



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**SIMULACIÓN DE LA UNIDAD FCC II DE LA REFINERÍA  
MIGUEL HIDALGO, TULA**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA:**

**ERIC ZAPATA LÓPEZ**



**MÉXICO, D.F.**

**2013**



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.



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:**

**PRESIDENTE:** Profesor: Celestino Montiel Maldonado  
**VOCAL:** Profesor: Juan Mario Morales Cabrera  
**SECRETARIO:** Profesor: José Fernando Barragán Aroche  
**1er. SUPLENTE:** Profesor: Milton Thadeu García Medeiros de Olivera  
**2° SUPLENTE:** Profesor: Humberto Hinojosa Gómez

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

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

**ASESOR DEL TEMA:**

---

**Ing. Celestino Montiel Maldonado**

**SUPERVISOR TÉCNICO:**

---

**Ing. Ileana Rodríguez Castañeda**

**SUSTENTANTE:**

---

**Eric Zapata López**



## ÍNDICE

	<b>PÁGINA</b>
Objetivo.....	1
Alcance.....	1
Introducción.....	2
Generalidades.....	4
Crudo.....	4
Tipos de crudos.....	8
Industria de la refinación.....	9
Refinería de Tula, Hidalgo.....	13
Proceso FCC.....	14
Antecedentes.....	14
Descripción general del proceso.....	15
Riser.....	18
Reacción.....	20
Reactor-Separador.....	22
Agotador.....	22
Regenerador.....	23
Catalizador.....	25
Variables de operación principales.....	28
Entorno de simulación.....	30
Componentes.....	31
Componentes hipotéticos.....	31
Paquete de fluidos.....	32
Simulación.....	48
Resultados y análisis.....	51
Temperatura de salida del riser.....	56
Temperatura de la alimentación al entrar al riser.....	59
Flujo de catalizador fresco de reposición.....	61



Flujo de alimentación del gasóleo de vacío.....	64
Calidad de la alimentación (grados API).....	66
Flujo de aire al regenerador .....	69
Conclusiones.....	73
Bibliografía .....	77
Anexo I: Índice de tablas .....	79
Anexo II: Índice de figuras .....	80
Anexo III: Índice de gráficas.....	81
Anexo IV: Índice de ecuaciones .....	83
Apéndice I: Programa Aspen Refsys .....	84
Apéndice II: Complemento del proceso FCC .....	85



## **OBJETIVO**

El presente proyecto de tesis busca establecer la serie de pasos a seguir para el desarrollo de la simulación de un proceso de forma computacional, desde el ingreso de los datos teóricos, el fundamento de los modelos matemáticos utilizados y el análisis de la exactitud de los cálculos reportados; demostrando la importancia de que el usuario tenga los conocimientos teóricos y del proceso necesarios para poder realizar una correcta identificación de posibles fuentes de error y la presentación de posibles opciones para mejorar los cálculos, además de representar un ejemplo de simulación para proyectos similares o posibles simulaciones futuras. Para esto se decidió tomar como ejemplo la Unidad Desintegradora de Lecho Catalítico Fluidizado tipo Orthoflow número 2 (FCC II) de Petróleos Mexicanos de Tula, Hidalgo; y utilizar el simulador comercial Aspen Refsys.

## **ALCANCE**

Se realizará un análisis comparativo de los datos reportados por la simulación del proceso contra los datos reales de operación (diseño) y los reportados en la literatura con la finalidad de observar que tanto apego o desviación mantienen entre sí y proponer mediante su interpretación las causas y posibles soluciones al respecto.

La simulación comprende solamente las secciones del reactor-elevador, separador, agotador y regenerador que integran el convertidor catalítico tomando como base los datos de operación para la producción de máxima gasolina. La simulación será generada en el programa Refsys, subprograma del simulador Aspen Hysys (apéndice I).



## INTRODUCCIÓN

En la actualidad gran parte de la aplicación práctica de la ingeniería química se basa en el desarrollo y optimización de procesos, la mayor de las veces, a nivel industrial. Uno de los procesos más complejos y clásicos en los que interviene la ingeniería química es el de la refinación del petróleo, sin embargo, dicha complejidad se vuelve en su contra al momento de requerir ajustes o cambios en su diseño ya que el tiempo que tome llevarlos a cabo repercutirá directamente en las finanzas y sustentabilidad de la refinería.

La refinación es un conjunto de procesos por el cual el petróleo crudo es separado en sus componentes útiles y es tratado para que las características de los productos terminados obtenidos satisfagan las necesidades de la sociedad. Los procesos básicos que incluye son la destilación atmosférica, destilación al vacío, hidrotratamientos, desintegración térmica, desintegración catalítica, alquilación y reformación catalítica.

La refinación del petróleo es una industria cuya operación y economía depende en gran medida de la calidad del crudo que procesa y de la calidad de los productos obtenidos. La calidad del crudo a procesar en una refinería suele variar debido a las características de la región de donde es extraído y/o a las posibilidades de importación que tenga el país.

La demanda mundial actual de gasolinas y combustibles se ha visto aumentada principalmente por el incremento en el consumo automotriz y del transporte, siendo que, además, la calidad de los productos que se generan debe mantenerse en un rango cada vez más estricto para así poder cumplir con las regulaciones ambientales establecidas.

