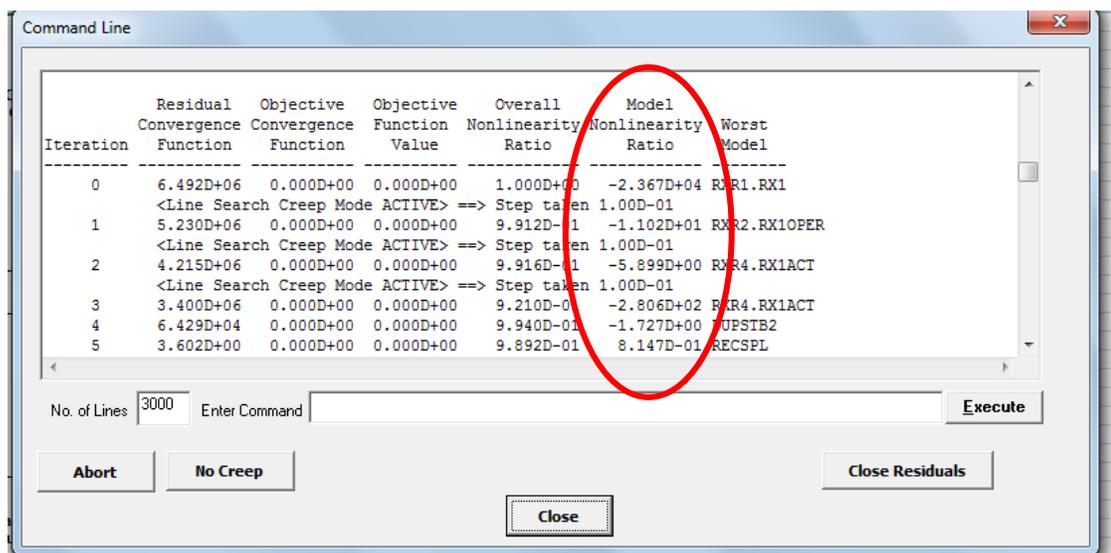


Imagen 23

En la command line se observan varias columnas, entre las que resalta "Model Nonlinearity Ratio", en esa columna se puede observar cómo se ha ido desarrollando la simulación, pues los valores de dicha columna serán de 1 cuando el problema esté resuelto, por el contrario, si se observan aumentos continuos en esta columna, es momento de parar la simulación dando clic en el botón "Abort", cargar el último archivo guardado y especificar cambios más pequeños a las condiciones predeterminadas. También se observan en esta ventana errores que pudieran surgir durante la simulación. Para este caso en particular el utilizar naftas con compuestos con más de 9 carbonos genera fracciones negativas a la salida del proceso para algunos compuestos.

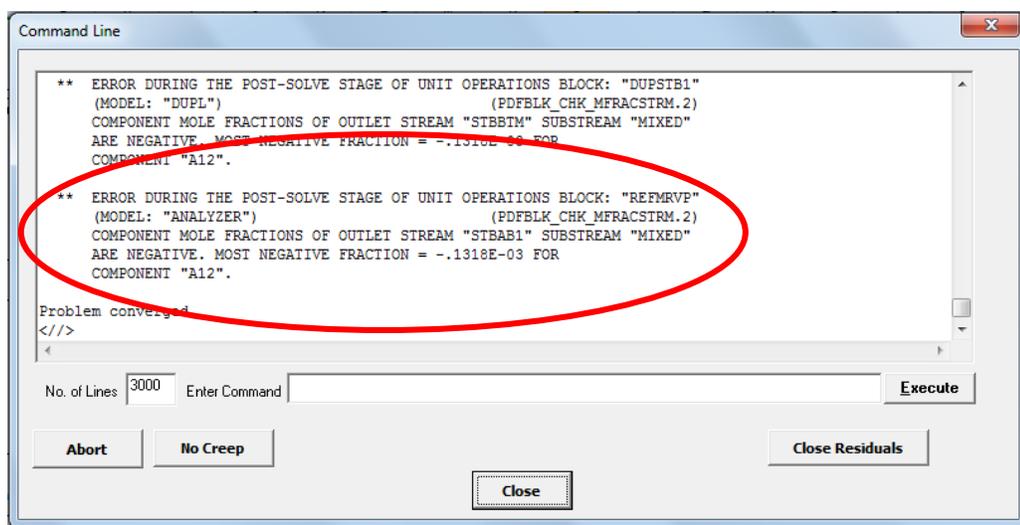


Imagen 24

Para corregir estos errores, se coloca una fracción adicional del compuesto de interés en la alimentación. Por ejemplo, la ventana marca el siguiente error:

** ERROR DURING THE POST-SOLVE STAGE OF UNIT OPERATIONS BLOCK:
"REFMRVP"

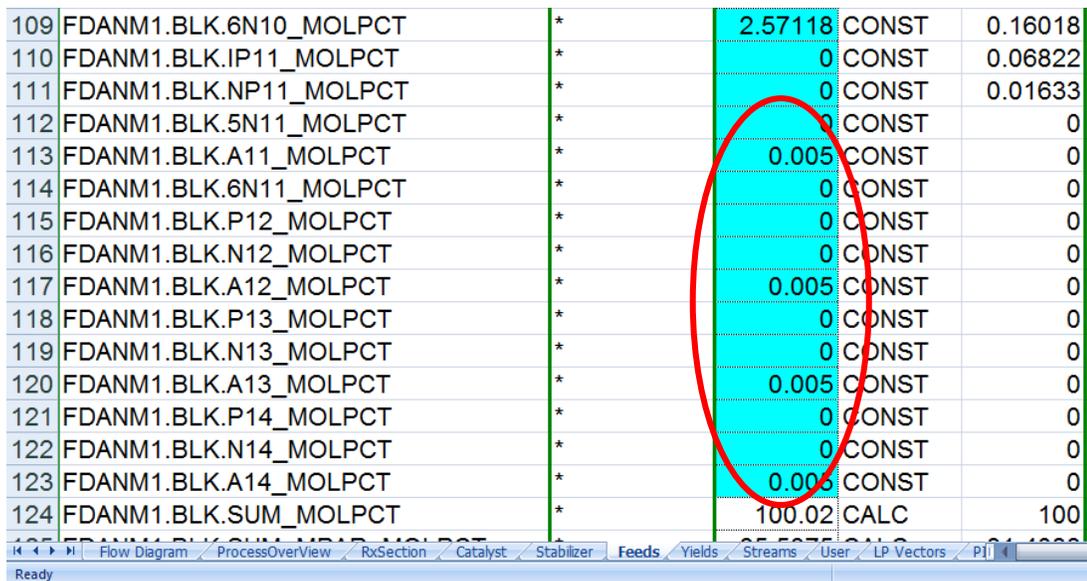
(MODEL: "ANALYZER")

(PDFBLK_CHK_MFRACSTRM.2)

COMPONENT MOLE FRACTIONS OF OUTLET STREAM "STBAB1"
SUBSTREAM "MIXED"

ARE NEGATIVE. MOST NEGATIVE FRACTION = $-.1318E-03$ FOR
COMPONENT "A12".

Para corregir este problema se coloca un flujo molar adicional para el compuesto A12 en la alimentación, una vez que se repite la simulación, el command line mandará un mensaje similar para el compuesto A13, A14 y finalmente para el A11, los 4 casos se corrigen de la misma manera, añadiéndoles 0.005%mol, esto genera un error del 0.02% en la alimentación (cantidad despreciable).



| | | | | | |
|-----|------------------------|---|---------|-------|---------|
| 109 | FDANM1.BLK.6N10_MOLPCT | * | 2.57118 | CONST | 0.16018 |
| 110 | FDANM1.BLK.IP11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0.06822 |
| 111 | FDANM1.BLK.NP11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0.01633 |
| 112 | FDANM1.BLK.5N11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 113 | FDANM1.BLK.A11_MOLPCT | * | 0.005 | CONST | 0 |
| 114 | FDANM1.BLK.6N11_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 115 | FDANM1.BLK.P12_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 116 | FDANM1.BLK.N12_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 117 | FDANM1.BLK.A12_MOLPCT | * | 0.005 | CONST | 0 |
| 118 | FDANM1.BLK.P13_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 119 | FDANM1.BLK.N13_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 120 | FDANM1.BLK.A13_MOLPCT | * | 0.005 | CONST | 0 |
| 121 | FDANM1.BLK.P14_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 122 | FDANM1.BLK.N14_MOLPCT | * | 0 | CONST | 0 |
| 123 | FDANM1.BLK.A14_MOLPCT | * | 0.005 | CONST | 0 |
| 124 | FDANM1.BLK.SUM_MOLPCT | * | 100.02 | CALC | 100 |

Imagen 25

Al correr la simulación nuevamente se observa la command line sin advertencias de errores y con la leyenda: "Problem converged", esto indica que el motor ha llegado a una solución razonable. Estas correcciones serán temporales y se quitarán al final de la simulación.

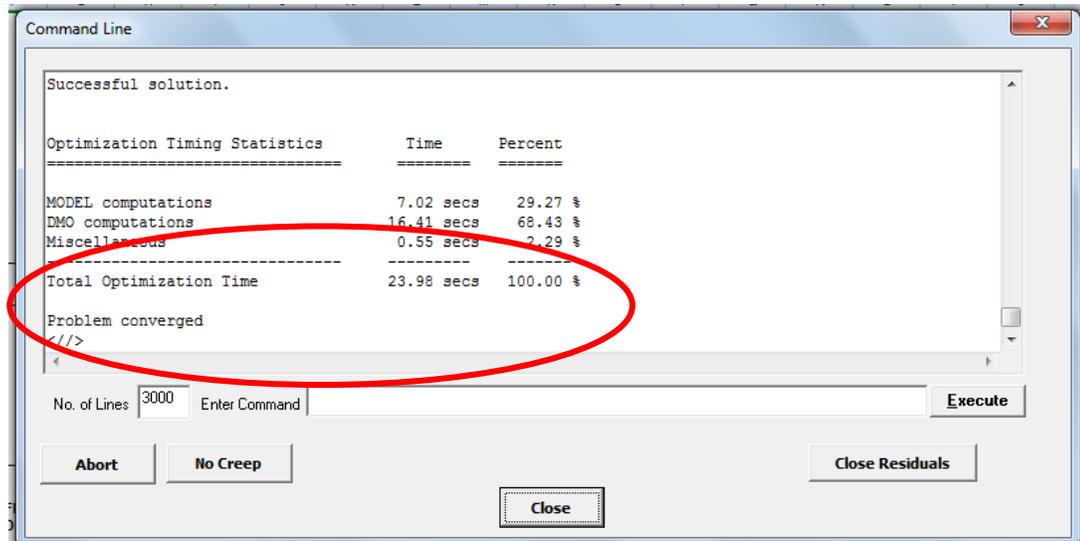


Imagen 26

7.3 CARGAR Y GUARDAR ARCHIVOS EN EL SIMULADOR

Debido a que en ocasiones el cambiar significativamente las condiciones predeterminadas o el modificar las condiciones en el orden incorrecto llevan a que el simulador no encuentre una solución, es necesario guardar continuamente nuestros datos, pues cada que se ejecuta el comando "run case" se sobrescriben los valores iniciales del simulador y no se obtendrán datos correctos a partir de una mala solución.

Para guardar los datos obtenidos tras cada simulación basta con dar clic en el ícono de acceso directo de la barra del simulador o desplegar el menú "AspenReformer", ir a "File" y finalmente seleccionar la opción "Save User Data to Var File"

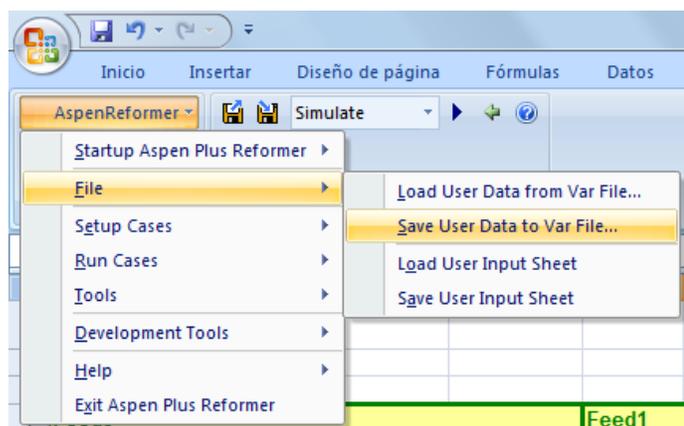
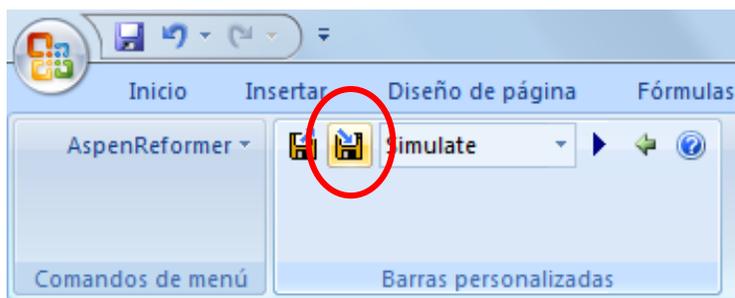


Imagen 27

Ambas opciones desplegarán una ventana en la cual se especifica el directorio y nombre de archivo mediante el botón "Browse...", y el simulador establecerá el directorio y nombre elegidos como predeterminados mientras esté abierto el programa. Cada vez que se cambie el nombre de archivo o el directorio, éstos serán establecidos como predeterminados.

