

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA INGENIERÍA QUÍMICA – INGENIERÍA DE PROCESOS

# SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE LA UNIDAD REFORMADORA DE NAFTAS (CCR) DE LA REFINERÍA "GENERAL LÁZARO CÁRDENAS" DE MINATITLÁN, VERACRUZ

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN INGENIERÍA

> PRESENTA: ALEJANDRA JUÁREZ URIBE

TUTOR PRINCIPAL ING. CELESTINO MONTIEL MALDONADO FACULTAD DE QUÍMICA

CIUDAD DE MÉXICO, OCTUBRE 2019



Universidad Nacional Autónoma de México



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:

Preside	ente:	DR. VIZCARRA MENDOZA MARIO GONZALO
Secreta	ario:	DR. RIVERA TOLEDO MARTÍN
<sub>1</sub> er. S	Suplente:	DR. MUÑOZ ARROYO JOSÉ ANTONIO
2 do. S	Suplente:	M.I. AGUIRRE CONSTANTINO JOSÉ LUIS
3 er. S	Suplente:	ING. MONTIEL MALDONADO CELESTINO

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

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

TUTOR DE TESIS:

NOMBRE

FIRMA

------

-----

# ÍNDICE

1.	1 INTRODUCCIÓN	2
1.	2 OBJETIVO	4
2.	MARCO TEÓRICO	5
	21 ΒΕΕΟΡΜΑCΙÓΝ ΓΑΤΑΙ ΙΤΙCA	5
	2.2 CONSTITUCIÓN DE LA ALIMENTACIÓN A LA REFORMADORA	10
	2 2 1 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA	10
	2.2.2 CLASIFICACIÓN DE LAS NAFTAS	12
	2.3 PROCESOS DE REFORMACIÓN CATALÍTICA	13
	2.3.1 UNIDADES SEMI-REGENERATIVAS	14
	2.3.2 UNIDAD DE REGENERACIÓN CÍCLICA	14
	2.3.3 UNIDAD DE REGENERACIÓN CONTINUA	15
	2.4 CATALIZADOR UTILIZADO EN LA REFORMACIÓN	17
	2.4.1 DESACTIVACIÓN DEL CATALIZADOR DE REFORMACIÓN	20
	2.5 REACCIONES DEL PROCESO DE REFORMACIÓN	23
	2.5.1 REACCIONES DE REGENERACIÓN DEL CATALIZADOR	28
	2.6 TERMODINÁMICA <sup>[14]</sup>	31
	2.7 PROCESO DE REFORMACIÓN CATALÍTICA CONTINÚA DE NAFTAS (CCR)	33
	2.7.1 VARIABLES DEL PROCESO [14]	40
	2.7.2 MODELOS CINETICOS	42
3.	SIMULADOR DE PROCESOS ASPEN-HYSYS V10	46
	3.1 CINÉTICA DE LAS REACCIONES DE REFORMACIÓN	49
	3.2 RUTA DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN	50
	3.3 CINÉTICA DE REACCIÓN. EXPRESIONES	52
	3.4 Coquización	53
	3.5 MODELO DE ACTIVIDAD DEL CATALIZADOR	55
4.	SIMULACIÓN DE LA UNIDAD CCR	56
	4.1 SIMULACIÓN DE LA PLANTA	56
	4.2 CONDICIONES DE OPERACIÓN	57
5.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	76
6.	CONCLUSIONES	110
7	BIBLIOGRAFÍA	111
· · ·		
ο.		114
	8.1 HISTORIA REFINERÍA "GRAL. LÁZARO CÁRDENAS" <sup>[18]</sup>	114
	6.1.1 Antecedentes	114
	8.1.2 Localización	114
	o. 1.3 Proceso de Retinacion	116
	$0.2 \cup 1 \text{ Anaje} = 1$	110
	8.4 SIMULACIÓN DEL PROCESO DE REFORMACIÓN CATA TILICA CONTINUA EN ASPEN-HYSYS V10	121

# **Capítulo 1**

# 1.1 Introducción

Después de la Segunda Guerra Mundial, la producción de automóviles aumentó. Estos coches con nuevos motores de alta compresión requerían de gasolinas de mayor calidad, pero debido a la demanda de los combustibles, las refinerías no eran capaz de cubrir la producción, por lo que se buscaron nuevos procesos para la mejora de la calidad de la gasolina y así mismo poder cubrir la demanda de combustible.

**Universal Oil Products** (UOP), líder en la tecnología de proceso de refinación, intensificó su enfoque en la Reformación Catalítica de Naftas. En 1946, UOP comenzó a experimentar con un metal noble, específicamente Platino, como catalizador. El Platino era muy caro en aquel entonces, y fue todo un obstáculo a superar para la aplicación comercial a gran escala en las refinerías ya que requiere miles de libras de catalizador.

A principios de 1947, un destacado científico de UOP Vladimir Haensel aplica Platino a una serie de materiales de base, sílice, silica-alúmina, y finalmente de alúmina para formar un material catalítico. Experimentando con estos catalizadores a diferentes temperaturas y presiones, el utilizó el equipo de laboratorio para convertir ciertos componentes naturales de bajo octanaje y la destilación directa de la gasolina para obtener productos de mayor octanaje. De las tres combinaciones catalíticas, Platino sobre alúmina parecía producir el mejor resultado. Las primeras dos formulaciones de catalizadores eran altamente susceptibles a la coquización en el laboratorio debido a las altas temperaturas de operación necesarias para aumentar el octanaje. Una formulación de laboratorio prometedora contenía 3 % de Platino. La aplicación de un catalizador comercial era poco práctica desde una perspectiva de la cadena de suministro y costo. La gasolina se vendía a 8-9 ¢/galón al mayoreo, por lo que era muy difícil de justificar una Unidad de Reformación Catalítica con varios cientos de miles de dólares de Platino, sobre todo porque la tecnología de regeneración todavía no se había desarrollado.

El desarrollo de catalizador continuó en el laboratorio. El Ácido cloroplatínico fue desarrollado por UOP como un medio para impregnar el metal sobre alúmina. Una solución

de amoníaco se utiliza para eliminar los compuestos ácidos. Alúmina de alta pureza se utiliza para evitar contaminantes que desactivarían el catalizador. El gran avance se produjo por accidente: quedando trazas de cloro presente durante las etapas de preparación del catalizador, esta formulación mostró una inmensa promesa después de la prueba. El cloro económico y abundante aumentó la acción catalítica y permitió la reducción del contenido de Platino lo cual representó una ventaja hasta el día de hoy.

En el otoño de 1947, Haensel había logrado una notable mejora en el catalizador a base de alúmina con una décima parte del 1 % en peso de Platino. Fue tan poderosa que cuando se probó la gasolina de bajo octanaje sobre ella, el 90% de la alimentación se convirtió en un producto con un octanaje de 80, así superando la práctica común del Reformado Térmico que se comercializaba en el momento (70 % de conversión con más o menos un número de octano de 70). UOP presentó la patente del nuevo proceso y su nombre fue seleccionado. El proceso de "*Platforming*" fue llamada así para reflejar las palabras de platino (*platinum*) y la reformación (*reforming*), y la imagen de octanaje elevado.

Aún quedaba mucho para producir tal catalizador, así como desarrollar el diseño de procesos, y lograr la aceptación comercial de este nuevo enfoque. El catalizador tenía un costo proyectado de diez US\$/libra, comparado con otro catalizador que cuestan de 15 a 60 ¢/libra. Además, el método para la recuperación de Platino del catalizador usado aún no había sido descubierto y la regeneración todavía no se había desarrollado. Cientos de científicos e ingenieros de UOP trabajaron para avanzar en la tecnología. En la primavera de 1948 en The Western Refiners Association (Texas), UOP introdujo información sobre el nuevo proceso durante la reunión. La respuesta de la industria varío ampliamente de: "¡Ustedes deben estar locos! Pensamos en el Platino, pero ¿quién en su sano juicio podría utilizar un catalizador que cuesta tanto?" a " Ahora usted tiene este proceso Platforming. ¿Por qué tengo que ir a una reunión WPRA en Texas para encontrar información sobre él? ¡Lo quiero! ". Resulta que la última cotización fue de Old Dutch Refining, Muskegon, Michigan, EE. UU., quien terminó firmando la primera licencia Platforming de UOP. La unidad fue rápidamente diseñada (renovación) y construida en octubre de 1948, con un costo de US\$700,000. La unidad terminada consistió en reactores que contenían catalizador granulado en lechos fijos, calentadores de carga, enfriador de producto, separador de gas líquido y una torre de fraccionamiento. Alrededor de 30 libras de Platino

3

con valor de más de US\$ 30,000 se había utilizado en las cuatro y media toneladas de catalizador cargadas. El catalizador se fabricó en las instalaciones de UOP Riverside en Illinois a las afueras de la sede de UOP, ampliando lo que se había producido en el laboratorio. Hoy en día, las instalaciones de Riverside todavía se utilizan para las pruebas de catalizador y de fabricación.

Eventualmente, esta primera Unidad Platforming de lecho fijo estaba produciendo un RON de 93, con un rendimiento de casi el 95% para duración total de nueve meses.

En los años transcurridos desde entonces, muchas otras versiones del proceso han sido desarrolladas por algunas de las principales compañías petroleras y otras organizaciones. Hoy en día, uno de los principales aportes al pool de gasolina proviene del proceso de reformación catalítica. <sup>[1]</sup>

Al final de la década de 1960 ocurrió un desarrollo muy importante en los catalizadores: la comercialización de catalizadores bimetálicos para el Proceso de Reformación Catalítica de Naftas. A la fecha, estos catalizadores han demostrado dar mejor actividad, estabilidad y selectividad que los catalizadores preparados solo de Platino. En muchos casos las refinerías han podido extender sus operaciones de Reformación a mayores cantidades de carga y a niveles más altos de RON en los productos.

En 1971 se llevó a cabo el arranque de una Reformadora que revolucionó el proceso. Se trata de la Reformadora de Regeneración Catalítica Continua (CCR por sus siglas en ingles), que permite severidades extremadamente altas, sin hacer paros frecuentes debido a las desactivaciones catalíticas. <sup>[2]</sup>

# 1.2 Objetivo

# Objetivo General

El objetivo del presente trabajo consiste en establecer mediante la simulación, la viabilidad de obtener una gasolina con un alto número de octano utilizando un proceso de 3 y 4 reactores.

### Objetivos Específicos

La simulación de los procesos con 3 y 4 reactores se llevará acabo con el Simulador comercial de proceso CatRef de Aspen HYSYS V10.

- Analizar ambos procesos y determinar cuáles son las principales similitudes y diferencias que existen en los procesos.
- Modificar las principales variables de proceso para observar el comportamiento de estos cuando se presenta un cambio en la condiciones de operación y así determinar qué sistema responde mejor al cambio.
- Determinar qué proceso cumple mejor las especificaciones de salida de los productos.
- Determinar las ventajas de usar un proceso respecto al otro y definir la viabilidad de los mismos.

# **Capítulo 2**

# 2. Marco teórico

# 2.1 Reformación Catalítica

Las unidades de reformado catalítico son parte integral e importante de los actuales complejos industriales para refinación del petróleo, en las que la conversión de nafta de bajo octanaje en un producto reformado con mayor número de octano es su principal característica. Como subproducto del proceso, se obtiene una corriente neta de gas con alto contenido de hidrógeno, que se separa para usarla en otros procesos (operaciones de hidrotratamiento e hidrodesintegración principalmente).

El proceso modifica o reorganiza la estructura molecular de los hidrocarburos involucrados, sin alterar apreciablemente el número de átomos de carbono en los mismos. Se produce una reestructuración de las especies de bajo número de octano presentes en la nafta, hacia componentes de estructura molecular más refinada con mejores valores de octano. Aunque un cierto grado de desintegración ocurre, la conversión se realiza sin cambio apreciable en los rangos de puntos de ebullición de la alimentación.

Este proceso se utiliza para mejorar una fracción importante del petróleo, convirtiendo una nafta pesada, cuyo bajo número de octano la hace inadecuada para utilizarla como combustible de motores de combustión. Es también usado para la producción de compuestos aromáticos, requeridos en la industria petroquímica. En el proceso, se genera además hidrógeno como subproducto, elemento muy valioso que se utiliza en muchos procesos internos de la refinería.

Una unidad típica de reformado catalítico se compone de un sistema de alimentación, varios calentadores, reactores en serie y un separador tipo flash. Parte del vapor separado en el flash (que contiene mayor cantidad de hidrógeno en su composición), se recircula y se mezcla con la alimentación antes de su ingreso al sistema de reactores, en tanto que la fracción líquida se envía a la sección de fraccionamiento (estabilizadora). La nafta reformada se obtiene como producto de fondo de la columna estabilizadora. Adicionalmente, gases ligeros incondensables y gas licuado de petróleo (GLP) se recuperan por el domo de la estabilizadora. <sup>[3]</sup>

La reformación catalítica constituye un proceso en el cual las naftas son puestas en contacto con un catalizador constituido por cristales de Platino soportado en alúmina en tres o cuatro reactores en serie o paralelo con precalentadores intermedios. Estos reactores operan adiabáticamente a elevadas temperaturas comprendidas entre 450 y 520°C, con presiones que van desde 3.4 atm a 34.50 atm y con la presencia de Hidrógeno (H<sub>2</sub>/CH igual a 4-6 mol/mol) con el fin de elevar el incide de octano de los hidrocarburos de la corriente de alimentación. <sup>[2]</sup>

Dado que la mayoría de las reacciones implicadas en el reformado catalítico son de naturaleza endotérmica (provocando disminución en la temperatura), varias celdas de un calentador se utilizan para mantener la temperatura en los niveles deseados, de modo que, a la corriente de producto de cada uno de los reactores se recalientan y se alimentan al siguiente. Otra característica del proceso es que conforme la alimentación pasa a través de los reactores, ocurren diferentes tipos de reacciones por lo que es necesario tener un mayor tamaño en los reactores que se ubican en serie.

6

Adicionalmente, las reacciones se hacen menos endotérmicas, por lo cual el diferencial de temperatura a través de los reactores disminuye y el aporte de calor necesario para mantener la temperatura también. Estas circunstancias explican también, el porqué de la diferente distribución del catalizador en los reactores, que es menor en el primero y mayor en el último reactor.

Usualmente el proceso de reformación catalítica se lleva a cabo al alimentar la nafta (luego de ser pretratada con hidrógeno, si es necesario) y una corriente de hidrógeno a un calentador en donde la mezcla se lleva a la temperatura deseada, y luego pasa a través de varios reactores catalíticos.

El producto que sale del último reactor catalítico se enfría (generalmente por intercambio térmico con la mezcla de alimentación que va al primer reactor y luego con agua de enfriamiento) y se envía a un separador de alta presión, donde se obtiene un gas compuesto principalmente de hidrógeno y se divide en dos corrientes:

- Una corriente que se recircula y se mezcla con la alimentación
- La parte restante representa un exceso de hidrógeno, el cual está disponible para otros usos.

El exceso de hidrógeno se envía a los procesos de hidrotratamiento de la fracción ligera. El producto líquido (reformado) se estabiliza (por eliminación de extremos ligeros) y se utiliza directamente para la formulación de gasolinas. En la estabilización se remueve butano y compuestos más ligeros. Una corriente líquida rica en propano y butanos (normal e iso) se recupera en el condensador de reflujo. La fase gas del condensador de reflujo es una mezcla de compuestos en el rango del hidrógeno hasta butanos. Usualmente, estos productos del condensador se envían a la planta de gas para un procesamiento adicional. El producto de fondo de la columna constituye la nafta reformada, constituida esencialmente por hidrocarburos de 5 átomos de carbono ( $C_5+$ ) o más.

Previo al reformado catalítico, la nafta de alimentación tiene que ser tratada con hidrógeno para reducir el contenido de impurezas (azufre, nitrógeno y compuestos de oxígeno) a niveles aceptables, los cuales si no son removidos desactivaran el catalizador. Este

pretratamiento es necesario ya que el catalizador se envenena gradualmente, dando lugar a una coquización excesiva y su rápida desactivación. <sup>[3]</sup>

La carga de alimentación al proceso puede provenir de las unidades de destilación primaria o de otros procesos de refinación en los cuales como subproducto se obtiene una nafta pesada la cual además de contener estructuras nafténicas, cuenta con parafinas y baja concentración de compuestos aromáticos.

La principal tendencia del proceso de reformación catalítica de naftas es la máxima participación de los hidrocarburos parafínicos en la reacción de aromatización y la mejora de la selectividad del proceso. El éxito que se alcanza resolviendo estos problemas ha llevado al aumento considerable en la obtención de productos deseados (reformado, hidrocarburos aromáticos) y a un aumento adicional en el número de octanos de la nafta reformada.

Estas mejoras en el proceso de reformación catalítica han implicado cambios tanto en la composición y las propiedades de los catalizadores que son utilizados y modificados de acuerdo con las nuevas tecnologías desarrolladas del proceso.

En un inicio las unidades comerciales utilizaban catalizadores de alúmina platinada y fueron diseñadas para trabajar a presiones de 35-40 kg/cm<sup>2</sup>, para producir gasolina con un índice de octano de 75 al ser procesado un amplio corte de nafta con un contenido total de hidrocarburos nafténicos y aromáticos de 35-37% peso. El contenido de azufre de la carga de alimentación no debía contener una concentración máxima de 1000 ppm en peso.

El cambio al procesamiento de cargas hidrotratadas (con contenido de azufre de 20-30 ppm en peso) hizo posible la participación de una cantidad de hidrocarburos parafínicos en la reacción de deshidrociclización y así producir reformados con elevados número de octanos de 76-80 (MON).

Posteriormente a los catalizadores de alúmina platinada se les adiciono cloro con lo que aumento la severidad en los requerimientos en el hidrotratamiento preliminar de la alimentación (contenido de azufre de 5-10 ppm en peso), la introducción del secado de materia prima y la utilización de normas en el proceso que limitan la cantidad de humedad en la zona de reacción. La utilización de catalizadores clorados y los cambios introducidos de la tecnología de procesamiento hicieron posible lograr un considerable aumento en la

8

rapidez de las reacciones de dehidrociclización de parafinas, y obtener hasta un 40% de hidrocarburos aromáticos a presiones de 30-35 kg/cm<sup>2</sup>. Una modificación de este proceso hizo posible obtener un reformado con un número de octano de 95.

En la última etapa de evolución del proceso de reformación catalítica, catalizadores muy estables han sido desarrollados. El Renio es el principal material utilizado como aditivo; el Germanio e Iridio son también empleados.

La ventaja más importante de los catalizadores polimetálicos es que la desactivación del catalizador es considerablemente más lenta que aquellos catalizadores platinados mono metálicos. Debido a esto, la presión del proceso de reformación puede ser reducida cerca de 14-15 kg/cm<sup>2</sup> en operación de lecho fijo y de 8-12 kg/cm<sup>2</sup> en sistemas con catalizador de lecho fluidizado.

La reducción de la presión de operación dio una mejora considerable en la selectividad, particularmente al procesar alimentaciones con un elevado contiendo de hidrocarburos parafínicos. El papel de las reacciones de dehidrociclización llegó a ser más importante. En operaciones de baja presión, no menos del 50-60% de los hidrocarburos aromáticos formados en el proceso son obtenidos a partir de parafinas. <sup>[4]</sup>

Otras alternativas que se han estudiado con respecto a los catalizadores del proceso de reformación de naftas son las zeolitas ya que estos catalizadores tienen mejores rendimientos y mayor resistencia, lo cual deriva en que el catalizador pueda ser usado por periodos de tiempos más largos favoreciendo así a la producción de reformado ya que hay menos paros en la planta. También con este tipo de catalizadores se tiene una mejor selectividad y no necesita cloración, dándole una mayor ventaja sobre los catalizadores con soporte de alúmina clorada. <sup>[19]</sup>

Además de producir gasolinas de alto octanaje en la reformación catalítica se producen LPG, pentanos y constituye la fuente principal de suministro de H<sub>2</sub> a plantas como alquilación, isomerización, hidrotratamiento, etc.

La reformación catalítica ha ido evolucionando. Los cambios en diseño del proceso tienen el fin de lograr algunos de los siguientes objetivos:

• Gran producción de reformado con alto índice de octano

- Regeneración más eficiente del catalizador.
- Mayor ciclo de vida del catalizador e incremento de la estabilidad superficial
- Bajas presiones de operación y menor recirculación de hidrogeno [2].

# 2.2 Constitución de la alimentación a la Reformadora

La nafta que se alimenta a la reformadora proviene de las distintas unidades que forman parte de la refinería, tal nafta presenta diferentes propiedades como su composición, intervalo de ebullición, etc. A continuación, se describe la composición general de la nafta, que es importante considerar ya que esta nos indica con qué facilidad se podrá reformar la nafta.

# 2.2.1 COMPOSICIÓN DE LA NAFTA

Para asegurar un reformado de alta calidad, la carga al proceso de Reformación Catalítica es previamente tratada en una unidad de hidrodesulfuración o hidrotratamiento, esto con el fin de remover la mayor parte de contaminantes ,es decir compuestos que contengan Azufre, Nitrógeno, halógenos, Oxigeno y metales. Además, en este tratamiento se desea que la mayor parte de las olefinas contenidas en la carga se saturen durante el proceso.

La composición de una nafta dada depende de si se obtiene directamente de la destilación de crudo o producido a partir de desintegración catalítica, FCC, coquización o de la unidad reductora de viscosidad.

Esta nafta de carga al proceso está compuesta por cientos de hidrocarburos de diferentes tipos, como hidrocarburos alifáticos saturados de cadena lineal (parafinas), hidrocarburos alifáticos saturados de cadena ramificada (iso-parafinas), hidrocarburos insaturados que contienen doble enlace carbón-carbón (olefinas), hidrocarburos saturados que tienen al menos un anillo (naftenos) y compuestos cíclicos insaturados compuestos de uno o más anillos de benceno (aromáticos). En la Figura 2.1 se muestras los diferentes compuestos que contiene la nafta<sup>[21]</sup>.



Figura 2.1 Composición de la nafta [21]

La reactividad de los enlaces insaturados hace a los aromáticos C<sub>6</sub>, C<sub>7</sub> C<sub>8</sub> o al BTX (Benceno, Tolueno y Xileno) importantes bloques de construcción para la industria petroquímica. Los aromáticos presentan un alto índice de octano <sup>[8,9]</sup>.

En la Tabla 2.1 Se muestra la composición de la nafta según su proceso de origen.

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

DA: Destilación Atmosférica. DCF: Desintegración Catalítica Fluidizada. RV: Reductor de Viscosidad. PEI: Punto de ebullición inicial. PEF: Punto de ebullición final. <sup>[12]</sup>

#### 2.2.2 CLASIFICACIÓN DE LAS NAFTAS

La nafta que proviene de otras unidades de refinación puede ser clasificada como a continuación se indica.

#### • Nafta directa

La fuentes principales de alimentación a la reformadora son nafta directa pesada, con un intervalo de temperatura de ebullición de 85-165°C. La nafta directa ligera (C<sub>5</sub> a 85°C) no es una buena alimentación a la reformadora porque está compuesta en su mayor parte por parafinas de bajo peso molecular, los cuales tienden a romperse a butano y fracciones ligeras. Por otra parte, los hidrocarburos con puntos de ebullición por arriba de 180°C son fácilmente hidrodesintegrados y como consecuencia se deposita de carbón sobre el catalizador de reformación.

La composición y la cantidad de nafta directa varían significativamente dependiendo del origen del crudo y su gravedad API.

#### • Nafta desintegrada

Productos derivados de otras unidades de procesamiento en la refinería, los cuales poseen aproximadamente el mismo intervalo de ebullición de la nafta directa, son añadidos a los anteriores como carga de alimentación a la reformadora, las fuentes principales de tales naftas son: la unidad reductora de viscosidad, la coquizadora, la hidrotratadora y la FCC, de aquí su denominación dado que todas estas unidades producen naftas por medio de la desintegración de fracciones pesadas. El porcentaje de naftas desintegradas que son mezclados con la nafta directa depende en la disponibilidad de estas corrientes, diseño y configuración de la hidrotratadora al proceso de mezclado de nafta.

Las naftas desintegradas generalmente contienen más azufre, nitrógeno, y olefinas; además lo compuesto de azufre y nitrógeno son en su mayoría aromáticos, producidos durante el craqueo de las largas cadenas de aceite pesado. Generalmente estos tipos de compuestos de azufre y nitrógeno son más difíciles de hidrotratar.

En la Tabla 2.2 se presenta la composición del pool de gasolinas de acuerdo al proceso del que proviene.

	%V/V	Azufre %w/w del total
Nafta de la FCC	36	98
Reformado	34	-
Alquiladora	12	-
Isomerizado	5	-
Butanos	5	-
Nafta Primaria Ligera	3	1
Nafta de Hidrodesintegración	2	-
MTBE*	2	-
Nafta de la coquizadora	1	1

Tabla 2.2 Típica composición del pool de Gasolinas [11]

\*MTBE. Metil Terbutil Éter

# 2.3 Procesos de Reformación Catalítica

Los procesos de reformado catalítico son comúnmente clasificado de acuerdo con la frecuencia y el modo de regeneración del catalizador, en (1) semi-regenerativo, (2) regeneración cíclica, y (3) regeneración continúa. La principal diferencia entre los tres tipos de procesos es la necesidad de detener la unidad para regenerar el catalizador. En el caso de un proceso semi-regenerativo el proceso se detiene y el catalizador es regenerado in situ, mientras que en el proceso cíclico se cuenta con una unidad móvil adicional o reactor de reserva para la regeneración del catalizador y en el proceso de regeneración continua el catalizador es reemplazado durante el funcionamiento normal de la unidad.

El proceso más utilizado en todo el mundo era del tipo semi-regenerativo, seguido de la regeneración continua y la regeneración cíclica es la menos común. Actualmente, la mayoría de los reformadores catalíticos están diseñados con regeneración continua, y en las antiguas plantas que usan proceso semi-regenerativo están siendo modernizados para operar como regeneración continua.

#### 2.3.1 UNIDADES SEMI-REGENERATIVAS

Un proceso de reformación catalítica semi-regenerativo generalmente tiene tres o cuatro reactores en serie con un sistema de catalizador de lecho fijo y opera continuamente (la duración del ciclo) de seis meses a un año. Durante esto período, la actividad del catalizador disminuye debido a la deposición de coque, provocando una disminución en el rendimiento de compuestos aromáticos y en la pureza del gas de hidrógeno.

Cuando se alcanzan las temperaturas del reactor de fin de ciclo, la unidad es apagada y el catalizador se regenera in situ. Un ciclo termina cuando el catalizador la unidad de reformado es incapaz de cumplir con sus objetivos de proceso: octanaje y rendimiento reformado. La regeneración del catalizador se lleva a cabo con aire como fuente de oxígeno. Un catalizador puede ser regenerado de cinco a diez veces antes de que se retire y sea reemplazado <sup>[14]</sup>. El RON obtenido en esta unidad está en el rango de 85-100<sup>[2]</sup>.

En la Figura 2.2 Se muestra la conformación de una unidad reformadora semi-regenerativa.



Figura 2.2 Unidad de reformado semi-regenerativo<sup>[2]</sup>

# 2.3.2 UNIDAD DE REGENERACIÓN CÍCLICA

En la regeneración cíclica aparte de los reactores de reformado catalítico, el proceso de regeneración cíclica tiene un reactor móvil adicional, que se utiliza cuando el catalizador de lecho fijo de cualquiera de los reactores regulares necesita regeneración. El reactor con el catalizador regenerado se convierte entonces en el reactor de reemplazo. Esto significa por lo tanto que el proceso de reformado se mantiene en operación continua.

