



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**SIMULACIÓN Y ANÁLISIS DE LA UNIDAD CATALÍTICA FCC No. 2  
(U-13000) DE LA REFINERÍA “GENERAL LÁZARO CÁRDENAS” DE  
MINATITLÁN, VERACRUZ**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA:**

**EDOUARD FRANÇOIS JORGE BONNEFOUS TORRES**



**MÉXICO, D.F.**

**2016**



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:** Profesor: CELESTINO MONTIEL MALDONADO

**VOCAL:** Profesora: AIDA GUTIÉRREZ ALEJANDRE

**SECRETARIO:** Profesor: MARTÍN RIVERA TOLEDO

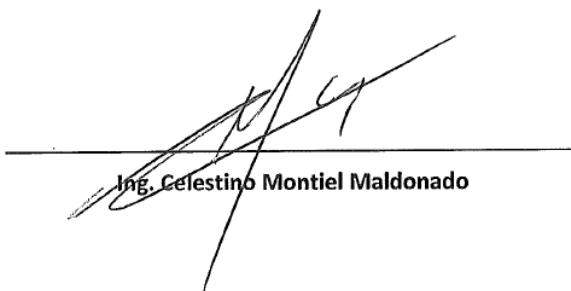
**1er. SUPLENTE:** Profesor: MILTON THADEU GARCIA MEDEIROS DE OLIVEIRA

**2° SUPLENTE:** Profesor: CARLOS ALVAREZ MACIEL

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**


**LABORATORIO DE SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS (LSyOP)  
EDIFICIO DE INGENIERÍA QUÍMICA, CONJUNTO E  
FACULTAD DE QUÍMICA  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**ASESOR DEL TEMA:**



Ing. Celestino Montiel Maldonado

**SUSTENTANTE:**



Edouard Bonnefous Torres

## Índice

Objetivo .....	3
Alcance.....	3
Introducción .....	4
Generalidades .....	6
<i>Petróleo</i> .....	6
<i>Petróleo Mexicano</i> .....	13
Refinería de Minatitlán, Veracruz .....	19
<i>Ubicación</i> .....	19
<i>Ambiente</i> .....	20
<i>Presión y Temperatura</i> .....	20
<i>Humedad Relativa</i> .....	20
<i>Viento</i> .....	20
Proceso de Desintegración Catalítica en Lecho Fluidizado (FCC).....	21
<i>Antecedentes</i> .....	21
<i>Reacciones de Desintegración Catalítica</i> .....	25
<i>Catalizadores</i> .....	28
<i>Pretratamiento de la Alimentación</i> .....	30
<i>Variables de Proceso</i> .....	31
Simulación.....	32
<i>Simuladores</i> .....	32
<i>Ecuaciones de Estado</i> .....	34
<i>Ecuación de Estado de Redlich-Kwong,</i> .....	37
<i>Ecuación de estado de Lee-Kesler.</i> .....	37
<i>Diseño del Reactor</i> .....	38
<i>Alimentación</i> .....	39
<i>Catalizador</i> .....	41
<i>Operación</i> .....	42
<i>Calibración del Reactor</i> .....	44
Simulación de la Torre Fraccionadora (101-V).....	45
<i>Alimentación a la Torre Fraccionadora (101-V)</i> .....	45
<i>Corrientes de la Torre Fraccionadora (101-V)</i> .....	47



Simulación del Absorbedor-Agotador (103-V) .....	48
<i>Configuración del Absorbedor Agotador (103-V)</i> .....	48
<i>Corrientes del Absorbedor Agotador (103-V)</i> .....	49
Resultados.....	50
<i>Reactor</i> .....	50
<i>Torre Fraccionadora (101-V)</i> .....	53
<i>Absorbedor-Agotador (103-V)</i> .....	54
Análisis de Resultados .....	55
<i>Reactor</i> .....	55
<i>Efecto de la variación de temperatura de operación del Reactor</i> .....	60
<i>Torre Fraccionadora (101-V)</i> .....	62
<i>Absorbedor-Agotador (103-V)</i> .....	68
Conclusiones .....	72
Bibliografía.....	75
Anexo I: Índice de Tablas .....	77
Anexo II: Índice de Figuras .....	79
Anexo III: Índice de Gráficas.....	80



## **Objetivo**

El presente proyecto de tesis busca llevar a cabo un análisis de las principales etapas a seguir para realizar la simulación de la Unidad Catalítica FCC N° 2 (U-13000), ubicada en la Refinería General Lázaro Cárdenas de PEMEX Refinación empleando los programas de simulación Aspen HYSYS V8.8 y Aspen Plus V8.8. Se abordarán temas como son los principios teóricos involucrados, los fundamentos de los modelos matemáticos empleados y el análisis de los resultados obtenidos. Se pretende, de igual manera, generar a partir de este trabajo un ejemplo que sirva de guía para futuros proyectos relacionados con la simulación de proyectos similares.

## **Alcance**

Se realizará una simulación empleando el software Aspen HYSYS V8.8 para reproducir la operación del Reactor y el software Aspen Plus V8.8 para reproducir los principales equipos de la Unidad Catalítica tales como la Fraccionadora principal y el Absorbedor-Agotador.

A partir de los datos obtenidos tras llevar a cabo la simulación, se hará un análisis comparativo entre los resultados obtenidos y los datos reales de operación con la finalidad de determinar la desviación que existe entre ambos y se propondrá una interpretación de dichas desviaciones.

## Introducción

En la actualidad, a pesar del desarrollo de nuevas fuentes renovables de energía, la humanidad sigue dependiendo en gran medida de la explotación de fuentes fósiles tales como el petróleo debido a su importante densidad energética. Es por este motivo que resulta sumamente importante desarrollar y optimizar todos los procesos involucrados en la refinación de crudo, especialmente para países con grandes reservas como México.

Una de las principales actividades de la Ingeniería Química es el estudio, diseño y operación de refinerías de petróleo. Dentro de este proceso de refinación, la desintegración catalítica se considera como una de las operaciones más importantes y más ampliamente utilizadas para obtener, a partir de crudo pesado, gasolinas de mayor valor agregado y productos ligeros.

En sus inicios, la desintegración catalítica se lograba a partir de un tratamiento térmico, sin embargo hoy en día se lleva a cabo a través de un proceso catalítico debido a una demanda creciente de gasolinas de mayor octanaje y una disminución en la demanda de combustibles pesados.

Hoy en día se emplean dos tipos de unidades de desintegración catalítica: lecho fluidizado y lecho móvil.

La desintegración catalítica de lecho fluidizado o FCC es el proceso básico para llevar a cabo la producción de gasolina. Conlleva la operación simultánea de un reactor-regenerador y una fraccionadora. Típicamente involucra una corriente de hidrocarburos previamente precalentada que es mezclada con el catalizador dentro del Riser. Dicha mezcla se combina en esta etapa con una corriente de recirculación y es calentada a una temperatura comprendida entre los 900 y 1000°F para lograr

vaporizarla. Al recorrer el Riser, la mezcla es craqueada a una presión promedio de 20 psi. Cabe mencionar que en los procesos más recientes de FCC la totalidad de la desintegración catalítica se lleva a cabo dentro del Riser. Por lo tanto el reactor deja de fungir como tal y únicamente permite contener los ciclones. La desintegración catalítica continúa hasta que los vapores del crudo de alimentación se separan del catalizador dentro de los ciclones del reactor. El efluente de esta etapa es alimentado a una columna fraccionadora donde se lleva a cabo la separación de las fracciones y se implementa una recirculación parcial de los fondos de la columna hacia el Riser.

El proceso de desintegración catalítica produce coque, responsable del envenenamiento del catalizador. Por lo tanto para mantener la actividad adecuada, es necesario regenerarlo con un proceso de calcinación por medio de aire caliente. Es por este motivo que el catalizador es continuamente desplazado del reactor al regenerador y reintroducido al reactor. La reacción de la desintegración catalítica es endotérmica y la regeneración es exotérmica, es por este motivo que existen operaciones en las cuales se emplea el calor generado por la regeneración para precalentar la alimentación al reactor.

Llevar a cabo el diseño y operación de este proceso involucra una gran labor por parte de las firmas de ingeniería o empresas paraestatales, es por este motivo que los simuladores de proceso son herramientas sumamente útiles que facilitan, en cierta medida, dicha tarea. Los simuladores tales como CHEMCAD, DWSIM, Aspen HYSYS, Aspen Plus o NAPCON, permiten tener una visión más clara del proceso y gracias a ellos es posible determinar los puntos clave en los cuales el diseño u operación del proceso muestra problemas o debilidades.



En la presente tesis se compararán los datos de operación reportados por PEMEX para la Unidad Catalítica FCC No. 2 de la Refinería General Lázaro Cárdenas, contra los obtenidos mediante una simulación empleando los simuladores Aspen HYSYS V8.8 y Aspen Plus V8.8.

## Generalidades

### ***Petróleo***

El petróleo es una sustancia fosilizada que se acumula bajo la superficie terrestre por extremadamente largos periodos de tiempo. Es también conocido como petróleo crudo o simplemente crudo. El crudo está compuesto principalmente por hidrocarburos e hidrocarburos sustituidos los cuales a su vez están compuestos de carbono (85%-90%), hidrógeno (10%-14%), azufre (0.2%-3%), nitrógeno (<0.1-2%), oxígeno (1%-1.5%), compuestos organometálicos tales como níquel, vanadio, arsénico, plomo y trazas de metales. Por otro lado, el crudo puede también contener sales inorgánicas de cloruro de magnesio, cloruro de sodio, agua y otras sales minerales que son inyectados a lo largo del proceso de extracción.

A continuación se muestra una clasificación de los principales componentes del petróleo:

- **Parafinas:** Son hidrocarburos saturados, es decir cadenas de hidrocarburos lineales o ramificados tales como el metano, propano o pentano. Tienen una fórmula general de tipo  $C_nH_{2n+2}$ , donde  $n$  es el número total de átomos de carbono en la molécula. El punto de ebullición de dichas moléculas aumenta a medida que aumenta el número de átomos de carbonos en el compuesto.

- Olefinas: Son hidrocarburos insaturados, es decir que existe la presencia de enlaces dobles entre dos átomos de carbono. La fórmula general es  $C_nH_{2n}$ . Las olefinas son compuestos altamente reactivos y pueden reaccionar con ellos mismos para formar mono-olefinas.
- Naftenos: También conocidos como ciclo alcanos. Son hidrocarburos cíclicos saturados con la misma fórmula general que las olefinas. Por el hecho de estar saturados, son relativamente inactivos.
- Aromáticos: Comúnmente conocidos como bencenos, son compuestos sumamente reactivos. La fórmula molecular de estos compuestos es  $C_nH_{2n-6}$ . Estos hidrocarburos en particular reaccionan con el oxígeno para formar ácidos orgánicos. Los compuestos aromáticos de bajo peso molecular tales como el tolueno o el xileno son buenos solventes y son precursores para la obtención de diversos productos petroquímicos.
- Compuestos de Nitrógeno: Se encuentran principalmente en los cortes más pesados del crudo. Son los responsables del envenenamiento de ciertos catalizadores. La presencia de nitrógeno en las gasolinas genera óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ), los cuales tienen un efecto negativo para la atmósfera.
- Compuestos de Oxígeno: El crudo puede incluir compuestos que contienen oxígeno, tal es el caso de los ácidos nafténicos, los fenoles y los cresoles los cuales tienen actividad corrosiva. El oxígeno también tiende a envenenar el

catalizador aunque es posible evitarlo por medio de un tratamiento de hidrogenación catalítica.

- **Compuestos Metálicos:** Pueden contener vanadio, níquel, plomo y arsénico entre otros. El vanadio y níquel se encuentran principalmente en forma de compuestos organometálicos dentro de las fracciones más pesadas del crudo, donde los átomos metálicos se distribuyen dentro de los demás compuestos en un tipo de molécula compleja denominada porfirina.

El petróleo crudo es usualmente clasificado como base parafínica, base nafténica o base asfáltica, en función del tipo de grupos de hidrocarburos que predominan en la mezcla. Sin embargo, se requiere considerar distintas propiedades físicas para llevar a cabo una adecuada caracterización del crudo.

La gravedad API, o grados API por sus siglas en inglés "*American Petroleum Institute*", es la gravedad específica del crudo medida con respecto al agua y se expresa a partir de la siguiente ecuación:

$$API = \frac{141.5}{s} - 131.5$$

Donde  $s$  representa la gravedad específica del crudo medida con respecto al agua, ambos a una temperatura de 60°F.

A partir de la gravedad API es posible establecer una clasificación de tipos de crudo:

<b>ACEITE CRUDO</b>	<b>DENSIDAD (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>DENSIDAD GRADOS API</b>
<b>Superligero</b>	< 0.83	> 39

<b>Ligero</b>	0.87 – 0.83	31.1 - 39
<b>Mediano</b>	0.92 – 0.87	22.3 – 31.1
<b>Pesado</b>	1.0– 0.92	10.0 – 22.3
<b>Extra pesado</b>	> 1.0	10.0

*Tabla 1: Tipo de crudo en función a su Gravedad API.*

(Fuente: Biodisol 2016, *Tipos de petróleo*. Recuperado el 16 de febrero 2016; de <http://www.biodisol.com>)

Ya que el crudo es más ligero que el agua, la gravedad API es siempre mayor que 10. En cuanto más ligero sea el crudo, mayor será la gravedad API. No obstante, la gravedad API no es la única propiedad que permite caracterizar al crudo ya que únicamente permite determinar su ligereza. Tomando en cuenta que el crudo es una mezcla de diversos hidrocarburos, los cuales pueden presentarse como gases o asfaltos semi-sólidos, resulta conveniente separar estas fases en distintas fracciones en función de su respectivo punto de ebullición. Por lo tanto, se lleva a cabo un "ensayo de crudo" en el cual se destila el crudo de acuerdo a rangos de destilación significativos. De esta forma es posible tratar cada fracción como un compuesto aislado denominado "pseudocomponente". Cada fracción es delimitada por medio de componentes llamados "componentes clave", los cuales se encuentran en mayor concentración que los demás compuestos dentro de los límites del rango de separación de cada fracción.

Por otro lado, se requiere de una curva de destilación y una curva de gravedad específica para poder llevar a cabo el "ensayo de crudo". Esta información es usualmente provista por los proveedores de crudo y se emplea para llevar a cabo el diseño y la operación de la refinería. Generalmente, en adición a estos datos, se proveen datos de contenido de azufre, viscosidad y otras propiedades de la mezcla.

A continuación se muestra un resumen de la información básica que se provee generalmente para caracterizar al crudo:

- **Curva de Destilación ASTM:** A diferencia de las curvas TBP, las curvas de destilación ASTM se generan rutinariamente. Este tipo de curvas de destilación se requieren para poder llevar un control de calidad. Para generarlas, se toma alguna de las fracciones del crudo y se procede a llevarlas a temperatura de ebullición para finalmente condensar los vapores producidos. A partir de esta operación es posible generar una curva en la cual se grafica la cantidad de destilado recuperado en función de la temperatura de ebullición. Ya que únicamente se emplea una etapa de equilibrio y no existe reflujo, no se logra una separación de componentes considerable. Tomando en cuenta que se trabaja con una fracción del crudo, el punto inicial de ebullición (IBP) en una destilación ASTM es mayor que en la destilación TBP y el punto final de ebullición de la destilación ASTM es menor que en la destilación TBP.
- **Punto de inflamabilidad:** Es la temperatura a la cual los vapores emitidos por el crudo alcanzan su punto de ignición. Existen métodos empíricos para determinar el punto de inflamabilidad a partir de la destilación ASTM. A continuación se muestra una correlación entre los datos provistos por la destilación ASTM y el punto de inflamabilidad:

$$\text{Punto de inflamabilidad} = 0.77(\text{ASTM } 5\% \text{ } ^\circ F - 150^\circ F)$$

- Curva de Verdadero Punto de Destilación (TBP): Es un gráfico de los puntos de ebullición de los compuestos puros contenidos en el crudo. Anteriormente se generaba en laboratorio a partir de una destilación batch con un gran número de etapas de equilibrio y una relación de reflujo muy grande. Hoy en día, esta curva se genera con la ayuda de un espectrómetro de masas ya que de este modo se obtiene en menor tiempo.

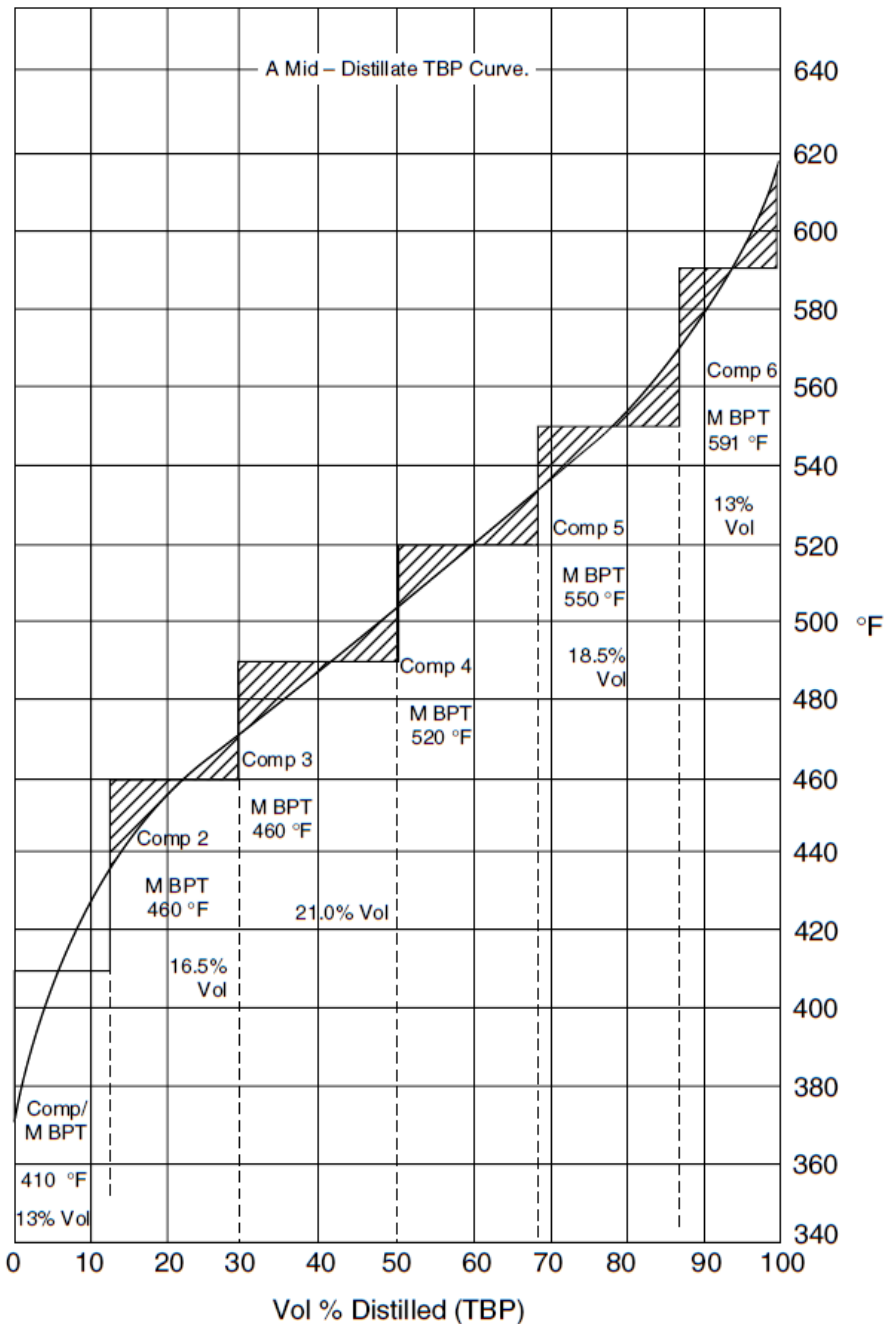


Figura 1: Ejemplo de Curva de Verdadero Punto de Destilación.  
 (Fuente: David S.J. Jones, Peter R. Pujadó (2006), *Handbook of Petroleum Processing*. Dordrecht Netherlands: Springer, p.21.)

- **Número de Octanos:** Es la medida de la capacidad que tiene la gasolina a resistir una detonación dentro de los cilindros del motor de combustión. Entre mayor sea dicha resistencia, mayor será la eficiencia del combustible para producir trabajo.
- **Viscosidad:** Es una medida de la resistencia que presenta el crudo a fluir, es representativa de sus capacidades lubricantes. Normalmente se reporta en Centistokes (unidad de la viscosidad cinemática), segundos Saybolt o segundos Redwood. Normalmente para las gasolinas, se reporta a 122°F y 210°F.
- **Contenido de Azufre:** Es reportado en porciento peso de la totalidad de azufre contenido en el crudo. El contenido de azufre varía con respecto al tiempo por lo que es necesario llevar a cabo análisis. Resulta relevante conocer esta concentración para adecuar el proceso de refinación ya que el azufre en las gasolinas es un contaminante peligroso. Al llevarse a cabo la combustión, las gasolinas que contienen azufre producen óxidos de azufre ( $SO_x$ ), los cuales son responsables de producir lluvia ácida al ser secretados en la atmósfera.
- **Puntos de Corte:** Son las temperaturas en las curvas de destilación TBP que delimitan los rangos en los cuales se producen las distintas fracciones.
- **Puntos Terminales de Corte:** A diferencia de los puntos de corte, los cuales representan la temperatura ideal a la cual se obtiene el mayor rendimiento de cada fracción, los puntos terminales de corte son las temperaturas reales a

las cuales las fracciones se producen comercialmente. Ningún proceso permite separar completamente los componentes de una fracción de las fracciones adyacentes. Por lo tanto, cuando se lleva a cabo una separación en un proceso industrial, algunos de los compuestos más ligeros permanecen en la fracción ligera consecutiva. De la misma forma, algunos de los compuestos más pesados de la fracción permanecen en la fracción pesada consecutiva. Por lo tanto, el punto inicial de ebullición de cada fracción será menor que el punto inicial de corte y el punto final de ebullición será mayor que el punto final de corte correspondiente.

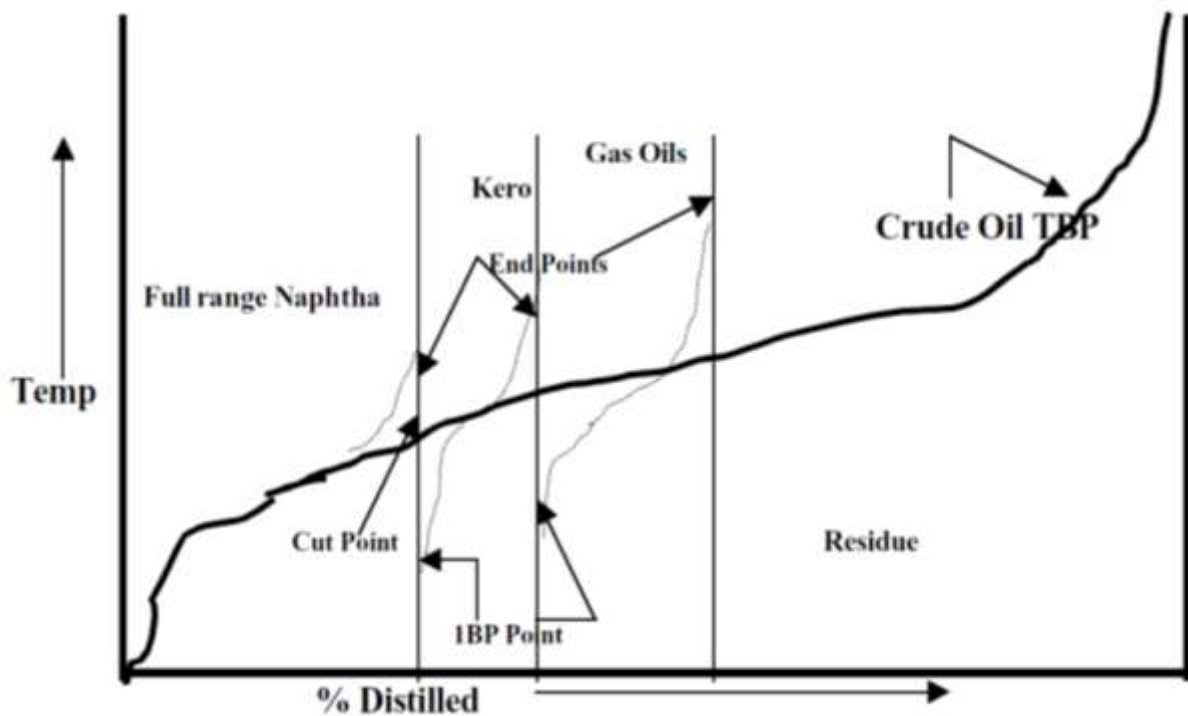


Figura 2: Ejemplo de puntos de corte y puntos terminales de corte.  
(Fuente: David S.J. Jones, Peter R. Pujadó (2006), *Handbook of Petroleum Processing*. Dordrecht Netherlands: Springer, p.9.)

