



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).

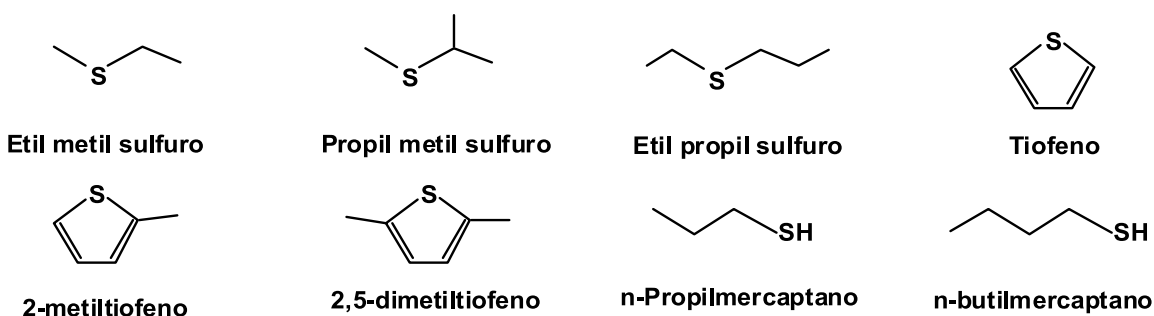


Figura 1. Principales compuestos azufrados presentes en la Nafta.

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 bimetalico 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:

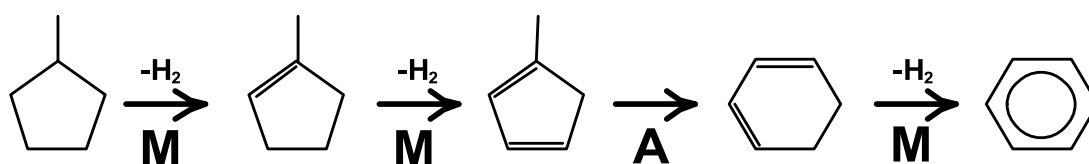


Figura 2. Ejemplo de sinergia entre la función metálica (M) y la función ácida (A)

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.

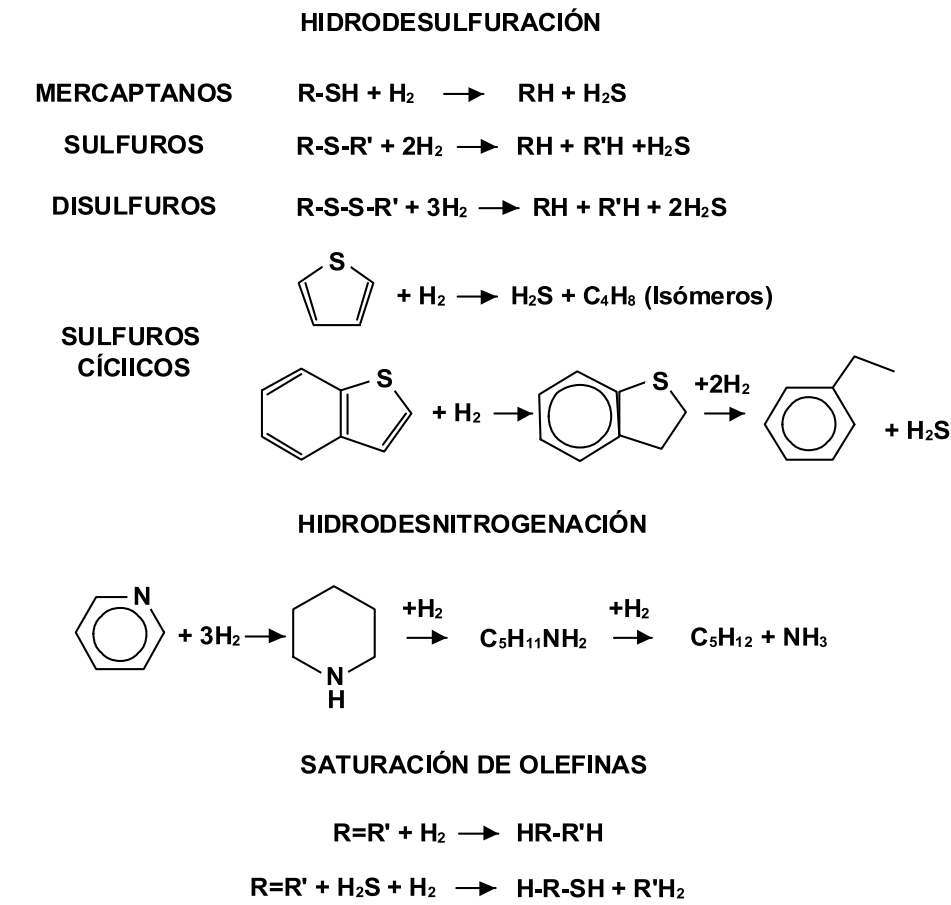


Figura 3. Principales reacciones del proceso de hidrodesulfuración

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

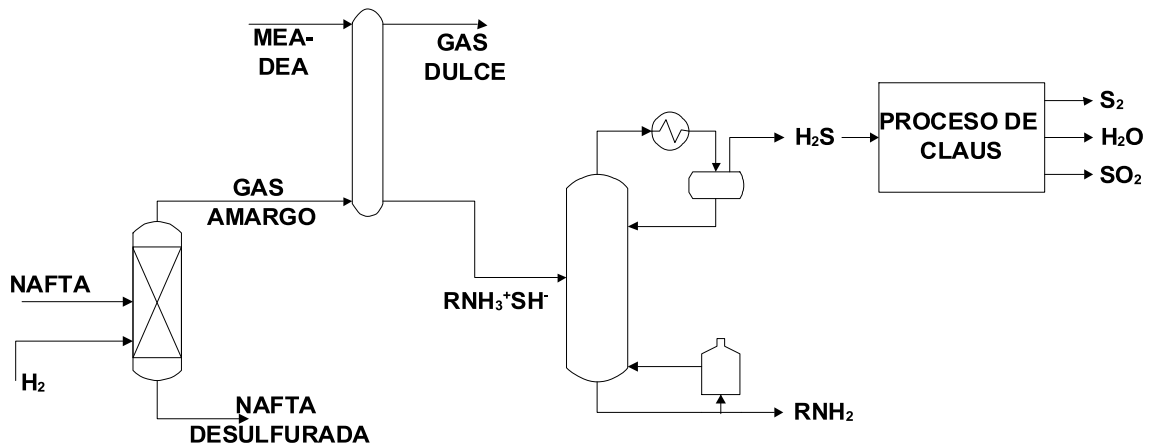
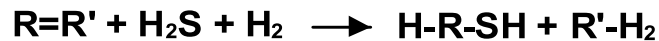


Figura 4. Diagrama del proceso general de hidrodesulfuración.

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).

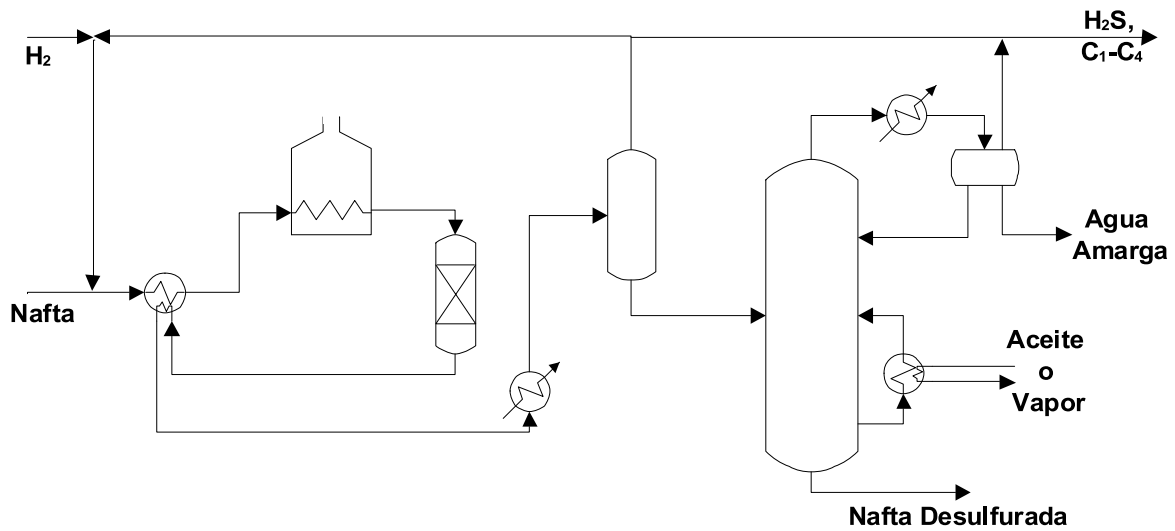


Figura 5. Proceso de Hidrodesulfuración.

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.