En comparación con el tipo semi-regenerativo, en el proceso de regeneración cíclica la actividad global del catalizador varía mucho menos con el tiempo, por lo que se mantienen la conversión y la pureza de hidrógeno más o menos constante durante toda la operación. La principal desventaja de este tipo de reformado catalítico es la naturaleza compleja de la norma de conmutación del reactor, lo que requiere precauciones de seguridad elevadas. Además, para hacer posibles cambios entre los reactores, tienen que ser máximo del mismo tamaño. <sup>[14]</sup>



En la Figura 2.3 se presenta una unidad típica de reformación catalítica cíclica

Figura 2.3 Unidad de reformado cíclico [14]

#### 2.3.3 UNIDAD DE REGENERACIÓN CONTINUA

Este tipo de proceso utiliza un diseño de reactor de lecho móvil, en el cual los reactores están apilados (comúnmente llamados estacados). El catalizador se mueve por gravedad, fluyendo desde la parte superior hacia el fondo de los reactores estacados. El catalizador gastado es retirado desde el último reactor y enviado a la parte superior del regenerador para quemar el coque. El transporte de catalizador entre los reactores y el regenerador se hace por un método de elevación con gas. Durante el funcionamiento normal, pequeñas cantidades de catalizador se retiran continuamente, por lo que catalizador fresco o regenerado se añade a la parte superior del primer reactor a fin de mantener constante el

flujo de catalizador. Esta descripción general del proceso corresponde a unidades tipo Platforming, licenciadas por la UOP.<sup>[14]</sup>

En otro tipo de diseño, los reactores individuales son colocados separadamente, como en el proceso semi-regenerativo, con la modificación del movimiento del catalizador desde la parte inferior de un reactor hacia la parte superior del próximo reactor en línea. El catalizador regenerado es enviado al primer reactor y el catalizador gastado es retirado desde el último reactor y trasportado de vuelta al regenerador.

El índice de octano del reformado en la regeneración continua se encuentra en el intervalo de 95-108. Los beneficios de este proceso son la eliminación del tiempo de inactividad para la regeneración del catalizador y producción permanente de hidrogeno a pureza constante.

En la Figura 2.4 se muestra la confirmación de una unidad con regeneración continua o de cama móvil.



Figura 2.4 Unidad de Regeneración Continua<sup>[14]</sup>

Existen otros procesos comerciales disponibles en el mundo que son dominados por los licenciadores UOP y Axens Technologies en la reformación catalítica de tipo continuo y semi-regenerativo. Entre otros licenciadores se encuentran HoudryDivision, Chevron, Engelhard, Exxon-Mobil y Amoco. Los procesos difieren en el tipo de operación, tipo de catalizador, el proceso de regeneración del catalizador y el diseño de procesos.

A continuación, en la Tabla 2.3 se muestran los procesos comerciales de reformación <sup>[13]</sup>

Licenciatario	Nombre del proceso	Instalaciones comerciales	Aplicaciones	Alimentación	Tipo de proceso
Universal Oil Products (UOP) Process Division	Platforming	+ de 700	Nafta alto octanaje Aromaticos	Nafta de destilación atmosférica (virgen) Hidrocraqueo, FCC Termocraqueo	Semiregenerativo Regeneración continua
Institut Français du Pétrole	Catalytic reforming	90 unidades	Reformado de alto octano BTX y LPG	Nafta virgen FCC y termocraqueo	Semiregenerativo Regeneración continua
Chevron Research Co.	Rheniforming	73 unidades	Gasolina de alto octanaje Aromaticos	Nafta virgen FCC Hidrocraqueo	Semiregenerativo
Engelhard Corp	Magnaforming	150 unidades	Reformado de alto octano	Nafta virgen Hidrocraqueo Nafta de coking	Semiregenerativo Semicíclico
Exxon Research and Engineering Co.	Powerforming	1,4 millones BPSD	Stocks para el pool de gasolinas Aromaticos	Nafta virgen	Semiregenerativo o cíclico
Amoco Oil Co.	Ultraforming	150 unidades	Reformado Aromáticos	Nafta virgen FCC y termocraqueo	Cíclico o regenerativo
Houdry Division of Air Products and Chemicals, Inc.	Houdryforming	0.25 millones BPSD	Gasolina de avión Aromáticos Gasolina	Variedad de alimentaciones hasta 200 °C	Semiregenerativo

Tabla 2.3 Procesos comerciales de reformación [13]

# 2.4 Catalizador utilizado en la Reformación

En el catalizador las propiedades importantes son la actividad, selectividad y estabilidad. La actividad se refiera a la eficiencia del catalizador para aumentar la velocidad de una determinada reacción <sup>[22]</sup>, mientras la selectividad es la característica del catalizador de activar solo un reducido tipo de reacciones químicas y al mismo tiempo inhibe o redacta reacciones secundarias <sup>[23]</sup> y la estabilidad se refiere a que tan buen rendimiento y duración maneja el catalizador durante el proceso.

Durante el proceso de reformación lo que se busca es reordenas los hidrocarburos con bajo número de octanos en estructuras con alto número de octano y para lograr esto se dan una serie de reacciones como hidrodesintegración, isomerización, hidrogenación, deshidrogenación y deshidrociclación. De acuerdo con el producto de salida que se desea, las reacciones que se dan durante el proceso se deben controlar para evitar la producto no deseado, por esta razón es importantes el uso de catalizador en este tipo de proceso.

Como se mencionó anteriormente el catalizador que comúnmente se emplea en el proceso de reformación catalítica de naftas consiste en pequeños cristales de platino soportados en alúmina, generalmente con la inclusión de un segundo metal, como Estaño (Sn), Renio (Re), Iridio (Ir), Germanio (Ge), además de Cloro como promotor de acidez. Por lo general el catalizador esta hecho de una fase metálica dispersa sobre un sólido con soporte ácido [16].

La función acida del catalizador está dado por un soporte sólido de alúmina (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), el óxido de aluminio que se utiliza como soporte del catalizador es el γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, es la superficie amorfa de este tipo de alúmina hay dos tipos de sitios ácidos Bronsted y Lewis, como se muestra en la Figura 2.5:



Este tipo de alúmina no muestra suficiente acidez tipos Bronsted aunque contiene grupos OH, sin embargo al ser parcialmente clorada, con la adición de HCI la alúmina muestra considerable acidez de Lewis, el Cloro se fija al catalizador en forma de iones de Cloro, los cuales sustituyen radicales hidroxilo del catalizador y atraen parte de la densidad electrónica del enlace que forman los átomos de Aluminio, generando con ellos que los grupos adyacentes cedan densidad electrónica y por tanto se fortalezcan los sitios de Lewis que normalmente se encuentran en la alúmina.

Adicionalmente, el Cloro suele debilitar el enlace oxigeno-hidrogeno de los grupos OH adyacentes, favoreciendo así la aparición de acidez tipo Bronsted, como se muestra en la Figura 2.6, lo que le proporciona mejor estabilidad térmica y además una elevada actividad catalítica para las reacciones de desintegración e isomerización de hidrocarburos.



Figura 2.6 Cloración Parcial de la γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub><sup>[21]</sup>

La función metálica del catalizador debe proporcionar la actividad necesaria para las reacciones de deshidrogenación, hidrogenación y deshidrociclación, esta se impregna sobre la superficie del soporte a partir de soluciones acuosas de compuestos metálicos, después del secado, el tratamiento térmico y la reducción, el catalizador contiene partículas dispersas en forma de cristales del metal. Estas dos funciones dentro del catalizador deben estar en equilibrio para obtener la máxima eficiencia del proceso.

Como forma de mejorar las propiedades del catalizador, se añadieron elementos que modifican la función metálica y alternativamente la función ácida del catalizador. La adición de promotores de la función metálica, como Renio, Estaño, Iridio, Plomo o Germanio, mejoran la actividad, selectividad y estabilidad del catalizador, estos nuevos catalizadores bimetálicos han reemplazado casi por completo el uso de catalizadores monometálicos a base de Platino, ya que son más selectivos, estables y permiten que el proceso trabaje a condiciones menos severas <sup>[21]</sup>.

Un catalizador de Reformación Catalítica es capaz de promover simultáneamente la isomerización, deshidrociclación y deshidrogenación de hidrocarburos para permitir la más alta conversión posible hacia compuestos aromáticos.

Aunque estas reacciones pueden ser activadas a través de catálisis acida o metálica, la catálisis bifuncional se tiene que equilibrar correctamente, ambas fases del catalizador lo hacen no solo más activo, sino también más selectivo.

Basado en estudios sobre componentes puros Mills G. A. explica este efecto sinérgico, considerando los siguientes esquemas de reacción: el metal cataliza la deshidrogenación de parafinas en olefinas y naftenos en ciclo olefinas y aromáticos. Las olefinas producidas en la fase metálica migran a un centro acido vecino, donde son fácilmente protonados los iones carbenio. Los iones carbenio pueden isomerizarse en la función acida y desorberse como iso-olefinas. Estas iso-olefinas después migran a la fase metálica donde se adsorben y posteriormente se hidrogenan hacia iso-parafinas.



*Figura 2.7* Mecanismo de isomerización y desintegración sobre un Catalizador Bifuncional<sup>[21]</sup>.

Alternativamente, los iones carbenio también pueden ciclarse, produciendo alquilciclopentanos y alquilciclohexanos. Mientras que estos últimos son directamente deshidrogenados hacia aromáticos, los alquilciclopentanos necesitan someterse a una expansión del anillo en la fase acida, antes de que puedan ser convertidos en compuestos aromáticos <sup>[21,24]</sup>.

# 2.4.1 DESACTIVACIÓN DEL CATALIZADOR DE REFORMACIÓN

La actividad del catalizador se puede verse afectada debido a una serie de factores que a continuación se presentan:

- 1. Deposición de coque en el catalizador
- 2. Ambiente de agua/cloro
- 3. Contaminantes temporales como Azufre
- 4. Contaminantes permanentes como Plomo, Zinc y Cobre
- 5. Área superficial del catalizador
- 6. Tamaño de los cristales de Platino
- 7. Aglomeración
- 8. Cambio de la  $\gamma\text{-}Al_2O_3\,a\,\alpha\text{-}Al_2O_3$
- 9. Atrición del catalizador

Los factores a partir del número 5 y hasta el 9 son básicamente cambios mecánicos en el catalizador y ocurren principalmente durante la regeneración del catalizador.

Otra forma de desactivación del catalizador es por la deposición de coque. Existen varias teorías sobre la deposición del coque, uno o más de ellos pueden ser correctos. El concepto general de mayor aceptación es que el coque es formado por la condensación de hidrocarburos policíclicos, un segundo concepto generalmente aceptado es que los policíclicos son formados a partir de una olefina intermedia creada principalmente durante la ciclación (y en cierto grado durante la isomerización) de naftenos a partir de parafinas y aromáticos.



# Figura 2.8 Esquema de formación del coque [16]

Por último, te tiene la desactivación del catalizador por componentes que lo contaminan. A continuación, se explica más a detalle cómo afecta cada estas impurezas en la actividad el catalizador.

Azufre: la concentración máxima permitida en la alimentación de nafta es de 0.5 ppm en peso. La contaminación con Azufre de la Unidad de Reformación produce una atenuación de la actividad del Platino. Lo anterior significa que las reacciones de hidrodesintegración (función ácida) aumenten en relación con las reacciones de deshidrogenación y deshidrociclación (función metálica). Entre los efectos que se observan están:

- Disminución en la producción de hidrógeno
- o Disminución de la pureza de hidrógeno de gas reciclado
- o Aumento de la hidrodesintegración
- o Reducción del Delta T
- Menor producción de C5+
- o Menor actividad de catalizador para casos más severos
- Aumento del promedio de coquización en el catalizador
- Nitrógeno: la concentración máxima permitida de Nitrógeno en la carga de nafta es de 0.5 ppm peso. El Nitrógeno es un contaminante de función ácida. El Nitrógeno orgánico que entra en la Unidad de Reformación se trasformará en amoníaco, este reaccionará con el cloruro del catalizador para formar Cloruro de amonio volátil.

El efecto general consiste en reducir el nivel de cloruro del catalizador produciendo lo que se señala a continuación:

- Perdida de la actividad del catalizador
- Aumento en la producción de Hidrogeno
- o Disminución en la pureza de Hidrogeno
- Aumento en el Delta T del reactor
- Agua: una Unidad de Platforming se desempeña mejor cuando la carga de alimentación que le llega a la unidad se encuentra esencialmente seca y se mantiene el equilibrio agua-cloruro a través de los sistemas de inyección. El agua tiende a actuar como un contaminante de la función del metal, también produce la eliminación del cloruro que se encuentra en el catalizador y forma el HCI. Entre los efectos, resultantes que se observan están:
  - o Disminución en la producción de Hidrógeno
  - o Disminución en la pureza de Hidrogeno en el gas recirculado
  - $\circ \quad \text{Mayor producción de $C_3$ y $C_4$}$
  - o Reducción del Delta T
  - Menor producción de C5+
  - o Mayor velocidad de coquización en el catalizador
  - o Aumento en los niveles de HCl en el gas de recirculado

 Metales: debido a los efectos cuantitativos e irreversibles de la contaminación por metales en los catalizadores de reformación, no deberían existir niveles detectables de metales en la carga de la unidad. La mayoría de los metales son perjudiciales para la función del Platino en el catalizador. En términos generales la contaminación por metales ocurre en todos los reactores.

Los efectos observables serán una perdida menos severa en la Delta T del reactor afectado, una pérdida de actividad y selectividad generalizada del catalizador, a medida que el catalizador se contamine.

La concentración máxima permitida de los metales es de Pb+As+Cu≤20 ppb.<sup>[16]</sup>

### 2.5 Reacciones del Proceso de Reformación

La nafta alimentada de bajo número de octano contiene gran cantidad de parafinas de cadena larga y poca cantidad de parafinas de cadena ramificada, naftenos, olefinas y aromáticos<sup>[24]</sup>.

Dada la cantidad de compuestos que participan en las reacciones de reformación, es muy común agrupar aquellos de características y compuestos semejantes, asumiendo que varios isómeros con el mismo grupo funcional reaccionan de forma similar.<sup>[2]</sup>

A continuación, se describe brevemente las reacciones que se dan de acuerdo con el tipo de compuesto a reformar.

 Parafinas: La nafta virgen proveniente comúnmente de la destilación y la nafta provenientes de diversos procesos de refinación contienen de 15 a 75 % de parafinas de cadena lineal larga con un RON típico menor a 50. Las parafinas pueden ser isomerizadas a moléculas ramificadas.

$$\begin{array}{c} \mathsf{CH3} \\ | \\ n\text{-}\mathsf{C}_7\mathsf{H}_{16} \rightarrow \mathsf{H}_3\mathsf{CCH}_2\mathsf{CH}_2\mathsf{CCH}_3 \\ | \\ \mathsf{CH3} \end{array}$$

Estas también pueden someterse a deshidrociclación para dar cicloparafinas:

$$n-C_7H_{16} \rightarrow \bigcirc CH_3 + H_2$$
 ó  $n-C_7H_{16} \rightarrow \bigcirc CH_2CH_3 + H_2$ 

Las parafinas pueden también someterse a hidrodesintegración.

 $n-C_9H_{20}+H_2 \rightarrow n-C_5H_{12} + n-C_4H_{10}$ 

 Olefinas: Las olefinas suelen no estar presentes en la nafta destilada, pero pueden estar presentes en las naftas que provienen de otros procesos de refinación. Las olefinas no son compuestos deseados en alta concentración por lo que es común que se hidrogenen. Estas pueden ser hidroisomerizadas para dar isoparafinas:

$$\begin{array}{c} CH_{3} \\ | \\ 1 \text{-Heptano} + H_{2} \rightarrow H_{3}CCH_{2}CH_{2}CH_{2}CHCH_{3} \end{array}$$

Las olefinas pueden también someterse a ciclación.

 Naftenos: La alimentación usualmente contiene de 18 a 50 % de naftenos como ciclopentanos y ciclohexanos. A menudo hay más ciclopentanos que ciclohexanos. Los ciclohexanos se pueden deshidrogenar para dar aromáticos.



Los ciclopentanos pueden someterse a hidroisomerazación para dar ciclohexanos con subsecuente deshidrogenación para dar aromáticos:



 Hidrocarburos cíclicos insaturados: Algunos de estos están presentes en la carga de alimentación y también son generados en el reactor. Pueden ocurrir reacciones que sustituyen aromáticos como a continuación se muestra:



Los aromáticos también pueden experimentar hidrodealquilación:



Compuestos que contengan S o N pueden someterse a hidrodesulfuración o hidrodesnitrogenación, respectivamente <sup>[24]</sup>:

$$\overbrace{S}^{CH_3} + 4H_2 \rightarrow C_5H_{12} + H_2S$$

Como anteriormente vimos de acuerdo con el tipo de hidrocarburo que contiene la nafta de alimentación se deberán llevar a cabo cierto tipo de reacciones para lograr convertir la nafta de bajo número de octano en una nafta con alto índice de octano. A continuación, se describirá el tipo de reacciones que ocurren en el proceso de reformación catalítica de naftas el cual se describió anteriormente de manera general dependiendo en el hidrocarburo a tratar, pero ahora se detallara un poco más que sucede en cada reacción.

Como en cualquier serie de reacciones químicas complejas, se producen reacciones que resultan en productos indeseables además de los deseados. Tienen que ser elegidas las condiciones de reacción que favorezcan las reacciones deseadas e inhiban las no deseadas. Las reacciones deseables en el reformador catalítico, todas conducen a la formación de compuestos aromáticos e isoparafinas, como se muestra a continuación:

- 1. Las parafinas se isomerizan y se convierten en naftenos. Los naftenos son posteriormente convertidos en compuestos aromáticos.
- 2. Las olefinas se saturan para formar parafinas, que luego reaccionan como en (1).
- 3. Los naftenos se convierten en compuestos aromáticos.
- 4. Los aromáticos se dejan esencialmente sin cambios.

Las reacciones que conducen a la formación de productos indeseables incluyen:

 La dealquilación de cadenas laterales en naftenos y aromáticos para formar butano y parafinas más ligeras. 2. La desintegración de parafinas y naftenos para formar butano y parafinas más ligeras.

De acuerdo con el grado de desactivación que presente el catalizador, será necesario cambiar las condiciones de operación del proceso para así poder mantener la severidad de reacción y así suprimir las reacciones no deseadas.

Las cuatro principales reacciones que tienen lugar durante el Proceso de Reformación Catalítica de Naftas son las siguientes: la deshidrogenación de naftenos a aromáticos, la deshidrociclación de parafinas a aromáticos, la isomerización y la hidrodesintegración <sup>[10]</sup>.

A continuación, se da una breve explicación de las reacciones de reformación:

#### • Reacciones de Deshidrogenación

Las reacciones de deshidrogenación son altamente endotérmicas y causan una disminución en la temperatura a medida que avanza la reacción por eso es necesario el uso de calentadores entre las camas catalíticas para mantener la mezcla a alta temperatura, esto debido a que las reacciones de deshidrogenación tienen las mayores velocidades de reacción dentro del proceso de reformación catalítica de naftas, por lo que al mantener las temperaturas los suficientemente altas las reacciones procederán con la misma velocidad<sup>[10]</sup>.

#### • Reacciones de Isomerización

Con la isomerización de parafinas y ciclopentanos generalmente se obtiene un producto de menor octanaje que la conversión en aromáticos. Sin embargo, hay un aumento sustancial sobre el de los productos no isomerizados. Estas son reacciones bastante rápidas con pequeños efectos de calor <sup>[10]</sup>.

#### • Reacciones de Hidrodesintegración

Las reacciones de hidrodesintegración son exotérmicas y dan como resultado la producción de líquido ligero y producto gaseoso. Son reacciones relativamente lentas, y por lo tanto la mayor parte de la hidrodesintegración se produce en la última sección del reactor. La principal reacción de hidrodesintegración implica la desintegración y la saturación de parafinas.

La concentración de parafinas en la carga abastecida determina el alcance de la reacción de hidrodesintegración, pero la fracción relativa de isómeros producidos en grupos de cualquier peso molecular es independiente de la carga abastecida.

Con el fin de obtener una alta calidad y rendimientos del producto, es necesario controlar cuidadosamente las reacciones de hidrodesintegración y de aromatización. Las temperaturas del reactor son cuidadosamente monitorizadas para observar el alcance de cada una de estas reacciones y la baja presión en el proceso de reformación se utiliza generalmente para la producción de compuestos aromáticos <sup>[10]</sup>.

Reacción	Hidrodesintegración	Isomerización	Ciclación	Isomerización de Naftenos	Deshidrogenación de Naftenos
Velocidad de reacción	Muy lenta	Rápida	Lenta	Rápida	Muy rápida
Efecto de calor	Exotérmica	Levemente exotérmica	Levemente exotérmica	Levemente exotérmica	Muy endotérmica
Efecto de alta P	Ayuda	No	Obstruye	No	Obstruye
Efecto de alta T	Ayuda	Ayuda	Ayuda	Ayuda	Ayuda
Efecto de alta velocidad espacial	Obstruye	Obstruye	Obstruye	Obstruye	Obstruye
Efecto en producción de H <sub>2</sub>	Absorbe	No	Evoluciona	No	Evoluciona
Efecto en RVP	Aumento	Aumento	Disminuye	Disminuye	Disminuye
Efecto en densidad	Disminuye	Leve disminución	Aumento	Leve aumento	Aumento
Efecto en rendimiento volumétrico	Varia	Leve aumento	Disminuye	Leve aumento	Leve disminución
Efecto en el octano	Aumenta	Aumenta	Aumenta	Disminuye	Aumenta

Tabla 2.4 Algunas relaciones en la reformación catalítica.

Debido a la amplia gama de parafinas y naftenos incluidos en la alimentación en la unidad reformadora y debido a que los promedios de reacciones varían considerablemente con respecto al número de carbonos del reactante, estas reacciones corren en serie y paralelo entre sí, formando el esquema complejo de reacción general que se indica en la Figura 2.9:



Figura 2.9 Esquema generalizado de reacción Platforming [17]

# 2.5.1 REACCIONES DE REGENERACIÓN DEL CATALIZADOR

Como se mencionó en la sección anterior durante el proceso de reformación el catalizador sufre fenómeno de desactivación, aglomeración, etc. que se traduce en reducción de las propiedades deseadas de los productos principalmente la calidad, lo cual se refleja en el costo de este; por esta razón es indispensable llevar a cabo la regeneración del catalizador empleado.

El objetivo de la regeneración es hacer que el catalizador retorne a un estado lo más cerca posible de la condición de catalizador fresco, lo cual quiere decir que el catalizador regenerado debe poseer las siguientes propiedades:

- 1. La superficie de área debe ser alta
- 2. Los metales deberán encontrarse en estado de reducción
- 3. Los metales deben ser altamente dispersos
- 4. La relación de halógeno/acidez debe encontrarse en el nivel adecuado. [2]

La regeneracion catalitica consiste en 4 etapas donde las reacciones de regeneración deseables se completan en el catalizador. La regeneración química es la misma en toda la selección de regeneración.

A continuación, se muestran las cuatro etapas de la regeneración catalítica, así como las reacciones que se dan en cada una.

#### > Sección de quemado de coque

El primer paso es quemar el coque del catalizador. La combustion de coque se hace con oxigeno por reaccion de combustion. La reaccion produce dióxido de carbono y agua, ademas libera energia (es exotermica).

A continuación se muestra la reaccion que se lleva a cabo.

Coque + 
$$O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$$
 + Calor

Esta reaccion es necesaria y deseable ya que remueve el coque, pero podria dañarse facilmente el catalizador. Esto resulta en el aumento de temperatura en el catalizador, y una alta temperatura aumenta en riesgo de generar un daño permamente en el catalizador. Asi que la reaccion debe ser controlada. Esto se hace controlando la cantidad de oxigeno durante la combustion. Mucho oxigeno genera una alta temperatura. Poco oxigeno proboca que la reaccion sea muy lenta. Durante la operación normal, el contenido de oxigeno se mantiene entre 0.5 y 1 % mol de oxigeno. Este el rango optimo maximo para tasa de la quema de coque con la menor temperatura posible.

#### Sección de oxicloración

En este segundo paso se justa la cantidad de cloruros y oxidación, y dispersa los metales (por ejemplo: Platino) en el catalizador. Estas reacciones toman lugar por reacciones complejas con oxigeno y compuestos organicos de cloruro. Estas reacciones necesita ambos compuestos oxigeno y cloruro. Las reacciones de ajuste de cloruro se pueden resumir de la siguiente manera:

(1) Compuestos de Cloro + 
$$0_2 \rightarrow HCl + CO_2 + H_2O$$

29

(2) 
$$HCl + O_2 \leftrightarrow Cl_2 + H_2O$$
  
(3)  $Base - OH + HCl \rightarrow Base - Cl + H_2O$ 

El cloruro es necesario en el catalizador para para mantener la propiedad activa de la función ácida. Pero mucho o poco cloruro podria provocar un efecto indeseable en la plataforma de reacción. Asi que la cantidad de cloruros en el catalizador deber ser controlado. Esto se hace por control de la cantidad de compuesto de cloruro injectados. Durante la operación normal, el contenido de cloruro en las oxinas del catalizador se mantienen entre 1.1-1.3 % peso de cloruro, dependiendo de las series del catalizador. Este es el rango optimo de la funcion ácida en el catalizador.

Las reacciones de oxidacion y redisperción se pueden resumir de la siguiente manera:

Metal + 
$$0_2 \xrightarrow{Cl_2}$$
 Metal Oxidado (diesperso)

Mayor distribución uniforme del metal en la superficie del catalizador resulta en una mejor función de metal del catalizador. La condición que promueve la apropiada oxidación y redisperción del metal es una alta concentración de oxígeno, adecuado tiempo de residencia, correcta temperatura, y correcta concentración de cloruro.

\*Nota: los compuestos de cloro que se utilizan en esta sección son Percloroetileno (PERC) o Metilcloformo (Tricloroetano).

#### Sección de secado

En el tercer paso se seca el exceso de humedad del catalizador. El exceso de humedad se presenta en la etapa del quedamo de coque. El secado ocurre cuando un flujo de gas seco caliente cruza el catalizador, removiendo el agua de la base del catalizador:

Base – 
$$H_2O$$
 + Gas Seco → Base + Gas +  $H_2O$ 

El secado de calizador se hace antes de que ese re-entre a la plataforma de reacción, eso mejora su rendimiento global. Esta etapa de secado es favorable a una alta temperatura, edecuando el tiempo de secado, y adecuando la velocidad del flujo de gas seco.

#### > Sección de reducción

En el cuarto paso se convierten los metales del estado de oxidación a la forma de estado reducido. Esto debe ser hecho después de la etapa de oxicloración para regresar los metales a un estado optimo antes de regresarlo a la plataforma de reacción. La reacción de reducción toma lugar con hidrogeno como se muestra en la siguiente reacción:

Metal oxidado +  $H_2 \rightarrow$  Metal reducido +  $H_2O$ 

La mas completa reducción, mejor para el metal se llevara acabo en la plataforma de reacción. La condición que favorece la reacción es la alta pureza del hidrogeno, suficiente temperatura en la zona de reducción y una velocidad de flujo adecuada de gas reducido para asegurar una buena distribución de gas<sup>[17]</sup>.

# 2.6 Termodinámica [14]

Las reacciones más rápidas (por ejemplo, deshidrogenación de naftenos) alcanzan el equilibrio termodinámico, mientras que los otros son controlados por la cinética. El aumento de la temperatura de reacción y la reducción de la presión tienen ambos un efecto positivo en la velocidad de reacción y la viabilidad termodinámica de la deshidrogenación de naftenos (la reacción más importante de reformado catalítico). El efecto de estas variables es más leve en el equilibrio termodinámico de las otras reacciones.