### **Petróleo Mexicano**

En México se producen 3 tipos de crudo:

- Crudo Maya: Es considerado como pesado debido a que tiene una gravedad API promedio de 21.85. Debido a su alto contenido de azufre es un crudo



amargo y por lo tanto brinda menores rendimientos de gasolina y diesel en el proceso de refinación, comparado con los otros tipos de crudo. Se extrae principalmente en la plataforma marítima de Cayo Arcas ubicada a 162 kilómetros de Ciudad del Carmen en el estado de Campeche, en el puerto de Dos Bocas, Tabasco y en Salina Cruz, Oaxaca. Por la composición que posee es necesario someterlo a un tratamiento de refinación con unidades de alta conversión, a partir de las cuales se transforman las fracciones más pesadas del crudo en productos con mayor valor para el refinador.

- Crudo Istmo: Se considera como un crudo medio, con una gravedad API promedio de 32.5 y tiene un contenido de azufre de 1.8% en peso. Tiene buenos rendimientos de gasolina y destilados intermedios tales como el diesel y Keroseno. Se extrae principalmente en Dos Bocas, Tabasco, Salina Cruz, Oaxaca y en Pajaritos, Veracruz. El mayor rendimiento de refinación de este tipo de crudo se obtiene en unidades FCC. Tiene una calidad similar a la del crudo Árabe Ligero y a la del crudo ruso Urales.
  
- Crudo Olmeca: Es el más ligero de los crudos mexicanos con una gravedad API promedio de 39.16 y un alto contenido de azufre comprendido en un rango de 5.5 a 6% en peso. Al igual que el Maya, los rendimientos que brinda en el proceso de refinación son bajos. Es ampliamente usado para la producción de lubricantes y petroquímicos. Se extrae principalmente en la Terminal Marítima de Pajaritos, en el estado de Veracruz.

A continuación se muestra una tabla comparativa entre las propiedades de los crudos mexicanos:

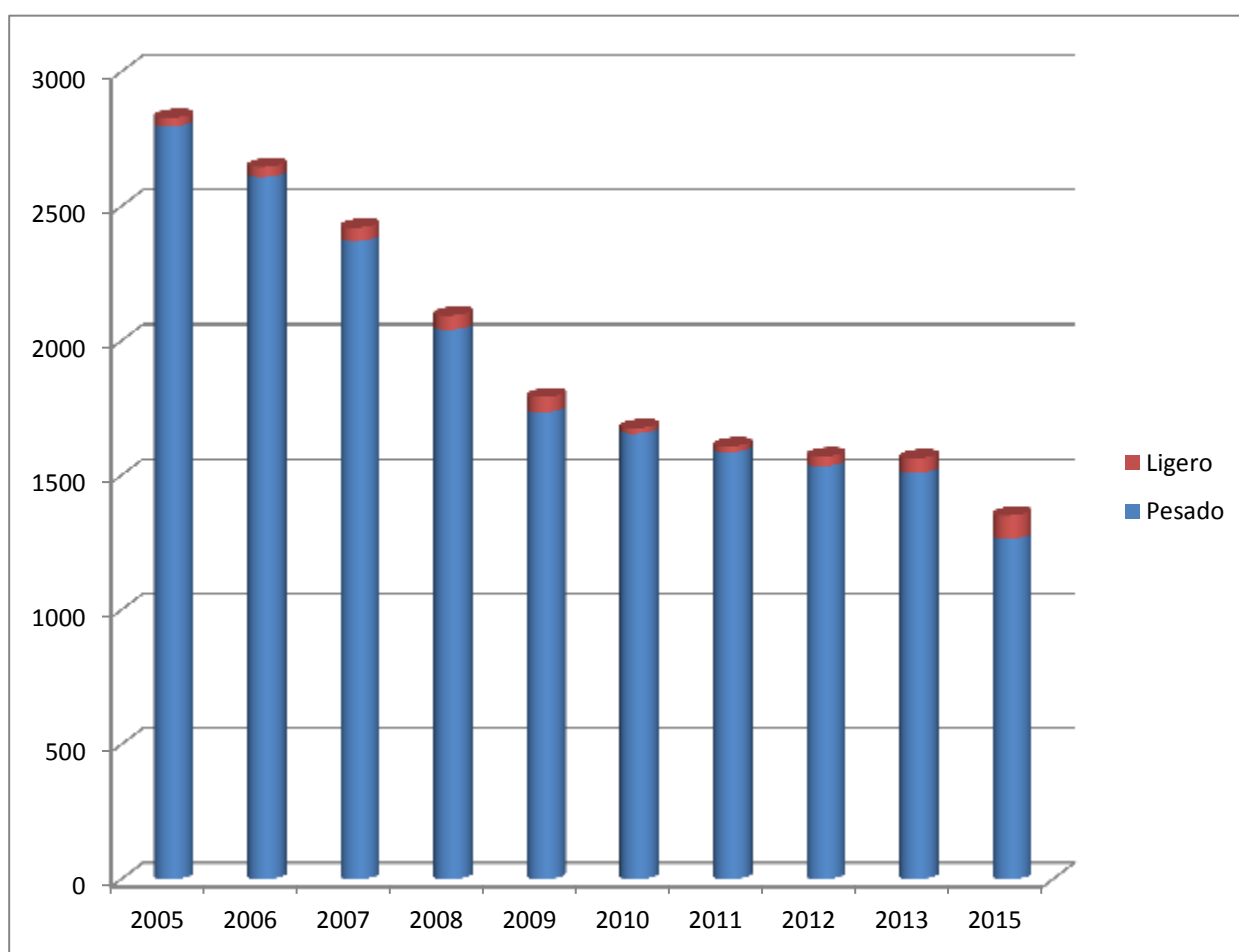
<b>Propiedades</b>	<b>Maya</b>	<b>Istmo</b>	<b>Olmeca</b>
<b>Gravedad API</b>	21.85	33.74	39.16
<b>Viscosidad SSU (21.1°C)</b>	1054.0	57.8	40.3
<b>Azufre total (%peso)</b>	3.70	1.45	0.81
<b>Carbón Ramsbottom (%peso)</b>	10.57	3.92	1.62
<b>Aceites (%peso)</b>	72.0	89.2	89.2
<b>Parafinas (%peso)</b>	3.6	8.1	13.4
<b>Aceite desparafinado (%peso)</b>	68.4	81.1	75.8
<b>Resinas (%peso)</b>	12.7	7.8	10.8
<b>Cenizas (%peso)</b>	0.074	0.007	0.006
<b>Tipo</b>	Pesado	Ligero	Superligero

*Tabla2: Comparación de propiedades entre petróleos Mexicanos.*  
(Fuente: Instituto de Investigaciones Eléctricas 1998, *Boletín IIE mayo-junio 1998.*  
Recuperado el 20 de febrero 2016; de <http://www.iie.org.mx>)

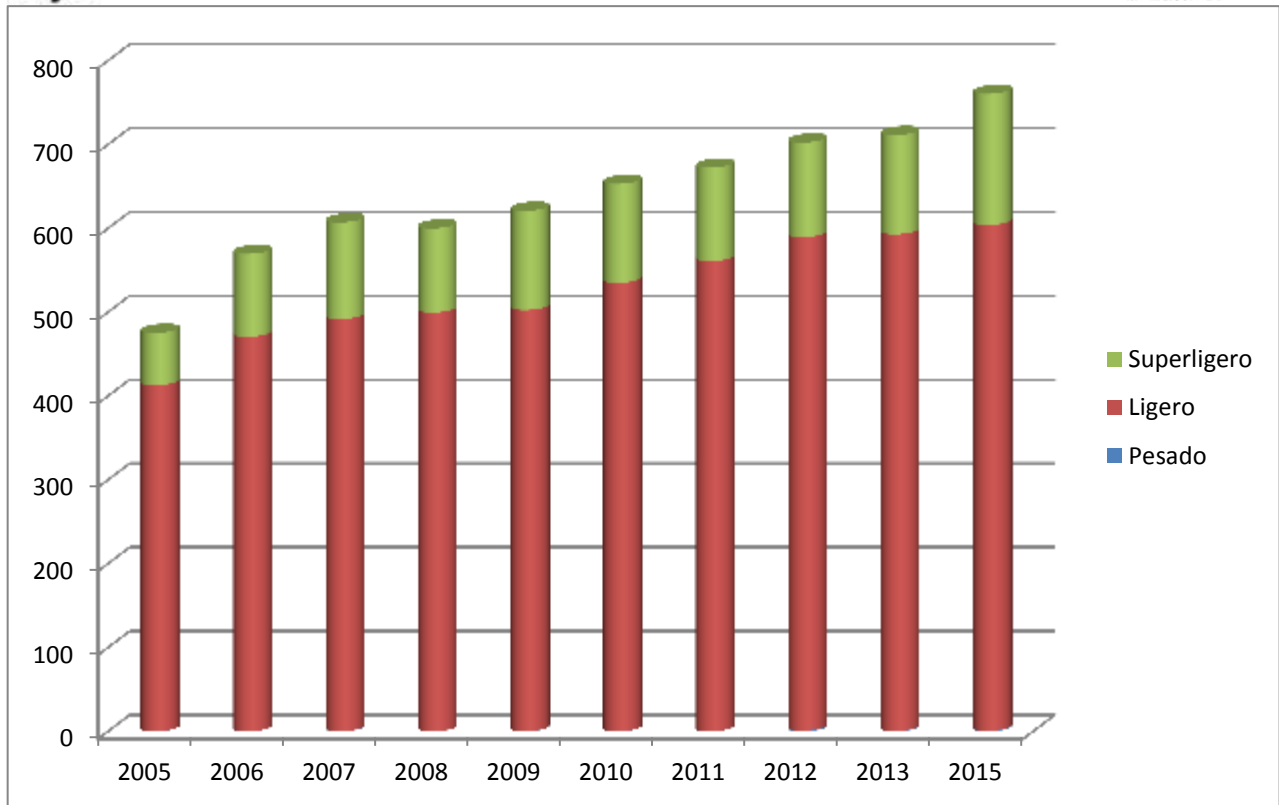
En México PEMEX Exploración y Producción es el organismo responsable de la exploración y explotación de petróleo y gas natural, además de su transporte, almacenamiento y comercialización. Sus actividades están divididas en cuatro regiones geográficas que en conjunto abarcan la totalidad del territorio mexicano. Estas regiones son: Norte, Sur, Región Marina Noreste y Región Marina Suroeste.

Para realizar sus tareas, Pemex Refinación y Producción dispone de 185 plataformas marinas, 4590 pozos de explotación, 309 campos en producción, una capacidad de almacenamiento de 26.8 millones de barriles de petróleo crudo y aproximadamente 12000 kilómetros de oleoductos y gasoductos.

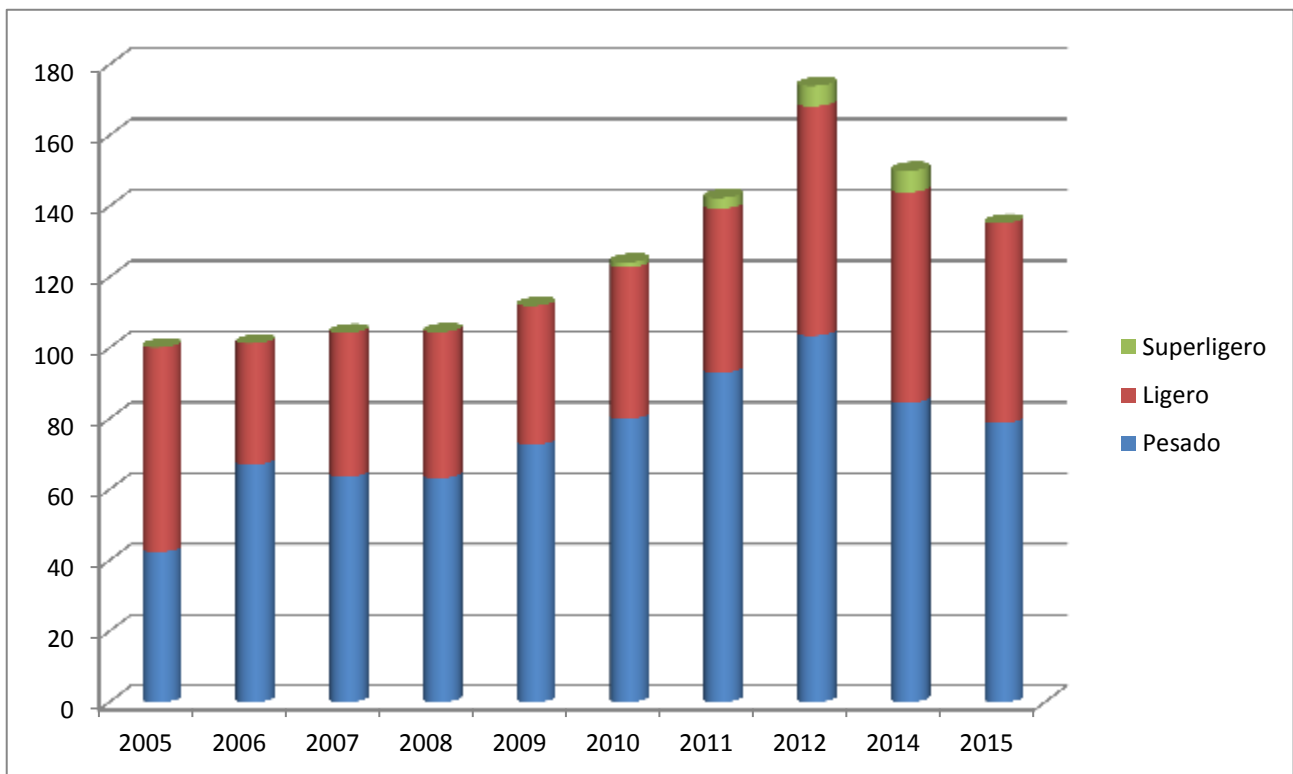
A continuación se presentan gráficas que muestran la producción de crudo por tipo a nivel regional y nacional desde el año 2005 hasta el año 2015:



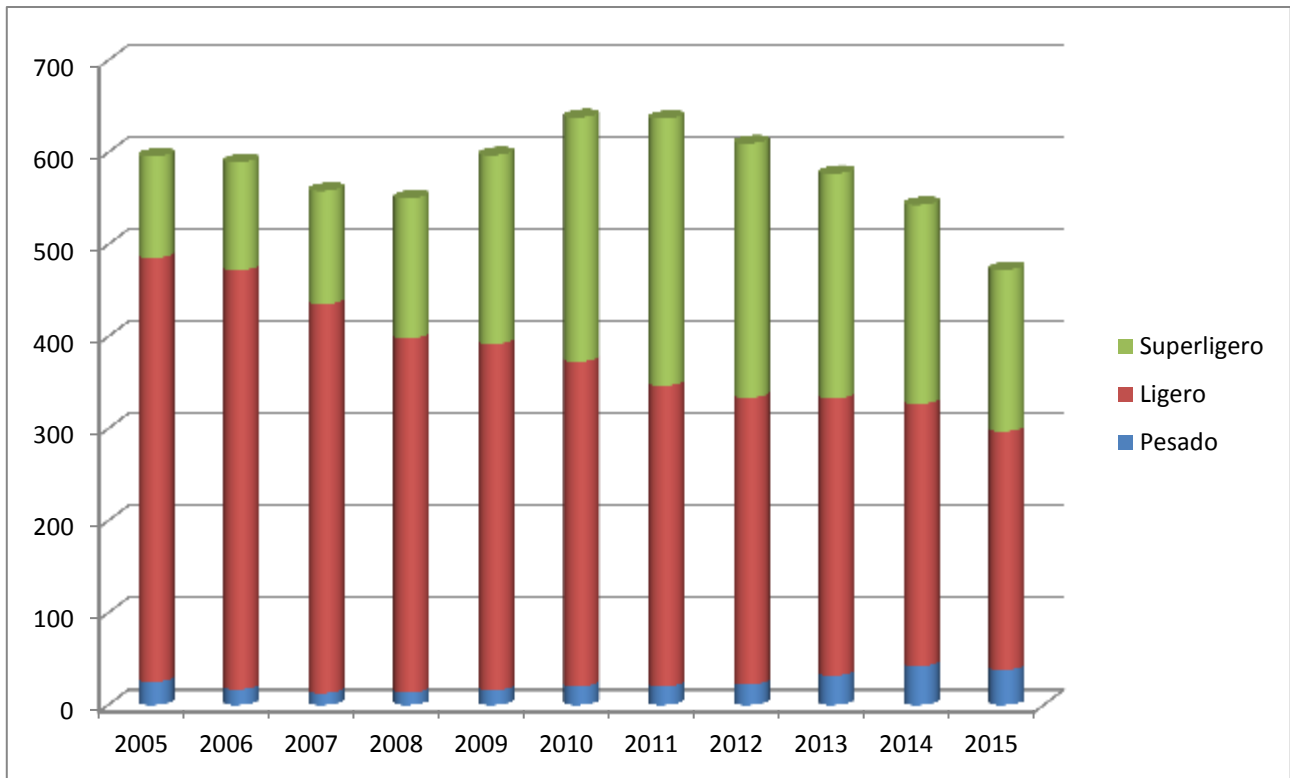
*Gráfica 1: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Marina Noreste. (Fuente: Secretaría de Energía 2016, Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx))*



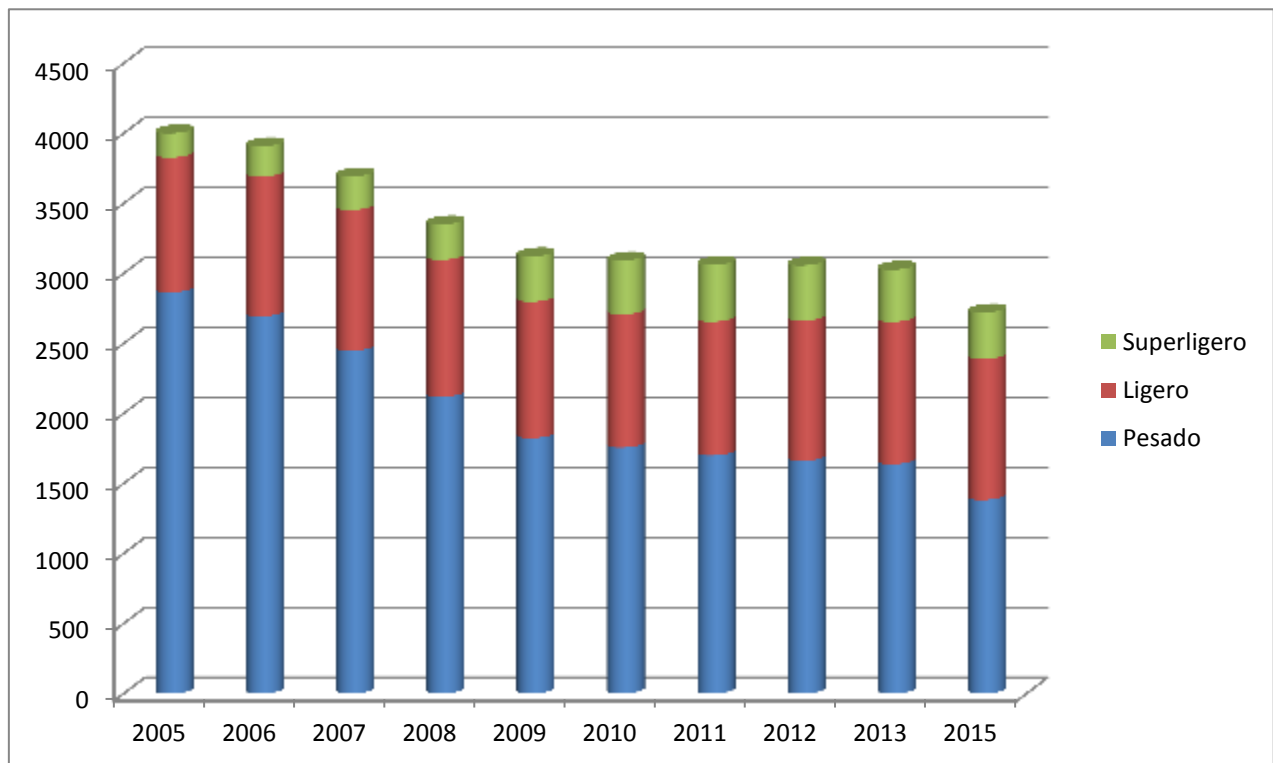
Gráfica 2: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Marina Suroeste. (Fuente: Secretaría de Energía 2016, Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx))



Gráfica 3: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Norte. (Fuente: Secretaría de Energía 2016, Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx))



Gráfica 4: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Sur. (Fuente: Secretaría de Energía 2016, Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx))



Gráfica 5: Producción de Miles de Barriles Diarios a nivel nacional. (Fuente: Secretaría de Energía 2016, Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx))

A partir de estas gráficas es posible observar una clara disminución en la producción de crudo a lo largo de los últimos 10 años. Dicha disminución puede ser parcialmente adjudicada a una caída aproximadamente del 36 por ciento de la producción en la región Marina Noreste, que llegó a ser la segunda más prolífera del mundo y donde se produce la mitad del petróleo de México.

Por otro lado esta disminución se explica por el cambio en las políticas energéticas por las que está atravesando el país. Estas reformas tienen por objetivo el fomento a la inversión privada, lo que ocasiona dificultades para la empresa paraestatal PEMEX.

### **Refinería de Minatitlán, Veracruz**

La Refinería General Lázaro Cárdenas, ubicada en Minatitlán Veracruz, fue inaugurada en 1906 por lo que es considerada la primera gran refinería de Latinoamérica. Cuenta con 27 plantas industriales, dedicadas a la producción de productos energéticos distribuidos dentro de sus 800 hectáreas de extensión. Tiene una capacidad suficiente para procesar 190000 barriles diarios de petróleo. Debido a la gran capacidad productiva que posee esta refinería, resulta sumamente relevante llevar a cabo una simulación que permita comprender y mejorar los procesos productivos que se llevan a cabo en ella.

La mayor parte de su producción tiene como destino principal la Región Sureste del país y parte de la demanda total de la Ciudad de México.

### ***Ubicación***

Las coordenadas exactas de la planta de Minatitlán son:

Latitud: 17° 59' Norte, Longitud: 94° 32' Oeste.

Altitud: 5 m sobre el nivel medio del mar.



### ***Ambiente***

Ambiente altamente corrosivo por  $\text{SO}_x$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , brisa marina, costa a 20 km, con vientos de mar a tierra y clima tropical húmedo.

### ***Presión y Temperatura***

Presión barométrica media: 101 191 kPa abs.

Temperatura ambiental:

- Máximo: 42°C bulbo seco, 35°C bulbo húmedo.
- Mínimo: 12°C bulbo seco, 2°C bulbo húmedo.
- Diseño: 32°C bulbo seco, 28°C bulbo húmedo.

### ***Humedad Relativa***

- Máximo (Media verano): 98% a 38°C
- Mínimo (Media invierno): 44% a 17°C
- Promedio: 75%

### ***Viento***

Velocidad regional: 40.277 m/s de acuerdo a la Sección C. 1.4 Diseño por viento del Manual de Diseño de Obras Civiles de la Comisión Federal de Electricidad, Ed. 1993, México, para estructuras del grupo A.