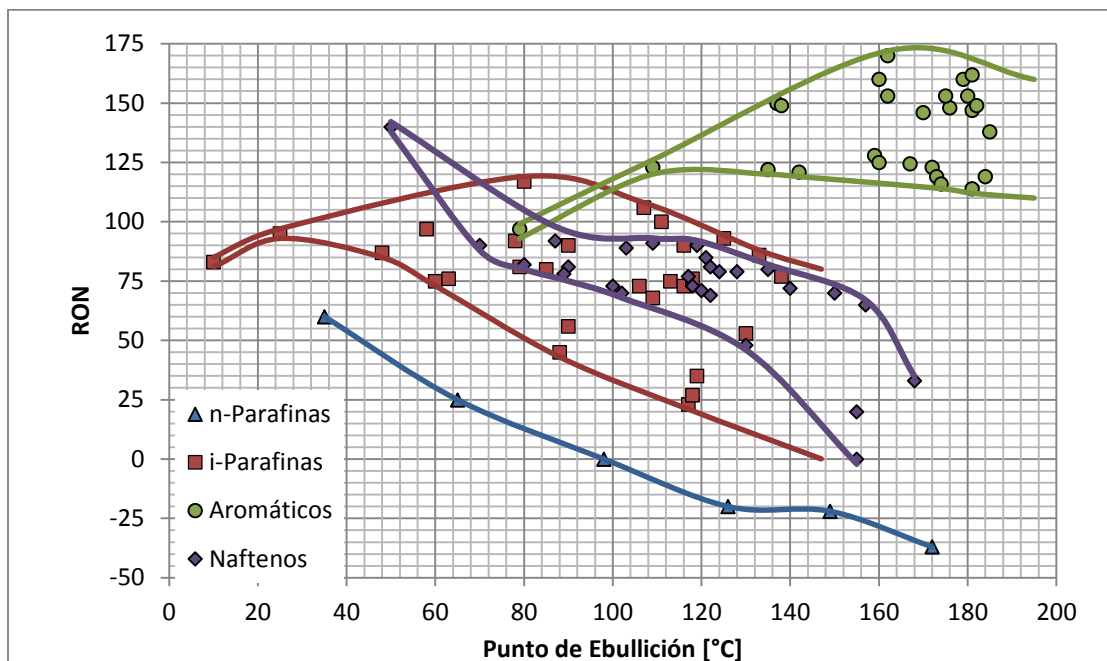


Figura 6. Octanaje vs. punto de ebullición para las familias de hidrocarburos.[Basado en **Antos, George J. y Aitani, Abdullah M. 2004. Catalytic Naphta Reforming..** New York : Marcel Dekker, Inc., 2004, pag. 13]

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.

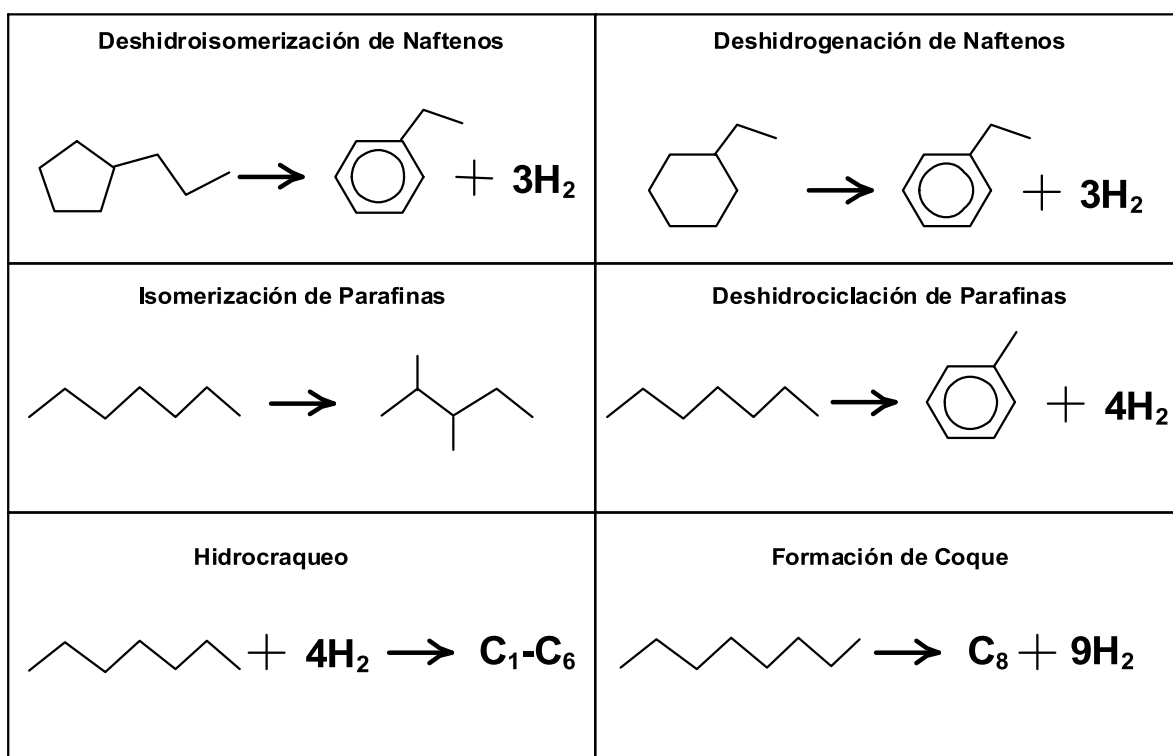


Fig. 7 Principales reacciones en la reformación catalítica.

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 hidro craqueo. 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.

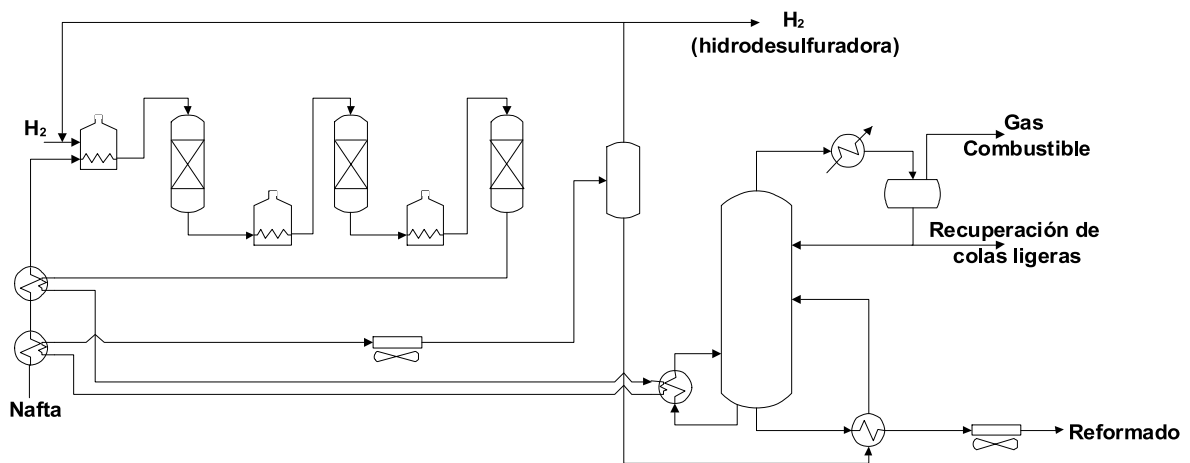


Figura 8. Proceso de reformación catalítica semiregenerativo.

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.

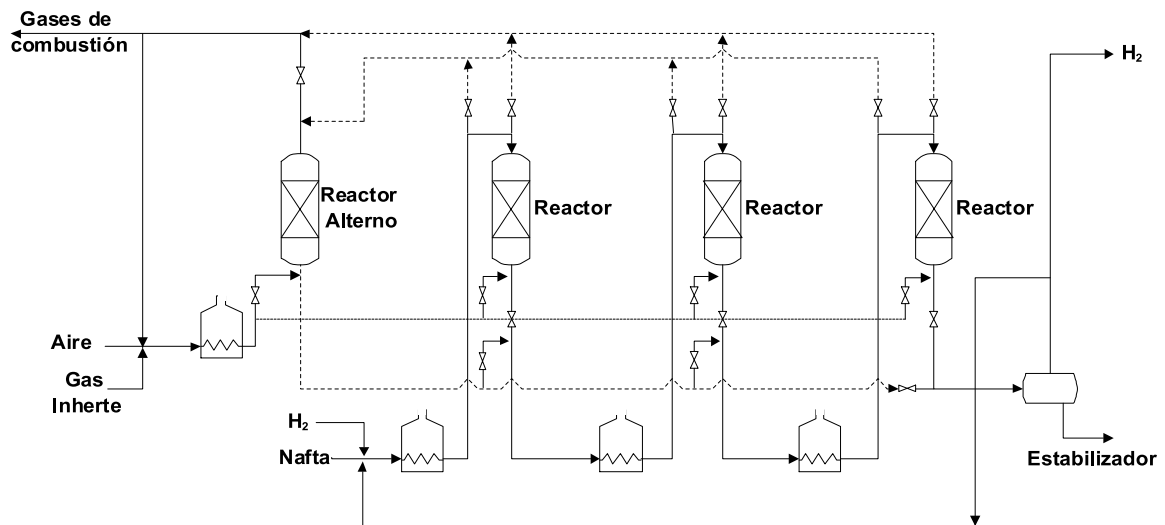


Figura 9. Proceso de reformación catalítica con regeneración cíclica

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.

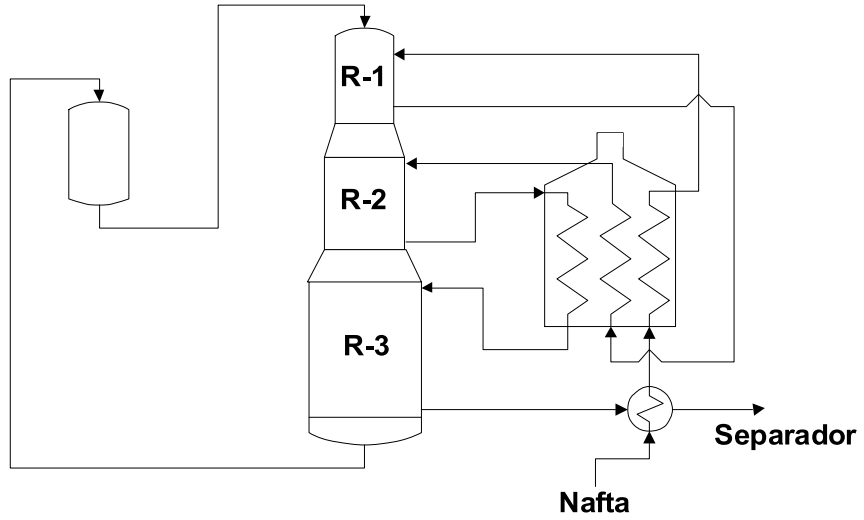


Figura 10. Proceso de reformación catalítica con regeneración continua.