En la Tabla 1.7 se resume el efecto termodinámico de la principal reacciones de reformación. Otros efectos se mencionan a continuación:

- La deshidrogenación de naftenos y parafinas es rápida y las concentraciones al equilibrio se establecen en la parte inicial de la cama catalítica.
- Olefinas son fácilmente hidrogenadas, y al equilibrio puede existir sólo en pequeñas concentraciones.
- La isomerización de parafinas es una reacción suficientemente rápida y sobre todo termodinámicamente controlada, lo que significa que las concentraciones reales están cerca del equilibrio.
- La deshidrociclación de parafinas es una reacción mucho más lenta y cinéticamente controlada.

- La velocidad de hidrodesintegración aumentan con la presión y reduce el rendimiento del reformado.
- La coquización es muy lenta, pero aumenta rápidamente a una presión de Hidrógeno baja y una alta temperatura.

Por lo tanto, es muy deseada la operación de reactores a alta temperatura y baja presión; sin embargo, la desactivación del catalizador debido a la deposición de coque también se ve favorecida a esas condiciones. Además, una baja presión parcial de hidrógeno da como resultado un aumento en la velocidad de aromatización y una disminución en la velocidad de la hidrodesintegración.

Tabla 2.5 Comparación general de la termodinámica de las principales reacciones de reformado catalítico.

	Velocidad de reacción	Calor de reacción	Equilibrio termodinámico
Deshidrogenación de Naftenos	Muy rápida	Muy Endotérmica	Se alcanza
Isomerización de Naftenos	Rápida	Levemente Exotérmica	Se alcanza
Isomerización de Parafinas	Rápida	Levemente Exotérmica	Se alcanza
Deshidrociclación de Parafinas	Lenta	Muy endotérmica	No se alcanza
Deshidrogenación de Parafinas	Muy rápida	Endotérmica	No se alcanza
Hidrodesintegración	Muy lenta	Exotérmica	No se alcanza

A continuación, se muestra los calores de reacción de algunas de las reacciones de reformación <sup>[20]</sup>:

Tabla 2.6 Calores de reacción

Reacción	ΔH, kJ/mol H <sub>2</sub>
Parafina a nafteno	+44 (endotérmica)
Nafteno a aromático	+71 (endotérmica)
Hidrodesintegración	-56 (exotérmica)

# 2.7 Proceso de Reformación Catalítica Continúa de Naftas (CCR)

La unidad de reformación catalítica con regeneración continua (CCR) se describió brevemente en con anterioridad. A continuación, se describirá a detalle las partes que conforman el proceso CCR.

El proceso de reformación continua fue desarrollado por la Universal Oil Products (UOP) y puesto en marcha en 1971 para producir grandes cantidades de reformado con altos índices de octano e hidrogeno de alta pureza sobre una base continua. Se le denomina continua o CCR por sus siglas en inglés (Continuous Catalityc Reforming) debido a que el catalizador empleado en el proceso se regenera continuamente.

A continuación, se describe a detalle partes que conforman el proceso CCR.

#### • Sección de Pretratamiento de la Carga de Alimentación

La alimentación al proceso debe ser hidrotratada adecuadamente para disminuir los contenidos de azufre e hidrógeno a 0.5 ppm, saturar todas las olefinas, remover metales y halógenos oxigenados. El intervalo de ebullición de la nafta tiene un IBP mínimo de 75°C y un FBP extra de 204°C.

La función de La sección de precalentamiento es elevar la temperatura del sistema de alimentación al proceso más el reciclado de H<sub>2</sub> hasta alcanzar la temperatura de 482°C o valores más elevados. Los intercambiadores combinados de la alimentación al proceso podrían ser:

- a) Un banco de intercambiadores horizontales en serie
- b) De uno a cuatro intercambiadores verticales paralelos
- c) Intercambiadores de placa

Los intercambiadores verticales y de placa presentan bajas caídas de presión y se prefieren por encima de los intercambiadores horizontales <sup>[2]</sup>.

#### • Sección de Reacción

La sección de reacción puede ser de 3 a 5 reactores en serie separados por la sección de recalentamiento o de intercambiadores. Los reactores pueden ir colocados al lado o
apilados uno encima del otro. Para aplicaciones de lecho fijo, los tipos de reactor pueden ser:

- a) Esféricos
- b) Flujo descendente
- c) Tubo central de flujo descendente radial
- d) Tubo central de flujo ascendente radial

La mayoría de los diseños de reactores ahora son de flujo radial debido a la baja caída de presión que se presentan entre ellos en contraposición en los tipos a y b. Todos los CCR utilizan reactores de flujo radial apilado, de los tipos c y d. El flujo ascendente radial es un diseño de reactores de flujo radal apilado usado en el proceso Platforming, el flujo de hidrocarburo asciende a partir del tubo central, en lugar de hacerlo en sentido descendente.

La mayoría de las unidades de Platforming CCR operan a presiones de (12.3-3.5 kg/cm<sup>2</sup>) con temperaturas de 482-543°C<sup>[2]</sup>.



Figura 2.10 Tipos de Reactores utilizador en el proceso Platforming<sup>[16]</sup>.

La carga alimentación se combina con una corriente gas de reciclo que contiene 60 a 90% mol de Hidrógeno. Se precalienta con el efluente del último reactor continuando su calentamiento, entra al primer calentador donde se vaporiza y se calienta a la temperatura de reacción antes de entrar al primer reactor.

La nafta pasa a través del lecho catalítico del reactor mientras los hidrocarburos que contiene se someten a diferentes reacciones como deshidrogenación, deshidrociclación, isomerización e hidrodesintegración. El primer reactor tiene la menor cantidad de catalizador y el último tiene la mayor cantidad. Esta distribución de catalizador es común debido a que, durante las etapas iniciales de reacción, las reacciones endotérmicas dominan el proceso y esto causa una contante disminución de la temperatura y de la velocidad de reacción. El efluente deja el primer reactor y entra al segundo calentador donde la carga se recalienta e introduce al segundo reactor, en el cual se lleva a cabo principalmente las reacciones de isomerización. El efluente del segundo reactor también es recalentado e introducido al tercer reactor. En este reactor se producen reacciones como la deshidrociclación e hidrodesintegración. Debido a que las reacciones deseadas son endotérmicas la temperatura de la alimentación disminuye en cada sección de reacción. Sin embargo, la caída de temperatura a través del tercer reactor es menor, ya que las reacciones de hidrodesintegración tienen un comportamiento exotérmico e influyen en este gradiente. El proceso de calentamiento y reacción continúa hasta que la alimentación ha dejado el último reactor. Al mismo tiempo pequeñas cantidades de catalizador dejan el sistema de reacción y entran al sistema de regeneración [21].

Dependiendo el producto reformado que se quiera obtener (ya sea una nafta con alto número de octano o productos para procesos petroquímicos [BTX]), la carga puede ser alimentada a un nuevo reactor o pasar a la siguiente sección del proceso.

#### • Sección de Calentamiento

El recalentamiento o sección de intercambiadores pueden ser calentadores individuales, de tiro ascendente circular o del tipo de cabina horizontal, bien puede ser una casilla dividida de calentador con una celda para el calentador de carga y para cada intercambiador. El calentador dividido de multiceldas se utiliza en las Unidades Platforming debido a su baja caída de presión. El combustible utilizado puede ser solamente aceite, solo gas o una combinación de aceite y gas. El tipo de combustible también ejercerá un impacto sobre si los quemadores serán de piso o de instalación lateral si los tubos serán del tipo vertical en U, tipo invertido en U, o un tubo recto en cruz. Estos calentadores pueden ser:

- a) Tiro natural
- b) Tiro forzado
- c) Alta intensidad
- d) La metalurgia de los tubos de calentadores es usualmente de 21/4% Cr-1%Mo o 9%Cr-1Mo según las temperaturas en las paredes del tubo (607.2 o 635°C, respectivamente).

La mayoría de los calentadores tienen una sección de convección para el calor de desecho que es utilizado para la generación de vapor o para los rehervidores de columnas más recientes.

### • Sección de Compresión

### > Compresores de Recirculación

Todas las unidades de reformación tienen uno o más compresores para reciclado. El compresor de reciclado hace circular el gas rico en Hidrógeno a través del circuito del reactor. Sin la circulación del hidrogeno, se formarían grandes cantidades de coque en el catalizador que evitarían las reacciones catalíticas deseadas. Es importante conservar el flujo de gas de reciclado pueden ser de tipo reciproco o centrifugo, siendo este último el más común.

### > Compresores de Gas

El gas rico en Hidrógeno proveniente del separador del producto que no es nuevamente reciclado hacia el circuito del reactor vía el compresor de gas de recirculación se exportara desde la unidad vía el sistema de gas neto. Este Hidrógeno sobrante es comprimido en el sistema de gas neto y exportado hacia el cabezal de Hidrógeno de la planta. Los compresores de gas pueden ser de tipo reciproco o centrifugo, siendo el de tipo reciproco el más usual. El usuario principal de este Hidrógeno es la Unidad de Hidrotratamiento de Nafta. Algunas unidades incorporan una unidad de purificación de flujo descendente del sistema de gas neto para aumentar la pureza del Hidrógeno que se encuentra en el flujo del efluente de gas.

### • Sección de Separación y Estabilización

La sección de separación entre gas y líquido, cuya función consiste en dividir los hidrocarburos ricos en componentes aromáticos C<sub>5</sub>+ del H<sub>2</sub> neto podrá ser:

- a) Un solo separador
- b) Separadores de baja y alta presión que pueden involucrar recontacto de gas
- c) Sección de enfriamiento

A medida que la presión de la unidad disminuye, el flasheo a través de un separador se hace menos eficiente y una cantidad mayor de hidrocarburos termina en el flujo neto de H<sub>2</sub>. Lo anterior aumenta la carga en el compresor de recirculación y en el equipo de calentamiento y enfriamiento. Lo anterior también incrementa el trabajo en el sistema de fraccionamiento ya que existe una mayor cantidad de hidrogeno con respecto de la cantidad de extremos livianos en el líquido separado, lo cual requiere de un reflujo y recalentamiento adicional.

Para mejorar la eficiencia de esta separación, se adicionará un separador de alta presión. Este paso de contacto mejora la recuperación del material C<sub>3</sub>+; a partir del flujo neto de H<sub>2</sub> también se eleva la presión, hasta llegar al nivel necesario para los usuarios del flujo descendente, como es el caso de los hidrotratadores de naftas.

La sección del estabilizador puede ser de una o dos columnas (divisor de estabilizador y reformado, como en el caso de la unidad de compuestos aromáticos) utilizados para producir un flujo o fraccionado a partir de aromáticos  $C_5$ + o  $C_6$ +. Estas columnas son por lo general accionadas por vapor, o en algunos casos, a través del recalentamiento del efluente del reactor<sup>[2]</sup>.

# • Sección de Regeneración del Catalizador

El regenerador permite quemar el coque depositado sobre el catalizador. Este sistema de regeneración cuenta con subsecciones que se encargan de tareas como la

redisperción de los metales activos, la restauración del Cloro en el catalizador ya sea a un nivel de catalizador fresco o casi fresco, el secado del catalizador y un acondicionamiento del catalizador antes de transportar el catalizador regenerado a la zona de reducción del catalizador y al reactor principal. El objetivo de la regeneración del catalizador es restaurarlo casi a su estado fresco (actividad igual a 1) donde los sitios del metal y ácidos están funcionando como antes de la deposición de coque.

El regenerador del catalizador está dividido en la zona de combustión de carbono, una zona de cloración y la zona de secado. El tiempo requerido para la regeneración del catalizador puede variar de 6 a 8 horas y las mejoras en la eficiencia de la regeneración han llevado a conseguir una excelente dispersión de metales y una alta actividad del catalizador <sup>[21]</sup>.



*Figura 2.11* Sección de regeneración de catalizador para una Reformadora Catalítica Continua<sup>[16]</sup>

A continuación, en la Figura 2.12 se muestra las secciones que conformar el proceso Platforming de la Reformación Catalítica Continua de Naftas.



*Figura 2.12* Esquema general de las secciones componen el proceso CCR <sup>[16]</sup>

### 2.7.1 VARIABLES DEL PROCESO<sup>[14]</sup>

Las variables del proceso son muy importantes ya que estas son las que le dan flexibilidad de operación, esto con el fin de lograr satisfacer la demanda en dado caso de haber un cambio drástico ya sea que la condiciones de la alimentación cambien o que la demanda aumente o disminuya, etc.

En el proceso de reformado catalítico existen cuatro variables principales que influyen en el rendimiento de la unidad, ya sea semi-regenerativa o de regeneración continua: presión del reactor o temperatura del reactor, el espacio velocidad y relación molar Hidrógeno/Hidrocarburo (H<sub>2</sub>/HC), estas pueden modificar el rendimiento y la calidad del reformado.

### • Presión

Una reducción en la presión del reactor aumenta la producción de Hidrógeno y el rendimiento de reformado, disminuye la temperatura requerida en el reactor para alcanzar una calidad constante de producto y acorta el ciclo de vida del catalizador, ya que se incrementa la velocidad de depósito del coque sobre el catalizador. Por efecto de las caídas de presión, la presión del reactor disminuye a través de las diversas etapas de reacción. La presión media de los diversos reactores se asocia generalmente como la presión del reactor. Valores típicos de presión del reactor se encuentran entre 15 y 21 atm (procesos semi-regenerativos y de regeneración cíclica) y de 5 y 11 atm (regeneración continua). Se requieren presiones parciales de hidrógeno altas en el reactor para promover reacciones de isomerización y para reducir la deposición de coque en el catalizador <sup>[14]</sup>.

#### Temperatura

La temperatura de reacción es la variable más importante en el reformado catalítico, ya que la calidad del producto y los rendimientos dependen en gran medida de esta.

La temperatura media ponderada del lecho (WABT) y la temperatura media ponderada de entrada (WAIT) son los dos principales parámetros para expresar la temperatura media del reactor de reformado. Se diferencian en que la WABT representa la temperatura integrada a lo largo del lecho del catalizador, en tanto que la WAIT se calcula con la temperatura de ingreso en cada reactor.

Las unidades semi-regenerativas operan a temperaturas más bajas (450 a 525 °C) que las de regeneración continua (525 a 540°).

Todas las velocidades de reacción se incrementan cuando se opera a altas temperaturas. La hidrodesintegración (reacción no deseable), se produce en mayor medida a temperaturas altas. Por lo que, para obtener productos de alta calidad y buenos rendimientos, es necesario controlar cuidadosamente la hidrodesintegración y las reacciones de aromatización. Las temperaturas del reactor son monitoreadas contantemente para observar el alcance de estas reacciones <sup>[14]</sup>.

### • Velocidad espacial

Tanto la LHSV (Espacio velocidad del líquido en horas) y WHSV (Espacio velocidad másica en horas) son de uso típico en Unidades de Reformado Catalítico para expresar el espacio velocidad. El espacio velocidad y la temperatura del reactor se emplean comúnmente para ajustar el índice de octano de un producto. Cuanto mayor sea el espacio velocidad, mayor es la temperatura necesaria para obtener un producto con un determinado índice de octano. La severidad de la unidad de reformado catalítico puede aumentarse mediante el incremento de la temperatura del reactor o mediante la reducción del espacio velocidad. Puesto que la cantidad de catalizador cargado en los reactores es constante, la reducción de la velocidad espacial durante funcionamiento puede reducirse sólo al disminuir el caudal de alimentación <sup>[14]</sup>.

# • Relación Hidrógeno/Hidrocarburo (H<sub>2</sub>/HC)

Esta relación se expresa en base molar, es decir, moles de hidrógeno en el gas de reciclo (que es una mezcla de hidrógeno y gases ligeros) por mol de alimentación de nafta (mol/mol). Valores de 4 a 6 son típicos en unidades de reformado comerciales.

Un aumento en la proporción H<sub>2</sub>/HC provoca un aumento en la presión parcial de hidrógeno y elimina precursores de coque de los sitios activos del metal. El efecto global de esto se refleja en el incremento de la vida del catalizador. En otras palabras, la tasa de formación

de coque sobre el catalizador, y por lo tanto la estabilidad del catalizador y su vida útil es función de la relación H<sub>2</sub>/HC y de la presión parcial del Hidrógeno presente en el sistema del reactor. Sin embargo, incrementar la relación H<sub>2</sub>/HC influye negativamente en la aromatización e incrementa la hidrodesintegración.

A continuación, en la Tabla 2.7 se presenta un resumen las condiciones típicas de operación en los procesos de reformado.<sup>[9]</sup>

Tipo de reformación	Catalizador	P (bar)	H2/HC (mol/mol)	Velocidad espacial (h <sup>-1</sup> )	RON
					100-102
Lecho móvil	Bimetálico	3-10	2	2-3	(Producción
					de aromáticos)

Tabla 2.7 Condiciones típicas de operación de los 3 procesos de reformación

# 2.7.2 Modelos Cinéticos

En su forma final un modelo cinético consiste en un conjunto de expresiones de velocidad de reacción que describen la trayectoria de las reacciones químicas en un esquema global. Es muy interesante notar la amplia variación en el número de componentes involucrados y la complejidad que un esquema de reacción puede incluir<sup>[21]</sup>.

Los estudios experimentales y de mecanismos generalmente resultan en la creación del modelo cinético que cuantitativamente describe el camino que toma un reactivo en particular. Tomando en cuenta la complejidad de las reacciones de reformación y el número de especies que se ven envueltas, muchos investigadores han adoptado un enfoque "agrupado" (lumped) para describir la cinética. En la aproximación por lumps, muchas moléculas diferentes, pero con características similares son agrupada en un solo grupo o lump. En la cinética de las reacciones asume que todas las especies del lump se comportan de manera idéntica.

El primer modelo cinético para la reformación fue dado por Smith <sup>[26]</sup>, quien asumió que la alimentación era una combinación de 3 lumps: Parafinas (P), Naftenos (N) y Aromáticos (A). En la Figura 2.13 se muestra el esquema básico de este modelo. El modelo cinético consta de las siguientes reacciones, deshidrociclación (P $\rightarrow$  N), deshidrogenación (N $\rightarrow$  A) e hidrodesintegración (A $\rightarrow$  P). Las reacciones de desintegración en este modelo dan como resultado una distribución equilibrada de Parafinas. Este modelo no incluye los parámetros

que generan efecto sobre las reacciones como la presión y el exceso de Hidrógeno. Además, no hay un factor de desactivación debido a la presencia de coque o hidrocarburos pesados adsorbidos. Krane et al.<sup>[27]</sup> mejora aún más este modelo dividiendo cada lump de P, N y A en grupos dependiendo el número de carbonos. Este modelo tiene 20 lumps y 53 reacciones. La ecuación (1) muestra la forma básica de cada expresión de velocidad.

$$\frac{dN_i}{d\left(\frac{A_c}{W}\right)} = -k_i N_i \tag{1}$$

Una falla significativa en el modelo de Krane es la falta del efecto de la actividad del catalizador y la presión del catalizador. Henningsen et al. <sup>[28]</sup> presentan un modelo que considera las diferentes velocidades de reacción entre los naftenos C<sub>5</sub> y C<sub>6</sub> y un factor de actividad para la desactivación del catalizador. Jenkins et al. <sup>[29]</sup> incluyó un factor de corrección empírica para el ácido y la presión en la expresión de velocidad. Ancheyta-Juárez <sup>[29,30]</sup> también introdujo un término de corrección de la presión similar que toma en cuenta presiones distintas de 300 psig especificada en el modelo de Krane et al. En trabajos posteriores de Ancheyta y colaboradores se incluyeron vías adicionales para tratar el MCH como precursor de primario de Benceno <sup>[31]</sup> en el pool de productos y para mejorar la operación no isotérmica. Modelos derivados de Krane y Ancheyta se han utilizado para modelar una variedad de procesos de reformación, que van desde plantas piloto hasta operaciones comerciales. Hu et al. <sup>[32]</sup> utiliza un enfoque similar para generar un modelo cinético.

$$\frac{dN_i}{d\left(\frac{A_c}{W}\right)} = -k_i e^{\left(E_i/R\right)\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)} \left(\frac{P}{P_0}\right)^a P_i \tag{2}$$

El modelo original de Krane y las modificaciones hechas por Ancheyta no tratan el modelo cinético como un proceso catalítico ocurriendo heterogéneamente y no consideran las diferentes reactividades de los ciclopentanos y ciclohexanos. En la Figura 2.13 se muestra el modelo cinético de Henningsen et al. Que incluye rutas de reacción separadas para los ciclopentanos y ciclohexanos. Henningsen aplicó este modelo en conjunto con el balance de energía para tener en cuenta la operación no isotérmica del reactor. Estos modelos generalmente muestran excelentes resultados entre los datos comerciales y las plantas piloto.

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum k_i e^{(E_i/RT)} P_i \tag{3}$$

Una limitación clave de los modelos derivados de Krane y Henningsen es que el modelo de reacción no es tratado como un proceso catalítico. Las reacciones cinéticas de un modelo cinético deben incluir términos que permitan la inhibición y decremento de la actividad debido a una variedad de factores. Raseev et al. <sup>[33]</sup> Presentaron el primer modelo que trata el sistema de reacciones como un modelo catalítico. Sin embargo, este estudio es limitado debido a la falta de datos experimentales. En la Figura 2.13 se muestra el modelo cinético derivado del extenso estudio de Ramage et al. <sup>[34]</sup> donde existen rutas de reacción independiente para los ciclopentanos y ciclohexanos, además del efecto de adsorción y presión. Sin embargo, este modelo está limitado solo por C<sub>5</sub>- y C<sub>5</sub>+ en el lump. Kmak presenta un modelo similar que se extiende a lumps que incluye compuestos C7 <sup>[35]</sup>.

$$\frac{dw_i}{dv} = \frac{\left(\frac{PV}{FRT}\right)k_{\emptyset}}{1 + K_H P_H + (PF_c/F)\sum K_{w_i}w_i}\sum k_i w_i$$
(4)

El trabajo clave hecho por Froment y colaboradores <sup>[17, 36, 37, 38]</sup> ha producido un modelo de reacción casi completo basado en los lumps formados para los compuestos  $C_5$ - $C_9$  (y  $C_1$ - $C_5$  para parafinas) de la alimentación al proceso. Este modelo incluye varios puntos de vista de estudios experimentales. Consideran que los sitios metálicos en el catalizador solo promueven las reacciones de deshidrogenación, mientras que el sito acido promueve las reacciones de ciclación, isomerización e hidrodesintegración. En la Figura 2.14 se muestra el modelo cinético.

El modelo cinético de la Figura 2.14 incluye rutas de reacción separadas para los componentes N<sub>5</sub> y N<sub>6</sub> y explica explícitamente la producción de compuestos ligeros (C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>). Esto es crítico para mantener una buena predicción de componentes ligeros en el gas para modelos industriales. Además, los factores de adsorción incluyen términos para explicar el contenido de Hidrógeno, la presión total y los hidrocarburos adsorbidos. El trabajo adicional de Taskar et al. <sup>[39,40]</sup> modifica este modelo ara incluir los efectos de la desactivación del catalizador <sup>[25]</sup>. En la Tabla 2.8 se muestran las principales ecuaciones de velocidad para cada clase y factor de desactivación debido al modelo de Taskar et al.

Isomerización de Parafinas	$\mathbf{\Phi}\cdot\mathbf{A_{o}}\mathbf{e}^{-\mathrm{E/RT}}\left(\mathbf{P}_{\mathrm{A}}-\mathbf{P}_{\mathrm{B}}/\mathbf{K}_{\mathrm{AB}} ight)/\Gamma$	(5)
Hidrodesintegración de Parafinas	$\phi \cdot A_o e^{-E/RT} (P_A P)_B / \Gamma$	(6)
Cerradura de anillo de Parafinas	$\phi \cdot A_o e^{-E/RT} (P_A - P_B P_H/K_{AB})/\Gamma$	(7)
Expansión de anillo (C5 a C6)	$\phi \cdot A_o e^{-E/RT} (P_A - P)_B/\Gamma$	(8)
Deshidrogenación	$\phi \cdot A_o e^{-E/RT} (P_A - P_B P_H^3/K_{AB})/(P_H \theta)^2$	(9)
Adsorción debido a la función ácida	$\Gamma = (P_H + K_{C6-}P_{C6-} + K_{P7}P_{P7} + K_{N7}P_{N7} + K_{Tol}P_{tot})$	<sub>ol</sub> ) (10)
Adsorción debido a la función metálica	$\theta = 1 + K_{MCH1}P_{MCH} + K_{MCH2}(P_{MCH}/P_H^2)$	(11)
Termino de desactivación	$\phi = e^{-lpha C_c}$	(12)

Tabla 2.8 Principales ecuaciones de velocidad de reacción para el modelo de Taskar <sup>[40, 41]</sup>



Figura 2.13 Modelos cinéticos básicos por lumps [25].



Figura 2.14 Modelos cinéticos por lumps de Froment cuando 5<x<9 [25].

Por ultimo en la Figura 2.15 se muestra la evolución cronológica de los modelos cinéticos de reformación catalítica



Figura 2.15 Evolución de los modelos cinéticos de las reacciones de reformación catalítica [14]

# **Capítulo 3**

# 3. Simulador de procesos ASPEN-HYSYS V10

El modelo reformador que está integrado en el simulador de procesos ASPEN-HYSYS v10 puede ser empleada para el modelado de unidades CCR o Semirregenerativa ya sea en un caso particular o como parte de una refinería completa.

La operación de la reformación catalítica en el simulador contiene un sistema de caracterización de alimentación, sección de reacción, estabilizador y un analizador de productos. En la sección de reacción se encuentran los reactores, calentadores, compresores, separador y los tambores de recontacto. La sección de reacción está basada en un modelo cinético riguroso<sup>[15]</sup>.



Figura 3.1 Esquema de Reformación Catalítico de Naftas ASPEN-HYSYS v10<sup>[15]</sup>

En la tabla siguiente se muestran los componentes que el simulador HYSYS emplea para llevar a cabo la simulación de la reformadora catalítica.

Hidrógeno	Ciclopentano	24-Mpentano	O8*	6N9*	N12*
Metano	22-Mbutano	2-Mhexano	n-Octano	IP10*	A12*
Etano	23-Mbutano	3-Mhexano	5N8*	n-Decano	P13*
Etileno	2-Mpentano	3-Epentano	EBenceno	5N10*	N13*
Propano	3-Mpentano	n-Heptano	o-Xileno	A10*	A13*
Propeno	n-Hexano	07*	m-Xileno	6N10*	P14*
i-Butano	O6*	11Mciclopentano	p-Xileno	IP11*	N14*
n-Butano	Mciclopentano	Eciclopentano	6N8*	n-C11	A14*
1-Butano	Benceno	Tolueno	IP9*	5N11*	
i-Pentano	Ciclohexano	Mciclohexano	n-Nonano	A11*	
n-Pentano	22-Mpentano	MBP8*	5N9*	6N11*	
O5*	23-Mpentano	SBP8*	A9*	P12*	

Tabla 3.1 Sistema de caracterización de carga

Fuente Simulador ASPEN-HYSYS v10

Los nombres de los compuestos hipotéticos pueden ser interpretados identificando el prefijo de acuerdo con el tipo de componente y el sufijo con el número de carbón. Los prefijos de los tipos de componentes son:

- O: Olefinas.
- MBP: (Multi-branch paraffin) parafina con ramas múltiples.
- SBP: (Single-branch paraffin) parafina con una sola rama.
- 6N: Naftenos con un anillo de 6 carbonos.
- IP: Isoparafinas (sin distinción en el número de ramificaciones).
- 5N: Naftenos con un anillo de 5 carbonos.
- A: Aromáticos.
- P: parafinas (sin distinción en el tipo de isómero).
- N: Naftenos (sin distinción en el número de átomos de carbono en el anillo).