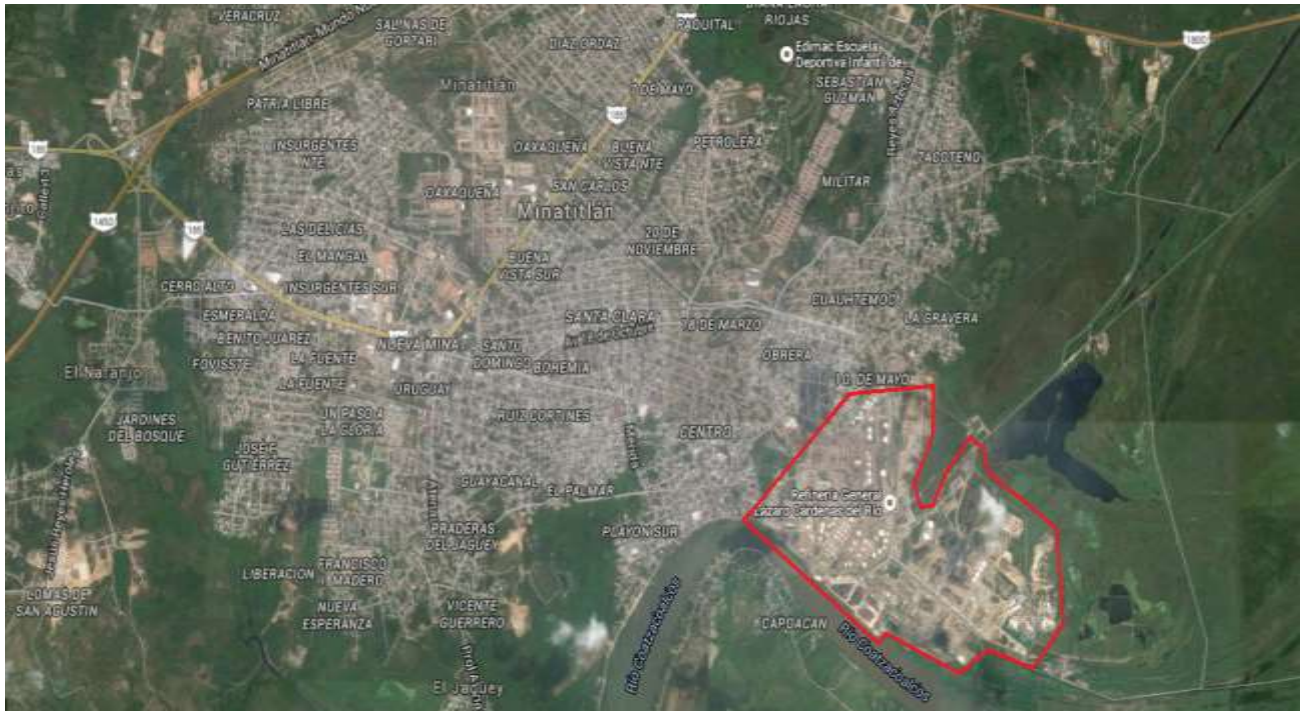


Figura 3: Plano de localización de la Refinería General Lázaro Cárdenas de Minatitlán, Ver. (Fuente: Google 2016, Localización de la Refinería General Lázaro Cárdenas. Recuperado el 23 de febrero 2016; de [www.maps.google.com.mx](http://www.maps.google.com.mx))

## Proceso de Desintegración Catalítica en Lecho Fluidizado (FCC)

### Antecedentes

El proceso de desintegración catalítica en lecho fluidizado o FCC requiere de un catalizador en finas partículas de aproximadamente 70 micrómetros que se comporta como un fluido al ser aireado con vapor. El catalizador fluidizado es recirculado continuamente entre una zona de reacción y una zona de regeneración y actúa como vehículo para permitir la transferencia de calor desde el regenerador hacia la alimentación de crudo y el reactor.

Una de las principales diferencias en las distintas unidades FCC reposa en la ubicación y el control de la reacción de desintegración catalítica. Hasta 1965, la mayoría de las unidades estaban diseñadas con reactores de lecho fluidizado y cama catalítica densa. Estas unidades operaban de modo que la mayoría de la desintegración catalítica ocurría dentro de la cama catalítica del reactor. La



extensión de la desintegración catalítica era controlada por medio de una variación en el tiempo de residencia dentro de la cama catalítica y la temperatura. Sin embargo, era sabido que la mayor parte de la desintegración catalítica ocurría dentro del Riser ya que era en esa región donde la actividad catalítica y la temperatura llegaban a su máximo. A pesar de esto, no se llevaban a cabo alteraciones en el proceso para manipular las condiciones de operación del Riser. No fue hasta que las refinerías adaptaron el uso de catalizadores con mayor actividad, como las zeolitas, que se requirió hacer cambios en el diseño de las unidades de desintegración catalítica ya que la conversión que se alcanzaba en el Riser era demasiado elevada. Es debido a estos avances, que en la actualidad se construyen unidades que operan con una cama catalítica mucho menos densa y la reacción se controla por medio de la variación en la relación de reflujo del catalizador. El modelo de Reactor mostrado en la *Figura 4* muestra un equipo tipo M. W. Kellogg que cuenta con estas características.

Los cambios más importantes se han enfocado al desarrollo de mejores catalizadores y en tener una mejor eficiencia entre el contacto del crudo de alimentación y las partículas de catalizador. Como resultado se han logrado obtener conversiones más altas con mayor selectividad, con tiempos de reacción mejor controlados.

Por otra parte, la alimentación fresca y las corrientes de recirculación son sometidas a un proceso de precalentamiento por medio de intercambiadores de calor o por medio de un horno, ubicado en la base de la alimentación al Riser, donde son mezcladas con el catalizador caliente ya regenerado. El calor del catalizador permite vaporizar la alimentación y llevarla a la temperatura de reacción requerida. La mezcla de catalizador e hidrocarburos circula dentro del Riser para llegar al reactor.

La reacción de desintegración catalítica comienza cuando la alimentación entra en contacto con el catalizador dentro del Riser y continúa hasta que los vapores del crudo son separados del catalizador dentro del reactor. Los vapores del crudo son entonces enviados a la columna fraccionadora para ser separados en productos líquidos y gaseosos.

Se conoce como catalizador gastado al catalizador que sale del reactor y contiene hidrocarburos y coque que fueron adsorbidos en su superficie interna y externa. Una fracción de los hidrocarburos que son adsorbidos en el catalizador es removida por medio de vapor, antes de que el catalizador entre al regenerador. La temperatura del regenerador es controlada por medio de la variación del flujo de aire caliente. El calor de combustión aumenta la temperatura del catalizador de 1150°F a 1550°F y la mayor parte de este calor es transferido del catalizador regenerado a la corriente de alimentación dentro del Riser. El catalizador regenerado contiene desde 0.01% hasta 0.4% en peso de coque residual, dependiendo de que la combustión se realice con CO o con CO<sub>2</sub>, dentro del regenerador.

El regenerador puede ser diseñado y operado para transformar el coque depositado en el catalizador en una mezcla de monóxido de carbono y dióxido de carbono o únicamente dióxido de carbono. Las unidades más antiguas estaban diseñadas para producir en mayor proporción monóxido de carbono, con el fin de minimizar los costos en el proceso de soplado, ya que para calcinar el monóxido de carbono se requiere de la mitad del aire caliente requerido para calcinar el dióxido de carbono. Sin embargo, las unidades modernas están diseñadas para producir dióxido de carbono a partir del coque dentro del regenerador debido a que de este modo se obtienen cantidades significativamente menores de carbón residual en el catalizador regenerado. Esta modificación le brinda mayor reactividad y selectividad al

catalizador dentro del Riser por lo que se obtiene una mejor distribución de los productos obtenidos, conservando la misma actividad y conversión.

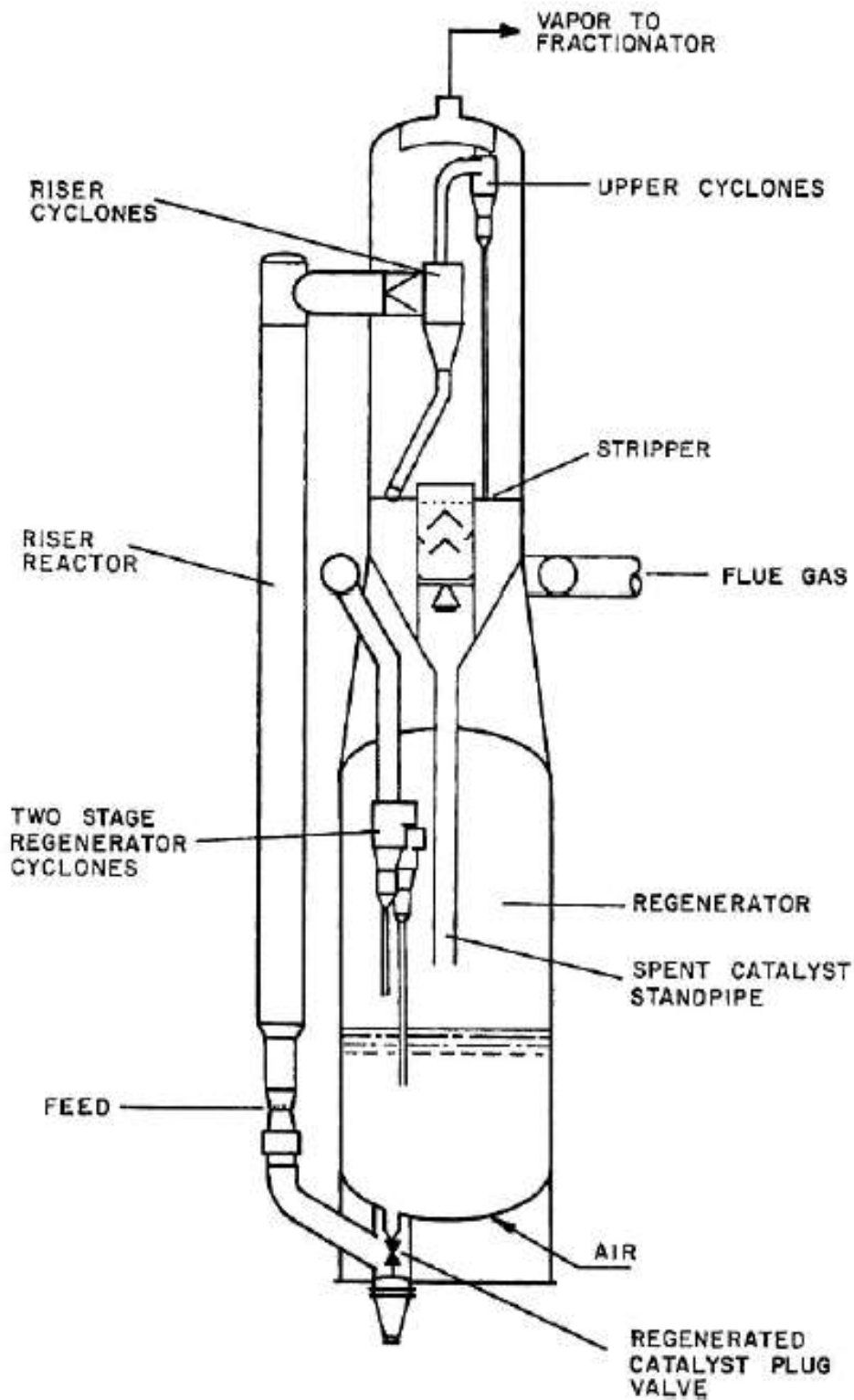
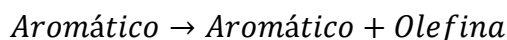
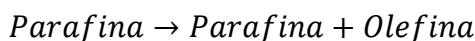


Figura 4: Convertidor Catalítico M. W. Kellogg.  
 (Fuente: James H. Gary, Glenn E. Handwerk (2001). *Petroleum Refining Technology and Economics*. (4th ed.). New York: Marcel Dekker, p. 102)

### **Reacciones de Desintegración Catalítica**

Los productos formados a partir de la desintegración catalítica son resultado de una serie de reacciones primarias y secundarias. Las reacciones primarias son aquellas que involucran rupturas iniciales de enlaces carbono-carbono seguidas inmediatamente por una neutralización del carbocatión.

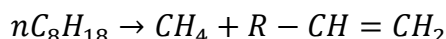
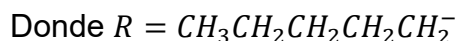
Las reacciones primarias pueden ser representadas de la siguiente forma:



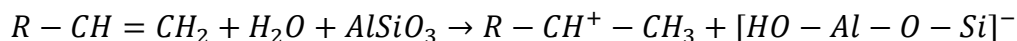
A partir de la desintegración térmica de las n-parafinas, se lleva a cabo la adición de un protón procedente del catalizador formando carbocationes que se descomponen por medio de la ruptura del enlace carbono-carbono del átomo de carbón ubicado en la posición beta con respecto al carbocatión, para formar olefinas. El carbocatión propaga la reacción en cadena transfiriendo un protón desde la n-parafina para formar una parafina de menor tamaño.

A continuación se ejemplifica esta reacción para n-octano:

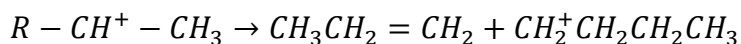
*Paso 1:* Reacción de iniciación por medio de desintegración térmica.



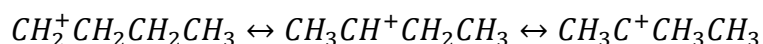
*Paso 2:* Intercambio de protón.



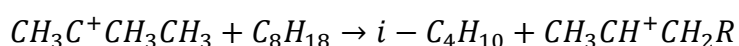
*Paso 3:* Escisión Beta.



**Paso 4:** Rearreglo a una estructura más estable donde la molécula con un carbocatión terciario es más estable que aquella con el carbocatión secundario, la cual a su vez es más estable que la molécula con un carbocatión primario.



**Paso 5:** Transferencia de protón



Es a partir de este mecanismo que se forma un nuevo carbocatión y la reacción puede volverse a repetir. Sin embargo a pesar de que el mecanismo sea esencialmente el mismo, existen ciertas diferencias entre las reacciones de diversos tipos de hidrocarburos.

### ***Desintegración catalítica de Parafinas***

La desintegración catalítica de parafinas se caracteriza por producir en los gases generados una importante cantidad de hidrocarburos de tipo  $C_3$  y  $C_4$ . Las velocidades de reacción y los productos están definidos por la estructura de la molécula de parafina, por los isómeros de estructuras ramificadas y por la formación de hidrocarburos aromáticos resultantes de las reacciones secundarias donde se involucran las olefinas. En cuanto a las velocidades de reacción, el efecto del catalizador es mayor cuando las moléculas comprenden una mayor cantidad de átomos de carbono, tomando en cuenta que dicho efecto es apreciable a partir de moléculas con 6 carbonos.

La velocidad de desintegración catalítica se ve también influenciada por la estructura de la molécula. Aquellas que poseen carbonos terciarios craquean más rápidamente

que aquellas que tienen en su estructura carbonos cuaternarios, ya que estos son más estables. Los compuestos que comprenden ambos tipos de carbonos tienden a neutralizarse las unas a las otras.

### ***Desintegración catalítica de Olefinas***

Las velocidades de la desintegración catalítica de olefinas son mucho mayores que aquellas de las parafinas. Las reacciones principales son:

1. Ruptura del enlace carbono-carbono
2. Isomerización
3. Polimerización
4. Saturación, amortiguación y formación de carbón

### ***Desintegración catalítica de Cicloalcanos***

La reacción más importante dentro de la desintegración catalítica de cicloalcanos en presencia de aluminosilicatos es la deshidrogenación para la obtención de aromáticos. Existe también ruptura del enlace carbono-carbono en el anillo y en las cadenas laterales, aunque a temperaturas menores a los 1000°F esta reacción es mucho más importante. La deshidrogenación se presenta de forma regular en cicloalcanos que contienen 9 carbonos o más, lo que tiene como resultado gasolinas de alto octanaje.

### ***Desintegración catalítica de Hidrocarburos Aromáticos***

Los hidrocarburos aromáticos con grupos alquilo que contienen menos de 3 átomos de carbono no son muy reactivos. La reacción predominante dentro del grupo de hidrocarburos aromáticos con largas cadenas alquílicas es aquella donde se separan estas cadenas sin causar la ruptura del anillo. La ruptura del enlace carbono-carbono se lleva a cabo de forma adyacente al anillo y los compuestos de

benceno que contienen grupos alquilo pueden ser craqueados prácticamente en su totalidad para llevar a cabo la recuperación del benceno.

### ***Catalizadores***

Los catalizadores empleados en el proceso de desintegración catalítica se dividen en 3 categorías: aluminosilicatos naturales ácidos, combinaciones amorfas de sílice-alúmina y zeolitas.

La mayoría de los catalizadores de uso comercial pertenecen a la categoría de las zeolitas debido a que poseen ventajas considerables con respecto a los otros dos tipos de materiales, dentro de las cuales destacan:

1. Mayor actividad
2. Mayor producción de gasolinas a una conversión dada
3. Producción de gasolinas que contienen una mayor porción de parafinas e hidrocarburos aromáticos
4. Menor producción de coque
5. Mayor producción de isobutano

La alta actividad de los catalizadores para desintegración catalítica del tipo zeolitas permite tener tiempos de residencia reducidos y por lo tanto los diseños de unidades FCC modernas están enfocados en llevar a cabo la mayor parte de la desintegración catalítica dentro del Riser. Esto resulta ventajoso en cuanto a que se reduce la cantidad de carbón depositada en el catalizador permitiendo mantener la actividad y selectividad del mismo. Adicionalmente, estas mejoras permiten diseñar unidades con Risers independientes que pueden ser usados para llevar a cabo la desintegración catalítica de forma independiente entre la corriente de alimentación

fresca y las corrientes de recirculación, permitiendo así operarlos a sus respectivas condiciones de operación óptimas.

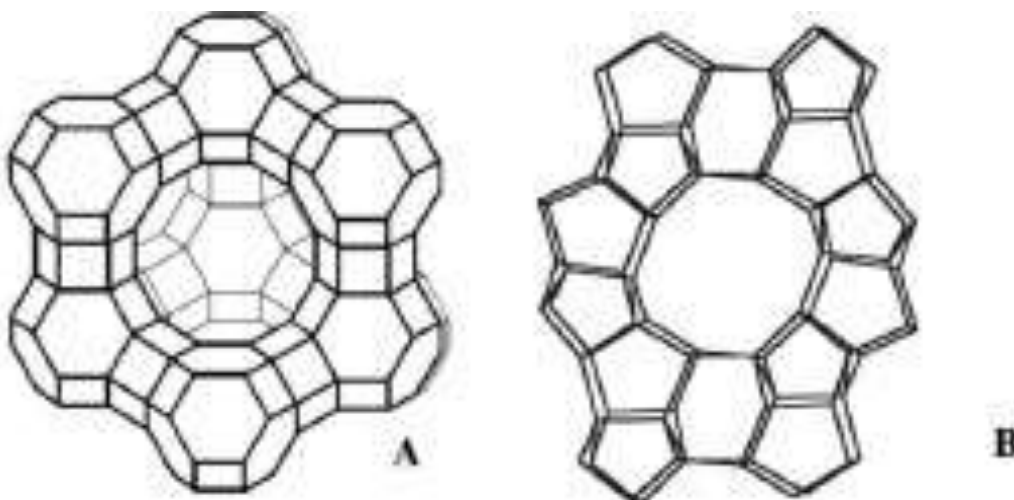
Los efectos catalíticos de las zeolitas pueden ser alcanzados de forma adecuada al tener una mezcla del 10 al 25% de este material con un catalizador amorfo de sílice-alúmina. Los catalizadores amorfos poseen una mayor resistencia estructural y tienen un costo menor que las zeolitas, por lo que llevar a cabo la operación empleando dicha mezcla resulta muy conveniente y por este motivo, la mayoría de los catalizadores de uso comercial contienen un 15% de zeolitas.

Por otra parte, los compuestos que contienen nitrógeno, vanadio, hierro, níquel y cobre envenenan al catalizador. El nitrógeno reacciona con los centros ácidos del catalizador, reduciendo su actividad. Los metales tienden a depositarse y acumularse dentro del catalizador promoviendo la formación de coque, dificultando el proceso de regeneración. Se considera que el níquel tiene un efecto de envenenamiento del catalizador 4 veces mayor que el vanadio.

Aunque los depósitos de níquel y vanadio reducen la actividad y selectividad del catalizador al ocupar los sitios activos, el efecto preponderante responsable del envenenamiento es la formación de coque, reduciendo considerablemente la producción de gasolinas. El efecto del níquel puede ser parcialmente contrarrestado por medio de la adición a la alimentación de inhibidores tales como antimonio o compuestos de bario y por medio de la adición al catalizador de finas partículas de bario, titanato de estroncio. El óxido de magnesio puede ser empleado en la elaboración del catalizador para atrapar al vanadio dentro de la operación. Los procesos de remoción de metales pueden también ser empleados para lograr reactivar al catalizador, con lo que es posible controlar el equilibrio de concentración



de metales dentro del catalizador a un nivel en el cual la demanda de catalizador fresco necesaria para mantener la actividad y selectividad se iguala con las pérdidas de catalizador irrecuperables.



*Figura 5:* Representación de una estructura de Zeolita tipo Y (A) y de una zeolita ZSM-5 (B).  
(Fuente: Claudio J. A. Mota, Nilton Rosenbach Jr. Carbocations on zeolites. Quo vadis? *Journal of the Brazilian Chemical Society* [en línea]. 7 de julio 2011, vol.22 nº7. [fecha de consulta: 21 de febrero 2016]. Disponible en: [www.scielo.br](http://www.scielo.br))

### **Pretratamiento de la Alimentación**

Debido a los requisitos de bajo contenido de azufre y nitrógeno en las gasolinas es necesario llevar a cabo un pretratamiento del crudo alimentado a la unidad de FCC. Al llevar a cabo dicho tratamiento, es posible reducir el contenido de estos compuestos en los productos del proceso. Además, al adicionar hidrógeno a la alimentación se incrementa la producción de nafta y aceite cíclico ligero sin provocar con esto una disminución del contenido de olefinas ni del octanaje en las gasolinas.

La unidad de hidrotratamiento puede ser operada de diversas maneras: como unidad hidrosulfuradora (HDS), como unidad de hidrosintegración (MHC) o como una unidad de conversión parcial por medio de hidrosintegración. En todos los casos, es necesario que el contenido de azufre en la alimentación sea menor a

135 partes por millón (PPM) para lograr producir gasolinas que contengan menos de 50 PPM de azufre y menor a 85 PPM para obtener gasolinas con menos de 30 PPM de azufre.

Al llevar a cabo el pretratamiento por medio de unidades HDS o MHC, es necesario operar a presiones comprendidas entre 800 y 1000 psig. Si el pretratamiento se lleva a cabo con una unidad de conversión parcial por medio de hidrodésintegración, es necesario operar a presiones comprendidas dentro del rango de 1400 a 1600 psig, para lograr así llevar a cabo la hidrogenación de los anillos aromáticos.

### ***Variables de Proceso***

Adicionalmente a la naturaleza y las características de la alimentación, las principales variables de operación que afectan la conversión son: la temperatura de desintegración, la cantidad de catalizador empleada, el tipo de catalizador y relación de reflujo.

Dentro de los límites normales de operación, al aumentar el tiempo de reacción, la cantidad de catalizador, la actividad del catalizador o el tiempo de contacto entre el catalizador y la alimentación, se logra aumentar la conversión. Sin embargo al aumentar el flujo de alimentación al reactor se produce el efecto opuesto y la conversión disminuye. Cabe mencionar que incrementar la temperatura de operación a cierto nivel puede aumentar la producción de coque y el número de octanos y puede disminuir la producción de gasolina por lo que una mayor conversión no es necesariamente sinónimo de una mayor producción de combustible.

En muchas de las unidades FCC, la conversión y capacidad de procesamiento están limitadas por la capacidad que tiene el regenerador para quemar el coque producido. Dicha impedimento puede deberse a los límites en cuanto a la capacidad de

compresión de aire o a las temperaturas de postcombustión en la última etapa de los ciclones del regenerador. Además, con la tendencia creciente de los crudos a ser más pesados, la potencial formación de carbón dentro de las unidades FCC incrementa por lo que las unidades que carecen de capacidad de procesar grandes cantidades de coque recurren a la adición de oxígeno dentro del regenerador para contrarrestar este efecto. Existe un aumento promedio en la adición de oxígeno del 24 al 30% en volumen y este recurso se ve limitado por la capacidad que tiene el regenerador de remover el calor generado por la combustión.

En las unidades de lecho fluidizado, la presión de operación del reactor está generalmente limitada a 15 o 20 psig, debido al diseño de la unidad y por lo tanto no es posible manipular esta variable en la operación. Un incremento en dicha presión provocaría un aumento de la producción de coque y una disminución del octanaje de la gasolina.

### **Simulación**

Cabe mencionar para la correcta comprensión de este apartado que por un lado la simulación del reactor se llevó a cabo con el simulador Aspen HYSYS V8.8 y por el otro lado se realizó la simulación de la sección contigua al reactor con la ayuda del simulador Aspen Plus.

### **Simuladores**

Cuando se habla de simuladores, existe una tendencia generalizada a considerar que cualquier ingeniero químico que posea un mínimo de experiencia es capaz de manipularlos y obtener resultados que representen de forma adecuada el proceso en el cual se trabaje. Sin embargo, llevar a cabo la simulación de un proceso complejo requiere de mucha experiencia para lograr llegar a una convergencia en los resultados. Un claro ejemplo de ello es cuando se pretende simular un equipo que

contenga corrientes de recirculación y en el caso específico de las unidades de FCC, lograr replicar el funcionamiento de la columna fraccionadora principal puede resultar sumamente complejo ya que esta cuenta con una cantidad considerable de corrientes de este tipo. Para lograr obtener resultados correctos es necesario considerar diversos factores tales como la importancia de tener datos de partida confiables, por ejemplo conocer con mucha precisión la composición del crudo. En cuanto al modelo matemático a emplear, los simuladores por lo general contienen una lista de opciones recomendadas en función del proceso que se requiera simular.