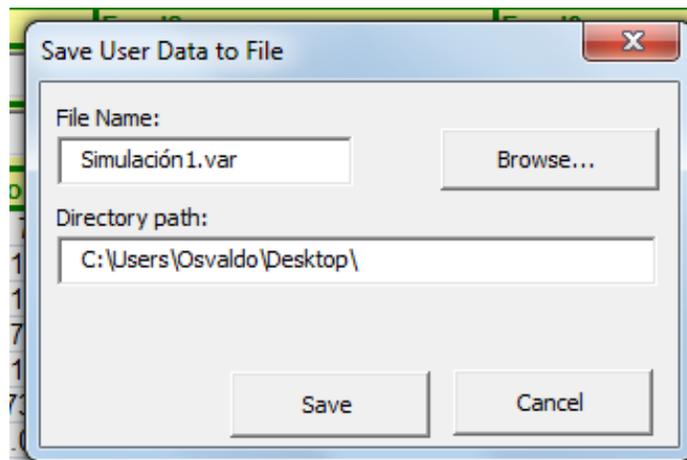


Imagen 28

Si por el contrario se desea cargar un archivo, entonces se selecciona el botón "Load User Data from Var File" desde la barra de acceso directo.

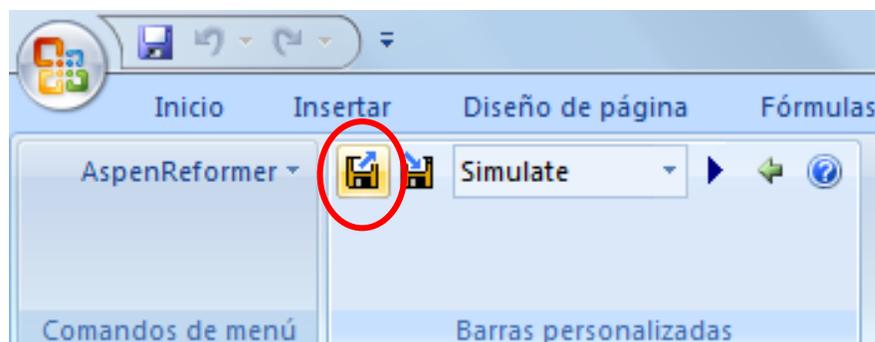


Imagen 29

O bien desde la barra de menú "AspenReformer".

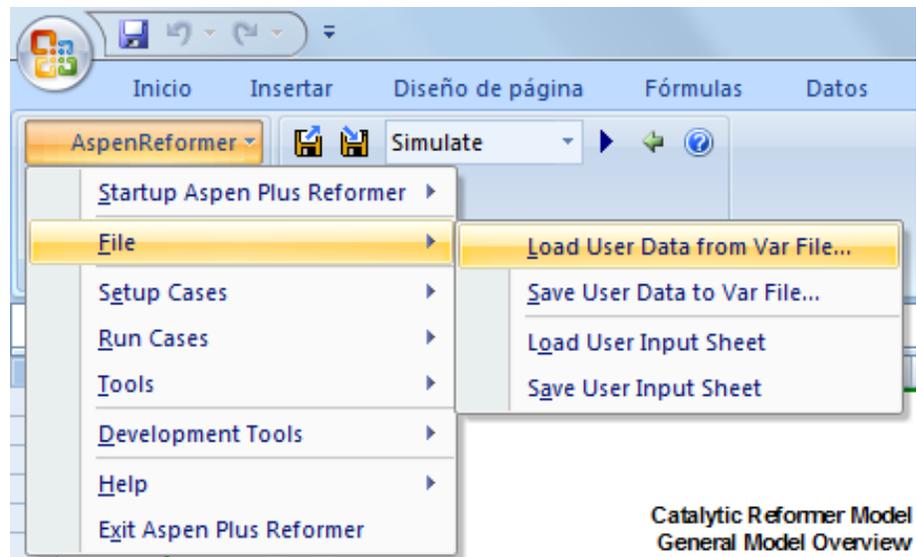
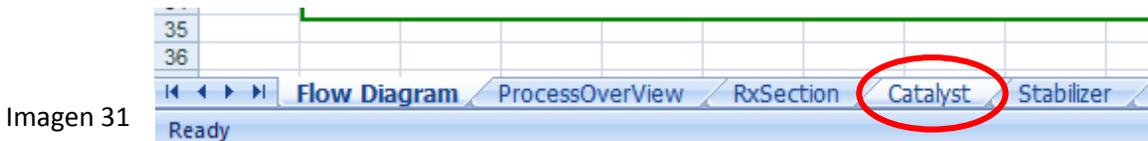


Imagen 30

De igual manera que cuando se guarda un archivo, al cargar uno se desplegará una ventana en la cual se puede seleccionar el archivo desde el directorio donde se encuentre.

7.4 ESPECIFICACIÓN DEL CATALIZADOR

Como segunda etapa se debe de establecer el flujo del catalizador y las condiciones de regeneración de éste. En la barra de hojas de cálculo se encuentra la pestaña "Catalyst", al dar clic se abre la hoja de cálculo con las propiedades del catalizador.



En la sección de "Catalyst Circulation Rate" se establece el flujo másico de catalizador por hora. Para la simulación es de 1300 Kg/h

| Catalyst - CCR Operation | | | | | |
|----------------------------------|----------|----------|-------|---------|--|
| Reactor Section Block | | | | | |
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior | |
| Catalyst Circulation Rate | 1300.00 | KG/HR | CONST | 1000.00 | |
| Rx 1 Coke on Cat Wt% | 2.75* | | CALC | 0.20 | |
| Rx 2 Coke on Cat Wt% | 3.49* | | CALC | 0.60 | |
| Rx 3 Coke on Cat Wt% | 6.94* | | CALC | 1.40 | |
| Rx 4 Coke on Cat Wt% | 19.93* | | CALC | 4.58 | |
| Regenerator Section Block | | | | | |
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior | |
| Air Rate Mass | 3.93 | TONNE/HR | CALC | 0.70 | |
| Air Rate Actual Volume | 6296.16 | CUM/HR | CALC | 1112.88 | |
| Air Rate Standard Volume | 4.54 | CUM/HR | CALC | 0.80 | |
| Air N2 Frac | 0.79 | FRACTION | CONST | 0.79 | |
| Air O2 Frac | 0.21 | FRACTION | CONST | 0.21 | |
| Air Rate Moles | 136.38 | KMOL/HR | CALC | 24.11 | |
| Air Inlet Temp | 60.00 | C | CONST | 60.00 | |
| Air Inlet Pres | 60.00 | KPA | CONST | 60.00 | |
| Heat Release Coke to CO | -0.99 | MMBTU/HR | CALC | -0.17 | |
| Heat Release CO to CO2 | -5.17 | MMBTU/HR | CALC | -0.91 | |
| Regen Off Gas Prod Mass | 4.19 | TONNE/HR | CALC | 0.74 | |
| Regen Off Gas Prod Actual Volume | 10276.27 | CUM/HR | CALC | 1816.39 | |
| Regen Off Gas Prod Moles | 141.51 | KMOL/HR | CALC | 25.01 | |
| Regen Off Gas Prod Temp | 600.00 | C | CONST | 600.00 | |
| Regen Off Gas Prod Pres | 100.00 | KPA | CONST | 100.00 | |
| Regen Off Gas Frac N2 | 0.76 | FRACTION | CALC | 0.76 | |
| Regen Off Gas Frac O2 | 0.03 | FRACTION | CONST | 0.03 | |

Imagen 32

Para los datos de la sección de regeneración se puede establecer la fracción mol de aire empleada para quemar el coque depositado, así como su temperatura y presión. También es posible establecer la temperatura de regeneración del catalizador y su presión.

Adicionalmente en esta sección se observa el % en peso de coque depositado sobre el catalizador a la salida de cada reactor. Conforme se van ajustando los datos de planta en el simulador, es importante cuidar que el valor máximo de coque depositado no sobrepase el 20%, pues más arriba de dicho valor el simulador no obtiene resultados satisfactorios en la convergencia. Aunado a esto, hay que recordar que industrialmente no se permite que el coque depositado sobre el catalizador sea mayor al 7% en peso, por lo que al final de la simulación se deben de ajustar las constantes de coque depositado en la sección de reacción para que se cumpla con dicha restricción.

| Catalyst - CCR Operation | | | | | |
|---------------------------|---------|----------|-------|---------|--|
| Reactor Section Block | | | | | |
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior | |
| Catalyst Circulation Rate | 1300.00 | KG/HR | CONST | 1000.00 | |
| Rx 1 Coke on Cat Wt% | 1.15* | | CALC | 0.20 | |
| Rx 2 Coke on Cat Wt% | 3.49* | | CALC | 0.60 | |
| Rx 3 Coke on Cat Wt% | 6.94* | | CALC | 1.40 | |
| Rx 4 Coke on Cat Wt% | 19.93* | | CALC | 4.58 | |
| Regenerator Section Block | | | | | |
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior | |
| Air Rate Mass | 3.93 | TONNE/HR | CALC | 0.70 | |
| Air Rate Actual Volume | 6296.16 | CUM/HR | CALC | 1112.88 | |
| Air Rate Standard Volume | 4.54 | CUM/HR | CALC | 0.80 | |
| Air N2 Frac | 0.79 | FRACTION | CONST | 0.79 | |
| Air O2 Frac | 0.21 | FRACTION | CONST | 0.21 | |
| Air Rate Moles | 136.38 | KMOL/HR | CALC | 24.11 | |
| Air Inlet Temp | 60.00 | C | CONST | 60.00 | |
| Air Inlet Pres | 60.00 | KPA | CONST | 60.00 | |

Imagen 33

7.5 AJUSTE DE LA PRESIÓN.

La tercera variable ajustada fue la presión, ésta se varía en 2 secciones distintas del simulador: para la sección de reacción se modifican el flash a la salida del reactor y el tambor de recontacto a alta presión, mientras que en la sección del estabilizador se modifican la presión de entrada a la torre de separación, la presión del condensador y el delta P de la columna.

7.5.1 SECCIÓN DE REACCIÓN

Para acceder a la sección de reacción se da clic en el botón "reactor" en el diagrama de flujo principal o bien en la pestaña "RxSection" en el diagrama de flujo principal o bien en la pestaña "RxSection"

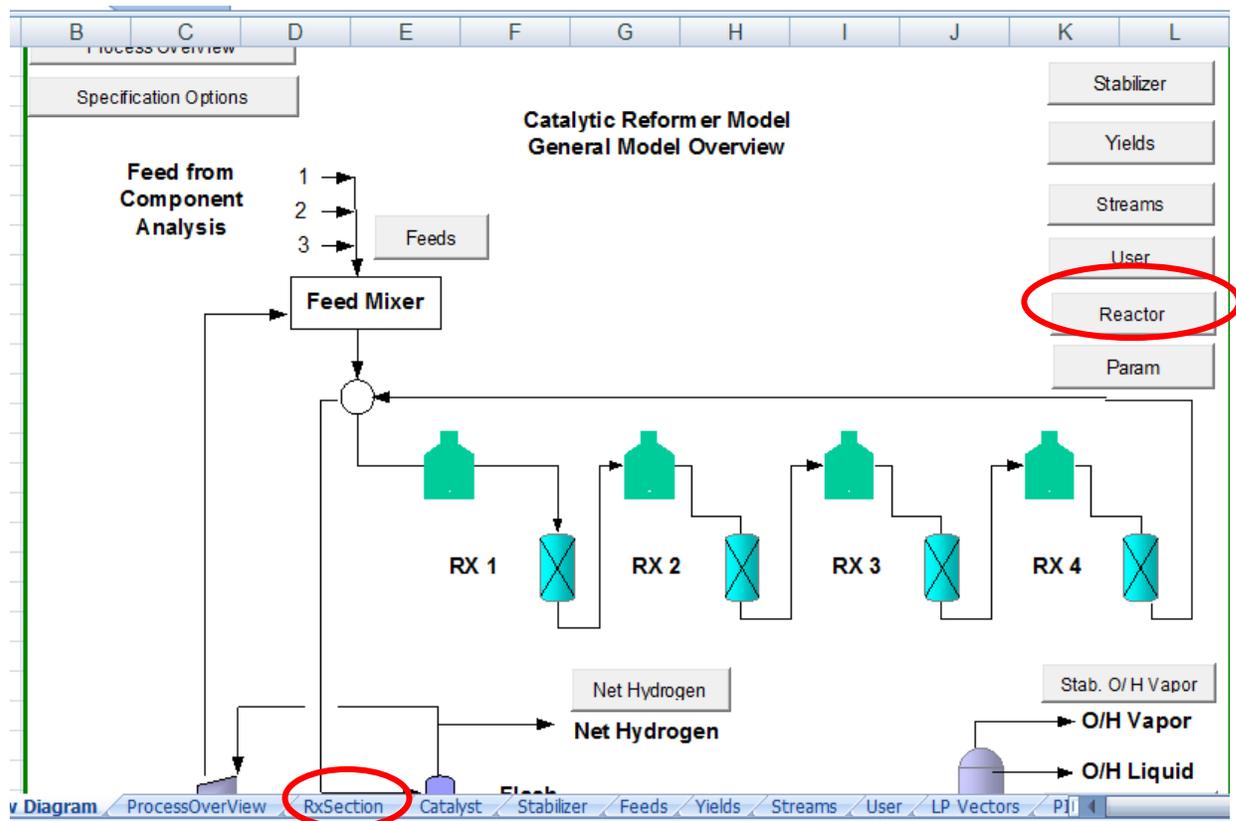


Imagen 34

En esta sección se pueden modificar las temperaturas de alimentación a cada reactor, la relación H2/hidrocarburo que entra al reactor, la temperatura y presión del flash, la presión de descarga de los compresores en la sección de recontacto, las temperaturas de los tambores de recontacto y las constantes de calibración.