Estos componentes son utilizados directamente en el modelo cinético del reactor.

El simulador contiene una opción que se encarga del cálculo de la composición de componentes a reformar. Para lograr esto debemos especificar el tipo de alimentación. En el tipo de alimentación se especificarán las relaciones de varios isómeros dentro de la alimentación al reformador. Estas relaciones, junto con la destilación y el análisis PONA de la carga a la reforma, se utilizarán para calcular la composición de los componentes de la reformadora <sup>[15]</sup>.

Tabla 3.2 Relación de los componentes de alimentación [15]

Relación de los componentes de la alimentación			
nP5/C5 Total	N7N5/[N5+N6]		
nP6/P6 Total	nP8/P8 Total		
MBP6/P6 Total	MBP8/P8 Total		
MCP/ [MCP+CH]	N8N5/[N5+N6]		
nP7/P7 Total	iP9/P9 Total		
MBP7/P7 Total	N9N5/ [N5+N6]		
iP5/C5 Total	iP10/ Total P10		
N10N5/[N5+N6]	N11N5/[N5+N6]		
iP11/P11 Total			

En el ambiente de la Reformadora Catalítica, se encuentran otras opciones para calcular la composición de la alimentación. Es posible realizar el cálculo de la composición basada en el rango de punto de ebullición del ensayo, especificación de propiedades de bulto, o en la especificación de los lumps cinéticos.

Para la opción del ensayo, se selecciona un ensayo asociado con la alimentación. El tipo de alimentación se especifica junto con el punto inicial y final de ebullición para generar una composición de la alimentación.

Para la opción de propiedades de bulto, se especifica el tipo de alimentación con los datos de la destilación, el total de naftenos y aromáticos en la alimentación.

En la opción de lumps cinéticos, se especifica el tipo de alimentación junto con la composición de los componentes que son deseados. Opcionalmente se puede introducir un valor para el N+2A o N+3A para ajustar la composición especificada será usada directamente <sup>[15]</sup>.

# 3.1 Cinética de las Reacciones de Reformación

Los componentes utilizados para la ruta de reacción son los mismos que se presentan en la lista para la alimentación. A continuación, se presentan una lista en forma abreviada de la Tabla 3.3 de los componentes utilizados en la red de reacción.

H2	NP6	O8	IP11
P1	5N6	5N8	NP11
P2	A6	A8	5N11
O2	6N6	6N8	A11
P3	MBP7	IP9	6N11
O3	SBP7	NP9	P12
P4	NP7	5N9	N12
O4	07	A9	A12
P5	5N7	6N9	P13
O5	A7	IP10	N13
5N5	6N7	NP10	A13
MBP6	MBP8	5N10	P14
SBP6	SBP8	A10	N14
O6	NP8	6N10	A14

Tabla 3.3 Nomenclatura de compuestos en ASPEN-HYSYS v10<sup>[15]</sup>

# 3.2 Ruta de la Cinética de Reacción

El modelo de reformación de ASPEN-HYSYS utiliza 50 lumps cinéticos y 112 reacciones. A continuación, se muestra un esquema de reacción en el que se observan todas las reacciones que se dan en el proceso.



Figura 3.2 Esquema de reacción del modelo de reformación de Aspen-HYSYS [15]

Se utilizan nueve tipos de reacciones fundamentales en la cinética del reformado:

Tabla 3.3 Reacción de reformación en Aspen-HYSYS v10 [15]

Tipo de reacción	Ejemplo
Isomerización	NP6 $\leftarrow \rightarrow$ SBP6
Anillo Cerradura /Apertura	NP6←→5N6
Expansión de anillo	5N6 ←→6N6
Deshidrogenación	6N6 ←→ A6 + 3H2
Hidrogenólisis	6N7 + H2 → 6N6 + P1
Hidrodesintegración	P5 + H2 → P2 + P3
Hidrodealquilación	A7 + H2 → A6 + P1
Polimerización	A7 + P5 → A12 + H2
Coquización de parafinas	MBP7 $\rightarrow$ Coque + H2
Polimerización	5N6 → Coque + H2
Polimerización	A7 $\rightarrow$ Coque + H2

Las rutas de reacción utilizadas para C<sub>6</sub> a C<sub>8</sub> son mostradas en el diagrama de inferior.



Figura 3.3 Rutas de reacción de reformación empleadas en Aspen-HYSYS [15]

Dónde:

- X: Número de carbonos de 6 a 8
- nP: Parafinas normales
- SP: Parafinas con ramificación simple
- MP: Parafinas con multiramificación
- 5N: Naftenos con anillo de 5 carbonos
- 6N: Naftenos con anillo de 6 carbonos
- A: Aromáticos

A medida que el número de carbonos se incrementa más allá de 8, la complejidad de las rutas se reduce.

### 3.3 Cinética de Reacción. Expresiones

Las reacciones de la Reformadora Catalítica siguen expresiones básicas para la cinética de reacción.

Son expresiones básicas de rapidez de reacción de primer orden:

$$Rapidez(f) = K_f * C_a$$

Expresión básica de rapidez de reacción de primer orden con expresión de Arrhenius y término de actividad:

$$K_f = A * e^{(-\frac{E}{RT})}$$

$$Rapidez(f) = K_f * C_a$$

Expresión básica de equilibrio:

$$K = K_f / K_r$$

Expresión básica de equilibrio de primer orden:

$$Rapidez(e) = Act * \left[ \left( A * e^{\left( -\frac{E}{RT} \right)} \right) * \left( 1 - 1/Gf \right) \right] * C_a$$

Las expresiones de cinética de reacción para a reformadora, son expresiones de rapidez basadas en la concentración. La reacción de deshidrogenación es utilizada como un ejemplo para ilustrar las expresiones de cinética de reacción empleada para modelar estas reacciones.

Ciclohexano  $\Leftrightarrow$  Benceno + 3H<sub>2</sub>

Rapidez = actividad \* 
$$k_f * ([6N6] - [A6] * [H_2]^3/K_{eq})xPF^x$$

Dónde:

Actividad = Producto de la actividad del catalizador, actividad del sitio metálico y actividad específica de deshidrogenación.

K<sub>f</sub> = Constante de velocidad directa que tiene la forma de la expresión de Arrhenius.

[6N6], [A6], [H2] = Concentración de ciclohexano, benceno e hidrogeno.

Keq= Concentración de equilibrio que presenta la forma de expresión de Arrhenius.

PF<sup>x</sup>= Factor de presión, (0.02 valor por default para la deshidrogenación).

Se utilizan diez tipos de reacciones fundamentales en el Reformado Catalítico Tipo de reacción Aplicación

Isomerización	1
Apertura/Cerradura de Anillo	2
Expansión de Anillo	3
Deshidrogenación	4
Hidrogenólisis	5
Hidrodesintegración/Hidrodealquilación	6
Polimerización	7
Desintegración de Parafinas	8
Desintegración de Naftenos	9
Desintegración de Aromáticos	10
Evente Oinsvilaiten Assan LIXOX	010

Fuente Simulador Aspen-HYSYS v10

El número de aplicación de referencia se refiere a la reacción específica usada en el archivo de configuración (EORX) usado el Reformador Catalítico. Un ejemplo de su uso se encuentra en la Tabla 2.3<sup>[15]</sup>.

# 3.4 Coquización

Para fines de modelado de una reformadora catalítica comercial, se puede suponer que el coque es función principalmente de los naftenos con anillos de cinco carbonos y aromáticos.

La generación de coque en la reformadora es modelada por medio de la reacción de parafinas, naftenos con cinco carbonos, y aromáticos a coque por medio de un mecanismo de reacción de primer orden. Todos los naftenos con cinco átomos de carbono comparten una energía de activación común como lo hacen los aromáticos y las parafinas. Los factores de frecuencia varían por el número de carbón y especies. Todos los rectores poseen su actividad para la generación de coque. La rapidez de reacción se presenta en forma general de la siguiente manera:

$$k_{p} = A_{s} \times A_{RXI} \times F_{Pi} \times e^{-\frac{E_{P}}{RxT}}$$
$$k_{N} = A_{s} \times A_{RXI} \times F_{Ni} \times e^{-\frac{E_{N}}{RxT}}$$
$$k_{A} = A_{s} \times A_{RXI} \times F_{Ai} \times e^{-\frac{E_{A}}{RxT}}$$

Dónde:

 $k_{P}$  = Factor de rapidez de parafinas, i número de carbono a coque.

k<sub>N</sub> = Factor de rapidez de naftenos de 5 átomo de carbono, i número de carbono a coque.

 $k_A$  = Factores de rapidez de aromático, i número de carbono a coque.

As = Actividad de coque del sistema de reactor.

A<sub>RX</sub> = Actividad del coque para reactor individual.

 $F_{Ni}$ ,  $F_{Ai}$  = Factores de frecuencia para los naftenos de 5 átomos de carbono y aromáticos, i número de carbono.

E<sub>N</sub>, E<sub>A</sub> = Energía de activación de los naftenos de 5 carbonos y aromáticos.

Los factores de rapidez entonces son utilizados en las ecuaciones de reacción con el siguiente formato general.

$$\frac{dC}{dt} = (k_P[Total P] + K_N[Total 5N] + k_A[Total A] \times PF \times H2HCF)$$

$$\frac{\mathrm{dC}}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{coque}}{\mathrm{tiempo}}$$

kP = Factor de coque a parafina.

[Total P] = Concentración de parafinas totales.

kN = Factor de rapidez de naftenos de cinco carbonos a coque.

[Total 5N] = Concentración de naftenos de cinco carbonos.

kA = Factor de rapidez de aromáticos a coque.

[Total A] = Concentración total de aromáticos.

PF = Factor para ajustar a cambios en la presión.

H2HCF= Factor para ajustar para cambios en la relación H<sub>2</sub>/HC.

# 3.5 Modelo de Actividad del Catalizador

La actividad del catalizador se divide en actividad de la fase metálica y actividad de la fase ácida. Estas actividades afectan el mecanismo de reacción como se muestra en la Tabla 3.4:

Tipo de reacción	Ácido	Metal	Diferenciador de presión
Isomerización	Х		Х
Apertura/Cerradura de Anillo	Х		Х
Expansión de Anillo	Х		
Deshidrogenación		Х	
Hidrogenólisis (Parafinas)		Х	Х
Hidrogenólisis (Naftenos)		Х	Х
Hidrodesintegración	Х		Х
Hidrodealquilación	Х		
Polimerización	Х		

Tabla 3.4 Actividad del catalizador dependiendo las diferentes reacciones

También se muestran en la tabla anterior los mecanismos de reacción que se ven afectados por los cambios de presión.

Las actividades de ácidos y metales son funciones independientes del carbón depositado en el catalizador (COC) expresadas como porcentaje de deposición en el catalizador. La forma general de las funciones de actividad ácida y metálica es:

Actividad = Intercep + Poly1 \* COC + Poly2 \* COC<sup>2</sup> + Poly3 \* COC<sup>3</sup> + Poly4 \* COC<sup>4</sup>

# **Capítulo 4**

# 4. Simulación de la Unidad CCR

# 4.1 Simulación de la planta

Para efectuar la simulación del proceso de reformación hay que seguir un método básico que se describe a continuación. Este procedimiento se llevó a cabo para el desarrollo de la simulación en este trabajo, aunque hay que mencionar que no necesariamente hay que seguir estos pasos, es solamente una sugerencia.

El desarrollo de la simulación en el programa ASPEN-HYSYS v10 se puede realizar de manera general mediante la introducción de los compuestos y las ecuaciones de estado que se van a utilizar para el cálculo de las propiedades termodinámicas y la introducción de la secuencia de operaciones unitarias con sus correspondientes condiciones de operación a las que se someterán los compuestos previamente declarados.

La secuencia que se siguió para el desarrollo de la simulación de la planta fue la siguiente:

# > Definir el diagrama de flujo de proceso

Este paso consiste en especificar las corrientes que se utilizaran en la simulación; es decir que se deben saber cuáles son las corrientes que están interconectadas con otros equipos. Ya que un cambio en alguna condición de dicha corriente afectara inmediatamente a los equipos que están interconectados.

# > Especificación de unidades para los datos de entras y salida

Es elemental seleccionar el sistema de unidades que se manejara para los datos de entrada, como los datos que reporte el simulador; también es posible especificar unidades pertinentes a distintos sistemas de unidades para una unidad de operación unitaria.

# > Especificación de los compuestos

El simulador APSEN-HYSYS contiene una base de datos de los componentes que son indispensables para lograr el simulado de una unidad en específico. Para una reformadora catalítica, dado que esta contiene una cinética de reformación, los componentes a ingresar en la alimentación deben ser aquellos utilizados en la cinética.

### > Selección de modelos

Se seleccionan las ecuaciones de estado para el cálculo de propiedades termodinámicas, de tal manera que dicho modelo sea el adecuado para asegurar que calculen con considerable exactitud las propiedades de los compuestos.

### > Inserción de las corrientes de proceso y unidades de operación unitaria

Una vez ya especificado lo anterior, se entrada en el ambiente de simulación del programa en el cual se insertan los equipos y las corrientes de proceso que se requieren para llevar a cabo la simulación de la planta. En este caso en la simulación realizada se insertaron la unidad reformadora, la torre estabilizadora (de destilación), las corrientes de proceso, etc.

### > Especificación de las corrientes de alimentación

Las corrientes de alimentación deben tener bien especificados el régimen de flujo (flujo de cada componente, flujo total, composición de componentes) y por lo menos dos condiciones termodinámicas que por lo regular son temperatura y presión.

# > Especificación de las condiciones de operación

Este paso no es del todo sencillo debido a que en muchas ocasiones las variables que especificamos no nos conducirán al resultado que se desea obtener.

Debido a lo anterior debemos de tomar decisiones que creamos convenientes para alcanzar los mejores resultados. El simulador ofrece una serie de posibles alternativas para la especificación de una unidad de operación unitaria de aquí que el elegir una variable incorrecta, no permitirá que el sistema converja, lo cual hará que varié las otras opciones para lograr la convergencia.

Para evitar estos error es conveniente saber cuáles son las variables que se deben o convienen especificar en los equipos a utilizar.

# 4.2 CONDICIONES DE OPERACIÓN

# Alimentación

La carga de alimentación de nafta (60°C, 4 kg/cm<sup>2</sup>) es calentada a la temperatura de reacción (521°C) por medio del intercambiador <sup>[16]</sup>.

En la Tabla 4.1 se muestra el porcentaje de destilado y la temperatura de destilación (TBP) de la carga de alimentación.

Porcentaje de destilación	Temperatura de destilación (°C)
0	8.38
5	58.59
10	63.35
30	95.72
50	116.4
70	146.1
90	161.8
95	177.6
100	253.3

Tabla 4.1 TBP de la carga de alimentación [16]

En la Tabla 4.2 se presenta a detalle la composición de la alimentación.

Compuestos	kmol	Compuestos	kmol	Compuestos	kmol
H2	0	23DMC5	12.82	NP9	86.59
P1	0	24DMC5	4.16	5N9	14.41
P2	0	MBP7	3.17	A9	54.86
P3	0	2MC6	35.05	6N9	13.45
IP4	0	3MC6	43.01	IP10	0
NP4	0	3EC5	4.33	NP10	74.46
P4	0	NP7	170.36	5N10	6.99
IP5	8.6	DMCP	8.91	A10	13.75
NP5	52.16	ECP	9.05	6N10	5.79
P5	0	A7	70.16	NP11	20.45
5N5	17.02	6N7	27.29	5N11	2.99
22DMC4	1.06	SBP8	182.84	A11	1.17
23DMC4	4.0	NP8	106.28	A12	2.13
2MC5	26.09	5N8	15.74	A13	1.10
3MC5	23.76	ETHYLBEN	11.13	A14	2.47
SBP6	0.00	O-XYLENE	13.25	Coque	0
NP6	99.21	M-XYLENE	30.44	H2O	0
5N6	10.51	P-XYLENE	10.40	H2S	0
A6	22.02	A8	0	HCI	0
6N6	9.07	6N8	16.56	TOTAL	1350.94
22DMC5	2.03	IP9	0		

Tabla 4.2 Composición de la alimentación

Fuente UOP CCR Platforming Process Unit

En la Tabla 4.3 se presenta el análisis PONA de la nafta alimentada:

	Alimentación (% mol)
N-Parafinas	45.12
Iso-Parafinas	25.96
Olefinas	0
Naftenos	11.68
Aromáticos	17.24

*Tabla 4.3* Resumen de la composición de la nafta alimentada<sup>[16]</sup>

En la Figura 4.1 se muestra un diagrama en donde se resume las condiciones de entrada y salida de la nafta, además de las condiciones generales de operación de la reformadora catalítica.



Figura 4.1 Diagrama de proceso resumido

Adicional a la información mostrada en la Figura 4.1 los productos de salida deben cumplir con una serie de característica las cuales se enumerarán en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4 Especificaciones de los productos de salida [16]

Pureza del H2 (% mol)		
C5+ max. en Gas LP (% mol)	1	
C <sub>4</sub> - en reformado (% mol)	1	

# • Proceso con 4 Reactores (Caso 1)

> Sección de Reacción

En la Tabla 4.5 se presentan las condiciones de diseño para el proceso de Reformación Catalítica con 4 reactores.



Tabla 4.5 Condiciones diseño para el proceso de Reformación con 4 reactores <sup>[16]</sup>

En esta sección se lleva a cabo la Reformación de la nafta pesada alimentada. El simulador hace estimados de los productos de salida dependiendo de la carga de alimentación, el diseño y operación del reactor (estos datos se presentan en la Tabla 4.6 y 4.5).

Diseño				
Densidad de	el catalizador (kg/m <sup>3</sup> )	835		
Longitud de los Reactores (m)		Peso de Catalizador (kg)		
Reactor 1	2.3	15,865		
Reactor 2	2.3	18,621		
Reactor 3	2.45	23,297		
Reactor 4	2.8	35,321		
Volumen to	otal del reactor (m <sup>3</sup> )	111.5		

Tabla 4.6 Datos de diseño que se ingresan al simulador

Tabla 4.7 Datos de diseño que se ingresan al simulador

Operación				
Alimentación				
Flujo volumétrico std. de entrada (kg/h)	197.09			
T entrada (°C)	38			
P entrada (kg/cm <sup>2</sup> )	4			
P mezclado (kg/cm <sup>2</sup> )	5.17			
Controles del reactor				
Especificación de T de los re	ectores			
	T entrada (°C)			
Reactor 1	521			
Reactor 2	521			
Reactor 3	521			
Reactor 4	521			
Recirculación de Cataliza	dor			
Relación H <sub>2</sub> /HC (mol/mol)	3.4			
Separador de producto				
T de separación (°C)	40			
P de separación (kg/cm <sup>2</sup> )	2.46			
Regeneración continua				
Flujo de catalizador recirculado(kg/h)	1361			
Calentador de producto				
T calentador (°C) 40				
P calentador (kg/cm <sup>2</sup> )	2.5			

El simulador cuenta además con valores predeterminados de los factores de rapidez de reacción los cuales son utilizados para estimar la composición de los productos.

Estos valores de ajuste predeterminados no son adecuados para la carga que se está alimentando, para eso se ingresa a la sección de calibración y los factores se modifican manualmente, dando un rango entre el cual el simulador ajustara la cinética de la reacción que esté involucrada y así obtener la composición de salida deseada.

En la Tabla 4.8 se muestra los factores de ajuste predeterminados que usa el simulador

Ajuste cinético			
Factor de ajuste-Isomerización			
Factor de Isomerización Etilbenceno	2.06		
Factor de Isomerización M-Xileno	2.28		
Factor de Isomerización O-Xileno	2.17		
Isomerización IC4	-46.66		
Isomerización IC <sub>5</sub>	-59.16		
Factor de distribución Olefinas			
Factor de Isomerización Etileno	-2.03		
Factor de Isomerización Propileno	-1.78		
Factor de Isomerización Butileno	-1.34		
Factor de Isomerización Penteno	13.27		
Factor de Isomerización Hexeno	2.34		
Factor de Isomerización Hepteno	0.21		
Factor de Isomerización Octeno	-2.79		
Factor de ajuste Constante de Equilibrio			
Ciclización C5	1		
Isomerización Multi-rama C6	100		
Isomerización Multi-rama C7	100		
Isomerización Multi-rama C8	100		
Isomerización Rama simple C6	100		
Isomerización Rama simple C7	100		
Isomerización Rama simple C8	100		
Factor de ajuste Ligeros finales			
C1	0.47		
C2	2.37		
C3	1.31		
C4	5		
Factores de ajuste Cinética de reacciones			
Deshidrogenación	0.97		
Hidrodesintegración	0.79		
Isomerización Multi-rama	0.89		
Isomerización Rama simple	0.98		
Cerradura de Anillo	0.53		
Expansión de Anillo	0.95		

Tabla 4.8 Factores de ajuste predeterminados que usa el simulador

Factor de ajuste Deshidrogenación	
Naftenos C7	0.85
Naftenos C8	0.41
Factores de ajuste Cerradura de Anillo	
C5	0.60
C6	10.55
C7	0.24
C8	0.38
C9	0.71
C10	0.89
Factores de Ajuste Desintegración	
C5	0.20
C6	1.2
C7	0.84
C8	2.16
C9	1.07
C10	0.88
C11	0.1
Factores de ajuste Isomerización de	
Parafinas	
Isomerización Multi-rama C6	1
Isomerización Multi-rama C7	1
Isomerización Rama simple C6	1
Isomerización Rama simple C7	1
Factor de ajuste Expansión de Anillo	
C6	3.87
C7	1.40
C8	2.46

Aunque los factores de ajuste se modifiquen se requiere de información más detallada del proceso para poder obtener unos resultados de salida satisfactorios. Por lo que se introducen datos más específicos al simulador que nos ayuden a disminuir el margen de error a la hora de calcular las propiedades de salida de los productos.

En las Tablas 4.9 y 4.10 se muestra la información adicional que se agregó al simulador.

Medición					
Operación					
	Reacto	or			
P entrada Caída de P Delta					
	(kg/cm <sup>2</sup> )	(kPa)	(°C)		
Reactor 1	4.93	20.68	74.85		
Reactor 2	4.42	22.68	53.42		
Reactor 3	3.96	23.11 37.2			
Reactor 4	4 3.49 22.89		24.16		
	Compre	sor			
P de descarga (kg/cm <sup>2</sup> ) 5.74					
P de succión	ı (kg/cm²)	2.46			
Recirculación de H <sub>2</sub>					
Pureza del H <sub>2</sub>	(fracc. mol)	0.90			
Octanos medidos					
C5+ R	ON	102			
C6+ RON		106			
C5+ M	ON	83.75			
C6+ M	ON	84.10	)		

Tabla 4.9 Datos adicionales de operación

Tabla 4.10 Datos adicionales de operación (Continuación)

Medición					
Productos					
	Reformado	LPG (Debut.)	Comp. Ligeros (Debut.)	H2 para combustible	H2 Neto
Flujo masico (kg/h)	126,006.77	7,642.15	620.17	2,390.23	92,037
Compuestos	% mol	% mol	% mol	% mol	% mol
H2	3.52E-11	0.27	14.19	90.61	81.58
P1	5.20E-08	0.51	5.25	4.13	3.75
P2	2.14E-04	11.11	28.04	3.45	3.73
P3	0.03	39.57	35.26	1.39	3.16
IP4	0.20	19.25	7.89	0.16	1.02
NP4	0.77	28.29	9.21	0.15	1.48
IP5	5.61	0.86	0.14	0.05	1.39
NP5	3.52	0.09	0.01	0.02	0.75
O5	0.61	0.05	0.01	0.00	0.14
MBP6	1.36	0.00	0.00	0.00	0.22
SBP6	6.43	0.00	0.00	0.01	0.83

NP6	3.47	0.00	0.00	0.00	0.37
O6	0.98	0.00	0.00	0.00	0.12
5N6	0.10	0.00	0.00	0.00	0.01
A6	4.64	0.00	0.00	0.00	0.35
6N6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
MBP7	0.98	0.00	0.00	0.00	0.08
SBP7	1.94	0.00	0.00	0.00	0.11
NP7	1.03	0.00	0.00	0.00	0.05
07	0.35	0.00	0.00	0.00	0.02
5N7	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00
A7	22.05	0.00	0.00	0.00	0.57
6N7	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
MBP8	0.43	0.00	0.00	0.00	0.01
SBP8	0.17	0.00	0.00	0.00	0.01
NP8	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00
O8	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
5N8	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
ETHYLBEN	3.67	0.00	0.00	0.00	0.04
O-XYLENE	5.09	0.00	0.00	0.00	0.04
M-XYLENE	8.21	0.00	0.00	0.00	0.07
P-XYLENE	3.87	0.00	0.00	0.00	0.04
6N8	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
IP9	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
NP9	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
A9	16.18	0.00	0.00	0.00	0.05
A10	5.99	0.00	0.00	0.00	0.01
A11	1.80	0.00	0.00	0.00	0.00

Una vez obtenido el producto de salida que cumpla con las especificaciones de diseño no solo en composición sino también de flujo y habiendo pasado por el separador. Se inicia la siguiente etapa en el proceso que es la sección de recontacto.

# > Sección de Recontacto

Para el proceso con 4 reactores la Sección de Recontacto cuenta con dos partes. En la primera sección la corriente vapor rica en H<sub>2</sub> que sale del separador después del reactor de reformación, es enviado a una serie de compresores y separadores, con el fin de eliminar la mayor cantidad de hidrocarburo ligeros y otros compuesto que lleva esta corriente. Pero debido a que esto no se logra en la primera sección, el proceso se envía a

la segunda Sección llamada Recontacto Plus la cual consiste en un intercambiador de calor, después la corriente es lavada, esto con el fin de eliminar el resto de los compuestos de CI que pudieron quedar en la corriente y por último se comprime y separa. Al final de este proceso extra la corriente alcanza la pureza de H<sub>2</sub> requerida que es de al menos el 90 %. Una parte del H<sub>2</sub> que se obtiene al final de este proceso es recirculado y enviado al principio del proceso el cual se mezcla con la corriente de alimentación y la otra parte es utilizada en algún otro proceso de refinación en donde se requiera.

Por otro lado, las corrientes liquidas que se obtienen a lo largo del tren de separación en las 2 sección de recontacto son mezcladas y enviadas a la sección de estabilización.

En las Figuras 4.2 y 4.3 se muestran imágenes del proceso tanto de la primera sección de Recontacto, así como la sección de Recontacto Plus.







Figura 4.3 Sección de Recontacto Plus

Por último el líquido que se recupera de la sección de recontacto se envía a la sección de estabilización, en el cual el líquido antes de entrar a la Torre Debutalizadora intercambia calor con la corriente liquida de salida de la Torre aprovechando la temperatura a la que sale el reformado.

# > Sección de estabilización

En la sección de estabilización lo que se quiere es quitar la mayor cantidad de compuestos ligero que se encuentras en el Reformado, para dejar solo compuestos de C<sub>6</sub> hacia arriba. En esta sección, como productos se obtienen la Nafta Reformada, Gas LP y Gas de combustible.

En la Figura 4.4 se muestra el diagrama de proceso de la sección de estabilización.





En la Tabla 4.11 se muestran las condiciones de operación de la Torre Debutanizadora.



# Tabla 4.11 Condiciones de operación de la Debutanizadora

A continuación, se presenta el segundo caso de estudios el cual consiste en un proceso con 3 reactores.

- Proceso con 3 Reactores (Caso 2)
  - Sección de Reacción

En este nuevo proceso el cambio más apreciable que se observa que se pasa de tener 4 reactores a tener solo 3 reactores. En este caso de estudio se analiza si es viable usar un proceso con 3 reactores y obtener los mismos resultados que en el caso anterior. Debido al cambio en los reactores, se identifican otras variaciones dentro del proceso las cuales se irán describiendo sección por sección.