En otras palabras, para poder operar un simulador de proceso, el ingeniero debe de disponer del criterio adecuado para comprender los errores que puedan surgir para poder llevar a cabo las modificaciones necesarias que permitan llegar a los resultados correctos. Cabe aclarar que las simulaciones raramente logran representar el funcionamiento de una operación de manera exacta.

### ***Modelos Termodinámicos***

Los modelos termodinámicos constituyen desarrollos matemáticos que permiten evaluar el comportamiento termodinámico de una sustancia pura o de una mezcla bajo condiciones dadas. Estas condiciones pueden ser presión, volumen, temperatura, polaridad entre otras. Dentro de la industria petrolera se emplean modelos especiales tales como Chao-Seader, Grayson Streed o Lee-Erbar-Edmister.

En la simulación de la unidad FCC N° 2 (U-13000) de la Refinería General Lázaro Cárdenas, se hará uso de la ecuación de estado Peng-Robinson para calcular las propiedades de los componentes en la sección del Reactor. Para calcular las propiedades de los componentes en la región de la fraccionadora se hará uso del modelo de Chao-Seader, el cual figura dentro del simulador Aspen Plus V8.8 como

uno de los modelos adecuados para lograr obtener resultados adecuados en las simulaciones de refinerías.

El modelo de Chao-Seader hace uso de 5 herramientas principales dentro de su funcionamiento para realizar la estimación de las variables de proceso:

- La correlación Chao-Seader para coeficientes de fugacidades de estado de referencia
- El modelo Scatchard-Hildebrand para los coeficientes de actividad
- La ecuación de estado Redlich-Kwong para las propiedades de la fase vapor
- La ecuación de estado Lee-Kesler para las entalpías de las fases líquido y vapor
- El método API para el volumen molar líquido, la viscosidad y la tensión superficial

### ***Ecuaciones de Estado***

Las ecuaciones de estado son funciones que relacionan las variables de estado dentro de un sistema termodinámico en equilibrio. En general estas variables son presión, volumen y temperatura. La ecuación de estado más sencilla es la del gas ideal, la cual se muestra a continuación:

$$PV = nRT$$

Esta ecuación de estado hace caso omiso de diversos factores, es decir que no considera ni las fuerzas de atracción ni las de repulsión entre las moléculas. Además considera que la energía cinética es directamente proporcional a la temperatura. Por ser un modelo tan básico, son raros los gases que pueden seguir el comportamiento descrito por esta ecuación. Sin embargo, el comportamiento de los gases

monoatómicos en condiciones de baja presión y alta temperatura pueden ser modelados a partir de esta ecuación.

La mayoría de las ecuaciones de estado recurren a las propiedades críticas de las sustancias para lograr relacionar las variables que permiten describir el comportamiento del sistema. Para lograr comprender el significado de las propiedades críticas es importante recordar las diferencias que existen entre los líquidos y los gases. Un líquido tiene una densidad relativamente alta que es poco sensible a las variaciones de presión y temperatura, en cambio un gas tiene una densidad relativamente baja que es muy sensible a los cambios de presión y temperatura y tiende a acercarse a cero en cuanto menor sea esta presión a temperatura constante. La diferencia entre ambos estados se ve reducida a presiones elevadas, a las cuales el líquido y el gas tienen densidades similares. En la figura 6 se puede observar cómo es posible clasificar los diferentes estados de una sustancia pura en relación a la curva de coexistencia de las fases líquido-gas y el punto crítico. Si se aumenta la temperatura del fluido a una presión constante, se provoca una transición de fase hacia una segunda fase fluida, el fluido original era un líquido y la transición ocurre sobre la curva de coexistencia líquido-gas. Dicha curva termina en el punto crítico, en el cual todas las propiedades intensivas del líquido y gas se vuelven las mismas. El estado fluido de una sustancia pura a una temperatura mayor a la temperatura crítica y una presión mayor a la presión crítica es conocido como fluido supercrítico.

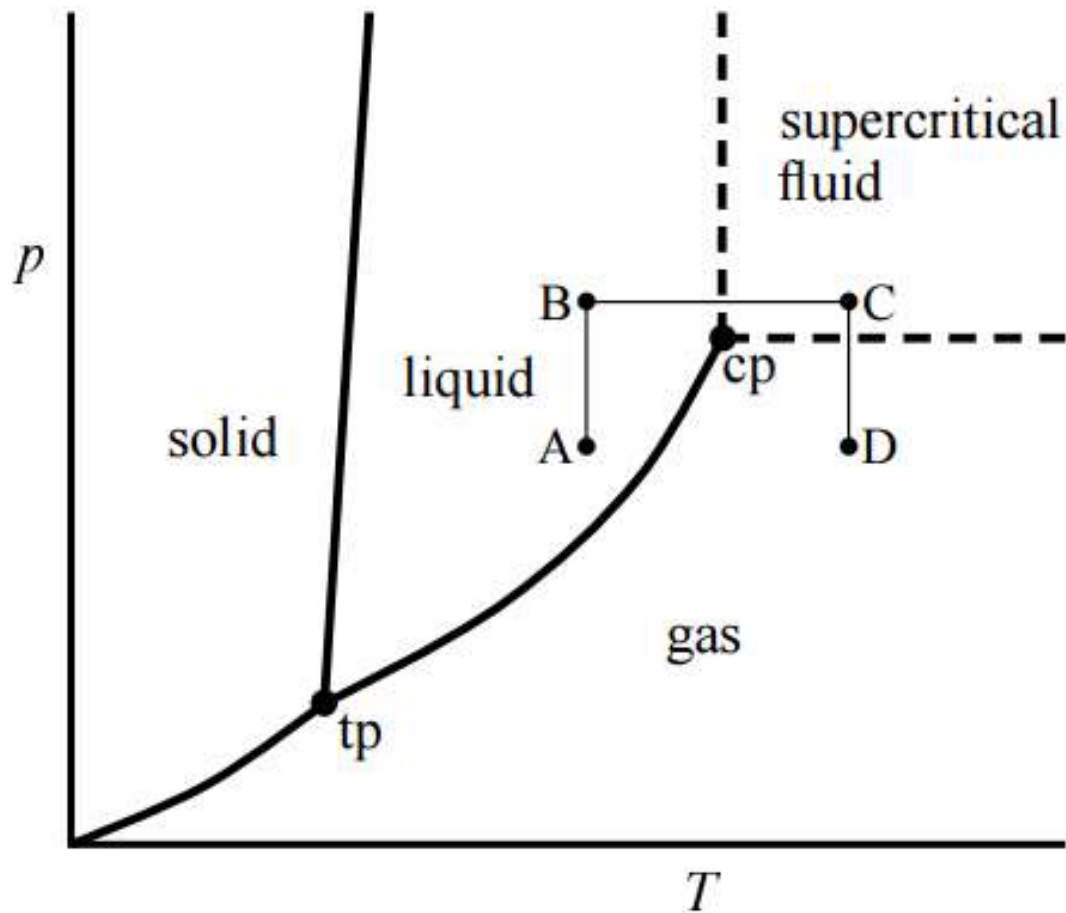


Figura 6: Ejemplo de diagrama de fases.  
 (Fuente: Chemwiki 2006, *Phases and Physical States of Matter*. Recuperado el 25 de febrero 2016; de <http://www.chemwiki.ucdavis.edu>)

En este trabajo de tesis, como se mencionó anteriormente se modelará el sistema empleando dos ecuaciones de estado: la ecuación de estado de Redlich-Kwong y la ecuación de estado de Lee-Kesler. A continuación se procederá a describir brevemente los factores y variables que se encuentran involucrados en dichas ecuaciones.

### **Ecuación de Estado de Redlich-Kwong.**

Esta ecuación de estado es una mejora a la ecuación de Van der Waals, la cual a diferencia de la ecuación del gas ideal, toma en cuenta las fuerzas de interacción entre moléculas. Por lo tanto, la ecuación de estado de Redlich-Kwong incluye los factores a y b los cuales son respectivamente el factor de atracción y el factor de volumen y tiene la siguiente forma:

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

Donde las constantes dependen de la naturaleza del gas y son función de sus presiones y temperaturas críticas:

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

### **Ecuación de estado de Lee-Kesler.**

Esta ecuación de estado permite estimar la presión de vapor a una temperatura dada para todos los componentes que tienen una presión crítica, temperatura crítica y factor acéntrico conocidos.

La ecuación de estado de Lee-Kesler tiene la siguiente forma:

$$\ln P_r = f^{(0)} + \omega \cdot f^{(1)}$$

Dónde:

$$f^{(0)} = 5.92714 - \frac{6.09648}{T_r} - 1.28862 \ln T_r + 0.169347 T_r^6$$

$$f^{(1)} = 15.2518 - \frac{15.6875}{T_r} - 13.4721 \ln T_r + 0.43577 T_r^6$$



$$\omega = -\log_{10}(p_r^{sat}) - 1$$

El factor acéntrico representa una medida de geometría no esférica de las moléculas.

## Simulación del Reactor

### ***Diseño del Reactor***

El primer paso para llevar a cabo la simulación del reactor consiste en especificar las dimensiones del equipo. Para lograr este fin, dentro de la pestaña de simulación se especifica la configuración del equipo. El reactor de la Refinería de Minatitlán trabaja con un Riser y el regenerador es de una etapa.

El siguiente paso involucra definir la geometría del equipo. Para esto se accede a la pestaña Geometría donde se especifican:

- Altura y diámetro del Riser
- Altura y diámetro de la zona de terminación del Riser
- Altura, diámetro y diámetro del ánulo del Riser
- Altura y diámetro de la cama densa del regenerador, diámetro de la fase diluida del regenerador, diámetro de la interfase, altura y diámetro internos de los ciclones y diámetro externo de los ciclones

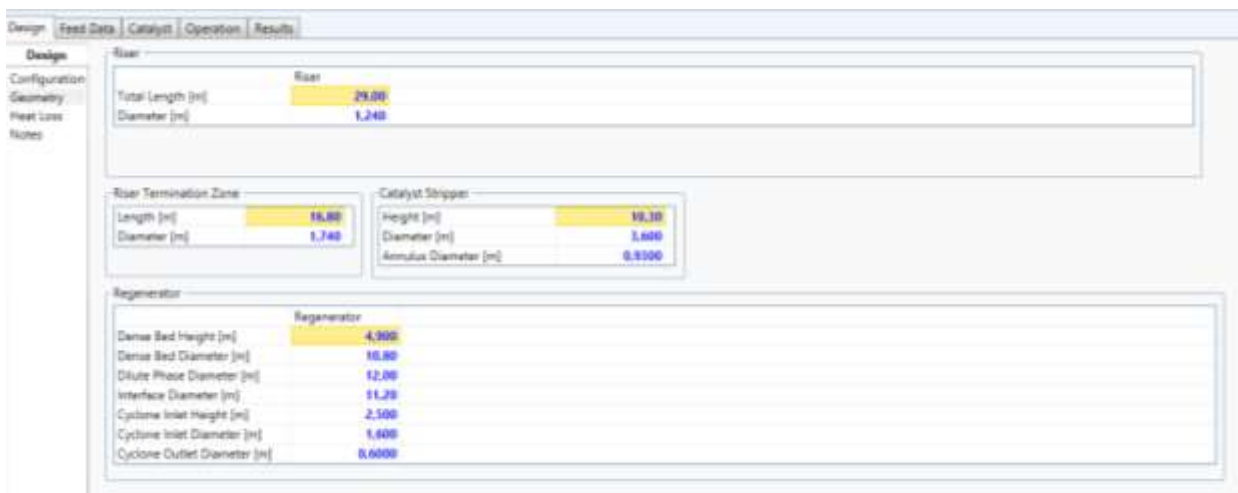


Figura 7: Pantalla de Geometría del Reactor en Aspen HYSYS V8.8.

Tras haber definido la geometría del reactor es necesario indicar las pérdidas de calor. En este caso la simulación se llevará a cabo considerando que el reactor trabaja de forma adiabática por lo tanto todas las pérdidas de calor son nulas. Cabe mencionar que esta consideración es un claro ejemplo de las diferencias que existen entre el comportamiento real de una operación y la representación computacional que se puede lograr con la ayuda de un simulador. Para minimizar estas diferencias es necesario llevar a cabo estudios profundizados del comportamiento de los equipos en la operación real, entre más datos se dispongan, más apegada será la simulación a la realidad.

### ***Alimentación***

A continuación es necesario especificar la alimentación en la opción "propiedades" localizada dentro de la pestaña "datos de la alimentación". El simulador Aspen HYSYS V8.8 ofrece 3 diferentes opciones para definir las propiedades de la alimentación:

- **Ensayo:** En esta opción es posible introducir las propiedades del crudo de forma automática a partir de la base de datos del mismo simulador. La refinería de Minatitlán trabaja con crudo Maya y dentro de la base de datos se encuentran 3 distintos paquetes de propiedades para este crudo: Maya-1991, Maya-2000 y Maya-2010. Tras elegir el tipo de crudo en la base de datos es necesario definir los puntos de corte superior e inferior, además de la fracción de azufre procesada.
- **Propiedades de bulto:** Esta opción requiere de la introducción de distintas propiedades del crudo, tales como la gravedad API, la curva de destilación, el contenido de nitrógeno, el contenido de azufre, el contenido de metales, entre otras.

- Cinética de bulto: Esta opción además de la curva de destilación y las propiedades de bulto, requiere de las concentraciones porcentuales de cada componente de la alimentación.

En este trabajo de tesis se trabajará con las propiedades de bulto ya que la información que se dispone es más apegada a los requisitos que demanda esta opción.

A continuación se muestran las propiedades del crudo con el cual trabaja la refinería de Minatitlán. Cabe mencionar que no se dispone de algunos de los datos que requiere el simulador para su funcionamiento, por lo que se procedió a investigar valores similares en la literatura.

Descripción	Gasóleo Atmosférico	Gasóleo de Vacío Liviano	Gasóleo de Vacío Pesado	Gasóleo Desulfurado del COKER	Alimentación Combinada al Convertidor
Crudo Origen	MAYA	MAYA	MAYA	MAYA	MAYA
Porcentaje Vol. Del Total [%]	15.06	19.02	34.35	31.57	100
Gravedad Específica [°API]	27.01	23.62	18.38	23.23	22.2
Porcentaje de Hidrodesulfurados [%HDS]	0	0	0	90	28.4
Contenido de Azufre [%p]	2.33	2.58	3.2	<0.2	2.02
Viscosidad [Pa.s@50°C]	0.0136	0.021	0.067	0.046	0.001
Nitrógeno Total [%p]	0.073	0.092	0.19	<0.05	0.1
Nitrógeno Básico [ppmp]	243	308	630	<165	300
Metales [ppmp]	0.02	0.62	3,5	<1	1.2
Punto de Inflamación [°C]	52	140	242	145	
Número de Bromo [g Br/100g]	<2	<2	<2	<2	<2
Punto de Anilina [°C]	69	75	78	90	80
Número de Cetano	56	N/A	N/A	N/A	N/A
Punto de Fluidéz [°C]	14	18	35	25	
Carbón Ramsbottom [%p]	0.34	0.06	0.45	0.3	0.33
Carbón Conradson [%p]	0.34	0.01	0.45	0.3	0.33
Contenido de Sodio [ppmp]	<2	<2	<2	<2	<2
Destilación [°C]	D-86	D-1160	D-1160	D-1160	D-1160
Punto Inicial [°C]	322	314	405	303	303
Punto a 10% [°C]	332	349	437	364	362
Punto a 30% [°C]	360	377	469	408	399
Punto a 50% [°C]	377	395	494	453	422
Punto a 70 % [°C]	393	414	526	505	467
Punto a 90% [°C]	442	448	572	556	536
Punto Final [°C]	459	506	634	670	670
Vanadio [ppmp]	N/A	N/A	N/A	N/A	0.60

Nickel [ppmp]	N/A	N/A	N/A	N/A	0.60
Sodio [ppmp]	N/A	N/A	N/A	N/A	1.90
Hierro [ppmp]	N/A	N/A	N/A	N/A	0.00
Cobre [ppmp]	N/A	N/A	N/A	N/A	0.00

Tabla 3: Propiedades del Crudo de Alimentación de la Refinería de Minatitlán.

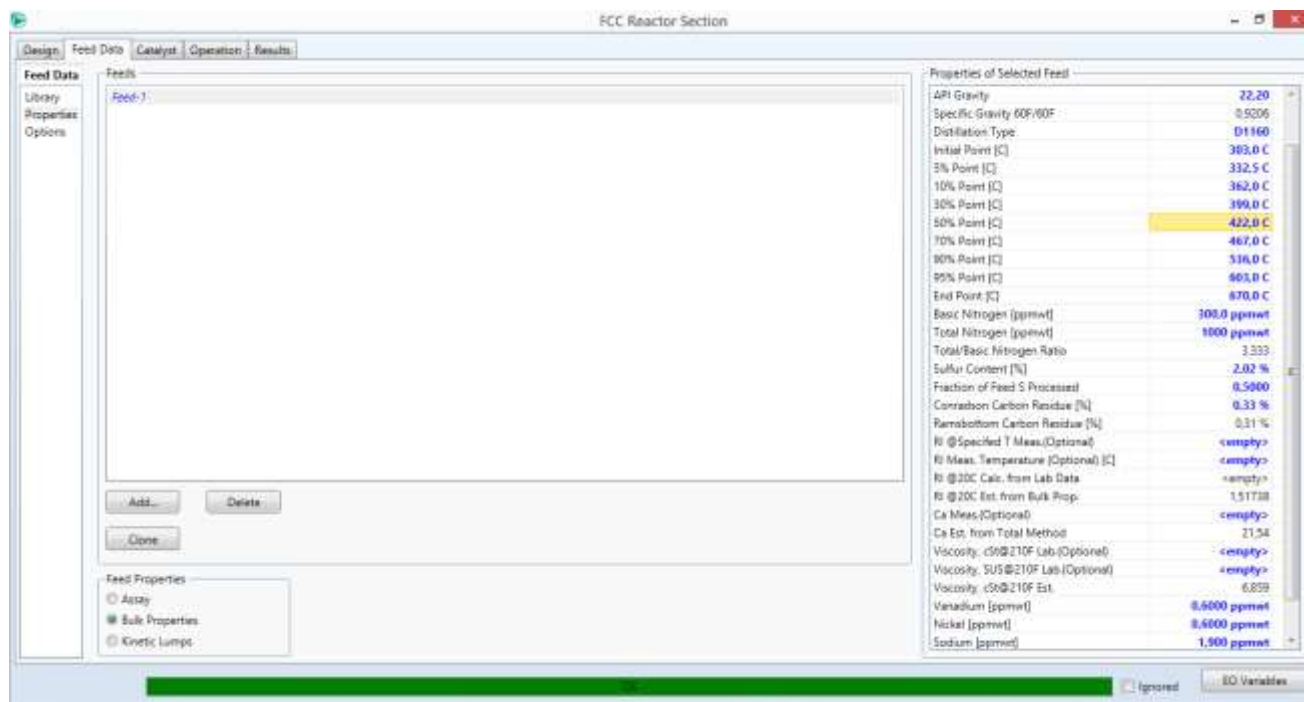


Figura 8: Pantalla de Datos de la Alimentación en Aspen HYSYS V8.8.

### Catalizador

Al igual que para el caso de la alimentación, el simulador Aspen HYSYS V8.8 dispone de una base de datos para el tipo de catalizador que se emplea en la operación. Usualmente PEMEX emplea catalizadores desarrollados por el Instituto Mexicano del Petróleo, sin embargo por falta de información se optó por seleccionar el catalizador tipo A/F-3 ubicado en la base de datos del simulador.

<b>Tipo de Catalizador</b>	A/F-3
<b>Fracción de aditivo ZSM-5 por unidad de masa</b>	0
<b>Selectividad</b>	Estándar
<b>Capacidad calorífica del catalizador, kJ/kg°C</b>	1.10
<b>Capacidad calorífica del coque, kJ/kg°C</b>	1.67
<b>Cantidad de Vanadio en el catalizador al equilibrio, ppmp</b>	750

<b>Cantidad de Níquel en el catalizador al equilibrio, ppmp</b>	500
<b>Cantidad de Sodio en el catalizador al equilibrio, ppmp</b>	2800
<b>Cantidad de Hierro en el catalizador al equilibrio, ppmp</b>	4000
<b>Cantidad de Cobre en el catalizador al equilibrio, ppmp</b>	20
<b>Inventario de Catalizador, kg</b>	9072
<b>Tasa de reposición de catalizador fresco, kg/h</b>	120.6

Tabla 4: Propiedades del Catalizador de la Refinería de Minatitlán.

### Operación

En la pestaña "Operation", se requiere introducir información correspondiente a la operación del equipo tal como la presión, temperatura, flujo de alimentación. A continuación se muestra una tabla en la cual se pueden observar los datos a partir de los cuales se generó la simulación.

<b>Vapor de Dispersión</b>	<b>Flujo Volumétrico, m<sup>3</sup>/h</b>	<b>4313</b>
	Flujo Másico, kg/h	5100
	Temperatura, °C	271
	Presión, kPa	1897
<b>Zona de Agotamiento</b>	Flujo Másico del Vapor, kg/h	1.49E+04
	Temperatura del Vapor, °C	271
	Presión del Vapor, kPa	1897
	Temperatura Fase Densa, °C	636.2
	Temperatura Ciclones, °C	632.9
	Temperatura Gas de Combustión, °C	632,9
	O <sub>2</sub> en Gas de Combustión, %vol	1.5
	CO en Gas de Combustión, %vol	0.761

<b>Regenerador</b>	CO <sub>2</sub> en Gas de Combustión, %vol	16.97
	Relación CO/CO <sub>2</sub> en Gas de Combustión	0.0045
	SO <sub>x</sub> en Gas de Combustión, ppmol	1666.5
	Carbono en Catalizador Regenerado, %masa	0.11
	Flujo Volumétrico de Aire Húmedo, m <sup>3</sup> /h	1.466E+05
	Flujo Másico de Aire Húmedo, kg/h	1.807E+05
	Flujo Volumétrico de O <sub>2</sub> Enriquecido, m <sup>3</sup> /h	2940
	Flujo Másico de O <sub>2</sub> Enriquecido, kg/h	3972
	Presión de O <sub>2</sub> Enriquecido, kPa	300
	Temperatura de O <sub>2</sub> Enriquecido, °C	100
	Temperatura de Salida del Soplador de Aire, °C	208
	Densidad de Bullo de la Fase Densa, kg/m <sup>3</sup>	540
	Catalizador en Almacenamiento, kg	2.424E+05
	Flujo de Agua al Quench, kg/h	0
	Temperatura del Agua al Quench	104.4
	Presión del Agua al Quench, kPa	687.4
<b>Alimentación</b>	Flujo Volumétrico, m <sup>3</sup> /h	277.2
	Flujo Másico, kg/h	2.854E+05
	Temperatura, °C	204
	Presión, kPa	560
<b>Vapor</b>	Flujo Másico, kg/h	5028
	Relación Alimentación/Vapor	0.02
	Temperatura, °C	200
	Presión, kPa	1000

<b>Control de Temperatura del Riser</b>	Temperatura de Salida, °C	541
	Temperatura de Operación, °C	540
	Flujo de Reposición de Catalizador, kg/h	4.96E+06
	Relación Catalizador/Alimentación	17.63

*Tabla 5: Configuración de Datos de Operación del Reactor.*

### **Calibración del Reactor**

Tras haber llevado a cabo la especificación del reactor, es necesario realizar una calibración del equipo, es decir una simulación con datos y resultados conocidos previamente, de modo que al correr una nueva simulación el programa tenga una base para lograr generar nuevos resultados confiables. Para llevar a cabo dicha calibración es necesario acceder a la opción de "Selección de Opciones de Calibración", en la cual se propone una opción "Default" ubicada en la base de datos del simulador.

## Simulación de la Torre Fraccionadora (101-V)

### Alimentación a la Torre Fraccionadora (101-V)

Como se mencionó anteriormente, la simulación de la región contigua al reactor se realiza con el simulador Aspen Plus V8.8, por lo tanto es necesario introducir nuevamente los componentes de la alimentación. En este caso se dispone de la información necesaria para especificar cada componente del crudo craqueado alimentado a la torre fraccionadora. A continuación se muestra una tabla que comprende los componentes de la alimentación a la fraccionadora principal, tomando en cuenta que por las limitaciones del programa, los hidrocarburos más pesados se encuentran modelados por hidrocarburos de tipo  $C_{20}H_{42}$ .