Para acceder a cada uno de estos puntos basta con ir recorriendo hacia abajo la hoja de cálculo.

7.5.1.1 FLASH DEL REACTOR

El tanque flash a la salida del reactor está preconfigurado para operar a 350 kPa, y se deben modificar según los datos de planta que señalan 253 kPa como presión de operación. Esta modificación se lleva a cabo en la tabla "Product Separator Section", y la manera en que se ajustó dicha presión fue mediante variaciones de 30 kPa: 350 → 320 → 290 → 260 → 253

| 26 | Product Separator Section | | | | |
|----|----------------------------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| 27 | Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| 28 | Product Separator Temperature | 28.00 | C | CONST | 28.00 |
| 29 | Product Separator Pressure | 350.00 | KPA | CONST | 349.98 |
| 30 | | | | | |
| 31 | Heater Section | | | | |
| 32 | Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| 33 | Charge Heater Fired Duty | 14278.26 | KW | CALC | 14278.43 |
| 34 | Rx 2 Interheater Fired Duty | 59.24 | MMBTU/HR | CALC | 59.24 |
| 35 | Rx 3 Interheater Fired Duty | 40.21 | MMBTU/HR | CALC | 40.21 |
| 36 | Rx 4 Interheater Fired Duty | 27.12 | MMBTU/HR | CALC | 27.12 |
| 37 | Total Fired Duty | 175.29 | MMBTU/HR | CALC | 175.29 |
| 38 | Charge Heater Absorbed Duty | 31.67 | MMBTU/HR | CALC | 31.67 |
| 39 | Rx 2 Interheater Absorbed Duty | 38.51 | MMBTU/HR | CALC | 38.51 |
| 40 | Rx 3 Interheater Absorbed Duty | 26.44 | MMBTU/HR | CALC | 26.44 |

Imagen 35

También es conveniente ajustar en este momento la relación de moles de hidrógeno alimentados al sistema respecto a las moles de hidrocarburo alimentadas. Esta modificación se lleva a cabo en la tabla "Hydrogen Recycle Section"; el dato de planta es 2.14 y la modificación se puede hacer en un solo paso debido a que la diferencia entre el valor final y el inicial no supera el 15% de variación que se tiene estimado como límite para lograr una buena convergencia.

| | | | | | |
|----|----------------------------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| 13 | Rx 3 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| 14 | Rx 4 Temperature Bias | 0.00 | DELTA-C | CONST | 0.00 |
| 15 | Rx 4 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| 16 | C5+ RON | 99.96 | * | CALC | 100.00 |
| 17 | C6+ RON | 101.96 | * | CALC | 102.00 |
| 18 | Sum of Aromatics, Wt. % of Feed | 64.02 | * | CALC | 64.02 |
| 19 | Reformate RON | 100.66 | * | CALC | 100.70 |
| 20 | | | | | |
| 21 | Hydrogen Recycle Section | | | | |
| 22 | Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| 23 | Recycle Compressor Flow | 38558.46 | CUM/HR | CALC | 38558.46 |
| 24 | H2HC Ratio – Mol/Mol | 2.00 | * | CONST | 2.00 |
| 25 | | | | | |
| 26 | Product Separator Section | | | | |
| 27 | Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| 28 | Product Separator Temperature | 28.00 | C | CONST | 28.00 |
| 29 | Product Separator Pressure | 350.00 | KPA | CONST | 349.98 |
| 30 | | | | | |

Imagen 36

7.5.1.2 TAMBOR DE RECONTACTO

Esta sección corresponde a 4 tablas: "Booster Compressor 1", "Booster Compressor 2", "Low Pressure Recontact Drum" y "High Pressure Recontact Drum". Los datos de planta disponibles para esta sección son exclusivos del tambor de recontacto a alta presión, por lo que los datos correspondientes al tambor de baja presión no serán modificados.

En lo que respecta al tambor de alta presión, en la tabla "Booster Compressor 2" se modifica la presión predeterminada (2100 kPa) por 4023 kPa (dato de planta), esto en intervalos de 500 kPa.

| Booster Compressor 2 (BCMP2) (RCONLP to RCONHP) | | | | |
|--------------------------------------------------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Booster Comp 2 IN_MOLES | 1409.07 | KMOL/HR | CALC | 1409.06 |
| Booster Comp 2 IN_TEMP | 29.00 | C | CALC | 28.99 |
| Booster Comp 2 IN_PRES | 825.00 | KPA | CALC | 825.00 |
| Booster Comp 2 IN_MOLE_WT | 5.93 | UNITLESS | CALC | 5.93 |
| Booster Comp 2 OUT_TEMP | 164.06 | C | CALC | 163.63 |
| Booster Comp 2 OUT_PRES | 2100.00 | KPA | CONST | 2100.00 |
| Booster Comp 2 NET_WORK | 1986.24 | KW | CALC | 1979.58 |
| Booster Comp 2 BRAKE_POWER | 1986.24 | KW | CALC | 1979.58 |
| Booster Comp 2 GAS_POWER | 1787.62 | KW | CALC | 1781.62 |
| Booster Comp 2 MECH_EFFICIENCY | 0.90 | UNITLESS | CONST | 0.90 |
| Booster Comp 2 TEMP_RATIO | 1.45 | UNITLESS | CALC | 1.45 |
| Booster Comp 2 PRES_RATIO | 2.55 | UNITLESS | CALC | 2.55 |
| Booster Comp 2 DELTA_P | 1275.00 | KPA | CALC | 1275.00 |
| Booster Comp 2 IN_VOL | 4299.79 | CUM/HR | CALC | 4299.56 |
| Booster Comp 2 HEAD_ACT | 49464.74 | M-KGF/KG | CALC | 49319.27 |
| Booster Comp 2 EFFICIENCY_ACT | 0.63 | UNITLESS | CONST | 0.63 |
| Booster Comp 2 POWER_LOSS_ACT | 198.62 | KW | CALC | 197.96 |
| Booster Comp 2 IN_CP_RATIO | 1.36 | UNITLESS | CALC | 1.35 |
| Booster Comp 2 POLY_EXPONENT | 0.42 | UNITLESS | CALC | 0.41 |
| Booster Comp 2 POLY_DELTA_ENTH | 687.23 | CAL/MOL | CALC | 684.93 |
| Booster Comp 2 DELTA_ENTH_ACT | 1090.84 | CAL/MOL | CALC | 1087.19 |

Imagen 37

7.5.2 ESTABILIZADOR

Para acceder a la sección del estabilizador se da clic en el botón "Stabilizer" en el diagrama de flujo principal o bien en la pestaña del mismo nombre.

7.5.2.1 PRESIÓN DE SALIDA DEL PRECALENTADOR

La presión de entrada a la torre de separación es establecida en la tabla "Stabilizer Specifications", la presión predeterminada es de 1100 kPa, y se debe de pasar a 3951 kPa. Para correr la simulación se hizo en variaciones de 500 kPa

En esta tabla también se especifica la relación de reflujo en la torre: de 3.00 se modifica hasta 6.35 (Esto se puede hacer en un solo paso)

| 1 | Stabilizer Specifications | | |
|----|----------------------------------|---------|----------|
| 2 | | | |
| 3 | Process Variable | Value | UoM |
| 4 | Stab Preheater Outlet Temp | 90.00 | C |
| 5 | Stab Preheater Outlet Pres | 1100.00 | KPA |
| 6 | Stab Preheater delta Temp | 61.00 | DELTA-C |
| 7 | Stab Preheater delta Pres | -275.00 | KPA |
| 8 | Stab Preheater Outlet Vapor Frac | -0.27 | UNITLESS |
| 9 | Stab Preheater Duty | 8.08 | MMBTU/HR |
| 10 | Stab Reflux MASS | 8.07 | TONNE/HR |
| 11 | Stab Reflux VOLUME | 13.79 | CUM/HR |
| 12 | Stab Reflux STDVOL | 13.79 | CUM/HR |
| 13 | Stab Reflux MOLES | 133.48 | KMOL/HR |
| 14 | Stab Reflux Ratio MASS | 2.49 | UNITLESS |
| 15 | Stab Reflux Ratio VOLUME | 0.31 | UNITLESS |
| 16 | Stab Reflux Ratio STDVOL | 3.00 | UNITLESS |
| 17 | Stab Reflux Ratio MOLES | 2.26 | UNITLESS |

Imagen 38

7.5.2.2 PRESIÓN DEL CONDENSADOR

En esta misma tabla se encuentra la presión del condensador, 880 kPa (valor predeterminado). Para llevarlo al valor de planta (1500 kPa) se llevaron a cabo variaciones de 300 kPa

| | | | | |
|-----------------------------|---------|----------|-------|---------|
| Stab O/H Vapor Rate VOLUME | 40.60 | CUM/HR | CALC | 40.61 |
| Stab O/H Vapor Rate STDVOL | 1.14 | CUM/HR | CALC | 1.14 |
| Stab O/H Vapor Rate MOLES | 14.69 | KMOL/HR | CALC | 14.69 |
| Stab O/H Liquid Rate MASS | 2.69 | TONNE/HR | CALC | 2.69 |
| Stab O/H Liquid Rate VOLUME | 4.60 | CUM/HR | CALC | 4.60 |
| Stab O/H Liquid Rate STDVOL | 4.60 | CUM/HR | CALC | 4.60 |
| Stab O/H Liquid Rate MOLES | 44.49 | KMOL/HR | CALC | 44.49 |
| Stab Btms Rate MASS | 66.96 | TONNE/HR | CALC | 66.96 |
| Stab Btms Rate VOLUME | 83.12 | CUM/HR | CALC | 83.13 |
| Stab Btms Rate STDVOL | 83.11 | CUM/HR | CALC | 83.12 |
| Stab Btms Rate MOLES | 686.20 | KMOL/HR | CALC | 686.23 |
| Stab Tray 1 Pres | 880.00 | KPA | CONST | 880.00 |
| Stab Tray 1 Temp | 45.00 | C | CONST | 45.00 |
| Stab Tray Btms Pres | 1017.00 | KPA | CALC | 1017.00 |
| Tray 1 to 2 delta Pres | 50.00 | KPA | CONST | 50.00 |
| Tray 2 to btms delta Pres | 87.00 | KPA | CONST | 87.00 |
| Condenser Duty | 4.02 | MMBTU/HR | CALC | 4.02 |
| Reboiler Duty | 20.62 | MMBTU/HR | CALC | 20.62 |
| Stab Tray 2 Temp | 81.95 | C | CALC | 81.95 |
| Stab Tray 2 Pres | 930.00 | KPA | CALC | 930.00 |
| Stab Bottoms Temp | 201.07 | C | CALC | 201.09 |
| Stab Bottoms Pres | 1017.00 | KPA | CALC | 1017.00 |
| Stab Btms RVP | 26.00 | KPA | CALC | 26.00 |

Imagen 39

7.6 AJUSTE DEL FLUJO MÁSCICO DE ALIMENTACIÓN

Una vez que las presiones han quedado definidas, en la sección "Feed" se ajusta el flujo de nafta de alimentación al reactor. El valor preestablecido en "Feed1" es de 75000 kg/h, y se debe de modificar a 146,872 kg/h en intervalos de 15,000 kg/h

| FEEDS | | | | |
|-----------------------------|----------|------------|-------|----------|
| Feeds | | Feed1 | | |
| Feed Basis | | Mass Basis | | |
| Feed Definition | | Mole % | | |
| Description | UoM | Value | Spec | Prior |
| FEED1.BLK.MASS | KG/HR | 146872 | CONST | 75000 |
| FEED1.BLK.VOLUME | CUM/HR | 198.1444 | CALC | 101.7509 |
| FEED1.BLK.STDVOL | CUM/HR | 198.1444 | CALC | 101.7509 |
| FDANV1.BLK.MOLES | KMOL/HR | 1326.557 | CALC | 737.7053 |
| FDANM1.BLK.MOLE_WT | UNITLESS | 110.7167 | CALC | 101.6666 |
| FDANV1.BLK.SPECIFIC_GRAVITY | * | 0.742761 | CALC | 0.738621 |
| FDANV1.BLK.API_GRAVITY | * | 59.00535 | CALC | 60.07328 |
| FDANW1.BLK.H2_WTPCT | * | 0 | CALC | 0 |
| FDANW1.BLK.P1_WTPCT | * | 0 | CALC | 0 |
| FDANW1.BLK.P2_WTPCT | * | 0 | CALC | 0 |
| FDANW1.BLK.P3_WTPCT | * | 0 | CALC | 0 |
| FDANW1.BLK.P4_WTPCT | * | 0 | CALC | 0 |

Imagen 40

7.7 AJUSTE DE LA TEMPERATURA. ESTABILIZADOR

Como siguiente punto se debe de ajustar la temperatura de alimentación al estabilizador, la temperatura del condensador, del flash, del tambor de recontacto y de los reactores.