Cabe mencionar que en este proceso se reformara la misma alimentación (Nafta Pesada) que en el caso anterior; enfocando así la atención en el funcionamiento de cada proceso y así poder identificar las similitudes y diferencia que se encuentre en ambos.

En la Tabla 4.12 se presentan las condiciones de diseño para el proceso de Reformación Catalítica con 3 reactores.



Tabla 4.12 Condiciones diseño para el proceso de Reformación con 3 reactores [16]

En la Tabla 4.13 se muestran los datos de diseño y en la Tabla 4.14 los datos de operación que se deben ingresar al simulador de reformación.

Diseño					
Densidad de	el catalizador (kg/m <sup>3</sup> )	835			
	Longitud de los Reactores (m)	Peso de Catalizador (kg)			
Reactor 1	2.3	15,146			
Reactor 2 2.3		21,726			
Reactor 3 2.45		35,495			
Volumen T	otal del reactor (m <sup>3</sup> )	86.67			

Tabla	4.13 Date	os de dise	ño que se	ingresan a	l simulador
rabia	4.70 Dail		no que se	ingicoan a	Simulauor
Operaci	ón				
------------------------------------	-----------------				
Alimentad	ción				
Flujo volumétrico std.	107.00				
de entrada (kg/h)	197.09				
T entrada (°C)	60				
P entrada (kg/cm <sup>2</sup> )	4				
P mezclado (kg/cm <sup>2</sup> )	9				
Controles del	reactor				
Especificación de T	de los rectores				
	T entrada (°C)				
Reactor 1	521				
Reactor 2	521				
Reactor 3	521				
Reactor 4	521				
Recirculación de	Catalizador				
Relación H <sub>2</sub> /HC	25				
(mol/mol)	2.0				
Separador de	oroducto				
T de separación (°C)	52				
P de separación	2.5				
(kg/cm <sup>2</sup> )	2.0				
Regeneración	continua				
Flujo de catalizador	1361				
recirculado(kg/h)	1301				
Calentador de	producto				
T calentador (°C)	52				
P calentador (kg/cm <sup>2</sup> )	2.5				

Tabla 4.14 Datos de diseño que se ingresan al simulador

En la Tabla 4.15 se muestran los valores por default de los factores de rapidez que el simulador utilizar para estimar la composición de productos.

Tabla 4.15 Factores de ajuste predeterminados que usa el simulador

Ajuste cinético	
Factor de ajuste-Isomerización	
Factor de Isomerización Etilbenceno	2.32
Factor de Isomerización M-Xileno	2.23
Factor de Isomerización O-Xileno	2.20

Isomerización IC <sub>4</sub>	-46.60
Isomerización IC5	-59.11
Factor de distribución Olefinas	
Factor de Isomerización Etileno	-2.05
Factor de Isomerización Propileno	-1.79
Factor de Isomerización Butileno	-1.27
Factor de Isomerización Penteno	10.59
Factor de Isomerización Hexeno	2.12
Factor de Isomerización Hepteno	0.11
Factor de Isomerización Octeno	-2.79
Factor de ajuste Constante de Equilibrio	
Ciclización C5	1
Isomerización Multi-rama C6	100
Isomerización Multi-rama C7	100
Isomerización Multi-rama C8	100
Isomerización Rama simple C6	100
Isomerización Rama simple C7	100
Isomerización Rama simple C8	100
Factor de ajuste Ligeros finales	
C1	2.015
C2	2.247
C3	2.055
C4	5
Factores de ajuste Cinética de reacciones	
Deshidrogenación	0.95
Hidrodesintegración	0.77
Isomerización Multi-rama	0.92
Isomerización Rama simple	1
Cerradura de Anillo	0.50
Expansión de Anillo	0.94
Factor de ajuste Deshidrogenación	
Naftenos C7	0.85
Naftenos C8	0.41
Factores de ajuste Cerradura de Anillo	
C5	3
C6	11.68
C7	0.38
C8	0.63
C9	1.2
C10	1.08

Factores de Ajuste Desintegración	
C5	0.87
C6	2
C7	1.91
C8	2.88
C9	1.42
C10	1.14
C11	0.1
Factores de ajuste Isomerización de	
Parafinas	
Isomerización Multi-rama C6	1
Isomerización Multi-rama C7	1
Isomerización Rama simple C6	1
Isomerización Rama simple C7	1
Factor de ajuste Expansión de Anillo	
C6	3.87
C7	1.40
C8	2.46

En la Tabla 4.16 y 4.17 se muestran los datos adicionales que se deben introducir al reactor para mejorar la estimación.

Medición					
Operación					
	Reacto	or			
	P entrada	Caída de P	Delta T		
	(kg/cm <sup>2</sup> )	(kPa)	(°C)		
Reactor 1	4.6	29.42	85		
Reactor 2	4.0	29.42	68		
Reactor 3	3.5	29.42	51		
Compresor					
P de descarg	5.4				
P de succión	ı (kg/cm²)	2.5			
Recirculación de H <sub>2</sub>					
Pureza del H <sub>2</sub> (fracc. mol)		0.90			
	Octanos me	edidos			
C5+ R	ON	100			
C6+ R	ON	104			
C5+ M	ON	83.77	7		
C6+ M	ON	84.15	5		

Tabla 4.16 Datos adicionales de operación

Medición								
Productos								
	Reformado	LPG (Debut.)	Comp. Ligeros (Debut.)	H2 para combustible	H2 Neto			
Flujo masico (kg/h)	131,443	1,838	2,454	10,026	80961			
Compuestos	% mol	% mol	% mol	% mol	% mol			
H2	0.00	0.17	13.30	92.91	83.25			
P1	0.00	0.25	3.52	2.64	2.43			
P2	0.00	5.59	18.43	2.29	2.46			
P3	0.01	32.95	37.62	1.20	2.14			
IP4	0.19	23.47	12.41	0.19	0.71			
NP4	0.78	35.54	14.13	0.20	1.05			
O4	0.02	1.02	0.39	0.01	0.03			
IP5	4.72	0.87	0.16	0.15	1.58			
NP5	2.97	0.08	0.02	0.07	0.91			
O5	0.35	0.06	0.02	0.01	0.11			
MBP6	1.39	0.00	0.00	0.02	0.32			
SBP6	7.00	0.00	0.00	0.11	1.63			
NP6	3.76	0.00	0.00	0.04	0.71			
O6	0.68	0.00	0.00	0.01	0.14			
5N6	0.12	0.00	0.00	0.00	0.02			
A6	4.02	0.00	0.00	0.02	0.37			
6N6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
MBP7	1.65	0.00	0.00	0.01	0.23			
SBP7	3.71	0.00	0.00	0.02	0.35			
NP7	2.19	0.00	0.00	0.01	0.16			
07	0.42	0.00	0.00	0.00	0.03			
5N7	0.23	0.00	0.00	0.00	0.02			
A7	19.47	0.00	0.00	0.04	0.80			
6N7	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00			
SBP8	1.76	0.00	0.00	0.00	0.07			
NP8	0.45	0.00	0.00	0.00	0.01			
O8	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00			
5N8	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00			
ETHYLBEN	3.38	0.00	0.00	0.00	0.06			
O-XYLENE	4.48	0.00	0.00	0.00	0.07			
M-XYLENE	7.96	0.00	0.00	0.01	0.14			
P-XYLENE	3.45	0.00	0.00	0.00	0.06			
6N8	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00			
NP9	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00			
5N9	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00			
A9	16.22	0.00	0.00	0.01	0.10			

6N9	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
NP10	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
5N10	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
A10	6.15	0.00	0.00	0.00	0.01
NP11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
A11	0.51	0.00	0.00	0.00	0.00
A12	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00
A13	0.27	0.00	0.00	0.00	0.00
A14	0.62	0.00	0.00	0.00	0.00

Una vez obtenido el producto de salida que cumpla con las especificaciones de diseño no solo en composición sino también de flujo y habiendo pasado por el separador. Se inicia la siguiente etapa en el proceso que es la Sección de Recontacto.

Sección de Recontacto

Para el proceso con 3 reactores se observa que el proceso no requiere de una sección de Recontacto Plus, ya que el hidrogeno que se obtiene al final de esta sección si tiene una pureza de al menos el 90%. Otra diferencia que se observa es que en esta Sección la corriente liquida que se obtiene del separador número 3 se ingresa de nuevo al separador 2, esto con el fin de que la corriente liquida se quede con la mayor cantidad de compuesto ligeros posibles.

En la Figuras 4.5 se muestran imágenes del proceso de la sección de Recontacto.



Figura 4.5 Sección de Recontacto

Por último, el líquido que se recupera del tanque se separación 2 se envía a la sección de estabilización, en el cual la corriente antes de entrar a la Debutalizadora intercambia calor

con la corriente liquida de salida de la Torre aprovechando la temperatura a la que sale el reformado.

# Sección de Estabilización

Por último, los principales cambios que se observa en esta sección se dan en el fondo de la columna. En el caso anterior la Debutanizadora tenía un rehervido a fuego directo, pero en este diseño la torre trabaja con un supercalentador que trabaja con vapor. Además, en el condensador las 2 corrientes de salida son lavadas para eliminar los cloruros, algo que no ocurría en la corriente de gas combustible, esta modificación se debe a que en la Sección de Recontacto no hay tratamiento de cloruros para la corriente liquida por lo que es preciso realizar este lavado antes de enviar a almacenamiento o cualquier otro proceso ya que los cloruros son compuestos contaminantes.

En esta sección al final que en el caso anterior los productos que se obtienen son: Nafta Reformada, Gas LP y Gas combustible.

En la Figura 4.6 se muestra el diagrama de proceso de la sección de estabilización.



Figura 4.6 Sección de Estabilización

En la Tabla 4.18 se muestran las condiciones de operación de la Torre Debutanizadora.



Tabla 4.18 Sección de Estabilización

# **Capítulo 5**

# 5. Resultados y discusión

En esta sección se mostrarán y discutirán los resultados obtenidos de la simulación de ambos casos.

# • Caso 1 (4 reactores)

> Resultados de composición de salida

En las Gráfica 5.1 y 5.2 se muestra la composición de salida que se obtiene utilizando los factores de ajuste predeterminados por el simulador contra la composición de diseño de salida.



Gráfica 5.1 Composición de Líquido calculada por el simulador contra la de diseño



Gráfica 5.2 Composición de Gas calculada por el simulador contra la de diseño

Como se mencionaba con anterioridad los factores de ajuste predeterminados no dan una buena estimación de salida, y esto se puede observar bien en la Grafica 1. Los compuestos A7 y A8 principalmente su composición es mayor a la esperada, mientras que P8 y A9 su composición está muy por debajo de lo esperado. Debido a la diferencia que existe en entre la composición calculada por el simulado y la de diseño es que se debe calibrar el reactor y así obtener una composición de salida que también mejore la calidad de los productos de salida.

En la Tabla 5.1 se muestran los factores de ajuste obtenido al final de la calibración del reactor.

Ajuste cinético	
Factor de ajuste-Isomerización	
Factor de Isomerización Etilbenceno	1.45
Factor de Isomerización M-Xileno	5.18e <sup>-2</sup>
Factor de Isomerización O-Xileno	0.8422
Isomerización IC <sub>4</sub>	-47.02
Isomerización IC5	-59.14
Factor de distribución Olefinas	
Factor de Isomerización Etileno	-2.2
Factor de Isomerización Propileno	-2.3
Factor de Isomerización Butileno	-2.4
Factor de Isomerización Penteno	18.70
Factor de Isomerización Hexeno	6.965
Factor de Isomerización Hepteno	1.274
Factor de Isomerización Octeno	-1.026
Factor de ajuste Constante de Equilibrio	
Ciclización C5	1
Isomerización Multi-rama C6	100
Isomerización Multi-rama C7	100
Isomerización Multi-rama C8	100
Isomerización Rama simple C6	100
Isomerización Rama simple C7	100
Isomerización Rama simple C8	100
Factor de ajuste Ligeros finales	
C1	0.47
C2	2.37
C3	1.31
C4	5
Factores de ajuste Cinética de reacciones	
Deshidrogenación	0.97

Tabla 5.1 Factores de ajuste predeterminados que usa el simulador

Hidrodesintegración	0.79
Isomerización Multi-rama	0.89
Isomerización Rama simple	0.98
Cerradura de Anillo	0.53
Expansión de Anillo	0.95
Factor de ajuste Deshidrogenación	
Naftenos C7	0.85
Naftenos C8	0.1
Factores de ajuste Cerradura de Anillo	
C5	0.5
C6	2.5
C7	0.3
C8	0.13
C9	0.3
C10	0.89
Factores de Ajuste Desintegración	
C5	0.8
C6	0.5
C7	1
C8	0.1
C9	1.5
C10	4
C11	27
Factores de ajuste Isomerización de Parafinas	
Isomerización Multi-rama C6	1
Isomerización Multi-rama C7	1
Isomerización Rama simple C6	1.5
Isomerización Rama simple C7	0.1
Factor de ajuste Expansión de Anillo	
C6	3.87
C7	1.40
C8	2

En las Gráfica 5.3 y 5.4 se muestra la composición de salida utilizando los nuevos factores de ajuste que se obtuvieron de calibrar el simulador contra la composición de diseño de salida.



Gráfica 5.3 Composición de Líquido calibrada por el simulador contra la de diseño



Gráfica 5.4 Composición de Gas calibrada por el simulador contra la de diseño

En esta se observa que la composición del líquido si es muchos más ajustada al de la Gráfica 5.1 y 5.2 esto se logró modificando los factores de ajuste de las reacciones.

Respecto a la corriente gas observamos que con el simulador se obtiene una mayor pureza de H<sub>2</sub> en comparación a la de diseño. Pero también se observar que la cantidad de ligeros es menos a la de diseño; estos compuestos ligeros se encuentran en la corriente liquida, pero no representa un problema debido a que estos al final se separan del reformado y de la corriente rica en H<sub>2</sub>.

#### Resultados del reactor

En la Figura 5.1 se muestran los resultados de la sección de reacción generados por el simulador.

I I, wt [%] I, vol [%] I, wt [%] I, vol [%] e Production [m3/h] e RON	<b>89.83</b> 82.25 102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	Recycle H2 Recycle H2 Rate [S Recycle H2 Purity H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS	.TD_m3/h]	1.241e+005 0.8775 3.400	
l , wt [%] , vol [%] , wt [%] , vol [%] e Production [m3/h] e RON	89.83 82.25 102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	Recycle H2 Recycle H2 Rate [S Recycle H2 Purity H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS	TD_m3/h]	1.241e+005 0.8775 3.400	
I , wt [%] , vol [%] , wt [%] , vol [%] e Production [m3/h] e RON	89.83 82.25 102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	Recycle H2 Recycle H2 Rate [S Recycle H2 Purity H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS	TD_m3/h]	1.241e+005 0.8775 3.400 3.32	
, wt [%] , vol [%] , wt [%] , vol [%] e Production [m3/h] e RON	89.83 82.25 102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	Recycle H2 Rate [S Recycle H2 Purity H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS	TD_m3/h]	1.241e+005 0.8775 3.400	
I, vol [%] I, wt [%] I, vol [%] e Production [m3/h] e RON	82.25 102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	Recycle H2 Purity H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS		0.8775 3.400 3.32	
l, wt [%] , vol [%] e Production [m3/h] e RON	102.0 84.80 76.50 106.0 149.6 104.2	H2/HC Ratio Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS		3.400	
I, wt [%] I, vol [%] e Production [m3/h] e RON	84.80 76.50 106.0 149.6	Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS		3.32	
l, vol [%] e Production [m3/h] e RON	76.50 106.0 149.6 104.2	Hydrogen Yield H2 Yield, Wt [%] Net H2 Rate, MMS		3.32	
e Production [m3/h] e RON	106.0 149.6 104.2	Net H2 Rate, MMS	l	3.32	
e Production [m3/h] e RON	149.6	Net H2 Rate, MMS	Net H2 Rate_MMSCED		
e RON	104.2	H2 Broduction SCM/CLIM		54./3	
	104.2	H2 Production, SC	M/CUM	327.6	
	[%]	[%]			
	2.62	2 19			
	16.84	14.26			
zene	3.43	2.90			
ne	3.59	3.06			
ene	4.67	3.90			
ene	7.59	6.46			
	15.85	13.41			
nes					
	zene ne ene ne	Wt         [%]           2.62         16.84           zene         3.43           ne         3.59           ene         4.67           ne         7.59           ne         15.85	Wt         Vol           [%]         [%]           2.62         2.18           16.84         14.26           2.62         3.43           2.62         3.06           ene         3.59           3.06         3.90           ene         7.59           5.85         13.41	Wt         Vol           [%]         [%]           2.62         2.18           16.84         14.26           zene         3.43         2.90           ne         3.59         3.06           ene         4.67         3.90           ne         7.59         6.46	Wt         Vol           [%]         [%]           2.62         2.18           16.84         14.26           2.62         3.43           2.62         3.06           ene         4.67           7.59         6.46           per         15.85

Figura 5.1 Resumen de resultados generados por el simulador para la sección de

reacción

Dentro del resumen que se presenta en la Figura 5.1, se puede observar que el Reformado está cumpliendo con los parámetros de salida base como son:

- ✤ RON de 102.
- Pureza de H<sub>2</sub> del 87%
- ✤ 89.83% vol. de C₅+ a la salida
- Una producción de Nafta Reformada de 149.6 m<sup>3</sup>/h
- 2.18 % vol. de Benceno y 14.26% vol. de Tolueno
- Relación H2/HC de 3.4

En la Figura 5.2 se muestran las condiciones de operación del reactor

🕑 Catalytic Reforme	r: Reformer-100					_	- [		×
Design Feed Data	Reactor Section	Stabilizer Tower	Results						
Results									
Summary Feed Blend			Reactor 1	Reactor 2	Reactor 3	Reactor 4			
Product Yields	Inlet Temperature	e [C]	521.0	521.0	521.0	521.0			
Product Properties	Outlet Temperatu	ire [C]	415.9	465.3	491.5	505.1			
Reactors	Delta T [C]		105.1	55.69	29.50	15.92			
Heaters	Inlet Pressure [kg	/cm2_g]	4.930	4.420	3.960	3.490			
Product Streams	Outlet Pressure [	(g/cm2_g]	4.719	4.189	3.724	3.257			
	Delta P [kPa]		20.68	22.68	23.11	22.89			
	Inlet Molar Flow	kgmole/h]	6587	7876	8538	8902			
	Outlet Molar Flow	v [kgmole/h]	7871	8538	8902	9108			
	Residence Time [	seconds]	000:00:2.18	000:00:2.00	000:00:2.12	000:00:2.79			
	LHSV			<b>1.771</b>					
Delete	Reformer Envi	ronment		OK		🔲 Igno	red	EO V	ari
								_	

*Figura 5.2* Resultados de las condiciones de operación de los reactores

Como condiciones de operación del rector se pueden destacar los siguientes datos:

- El espacio velocidad es de 1.71
- El Delta de Temperatura va de 105°C a 15.92°C
- El Delta de Presión va de 20.68 kPa a 23.11 kPa

- La T de entrada para todos los reactores es de 521°C
- ✤ La P de entrada varía de 4.9 kg/cm<sup>2</sup> a 3.5 kg/cm<sup>2</sup>

Por último, se hará una comparación de los datos más destacados entre los datos de diseño y los obtenidos con el simulador.

Resumen

Esta sección consiste en mostrar un resumen de datos más destacados como son composición de salida de los productos finales, el flujo de salida de Nafta Reformada y algunas otras especificaciones que deben cumplir las corrientes de salida.

Comenzando con la composición de salida de los productos, en las Gráficas se muestra la composición de salida del Reformado y Gas LP.



Gráfica 5.5 Composición del Reformado



Gráfica 5.6 Composición del Gas LP

En la Gráfica 5.5 se observa que la tendencia que tiene la composición calculada por el simulador respecto a la de diseño son parecida, pero analizando más a detalle se observa que en la composición obtenida con el simulador cuanta con más compuestos  $C_6$  a  $C_{10}$  que compuestos ligeros, esto podría deberse a que esos compuestos ligeros se están yendo en alguna otra corriente como la de H<sub>2</sub> o la de Gas combustible. Esto no afecta al producto fina ya que cumple con las especificaciones de diseño.

Por otro lado, corriente de Gas LP se ajusta bien la composición entre la de diseño y la calculada por el simulador y esta corriente también cumple con las especificaciones de salida.

En la Tabla 5.4 se muestran las especificaciones que deben cumple los productos de salida.

	Diseño	Calculado	%Error
Flujo de Liquido a la salida del reactor (kmol/h)	1,138	1,191	4.72
C5+ RON	102	102	0.00
C5+ (% peso)	86.5	89.8	3.85
Reformado producido [BPD]	23,515	23,211	1.29
% mol H2 a la salida de reactor	82.00	87.75	7.01
% mol H2 a la salida del proceso	90.00	94.43	4.92
% mol de reformado (C4-)	1.00	1.73	73
% mol de LPG (C5+)	1.00	1.41E-03	0

Tabla 5 1 Comparació	n annoral da	rocultodoc	ontro ol	dicoño y la	, cimulación
Tabla J.4 Comparació	n yenerai ue	resultauus		UISEIIO y la	a Simulacion

En la Tabla 5.4 se observa que el flujo de salida calculado por el simulador es mayor que el de diseño, esto podría ser una ventaja ya que con las condiciones de operación que se utilizan en el simulador podría ser preciso incrementar la producción de reformado. Se logra el objetivo de obtener un reformado con un RON de 102 y este tiene un % peso de C<sub>5</sub>+ de casi el 90%, ,muy parecido al de diseño. La pureza del H<sub>2</sub> alcanza un casi 95% respecto a la de diseño que es de 90% y por último los compuesto C<sub>4</sub>- si están un poco por encima del establecido esto se puede observar en la Gráfica 5.5, que el valor calculado de es mayor al de diseño y para poder disminuir la cantidad de C<sub>4</sub>- se podría aumentar la temperatura o presión del separador en el condensador o disminuir la temperatura del reactor para que haya menor desintegración a compuestos ligeros.

A continuación, se mostrarán los resultados obtenido para el Caso 2.

## • Caso 2 (3 reactores)

# > Resultados de composición de salida

En las Gráfica 5.6 y 5.7 se muestra la composición de salida que se obtiene utilizando los factores de ajuste predeterminados por el simulador contra la composición de diseño de salida.



Gráfica 5.6 Composición de Líquido calculada por el simulador contra la de diseño



Gráfica 5.7 Composición de Gas calculada por el simulador contra la de diseño

Como se mencionaba con anterioridad los factores de ajuste predeterminados no dan una buena estimación de salida, y esto se puede observar bien en la Grafica 5.6. En este caso se observa que la estimación es más ajusta con respecto a la del caso anterior pero aun así la composición de salida no la que se desea, por lo que se deben ajustar los factores de calibración para poder tener una mejor estimación.

En la Tabla 5.5 se muestran los factores de ajuste obtenido al final de la calibración del reactor.

Ajuste cinético	
Factor de ajuste-Isomerización	
Factor de Isomerización Etilbenceno	1.73
Factor de Isomerización M-Xileno	0.53
Factor de Isomerización O-Xileno	0.79
Isomerización IC <sub>4</sub>	-46.88
Isomerización IC5	-59.18
Factor de distribución Olefinas	
Factor de Isomerización Etileno	-2.2
Factor de Isomerización Propileno	-2.3
Factor de Isomerización Butileno	4.86
Factor de Isomerización Penteno	10.64
Factor de Isomerización Hexeno	4.74
Factor de Isomerización Hepteno	1.76
Factor de Isomerización Octeno	0.61
Factor de ajuste Constante de Equilibrio	
Ciclización C5	1
Isomerización Multi-rama C6	100
Isomerización Multi-rama C7	100
Isomerización Multi-rama C8	100
Isomerización Rama simple C6	100
Isomerización Rama simple C7	100
Isomerización Rama simple C8	100
Factor de ajuste Ligeros finales	
C1	2.02
C2	2.25
C3	2.06
C4	5
Factores de ajuste Cinética de reacciones	
Deshidrogenación	0.95
Hidrodesintegración	0.77
Isomerización Multi-rama	0.92

Tabla 5.5 Factores de ajuste predeterminados que usa el simulador

Isomerización Rama simple	1
Cerradura de Anillo	0.5
Expansión de Anillo	0.94
Factor de ajuste Deshidrogenación	
Naftenos C7	2
Naftenos C8	1
Factores de ajuste Cerradura de Anillo	
C5	1
C6	15
C7	0.75
C8	3
C9	1
C10	1
Factores de Ajuste Desintegración	
C5	1.1
C6	1
C7	1.8
C8	1.3
C9	4.5
C10	5
C11	35
Factores de ajuste Isomerización de Parafinas	
Isomerización Multi-rama C6	1
Isomerización Multi-rama C7	1
Isomerización Rama simple C6	2
Isomerización Rama simple C7	0.16
Factor de ajuste Expansión de Anillo	
C6	3
C7	4
C8	2.46

En las Gráfica 5.8 y 5.9 se muestra la composición de salida utilizando los nuevos factores de ajuste que se obtuvieron de calibrar el simulador contra la composición de diseño de salida.



Gráfica 5.8 Composición de Líquido calibrada por el simulador contra la de diseño



Gráfica 5.9 Composición de Gas calibrada por el simulador contra la de diseño

En la Grafica 5.8 se observa que la composición del líquido se ajusta mucho mejor a la composición de diseño a diferencia de la composición obtenida con los valores predeterminados.

Ahora si se analiza la composición del reactor ya calibrado respecto al Caso 1, se puede observar que para el Caso 2 la estimación es mucho que mejor en el Caso 1, tanto para el líquido como para el gas, haciendo que el Caso 2 cumpla mejor con los parámetros de salida que el caso 1. Estos parámetros son los que se describen en la tabla \*.