Compuesto	Flujo Molar (kmol/h)
H <sub>2</sub>	246,67
N <sub>2</sub>	92,85
O <sub>2</sub>	3,9158
CO <sub>2</sub>	17,2071
CH <sub>4</sub>	241,04
Eteno	199,9
Etano	99,07
Propeno	584,82
Propano	147,48
I-Buteno	134,355
1-Buteno	134,355
T2-Buteno	134,355
C2-Buteno	134,355



I-Butano	196,69
N-Butano	44,75
I-Pentano	165,83
1-Penteno	23,74
N-Pentano	39,29
2-Metil-1-Buteno	5,45
3-Metil-1-Buteno	7,93
2-Metil-2-Buteno	84,06
2-Metil-1,3- Butadieno	7,04
T2-Penteno	53,44
C2-Penteno	30,85
Ciclopentano	2,83
Ciclopenteno	4,14
N-Eicosano	1049,33
Agua	696,02
H <sub>2</sub> S	81,84
SO <sub>2</sub>	0,172

*Tabla 6: Composición de Corriente de Alimentación a Torre Fraccionadora.*

Además de especificar la composición de la corriente de alimentación al equipo, es necesario indicar la temperatura y presión a la cual es alimentada. En este caso esta corriente se alimenta a una temperatura de 548.9°C y una presión de 119.6 kPag.

## Configuración de la Torre Fraccionadora (101-V)

Este equipo es una torre que contiene 20 etapas, con un rehervidor tipo Kettle y no comprende condensador ya que el reflujo es introducido a la torre por medio de una corriente proveniente de un tanque tipo flash externo. Las fases que coexisten en la torre son líquido y vapor y la potencia del rehervidor es de 20000000 Watts.



Figura 9: Pantalla de Configuración de Equipo en Aspen V8.8.

## Corrientes de la Torre Fraccionadora (101-V)

La torre fraccionadora es un equipo que cuenta con un total de 7 corrientes de entrada y 5 corrientes de salida. A continuación se especifica el tipo de corriente, la etapa de alimentación o extracción, su función y el flujo de cada una de ellas.

	Número	Descripción	Flujo (kmol/h)	Etapas
<b>Entrada</b>	8	Efluente del convertidor	4663.77	21
	14-B	Recirculación de nafta pesada	2276.13	6
	22	Retorno de aceite cíclico pesado	1776.47	17
	21C	Recirculación de aceite cíclico pesado	1088.80	19

	12B	Recirculación de tope de fraccionadora	531.76	1
	14F	Recirculación de nafta pesada	4988.12	6
	18A	Retorno de agotador de aceite cíclico ligero	103.53	12
<b>Salida</b>	14	Salida lateral de nafta pesada	6503.25	6
	10	Tope de la fraccionadora	5426.19	1
	17	Aceite cíclico ligero a agotamiento	159,09	12
	21	Salida lateral de aceite cíclico pesado	2865.28	19
	25	Producto de fondo	474.79	20

Tabla 7: Datos de Corrientes de Entrada y Salida a la Torre Fraccionadora.

## Simulación del Absorbedor-Agotador (103-V)

### Configuración del Absorbedor Agotador (103-V)

Este equipo consiste en una torre de 50 etapas con un rehervidor externo a la torre, sin embargo se incluye de la misma forma que un rehervidor tipo Kettle. No comprende condensador ya que el reflujo es introducido a la torre por medio de una corriente proveniente de un tanque tipo flash externo. Las fases que coexisten en la torre son líquido y vapor y la potencia del rehervidor es de 12000000 Watts.



Figura 10: Pantalla de Configuración de Equipo en Aspen V8.8.

### **Corrientes del Absorbedor Agotador (103-V)**

El Absorbedor-Agotador es un equipo que cuenta con un total de 5 corrientes de entrada y 6 corrientes de salida. A continuación se especifica el tipo de corriente, la etapa de alimentación o extracción, su función y el flujo de cada una de ellas.

	<b>Número</b>	<b>Descripción</b>	<b>Flujo (kmol/h)</b>	<b>Etapas</b>
<b>Entrada</b>	12C	Alimentación tope Absorbedor	1006.56	1
	50A	Entrada de reflujo etapa 9	1750.04	9
	51A	Entrada de reflujo etapa 24	2007.54	24
	31	Vapores del separador de alta	1765.38	30
	32	Hidrocarburos líquidos del separador de alta	4313.89	31
<b>Salida</b>	34	Tope del absorbedor	1550.12	1
	50	Enfriamiento de tope del absorbedor	1750.04	9
	51	Enfriamiento de fondo del absorbedor	2007.54	24
	36A	Líquidos del absorbedor	1900	30
	37A	Vapores del agotador	1400	31
	38	Fondo del agotador	2235.72	50

*Tabla 8: Datos de Corrientes de Entrada y Salida al Absorbedor-Agotador.*

## Resultados

### Reactor

	Flujo Volumétrico [m <sup>3</sup> /h]	Flujo Másico [kg/h]	Volumen [%]	Masa [%]
H <sub>2</sub> S	-	3495.49	-	1.36
Gasolina	14.73	12607.67	5.30	4.94
Propano	17.77	9032.11	6.40	3.53
Propileno	25.13	13044.49	9.04	5.11
n-Butano	9.67	5653.75	3.48	2.21
i-Butano	22.67	12792.77	8.16	5.01
Butenos	29.34	17872.37	10.56	7.00
Nafta C5-430F	163.01	124555.69	58.68	48.80
Aceite Cíclico Ligero 430-650F	31.02	28486.41	11.16	11.16
Fondos 650F+	11.86	13401.44	4.27	5.25
Coque	-	14254.52	-	5.58
<b>Total</b>	<b>310.53</b>	<b>255196.77</b>	<b>111.79</b>	<b>100</b>
Conversión	-	-	84.55	83.58

Tabla 9: Resultados de Productos en el Efluente del Reactor.

Gravedad API	61.56
Gravedad Específica	0.73
Azufre [%]	0.11
RON	95.90
MON	84.68
Parafinas [%]	37.86
Olefinas [%]	47.82
Naftenos [%]	6.09
Aromáticos [%]	8.23
Carbón Conradson	0.02
Nitrógeno Básico [ppmw]	0.88

Tabla 10: Resultados de Propiedades en el Efluente del Reactor.

<b>Condiciones de Mezcla de Alimentación al Riser</b>	
Fracción de alimentación no vaporizada a Coque	0.0400
Fracción Mol de mezcla vaporizada	1.6187
Temperatura de punto de rocío [C]	521.2
Temperatura de mezclado [C]	567.2
Presión de mezclado [kPa]	327.8
Compuestos de aceite en la mezcla de alimentación	0.5345
Compuestos de gas de combustión en la mezcla de alimentación	0.2016
Vapor en la mezcla de alimentación	0.2638
Total	1.00
<b>Tiempos de Residencia del Vapor</b>	
Riser [s]	1.65
Fase diluida del reactor [s]	1.46
Total riser + reactor	3.11
<b>Tiempos de Residencia de Sólidos</b>	
Riser [s]	1.67
Fase diluida del reactor [s]	1.49
Total Riser + Reactor	3.16
<b>Velocidades Superficiales del Riser</b>	
Entrada [m/s]	7.543
Salida [m/s]	21.59
<b>Inventario de Catalizador Riser/Reactor</b>	
Riser [kg]	1974
Fase diluida del reactor [kg]	1765
Total Riser + reactor [kg]	3739

Tabla 11: Resultados de Operación del Reactor y Riser.

Temperatura de fase densa [C]	636.2
Temperatura de ciclones [C]	632.9
Temperatura de gas de combustión [C]	632.9
Diferencia de temperatura entre gas de combustión y cama densa [C]	-3.268
O <sub>2</sub> en gas de combustión [% seco]	1.50
O <sub>2</sub> + Ar en gas de combustión [% seco]	2.50
CO en gas de combustión [% seco]	0.76
CO <sub>2</sub> en gas de combustión [% seco]	16.97
Relación CO/CO <sub>2</sub> en gas de combustión	0.04484
SO <sub>x</sub> en gas de combustión [% seco]	0.1666
Coque en catalizador regenerado [%]	0.11
Coque en catalizador gastado [%]	0.44
Flujo de reposición de catalizador [kg/h]	0.000004273
Velocidad superficial de fase diluida [m/s]	0.4253
Tasa de circulación de catalizador en fase diluida hacia ciclones [kg/h]	0.00003635
Emisión de CO <sub>2</sub> en gas de combustión [kg/h]	0.0004479
Emisión de CO <sub>x</sub> en gas de combustión [kg/h]	639.5

Tabla 12: Resultados de Operación del Regenerador.

Flujo molar de aire seco [kgmol/h]	6154
Flujo molar de aire húmedo [kgmol/h]	6331
Flujo molar de O <sub>2</sub> enriquecido [kgmol/h]	124.1
Flujo molar de aire enriquecido [kgmol/h]	6455
Flujo másico de aire seco [kg/h]	1.775E+05
Flujo másico de aire húmedo [kg/h]	1.807E+05
Flujo másico de O <sub>2</sub> enriquecido [kg/h]	3972
Flujo másico de aire enriquecido [kg/h]	1.847E+05
Flujo volumétrico de aire seco [m <sup>3</sup> /h]	1.457E+05
Flujo volumétrico de aire húmedo [m <sup>3</sup> /h]	1.499E+05
Flujo volumétrico de O <sub>2</sub> enriquecido [m <sup>3</sup> /h]	2940
Flujo volumétrico de aire enriquecido [m <sup>3</sup> /h]	1.529E+05
Temperatura ambiental del aire [C]	28
Temperatura de descarga del soplador de aire [C]	208
Temperatura del O <sub>2</sub> enriquecido [C]	100
Temperatura del aire enriquecido [C]	205.9
Presión del aire ambiental [kPa]	101.2
Presión de descarga del soplador de aire [kPa]	325.9
Presión del O <sub>2</sub> enriquecido [kPa]	300
Presión del aire enriquecido [kPa]	325.9
N <sub>2</sub> en aire húmedo [%]	76.79
O <sub>2</sub> en aire húmedo [%]	20.41
H <sub>2</sub> O en aire húmedo [%]	2.80
Porcentaje molar total de aire húmedo [%]	100
Humedad relativa del aire ambiental [%]	75
N <sub>2</sub> en aire enriquecido [%]	75.31
O <sub>2</sub> en aire enriquecido [%]	21.94
CO en aire enriquecido [%]	0
CO <sub>2</sub> en aire enriquecido [%]	0
H <sub>2</sub> O en aire enriquecido [%]	2.75
Porcentaje molar total de aire enriquecido [%]	100

*Tabla 13: Resultados de Operación del Suministro de Aire al Regenerador.*

### Torre Fraccionadora (101-V)

Flujo en kmol/h	Corrientes de Entrada						Corrientes de Salida				
	14B	22	21C	12B	14F	18A	14	10	17	21	25
H <sub>2</sub>	0,38	0,26	0,16	0,24	1,81	0,03	1,09	247,94	0,03	0,42	0,07
N <sub>2</sub>	0,21	0,16	0,10	0,15	1,19	0,02	0,59	93,76	0,02	0,26	0,04
O <sub>2</sub>	0,01	0,01	0,00	0,01	0,08	0,00	0,03	3,99	0,00	0,01	0,00
CO	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	0,01	0,00	0,00	0,18	1,72	0,00	0,04	19,07	0,00	0,00	0,00
CH <sub>4</sub>	0,80	0,38	0,23	1,34	11,02	0,05	2,28	251,81	0,05	0,62	0,10
Eteno	0,16	0,00	0,00	3,62	31,11	0,00	0,45	234,34	0,00	0,00	0,00
Etano	0,18	0,00	0,00	2,79	23,10	0,00	0,51	124,63	0,00	0,01	0,00
Propeno	4,19	0,24	0,15	34,95	38,72	0,04	11,96	650,65	0,04	0,39	0,06
Propano	1,14	0,07	0,04	9,45	6,79	0,01	3,25	161,59	0,01	0,12	0,02
I-Buteno	2,53	0,23	0,14	18,51	7,32	0,03	7,23	155,43	0,03	0,36	0,06
1-Buteno	2,56	0,23	0,14	18,58	7,37	0,03	7,31	155,49	0,03	0,37	0,06
T2-Buteno	2,99	0,28	0,17	21,07	8,05	0,04	8,53	157,86	0,04	0,45	0,07
C2-Buteno	3,17	0,30	0,19	21,96	8,35	0,04	9,06	158,70	0,04	0,49	0,08
I-Butano	3,07	0,27	0,16	23,80	8,89	0,04	8,77	223,61	0,04	0,43	0,07
N-Butano	0,95	0,09	0,05	6,91	2,62	0,01	2,71	52,50	0,01	0,14	0,02
I-pentano	16,07	0,60	0,37	133,36	445,78	0,08	45,91	714,97	0,08	0,97	0,16
1-Penteno	2,16	0,09	0,06	16,59	50,47	0,01	6,17	86,76	0,01	0,15	0,02
N-Pentano	5,32	0,17	0,10	39,94	128,54	0,02	15,20	197,84	0,02	0,27	0,04
2-Metil-1-Buteno	0,41	0,02	0,01	2,94	7,66	0,00	1,18	15,28	0,00	0,04	0,01
3-Metil-1-Buteno	0,66	0,02	0,02	5,76	21,07	0,00	1,90	33,52	0,00	0,04	0,01
2-Metil-2-Buteno	11,44	0,37	0,23	82,85	258,36	0,05	32,69	403,92	0,05	0,60	0,10
2-Metil-1,3-Butadieno	0,43	0,03	0,02	2,50	4,30	0,00	1,22	13,03	0,00	0,05	0,01
T2-Penteno	5,95	0,23	0,14	43,38	129,54	0,03	16,99	215,25	0,03	0,37	0,06
C2-Penteno	4,52	0,14	0,08	32,77	107,26	0,02	12,92	162,44	0,02	0,22	0,04
Ciclopentano	0,20	0,02	0,01	1,14	1,77	0,00	0,57	5,36	0,00	0,02	0,00
Ciclopenteno	0,26	0,02	0,01	1,57	2,53	0,00	0,74	7,76	0,00	0,03	0,01
N-Eicosano	2205,81	1772,20	1086,19	1,97	3639,38	45,06	6302,32	7,04	158,51	2858,39	473,68
Agua	0,02	0,01	0,00	0,01	3,55	57,89	0,06	757,43	0,00	0,01	0,00
H <sub>2</sub> S	0,55	0,03	0,02	3,44	29,77	0,00	1,56	114,02	0,00	0,05	0,01
SO <sub>2</sub>	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,19	0,00	0,00	0,00
<b>Total</b>	<b>2276,14</b>	<b>1776,47</b>	<b>1088,81</b>	<b>531,77</b>	<b>4988,12</b>	<b>103,53</b>	<b>6503,25</b>	<b>5426,19</b>	<b>159,09</b>	<b>2865,28</b>	<b>474,80</b>

Tabla 14: Resultados de Composiciones de Corrientes de Entrada y Salida de la Torre Fraccionadora.



### Absorbedor-Agotador (103-V)

Flujo en kmol/h	Corrientes de Entrada					Corrientes de Salida					
	12C	50A	51A	31	32	34	50	51	36A	37A	38
H <sub>2</sub>	0,45	6,16	6,70	238,58	10,68	247,55	6,16	6,70	1,51	0,65	0,00
N <sub>2</sub>	0,28	3,60	3,92	88,63	6,37	93,51	3,60	3,92	1,22	0,55	0,00
O <sub>2</sub>	0,02	0,27	0,29	3,67	0,47	3,97	0,27	0,29	0,13	0,06	0,00
CO	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	0,33	4,11	4,52	16,58	6,96	18,78	4,11	4,52	3,28	1,83	0,00
CH <sub>4</sub>	2,53	29,90	32,39	224,77	51,50	249,57	29,90	32,39	19,35	9,88	0,00
Eteno	6,86	84,73	93,93	207,75	140,28	228,27	84,73	93,93	78,31	48,32	0,00
Etano	5,28	71,17	80,10	120,84	117,96	119,95	71,17	80,10	73,16	50,96	0,00
Propeno	66,16	385,84	581,48	434,01	1076,53	181,17	385,84	581,48	561,41	423,29	410,82
Propano	17,89	67,74	122,57	93,02	257,64	32,81	67,74	122,57	127,60	95,22	112,92
I-Buteno	35,04	35,54	33,97	23,35	163,92	19,78	35,54	33,97	49,79	48,16	104,57
1-Buteno	35,18	35,81	34,21	23,14	163,58	19,68	35,81	34,21	49,64	47,96	104,62
T2-Buteno	39,89	42,32	40,71	19,00	158,30	19,04	42,32	40,71	48,95	45,74	103,45
C2-Buteno	41,57	44,71	43,10	17,57	156,34	18,52	44,71	43,10	48,86	44,79	103,31
I-Butano	45,05	42,53	40,91	40,93	247,74	29,69	42,53	40,91	75,95	74,11	153,97
N-Butano	13,07	13,79	13,19	6,33	52,76	6,30	13,79	13,19	16,07	15,18	34,60
I-pentano	252,42	285,70	278,70	33,86	608,65	59,49	285,70	278,70	238,22	165,60	431,63
1-Penteno	31,40	35,69	34,90	3,87	73,04	6,97	35,69	34,90	29,54	19,85	51,95
N-Pentano	75,60	86,37	84,62	7,23	161,98	14,37	86,37	84,62	70,29	43,71	116,43
2-Metil-1-Buteno	5,56	6,33	6,19	0,68	12,83	1,22	6,33	6,19	5,23	3,49	9,13
3-Metil-1-Buteno	10,90	12,22	11,88	2,05	29,69	3,12	12,22	11,88	10,63	8,17	20,72
2-Metil-2-Buteno	156,82	179,43	176,10	14,24	328,18	28,94	179,43	176,10	145,71	88,68	235,91
2-Metil-1,3-Butadieno	4,73	5,42	5,32	0,60	10,98	1,03	5,42	5,32	4,49	2,98	7,81
T2-Penteno	82,10	93,86	92,03	8,02	176,54	15,69	93,86	92,03	76,52	47,69	126,76
C2-Penteno	62,03	70,96	69,60	6,06	133,17	11,83	70,96	69,60	57,85	35,98	95,60
Ciclopentano	2,15	2,48	2,44	0,17	4,29	0,34	2,48	2,44	2,01	1,15	3,11
Ciclopenteno	2,97	3,41	3,35	0,30	6,37	0,56	3,41	3,35	2,79	1,72	4,57
N-Eicosano	3,73	4,37	4,31	0,00	4,83	0,00	4,37	4,31	3,58	1,25	3,73
Agua	0,01	0,00	0,00	9,65	0,00	9,67	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H <sub>2</sub> S	6,51	95,27	105,72	120,22	151,76	108,15	95,27	105,72	97,53	72,71	0,10
SO <sub>2</sub>	0,02	0,33	0,38	0,26	0,56	0,16	0,33	0,38	0,36	0,31	0,01
<b>Total</b>	<b>1006,56</b>	<b>1750,04</b>	<b>2007,54</b>	<b>1765,38</b>	<b>4313,89</b>	<b>1550,12</b>	<b>1750,04</b>	<b>2007,54</b>	<b>1900,00</b>	<b>1400,00</b>	<b>2235,71</b>

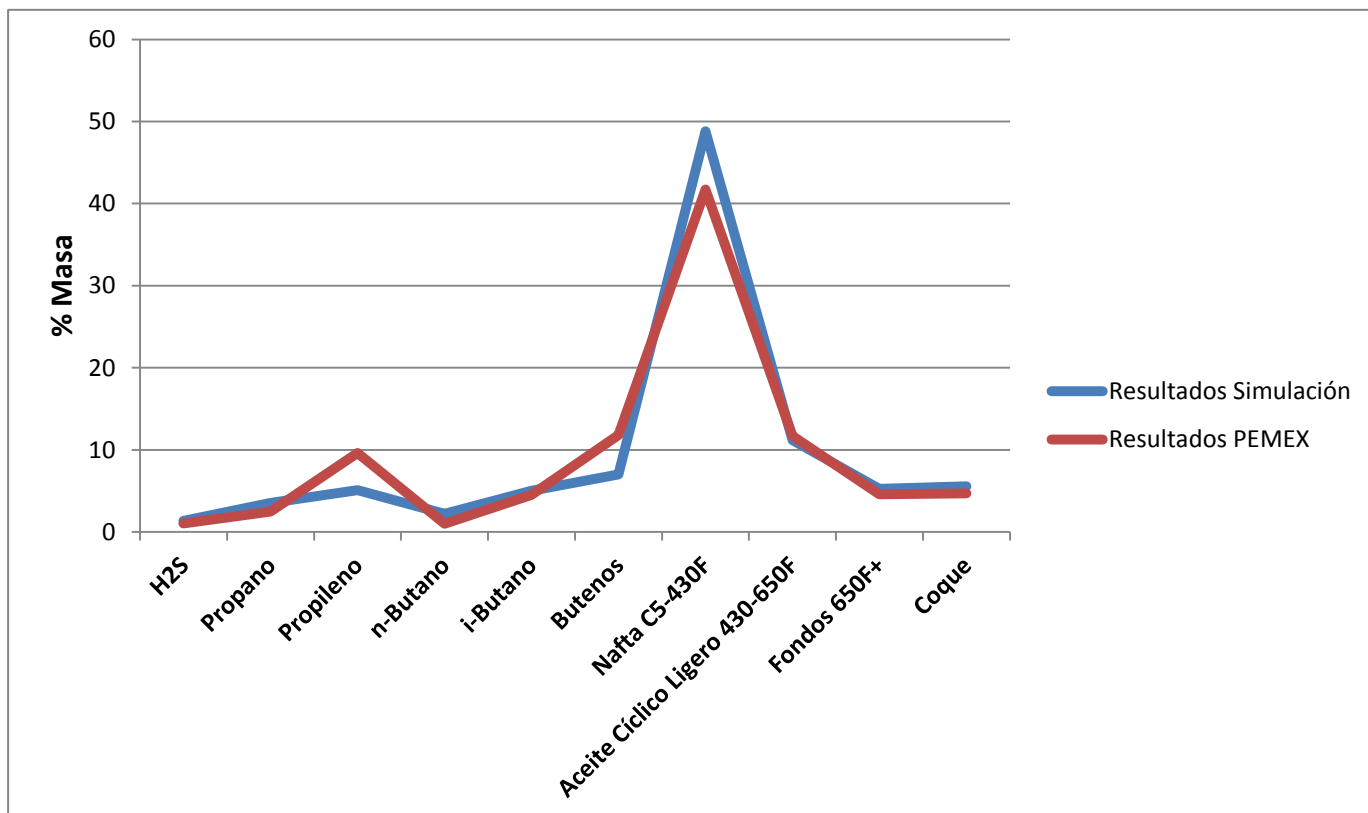
Tabla 15: Resultados de Composiciones de Corrientes de Entrada y Salida del Absorbedor-Agotador.