7.7.1 TEMPERATURA DE SALIDA DEL PRECALENTADOR

En la sección del estabilizador, en la parte superior de la tabla "Stabilizer Specifications" se encuentra la casilla para especificar la temperatura de salida del precalentador que alimenta la torre de separación. El valor que trae predeterminado es 90°C, el valor de planta es 189°C y se llega a éste con variaciones de 15°C

90°C → 105°C → 120°C → 135°C → 150°C → 165°C → 180°C → 189°C

| 1 | Stabilizer Specifications | | | | |
|----|----------------------------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| 2 | | | | | |
| 3 | Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| 4 | Stab Preheater Outlet Temp | 90.00 | | CONST | 90.00 |
| 5 | Stab Preheater Outlet Pres | 3951.00 | KPA | CONST | 1100.00 |
| 6 | Stab Preheater delta Temp | 61.00 | DELTA-C | CALC | 61.01 |
| 7 | Stab Preheater delta Pres | -275.00 | KPA | CALC | -275.00 |
| 8 | Stab Preheater Outlet Vapor Frac | -0.27 | UNITLESS | CALC | -0.27 |
| 9 | Stab Preheater Duty | 8.08 | MMBTU/HR | CALC | 8.08 |
| 10 | Stab Reflux MASS | 8.07 | TONNE/HR | CALC | 8.07 |
| 11 | Stab Reflux VOLUME | 13.79 | CUM/HR | CALC | 13.79 |
| 12 | Stab Reflux STDVOL | 13.79 | CUM/HR | CALC | 13.79 |
| 13 | Stab Reflux MOLES | 133.48 | KMOL/HR | CALC | 133.46 |
| 14 | Stab Reflux Ratio MASS | 2.49 | UNITLESS | CALC | 2.49 |
| 15 | Stab Reflux Ratio VOLUME | 0.31 | UNITLESS | CALC | 0.30 |
| 16 | Stab Reflux Ratio STDVOL | 6.35 | UNITLESS | CONST | 3.00 |

Imagen 41

7.7.2 TEMPERATURA DEL CONDENSADOR

La temperatura del condensador se modifica en la casilla correspondiente a la temperatura de la primer etapa de la torre el valor de planta es 45°C y se debe llevar a 65°C mediante variaciones de 10°C

| | | | | | |
|---------------------------|---------|----------|-------|---------|--|
| Stab Btms Rate STDVOL | | | | | |
| Stab Btms Rate MOLES | 686.20 | KMOL/HR | CALC | 686.23 | |
| Stab Tray 1 Pres | 1580.00 | KPA | CONST | 880.00 | |
| Stab Tray 1 Temp | 45.00 | | CONST | 45.00 | |
| Stab Tray Btms Pres | 1017.00 | KPA | CALC | 1017.00 | |
| Tray 1 to 2 delta Pres | 50.00 | KPA | CONST | 50.00 | |
| Tray 2 to btms delta Pres | 87.00 | KPA | CONST | 87.00 | |
| Condenser Duty | 4.02 | MMBTU/HR | CALC | 4.02 | |
| Stab Btms Rate STDVOL | | | | | |

Imagen 42

7.8 AJUSTE DE A TEMPERATURA. SECCIÓN DE REACCIÓN

En la sección de reacción se establece la temperatura de operación del Flash, el tambor de recontacto y el reactor, en ese orden.

7.8.1 FLASH DEL REACTOR

Para el Flash del reactor se debe localizar la casilla "Product Separator Temperature", en la tabla "Product Separator Section". El valor preestablecido es de 28°C y se debe de llevar a 40°C, esto se lleva a cabo con variaciones de 5°C.

| Product Separator Section | | | | |
|----------------------------------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Product Separator Temperature | 28.00 | C | CONST | 28.00 |
| Product Separator Pressure | 253.00 | KPA | CONST | 349.98 |
| Heater Section | | | | |
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Charge Heater Fired Duty | 14278.26 | KW | CALC | 14278.43 |
| Rx 2 Interheater Fired Duty | 59.24 | MMBTU/HR | CALC | 59.24 |
| Rx 3 Interheater Fired Duty | 40.21 | MMBTU/HR | CALC | 40.21 |
| Rx 4 Interheater Fired Duty | 27.12 | MMBTU/HR | CALC | 27.12 |
| Total Fired Duty | 175.29 | MMBTU/HR | CALC | 175.29 |
| Charge Heater Absorbed Duty | 31.67 | MMBTU/HR | CALC | 31.67 |
| Rx 2 Interheater Absorbed Duty | 38.51 | MMBTU/HR | CALC | 38.51 |
| Rx 3 Interheater Absorbed Duty | 26.14 | MMBTU/HR | CALC | 26.14 |
| Rx 4 Interheater Absorbed Duty | 17.63 | MMBTU/HR | CALC | 17.63 |
| Total Absorbed Duty | 113.94 | MMBTU/HR | CALC | 113.94 |
| Charge Heater Tube Skin Temperature | 1159.99 | C | CALC | 1160.01 |
| Rx 2 Interheater Tube Skin Temperature | 1159.99 | C | CALC | 1160.01 |

Imagen 43

7.8.2 TAMBOR DE RECONTACTO

Para el tambor de recontacto, en la tabla "High Pressure Recontact Drum" se establece la temperatura de planta 40°C con variaciones de 10°C (La temperatura predeterminada es 11°C)

| High Pressure Recontact Drum (RCONHP) | | | | |
|---------------------------------------|----------|----------|-------|----------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| HP Recont Drum STRM_1_TEMP | 164.06 | C | CALC | 163.63 |
| HP Recont Drum STRM_1_PRES | 2100.00 | KPA | CALC | 2100.00 |
| HP Recont Drum STRM_1_DP | 0.00 | KPA | CONST | 0.00 |
| HP Recont Drum STRM_2_MOLES | 671.64 | KMOL/HR | CALC | 671.66 |
| HP Recont Drum STRM_2_TEMP | 28.00 | C | CALC | 28.00 |
| HP Recont Drum STRM_2_PRES | 350.00 | KPA | CALC | 349.98 |
| HP Recont Drum STRM_2_DP | -1750.00 | KPA | CALC | -1750.02 |
| HP Recont Drum HEAT_LOSS | 9.87 | MMBTU/HR | CALC | 9.85 |
| HP Recont Drum PROD_TEMP | 11.00 | C | CONST | 10.98 |
| HP Recont Drum PROD_VAPOR_FRACTION | 0.64 | UNITLESS | CALC | 0.64 |
| HP Recont Drum PROD_MURPHREE_EFF | 1.00 | UNITLESS | CONST | 1.00 |
| HP Recont Drum VAP_MASS | 4.76 | TONNE/HR | CALC | 4.76 |
| HP Recont Drum VAP_MOLES | 1341.13 | KMOL/HR | CALC | 1341.15 |

Imagen 44

7.8.3 REACTOR

En la tabla "Reactor Temperature Specification Section" se establece la temperatura de entrada a cada reactor. Esto se hace estableciendo primeramente una temperatura de referencia y posteriormente un delta T para cada reactor. En este caso la temperatura de entrada para los 4 reactores es la misma, por lo que basta con establecer la temperatura de referencia. El valor de planta es 549°C y se llega a éste con variaciones de 5°C.

En este punto cabe hacer énfasis en que conforme se incremente la temperatura, el grado de deposición de coque va a incrementarse. Es de vital importancia estar revisando esta variable en la sección de catalizador, pues una vez que alcance el 20% la simulación comenzará a tener problemas de convergencia.

| Reactor Temperature Specification Section | | | | |
|-------------------------------------------|--------|---------|-------|--------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| WAIT | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| WABT | 477.91 | C | CALC | 477.90 |
| Reactor Inlet Reference Temperature | 510.00 | C | CONST | 510.00 |
| Rx 1 Temperature Bias | 0.00 | DELTA-C | CONST | 0.00 |
| Rx 1 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| Rx 2 Temperature Bias | 0.00 | DELTA-C | CONST | 0.00 |
| Rx 2 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| Rx 3 Temperature Bias | 0.00 | DELTA-C | CONST | 0.00 |
| Rx 3 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| Rx 4 Temperature Bias | 0.00 | DELTA-C | CONST | 0.00 |
| Rx 4 Inlet Temperature | 510.00 | C | CALC | 510.00 |
| C5+ RON | 99.96 | * | CALC | 100.00 |
| C6+ RON | 101.96 | * | CALC | 102.00 |
| Sum of Aromatics, Wt. % of Feed | 64.02 | * | CALC | 64.02 |
| Reformate RON | 100.66 | * | CALC | 100.70 |

Imagen 45

7.9 REDUCCIÓN DE LA DEPOSICIÓN DE COQUE.

Para poder colocar la simulación con la temperatura de reacción adecuada, es necesario ajustar la deposición de coque en cierto momento. En la simulación realizada para el presente trabajo, se ha alcanzado una deposición de coque del 20% a una temperatura de reacción de 520°C, por lo que es necesario ajustar las constantes de deposición de coque del simulador.

| Reactor Section Block | | | | |
|---------------------------|---------|-------|-------|---------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Catalyst Circulation Rate | 1300.00 | KG/HR | CONST | 1000.00 |
| Rx 1 Coke on Cat Wt% | 0.98 | * | CALC | 0.20 |
| Rx 2 Coke on Cat Wt% | 2.97 | * | CALC | 0.60 |
| Rx 3 Coke on Cat Wt% | 6.15 | * | CALC | 1.40 |
| Rx 4 Coke on Cat Wt% | 20.64 | | CALC | 4.58 |

Imagen 46

En la sección de reacción se encuentran las constantes del simulador: actividad del catalizador, deposición de coque, constantes cinéticas, eficiencias de conversión; etc.