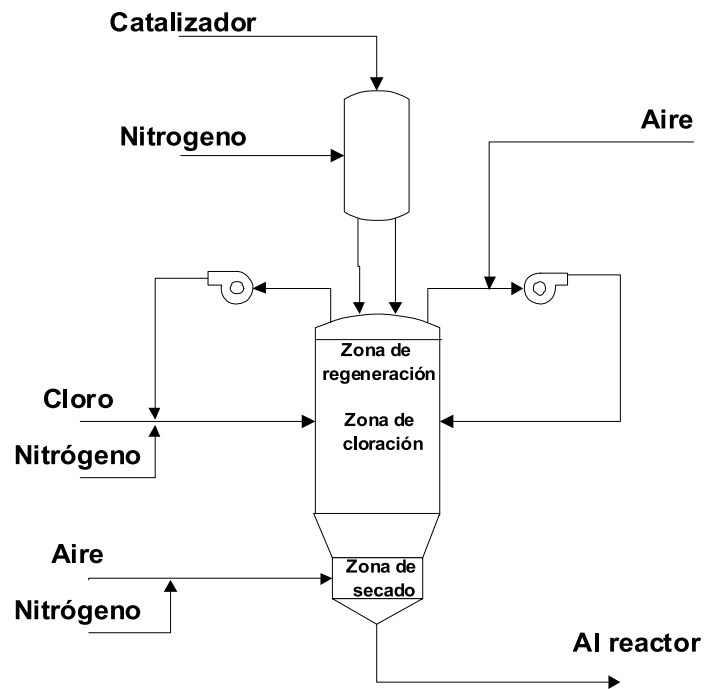
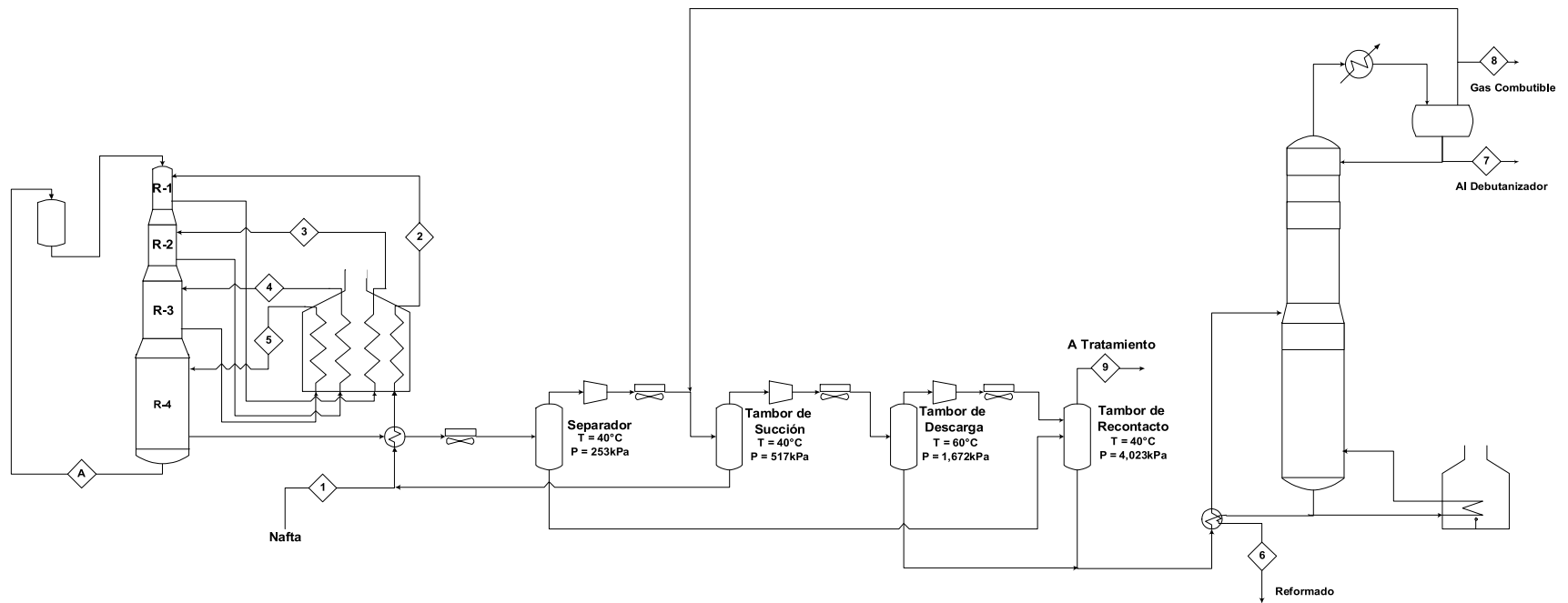


Figura 11. Sección de regeneración del catalizador para una CCR con regeneración continua.

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

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

El simulador establecerá un vector x :

$$x = (y, w, p, v, z)$$

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.

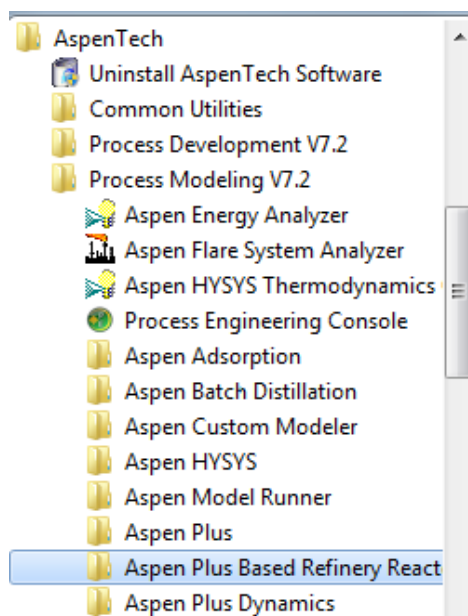


Imagen 1

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

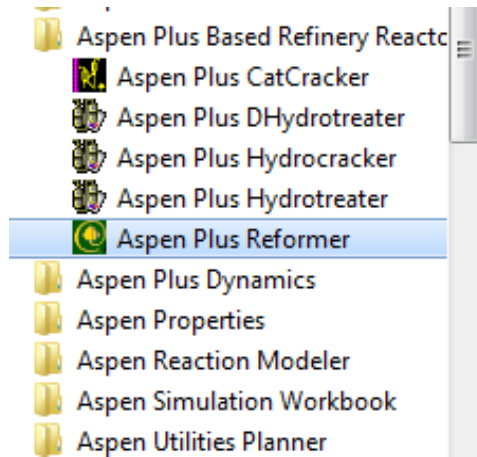


Imagen 2

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.

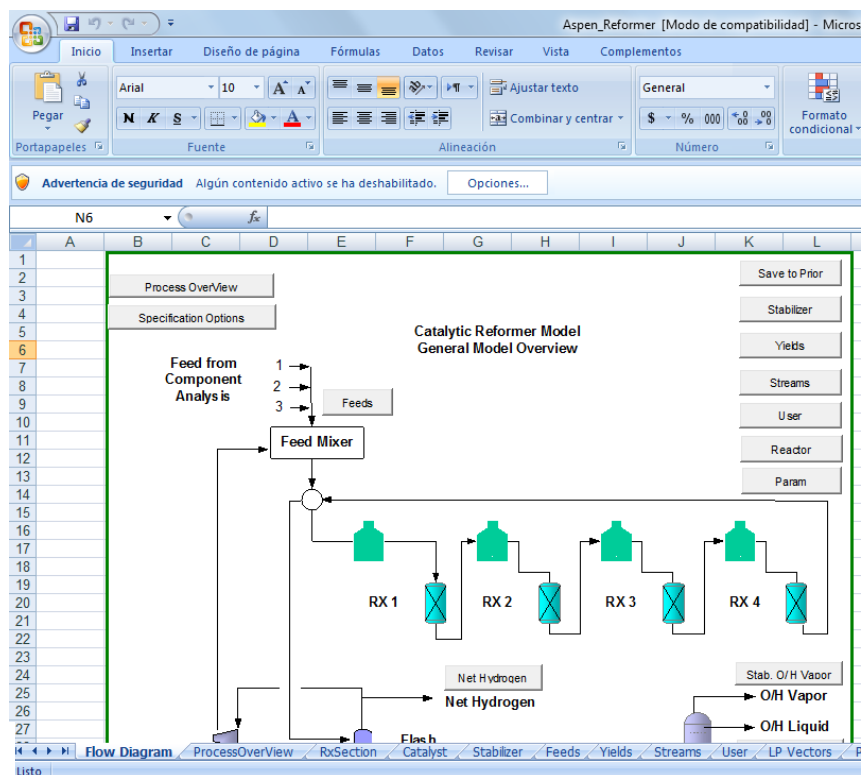


Imagen 3

Una vez abierto el archivo aparecerá una advertencia de seguridad

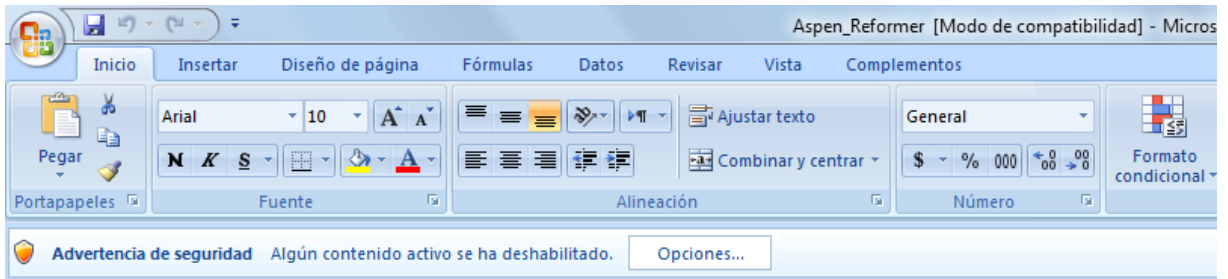


Imagen 4

Dar clic en opciones, esto desplegará una ventana.