Resultados del reactor

En la Figura 5.6 se muestran los resultados de la sección de reacción generados por el simulador.

esign Feed Data	Reactor Section Stabilizer Tower	Results				
Results	WAIT [C]	521.0				
ummary						
eed Blend	Yields/RON		Recycle H2			
roduct Yields	C5+ Yield, wt [%]	91.02	Recycle H2	Rate [STD_m3/h]	9.441e+004	1
roduct Properties	C5+ Yield, vol [%]	83.88	Recycle H2	Purity	0.8476	
eactors	C5+ RON	100.0	H2/HC Ratio	0	2.500	1
leaters	C6+ Yield, wt [%]	85.62				1
Product Streams C6+ Yield	C6+ Yield, vol [%]	77.69	Hydrogen Yie	eld		_
	C6+ RON	104.0	H2 Yield, W	t [%]	3.19	
	Reformate Production [m3/h]	142.1	Net H2 Rate	e, MMSCFD	54.46	-
			H2 Product	ion_SCM/CUM	326.0	
	Aromatics Yields	103.4	H2 Purity, n	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields	103.4	H2 Purity, n	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields	103.4 Wt [%]	Vol [%]	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields Benzene	103.4 Wt [%] 3.01	Vol [%] 2.51	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields Benzene Toluene Etit i D	103.4 Wt [%] 3.01 16.98	Vol [%] 2.51 14.37	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields Aromatics Vields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Dendelse	Wt [%] 3.01 16.98 3.23	Vol [%] 2.51 14.37 2.73	nole fraction	0.8476	
	Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Othe widera	Wt [%] 3.01 16.98 3.23 3.28	Vol [%] 2.51 14.37 2.73 2.80	nole fraction	0.8476	
	Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Mate xylene	103.4 Wt [%] 3.01 16.98 3.23 3.28 4.19 7.54	Vol [%] 2.51 14.37 2.73 2.80 3.49	nole fraction	0.8476	
	Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Meta-xylene Total Videoes	103.4 Wt [%] 3.01 16.98 3.23 3.28 4.19 7.54	Vol [%] 2.51 14.37 2.73 2.80 3.49 6.40	nole fraction	0.8476	
	Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Meta-xylene Total Xylenes Total Aromatics	103.4 Wt [%] 3.01 16.98 3.23 3.28 4.19 7.54 15.02 62.79	Vol [%] 2.51 14.37 2.73 2.80 3.49 6.40 12.70	nole fraction	0.8476	
	Aromatics Yields Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Meta-xylene Total Xylenes Total Aromatics	103.4 Wt [%] 3.01 16.98 3.23 3.28 4.19 7.54 15.02 63.78	Vol [%] 2.51 14.37 2.73 2.80 3.49 6.40 12.70 54.08	nole fraction	0.8476	

Figura 5.6 Resumen de resultados generados por el simulador para la sección de reacción

Dentro del resumen que se presenta en la Figura 5.6, se puede observar que el Reformado está cumpliendo con los parámetros de salida base como son:

- ✤ RON de 100.
- Pureza de H<sub>2</sub> del 85%
- ✤ 83.88% vol. de C₅+ a la salida
- Una producción de Nafta Reformada de 142.1 m<sup>3</sup>/h
- ✤ 2.51 % vol. de Benceno y 14.37% vol. de Tolueno
- Relación H2/HC de 2.5

En la Figura 5.7 se muestran las condiciones de operación del reactor

Design	Feed Data	Reactor Section	Stabilizer Tower	Results				
Po	eulte	Redetor Section	Stubilizer fower					
Summai Feed Ble	nd			Reactor 1	Reactor 2	Reactor 3		
Product	Yields	Inlet Temperature	e [C]	521.0	521.0	521.0		
Product	Properties	Outlet Temperatu	re [C]	412.2	456.8	485.1		
Reactors	s )	Delta T [C]		108.8	64.22	35.86		
Heaters		Inlet Pressure [kg	/cm2_g]	4.600	4.000	3.500		
Product	Streams	Outlet Pressure [	(g/cm2_g]	4.300	3.700	3.200		
		Delta P [kPa]		29.42	29.42	29.42		
		Inlet Molar Flow	kgmole/h]	5337	6631	7370		
		Outlet Molar Flow	v [kgmole/h]	6628	7369	7785		
		Residence Time [	seconds]	000:00:2.34	000:00:2.52	000:00:3.36		
		LHSV			2.279			
		WISV			2.014			
	alata	Reformer Envi	ronment		ОК		d 🗖	

Figura 5.7 Resultados de las condiciones de operación de los reactores

Como condiciones de operación del rector se pueden destacar los siguientes datos:

- El espacio velocidad es de 1.71
- El Delta de Temperatura va de 109°C a 35.86°C
- El Delta de Presión va de 20.68 kPa a 23.11 kPa
- La T de entrada para todos los reactores es de 521°C
- ✤ La P de entrada varia de 4.9 kg/cm<sup>2</sup> a 3.5 kg/cm<sup>2</sup>

Por último, se hará una comparación de los datos más destacados entre los datos de diseño y los obtenidos con el simulador.

#### > Resumen

Esta sección consiste en mostrar un resumen de datos más destacados como son composición de salida de los productos finales, el flujo de salida de Nafta Reformada y algunas otras especificaciones que deben cumplir las corrientes de salida.

Comenzando con la composición de salida de los productos, en las Gráficas 5.10 y 5.11 se muestra la composición de salida del Reformado y Gas LP.



Gráfica 5.10 Composición del Reformado



Gráfica 5.11 Composición del Gas LP

En la Gráfica 5.10 se observa que si hay variación entre la composición de calculada y la del diseño, observándose la principal diferencia en los compuestos, IP4,A7,N9 y A11, siendo mucho mayor la composición calculada a la de diseño, y los compuestos C6, P7 y P8 siendo mucho menos los calculados a los de diseño.

Se puede observar algo similar en la composición de Gas LP en donde los compuestos H2 y P2 son mucho mayor los calculados a el diseño y los compuestos P4 menos con respecto al diseño.

Es se debe en gran medida al cambio en el proceso que se describió en el capítulo anterior, en el cual en este caso son se cuenta en la sección de recontacto, la cual tiene una recirculación del separador 3 al 2 y la salida liquida del separador 2 se va a la zona de estabilización. Entonces en la Torre Debutanizadora se separan los extremos ligeros para así dar el reformado final.

Lo que se recomendaría en este caso es aumentar ya sea la temperatura o la presión para así poder tener una mejor separación de los compuestos. La composición final de ambas salida cumple con las características descritas en la tabla 4.4, por lo que a pesar de que la estimación de salida no es buena el reformado aun cumple con las especificaciones de diseño.

En la Tabla 5.4 se muestran las especificaciones que deben cumple los productos de salida.

	Diseño	Calculado	%Error
Flujo de Liquido a la salida del reactor (kmol/h)	1,146	1,127	1.69
C <sub>5</sub> + RON	100	100	0.00
C5+ (% peso)	90.4	91.0	0.69
Reformado producido [BPD]	24,681	23,358	5.36
% mol H2 a la salida de reactor	82.00	84.76	3.37
% mol H2 a la salida del proceso	90.00	94.38	4.87
% mol de Reformado (C4-)	1.00	0.72	27.67
% mol de GLP (C <sub>5</sub> +)	1.00	2.54E-03	-

Tabla 5.4 Comparación general de resultados entre el diseño y la simulación

En la Tabla 5.4 se observa que el flujo de salida calculado por el simulador es menor que el de diseño, dando un error por debajo del 2%. Se logra el objetivo de obtener un reformado con un RON de 100 y este tiene un % peso de C<sub>5</sub>+ por arriba del 90%, muy parecido al de diseño. La pureza del H<sub>2</sub> alcanza un casi 95% respecto a la de diseño que es de 90% y por último tanto los compuesto C<sub>4</sub>- presente en el Reformado son del 0.72% mol, está por debajo de los establecido que es máximo 1 % y los compuestos C<sub>5</sub>+ que están muy por debajo del máximo que es 1% mol. Pese a que la composición calculada de los productos de salida no se ajusta al 100 con la de diseño, los productos si están cumpliendo con las especificaciones de diseño establecida y mencionadas anteriormente.

## • Comparación de resultados (ambos casos)

A continuación, en la Tabla 5.5 se muestra un resumen de todos los datos importantes que se tomaron en cuanta a la hora de considerar que proceso es mejor.

	Diseño	Caso 1	Diseño	Caso 2
P entrada reactor 1 (kg/cm <sup>2</sup> )	4.9	4.9	4.6	4.6
P entrada reactor 2 (kg/cm <sup>2</sup> )	4.4	4.4	4.0	4.0
P entrada reactor 3 (kg/cm <sup>2</sup> )	4.0	4.0	3.5	3.5
P entrada reactor 4 (kg/cm <sup>2</sup> )	3.5	3.5	-	-
T entrada reactor 1 (°C)	521	521	535	521
T entrada reactor 2 (°C)	521	521	535	521
T entrada reactor 3 (°C)	521	521	535	521
T entrada reactor 4 (°C)	521	521	-	-
LHSV (promedio)	1.78	1.77	2.30	2.28
H <sub>2</sub> /HC (mol/mol)	3.4	3.4	2.5	2.5
Volumen del de reactor (m <sup>3</sup> )	111.50	111.5	86.7	86.7
Peso total de catalizador (kg)	93,103	93,103	72,369	72,369
% de catalizador distribuido Reactor 1	17.04	17.04	20.00	20.93
% de catalizador distribuido Reactor 2	20.00	20.00	30.00	30.02
% de catalizador distribuido Reactor 3	25.02	25.02	50.00	49.05
% de catalizador distribuido Reactor 4	37.94	37.94	-	-
Reformado producido (Barriles/día)	23,515	23,211	24,681	23,358

Tabla 5.5 Comparación general de resultados entre el diseño y la simulación

La característica más importante a destaca al hacer esta comparación, es que la temperatura de los reactores en el Caso 2 se modificó, debido a que la temperatura de diseño era alta y eso daba lugar a la desintegración de cadenas largas y así la mayor producción de compuestos ligeros que de transforman en coque haciendo que la desactivación del catalizador fuera más rápida.

Esto causaba que la composición de salida no se ajustara a la de diseño, provocando que el flujo de producto liquido fuera mucho menor y al contener tantos compuestos ligeros la Torre Debutanizadora a las condiciones de operación establecidas por el diseño no era capaz de separar los compuestos de forma correcta dando como resultado una cantidad de compuestos ligeros en el Reformado, haciendo que por consecuencia el RON de salida no fuera el correcto.

Por otro lado, se puede observar que ambos reactores trabajan con similares condiciones de operación, haciendo posible la comparación, ya que lo que se busca es sabes qué proceso da un Reformado con alto número de octano para la producción de gasolinas, pero utilizando la menor cantidad de recursos disponibles. Además, se conoce que la

alimentación a ambos proceso es la misma y las características que los productos de salida deben cumplir al final de cada proceso.

Por lo tanto, el enfoque que se dará es respecto a que tan bien se ajustan estos modelos a las condiciones o especificaciones de salida que los productos deben cumplir y a la comparación en la sección de reacción para cada caso.

Comenzando con la comparación de la sección de reacción para ambos casos en la Tabla 5.5 se muestran las principales característica de ambos reactores.

En el caso 1 el volumen final del reactor es de casi 112 m<sup>3</sup> y al pasar al caso 2 el volumen del reactor es de 87 m<sup>3</sup>, observando así una disminución en el volumen del reactor; esto también se comprueba en la distribución de catalizador, para el caso 1 la distribución va del 17% al 38% mientras que para el Caso 2 la distribución cambia del 20% al 50%, este cambio en la distribución hace que el espacio velocidad pase de 1.78 a 2.30. Lo que expresa el espacio velocidad es el tiempo que está en contacto el catalizador respecto al flujo alimentado. Dando como resultado que para el Caso 2 el catalizador tenga mayor contacto con el catalizador, esto visto desde el punto de las reacciones quiere decir que mientras más contacto tengan el catalizador y la nafta a reformar es las probable obtener los productos deseados en menor tiempo y eso también permitiría tener un mejor control en la selectividad del proceso, como consecuencia se requeriría de menor cantidad de catalizador para reformar esa nafta. Pero para lograr esto lo eso es necesario aumentar la temperatura en el reactor por eso también se observa que la temperatura pasa de 521°C a 535°C.

Otra característica importante es que en la relación Hidrogeno-Hidrocarburo para el Caso 1 es de 3.4 y en el Caso 2 pasa a ser 2.5. Este cambio se debe a que en el Caso 2 hay una mayor caída de presión que en el Caso 1 derivado de la distribución de catalizador que tiene cada reactor, en consecuencia disminuye la relación H<sub>2</sub>/HC, esto como consecuencia hace que la velocidad de recirculación del catalizador disminuya pasando de una regeneración de catalizador requerida para el Caso 1 de 1471 kg/h y remoción de catalizador cada 2.6 días a una regeneración de catalizador de 1279 kg/h remoción de catalizador cada 2.2 días. Haciendo posible que el reactor del Caso 2 trabaje con presiones de entrada similares a las del Caso 1.

96

Respeto al catalizador utilizador en uno y otro proceso no es el mismo, aunque en esencia son idénticos (bimetálicos, contienen 0.29 % de Pt, densidad de 835 kg/m<sup>3</sup>) el catalizador del Caso 2 no tiene precursor por lo que según UOP eso hacer que mejor la selectividad el catalizador y mejora el rendimiento del reactor; esto se puede comprobar al obtener una mejor estimación en la composición del Caso 2 respecto al 1. Debido a la mejora en la selectividad del proceso es que se opta por eliminar la sección de Recontacto Plus.

En la Tabla 5.6 se muestran la comparación entre los flujos de Reformado obtenido con el simulación contra los de diseño.

	Flujo (barriles/ día)
Diseño	23,515
Caso 1	23,211
%Error (Diseño-Caso 1)	1.29
Diseño	24,681
Caso 2	23,358
%Error (Diseño-Caso 2)	5.36

Tabla 5.6 Resultados del flujo de reformado obtenida

Se observa que tanto para el Caso 1 como el Caso 2 el flujo de salida es similar y en el Caso 2 se obtiene un mayor flujo que en el Caso 1 a pesar de que de la diferencia entre estos no es muy grande.

Donde se encuentra la mayor diferencia entre el flujo de diseño y el calculado es en el Caso 2, esto puede deberse a lo antes mencionado de que en el reactor se obtiene una menor cantidad de producto líquido, para hacer más pequeña esta diferencia lo que podría hacer es modificar las condiciones de operación del reactor o los factores de calibración para así obtener una mayor cantidad de producto final o modificar la temperatura de la sección de Recontacto y Estabilización para mejorar el flujo de salida de Reformado.

En la Tabla 5.7 y 5.8 se muestra el análisis PONA y análisis de aromáticos de los productos de salida.

Total (% mol)	Diseño	Caso 1	%Error	Diseño	Caso 2	%Error
Р	26.13	24.48	6.32	30.90	27.82	9.99
0	2.02	2.01	0.72	1.61	1.90	17.93
Ν	0.28	1.86	568.91	0.51	2.60	406.89
A	71.50	71.09	0.57	66.86	67.38	0.78

Tabla 5.7 Análisis PONA del reformado y sus respectivos errores

% aromáticos (mol)	Diseño	Caos 1	%Error	Diseño	Caso 2	%Error
Benceno	4.64	3.55	23.40	4.02	4.04	0.36
Tolueno	22.05	20.99	4.82	19.47	20.08	3.14
Etilbenceno	3.67	3.80	3.43	3.38	3.41	1.12
P-Xileno	3.87	3.98	2.88	3.45	3.48	1.03
O-Xileno	5.09	5.19	1.94	4.48	4.46	0.45
M-Xileno	8.21	8.42	2.66	7.96	8.00	0.51
Total, Xilenos	17.17	17.60	2.49	15.90	15.95	0.35
Total, Aromáticos	71.50	71.09	0.57	66.86	67.38	0.78

Tabla 5.8 Análisis de los aromáticos más importantes

La cantidad de parafinas finales en muy similar para ambos caso habiendo una diferencia entre ambos caso del 4% mol, respecto a las olefinas y aromáticos también son muy similares entres si observante que en el Caso 2 se encuentra una menor cantidad de olefinas y aromáticos que en el Caso 1. Por último la composición de naftenos para ambos casos es muy diferente a la de diseño, debido a que en la alimentación se tienen una gran cantidad de Ciclopentano el cual no es posible transformar y así teniendo presencial en el Reformado, haciendo que el número de naftenos en la mezcla final sea mucho mayor a la de diseño.

Por último, se observa que la cantidad de Benceno, Tolueno y Etilbenceno se ajustan muy bien a los valores establecidos por el diseño. Una de las cosas a tener en cuanta en el Reformado final es la cantidad de Benceno ya que este compuesto está catalogado como cancerígeno y se busca que el contenido del mismo sea controlado para así evitar daños a la salud, además si la selectividad del catalizador no es buena o las condiciones de operación no son óptimas pueden provocar que el benceno se transforme en productos indeseables por eso su producción debe ser controlada.

Para poder saber con mayor precisión qué proceso es mejor se hizo un análisis de sensibilidad para ambos casos en el que se modificaron algunas variables del proceso y se observó cómo respondía cada sistema a estos cambios.

# • Análisis de sensibilidad

Las variables de proceso que se modificación son: temperatura de entrada al reactor, flujo de la alimentación y relación Hidrogeno-Hidrocarburo. Las variables por examinar son:  $C_5$ + RON, producción de Reformado, pureza de H<sub>2</sub>, presión de entrada y % volumen de Aromáticos.

## > Variación de la Temperatura de entrada

La primera variable que se modifica en este análisis de sensibilidad es la temperatura de entrada. La variación de la temperatura se hace en el rango de 480°C a 540°C, ese hace en este rango ya que es intervalo en el que trabaja normalmente la CCR.



*Gráfica 5.12* Variación del RON respecto a la T de entrada para cada caso

En la Gráfica 5.12 se observa que a medida que aumenta la temperatura aumenta el RON y llega un punto en el que se estabiliza el RON y pasado ese punto el RON disminuye, por esta razón es que las Reformadoras Continuas trabajan en ese intervalo de temperatura ya que a mayor temperatura mayor desintegración y deposición de coque, por lo tanto, el RON disminuye.

También se puede observar que en el Caso 2 se obtiene un mayor RON que el Caso 1, representando una ventaja para el Caso 2 debido a que lo que se busca es obtener una gasolina con alto numero de octano.



*Gráfica 5.13* Variación de la producción de Reformado respecto a la T de entrada para cada caso

En la Gráfica 5.13 se puede observar como varia la cantidad de Reformado que se produce en cada caso, a diferencia de la gráfica anterior en donde veíamos que a mayor temperatura mayor RON aquí pasa lo contrario, a mayor temperatura la producción de Reformado disminuye esto debido a que conforme aumenta la temperatura es más fácil que los compuestos pesado se desintegren generando así compuestos ligeros y H<sub>2</sub> que son volátiles por lo que pasaran a la corriente Gas y eso provoca que se disminuya la cantidad de Reformado producido. Además, aquí se puede observar que en el Caso 1 se obtiene mayor cantidad de Reformado que en el Caso 2, por lo que en esta comparación el Caso 1 tiene ventaja sobre el Caso 2, ya que buscamos que la cantidad de reformado sea de al menos 160 m<sup>3</sup>/h y en el Caso 2 lo máximo que se produce es 145 m<sup>3</sup>/h.





Por ultimo se analiza la pureza de H<sub>2</sub> que se obtiene a la salida de reactor. En la Gráfica 5.14 se observa que a mayor temperatura mayor pureza de H<sub>2</sub>. Esto se debe a que conforme aumenta la temperatura se dan en mayor proporción la desintegración y coquización, originando así que el Hidrogeno aumente y con esto su pureza.

Aquí se puede observar que para el Caso 1 se obtiene una mayor pureza que en el Caso 2 y podría suponerse que el Caso 1 tiene ventaja sobre el Caso 2, ya que al salir el H<sub>2</sub> con mayor pureza requiere de menor tratamiento a la salida del reactor, pero si vemos en conjunto los datos analizados anteriormente, el tener una mayor pureza de H<sub>2</sub> representa una disminución en el RON, por lo que al final se puede decir que el Caso 2 tiene ventaja sobre el Caso 1 debido a que cumple con el RON de salida que requiere el producto y a pesar de que la pureza del H<sub>2</sub> no es tan buena como en el Caso 1, en la sección de recontacto que es donde se separan la mayor cantidad de compuestos ligeros del H<sub>2</sub>, al finalizar el proceso si se alcanza la pureza requerida que es mucho menor que en Caso 1, lo que se puede hacer para aumentar el Reformado producido es disminuir la

temperatura del reactor, o mejorar la calidad de la alimentación ya que al ser una nafta pesa contiene mucho ciclopentano que no reacciona y que al no transformarse disminuye el RON del producto así como su producción, otra variable que podría modificarse es el flujo de entrada al reactor y así incrementar la producción de Reformado.

Adicional a la información antes presentada se muestran dos graficas mas que representan la producción de Benceno y Aromáticos para cada caso.



*Gráfica 5.16* Variación de % vol. de aromáticos respecto a la T de entrada para cada caso

En la Gráfica 5.16 se observa que la cantidad de aromáticos que se general aumenta conforme aumenta la temperatura, llegando aun un máximo y después comienza a disminuir, esto es debido a que como ya se mencionó antes a mayor temperatura mayor desintegración de compuestos pesados y disminuye la cantidad de aromáticos producidos. También se puede observar que el Caso 2 produce una mayor cantidad de aromáticos que el Caso 1, por lo que representa un ventaja ya que los compuestos aromáticos son los que dan un mejor número de octano a la mezcla.



*Gráfica 5.17* Variación de la frac. mol de Benceno respecto a la T de entrada para cada caso

Por último se presenta la fracción de Benceno que se genera en cada caso y se puede observar que la producción de Benceno en el Caso 1 es mucho mayor que en el Caso 2, lo cual pone en desventaja al Caso 1 ya que uno de las cosas que mas se cuida de la nafta Reformada, es mantener bajos los niveles de Benceno en la mezcla ya que el Benceno es precursor de compuestos indeseados, además de que es un compuesto dañino para la salud.

Otra cosa que se puede observar es que al igual que en la gráfica anterior conforme aumenta la temperatura mayor cantidad de Benceno se forma hasta que llega a un máximo y después disminuye.

Para controlar la producción de Benceno lo que se recomienda es utilizar catalizadores que tengan una alta selectividad para evitar así en lo posible la formación de Benceno en exceso, también se pueden controlar la velocidad de reacción para disminuir la producción de benceno mediante la variación de la T o P de entrada a los reactores y por ultimo se puede disminuir el tiempo de residencia o de contacto entre el catalizador y el producto Reformado para así evitar que la reacción llegue a la producción de Benceno en exceso.

La siguiente variable que se modifica es la relación H<sub>2</sub>/HC. Esta relación al modificarla impacta directamente en la presión del reactor.

# > Relación Hidrogeno-Hidrocarburo (H<sub>2</sub>/HC)

La relación H<sub>2</sub>-HC se modifica en el rango de 2 a 4 (mol/mol) ya que normalmente este es el rango en el que funciona la Reformadora Catalítica.

Esta relación es muy importante ya que si la cantidad de hidrogeno se disminuye por debajo de los establecido, esto provocara que las reacciones de coquización se den en mayor medida y el catalizador se desactivara más rápido y se requerida de mayor recirculación para mantener el catalizador fresco y funcionando, esto acorta la vida del catalizador. Si existe un exceso de hidrógeno recirculado esto provocara que se den con mayor facilidad las reacciones de desintegración dando como resultado componentes más ligeros y disminuyendo el rendimiento del reformado.



Gráfica 5.18 Variación de P de entrada respecto a H2/HC para cada caso

En la Gráfica 5.18 se muestra la variación de la presión de entrada para cada reactor en ambos casos. Se puede observar que a mayor H<sub>2</sub>/HC mayor es la presión de entrada al

reactor, esto afecta la operación del reactor ya que modifica la cinética de las reacciones en el catalizador, lo cual puede ocasionar que el producto final quede fuera de especificación.

Se puede observar en el Caso 2 que el reactor 1 es el que mayor presión de entrada maneja, mientras que la presión del segundo reactor es muy parecida al 2 reactor del Caso 1, el siguiente es el reactor 3 te tiene la misma tendencia para los 2 casos y el cuarto reactor del Caso 1 es el que menor presión maneja. Lo cual deja claro que ambos procesos manejan presión de entrada muy parecidas. La diferencia en la presión para el Caso 2 radica en que, al tener una distribución de catalizador mayor en cada reactor, eso genera que haya una mayor caída de presión dentro del reactor por lo que se debe compensar esa caída de presión, aumentando la presión de entrada; esto con el fin de no afectar la producción de Reformado.



Gráfica 5.19 Variación de RON respecto a H<sub>2</sub>/HC para cada caso

En la Gráfica 5.19 se observa que para el Caso 1 el RON disminuye conforme se aumenta el H<sub>2</sub>/HC, esto se debe a que existe una mayor cantidad de Hidrógeno en la alimentación provocando que haya mayor cantidad de ligeros y disminuya el rendimiento. En Cambio para el Caso 2 se observa que conforme se aumenta el H<sub>2</sub>/HC aumenta el RON, esto se
debe a que al tener un menor tamaño de reactor, la caída de presión es mayor, por lo que al aumentar la presión parcial del hidrogeno esto da lugar que la conversión de hidrocarburo sea mejor, dando como resultado un aumento en el RON.





En la Gráfica 5.20 se observa que a mayor H2/HC mejor es la producción de Reformado. Se observa que en el Caso 1 a pesar que disminuye el Reformado producido aun es mayor a lo que se produce en el Caso 2. Por lo que podría representar una ventaja a la hora de elegir un proceso respecto al otro.

Pero tomando en cuenta la otras variables se prefiere un Reformado con un alto rendimiento por lo que en ese sentido tiene ventaja el Caso 2.

#### > Variación en el flujo de alimentación

La última variable que se modifica es el flujo de alimentación al reactor. La variable que más se ve afectada por este cambio es el espacio velocidad (LHSV) y esta es una variable a considerar ya que indica el tiempo que estarán en contacto el flujo alimentado y el volumen de catalizador, a mayor LHSV mayor tiempo de residencia tendrá el flujo de alimentación en el reactor. Por lo tanto se espera que la velocidad de las reacciones disminuya, en consecuencia la calidad de los productos de salida disminuirán y se obtendrá un menor rendimiento, para poder mantener la producción de Reformado con las

especificaciones de salida, se debe aumentar la severidad del proceso, generalmente se aumenta la temperatura para compensar el aumento en el LHSV.



Gráfica 5.21 Variación del LHSV respecto al flujo alimentado para cada caso

En la Gráfica 5.21 se puede observar que a mayor flujo mayor espacio velocidad. Pero también se observa que el espacio velocidad del Caso 2 es mayor al del Caso 1, esto se debe a que el volumen del reactor es más pequeño (menor cantidad de catalizador), para compensar el tamaño del reactor se debe aumentar la temperatura de entrada al mismo, eso se observa en los datos de diseño en donde en el Caso 2 la temperatura de entrada pasa de 521°C (Caso 1) a 535°C.



Gráfica 5.22 Variación del RON respecto al flujo alimentado para cada caso

En la Gráfica 5.22 se puede observar que en efecto debido al aumento en el LHSV el RON obtenido disminuye conforme se aumenta el caudal de alimentación, siendo así que para un caudal pequeño se obtiene un RON por encima de 99 y al aumentar el flujo casi al triple el RON disminuye a casi 90.





En la Gráfica 5.23 se observa que conforme aumenta el caudal se obtiene una menor cantidad de aromáticos, esto se debe a que la velocidad de las reacciones disminuye, por lo tanto la conversión aromática se da en menos proporción.





En la Gráfica 5.24 se observa que si se aumenta el flujo de alimentación se aumenta el flujo de Reformado producido, pero hay que tomar en cuenta que este reformado es probable que no cumpla con los rendimientos requeridos, por lo que al final no será un buen producto.

Por lo tanto el LHSV es una variable un importante dentro del proceso de Reformación Catalítica. En este sentido El Caso 1 tiene ventaja sobre el Caso 2 ya que al tener un mayor volumen de reactor el LHSV es menor y se requieren de condiciones menos severas en la operación del reactor.

# **Capítulo 6**

## 6. Conclusiones

De acuerdo al análisis de resultados se puede concluir que el Caso 2 tiene muchas ventajas respecto al Caso 1, como por ejemplo sin importar si aumenta la temperatura o presión de los reactores el proceso nos dará mejor rendimiento en los productos de salida. Por otra parte el proceso funciona con un reactor menos, eliminando así una etapa en el proceso, además de requerir menor cantidad de catalizador. También como se mencionó con anterioridad no se requiere de la sección de Recontacto Plus, eliminándose así otra etapa en el proceso, haciéndolo más sencillo y disminuyendo el costo de operación del proceso. Por otro lado en el Caso 2, el producto de salida contiene menor cantidad de Benceno que el Caso 1, cumpliendo con la NOM-016 en la que se restringe la cantidad de Benceno contenida en las gasolinas.

La desventaja de este proceso es que el flujo de salida del Reformado es mucho menor al que se puede obtener en el Caso 1 y la severidad del proceso aumenta para compensar la disminución en el volumen del reactor.

Para producir gasolina de alto octanaje se puede utilizar un proceso con 4 reactores, pero no es necesario ya que con un proceso con 3 reactores se puede obtener una Nafta Reformada con alto número de octano también.