En la casilla C402 se encuentra el primer factor de deposición de coque correspondiente a las reacciones de compuestos con 6 carbonos, la última de las constantes corresponde a compuestos con 14 carbonos.

| | | | | |
|---------------------------|--------|---|-------|--------|
| RXR1.RX1.BLK.PP_DEH_FACT | -1.00 | * | CONST | -1.00 |
| RXR1.RX1.BLK.PP_HYD_FACT | -4.00 | * | CONST | -4.00 |
| RXR1.RX1.BLK.PP_HG_FACT | -2.00 | * | CONST | -2.00 |
| RXR1.RX1.BLK.PP_HC_FACT | -1.00 | * | CONST | -1.00 |
| RXR1.RX1.BLK.PP_POLY_FACT | -1.00 | * | CONST | -1.00 |
| RXR1.RX1.BLK.PP_COKE_FACT | -1.00 | * | CONST | -1.00 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC6MULT | 0.11 | * | CONST | 0.11 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC7MULT | 0.34 | * | CONST | 0.34 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC8MULT | 1.00 | * | CONST | 1.00 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC9MULT | 2.99 | * | CONST | 2.99 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC10MULT | 8.92 | * | CONST | 8.92 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC11MULT | 26.65 | * | CONST | 26.65 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC12MULT | 79.62 | * | CONST | 79.62 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC13MULT | 237.00 | * | CONST | 237.00 |
| RXR1.RX1.BLK.COKC14MULT | 707.00 | * | CONST | 707.00 |
| RXR1.RX1.BLK.COKBASEMULT | 1.00 | * | CONST | 1.00 |

Imagen 47

Se disminuye el valor de cada constante en un 80%

Tabla 8. Modificación de las constantes de deposición de coque.

| Constante | Predeterminado | Nuevo Valor |
|-----------|----------------|-------------|
| C6 | 0.11 | 0.02 |
| C7 | 0.34 | 0.07 |
| C8 | 1.00 | 0.20 |
| C9 | 2.99 | 0.60 |
| C10 | 8.92 | 1.78 |
| C11 | 26.65 | 5.33 |
| C12 | 79.62 | 15.92 |
| C13 | 237.00 | 47.40 |
| C14 | 707.00 | 141.40 |

Una vez convergido el sistema con los nuevos valores de constantes se observa que la deposición de coque ha disminuido significativamente hasta 9%

| Reactor Section Block | | | | |
|---------------------------|---------|-------|-------|---------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Catalyst Circulation Rate | 1300.00 | KG/HR | CONST | 1000.00 |
| Rx 1 Coke on Cat Wt% | 0.43* | | CALC | 0.20 |
| Rx 2 Coke on Cat Wt% | 1.29* | | CALC | 0.60 |
| Rx 3 Coke on Cat Wt% | 2.67* | | CALC | 1.40 |
| Rx 4 Coke on Cat Wt% | 8.97* | | CALC | 4.58 |

Imagen 48

El siguiente paso a seguir es colocar los compuestos con 11 carbonos que se quitaron para facilitar la convergencia del sistema en la alimentación y posteriormente ajustar la cantidad de coque depositado a 7% (Límite máximo permisible a nivel industrial)

| | | | | |
|-----|------------------------|---|----------|-------|
| 108 | FDANM1.BLK.A10_MOLPCT | * | 1.651226 | CONST |
| 109 | FDANM1.BLK.6N10_MOLPCT | * | 0.50381 | CONST |
| 110 | FDANM1.BLK.IP11_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 111 | FDANM1.BLK.NP11_MOLPCT | * | 1.325691 | CONST |
| 112 | FDANM1.BLK.5N11_MOLPCT | * | 0.271398 | CONST |
| 113 | FDANM1.BLK.A11_MOLPCT | * | 0.518386 | CONST |
| 114 | FDANM1.BLK.6N11_MOLPCT | * | 0.271398 | CONST |
| 115 | FDANM1.BLK.P12_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 116 | FDANM1.BLK.N12_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 117 | FDANM1.BLK.A12_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 118 | FDANM1.BLK.P13_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 119 | FDANM1.BLK.N13_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 120 | FDANM1.BLK.A13_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 121 | FDANM1.BLK.P14_MOLPCT | * | 0 | CONST |
| 122 | FDANM1.BLK.N14_MOLPCT | * | 0 | CONST |

Imagen 49

Tabla 8. Ajuste final de las constantes de deposición de coque

| Constante | Anterior | Final |
|-----------|----------|--------|
| C6 | 0.02 | 0.02 |
| C7 | 0.07 | 0.06 |
| C8 | 0.20 | 0.18 |
| C9 | 0.60 | 0.54 |
| C10 | 1.78 | 1.62 |
| C11 | 5.33 | 4.85 |
| C12 | 15.92 | 14.48 |
| C13 | 47.40 | 43.09 |
| C14 | 141.40 | 128.55 |

Este ajuste logra que el coque depositado cumpla con las condiciones industriales.

| Reactor Section Block | | | | |
|---------------------------|---------|-------|-------|---------|
| Process Variable | Value | UoM | Spec | Prior |
| Catalyst Circulation Rate | 1300.00 | KG/HR | CONST | 1000.00 |
| Rx 1 Coke on Cat Wt% | 0.00* | | CALC | 0.20 |
| Rx 2 Coke on Cat Wt% | 0.64* | | CALC | 0.60 |
| Rx 3 Coke on Cat Wt% | 2.32* | | CALC | 1.40 |
| Rx 4 Coke on Cat Wt% | 7.08* | | CALC | 4.58 |

Imagen 50

8.0 COMPARACIÓN DE RESULTADOS

Como siguiente etapa se debe de comparar los resultados arrojados por la simulación con los datos de planta, y posteriormente llevar a cabo las correcciones pertinentes. Las tablas 10, 11 y 12 muestran las comparaciones para la corriente de reformado, la de vapor del estabilizador y el vapor en el tanque Flash, respectivamente. La tabla 9 corresponde a los datos de alimentación.

En esta etapa se hará una comparación directa entre los flujos y composiciones de cada una de las corrientes de interés, esto con la finalidad de saber qué modificaciones adicionales requieren ser llevadas a cabo para poder aproximar mejor los resultados obtenidos.

Resumen de Condiciones de operación

| | | | |
|------------------------|--------------|-----------------------------|-----------|
| Alimentación → | 146,872 kg/h | Tambor de Recon. (P) → | 4,023 kPa |
| Catalizador → | 1,300 kg/h | Precalentador (T) → | 189°C |
| Temp. Del Reactor → | 549°C | Precalentador (P) → | 3951 kPa |
| H ₂ /HC → | 2.14 | Reflujo del Estabilizador → | 6.35 |
| Temp. Del Flash → | 40°C | Pres. del condensador → | 1500 kPa |
| Pres. Del Flash → | 253 kPa | Temp. Del condensador → | 65°C |
| Tambor de Recon. (T) → | 40°C | | |

Tabla 9. Resultados preliminares de la alimentación en la simulación.

| %mole Compuestos | FEED | | %mole Compuestos | FEED | |
|---------------------|--------|------------|---------------------|--------|------------|
| | Planta | Simulación | | Planta | Simulación |
| H2 | 0.0000 | 0.0000 | 5N8 | 2.5765 | 2.5765 |
| P1 | 0.0000 | 0.0000 | ETHYLBEN | 0.8089 | 0.8087 |
| P2 | 0.0000 | 0.0000 | O-XYLENE | 0.9635 | 0.9632 |
| O2 | 0.0000 | 0.0000 | M-XYLENE | 2.2239 | 2.2234 |
| P3 | 0.0000 | 0.0000 | P-XYLENE | 0.7546 | 0.7544 |
| O3 | 0.0000 | 0.0000 | 6N8 | 2.6062 | 2.6062 |
| IP4 | 0.0000 | 0.0000 | IP9 | 6.1836 | 6.1836 |
| NP4 | 0.0000 | 0.0000 | NP9 | 5.5686 | 5.5686 |
| O4 | 0.0000 | 0.0000 | 5N9 | 2.1602 | 2.1602 |
| IP5 | 0.0641 | 0.0643 | A9 | 3.8005 | 3.8005 |
| NP5 | 0.2495 | 0.2496 | 6N9 | 2.0523 | 2.0523 |
| O5 | 0.0000 | 0.0000 | IP10 | 3.3169 | 3.3170 |
| 5N5 | 0.0567 | 0.0567 | NP10 | 3.3169 | 3.3170 |
| MBP6 | 0.5330 | 0.5330 | 5N10 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP6 | 5.3812 | 5.3813 | A10 | 1.6512 | 1.6512 |
| NP6 | 7.5825 | 7.5826 | 6N10 | 2.5098 | 2.5098 |
| O6 | 0.0000 | 0.0000 | IP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N6 | 1.7979 | 1.7979 | NP11 | 1.3257 | 1.3257 |
| A6 | 1.3186 | 1.3186 | 5N11 | 0.2714 | 0.2714 |
| 6N6 | 1.1732 | 1.1733 | A11 | 0.5184 | 0.5184 |
| MBP7 | 1.2734 | 1.2734 | 6N11 | 0.2714 | 0.2714 |
| SBP7 | 4.7512 | 4.7512 | P12 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP7 | 9.2516 | 9.2516 | N12 | 0.0000 | 0.0000 |
| O7 | 0.0000 | 0.0000 | A12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N7 | 1.6132 | 1.6132 | P13 | 0.0000 | 0.0000 |
| A7 | 4.2428 | 4.2429 | N13 | 0.0000 | -0.0000 |
| 6N7 | 3.4519 | 3.4520 | A13 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP8 | 4.0880 | 4.0881 | P14 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP8 | 1.6352 | 1.6352 | N14 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP8 | 8.6554 | 8.6555 | A14 | 0.0000 | 0.0000 |
| O8 | 0.0000 | 0.0000 | | | |

Tabla 10. Resultados preliminares de la corriente de reformado

| %mole Compuestos | REFORMADO | | %mole Compuestos | REFORMADO | |
|---------------------|-----------|------------|---------------------|----------------|----------------|
| | Planta | Simulación | | Planta | Simulación |
| H2 | 0.0000 | 0.0000 | 5N8 | 0.0964 | 0.0164 |
| P1 | 0.0000 | 0.0000 | ETHYLBEN | 3.8774 | 3.9069 |
| P2 | 0.0000 | 0.0000 | O-XYLENE | 4.0859 | 5.2347 |
| O2 | 0.0000 | 0.0000 | M-XYLENE | 8.6671 | 8.5072 |
| P3 | 0.0419 | 0.0000 | P-XYLENE | 5.3750 | 2.9361 |
| O3 | 0.0000 | 0.0000 | 6N8 | 0.0253 | 0.0044 |
| IP4 | 0.2204 | 0.0034 | IP9 | 0.0395 | 0.0498 |
| NP4 | 0.7369 | 0.0274 | NP9 | 0.0411 | 0.0031 |
| O4 | 0.0000 | 0.0001 | 5N9 | 0.0111 | 0.0116 |
| IP5 | 2.3530 | 2.7062 | A9 | 16.9654 | 19.5796 |
| NP5 | 1.5647 | 1.2686 | 6N9 | 0.0039 | 0.0007 |
| O5 | 0.2235 | 0.4692 | IP10 | 0.0047 | 0.0047 |
| 5N5 | 0.0000 | 1.1712 | NP10 | 0.0047 | 0.0004 |
| MBP6 | 1.5963 | 1.7142 | 5N10 | 0.0000 | 0.0014 |
| SBP6 | 7.3481 | 5.5016 | A10 | 8.7216 | 10.5528 |
| NP6 | 3.9722 | 2.1638 | 6N10 | 0.0032 | 0.0001 |
| O6 | 0.9415 | 0.4856 | IP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N6 | 0.0948 | 0.0644 | NP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| A6 | 5.6301 | 7.3167 | 5N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N6 | 0.0087 | 0.0288 | A11 | 1.9194 | 2.5955 |
| MBP7 | 1.0363 | 1.4054 | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP7 | 2.0900 | 4.1088 | P12 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP7 | 1.1445 | 1.2086 | N12 | 0.0000 | 0.0000 |
| O7 | 0.3152 | 0.2030 | A12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N7 | 0.0995 | 0.1638 | P13 | 0.0000 | 0.0000 |
| A7 | 19.3428 | 16.1831 | N13 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N7 | 0.0332 | 0.0128 | A13 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP8 | 0.7188 | 0.3622 | P14 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP8 | 0.2875 | 0.0463 | N14 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP8 | 0.2599 | 0.0078 | A14 | 0.0000 | 0.0000 |
| O8 | 0.0987 | 0.0000 | Octanaje | 102 | 107.35 |
| | | | Flujo kg/h | 129,958 | 119,067 |