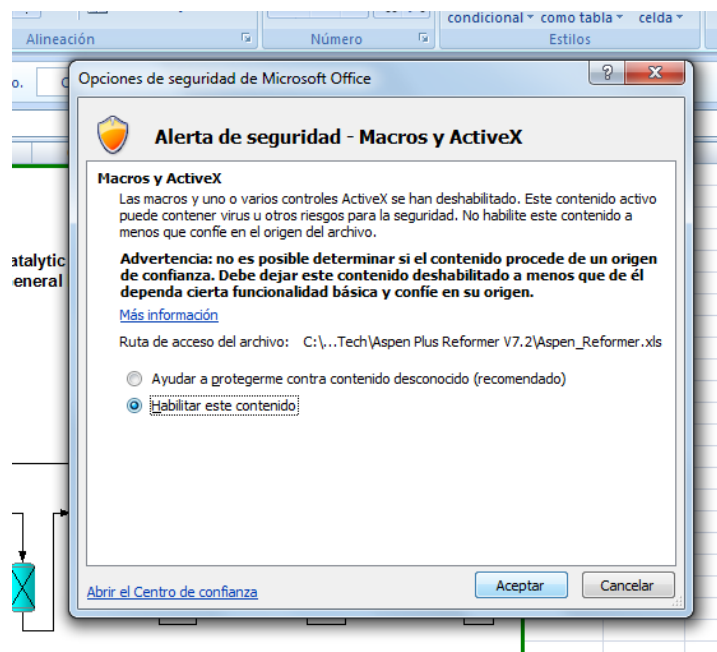


Imagen 5

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.

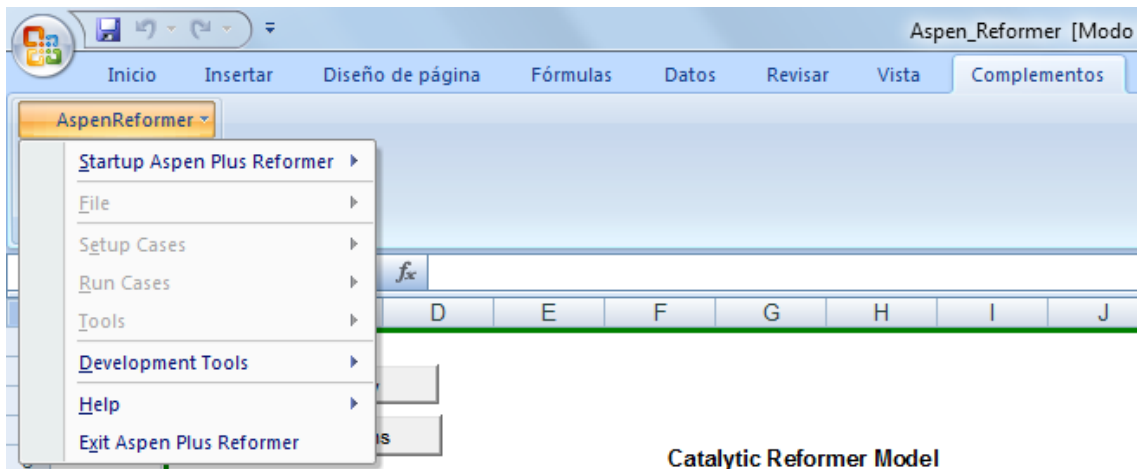


Imagen 6

Catalytic Reformer Model

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

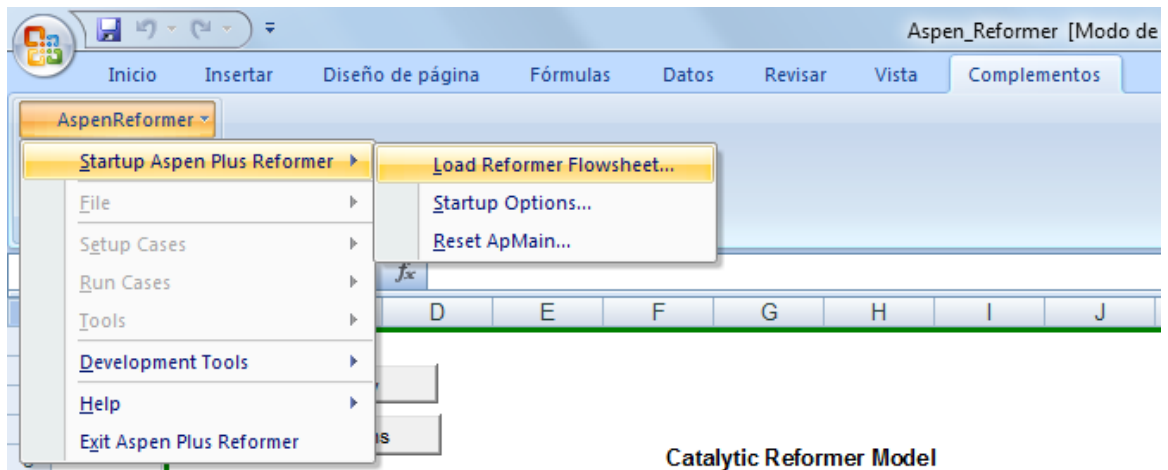


Imagen 7

Catalytic Reformer Model

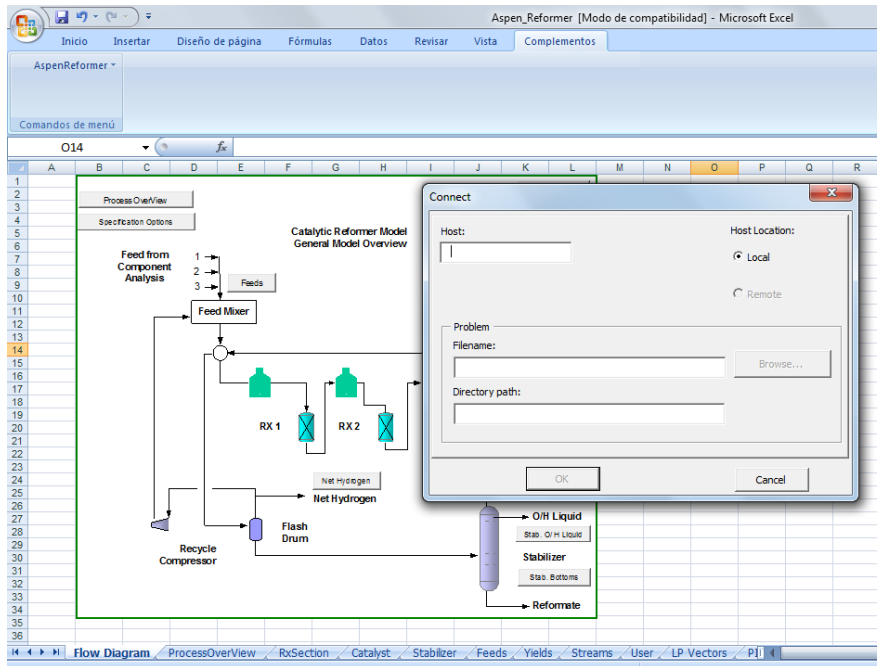


Imagen 8

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

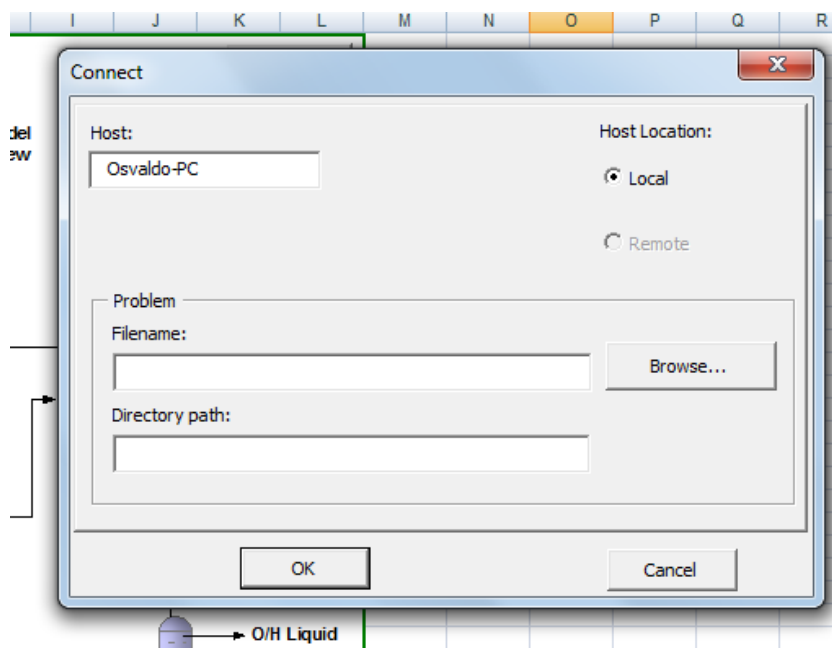


Imagen 9

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"