## Análisis de Resultados

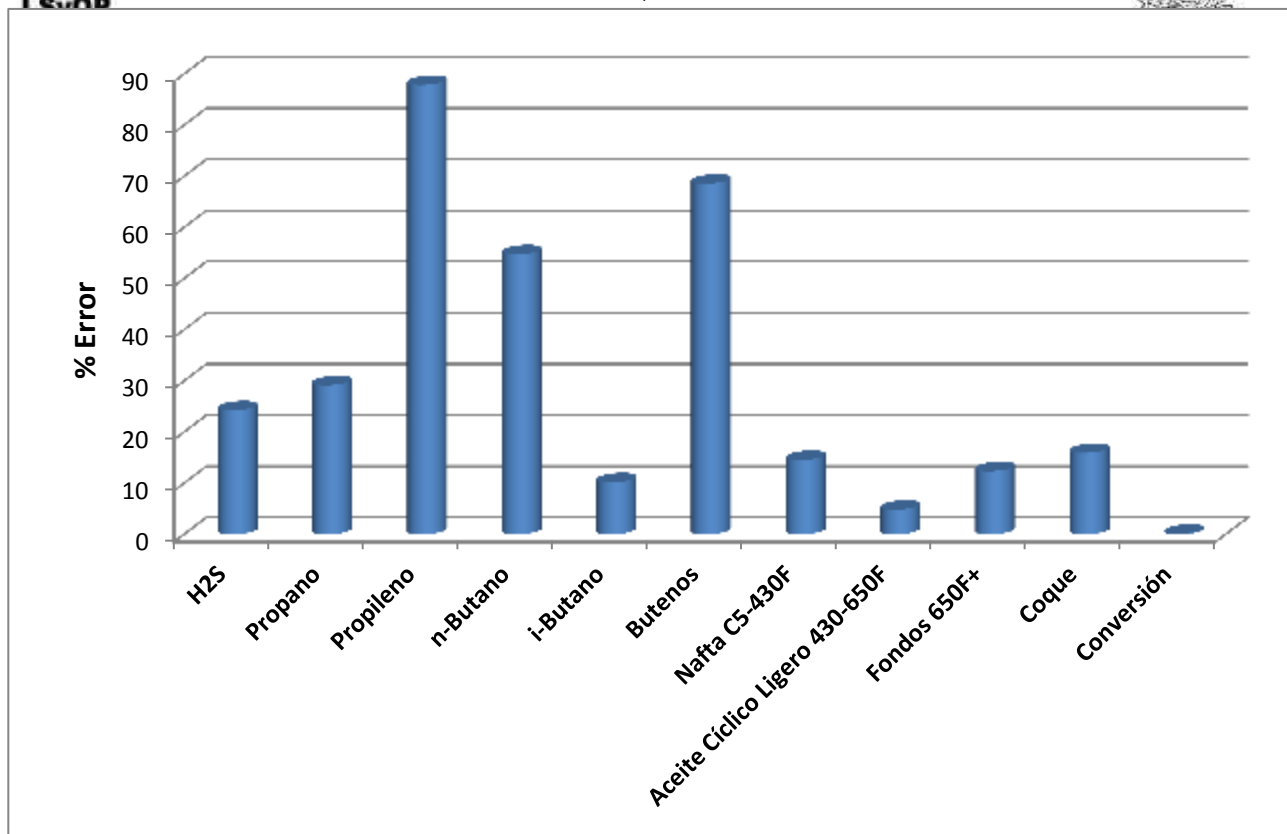
### Reactor

	Resultados Simulación		Resultados PEMEX		% Error Volumen	% Error Masa
	Volumen [%]	Masa [%]	Volumen [%]	Masa [%]		
H <sub>2</sub> S	-	1.36	-	1.03	-	24.26
Propano	6.40	3.53	4.60	2.50	28.12	29.18
Propileno	9.04	5.11	16.90	9.60	86.94	87.87
n-Butano	3.48	2.21	1.60	1.00	54.02	54.75
i-Butano	8.16	5.01	7.30	4.50	10.54	10.18
Butenos	10.56	7.00	17.80	11.80	68.56	68.57
Nafta C5-430F	58.68	48.80	50.50	41.70	13.94	14.55
Aceite Cíclico Ligerio 430-650F	11.16	11.16	11.00	11.70	1.43	4.84
Fondos 650F+	4.27	5.25	3.90	4.60	8.66	12.38
Coque	-	5.58	-	4.69	-	15.95
<b>Conversión</b>	<b>84.55</b>	<b>83.58</b>	<b>85.10</b>	<b>83.70</b>	<b>0.65</b>	<b>0.14</b>

Tabla 16: Comparación entre resultados de Simulación y Resultados de PEMEX a la Salida del Reactor.



Gráfica 6: Comparación de los porcentajes en Masa de los productos obtenidos en la Simulación contra los porcentajes en masa de los productos de la operación real.

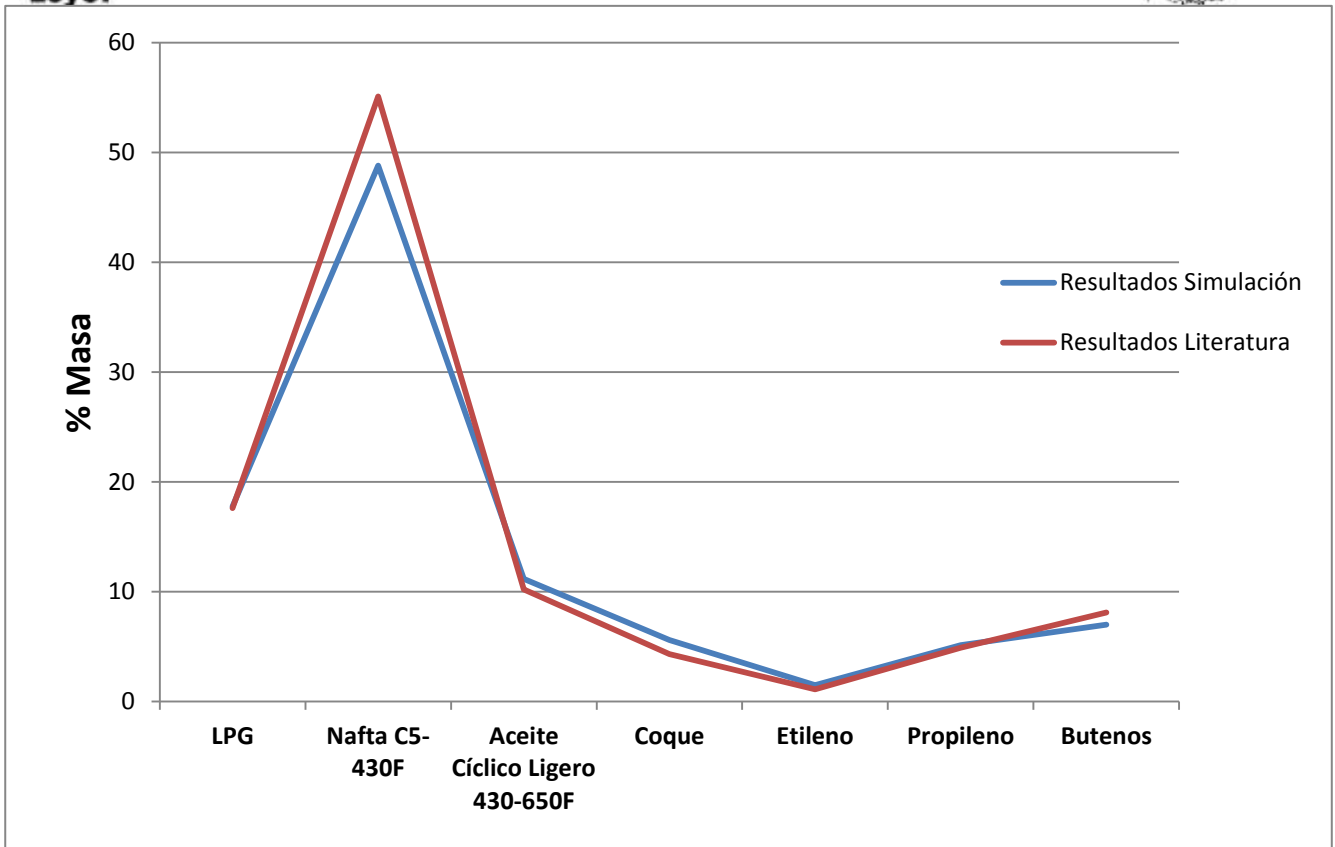


Gráfica 7: Comparación de los porcentajes de error en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor con respecto a los datos de operación de PEMEX.

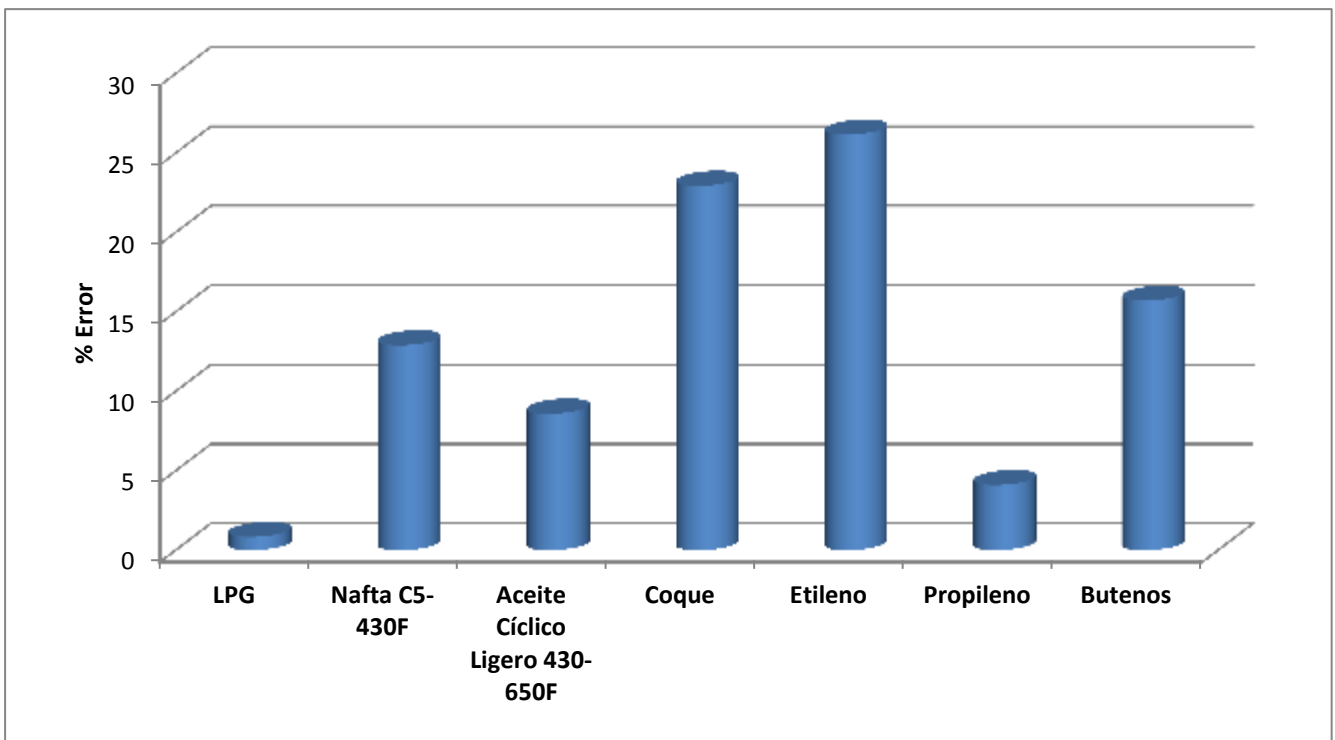
	Resultados Simulación	Resultados Literatura	% Error Masa
	Masa [%]	Masa [%]	
LPG	17.75	17.6	0.84
Nafta C5-430F	48.8	55.1	12.91
Aceite Cíclico Ligero 430-650F	11.16	10.2	8.60
Coque	5.58	4.3	22.94
Etileno	1.49	1.1	26.17
Propileno	5.11	4.9	4.11
Butenos	7	8.1	15.71

Tabla 17: Comparación entre Resultados de Simulación y Resultados de la Literatura a la salida del Reactor.

(Fuente: Jones, David S.J. and Pujadó, Peter R. Handbook of Petroleum Processing. Holanda: Springer, 2006 p. 243)



Gráfica 8: Comparación de los porcentajes en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor contra los porcentajes en peso de los productos reportados en la Literatura.



Gráfica 9: Comparación de los porcentajes de error en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor con respecto a los datos obtenidos en la Literatura.

Tras haber realizado la simulación del Reactor, es posible llevar a cabo una comparación de los principales componentes contenidos en la corriente de salida con respecto a los que se encuentran reportados en el manual de operación de la Unidad Catalítica FCC N° 2 (U-13000) de PEMEX y los resultados obtenidos en la Literatura.

Al hacer dicha comparación es posible observar una cierta desviación de los resultados obtenidos con respecto a los datos de operación real y los que han sido reportados en la literatura. Esta desviación resulta muy variable según el tipo de compuesto a pesar de obtener una conversión con un 0.14% de error con respecto a la reportada por PEMEX. Esto implica que aunque no se tiene una buena capacidad predictiva, se llevan a cabo reacciones dentro del Riser de forma que al considerarlas globalmente se logra una transformación del crudo muy similar a la que se alcanza en la operación real.

Por otra parte, al observar las gráficas 6 y 8 es posible distinguir una tendencia muy similar en cuanto a la obtención de productos principales como lo son el Gas LP, la Nafta y el Aceite Cíclico Ligero. Cabe mencionar que a pesar de tener una desviación considerable al analizar los resultados componente por componente, en un análisis que considera los porcentajes en masa se obtienen resultados muy apegados a los reales.

Las desviaciones que se obtienen en la simulación se deben a los siguientes factores:

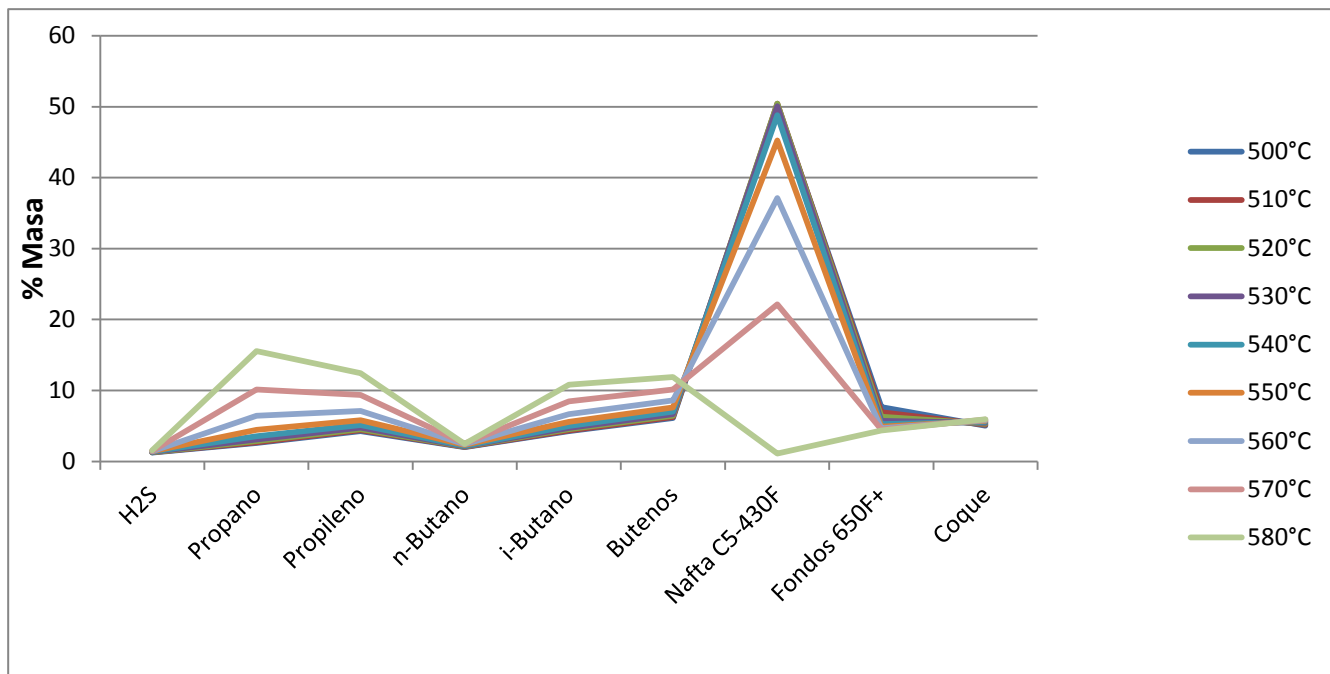
- Los datos ingresados en el simulador para especificar la geometría del Reactor pueden tener cierta desviación con respecto a los reales ya que no se dispone de todas las especificaciones, principalmente para la región del

Regenerador en la cual se estimaron las dimensiones de los ciclones y de las fases densa y diluida.

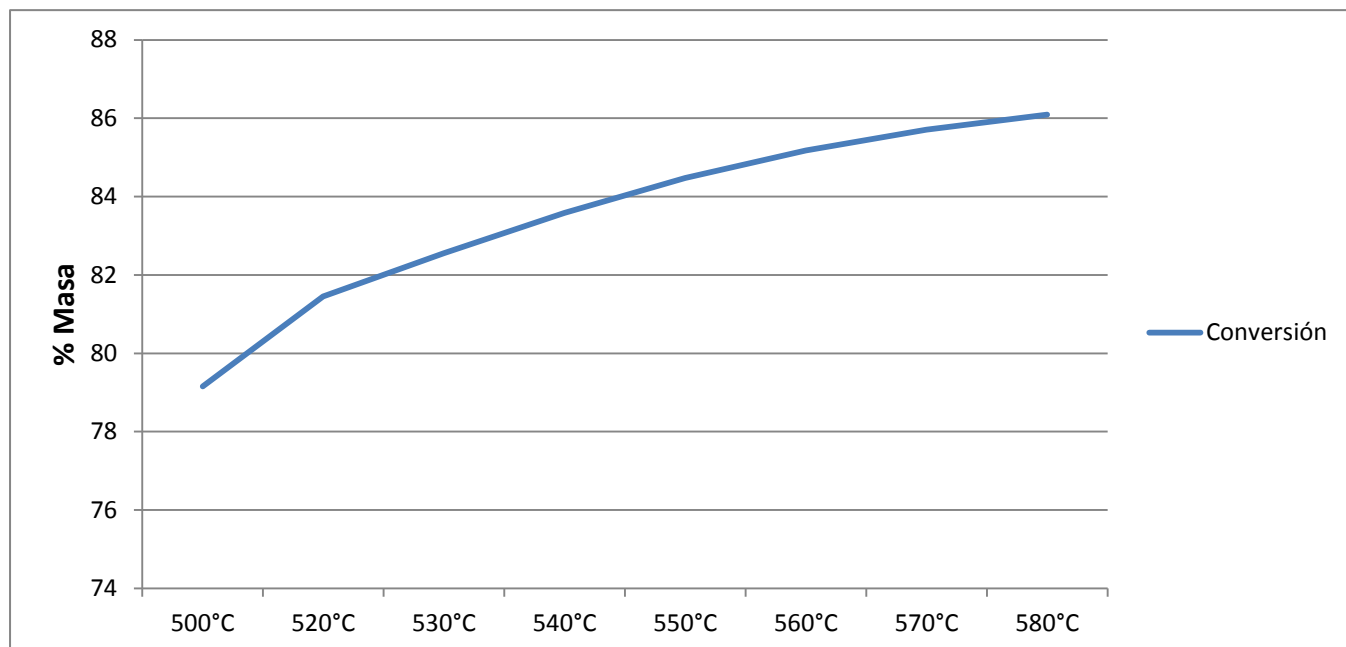
- El diseño del Reactor se llevó a cabo omitiendo las pérdidas de calor, lo cual no sucede en la operación real. Al considerar la operación del Reactor de forma adiabática, se genera una diferencia en la obtención de productos ya que las constantes cinéticas dependen de la temperatura y por lo tanto con un mismo tiempo de residencia los productos obtenidos varían en cuanto a la operación real en la cual existe una transferencia de calor entre el reactor y los alrededores.
- El catalizador empleado en la simulación fue seleccionado dentro de la base de datos del Simulador, sin embargo en el Manual de Operación de la Unidad FCC No. 2 se hace mención del uso de un catalizador tipo REUSY del cual no fue posible conocer las características.
- Ciertos datos de operación del equipo no son mencionados en el Manual de Operación, por lo tanto se tuvo que recurrir nuevamente a la literatura para obtener valores de operaciones similares. Tal fue el caso de la composición y el flujo de gas enriquecido al regenerador y el flujo de agua al Quench, entre otros datos.

### Efecto de la variación de temperatura de operación del Reactor

A continuación se muestran los porcentajes en masa de los principales productos obtenidos y las variaciones en la conversión en el efluente del reactor tras llevar a cabo una modificación en la temperatura de operación.



Gráfica 10: Variación en porcentaje masa de los productos obtenidos a la salida del Reactor en función de la temperatura.



Gráfica 11: Variación en porcentaje masa de la conversión a la salida del Reactor en función de la temperatura.

Como se explicó anteriormente, el Reactor trabaja de forma simultánea por medio de dos equipos, el Riser y el Regenerador. Por lo tanto, el control de la temperatura de

operación del Reactor se lleva principalmente a cabo a través de la variación del flujo de catalizador recirculado al Riser. Esto implica que la variación de temperatura de operación del Reactor conlleva una fluctuación importante en las concentraciones de los productos a la salida del equipo.

En la gráfica 10, a medida que aumenta la temperatura de operación se observa un claro aumento en la producción de compuestos ligeros como el propano y el propileno a expensas de una disminución en la mezcla de los hidrocarburos pesados como la nafta. Esto se debe a que las reacciones de desintegración catalítica, al ser endotérmicas, se ven favorecidas a mayores temperaturas.

Por otra parte, la producción de coque permanece casi constante, lo que indica que el Simulador hace énfasis en adaptar la etapa de regeneración del catalizador para así mantener la actividad del mismo constante

La gráfica 11 permite corroborar la mencionado anteriormente, es decir que el aumento de temperatura se logra por medio de un aumento en la recirculación de catalizador, para lograr reintroducir una mayor carga térmica al Riser. Esto se traduce por una mayor conversión debido a que se dispone de una mayor cantidad de catalizador en la operación. Por lo tanto la operación del equipo debe de equilibrar el producto deseado de las reacciones de desintegración catalítica con los costos de operación que se ven afectados por una mayor demanda de insumos para lograr regenerar al catalizador de modo que se mantenga la temperatura de operación deseada sin afectar la actividad del mismo.



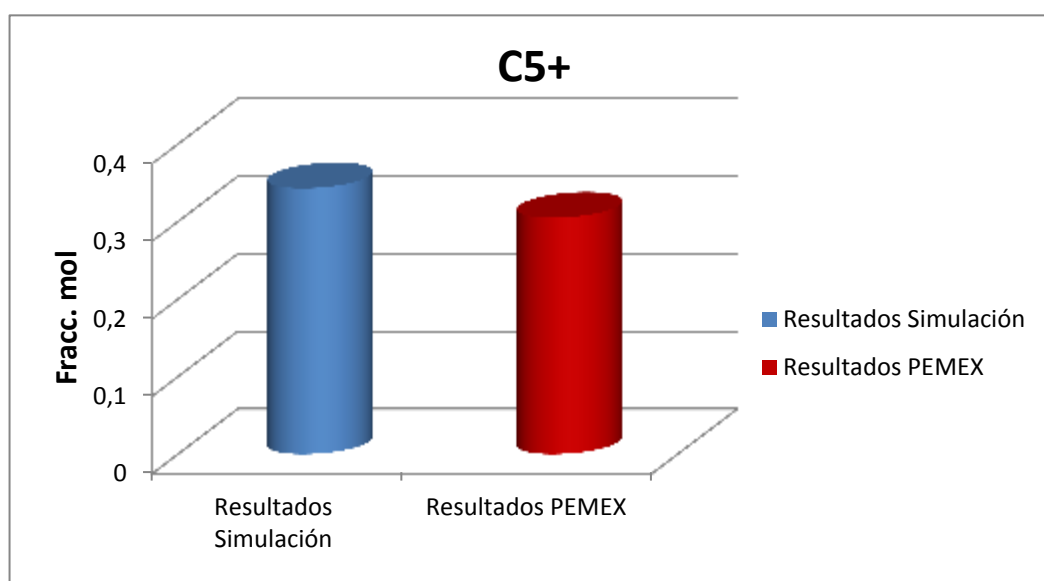
### Torre Fraccionadora (101-V)

A continuación se muestra el análisis de las composiciones en las corrientes de salida de la Torre Fraccionadora. Cabe mencionar que los datos reportados por PEMEX engloban en un mismo grupo al conjunto de Butilenos y también se reagrupa a todos los compuestos que contengan 5 carbonos o más en el grupo C5+.