Tabla 11. Resultados preliminares de la corriente de vapor del estabilizador

| %mole Compuestos | VAP STAB. | | %mole Compuestos | VAP STAB. | |
|---------------------|-----------|------------|---------------------|------------|--------------|
| | Planta | Simulación | | Planta | Simulación |
| H2 | 0.3035 | 14.7962 | 5N8 | 0.0000 | 0.0000 |
| P1 | 0.4594 | 2.6196 | ETHYLBEN | 0.0000 | 0.0000 |
| P2 | 10.5086 | 17.6522 | O-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 |
| O2 | 0.0000 | 0.0197 | M-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 |
| P3 | 39.8441 | 29.8674 | P-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 |
| O3 | 0.0000 | 0.1495 | 6N8 | 0.0000 | 0.0000 |
| IP4 | 19.4258 | 18.8359 | IP9 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP4 | 28.4660 | 13.5214 | NP9 | 0.0000 | 0.0000 |
| O4 | 0.0000 | 0.2132 | 5N9 | 0.0000 | 0.0000 |
| IP5 | 0.8532 | 1.8337 | A9 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP5 | 0.0984 | 0.2119 | 6N9 | 0.0000 | 0.0000 |
| O5 | 0.0410 | 0.2230 | IP10 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N5 | 0.0000 | 0.0252 | NP10 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP6 | 0.0000 | 0.0064 | 5N10 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP6 | 0.0000 | 0.0171 | A10 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP6 | 0.0000 | 0.0020 | 6N10 | 0.0000 | 0.0000 |
| O6 | 0.0000 | 0.0010 | IP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N6 | 0.0000 | 0.0000 | NP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| A6 | 0.0000 | 0.0041 | 5N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N6 | 0.0000 | 0.0000 | A11 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP7 | 0.0000 | 0.0001 | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP7 | 0.0000 | 0.0003 | P12 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP7 | 0.0000 | 0.0000 | N12 | 0.0000 | 0.0000 |
| O7 | 0.0000 | 0.0000 | A12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N7 | 0.0000 | 0.0000 | P13 | 0.0000 | 0.0000 |
| A7 | 0.0000 | 0.0002 | N13 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N7 | 0.0000 | 0.0000 | A13 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP8 | 0.0000 | 0.0000 | P14 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP8 | 0.0000 | 0.0000 | N14 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP8 | 0.0000 | 0.0000 | A14 | 0.0000 | 0.0000 |
| O8 | 0.0000 | 0.0000 | Flujo kg/h | 526 | 1,730 |

Tabla 12. Resultados preliminares de la corriente de vapor del tanque flash

| %mole Compuestos | HIDRÓGENO | | %mole Compuestos | HIDRÓGENO | |
|---------------------|-----------|------------|---------------------|---------------|---------------|
| | Planta | Simulación | | Planta | Simulación |
| H2 | 92.2948 | 89.2825 | 5N8 | 0.0000 | 0.0000 |
| P1 | 3.3038 | 2.9466 | ETHYLBEN | 0.0000 | 0.0040 |
| P2 | 2.8633 | 4.0525 | O-XYLENE | 0.0000 | 0.0039 |
| O2 | 0.0000 | 0.0064 | M-XYLENE | 0.0000 | 0.0075 |
| P3 | 1.2004 | 2.2121 | P-XYLENE | 0.0000 | 0.0026 |
| O3 | 0.0000 | 0.0121 | 6N8 | 0.0000 | 0.0000 |
| IP4 | 0.1395 | 0.6724 | IP9 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP4 | 0.1340 | 0.3342 | NP9 | 0.0000 | 0.0000 |
| O4 | 0.0000 | 0.0058 | 5N9 | 0.0000 | 0.0000 |
| IP5 | 0.0220 | 0.1162 | A9 | 0.0000 | 0.0104 |
| NP5 | 0.0092 | 0.0343 | 6N9 | 0.0000 | 0.0000 |
| O5 | 0.0000 | 0.0168 | IP10 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N5 | 0.0000 | 0.0185 | NP10 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP6 | 0.0037 | 0.0240 | 5N10 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP6 | 0.0147 | 0.0735 | A10 | 0.0000 | 0.0016 |
| NP6 | 0.0055 | 0.0216 | 6N10 | 0.0000 | 0.0000 |
| O6 | 0.0000 | 0.0057 | IP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N6 | 0.0000 | 0.0006 | NP11 | 0.0000 | 0.0000 |
| A6 | 0.0055 | 0.0516 | 5N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N6 | 0.0000 | 0.0002 | A11 | 0.0000 | 0.0001 |
| MBP7 | 0.0000 | 0.0082 | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP7 | 0.0000 | 0.0243 | P12 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP7 | 0.0000 | 0.0051 | N12 | 0.0000 | 0.0000 |
| O7 | 0.0000 | 0.0010 | A12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 5N7 | 0.0000 | 0.0008 | P13 | 0.0000 | 0.0000 |
| A7 | 0.0037 | 0.0418 | N13 | 0.0000 | 0.0000 |
| 6N7 | 0.0000 | 0.0000 | A13 | 0.0000 | 0.0000 |
| MBP8 | 0.0000 | 0.0009 | P14 | 0.0000 | 0.0000 |
| SBP8 | 0.0000 | 0.0001 | N14 | 0.0000 | 0.0000 |
| NP8 | 0.0000 | 0.0000 | A14 | 0.0000 | 0.0000 |
| O8 | 0.0000 | 0.0000 | Flujo kg/h | 16,926 | 15,210 |

En la tabla 10 se puede apreciar que la simulación aún dista de las condiciones de operación de planta. Los valores de salida de los compuestos no se aproximan del todo. Aunado a ello se puede apreciar que la simulación llega a un flujo másico de reformado 10,000 kg/h menor al dato de planta. En lo que a octanaje respecta el valor obtenido por el simulador es de 107.35, el de planta es 102.

En las tablas 11 y 12 se pueden apreciar las desviaciones en el %mol y flujo obtenido para el gas del estabilizador y para el hidrógeno del tanque flash, aunque para este último son desviaciones menores.

9.0 AJUSTE DE LA SIMULACIÓN. MODIFICACIONES A LAS CONSTANTES DE ACTIVIDAD DE LAS REACCIONES

Debido al ajuste obligado que se le debe de realizar al reformado para lograr una aproximación a los datos de planta, será necesario modificar las constantes de actividad de las reacciones, dichas constantes representan la predominancia de un tipo de reacción dada sobre el resto de las reacciones del sistema, modificando esta relación se podrá llevar a cabo el ajuste.

Las constantes se pueden dividir en 3 grupos según la siguiente jerarquía:

Constantes de actividad Globales → Constantes de actividad por número de carbonos → Constantes particulares.

Constantes de actividad Globales. Estas constantes comprenden las reacciones sin ahondar en el número de carbonos de los compuestos involucrados. Ej. Isomerización. Todas las reacciones de isomerización serán modificadas por la constante global.

Constantes de actividad por número de carbonos. Estas constantes corresponden a las reacciones según el número de carbonos. Ej. Craqueo de C6. Todas las reacciones de craqueo para compuestos de 6 carbonos serán modificadas.

Constantes particulares. Estas constantes permiten modificar la actividad de un tipo de reacción en particular. Ej. Formación de anillo aromático a partir de los isoheptanos. Sólo dicha reacción en particular se verá afectada.

Como se muestra en la tabla 13, las constantes hacen referencia al tipo de reacción y al número de carbonos del compuesto involucrado.

Las constantes se encuentran en la hoja de cálculo de la sección de reacción y van desde la celda C455 hasta la C515

Tabla 13. Nombres y valores predeterminados de las constantes de actividad por número de carbonos

| Nombre | Valor | Nombre | Valor | Nombre | Valor |
|---------------|--------------|---------------|--------------|---------------|--------------|
| MBP6ISOM | 1.00 | N6RINGEX | 3.82 | C5_CRACKING | 0.28 |
| SBP6ISOM | 1.00 | N7RINGEX | 1.40 | C6_CRACKING | 1.29 |
| MBP7ISOM | 1.00 | N8RINGEX | 2.46 | C7_CRACKING | 1.15 |
| SBP7ISOM | 1.00 | N9RINGEX | 1.00 | C8_CRACKING | 2.02 |
| MBP8ISOM | 1.00 | N10RINGEX | 1.00 | C9_CRACKING | 1.00 |
| SBP8ISOM | 1.00 | N11RINGEX | 1.00 | C10_CRACKING | 1.00 |
| IP9ISOM | 1.00 | 6NDEHYDROG | 1.00 | C11_CRACKING | 0.10 |
| IP10ISOM | 1.00 | 7NDEHYDROG | 0.85 | C12_CRACKING | 1.00 |
| IP11ISOM | 1.00 | 8NDEHYDROG | 0.41 | C13_CRACKING | 1.00 |
| 5RINGC | 1.00 | 9NDEHYDROG | 1.00 | C14_CRACKING | 1.00 |
| 6RINGC | 9.56 | 10NDEHYDROG | 1.00 | A7_DEAKYL | 1.00 |
| 6N6_TO_P6 | 1.00 | 11NDEHYDROG | 1.00 | A8_DEAKYL | 1.00 |
| 7RINGC | 0.26 | 12NDEHYDROG | 1.00 | A9_DEAKYL | 1.00 |
| 8RINGG | 0.41 | 13NDEHYDROG | 1.00 | A10_DEAKYL | 1.00 |
| 9RINGC | 0.82 | 14NDEHYDROG | 1.00 | A11_DEAKYL | 1.00 |
| 10RINGC | 0.82 | C6_HYDGENOL | 1.00 | A12_DEAKYL | 1.00 |
| 11RINGC | 1.00 | C7_HYDGENOL | 1.00 | A13_DEAKYL | 1.00 |
| 12RINGC | 1.00 | C8_HYDGENOL | 1.00 | A14_DEAKYL | 1.00 |
| 13RINGC | 1.00 | C9_HYDGENOL | 1.00 | A7POLY | 1.00 |
| 14RINGC | 1.00 | C10_HYDGENOL | 1.00 | A8POLY | 1.00 |
| | | C11_HYDGENOL | 1.00 | | |

Las reacciones con la terminación ISOM corresponden a generación de isómeros según la familia señalada, por ejemplo: SBP8ISOM se refiere a la familia SBP8, es decir, formación de parafinas de 8 carbonos con una sola ramificación.

Resto de los sufijos:

RINGC → formación de ciclos

RINGEX → formación de aromáticos

DEHYDROG → deshidrogenación

HYDGENOL → hidrogenólisis

CRACKING → craqueo

DEAKYL → deaquilación

POLY → polimerización

Teniendo en cuenta lo que representa cada nombre para las constantes, el siguiente paso es ver en qué compuestos del reformado está habiendo una desviación importante para aumentar o disminuir, según sea el caso, la respectiva constante de actividad de la reacción.

Tabla 14. Compuestos del reformado que presentan las mayores desviaciones

| Compuesto | Planta | Simulación | Constante |
|------------------|---------------|-------------------|------------------|
| P3 | 0.0419 | 0.0000 | C5_CRACKING |
| IP4 | 0.2204 | 0.0034 | C5_CRACKING |
| NP4 | 0.7369 | 0.0274 | C5_CRACKING |
| IP5 | 2.3530 | 2.7062 | C6_CRACKING |
| NP5 | 1.5647 | 1.2686 | C6_CRACKING |
| 5N5 | 0.0000 | 1.1712 | 5RINGC |
| MBP6 | 1.5963 | 1.7142 | MBP6ISOM |
| SBP6 | 7.3481 | 5.5016 | SBP6ISOM |
| NP6 | 3.9722 | 2.1638 | 6N6_TO_P6 |
| O6 | 0.9415 | 0.4856 | 6NDEHYDROG |
| A6 | 5.6301 | 7.3167 | 6RINGC |
| MBP7 | 1.0363 | 1.4054 | MBP7ISOM |
| SBP7 | 2.0900 | 4.1088 | SBP7ISOM |
| A7 | 19.3428 | 16.1831 | 7RINGC |
| MBP8 | 0.7188 | 0.3622 | MBP8ISOM |
| SBP8 | 0.2875 | 0.0463 | SBP8ISOM |
| NP8 | 0.2599 | 0.0078 | C9_CRACKING |
| P-XYLENE | 5.3750 | 2.9361 | 8RINGC |
| A9 | 16.9654 | 19.5796 | 9RINGC |
| A10 | 8.7216 | 10.5528 | 10RINGC |
| A11 | 1.9194 | 2.5955 | 11RINGC |

Cabe añadir que, no obstante lo mostrado en la tabla 14, la interdependencia de las constantes no es tan simple para limitarse a solo modificar éstas, en cambio sí resulta una guía para realizar las primeras modificaciones y finalmente concluir el ajuste modificando aquellas otras que así lo requirieren.

En la tabla 15 se observan los nuevos valores de las constantes al realizar el ajuste pertinente.