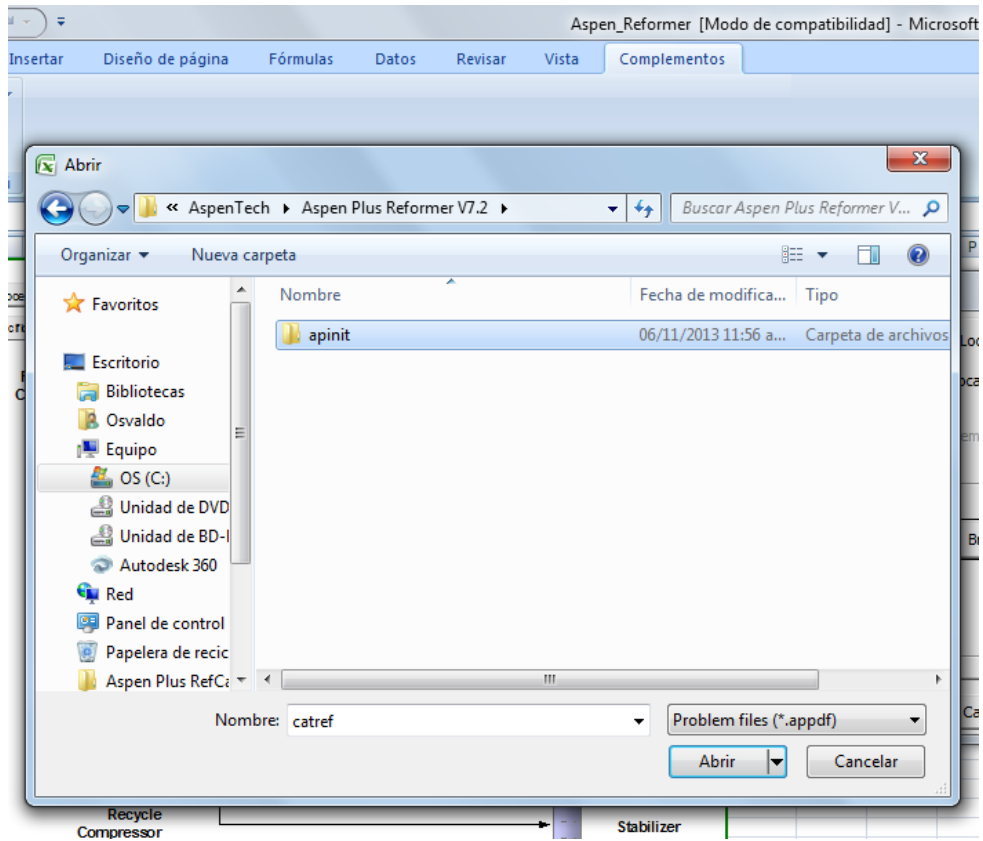


Imagen 10

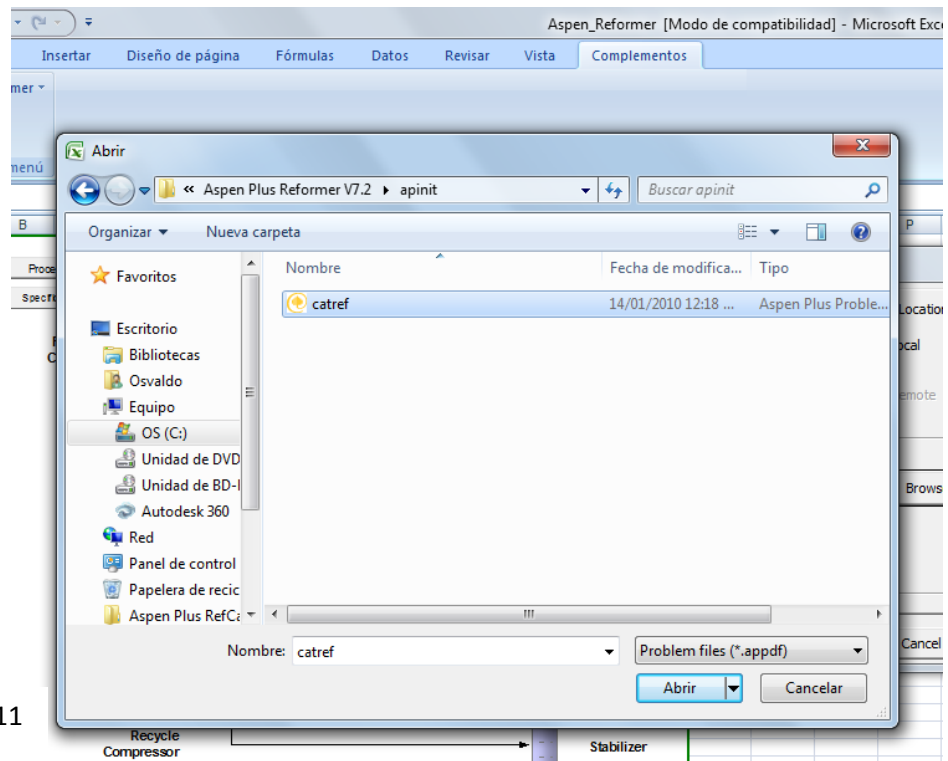


Imagen 11

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"

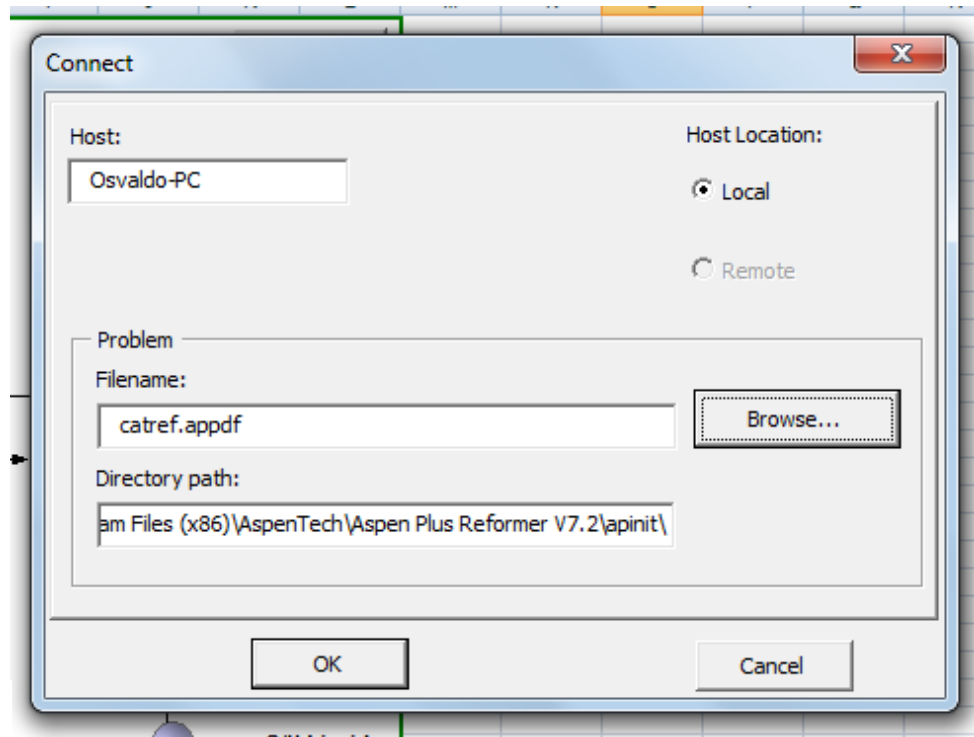


Imagen 12

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.

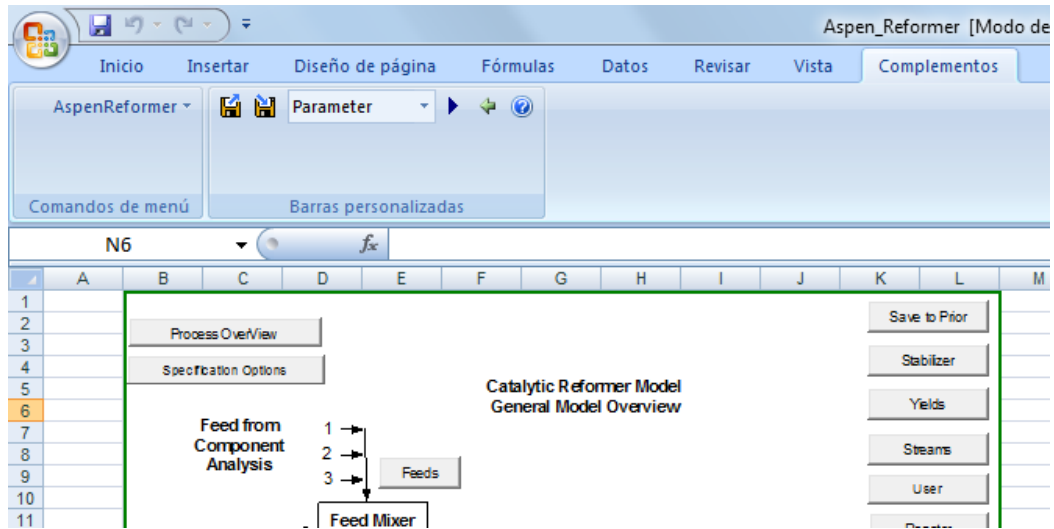


Imagen 13

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.