El proceso con 4 reactores es mejor para generar productos BTX y mandarlos después a procesos petroquímicos. Un proceso con 3 reactores no sería capaz de producir BTX debido a las condiciones de operación del proceso.

Cada proceso fue diseñado para una función en específico y dependerá de los productos de salida que se quieran obtener que proceso es mejor utilizar. En este caso como lo que se quiere es producir gasolinas de alto octanaje es recomendable utilizar un proceso con 3 reactores.

# **Capítulo 7**

## 7. Bibliografía

- Metro, Steve. "Ideas for Rent: The first fixed bed reforming unit history" [en línea]. [Fecha de consulta: 12 abril 2019]. Disponible en: <u>http://www.uop.com/ideas-rent-fixed-bed-reforming-unit-history/?cid=953</u>
- 2. Alias Marín, Alberto. "Análisis y Simulación de la Unidad Reformadora de Naftas CCR de la Refinería de Minatitlán, Ver." Tesis mención Ingeniero Químico, 2009.
- Montesdeoca Espín, Diego Eduardo. "Simulación de la unidad de Reformado Catalítico de la Refinería Estatal Esmeraldas". Tesis de Maestría. Universidad Politécnica de Madrid, 2013.
- G.N. Maslyanskii, B.B. Zharkov, A. P. Fedorov, T.M. Klimenko, P.N. Shapiro and R.F. Pannikova. "Catalytic Reforming of Naphtha Cuts over Polymetallic Catalysts. Chemistry and Technology of Fuels and Oils". Vol. 13, Number 1/ Enero de 1977.
- 5. Barroso Castillo, José. "¿Qué es octanaje?" [en línea]. [Fecha de consulta: 12 abril2019].Disponibleen:

http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/rmro/2906019/sem06/QUE\_ES\_OCTANA JE.pdf

- "Magna o Premium, la deferencia no solo radica en el precio" [en línea]. [Fecha de consulta: 12 abril 2019]. Disponible en: <u>https://studylib.es/doc/5460726/magna-opremium--la-diferencia-no-s%C3%B3lo-radica-en-el-precio</u>
- Pastrana, Eduardo. "*Tipos de gasolinas*" [en línea]. [Fecha de consulta: 12 abril 2019]. Disponible en: <u>https://autobild.com.mx/sin-categoria/tipos-de-gasolina/10/05/</u>
- "El Petróleo: Historia del Petróleo" [en línea]. [Fecha de consulta: 12 abril 2019]. Disponible en: <u>http://trabajoquimica-petroleo.blogspot.mx/2011/07/historia-del-petroleo.html</u>
- Fahim, M.A.; Al-Sahhaf, T.A.; Elkilani, A.S. *"Fundamentals of Petroleum Refining"*, 1<sup>ra</sup> Ed. (UK, 2010. Elsevier).

- Garry, James H. y E., Handwerk Gleen. 2011. "Petroleum Refining Technology and Economics". 4<sup>ta</sup> Ed. (New York, 2001. Marcel Dekker, Inc.).
- 11.NOM-016-CRE-2016
- Morales Romero, Osvaldo. "Análisis y Simulación de la Nueva Planta CCR de la Refinería Ing. Antonio M. Amor, Salamanca." Tesis mención Ingeniero Químico, 2014.
- 13. Mazzieri, V.A., Grau, J.M., Vera, C.R., Yori, J.C., Perea, J.M. y Pieck, C.L. "Catalizadores de reformado de naftas de pt-Re/Al2O3 sin necesidad de sulfuración". n.d. Santa Fe, Argentina.
- 14. Ancheyta, Jorge. "Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining". 1ra ed. (John Wiley & Sons, Inc. 2011).
- 15. AspenTech. Aspen plus Reformer V10 User's Guide.
- 16. Manual General de Operacion. CCR Platforming, UOP. 2012.
- 17. Antos, George J. y Aitani, Abdullah M. 2004. "*Catalytic Naphta reforming*". New York: Marcel Dekker, Inc., 2004.
- 18. Catálogo, PEMEX Refinación, *"Refinería Gral. Lázaro Cárdenas"*, México 2003. (Plano creativo, S.A. de C.V.)
- 19. Llabrés Campaner, Pedro Juan. "¿Qué es la gasolina?". [en línea]. [Fecha de consulta: 1 octubre 2019]. Disponible en: https://hueleaquimica.wordpress.com/2016/10/25/que-es-la-gasolina/
- 20. Mayers, Robert A. *"Manual de Procesos de Refinación de Petróleo"*. 1era ed. en español (2008. McGraw-Hill Interamericana).
- 21. Ochoa Jiménez Luis Angel. "Desarrollo de un Modelo Dinámico para la Simulación del Proceso de Reformación Catalítica de Naftas," Tesis mención Ingeniero Químico, 2013.
- 22. Real Academia de Ingeniería, "Actividad del catalizador". [en línea], [Fecha de consulta: 14 noviembre 2019]. Disponible en: <a href="http://diccionario.raing.es/es/lema/actividad-del-catalizador">http://diccionario.raing.es/es/lema/actividad-del-catalizador</a>
- 23. Real Academia de Ingeniería, "Selectividad del catalizador". [en línea], [Fecha de consulta: 14 noviembre 2019]. Disponible en: <a href="http://diccionario.raing.es/es/lema/selectividad-del-catalizador">http://diccionario.raing.es/es/lema/selectividad-del-catalizador</a>

- 24.B. C. Gates, J. R. Katzer, and G. C. A. Schuit, *"Chemistry of Catalytic Processes",* McGraw-Hill, New York, 1979.
- 25. Ai-Fu Chang, Kiran Pashikanti and Y. A. Liu, *"Refinery Engineering"*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. Virginia, USA, 2012.
- 26. Smith, R. B., "Chemical Engineering Progress". 1959, 55, 76–80.
- 27.Krane, H. G.; Groth, B. A.; Schulman, L. B.; Sinfeld, H. J. Fifth World Petroleum Congress Section III, New York, 1959, 39.
- 28. Henningsen, J.; Bundgaard-Nielson, M. British *"Chemical Engineering"* 1970, 15, 1433–1436.
- 29. Aguilar-Rodriguez, E.; Ancheyta-Juarez, J. "Oil & Gas Journal" 1994, 92, 80-83.
- 30. Ancheyta-Juarez, J.; Aguilar-Rodriguez, E. "Oil & Gas Journal" 1994, 92, 93–95.
- 31. Ancheyta-Juarez, J.; Macias-Villafuerte, E.; Schachat, P.; Aguilar-Rodriguez, E.; Gonzales-Arredondo, E. Chem. Eng. Technol. 2002, 25, 541–546.
- 32. Hu, S.; Zhu, X. X. Chem. Eng. Comm., 2004, 191, 500-512.
- 33. Raseev, S. "Thermal and Catalytic Processes in Petroleum Refining"; Marcel Dekker 2003. New York, NY.
- 34. Ramage, M. P.; Graziani, K. R.; Schipper, P. H.; Krambeck, F. J.; Choi, B. C. Advances in Chemical Engineering 1987, 13, 193–266.
- 35. Kmak, W. S. AIChE National Meeting, Houston, TX, 1972.
- 36. Hosten, L. H; Froment, G. F. Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop 1971, 10, 280– 287.
- 37. Selman, D. M; Voorhies, A. Ind. Eng. Chem., Prod. Res. Dev. 1975, 14, 118–123.
- 38. Froment, G. F. Chemical Engineering Science 1987, 42, 1073–1087.
- 39. Taskar, U. M. Ph. D. Diss. 1996. Texas Tech University, Lubbock, TX.
- 40. Taskar, U. M.; Riggs, J. B. AIChE J. 1997, 43, 740–753.

# **Capítulo 8**

## 8. Apéndice

#### 8.1 Historia Refinería "Gral. Lázaro Cárdenas" [18]

#### 6.1.1 Antecedentes

Durante varios años, debido principalmente a los problemas inherentes de la expropiación y a situaciones externas, se detuvieron los planes de expansión. Es hasta 1954 en el que se alcanza el equilibrio, cuando comienza prácticamente la era moderna de la Refinería; las antiguas instalaciones son desmanteladas y se inicia la construcción de nuevas Unidades de proceso con mayor capacidad, utilizando todos los avances tecnológicos de su tiempo, acordes con la demanda nacional de energéticos. Como resultado de la citada expansión, la Refinería actualmente está integrada por 32 plantas en operación normal.

Este centro de trabajo inició sus labores en el año de 1906, bajo la administración de la compañía inglesa "El Águila". 34 años después, las instalaciones pasaron a ser patrimonio de la Nación como resultado del Decreto de la Expropiación Petrolera, en el año de1938, por el entonces presidente de la República, General Lázaro Cárdenas del Río.

En 1974, la Refinería de Minatitlán, Veracruz, cambia su nombre a Refinería "General Lázaro Cárdenas", como homenaje y reconocimiento unánime al precursor del petróleo mexicano.

En 1997 se incorporan oficialmente las instalaciones industriales (tres plantas de proceso, doce tanques de almacenamiento y una torre de enfriamiento) de Pemex-Refinación ubicadas en el complejo petroquímico "Cangrejera".

#### 8.1.2 Localización

La refinería "Gral. Lázaro Cárdenas del Río" se ubica en el Municipio de Minatitlán, en el estado de Veracruz: latitud 17° 59' norte, longitud 94° 32' oeste a una altitud de 64 metro

sobre el nivel del mar. Cuenta con una superficie de 200 hectáreas, que están ubicadas en el margen izquierdo del rio Coatzacoalcos.

Las zonas a las que se distribuye los diferentes productos obtenidos dentro de la refinería son las siguientes:

- Zona 1: Zona Central que abarca los siguientes estados de la Republica: Guerrero, Oaxaca, Puebla, Norte de Veracruz, Estado de México y Distrito Federal.
- Zona 2: Zona Sureste que incluye: Campeche, Chiapas, Sur de Veracruz, Tabasco y Yucatán.
- Zona 3: Zona Noroeste que abarca: Baja California Norte, Baja California Sur, Sinaloa y Sonora.

Para poder distribuir los diferente productos a los diferentes Estados, el sector de movimiento de productos ocupa el 68% (135 hectáreas) de la superficie total de la Refinería.

#### 8.1.3 Proceso de Refinación



Figura 8.1 Variación en el Numero de Octanos de Investigación (RON

Los productos finales elaborados en la Refinería son: LPG, propileno, butilenos, isobutano, gasolinas (Pemex-Magna y Pemex-Premium), gas nafta, turbosina, kerosina, Pemex Diesel, Diesel desulfurado, combustóleo y ciclohexano.

#### 8.2 Octanaje<sup>[5]</sup>

#### • ¿Qué es el octanaje?

Octanaje o número de octano es una medida de la calidad y capacidad antidetonante de las gasolinas para evitar las detonaciones y explosiones en las máquinas de Ciclo Otto, de tal manera que se libere o se produzca la máxima cantidad de energía útil.

#### • ¿Cómo se determina?

Para determinar la calidad antidetonante de una gasolina, se efectúan corridas de prueba en un motor, de donde se obtienen dos parámetros diferentes:

El Research Octane Number (Número de Octano de Investigación) que se representa como RON o simplemente R y que se determina efectuando una velocidad de 600 revoluciones por minuto (rpm) y a una temperatura de entrada de aire de 51.7 °C. El RON se define como el porcentaje en volumen de iso-octano en una mezcla de iso-octano y n-heptano que se golpea con cierta intensidad como el combustible que está siendo estudiado. En la Figura que se muestra a continuación se muestra que el RON de parafinas, iso-parafinas y naftenos disminuye con forme el número de carbonos en la molécula aumenta. Los aromáticos tienen la tendencia opuesta. <sup>[9]</sup>



Figura 8.2 Variación en el Numero de Octanos de Investigación (RON)

El Motor Octane Number (Número de Octano del Motor) que se representa como MON o simplemente M y se obtiene mediante una corrida de prueba en una máquina operada a una velocidad de 900 revoluciones por minuto y con una temperatura de entrada de aire de 149 °C. Para propósitos de comercialización y distribución de las gasolinas, los productores determinan el índice de octano, como el promedio de los números de octano de investigación (RON) y el octano del motor (MON), de la siguiente forma:

Índice de octano = 
$$\frac{\text{RON} + \text{MON}}{2} = \frac{\text{R} + \text{M}}{2}$$

#### • ¿Cuál es la escala utilizada para medir el octanaje?

La calidad antidetonante de una gasolina se mide usando una escala arbitraria de número de octano. En esta escala, se dio a los hidrocarburos iso-octano (que es poco detonante) un índice de octano de 100; y al n-heptano (que es muy detonante), un índice de octano de cero.

La prueba de determinación del octanaje de una gasolina se efectúa en un motor especial de un sólo cilindro, aumentando progresivamente la comprensión hasta que se manifiesten las detonaciones. Posteriormente, se hace funcionar el motor sin variar la comprensión anterior, con una mezcla de iso-octano y una cantidad variable de n-heptano, que representará el octanaje o índice de octano de la gasolina para la cual se procedió a la prueba y que tiene, por lo tanto, el mismo funcionamiento antidetonante de la mezcla de hidrocarburos.

Así, por ejemplo, si una gasolina presenta propiedades antidetonantes similares a una mezcla de 95% de iso-octano y 5% de n-heptano, se dice que tiene un número de octano de 95.

#### • ¿Qué problemas se presentan al usar gasolinas de bajo número de octano?

Los principales problemas son la generación de detonaciones o explosiones en el interior de las máquinas de ciclo Otto, aparejado esto con un mal funcionamiento y bajo rendimiento del combustible, cuando el vehículo está en movimiento, aunado a una elevada emisión de contaminantes.

#### 8.3 La gasolina

Entre los productos derivados del petróleo la gasolina es el combustible más demando, toda vez que la gran mayoría de autos en el mundo la usan para hacer funcionar sus motores, los cuales tienen diferentes características por lo que deben usar gasolinas también distintas. Así, este combustible se clasifica de acuerdo con su nivel de octanaje.

#### • La relación entre gasolina y el octanaje

De acuerdo con la revista "Octanaje", publicada por Pemex Refinación, los motores de combustión interna como el de los automóviles y camiones tienen un funcionamiento dividido en cuatro tiempos (admisión, compresión, combustión y escape), en donde una mezcla de aire y gasolina es comprimida por la acción de un cilindro. Como resultado de esta presión, la mezcla adquiere una elevada temperatura que enciende el combustible.

Por esta razón, a las gasolinas se les agrega un aditivo medido en número de octanos, el cual regula la capacidad detonante del combustible, eliminando la presencia de explosiones múltiples dentro del motor, de tal manera que se produzca la máxima cantidad de energía útil. <sup>[6]</sup>

#### • Magna o Premium

El octanaje indica la presión y temperatura a que puede ser sometido un combustible carburado mezclado con aire, antes de auto detonarse al alcanzar su temperatura de auto ignición debido a la ley de los gases ideales. Hay distintos tipos de gasolinas comerciales clasificadas en función de su número de octano. La gasolina más vendida en Europa (2004) tiene un MON mínimo de 85 y un RON mínimo de 90.

En nuestro país no se tiene un historial amplio en este rubro, ya que las gasolinas aparecieron dos años después de la Expropiación Petrolera de 1938, cuando vio la luz la primera gasolina mexicana conocida como la Mexolina cuyo octanaje era de 70. Diez años después, obligados por los requerimientos automotrices, se mejoró la gasolina para ofrecer la Supermexolina de 80 octanos. Le siguieron, en 1956, Gasolmex de 90 octanos, y Pemex 100 (de 100 octanos), una década después.

Hasta 1973 se mantuvieron en el mercado estas cuatro gasolinas; todas contenían tetra etilo de plomo (componente químico utilizado para incrementar el número de octanos). Gracias a los estudios de mercado realizados ese mismo año, se definió que el promedio de octanaje que el país requería era de 85, por lo que todas las gasolinas anteriores fueron sustituidas por la Nova, con 81 octanos y la Extra con Plomo de 94 octanos, las cuales, según la sugerencia que les daban a los consumidores de aquellos años, debían ser combinadas para satisfacer las necesidades de sus autos; sin embargo, el público prefirió utilizar la Nova.

Los cambios más notables en la composición de las gasolinas no se dieron hasta la introducción del convertidor catalítico en 1991, que fue parte importante para reducir los daños al medio ambiente causados por los autos. El plomo daña el catalizador de los convertidores y los estropea, por lo que se hizo indispensable el uso de gasolinas libres de plomo. Así fue como desapareció la gasolina Nova para dar paso a una nueva generación de gasolinas: Pemex Magna y Pemex Premium.

Las gasolinas Magna y Premium no se diferencian sólo por el color de las bombas, su principal característica es su nivel de octanaje: la Premium cuenta con **92 octanos**, mientras que la Magna tiene **87**. Ahora bien, el índice de octanos requerido por un motor está directamente asociado con su nivel de compresión, que es la relación que existe entre el volumen de la cámara de combustión y el volumen del cilindro, más la suma del volumen de la propia cámara.

En términos sencillos, basta con decir que a mayor octanaje (siempre que el automóvil así lo requiera) es mejor la combustión, lo que previene el desgaste prematuro del motor. No todos los vehículos trabajan con niveles de compresión iguales. Los autos más sofisticados, de alto desempeño y alta compresión requieren de gasolina de alto octanaje (en el caso de nuestro país, Pemex Premium); no utilizar este tipo de combustible ocasionaría cascabeleo, pérdida de potencia y daños al motor a largo plazo. En cambio, un consumidor que tiene un vehículo común y acostumbra a utilizar gasolina Premium, desperdicia su dinero porque no le traerá ningún beneficio adicional.

- Pemex Premium UBA: Gasolina de bajo contenido de azufre y mayor octanaje formulada para automóviles con convertidor catalítico y motores de alta relación de compresión.
- Pemex Magna: Gasolina sin plomo formulada para automóviles con convertidor catalítico y en general, motores de combustión interna a gasolina con requerimientos, por lo menos de 87 octanos.

Así, la gasolina Pemex Magna está recomendada para casi todo tipo de automóviles con la excepción de los autos con turbocompresor, los cuales tienen una muy alta relación de compresión; mientras que la Pemex Premium es para automóviles de lujo o deportivos. En la Tabla 8.1 se muestran algunos parámetros con los cuales debe cumplir la gasolina en el Valle de México, según la normativa mexicana, a través de la NOM-016-CRE-2016 [11]:

Tahla Q 1 Ala	nunne cenecificae	pionoc do in	tarác cabra	la Cacolina
<i>i abia 0. i A</i> iu	iunas especincal			ia Gasuillia.

	Gasolina Premium	Gasolina Magna
Índice de Octano*	92 (min)	87 (min)
Olefinas (%V/V)	12	10
Benceno (%V/V)	2	2
Aromáticos (%V/V)	25	25
Azufre (ppm)	30-80	30-80
	*/1401-001/ /0	

\*(MON+RON) /2

### 8.4 Simulación del Proceso de Reformación Cata tilica Continua en Aspen-HYSYS v10

#### > Selección del paquete de simulación y termodinámico

A continuación, se mostrarán el proceso de cómo se realizó la simulación de las reformadoras catalíticas.

Esta metodología se utiliza para simular las dos unidades de reformado (proceso con 4 reactores y proceso con 3 reactores). Lo único que cambia para cada diseño son las condiciones de operación de cada unidad, más adelante se mostrara de manera más detalla las condiciones de operación de cada proceso.

(Nota: todas las imágenes aquí mostradas fueron tomadas del Simulador ASPEN-HYSYS)

Primero se selecciona el paquete de propiedades que utilizara el programa. Es un paquete de reacciones predeterminado por el simulador de procesos llamado *CatRefIsom.cml* 

File Selection for Importing File Selection for Importing	ng a Component List			×
← → × ↑ 🖡 « Asj	penTech > Aspen HYSYS V10.0 > Paks	~ Ū	Buscar en Paks	م
Organizar 👻 Nueva car	rpeta		•=== •== •	□ ?
Ste equipo	Nombre	Fecha de modifica	Тіро	Tamaño ^
A360 Drive	Assay Components Celsius to 850C.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	222 K
Descargas	Assay Components Celsius to 1150C.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	258 K
Documentos	Assay Components Fahrenheit to 1500F.c	24/04/2017 04:04	Archivo CML	323 K
- Escritorio	Assay Components Fahrenheit to 2000F.c	24/04/2017 04:04	Archivo CML	362 K
	CatReflsom.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	1,204 K
in inagenes	FCC Components Celsius.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	261 K
Música	FCC Components Fahrenheit.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	346 K
bjetos 3D	HCR.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	1,607 K
Videos	HCR_extended.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	1,865 K
🐛 Windows (C:)	Hydrocracker Components Celsius.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	242 K
RECOVERY (D:)	Hydrocracker Components Fahrenheit.cml	24/04/2017 04:04	Archivo CML	284 K
🥌 Red 🗸 🗸	< C 11 C 11 D 1	24/04/2017 01 01	A 11 OM	>
Nombre	e de archivo: CatReflsom.cml	~	Component Lists (*.cm	ıl) ~
			Abrir	Cancelar

Figura 8.3 Selección del paquete de simulación y termodinámico

#### > Configuración de Unidad Reformadora

Una vez seleccionado el paquete de propiedades, pasamos a la sección de simulación

🕒 , 🗒 🤊 📢 🔁 🐚 🔹	Untitled - Aspen HYSYS V10 - aspenONE     Flowsheet
File Home Economics	Dynamics Plant Data Equation Oriented View Customize Resources Flowsheet/Modify Format
👗 Cut 🛛 NewUser1eb32' 👻 🔮	🕈 Utility Manager 🔽 Active 📰 😰 Model 📈 🖄 Case Studies 🗳 Stream Analysis 🛛 🖗 Pressure Relief
🗟 Copy 🔹 🐈 Unit Sets 🕺	Adjust Manager 🧌 On Hold Workbook Reports Datasheets Compressure 🦉 Data Fits 🖳 Equipment Design * 🖓 BLOWDOWN and Depressuring * Datasheets
🖺 Paste =	g Fluid Packages Input Surge Mc Optimizer Mc Model Analysis → 🔞 Flare System
Clipboard Units	Simulation Ta Solver Ta Summanes Analysis Safety
Simulation <	Capital:USD Utilities:USD/Year DEnergy Savings:MW (%) DK: 0 Risk 0 💽
All Items	D Model Palette - D X
<ul> <li>Workbook</li> <li>UnitOps</li> <li>Stream Analysis</li> <li>Equipment Design</li> <li>Model Analysis</li> <li>Data Tables</li> <li>Strip Charts</li> <li>Case Studies</li> <li>Plant Data</li> </ul>	Views Streams Fowsheets Streams Fowsheets Pressure Pr
T Presentian	Separator
Properties	
C Simulation	
Safety Analysis	
6 Energy Analysis	Messages
-	<< Loading Simulation Engine 18:37:59 Mon Jun 17, 2019>>
Solver (Main) - Ready View Conver	rgence

Figura 8.4 Ventana de simulación

Una vez dentro del ambiente de simulación en la paleta de equipos, damos clic en la pestaña de reactor. A continuación, buscamos el reactor de reformación catalítica, damos clic y arrastramos hacia el panel de simulación.

関 Model Palette			
Views	Streams	Flows	heets EO
All Dynamics &		∭+ + 3йрьз , (]	
External Model			→ •4
Heat Transfer Manipulator		8. 0 8 0	Catalyti
Piping & Hydraulics			
Changer Reactor	• <u></u>		
Separator			

Figura 8.5 Paleta de equipos

Una vez insertado el reactor se abre una pestaña en la cual daremos clic en "Configure a New Reformer Unit".

🕒 । 🗟 न 🌾 🛄 📴 र र	Untitled - Aspen HYSYS V10 - aspenONE     From	heet	- a ×
File Home Economics	Dynamics Plant Data Equation Oriented View Customize Resources Flow	sheet/Modify Format	Search aspenONE Exchange 🛛 😥 🗠 🥑
👗 Cut NewUser1eb32' 🔹 🕐	Utility Manager 🔽 Active 📅 🧰 🖄 Model 📈 🖾 Case Studies 🕹	Stream Analysis * M Pressure Relief	
Copy - 宁 Unit Sets	Adjust Manager no On Hold Workbook Reports Data Fits Compressor	Equipment Design * BLOWDOWN and Depressuring * Datasheets	
Paste *	Fluid Packages - Input Surge MC Optimizer (	Model Analysis * 🔞 Flare System	
Simulation 4	Capital: USD Utilities: USD/Year Energy Savings: MW ( %)	Exchangers - Unknown: 0 OK: 0 Risk: 0 🛞	8 v
All Items •			
Avoktaook     Gardena Analysis     Gardena Ana	Views Streams Flowsheets Views Streams Flowsheets All Dynamics & Control Esternal Model Heat Transfer Pipigauics Presure Changer Reactor	Dption — — X weheet g Reformer Template New Reformer Unit Cancel	
Properties	Separator		
C Simulation			U.
Safety Analysis			>
6 Energy Analysis	Messages		↓ ↓ ×
	Optional Info : Reformer-100 Not Solved	Completed. Flowsheet Object Reformer-100 is created on the Main flowsheet	* *
Solver (Main) - Ready View Converg	1	Remo	actuanaers 5 120%

Figura 8.6 Diseño de una nueva unidad reformadora

関 Reformer Template Option 🛛 —	×
Source for Reformer Flowsheet	
Read an Existing Reformer Template	
Configure a <u>N</u> ew Reformer Unit	
Cancel	

Figura 8.7 Template de opciones de reformadora

Se despliega una nueva pestaña en la cual elegiremos el tipo de proceso que simularemos y la cantidad de reactor que contenga. Adicionalmente podemos elegir que el proceso contenga la sección de recontacto con el hidrogeno y/o la torre estabilizadora.

Para este caso el proceso es de reformación continua y cuenta con 4 reactores, no se incluirá ni la sección de recontacto, ni la torre estabilizadora ya que estas simularan por separado.

ype of Unit	Reaction Section	n	_
Continuous Regeneration	③ 3 Beds	S Beds	
Semi-Regen	4 Beds	C 6 Beds	
Include Understein Recontactor			
Include Hydrogen Recontactor			
Include Stabilizer Tower			

Figura 8.8 Pestaña de configuración de la reformadora

Damos clic en *"next"* y nos enviara a la siguiente pestaña en la cual entramos a la sección de reacción, en la cual se nos piden datos de diseño como las medidas de los reactores, la densidad del catalizador y la distribución de catalizador en cada reactor.

Para este caso la densidad del catalizador es de 835 kg/m<sup>3</sup>, la medida de los reactores y la distribución del catalizador se muestran a continuación:

Catalyst Void Fraction	0.60	00			
Catalyst Bulk Density [kg/m	3] 835	5.0			
					_
	Bed 1	Bed 2	Bed 3	Bed 4	
Reaction Path Length (m)	2.300	2.300	2.450	2.800	
Catalyst Weight [kg]	1.587e+004	1.862e+004	2.330e+004	3.532e+004	

Figura 8.9 Datos de diseño de los reactores de reformación

Una vez que se introducen la información requerida se da clic en el botón *"next"* y nos envía a la última pestaña en la cual contamos con 2 opciones, en la primera se da la opción de crear un nuevo set de calibración (opción recomendada) y la opción 2 es la simulación de

un caso y uno puede seleccionar después el set de calibración a utilizar, para este caso se selecciona la opción1 y se pulsa el botón "done".