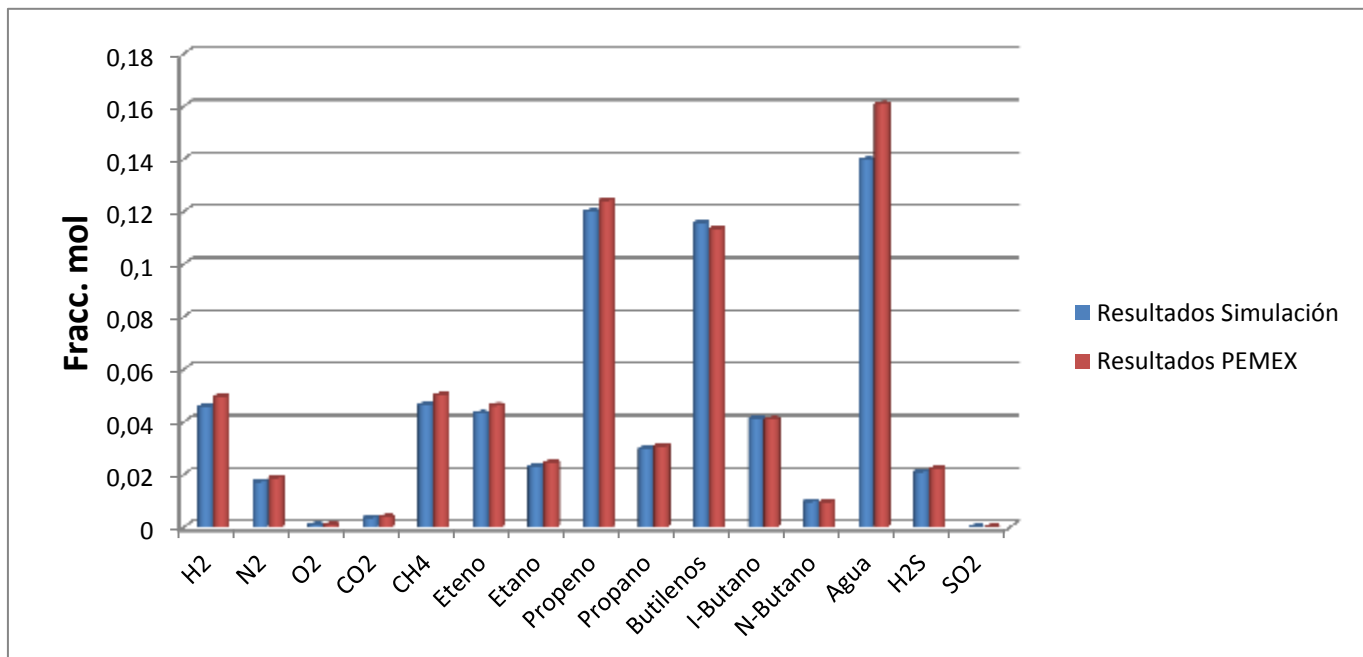
#### Tope de la Fraccionadora (Corriente 10)

	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
H2	0,046	0,050
N2	0,017	0,019
O2	0,001	0,001
CO2	0,004	0,004
CH4	0,046	0,050
Eteno	0,043	0,046
Etano	0,023	0,024
Propeno	0,120	0,124
Propano	0,030	0,031
Total Butilenos	0,116	0,113
I-Butano	0,041	0,041
N-Butano	0,010	0,009
C5+	0,343	0,305
Agua	0,140	0,161
H2S	0,021	0,022
SO2	0,000	0,000

Tabla 18: Resultados de la Corriente 10 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.



Gráfica 12: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 10 y datos de la operación real. (1)

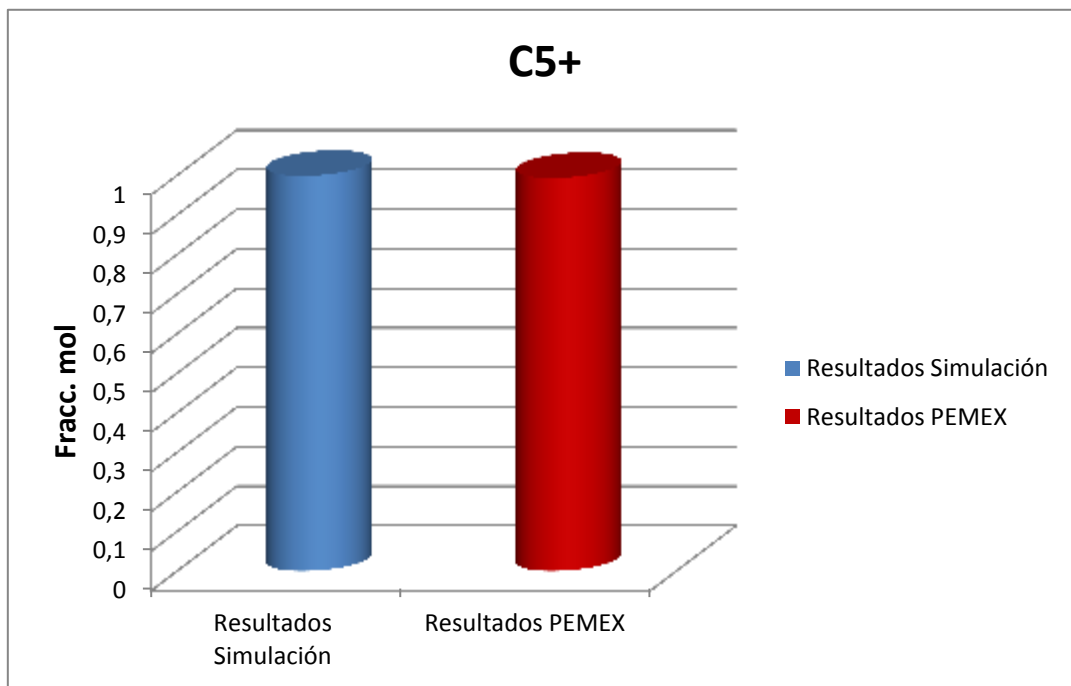


Gráfica 13: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 10 y datos de la operación real. (2)

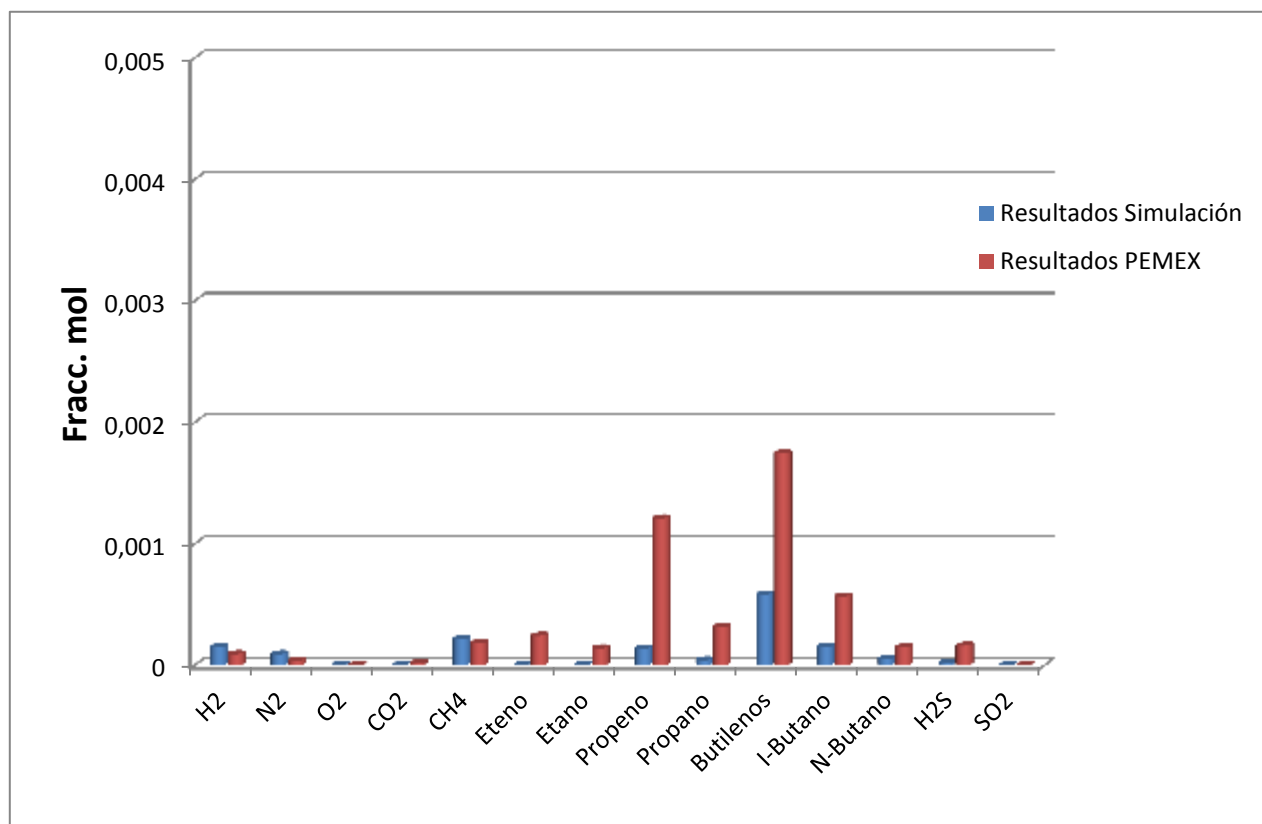
*Aceite Cíclico Ligero a Agotamiento (Corriente 17)*

	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
<b>H2</b>	0,00019673	0,00007354
<b>N2</b>	0,00011915	0,00003268
<b>O2</b>	0,00000547	0,00000188
<b>CO2</b>	0,00000027	0,00001697
<b>CH4</b>	0,00029422	0,00017976
<b>Eteno</b>	0,00000166	0,00026839
<b>Etano</b>	0,00000349	0,00015902
<b>Propeno</b>	0,00022241	0,00152672
<b>Propano</b>	0,00006538	0,00040227
<b>Total Butilenos</b>	0,00091402	0,00247205
<b>I-Butano</b>	0,00023807	0,00077750
<b>N-Butano</b>	0,00007786	0,00020742
<b>C5+</b>	0,99782880	0,99152225
<b>H2S</b>	0,00002797	0,00018291
<b>SO2</b>	0,00000013	0,00000063

Tabla 19: Resultados de la Corriente 17 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.



Gráfica 14: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 17 y datos de la operación real. (1)

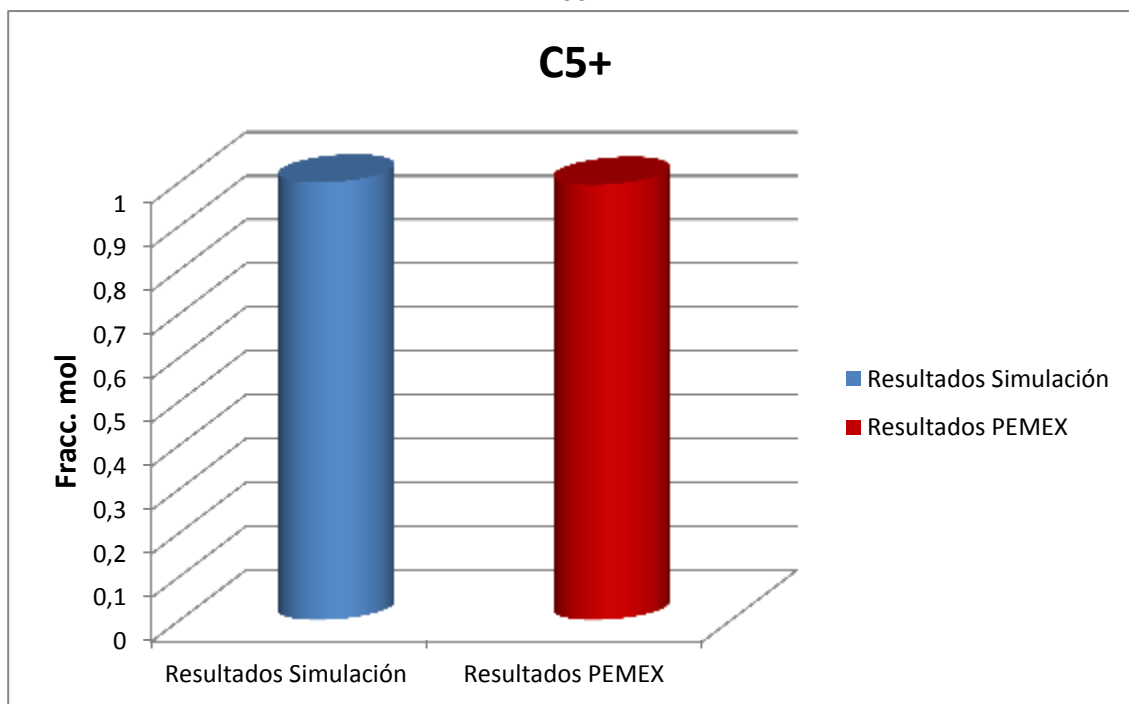


Gráfica 15: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 17 y datos de la operación real. (2)

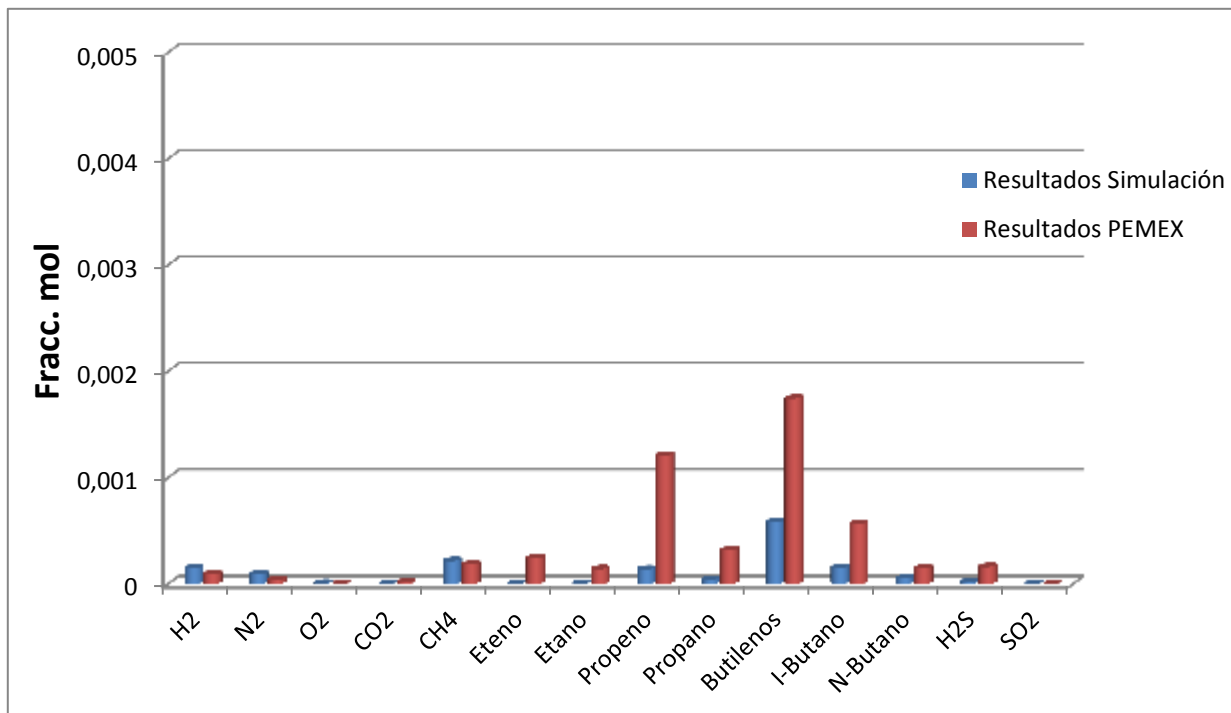
Salida Lateral de Aceite Cíclico Pesado (Corriente 21)

	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
H2	0,00014774	0,00009053
N2	0,00009038	0,00003723
O2	0,00000412	0,00000204
CO2	0,00000015	0,00001598
CH4	0,00021513	0,00018120
Eteno	0,00000088	0,00024120
Etano	0,00000196	0,00013840
Propeno	0,00013616	0,00120871
Propano	0,00004027	0,00031458
Total Butilenos	0,00058202	0,00174334
I-Butano	0,00015070	0,00056569
N-Butano	0,00004961	0,00014609
C5+	0,99856055	0,99311211
H2S	0,00001721	0,00015937
SO2	0,00000009	0,00000049

Tabla 20: Resultados de la Corriente 21 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.



Gráfica 16: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 21 y datos de la operación real. (1)

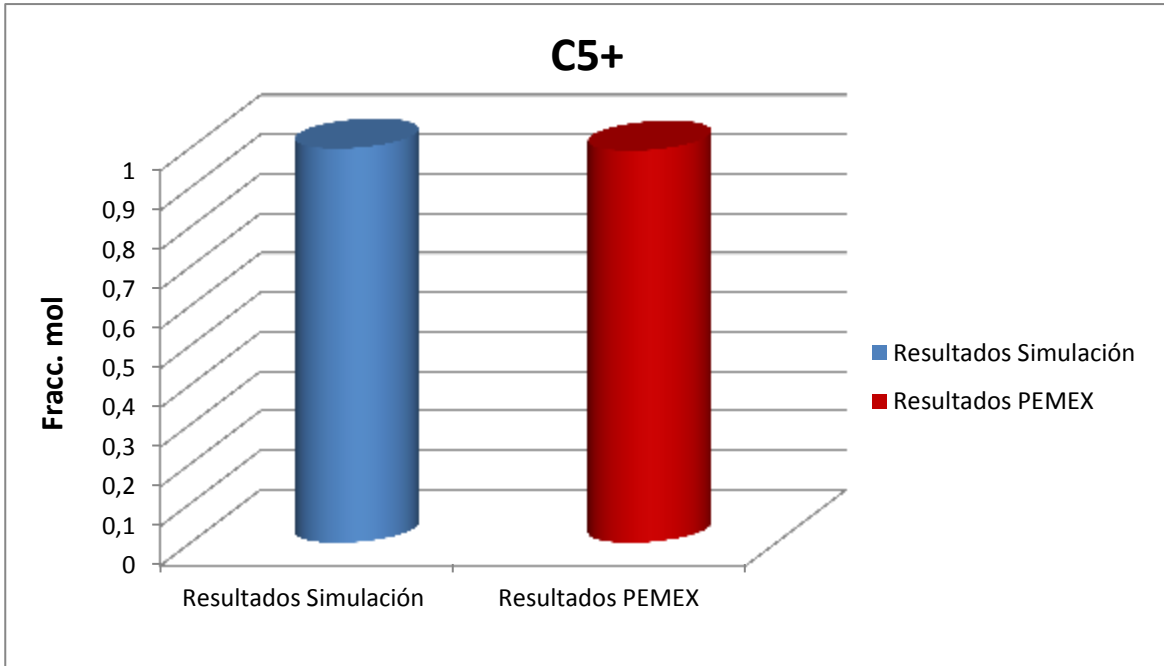


Gráfica 17: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 21 y datos de la operación real. (2)

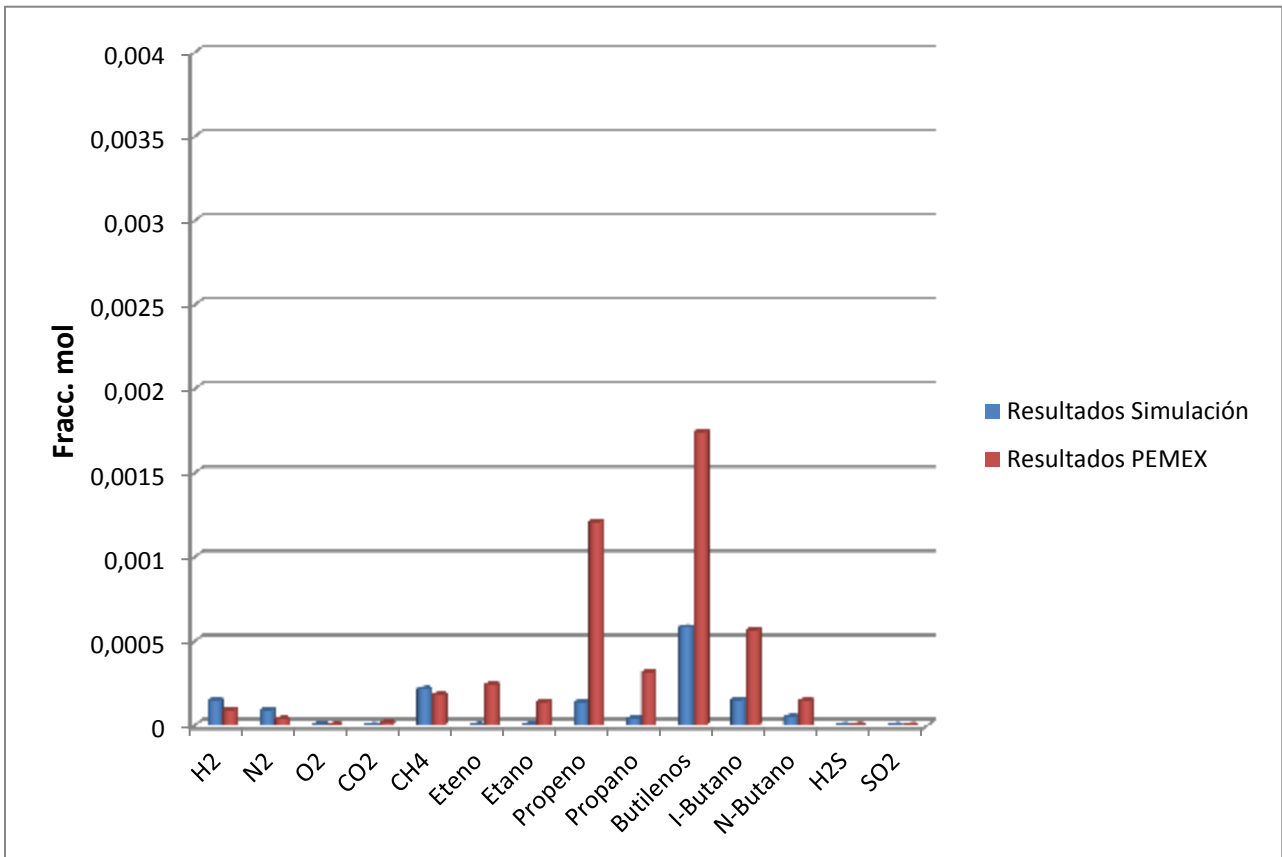
Producto de Fondo de la Fraccionadora (Corriente 25)

	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
<b>H2</b>	0,00014774	0,00009053
<b>N2</b>	0,00009038	0,00003723
<b>O2</b>	0,00000412	0,00000204
<b>CO2</b>	0,00000015	0,00001598
<b>CH4</b>	0,00021513	0,0001812
<b>Eteno</b>	0,00000088	0,0002412
<b>Etano</b>	0,00000196	0,0001384
<b>Propeno</b>	0,00013616	0,00120871
<b>Propano</b>	0,00004027	0,00031458
<b>Total Butilenos</b>	0,00058202	0,00174334
<b>I-Butano</b>	0,0001507	0,00056569
<b>N-Butano</b>	0,00004961	0,00014609
<b>C5+</b>	0,99856055	0,99311211
<b>H2S</b>	0,00001721	0,00015937
<b>SO2</b>	0,00000009	0,00000049

Tabla 21: Resultados de la Corriente 25 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.