Tabla 15. Nuevos valores para las constantes de actividad de las reacciones por número de carbonos

| Nombre | Valor | Nombre | Valor | Nombre | Valor |
|---------------|--------------|---------------|--------------|---------------|--------------|
| MBP6ISOM | 0.5800 | N7RINGEX | 4.2000 | C6_CRACKING | 0.2940 |
| SBP6ISOM | 0.6300 | N8RINGEX | 2.1000 | C7_CRACKING | 0.8050 |
| MBP7ISOM | 1.5000 | N9RINGEX | 0.6000 | C8_CRACKING | 0.9200 |
| SBP7ISOM | 0.5500 | N10RINGEX | 0.5150 | C9_CRACKING | 2.0000 |
| MBP8ISOM | 0.8000 | N11RINGEX | 0.5150 | C10_CRACKING | 1.3600 |
| SBP8ISOM | 0.1000 | 6NDEHYDROG | 1.0000 | C11_CRACKING | 1.3000 |
| IP9ISOM | 2.0000 | 7NDEHYDROG | 1.0000 | C12_CRACKING | 0.1500 |
| IP10ISOM | 0.5150 | 8NDEHYDROG | 3.0000 | C13_CRACKING | 0.1500 |
| IP11ISOM | 0.5150 | 9NDEHYDROG | 1.0000 | C14_CRACKING | 0.3000 |
| 5RINGC | 0.0000 | 10NDEHYDROG | 1.0000 | A7_DEAKYL | 1.0000 |
| 6RINGC | 3.4400 | 11NDEHYDROG | 1.0000 | A8_DEAKYL | 3.0000 |
| 6N6_TO_P6 | 0.5150 | 12NDEHYDROG | 1.0000 | A9_DEAKYL | 1.0000 |
| 7RINGC | 0.4700 | 13NDEHYDROG | 1.0000 | A10_DEAKYL | 1.0000 |
| 8RINGG | 0.3000 | 14NDEHYDROG | 1.0000 | A11_DEAKYL | 1.0000 |
| 9RINGC | 0.8850 | C6_HYDGENOL | 1.0000 | A12_DEAKYL | 1.0000 |
| 10RINGC | 0.4460 | C7_HYDGENOL | 1.0000 | A13_DEAKYL | 1.0000 |
| 11RINGC | 0.4300 | C8_HYDGENOL | 3.0000 | A14_DEAKYL | 1.0000 |
| 12RINGC | 0.5150 | C9_HYDGENOL | 1.0000 | A7POLY | 1.0000 |
| 13RINGC | 0.5150 | C10_HYDGENOL | 1.0000 | PNATOCOKE | 1.0000 |
| 14RINGC | 0.5150 | C11_HYDGENOL | 1.0000 | | |
| N6RINGEX | 2.5700 | C5_CRACKING | 0.5000 | | |

Adicionalmente a los cambios realizados a las constantes de reacción se modificaron algunas constantes de actividad particular.

Tabla 16. Valores originales y modificados de las constantes de actividad particulares

| CONSTANTE | Original | Modificado | CONSTANTE | Original | Modificado |
|------------|----------|------------|--------------|----------|------------|
| MBP6ISOM | 1.0000 | 1.0000 | IP111RINGC | 0.7000 | 0.7000 |
| SBP6ISOM | 1.0000 | 1.0000 | IP112RINGC | 0.7000 | 0.7000 |
| MBP7ISOM | 1.0000 | 0.9900 | NP111RINGC | 2.8000 | 2.8000 |
| SBP7ISOM | 1.0000 | 0.3000 | NP112RINGC | 1.9600 | 1.9600 |
| MBP8ISOM | 0.0100 | 0.8000 | P12RINGC | 3.8000 | 3.8000 |
| SBP8ISOM | 1.0000 | 0.8000 | P13RINGC | 5.3000 | 5.3000 |
| IP9ISOM | 1.9000 | 1.9000 | P14RINGC | 7.0000 | 7.0000 |
| IP10ISOM | 3.4000 | 3.4000 | N6RINGEX | 0.7000 | 0.7000 |
| IP11ISOM | 6.4000 | 6.4000 | N7RINGEX | 0.8000 | 0.8000 |
| NP5RINGC | 0.0800 | 0.0800 | N8RINGEX | 1.0000 | 1.0000 |
| NP6RINGC | 0.0121 | 0.0121 | N9RINGEX | 1.1500 | 1.1500 |
| NP62RINGC | 3.0000 | 3.0000 | N10RINGEX | 1.3500 | 1.3500 |
| SBP7RINGC | 0.1400 | 0.2200 | N11RINGEX | 1.6000 | 1.6000 |
| NP71RINGC | 0.4000 | 0.3800 | 6NDEHYDROG | 0.1800 | 0.1800 |
| NP72RINGC | 0.1200 | 0.1200 | 7NDEHYDROG | 0.8000 | 0.8000 |
| MBP8RINGC | 0.2500 | 0.2500 | 8NDEHYDROG | 1.0000 | 2.0000 |
| SBP81RINGC | 1.0000 | 1.0000 | 9NDEHYDROG | 1.4000 | 1.4000 |
| SBP82RINGC | 0.3000 | 0.3000 | 10NDEHYDROG | 2.2000 | 2.2000 |
| NP81RINGC | 1.0000 | 1.0000 | 11NDEHYDROG | 3.1000 | 3.1000 |
| NP82RINGC | 0.7000 | 0.7000 | 12NDEHYDROG | 4.0000 | 4.0000 |
| IP91RINGC | 0.3250 | 0.3250 | 13NDEHYDROG | 6.0000 | 6.0000 |
| IP92RINGC | 0.3250 | 0.3250 | 14NDEHYDROG | 10.0000 | 10.0000 |
| NP91RINGC | 1.3000 | 1.3000 | MBP6HYDGENOL | 0.0000 | 0.0000 |
| NP92RINGC | 0.9100 | 0.9100 | SBP6HYDGENOL | 0.3500 | 0.3500 |
| IP101RINGC | 0.4250 | 0.4250 | NP6HYDGENOL | 0.0000 | 0.0000 |
| IP102RINGC | 0.4250 | 0.4250 | 5N6HYDGENOL | 0.1000 | 0.1000 |
| NP101RINGC | 1.7000 | 1.7000 | MBP7HYDGENOL | 0.0001 | 0.0010 |
| NP102RINGC | 1.1900 | 1.1900 | SBP7HYDGENOL | 0.5500 | 0.7000 |

Tabla 16. Valores originales y modificados de las constantes de actividad particulares

| CONSTANTE | Original | Modificado | CONSTANTE | Original | Modificado |
|--------------|----------|------------|-------------|----------|------------|
| NP7HYDGENOL | 0.0000 | 1.0000 | SBP8HYDROC | 0.4500 | 0.4500 |
| 5N7HYDROGDE | 0.7000 | 0.7000 | NP8HYDROC | 1.0000 | 0.5000 |
| 6N7HYDROGDE | 0.2700 | 0.2700 | IP9HYDROC | 0.9000 | 0.9000 |
| MBP8HYDGENOL | 0.0001 | 0.0100 | NP9HYDROC | 1.5000 | 1.5000 |
| SBP8HYDGENOL | 1.0000 | 1.0000 | IP10HYDROC | 1.2000 | 1.2000 |
| NP8HYDGENOL | 0.0000 | 0.0100 | NP10HYDROC | 2.0000 | 2.0000 |
| 5N8HYDROGDE | 1.6000 | 1.6000 | IP11HYDROC | 2.7000 | 2.7000 |
| 6N8HYDROGDE | 0.6000 | 0.6000 | NP11HYDROC | 4.5000 | 4.5000 |
| IP9HYDGENOL | 1.5000 | 1.5000 | P12HYDROC | 7.5000 | 7.5000 |
| NP9HYDGENOL | 0.0000 | 0.0000 | P13HYDROC | 13.0000 | 13.0000 |
| 5N9HYDROGDE | 3.5000 | 3.5000 | P14HYDROC | 20.0000 | 20.0000 |
| 6N9HYDROGDE | 1.3000 | 1.3000 | A7HYDROCDE | 0.6500 | 0.6500 |
| IP10HYDGENOL | 2.0000 | 2.0000 | A8HYDROCDE | 1.0000 | 1.0000 |
| NP10HYDGENOL | 0.0000 | 0.0000 | A9HYDROCDE | 1.7000 | 1.7000 |
| 5N10HYDROGDE | 7.0000 | 7.0000 | A10HYDROCDE | 2.7000 | 2.7000 |
| 6N10HYDROGDE | 2.8000 | 2.8000 | A11HYDROCDE | 4.2000 | 4.2000 |
| IP11HYDGENOL | 4.5000 | 4.5000 | A12HYDROCDE | 6.0000 | 6.0000 |
| NP11HYDGENOL | 0.0000 | 0.0000 | A13HYDROCDE | 10.0500 | 10.0500 |
| 5N11HYDROGDE | 16.0000 | 16.0000 | A14HYDROCDE | 19.0000 | 19.0000 |
| 6N11HYDROGDE | 5.5000 | 5.5000 | A71POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| P5HYDROC | 0.2100 | 0.1500 | A72POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| SBP6HYDROC | 0.1600 | 0.1700 | A73POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| MBP6HYDROC | 0.2600 | 0.4000 | A81POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| NP6HYDROC | 0.3500 | 0.9600 | A82POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| MBP7HYDROC | 0.4100 | 0.5800 | A83POLY | 1.0000 | 1.0000 |
| SBP7HYDROC | 0.2500 | 0.4100 | PTOCOKE | 1.0000 | 1.0000 |
| NP7HYDROC | 0.5500 | 0.5800 | NTOCOKE | 1.0000 | 1.0000 |
| MBP8HYDROC | 0.7500 | 1.0000 | ATOCOKE | 1.0000 | 1.0000 |

10.0 RESULTADOS FINALES DE LA SIMULACIÓN.

Tabla 17. Comparación final del reformado.

| %mole | REFORMADO | | | %mole | REFORMADO | | |
|-------|-----------|------------|--------|--------------|------------|---------|------------|
| | Planta | Simulación | error | | Compuestos | Planta | Simulación |
| H2 | 0.0000 | 0.0000 | | 5N8 | 0.0973 | 0.0785 | 19.37% |
| P1 | 0.0000 | 0.0000 | | ETHYLBEN | 3.9165 | 4.1557 | 6.11% |
| P2 | 0.0000 | 0.0000 | | O-XYLENE | 4.1272 | 5.6286 | 36.38% |
| O2 | 0.0000 | 0.0000 | | M-XYLENE | 8.7546 | 9.2062 | 5.16% |
| P3 | 0.0000 | 0.0000 | | P-XYLENE | 5.4292 | 3.1869 | 41.30% |
| O3 | 0.0000 | 0.0000 | | 6N8 | 0.0255 | 0.0014 | |
| IP4 | 0.0000 | 0.0111 | | IP9 | 0.0399 | 0.0304 | |
| NP4 | 0.0000 | 0.0772 | | NP9 | 0.0415 | 0.0045 | |
| O4 | 0.0000 | 0.0004 | | 5N9 | 0.0112 | 0.0291 | |
| IP5 | 2.3767 | 2.6009 | 9.43% | A9 | 17.1366 | 17.4048 | 1.57% |
| NP5 | 1.5805 | 1.2253 | 22.47% | 6N9 | 0.0040 | 0.0009 | |
| O5 | 0.2258 | 0.4384 | 94.16% | IP10 | 0.0048 | 0.0521 | |
| 5N5 | 0.0000 | 0.0581 | | NP10 | 0.0048 | 0.0046 | |
| MBP6 | 1.6124 | 1.6097 | 0.17% | 5N10 | 0.0000 | 0.0240 | |
| SBP6 | 7.4222 | 7.3266 | 1.29% | A10 | 8.8096 | 8.9456 | 1.54% |
| NP6 | 4.0123 | 3.9401 | 1.80% | 6N10 | 0.0032 | 0.0005 | |
| O6 | 0.9510 | 0.6616 | 30.43% | IP11 | 0.0000 | 0.0002 | |
| 5N6 | 0.0957 | 0.0732 | 23.51% | NP11 | 0.0000 | 0.0000 | |
| A6 | 5.6869 | 5.6729 | 0.25% | 5N11 | 0.0000 | 0.0003 | |
| 6N6 | 0.0088 | 0.0248 | | A11 | 1.9387 | 1.9727 | 1.75% |
| MBP7 | 1.0468 | 1.0770 | 2.89% | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 | |
| SBP7 | 2.1111 | 2.1341 | 1.09% | P12 | 0.0000 | 0.0000 | |
| NP7 | 1.1561 | 1.1824 | 2.28% | N12 | 0.0000 | 0.0000 | |
| O7 | 0.3183 | 0.1318 | 58.59% | A12 | 0.0000 | 0.0000 | |
| 5N7 | 0.1005 | 0.0979 | 2.65% | P13 | 0.0000 | 0.0000 | |
| A7 | 19.5381 | 19.6830 | 0.74% | N13 | 0.0000 | 0.0000 | |
| 6N7 | 0.0335 | 0.0200 | | A13 | 0.0000 | 0.0000 | |
| MBP8 | 0.7260 | 0.7124 | 1.88% | P14 | 0.0000 | 0.0000 | |
| SBP8 | 0.2904 | 0.3172 | 9.21% | N14 | 0.0000 | 0.0000 | |
| NP8 | 0.2625 | 0.2046 | 22.04% | A14 | 0.0000 | 0.0000 | |
| O8 | 0.0997 | 0.0001 | 99.87% | Octanaje | 102.00 | 107.20 | 5.10% |
| | | | | Flujo [kg/h] | 129,958 | 128,452 | 1.16% |

Tabla 18. Comparación final del vapor del estabilizador.