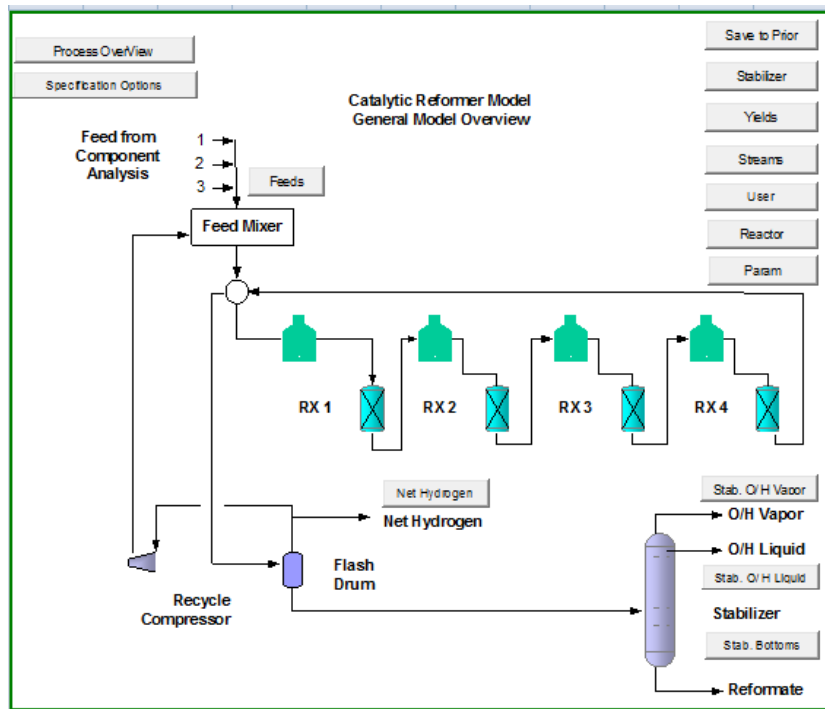


Imagen 14

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.

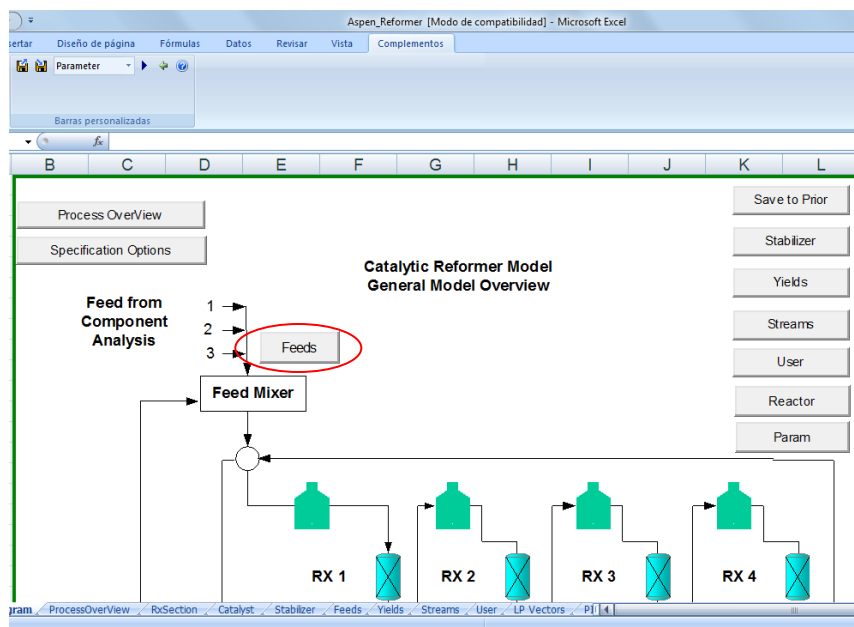


Imagen 15

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"

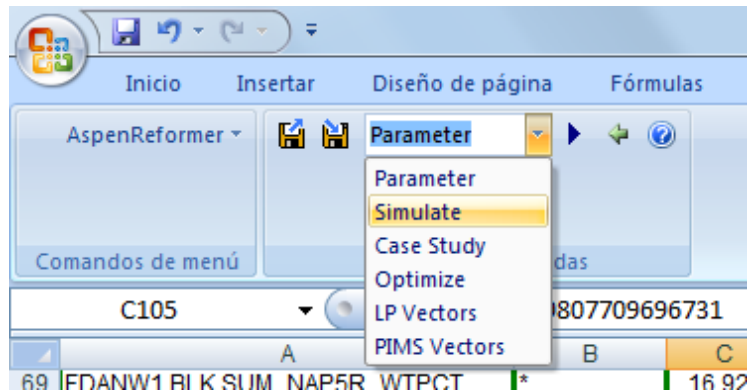


Imagen 20

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

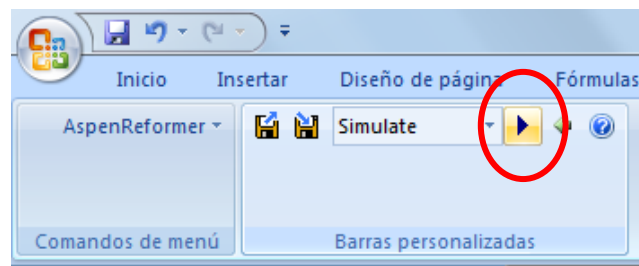


Imagen 21

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)

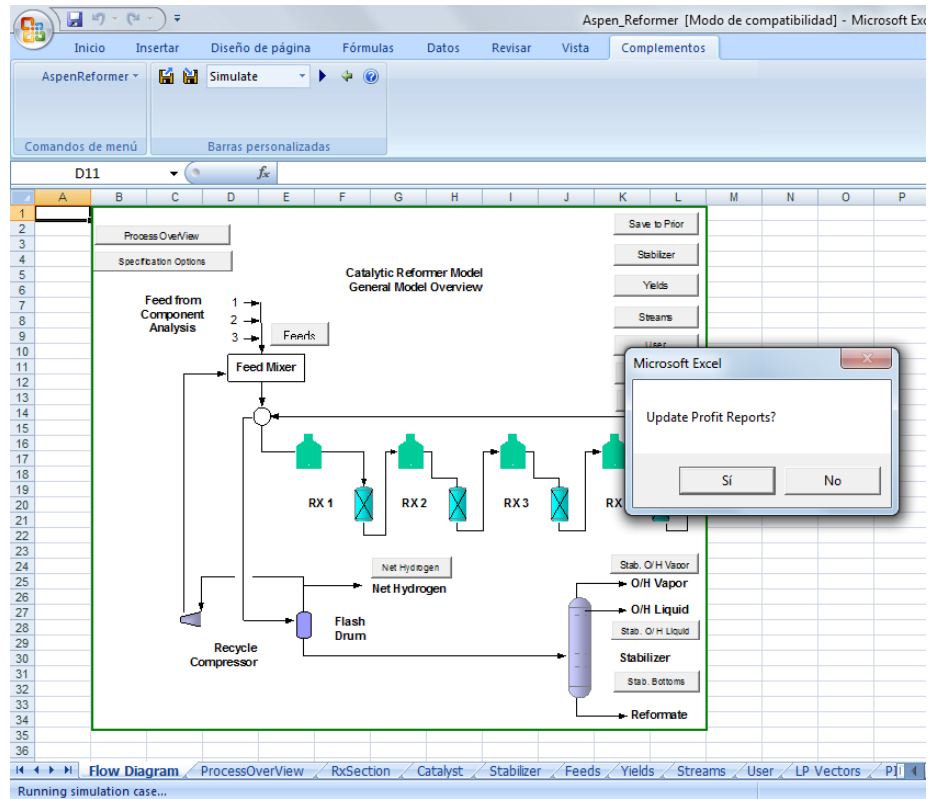


Imagen 22

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.

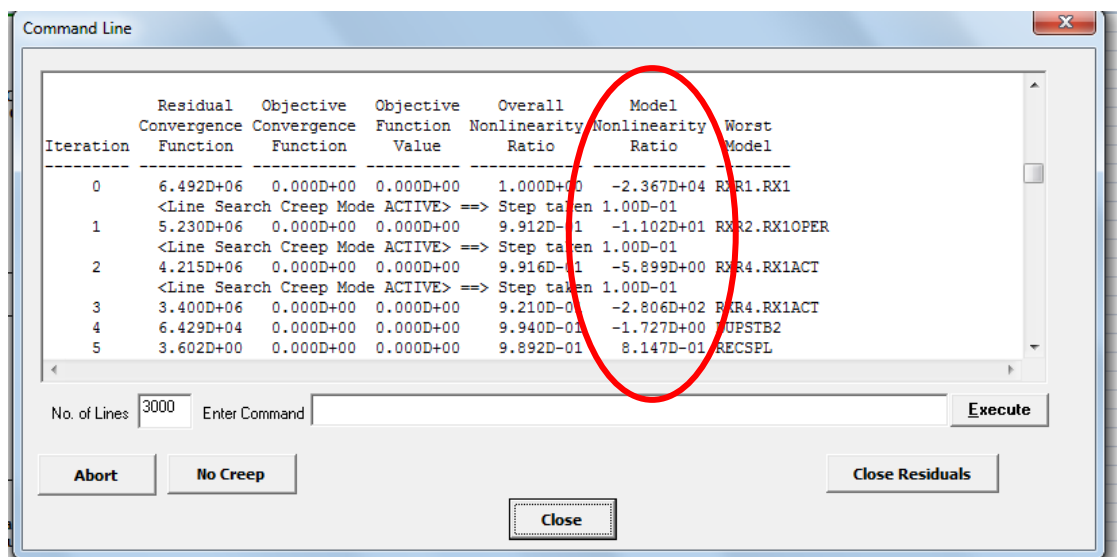


Imagen 23

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.