Figura 8.10 Ultima pestaña de configuración de la sección de reformación

Esto nos abre directamente la sección de calibración, pero antes de entrar al ambiente de calibración debemos introducir los datos de diseño de la alimentación, la sección de reacción y los productos separados, esto es para hacer correr el reactor con el set de calibración por *"Default"* y obtener algunos valores que se estiman en la primera corrida y así poder proceder después a la calibración del reactor.

sign Feed Data	Reactor Section Stabilize	r Tower Results				
Feed Data	- Eeeds					
Library	Feed-1	Basis		Weight		
Conventional		Turn C	Off GC Edit Box			
Molecule-Bas	ed					7
Properties		C#	Common Name	Short Name	Weight Frac	
	Add Dele	te 0 H	ydrogen	H2	0.0000 -	-
		1 N	lethane	P1	0.0000	
	Transition Method	2 E	thane	P2	0.0000	
	Conventional	2 E	thylene	OL2	0.0000	
	Molecule-Based	3 P	ropane	P3	0.0000	5
		3 P	ropylene	O3	0.0000	
	Properties Source	4 Is	obutane	IP4	0.0000	
	Assay	4 n	-Butane	NP4	0.0000	
	Bulk Properties	4 T	otal butanes	P4	0.0000	
	GC Full	4 B	utylenes	04	0.0000	
	GC Recommended	5 Is	opentane	IP5	4.259e-003	
	© CC Dartial	5 n	-Pentane	NP5	2.583e-002	
	OC Partial	5 T	otal pentanes	P5	0.0000	
		5 P	entylenes	O5	0.0000	
		5 C	yclopentane	5N5	8.193e-003	
		6 2	2-Dimethylbutane	22DMC4	6.269e-004	
		6 2	3-Dimethylbutane	23DMC4	2.277e-003	
		6 N	fulti-branch butanes	MBP6	0.0000	
		6 2	-Methylpentane	2MC5	1.543e-002	
		6 3	-Methylpentane	3MC5	1.405e-002	
		6 S	ingle-branch pentanes	SBP6	0.0000	
		6 n	-Hexane	NP6	5.868e-002	
		6 H	exenes	O6	0.0000	
		6 N	lethylcyclopentane	5N6	6.071e-003	
		6 B	enzene	A6	1.181e-002	
		6 C	yclohexane	6N6	5.239e-003	
		7 2	2-Dimethylpentane	22DMC5	1.396e-003	
		7 2	3-Dimethylpentane	23DMC5	8.817e-003	
		7 2	4-Dimethylpentane	24DMC5	2.861e-003 -	r

> Especificación de la alimentación

Figura 8.11 Creación de la corriente de alimentación del reactor

#### > Especificación de las condiciones de operación en reactor

Una vez que se introducen los datos de la alimentación, procedemos a la siguiente pestaña que es *"Operation"* en la cual se deben introducir los datos de operación que se piden como: flujo de alimentación, temperatura y presión de la alimentación, la temperatura de entrada a los reactores, la relación hidrogeno-hidrocarburo, la presión y temperatura de los productos separados al final de la sección de reacción y las condiciones del calentador del producto.

💽 Catalytic Reformer: Re	former-100		_	_	_	_		
Design Feed Data R	Reactor Section	Stabilizer Tower	Results					
Reactor Section	-Feed Conditions	;						
Feeds Reactor Control	Feed	Volume Flow [barrel/day]	Mass Flow [kg/h]	Std Vol Flow [barrel/day]	Temperature [C]	Pressure [kg/cm2_g]		
Catalyst Product Heater	Feed-1	30039.240	1.45760e+05	29753.126	38.000	4.000		
Solver Console Advanced Kinetic Factors Octane Curves EO Variables Presolve Commands								
	Blend	30039.240	1.45760e+05	29753.126	37.939	5.170		
Delete	Reformer Enviro	nment			ОК		Ignore	ed EO Variables



Reformer Reactor Sect	ion					- 0	×
Design Feed Data Op	peration Results						
Operation	Reactor Temperature Specification	]					
Feeds	Rx 1 Inlet Temperature [C]	521.0	<empty></empty>	Copy Data			
Reactor Control	Rx 2 Inlet Temperature [C]	521.0	<empty></empty>				
Catalyst	Rx 3 Inlet Temperature [C]	521.0	<empty></empty>				
Product Heater	Rx 4 Inlet Temperature [C]	521.0	<empty></empty>				
Solver Options	Reactor Inlet Reference Temperature [C]	521.0	<empty></empty>				
Solver Console	Rx 1 Temperature Bias [C]	0.0000	<empty></empty>				
Advanced	Rx 2 Temperature Bias [C]	0.0000	<empty></empty>				
Kinetic Factors	Rx 3 Temperature Bias [C]	0.0000	<empty></empty>				
Octane Curves	Rx 4 Temperature Bias [C]	0.0000	<empty></empty>				
EO Variables	WAIT [C]	521.0	<empty></empty>				
Presolve Commands	WABT [C]	500.7	<empty></empty>				
Postsolve Commands	C5+ RON	102.0	<empty></empty>				
	C6+ RON	106.0	<empty></empty>				
	Sum of Aromatics [wt%]	67.51	<empty></empty>				
	Hydrogen Recycle	1.274e+005	Recycle Gas Locat	ion Options			
	H2HC Ratio - Mol/Mol	3.400		lion options			
	Product Separator Product Separator Temperature [C]	39.97					
	Product Separator Pressure [kg/cm2_g]	2.460					
		ОК			gnored	EO Varia	ables

Figura 8.13 Pestaña del control del reactor

Design         Feed Data         Op           Operation         Feeds         <	Continuous Regeneration Catalyst Circulation Rate [kg/h] Rx 1 Coke on Cat [wt %] Rx 2 Coke on Cat [wt %]	<b>1361</b> 2.395			
Operation Feeds Reactor Control Catalyst Product Heater Solver Options	Continuous Regeneration Catalyst Circulation Rate [kg/h] Rx 1 Coke on Cat [wt %] Rx 2 Coke on Cat [wt %]	<b>1361</b> 2.395			
Feeds Reactor Control Catalyst Product Heater Solver Options	Catalyst Circulation Rate [kg/h] Rx 1 Coke on Cat [wt %] Rx 2 Coke on Cat [wt %]	<b>1361</b> 2.395			
Reactor Control Catalyst Product Heater Solver Options	Rx 1 Coke on Cat [wt %] Rx 2 Coke on Cat [wt %]	2.395			
Catalyst Product Heater Solver Options	Rx 1 Coke on Cat [wt %] Rx 2 Coke on Cat [wt %]	2.395			
Product Heater Solver Options	Rx 2 Coke on Cat [wt %]	4 4 9 9			
Solver Options		4.138			
	Rx 3 Coke on Cat [wt %]	6.436			
Solver Console	Rx 4 Coke on Cat [wt %]	11.67			
Advanced					
Kinetic Factors	Rx 1 Coke Laydown Rate [kg/h]	32.60			
Octane Curves	Rx 2 Coke Laydown Rate [kg/h]	23.71			
EO Variables	Rx 3 Coke Laydown Rate [kg/h]	31.27			
Presolve Commands	Rx 4 Coke Laydown Rate [kg/h]	71.22			
	Reactor 1 Percent Pinning [%] Reactor 2 Percent Pinning [%] Reactor 3 Percent Pinning [%]	387.74 317.67 197.73			
	Reactor 4 Percent Pinning [%]	145.94			
(					
		OK	🔲 Ignored	EC	O Variables

Figura 8.14 Pestaña del catalizador

💽 Reformer Reactor Section	-	o x
Design Feed Data Operation Results		
Operation Product Heater		
Feeds Reactor Control Catalyst       Temperature [C]       39.97         Product Heater       Heat Duty [k//h]       -2.824e-009         Solver Options       Solver Console       Pressure [kg/cm2_g]       2.460         Advanced       Detta P [kPa]       0.0000         Kinetic Factors       Octane Curves       Detta P [kPa]       0.0000         EO Variables       Presolve Commands       Postsolve Commands       Postsolve Commands		
OK 🔄 Ignored	EO	/ariables

Figura 8.15 Pestaña del calentador del producto

Una vez introducidos los datos la barra de la parte inferior pasara de estar en rojo a verde y eso nos indica que el reactor convergió y obtenemos los resultados de los cálculos que realizo el reactor.

	WAIT [C]	521.0			
ummary					
eed Blend	Yields/RON		Recycle H2		
oduct Yields	C5+ Yield, Wt [%]	87.32	Recycle H2 Rate [STD_m3/h]	1.274e+005	
oduct Properties	C5+ Yield, Vol [%]	79.61	Recycle H2 Purity	0.8514	
actors	C5+ RON	102.0	H2/HC Ratio	3.400	
eaters	C6+ Yield, Wt [%]	80.76			
oduct Streams	C6+ Yield, Vol [%]	72.08	Hydrogen Yield		
	C6+ RON	106.0	H2 Yield, Wt [%]	3.35	
			Net U2 Data MMCCED	56.88	
	Reformate Production [m3/h]	142.4	Net H2 Kate, MINISCED	50.00	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields	142.4 104.2	H2 Production, SCM/CUM H2 Production, SCM/CUM H2 Purity, mole fraction	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields	142.4 104.2 Wt [%]	Vol	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene	142.4 104.2 Wt [%] 2.88	Vol [%] 2.41	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene	142.4 104.2	Vol [%] 2.241 15.37	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene	142.4 104.2 Wt [%] 2.88 18.08 3.45	Vol Vol [%] 2.41 15.37 2.94	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene	142.4 104.2 Wt [%] 2.88 18.08 3.45 3.62	Vol Vol [%] 2.41 15.37 2.94 3.10	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene	142.4 104.2 Wt [%] 2.88 18.08 3.45 3.45 3.62 4.70	Vol (%) Vol (%) 2.41 15.37 2.94 3.10 3.94	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Meta-xylene	142.4 104.2 Wt [%] 2.88 18.08 3.45 3.62 4.70 7.65	Vol Vol [%] 2.41 15.37 2.94 3.10 3.94 6.53	342.9 0.8514	
	Reformate Production [m3/h] Reformate RON Aromatics Yields Benzene Toluene Ethyl-Benzene Para-xylene Ortho-xylene Meta-xylene Total Xylenes	142.4 104.2 Wt [%] 2.88 18.08 3.45 3.62 4.70 7.65 15.97	Vol         [%]           Vol         [%]           2.41         15.37           2.94         3.10           3.94         6.53           13.57         1.57	342.9 0.8514	

Figura 8.16 Resumen de resultados

関 Reformer Reactor S	ection						-	о x
Design Feed Data	Operation Results							
Results								
Summary		Reactor 1	Reactor 2	Reactor 3	Reactor 4			
Product Vields	Inlet Temperature [C]	521.0	521.0	521.0	521.0	-		
Product Properties	Outlet Temperature [C]	409.4	464.0	495.8	510.6			
Reactors	Delta T [C]	111.6	56.96	25.21	10.39			
Heaters	Inlet Pressure [kg/cm2 g]	4,930	4.420	3.960	3.490			
Product Streams	Outlet Pressure [kg/cm2_g]	4.719	4.189	3.724	3.257			
	Delta P [kPa]	20.68	22.68	23.11	22.89			
	Inlet Molar Flow [kgmole/h]	6723	8131	8841	9170			
	Outlet Molar Flow [kgmole/h]	8128	8840	9170	9316			
	Residence Time [seconds]	000:00:2.13	000:00:1.94	000:00:2.05	000:00:2.71			
	LHSV WHSV		<b>1.759</b> 1.559					
			014				FO	Variables
			UK			Ignored		

Figura 8.17 Resultados de los reactores

#### > Configuración de la sección de calibración

Unas vez que se tiene la simulación base, ahora si se procede a la calibración del reactor en el que se ajustaran las constantes de equilibrio con los factores de ajuste para obtener una composición parecida a la de diseño.

Para comenzar damos clic en el botón *"Reformer Enviroment"* y después en el botón *"Go to Calibration"* 

関 Catalytic Reforme	r: Reformer-100						- 0	×
Design Feed Data	Reactor Section Stabilizer Tower	r Results						
Results	WAIT [C]	521.0						
Summary Feed Blend	Yields/RON		Recycle H2					
Product Yields	C5+ Yield, wt [%]	87.32	Recycle H2	Rate [STD_m3/h]	1.274e+005			
Product Properties	C5+ Yield, vol [%]	79.61	Recycle H2	Purity	0.8514			
Heaters	C5+ RON	102.0	H2/HC Rati	0	3.400			
Product Streams	C6+ Yield, wt [%]	80.76	Hydrogen Vie	hld				
Troduct Streams	C6+ Yield, vol [%]	72.08	H2 Vield W	+ [9/]	2.25			
	C6+ RON	106.0	Not H2 Pate		5.55			
	Reformate Production [m3/h]	142.4	H2 Product		242.0			
	Reformate RON	104.2	H2 Product	ole fraction	0.9514			
	Aromatics Yields	Wt	Vol [%]					
	Benzene	2.88	2.41					
	Toluene	18.08	15.37					
	Ethyl-Benzene	3.45	2.94					
	Para-xylene	3.62	3.10					
	Ortho-xylene	4.70	3.94					
	Meta-xylene	7.65	6.53					
	Total Xylenes	15.97	13.57					
	Total Aromatics	67.51	57.51					
Delete	Reformer Environment			OK		Ignored	EO Varia	ables

Figura 8.18 Pasamos de la sección de simulación a la de reacción





Tile Home Economics	I Rx Dynamics Plant Da	4-RON 102.hsc - Aspen HYSYS V10 - aspenONE ta Equation Oriented View Customize	Resources	Core Reactor Mod Reformer	el	_	_		– Search aspenONE Exchange	□ × 2 ^ Ø
🔏 Run Pre-Calibration 🛛 📣 Pull Da	ata from Simulation Creat	e ASW Data Set Editor								
🖧 Run Calibration 🏻 🦥 Return	to Simulation									
89 Push Data to Simulation 🖷 Manag Reform	ge Data Sets mer Calibration									
Simulation <	Capital:USD Uti	lities:USD/Year Energy Savings:	MW (	%)	Exchangers	Unknown: 5	OK: 0 Risk:	0 💽 -		∞ ⊠
All Items •	Flowsheet Reformer	-100 Calibration × +								
ling Workbook ▷ ling UnitOps	Calibration Factors Mass Balance	Parameters	Zaur	ration factors En	Jiaiy					
<ul> <li>Streams</li> <li>Stream Analysis</li> </ul>	Summary Feed Blend		Included	Initial Value	Final Value	Lower Bound	Upper Bound			
lize Equipment Design	Product Yields	Global Activity Tuning Factors								<u>^</u>
bodel Analysis	Reactors	Reactor 1		4.063	4.063	<empty></empty>	<empty< td=""><td>&gt;</td><td></td><td>=</td></empty<>	>		=
📷 Data Tables	Heater	Reactor 2		1.140	1.140	<empty></empty>	<empty< td=""><td>&gt;</td><td></td><td></td></empty<>	>		
Strip Charts	Stabilizer	Reactor 3		0.6065	0.6065	<empty></empty>	<empty< td=""><td>&gt;</td><td></td><td></td></empty<>	>		
Case Studies	Product Streams	Reactor 4		0.3051	0.3051	<empty></empty>	<empty:< td=""><td>&gt;</td><td></td><td></td></empty:<>	>		
Data Fits		Kinetic Pathways Tuning Factors	_	0.0703	0.0703					
Plant Data		Denydrogenation		0.9703	0.9703	<empty></empty>	<empty:< td=""><td>&gt;</td><td></td><td></td></empty:<>	>		
		Hydrocracking Multi-branch icomorization		0.7894	0.7894	<empty></empty>	<empty:< td=""><td>&gt;</td><td></td><td></td></empty:<>	>		
		Single-branch isomerization		0.0050	0.0090	<empty></empty>	compty	>		
		Ring closure		0.5268	0.5755	<empty></empty>	cempty	> >		* E
		Objective Euloction								
		Objective Function		<i>c</i> :						
		10.11.00	Included	Sigma	weasurement	woder	Delta	Contribution		
		Yield, wt%	5	0.10	71.20	07.33	15.04	2541-004		- Â
		C3+ Tatal Assessmentias	19 17	0.10	/ 1.50	67.52	15.94	2.5410+004		
		Total 5-Ring Nanhthenics	4	0.20	40.07	1.463	21,44	1.1490+004		
		Total 6-Ring Naphthenics	4	0.10	4 131e-002	6.411e-002	2 2800-002	5 100e-002		
		H2	V	0.10	6711	3 354	-3 358	4510		
		01	54	0.10	2.466	0 0117	2.255	500.4		· ·
Properties										
C Simulation		Data Set: Set-1						ОК		•
Safety Analysis	Messages									+ 4 ×
				Complet	ed.					*
Straty Analysis				Saving	case C:\Users	\Alex_\AppData	a\Local\Temp\	AutoRecovery save	of Rx 4-RON 102 (0x7f0694).ahc	_
*				Complet	ed.					*
Calibration for Reformer-100 - Read	y View Convergence								Responsiveness: 5 100% 😑	•

Figura 8.20 Sección de calibración

Ahora que estamos dentro de ambiente de calibración, para que nos aparezcan los datos de operación y diseño que se introdujeron en un principio damos clic en el botón *"Pull Data From Simulation"*, le damos aceptar y todos los datos de la Sección de simulación aparecen en la Sección de calibración.



Figura 8.21 Pestaña de transferencia de datos

Una vez dentro del ambiente de calibración se deben introducir algunos datos de operación que se requieren para poder hacer la calibración del reactor, como son las presiones de entrada, así como las diferencias de temperatura y presión para cada reactor, además de la pureza de hidrogeno que se obtendrá al final de proceso, el RON y MON de la nafta reformada y la composición y flujo de salida de los diferentes productos.

🕒 i 🗒 🤊 🤤 🗖 i 🕒	ı F	रेx 4-RON 102.hsc - Aspen HY	'SYS V10 - aspenONE	Core Read	tor Model
File Home Economics	Dynamics Plant I	Data Equation Oriented	View Customize	Resources Refo	rmer
💦 Run Pre-Calibration 🛛 🔊 Pull Da	ta from Simulation Cre	ate ASW Data Set Editor			
🖧 Run Calibration 🏻 🧞 Return	to Simulation				
🗞 Push Data to Simulation  🛗 Manag	e Data Sets				
Reform	ner Calibration				
Simulation <	Flowsheet Reform	er-100 Calibration × +			
All Items 🔹	Design Feed Dat	a Operation Measureme	nt Calibration Control	Analysis	
Corkbook	Measurement	Reactor			
UnitOps	Operation		Inlet Pressure (ka/cm2 a)	Pressure Drop [kPa]	Delta T (C)
Streams	Products	Reactor 1	4.930	20.6	74.85
Stream Analysis	Analysis	Reactor 2	4.420	22.6	3 53.42
Equipment Design		Reactor 3	3.960	23.1	I 37.21
Model Analysis		Reactor 4	3.490	22.8	24.16
Strip Charts					
Case Studies					
Data Fits					
Plant Data		Compressor			
		Discharge Pressure [kg/c	m2_g]	5.740	
		Suction Pressure [kg/cm2	2_g]	2.460	
		Recycle H2			
		H2 Purity of Recycle, mol	. frac.	0.9000	
		Measured Octanes			
		C5+ RON		102.0	
		C6+ RON		106.0	
		C5+ MON		83.75	
		C6+ MON		84.10	
📕 Properties					
		Data Set: Set	-1 *		
End Simulation					

Figura 8.22 Pestaña de operación de los reactores

owsheet Refor	mer-100 Calibration × +							
esign   Feed D	ata Operation Measuremen	t Calibration Control Analysis						
leasurement			Net H2	H2 to Fuel	Stab OH Vapor	Stab OH Liquid	Reformate	Total
Operation	Gas Rate [STD_m3/h]		2.063e+005	1.283e+004	417.0	3670	2.980e+004	2.531e+0
roducts	Liquid Rate [m3/h]		344.1	17.39	1.373	14.46	156.0	533
Analysis	Mass Rate [kg/h]		9.204e+004	2390	620.2	7642	1.260e+005	2.287e+0
	RON						102.0	
	MON						83.00	
	Composition		Mol%	Mol%	Mol%	Mol%	Mol%	Mo
	Hydrogen	(H2) [%]	81.58	90.61	14.19	0.27	0.00	71.
	Methane	(P1) [%]	3.75	4.13	5.25	0.51	0.00	3.
	Ethane	(P2) [%]	3.73	3.45	28.04	11.11	0.00	3.
	Ethylene	(OL2) [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.
	Propane	(P3) [%]	3.16	1.39	35.26	39.57	0.03	3.
	Propylene	(O3) [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.
	Isobutane	(IP4) [%]	1.02	0.16	7.89	19.25	0.20	1.
	n-Butane	(NP4) [%]	1.48	0.15	9.21	28.29	0.77	1.
	Butylenes	(O4) [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.
	Isopentane	(IP5) [%]	1.39	0.05	0.14	0.86	5.61	1.
	n-Pentane	(NP5) [%]	0.75	0.02	0.01	0.09	3.52	1.
	Pentylenes	(O5) [%]	0.14	0.00	0.01	0.05	0.61	0.
	Cyclopentane	(5N5) [%]	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.
	Multi-branch butanes	(MBP6) [%]	0.22	0.00	0.00	0.00	1.36	0.
	Single-branch pentanes	(SBP6) [%]	0.83	0.01	0.00	0.00	6.43	1.
	n-Hexane	(NP6) [%]	0.37	0.00	0.00	0.00	3.47	0.
	Hexenes	(O6) [%]	0.12	0.00	0.00	0.00	0.98	0.
	Methylcyclopentane	(5N6) [%]	0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	0.

Figura 8.23 Pestaña de los productos de salida

Con estos datos hacemos la precalibración del rector y una vez que converja procedemos a hacer la calibración del reactor.

Una vez que se calibro por primera vez el reactor, se obtienen los estimados iniciales con esto se modifican los factores de ajuste, introduciendo un intervalo entre el que calculara el simulador para ajustar esos parámetros y obtener la composición de salida requerida. Los diferentes parámetros controlan las constantes de equilibrio de las reacciones por lo que se hace es mover los factores de ajuste dependiendo la composición que se quiera de salida y la reacción que afecte al componente que se quiere ajustar.

A continuación, se muestra la pestaña de los factores de ajuste.

Design   Feed Data	Operation Measurement Calibration Control A	nalysis			
Calibration Contro		Included	Initial Value	Lower Bound	Upper Bound
Parameter	Global Activity Tuning Factors				
Objective Function	Reactor 1		4.063	<empty></empty>	<empty></empty>
	Reactor 2		1.140	<empty></empty>	<empty></empty>
	Reactor 3		0.6065	<empty></empty>	<empty></empty>
	Reactor 4		0.3051	<empty></empty>	<empty></empty>
	Kinetic Pathways Tuning Factors				
	Dehydrogenation		0.9703	<empty></empty>	<empty></empty>
	Hydrocracking		0.7894	<empty></empty>	<empty></empty>
	Multi-branch isomerization		0.8890	<empty></empty>	<empty></empty>
	Single-branch isomerization		0.9795	<empty></empty>	<empty></empty>
	Ring closure		0.5268	<empty></empty>	<empty></empty>
	Ring expansion		0.9522	<empty></empty>	<empty></empty>
	Dehydrogenation Tuning Factors				
	C7 Naphthenics		0.8474	<empty></empty>	<empty></empty>
	C8 Naphthenics	N	0.1000	0.1000	0.5000
	Ring Closure Tuning Factors				
	C5	N N	0.5000	0.5000	1.000
	C6	<b>V</b>	2.500	0.1000	2.500
	C7	R	0.3000	0.3000	0.3500
	C8		0.1300	0.1000	0.1300
	C9	<b>V</b>	0.3000	0.3000	1.000
	C10		0.8918	<empty></empty>	<empty></empty>
	Cracking Tuning Factors				
	CS	<b>V</b>	0.8000	0.1000	0.8000
	C6	R	0.5000	0.1000	0.5000
	C7	R I	1.000	0.1000	1.000
	C8	R	0.1000	0.1000	0.1000
	C9		1.500	0.1000	1.500
	C10	R	4.000	3.000	4.000
	C11	V	27.00	15.00	27.00
	Paraffin Isomerization Tuning Factors	<u></u>			
	C6 Multi-branch isomerization		1.000	<empty></empty>	<empty></empty>
	C7 Multi-branch isomerization		1.000	<empty></empty>	<empty></empty>
	C6 Single-branch isomerization	~	1.500	0.1000	1.500
	C7 Single-branch isomerization	M	0.1000	0.1000	1.000
	Ring Expansion Tuning Factors				
	C6		3.870	<empty></empty>	<empty></empty>
	C7		1.402	<empty></empty>	<empty></empty>
	C8	•	2.000	2.000	3.000
	Light Ends Tuning Factors				
	a		0.4673	<empty></empty>	<empty></empty>
	C2		2.370	<empty></empty>	<empty></empty>
	G		1.305	<empty></empty>	<empty></empty>
	Product Separator Tuning Factors				
	Murphree Efficiency		1.000	<empty></empty>	<empty></empty>

Figura 8.24 Factores de ajuste

Los valores de los factores de ajuste nunca se harán cero o nunca serán negativos, se pueden acerca a cero tanto como la simulación lo permita y algunos pueden ser lo mayor posible sin restricción alguna.

Esto se hace componente por componente, reacción por reacción. Los ajustes se debe hacer poco a poco y componente por componente ya que si se realizan varios cambios a la vez es posible que el programa no converja.

Para cada cambio en los factores de ajuste se debe hacer la precalibración y calibración de ese cambio, así puede llegar a ser un proceso tardado, pero con esto nos aseguramos que los pasos siguientes se están ajustando a los datos de diseño y los resultados que obtengamos serán correctos.

Una vez que se encuentran los factores de ajuste que nos dan la composición de salida deseada se procede a guardar el set de calibración, para esto nos vamos a la pestaña *"Analysis"* y en la sección de *"Calibration Factor"* le damos clic al botón de *"Save for Simulation"*, le ponemos el nombre que queramos al set y damos en ok.



Figura 8.25 Pestaña para resguardar la calibración antes hecha

Esto asegura que de ahora en adelante ese será el set de calibración que utilizará nuestro reactor, entonces una vez que tenemos el set guardado, regresamos al ambiente de simulación y procedemos a simular el resto del proceso.

Antes de regresar a la pestaña de simulación debemos activar la simulación, ya que una vez que salimos del ambiente de calibración el reactor debe recalcular los valores para el nuevo set de calibración.



Figura 8.26 Activación de la simulación

# Simulación del resto del proceso (Sección de recontacto y Sección de estabilización)

Ya estando en la sección de simulación procedemos a simular el resto del proceso. Comenzamos con la Sección de Recontacto del hidrogeno.

El hidrogeno es comprimido, enfriado y separado en 3 etapas, estos para recuperar los hidrocarburos que aún queda en la corriente gas que sale del reactor y así también limpiar el hidrogeno. Por último, se pasa por la Sección de Recontacto Plus (para el caso de 4 reactores) en el que se eliminaran los últimos restos de cloruros e hidrocarburos que aun contenga y al final de este proceso se obtiene un hidrogeno con una pureza del 90% mol aprox.

A continuacion se muestra la seccion de recontacto.



Figura 8.27 sección de recontacto (parte 1)



Figura 8.28 sección de recontacto (parte 2)



Figura 8.29 sección de recontacto (parte 3)

En las figuras anteriores se muestra cada una de las etapas de recontacto por las que pasa el gas una vez que sale de la sección de reacción.



Figura 8.30 Sección de recontacto Plus (solo para el caso de 4 reactores)

Por último, está la torre estabilizadora en donde se obtendrán como productos la Nafta Reformada y Gas LP.



Figura 8.31 Sección de estabilización de los productos líquidos



Figura 8.32 Simulación de Unidad con 4 reactores



Figura 8.33 Simulación de Unidad con 3 reactores