| %mole | VAP STAB. | | | %mole | VAP STAB. | | | |
|------------|-----------|------------|----------|--------------|-----------|------------|-------|---------|
| Compuestos | Planta | Simulación | error | Compuestos | Planta | Simulación | error | |
| H2 | 0.3035 | 18.0296 | 5840.02% | 5N8 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| P1 | 0.4594 | 2.1866 | 375.98% | ETHYLBEN | 0.0000 | 0.0000 | | |
| P2 | 10.5086 | 15.9768 | 52.04% | O-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O2 | 0.0000 | 0.0175 | 30.41% | M-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 | | |
| P3 | 39.8441 | 27.7265 | | P-XYLENE | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O3 | 0.0000 | 0.1379 | | 6N8 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| IP4 | 19.4258 | 19.0933 | 1.71% | IP9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP4 | 28.4660 | 14.4037 | 49.40% | NP9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O4 | 0.0000 | 0.2160 | 100.01% | 5N9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| IP5 | 0.8532 | 1.7064 | | A9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP5 | 0.0984 | 0.2368 | | 140.52% | 6N9 | 0.0000 | | 0.0000 |
| O5 | 0.0410 | 0.2130 | | IP10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 5N5 | 0.0000 | 0.0017 | | NP10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| MBP6 | 0.0000 | 0.0086 | | 5N10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| SBP6 | 0.0000 | 0.0330 | | A10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP6 | 0.0000 | 0.0052 | | 6N10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O6 | 0.0000 | 0.0019 | | IP11 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 5N6 | 0.0000 | 0.0001 | | NP11 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| A6 | 0.0000 | 0.0046 | | 5N11 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 6N6 | 0.0000 | 0.0000 | | A11 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| MBP7 | 0.0000 | 0.0001 | | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| SBP7 | 0.0000 | 0.0002 | | P12 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP7 | 0.0000 | 0.0000 | | N12 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O7 | 0.0000 | 0.0000 | | A12 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 5N7 | 0.0000 | 0.0000 | | P13 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| A7 | 0.0000 | 0.0003 | | N13 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 6N7 | 0.0000 | 0.0000 | | A13 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| MBP8 | 0.0000 | 0.0000 | | P14 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| SBP8 | 0.0000 | 0.0000 | | N14 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP8 | 0.0000 | 0.0000 | | A14 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O8 | 0.0000 | 0.0000 | | Flujo [kg/h] | 526 | 1,296 | | 146.43% |

Tabla 19. Comparación final de la corriente de hidrógeno

| %mole | H2 | | | %mole | H2 | | | |
|-------|---------|------------|--------------|----------|------------|--------|------------|--------|
| | Planta | Simulación | error | | Compuestos | Planta | Simulación | error |
| H2 | 92.2948 | 92.4116 | 0.13% | 5N8 | 0.0000 | 0.0001 | 29.01% | |
| P1 | 3.3038 | 2.0102 | 39.16% | ETHYLBEN | 0.0000 | 0.0042 | | |
| P2 | 2.8633 | 2.8175 | 1.60% | O-XYLENE | 0.0000 | 0.0042 | | |
| O2 | 0.0000 | 0.0045 | 25.91% | M-XYLENE | 0.0000 | 0.0082 | | |
| P3 | 1.2004 | 1.5114 | | P-XYLENE | 0.0000 | 0.0029 | | |
| O3 | 0.0000 | 0.0082 | 253.19% | 6N8 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| IP4 | 0.1395 | 0.4927 | | IP9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| NP4 | 0.1340 | 0.2600 | | 94.07% | NP9 | 0.0000 | | 0.0000 |
| O4 | 0.0000 | 0.0043 | | 5N9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| IP5 | 0.0220 | 0.1057 | | A9 | 0.0000 | 0.0092 | | |
| NP5 | 0.0092 | 0.0336 | | 6N9 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| O5 | 0.0000 | 0.0153 | | IP10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| 5N5 | 0.0000 | 0.0009 | | NP10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| MBP6 | 0.0037 | 0.0232 | | 5N10 | 0.0000 | 0.0000 | | |
| SBP6 | 0.0147 | 0.1009 | | A10 | 0.0000 | 0.0013 | | |
| NP6 | 0.0055 | 0.0404 | 6N10 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| O6 | 0.0000 | 0.0080 | IP11 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| 5N6 | 0.0000 | 0.0006 | NP11 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| A6 | 0.0055 | 0.0406 | 5N11 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| 6N6 | 0.0000 | 0.0002 | A11 | 0.0000 | 0.0001 | | | |
| MBP7 | 0.0000 | 0.0064 | 6N11 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| SBP7 | 0.0000 | 0.0129 | P12 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| NP7 | 0.0000 | 0.0051 | N12 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| O7 | 0.0000 | 0.0007 | A12 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| 5N7 | 0.0000 | 0.0005 | P13 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| A7 | 0.0037 | 0.0513 | N13 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| 6N7 | 0.0000 | 0.0001 | A13 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| MBP8 | 0.0000 | 0.0018 | P14 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| SBP8 | 0.0000 | 0.0008 | N14 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| NP8 | 0.0000 | 0.0004 | A14 | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| O8 | 0.0000 | 0.0000 | Flujo [kg/h] | 16,926 | 12,016 | 29.01% | | |

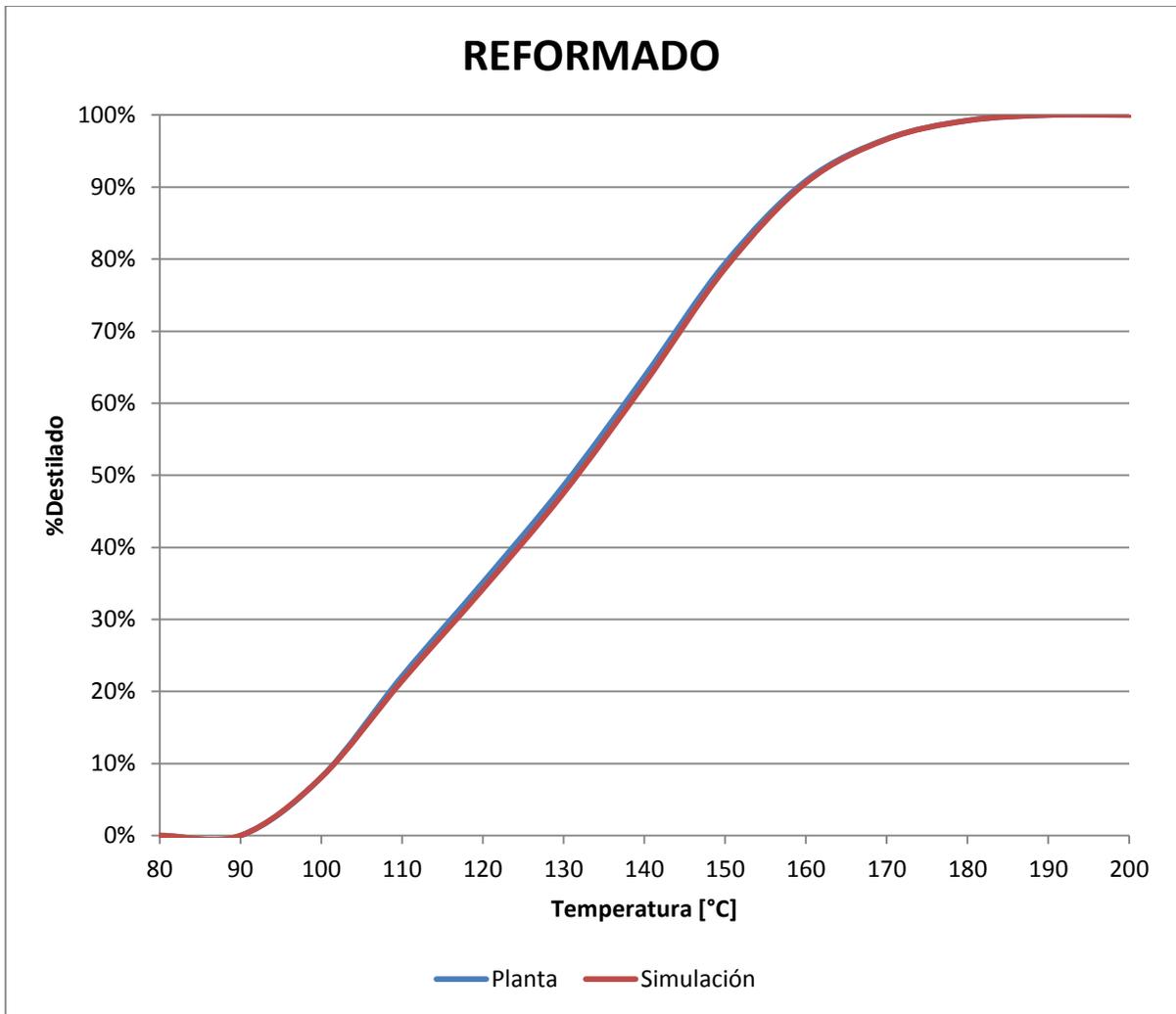


Figura 13. Curva de destilación del reformado. Planta vs. Simulación

11.0 ANÁLISIS DE RESULTADOS

De la tabla 16 el punto principal a resaltar es la aproximación de la corriente de reformado entre los datos de planta y el resultado obtenido por el simulador.

Se hace énfasis en que las olefinas no están del todo ajustadas debido a problemas en el ajuste de las constantes, pues no hay un elemento de reacción que permita realizar el ajuste directamente.

El flujo de la corriente de reformado es de 128.45 TON/h esto representa un error del 1.16% respecto a las 129.96 TON/h, dato de planta.

El octanaje para esta corriente es de 107 y el requerido es 102, por lo que el error es de 5.10%

Cabe señalar que para esta comparación de reformado se han quitado los compuestos ligeros, y posteriormente normalizado, debido a que el simulador separa los ligeros a partir de los butanos del reformado y prácticamente sólo aparecen en esta corriente compuestos a partir de C5.

En la tabla 17 se muestra la corriente de salida del vapor del estabilizador, ésta presenta errores importantes que principalmente se deben a la presencia de hidrógeno, pues los datos de planta señalan apenas 0.30 %mol de éste compuesto en la presente sección. El flujo obtenido con el simulador es de 1,296 kg/h y el dato de planta es de 526 kg/h, esto representa un error de 146.43%

Para la tabla 18 se observa que el ajuste de hidrógeno producido es muy similar al dato de planta, 92.3%mol de pureza contra 92.4%mol de la simulación, no obstante hay un error de 29% en el flujo de éste (16.93 TON/h – planta | 12.02 TON/h – simulación).

12.0 CONCLUSIONES

Cuando se trabajan naftas con compuestos mayores a 10 carbonos es necesario controlar la deposición de coque, pues si rebasa el 20% wt, el simulador no logra convergir al hacer modificaciones al reactor.

La corrección en la deposición de coque se lleva a cabo modificando las constantes destinadas a este fin.

Para poder controlar adecuadamente la simulación es necesario modificar las constantes de actividad de las reacciones.

Sólo se logró ajustar la corriente de reformado, las otras 3 corrientes principales quedaron con flujos notablemente diferentes a los esperados, esto se debe principalmente a una alta producción de butanos. Por otro lado, a diferencia de lo reportado en los datos de planta, no todo el hidrógeno producido es separado en el tanque flash a la salida del reactor, parte de éste abandona el sistema por la corriente de vapor del estabilizador y parte por la corriente de butanos.

13.0 BIBLIOGRAFÍA

1. [En línea] [Citado el: 14 de Agosto de 2013.] [http://www.ordenjuridico.gob.mx/Federal/PE/APF/APC/SEMARNAT/Normas/Oficiales/2006/30012006\(1\).pdf](http://www.ordenjuridico.gob.mx/Federal/PE/APF/APC/SEMARNAT/Normas/Oficiales/2006/30012006(1).pdf).
2. **Antos, George J. y Aitani, Abdullah M. 2004.** *Catalytic Naphta Reforming*. New York : Marcel Dekker, Inc., 2004.
3. **AspenTech.** *Aspen Plus Reformer V7.3 User's Guide*.
4. **Fernández Martínez, Ximena, y otros. 2012.** *Prospectiva de Petrolíferos 2012-2026*. México : Secretaría de Energía, 2012.
5. **Garry, James H. y E., Handwerk Glenn. 2001.** *Petroleum Refining Technology and Economics*. Fourth Edition. New York : Marcel Dekker, Inc., 2001.
6. *NOM-086-SEMARNAT-SENER-SCFI-2005*.
7. **Refinación, PEMEX.** SEMARNAT. SINAT. [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2013.] <http://sinat.semarnat.gob.mx/dgiraDocs/documentos/hgo/estudios/2000/13HI2000E0008.pdf>.
8. **SENER.** [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2013.] http://www.sener.gob.mx/res/85/Refinacion_Web.pdf.