Gráfica 18: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 25 y datos de la operación real. (1)



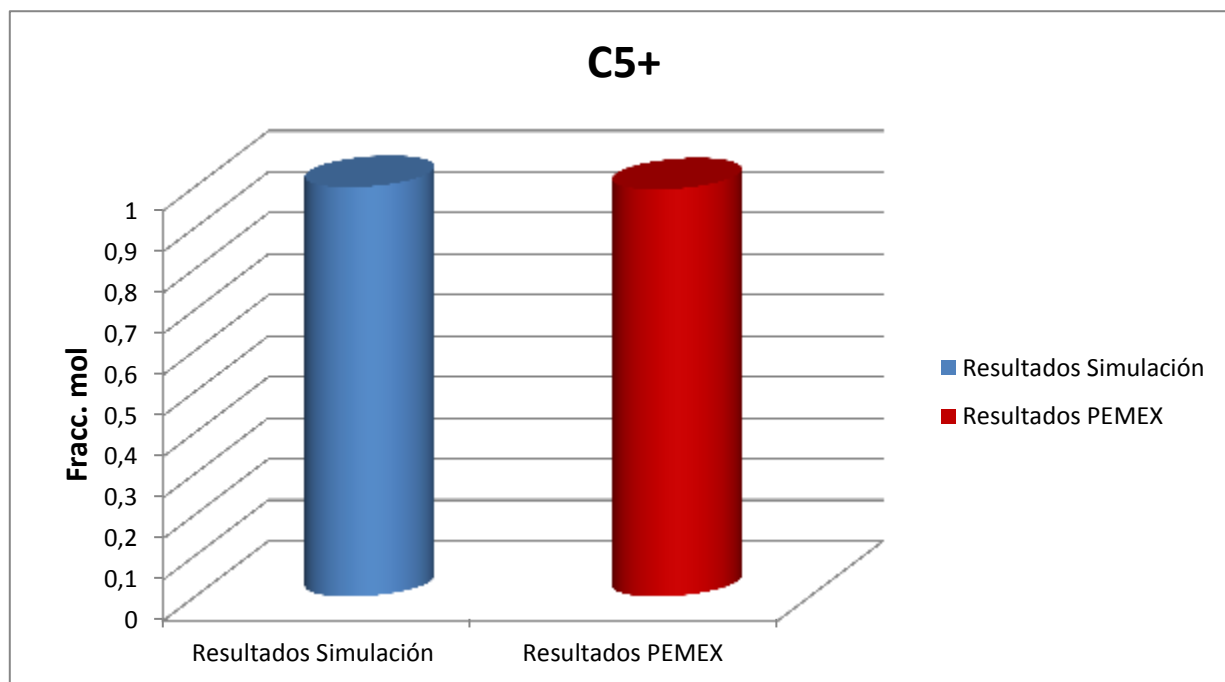
Gráfica 19: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 25 y datos de la operación real. (2)

### Absorbedor-Agotador (103-V)

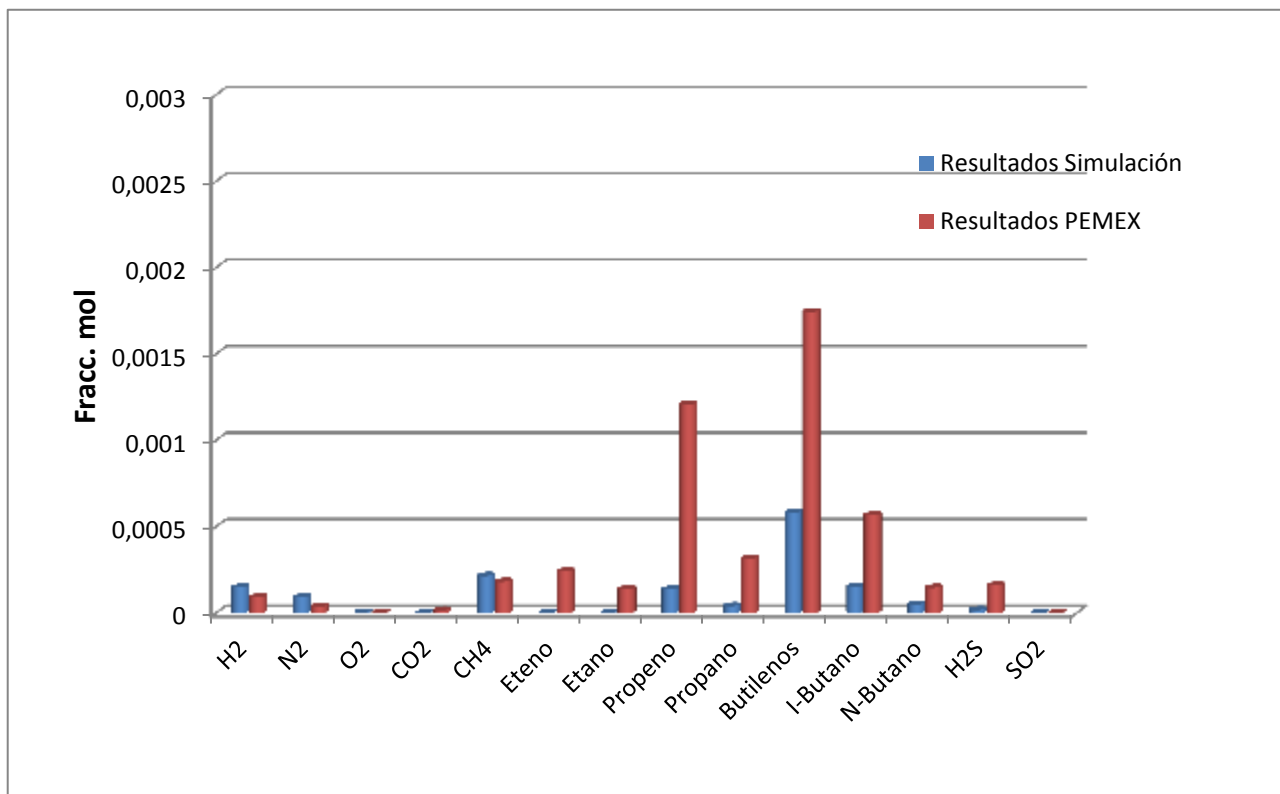
#### Tope del Absorbedor (Corriente 34)

	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
H2	0,00014774	0,00009053
N2	0,00009038	0,00003723
O2	0,00000412	0,00000204
CO2	0,00000015	0,00001598
CH4	0,00021513	0,0001812
Eteno	0,00000088	0,0002412
Etano	0,00000196	0,0001384
Propeno	0,00013616	0,00120871
Propano	0,00004027	0,00031458
Total Butilenos	0,00058202	0,00174334
I-Butano	0,0001507	0,00056569
N-Butano	0,00004961	0,00014609
C5+	0,99856055	0,99311211
H2S	0,00001721	0,00015937
SO2	0,00000009	0,00000049

Tabla 22: Resultados de la Corriente 34 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.



Gráfica 20: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 34 y datos de la operación real. (1)



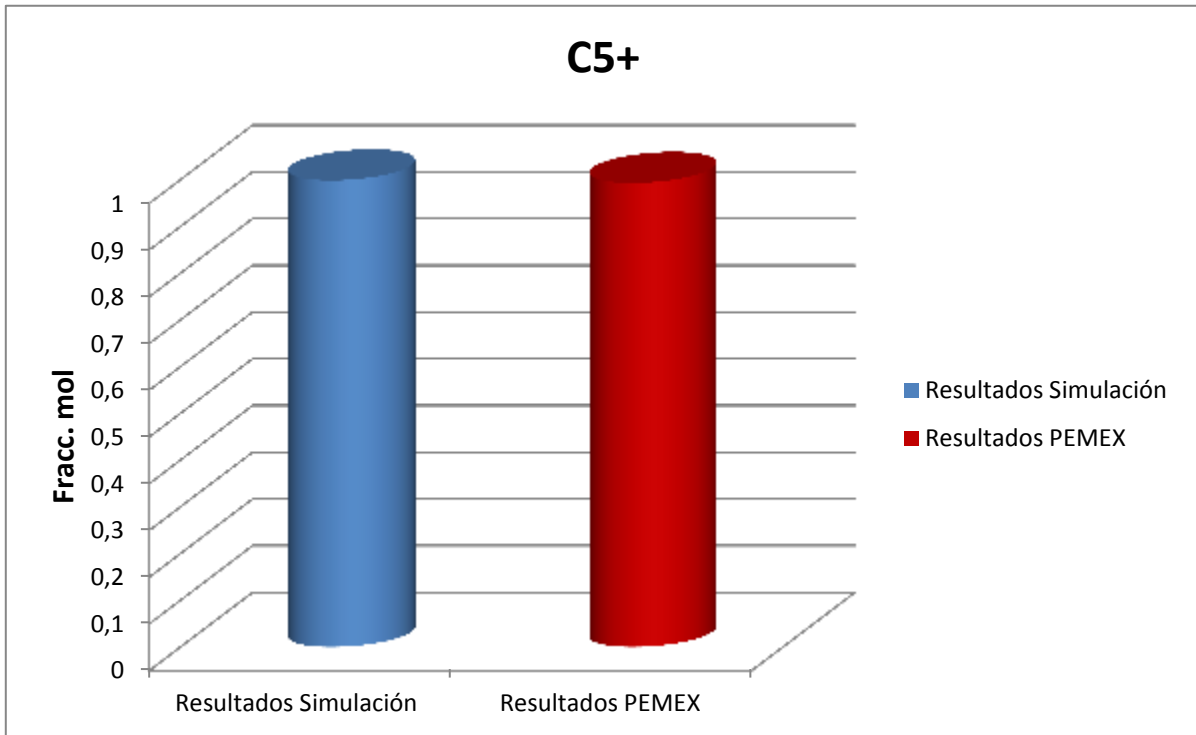
Gráfica 21: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 34 y datos de la operación real. (2)

Fondo del Agotador (Corriente 38)

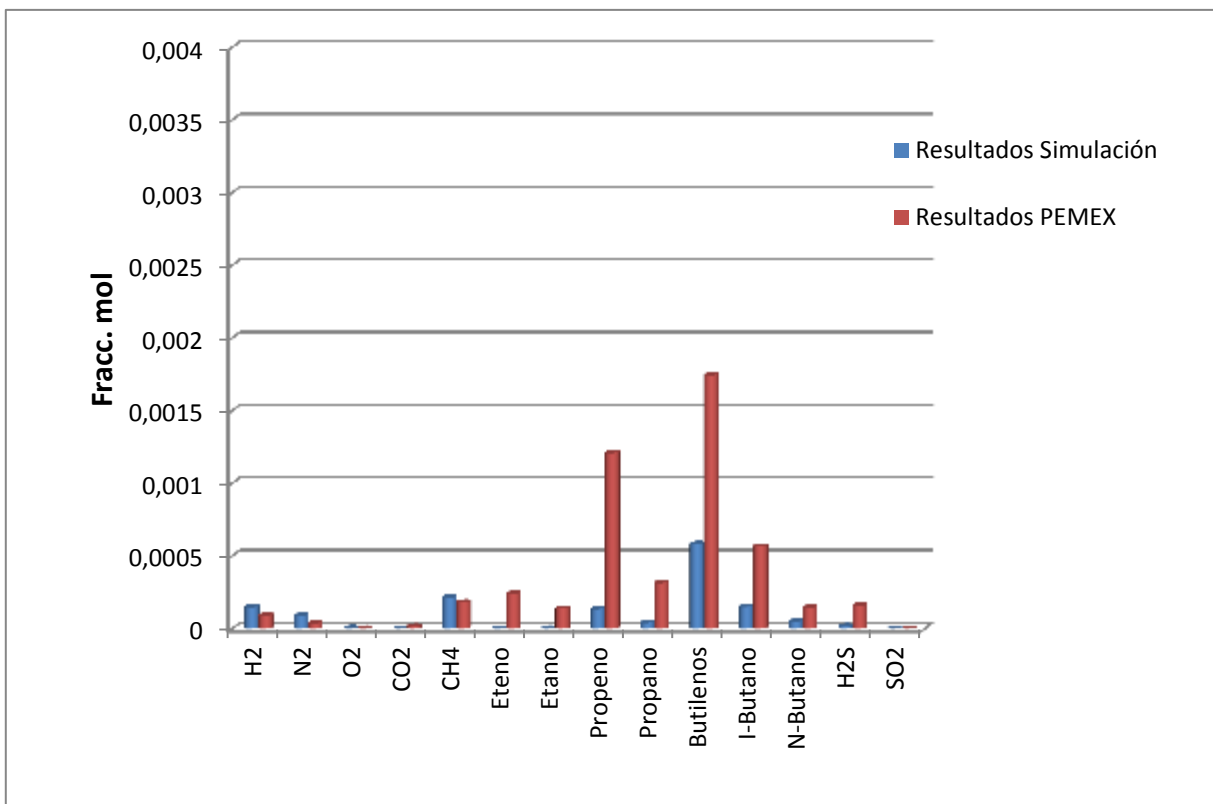
	Resultados Simulación [Fracc. mol]	Resultados PEMEX [Fracc. mol]
H2	0,00014774	0,00009053
N2	0,00009038	0,00003723
O2	0,00000412	0,00000204
CO2	0,00000015	0,00001598
CH4	0,00021513	0,0001812
Eteno	0,00000088	0,0002412
Etano	0,00000196	0,0001384
Propeno	0,00013616	0,00120871
Propano	0,00004027	0,00031458
Total Butilenos	0,00058202	0,00174334
I-Butano	0,0001507	0,00056569
N-Butano	0,00004961	0,00014609
C5+	0,99856055	0,99311211
H2S	0,00001721	0,00015937
SO2	0,00000009	0,00000049

Tabla 23: Resultados de la Corriente 38 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.





Gráfica 22: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 38 y datos de la operación real. (1)



Gráfica 23: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 38 y datos de la operación real. (2)

A partir de las gráficas presentadas anteriormente, es posible observar la similitud que existe entre los datos obtenidos por medio del Simulador Aspen Plus V.8.8 y los datos de la operación real provistos por PEMEX. Se presentan por separado las concentraciones en fracción molar de los hidrocarburos pesados reagrupados en el grupo C5+ ya que en la gran mayoría de las corrientes representan una fracción mucho más significativa que el resto de los compuestos presentes en la mezcla. Por otra parte en las gráficas comparativas de los otros compuestos se observa una variación aparentemente significativa entre los resultados de la simulación y aquellos de la operación real. Esto se debe principalmente a que dichos compuestos se encuentran en fracciones mucho menores dentro de la mezcla a comparación de los hidrocarburos pesados y por lo tanto la diferencia relativa de concentraciones resulta muy visible a pesar de no ser tan significativa.

De forma general, se observa un comportamiento muy similar entre los datos de la operación y los datos reales. Las principales fuentes de error son las siguientes:

- Los equipos en la simulación operan de forma adiabática a diferencia de la operación real, en la cual existen pérdidas de calor por lo que la temperatura no varía del mismo modo en ambos casos, afectando la composición de las corrientes de salida.
- Las caídas de presión de las torres en la simulación son una aproximación de aquellas que se generan en la operación real por lo que los flujos en las corrientes de salida varían de forma significativa con respecto a la operación real.
- No se dispone de forma exacta de todos los compuestos que toma en cuenta PEMEX dentro del balance de materia por lo que la composición de la

corriente de alimentación principal puede tener variaciones significativas con respecto a la alimentación real.

### **Conclusiones**

En cuanto a los resultados obtenidos, se observa un comportamiento muy similar en la región del Reactor a pesar de contar con ciertas desviaciones debido a que la simulación se llevó a cabo con un catalizador con propiedades distintas a la que posee el catalizador de la operación real. Sin embargo, se mantiene una estrecha similitud de la tendencia de las concentraciones del efluente del equipo, lo que implica que tanto las ecuaciones de estado seleccionadas como el diseño del Reactor y las condiciones de la operación se realizaron de forma adecuada.

Al disponer de la simulación del reactor, el simulador permite de forma sencilla llevar a cabo modificaciones en las condiciones de operación ya sea variando el flujo de alimentación, la temperatura y presión de operación, la velocidad de reabastecimiento de catalizador regenerado entre otras. Esta facilidad que brinda el software es sumamente práctica ya que permite al operador tomar decisiones en un plazo muy corto, teniendo la seguridad de elegir la opción que le permita maximizar la producción reduciendo los costos de operación.

Cabe mencionar que se detectaron ciertas fallas en el desempeño del simulador Aspen HYSYS V.8.8, principalmente en el proceso de caracterización del crudo. Por una parte, se intentó trabajar con los datos provistos directamente desde la base de datos del software, seleccionando los 3 diferentes tipos de crudo Maya propuestos. Los resultados obtenidos por este medio fueron muy poco apegados a los resultados de la operación real. Por otro lado, al caracterizar el crudo de forma manual, el simulador requiere de una cantidad importante de información acerca del crudo, lo

cual resulta muy difícil de conocer si no se trabaja directamente en el proyecto a simular.

Por parte de los resultados obtenidos en la simulación de la Torre Fraccionadora y el Absorbedor-Agotador, se observa una correcta representación en cuanto a las concentraciones de los hidrocarburos pesados, sin embargo se tiene una desviación considerable para el resto de los componentes. Esto se debe a que el simulador Aspen Plus V.8.8 requiere de una mayor precisión en la especificación de las corrientes de alimentación y en este trabajo se tomaron directamente las propiedades que proporciona el programa lo que puede ser una importante fuente de error. Además, para esta parte de la simulación se hicieron simplificaciones en cuanto a los compuestos que se encuentran reagrupados en el llamado grupo C5+ en el cual los hidrocarburos pesados que llegan a tener masas molares extremadamente importantes, lo que también genera un error considerable al momento de llevar a cabo la comparación de los resultados.

Es importante mencionar que la base de datos de componentes que ofrece el programa Aspen Plus V.8.8, carece de versatilidad en procesos relacionados a la refinación de petróleo. En este caso en particular, no se lograron introducir hidrocarburos con una cantidad mayor a 20 átomos de carbono. De haber tenido a disposición estructuras con mayor peso molecular, hubiera sido posible generar una simulación mucho más apegada a la realidad.

También es importante mencionar que al hacer una simulación que incluya un importante número de corrientes de recirculación es necesario ampliar la tolerancia del método numérico seleccionado para que las iteraciones converjan adecuadamente. Además se requiere de introducir de preferencia una corriente a la



vez y correr la simulación ya que de otro modo el programa no logra generar resultados. En caso de que esto suceda, es recomendable reiniciarlo y volver a tratar de introducir la nueva corriente, llevando a cabo variaciones en el método de introducción, preferentemente evitando generar grandes diferencias con respecto a lo que se encuentre simulado anteriormente.

Finalmente, llevar a cabo la simulación de la Unidad Catalítica FCC N° 2 (U-13000) permite generar una herramienta de extrema utilidad para predecir las correctas condiciones de operación con el fin de maximizar la conversión hacia los productos deseados y minimizando los insumos requeridos. Sin embargo, es necesario tener un amplio conocimiento de toda la teoría involucrada detrás de cada proceso ya que la mayoría de los problemas que encuentra el simulador al momento de realizar los cálculos conllevan un error en el planteamiento básico de la operación, el cual no se encuentra en ninguna base de datos.

## Bibliografía

1. **M.A. Fahim, T.A. Al-Shhaf, A.S. Elkilani** (2010), *Fundamentals of Petroleum Refining*, First Edition, Elsevier.
2. **Serge Raseev** (2003), *Thermal and Catalytic Process in Petroleum Refining*.
3. **Uttam Ray Chaudhuri** (2011), *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*, Taylor & Francis Group.
4. **James H. Gary, Glenn E. Handwerk** (2001), *Petroleum Refining Technology and Economics*. (4th ed.). New York: Marcel Dekker.
5. **David S.J. Jones, Peter R. Pujadó** (2006), *Handbook of Petroleum Processing*. Dordrecht Netherlands: Springer.
6. **Ozzen Ocic** (2005), *Oil Refineries in the 21<sup>st</sup> Century*, Wiley-VCH.
7. **Wauquier J.P** (2004), *El refine del petróleo*, Díaz de Santos.
8. **Petróleos Mexicanos** (2006), *Manual de operación de la planta FCC-02-U13000*.
9. **Chang, Ai-Fu, Pashikanti, Kiran and Liu A.** (2012), *Refinery Engineering: Integrated Process Modeling and Optimization*. Virginia: John Wiley & Sons.
10. **Aspen Technology Inc.** (2005), *Simulation Basis HYSYS*.
11. **Sadeghbeigi, Reza** (2012), *Fluid Catalytic Cracking Handbook: An Expert Guide to the Practical Operation, Design, and Optimization of FCC Units*. 3th ed. Elsevier.
12. **Smith Robin** (2005), *Chemical Process Design and Integration*. John Wiley & Sons.
13. **R. Perry** (2005), *Manual del Ingeniero Químico*, 6<sup>a</sup> ed.

14. **O. Levenspiel** (1993), *Flujo de Fluidos, Intercambio de Calor*, Reverté.
15. **Claudio J. A. Mota, Nilton Rosenbach Jr.** Carbocations on zeolites. Quo vadis? *Journal of the Brazilian Chemical Society* [en línea]. 7 de julio 2011, vol.22 nº7.
16. **Biodisol** 2016, *Tipos de petróleo*. Recuperado el 16 de febrero 2016; de <http://www.biodisol.com>
17. **Instituto de Investigaciones Eléctricas** 1998, *Boletín IIE mayo-junio* 1998. Recuperado el 20 de febrero 2016; de <http://www.iie.org.mx>
18. **Secretaría de Energía** 2016, *Producción de petróleo crudo por tipo y región del periodo 2005-2015*. Recuperado el 18 de febrero 2016; de [www.sener.gob.mx](http://www.sener.gob.mx)
19. **Google** 2016, *Localización de la Refinería General Lázaro Cárdenas*. Recuperado el 23 de febrero 2016; de [www.maps.google.com.mx](http://www.maps.google.com.mx)
20. **Chemwiki** 2006, *Phases and Physical States of Matter*. Recuperado el 25 de febrero 2016; de <http://www.chemwiki.ucdavis.edu>



## Anexo I: Índice de Tablas

Tabla 1: Tipo de crudo en función a su Gravedad API.....	9
Tabla 2: Comparación de propiedades entre petróleos Mexicanos.....	15
Tabla 3: Propiedades del Crudo de Alimentación de la Refinería de Minatitlán.....	41
Tabla 4: Propiedades del Catalizador de la Refinería de Minatitlán.....	42
Tabla 5: Configuración de Datos de Operación del Reactor.....	44
Tabla 6: Composición de Corriente de Alimentación a Torre Fraccionadora.....	46
Tabla 7: Datos de Corrientes de Entrada y Salida a la Torre Fraccionadora.....	48
Tabla 8: Datos de Corrientes de Entrada y Salida al Absorbedor-Agotador.....	49
Tabla 9: Resultados de Productos en el Efluente del Reactor.....	50
Tabla 10: Resultados de Propiedades en el Efluente del Reactor.....	50
Tabla 11: Resultados de Operación del Reactor y Riser.....	51
Tabla 12: Resultados de Operación del Regenerador.....	51
Tabla 13: Resultados de Operación del Suministro de Aire al Regenerador.....	52
Tabla 14: Resultados de Composiciones de Corrientes de Entrada y Salida de la Torre Fraccionadora.....	53
Tabla 15: Resultados de Composiciones de Corrientes de Entrada y Salida del Absorbedor-Agotador.....	54
Tabla 16: Comparación entre resultados de Simulación y Resultados de PEMEX a la Salida del Reactor.....	55
Tabla 17: Comparación entre Resultados de Simulación y Resultados de la Literatura a la salida del Reactor.....	56
Tabla 18: Resultados de la Corriente 10 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.....	62
Tabla 19: Resultados de la Corriente 17 obtenidos en la Simulación y datos	





de la operación real.....	63
Tabla 20: Resultados de la Corriente 21 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.....	65
Tabla 21: Resultados de la Corriente 25 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.....	66
Tabla 22: Resultados de la Corriente 34 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.....	68
Tabla 23: Resultados de la Corriente 38 obtenidos en la Simulación y datos de la operación real.....	69



## Anexo II: Índice de Figuras

Figura 1: Ejemplo de Curva de Verdadero Punto de Destilación.....	11
Figura 2: Ejemplo de puntos de corte y puntos terminales de corte.....	13
Figura 3: Plano de localización de la Refinería General Lázaro Cárdenas de Minatitlán, Ver.....	21
Figura 4: Convertidor Catalítico M. W. Kellogg.....	24
Figura 5: Representación de una estructura de Zeolita tipo Y (A) y de una zeolita ZSM-5 (B).....	30
Figura 6: Ejemplo de diagrama de fases.....	36
Figura 7: Pantalla de Geometría del Reactor en Aspen HYSYS V8.8.....	38
Figura 8: Pantalla de Datos de la Alimentación en Aspen HYSYS V8.8.....	41
Figura 9: Pantalla de Configuración de Equipo en Aspen V8.8.....	47
Figura 10: Pantalla de Configuración de Equipo en Aspen V8.8.....	48

### **Anexo III: Índice de Gráficas**

Gráfica 1: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Marina Noreste.....	16
Gráfica 2: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Marina Suroeste.....	17
Gráfica 3: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Norte.....	17
Gráfica 4: Producción de Miles de Barriles Diarios para la Región Sur.....	18
Gráfica 5: Producción de Miles de Barriles Diarios a nivel nacional.....	18
Gráfica 6: Comparación de los porcentajes en Masa de los productos obtenidos en la Simulación contra los porcentajes en masa de los productos de la operación real.....	55
Gráfica 7: Comparación de los porcentajes de error en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor con respecto a los datos de operación de PEMEX.....	56
Gráfica 8: Comparación de los porcentajes en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor contra los porcentajes en peso de los productos reportados en la Literatura.....	57
Gráfica 9: Comparación de los porcentajes de error en masa de los productos obtenidos en la Simulación a la salida del Reactor con respecto a los datos obtenidos en la Literatura.....	57
Gráfica 10: Variación en por ciento masa de los productos obtenidos a la salida del Reactor en función de la temperatura.....	60
Gráfica 11: Variación en por ciento masa de la conversión a la salida del Reactor en función de la temperatura.....	60
Gráfica 12: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 10 y datos de la operación real. (1).....	62
Gráfica 13: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 10 y datos de la operación real. (2).....	63
Gráfica 14: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación	



para la Corriente 17 y datos de la operación real. (1).....	64
Gráfica 15: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 17 y datos de la operación real. (2).....	64
Gráfica 16: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 21 y datos de la operación real. (1).....	65
Gráfica 17: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 21 y datos de la operación real. (2).....	66
Gráfica 18: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 25 y datos de la operación real. (1).....	67
Gráfica 19: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 25 y datos de la operación real. (2).....	67
Gráfica 20: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 34 y datos de la operación real. (1).....	68
Gráfica 21: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 34 y datos de la operación real. (2).....	69
Gráfica 22: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 38 y datos de la operación real. (1).....	70
Gráfica 23: Comparación entre los resultados obtenidos en la Simulación para la Corriente 38 y datos de la operación real. (2).....	70