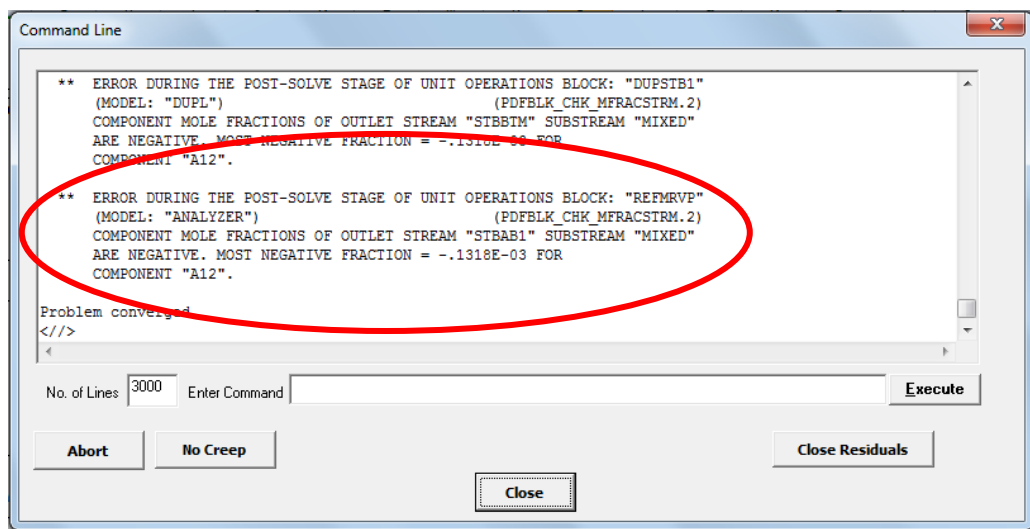


Imagen 24

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"

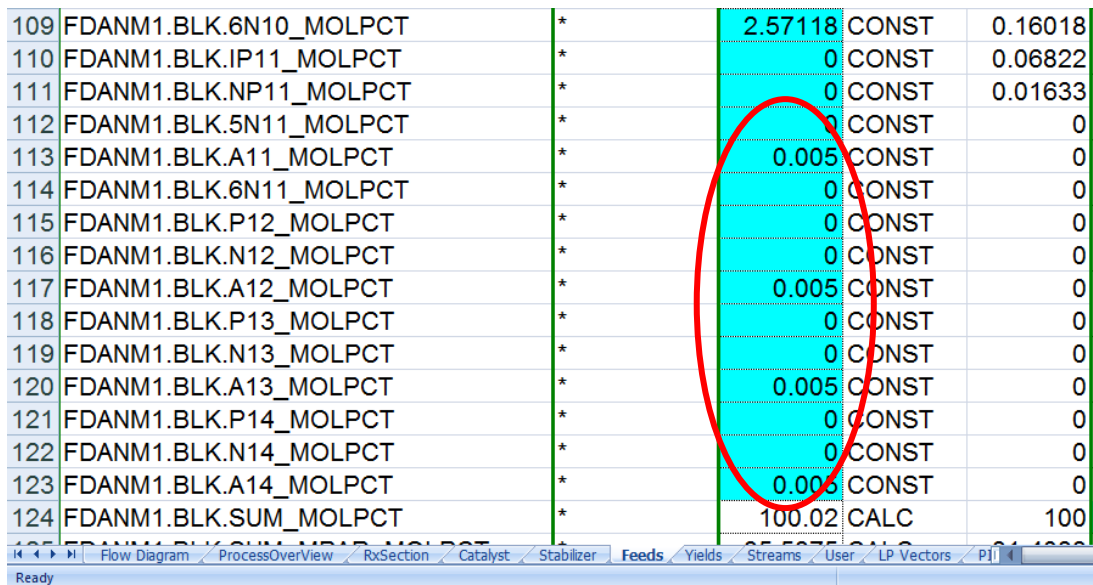
(MODEL: "ANALYZER")

(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 legenda: "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.

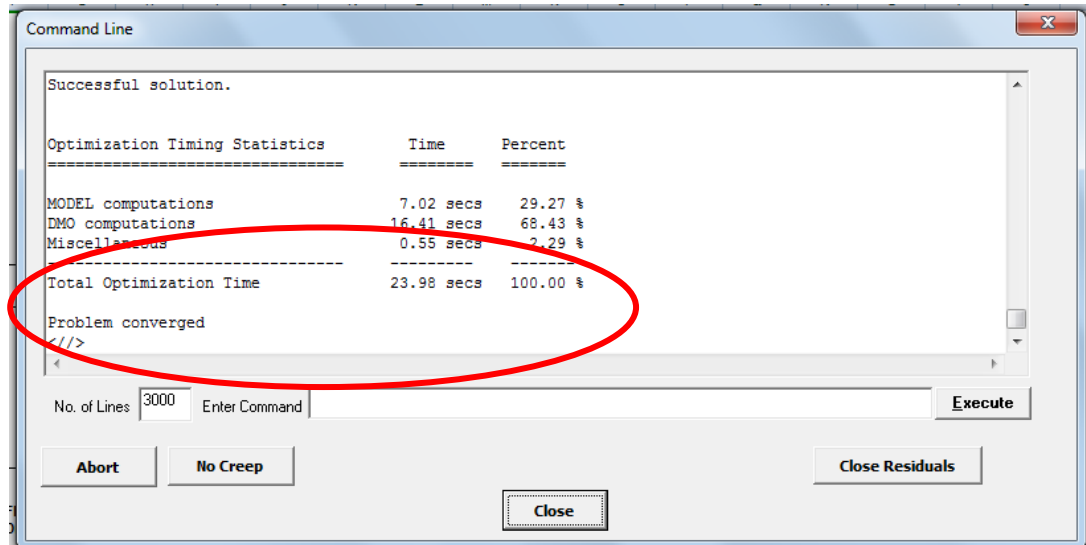


Imagen 26

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"

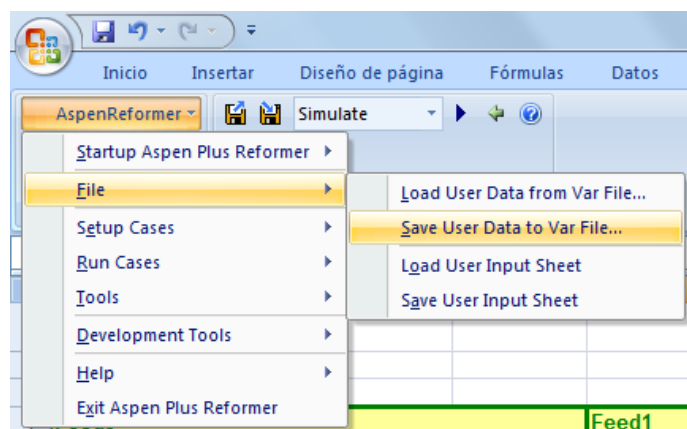
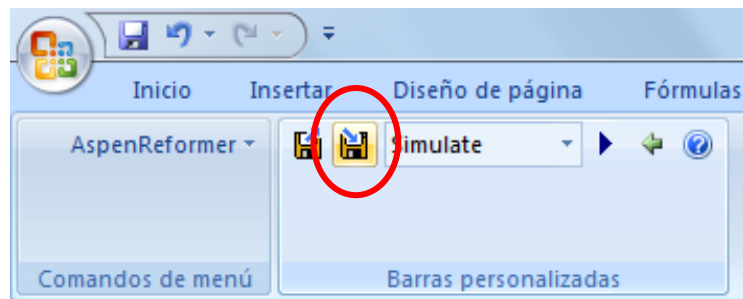


Imagen 27

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.

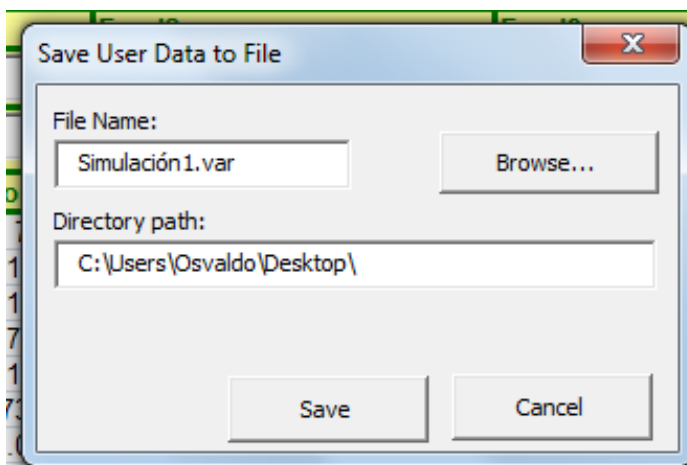


Imagen 28

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.

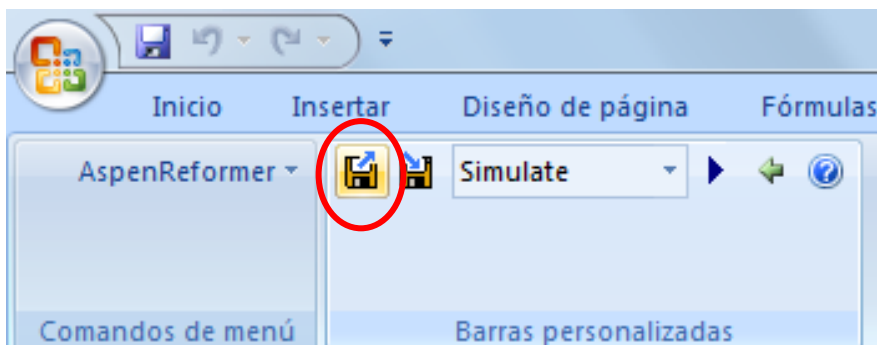


Imagen 29

O bien desde la barra de menú "AspenReformer".

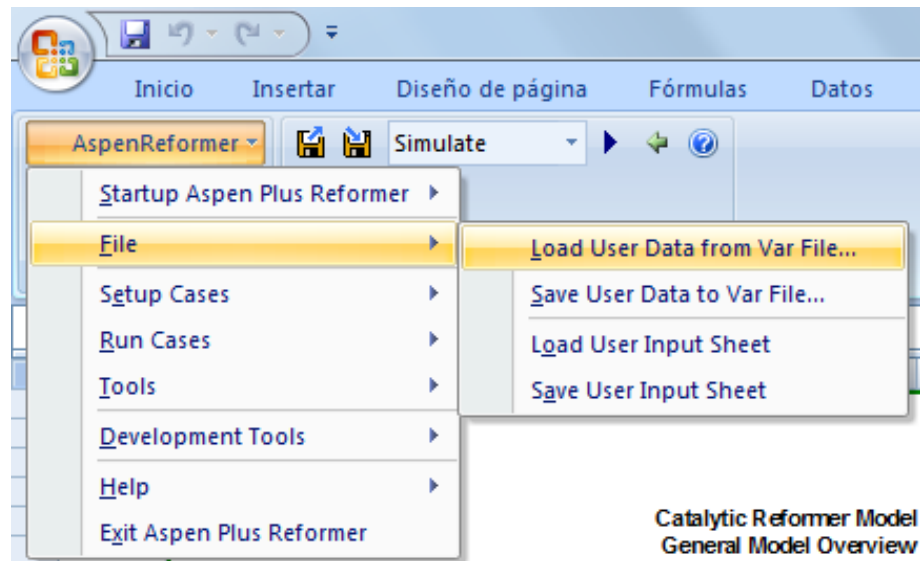
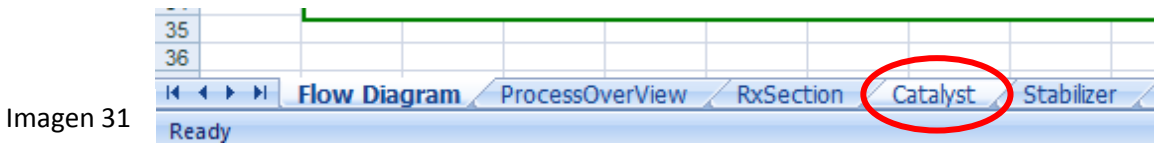


Imagen 30

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 la barra de navegación inferior.

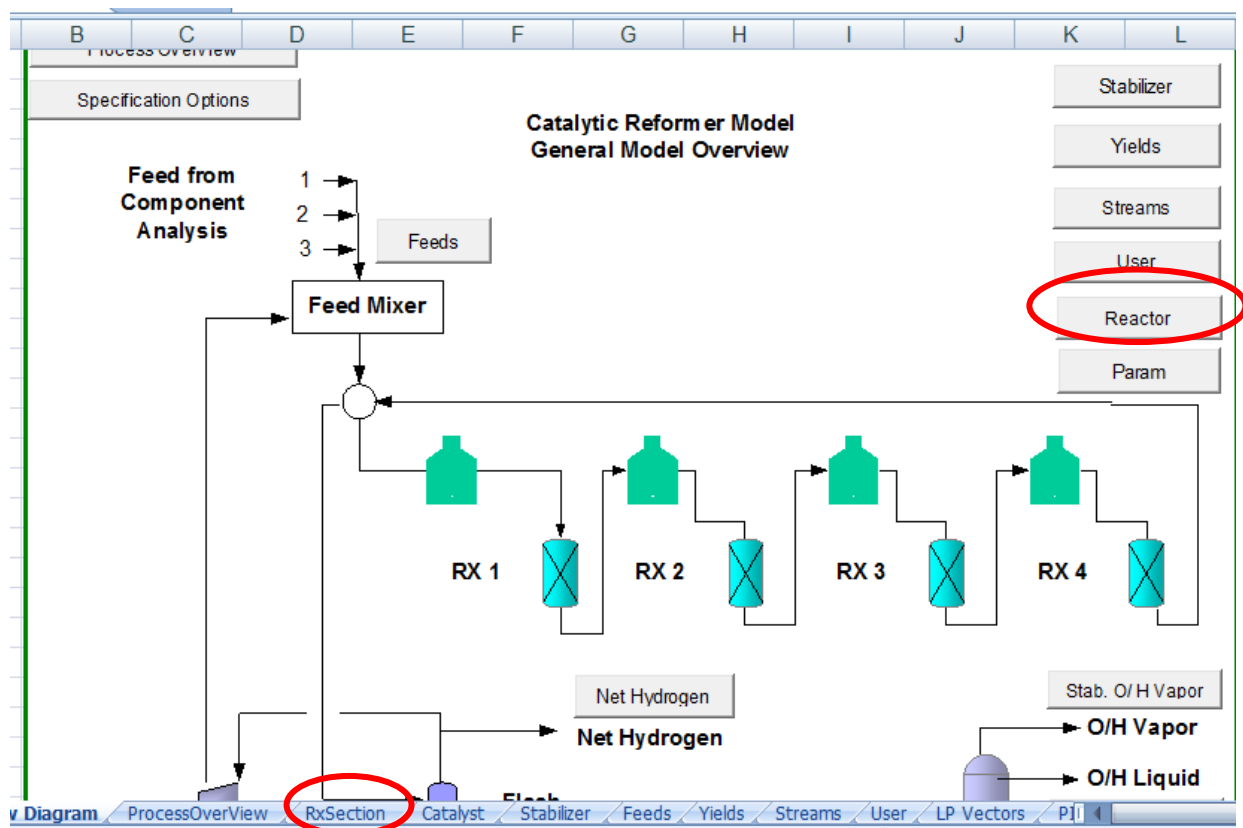


Imagen 34

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		
Compuestos	Planta	Simulación	error	Compuestos	Planta	Simulación	error
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%		

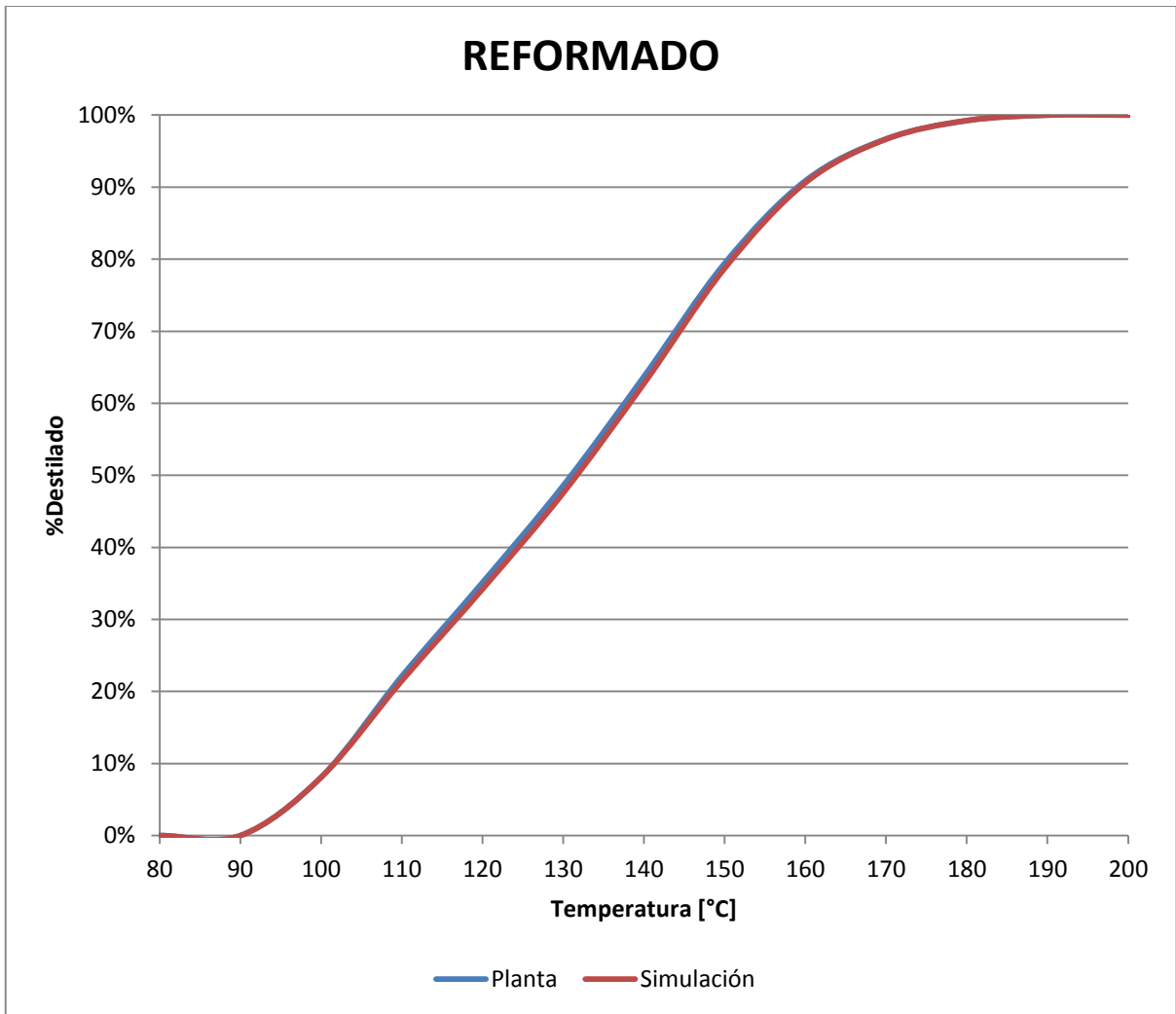


Figura 13. Curva de destilación del reformado. Planta vs. Simulación

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.