Por estas razones, no es de sorprenderse que muchas refinerías suelen modificar constantemente las condiciones de operación de sus plantas, o incluso implementar reconfiguraciones mayores en el diseño y operación para buscar cumplir con las demandas de producción y calidad. Para efectuar dichos cambios es necesario realizar cálculos que representen en forma adecuada el comportamiento de los equipos y del proceso, ya que un error al momento de implementar los cambios puede tener consecuencias adversas, tanto económicas como de seguridad; todo esto debiendo realizarse en el menor tiempo posible.





En México particularmente, la forma de operar y la economía con la cual se maneja la industria petrolera ha sido un tema político y social discutido desde hace mucho tiempo, pues es necesario que se produzca un desarrollo con el cual se pueda cubrir la demanda y regulaciones establecidas tomando en cuenta la calidad cambiante del crudo que actualmente se refina; para ello, se han implementado recientemente en refinerías como la de Salamanca o Tula proyectos de reconfiguración que mejoren la infraestructura existente y que reduzcan el volumen de importaciones y las limitaciones que impiden un aprovechamiento eficiente de los recursos con los que cuenta el país. Es en este ámbito donde la correcta simulación de los procesos cobra importancia.

Actualmente, los simuladores computarizados constituyen una gran ventaja para representar el comportamiento de un proceso a distintas condiciones de operación y con ello es posible ahorrar tiempo y recursos, sin embargo, por sí solos, sin una correcta interpretación, pueden representar más riesgo que beneficio.

En la presente tesis se compararán los datos de operación reportados para la Unidad FCC II de Petróleos Mexicanos de Tula, Hidalgo, contra los obtenidos mediante una simulación simple en el programa computacional "Refsys" y los reportados en la literatura, para así establecer el grado de apego a la realidad que se tiene al utilizar dicho simulador.



## GENERALIDADES

### **Crudo**

El crudo es una sustancia fósil constituida por cientos de distintos compuestos de carbono, principalmente hidrocarburos, los cuales van desde el metano, con un solo átomo de carbono, hasta aquellos con más de 300 en su cadena.

De acuerdo a su estructura, la mayoría de los hidrocarburos presentes en el crudo pueden clasificarse de la siguiente manera:

- Parafinas: También llamados alcanos son cadenas de hidrocarburos, lineales o ramificadas, cuya fórmula general de su estructura es  $C_nH_{2n+2}$  ; no presentan insaturaciones en su estructura y su punto de ebullición aumenta con el número de carbonos en la molécula.

- Naftenos: También llamados cicloalcanos, son hidrocarburos que presentan una o varias ciclaciones parciales o totales de su estructura; al igual que los alcanos no presentan insaturaciones pero su punto de ebullición y densidad es superior a la de los alcanos que tienen el mismo número de átomos de carbono. En los crudos, los anillos más frecuentes que se encuentran son los formados por cinco o seis átomos de carbono.

- Aromáticos: Son hidrocarburos cíclicos poli-insaturados que suelen encontrarse en gran proporción y cuya base elemental es el anillo bencénico. Algunos como el benceno, tolueno y xileno resultan materias primas para la industria petroquímica, pero la mayoría son causantes de problemas como pérdida de actividad catalítica y contaminación al medio ambiente y la salud.

En aquellos procesos donde se mantienen temperaturas altas por largos periodos de tiempo se generan además olefinas, que son cadenas simples o ramificadas de hidrocarburos con insaturaciones en su estructura.

Existen en el crudo, además de los hidrocarburos, otros compuestos en pequeñas cantidades considerados como impurezas debido a que muchos pasan a distintas etapas del proceso de



refinación junto con los productos sin representar un interés productivo, e incluso pudiendo causar problemas durante algunas etapas de la refinación, en cuyo caso son removidos. Las principales impurezas halladas son (1):

- Azufre: Es común encontrarlo en forma de compuestos orgánicos que abarcan todo el rango de destilación del crudo, desde tiofenos en el residuo pesado, hasta sulfuros y disulfuros en rangos de productos más ligeros. Provoca que el crudo o alimentación sean más difíciles de fraccionar por lo que se remueve previamente al transformarlo en  $H_2S$  mediante procesos de hidrotratamiento catalizado a condiciones severas de temperatura y presión. Los compuestos ligeros de azufre pueden removerse también mediante el uso de mercaptanos para su posterior extracción con sosa u otro solvente.

- Compuestos clorados: No suelen removerse de la mezcla de crudo pero se aplica protección contra la corrosión metálica en los equipos que se encuentren en contacto y en el caso del ácido clorhídrico, se inyecta amoniaco para neutralizarlo.

- Metales: Por lo general no se remueven a menos que afecten futuros procesos del refinado como lo son aquellos en los que se utilizan catalizadores; en estos casos se retiran junto con el asfalto producido usando propano como solvente. Los principales metales encontrados son:

- Níquel: Envenena el catalizador; en el proceso FCC cataliza las reacciones de deshidrogenación y condensación produciendo gases ligeros y coque, aunque con el tiempo su acción catalítica se reduce.
- Vanadio: Se deposita en el catalizador, destruye la cristalinidad de la zeolita y cataliza en menor medida que el níquel las reacciones de deshidrogenación en el proceso FCC.

- Nitrógeno: Se presenta generalmente en forma de aminas y gas en las fracciones con punto de ebullición superior a los 250 °C. Causa efectos no deseados en procesos que involucran la obtención de naftas, como en la reformación catalítica por ejemplo, debido a las condiciones de operación, por lo que se remueve previamente mediante un proceso de hidrotratamiento. En el proceso FCC neutraliza los sitios ácidos del catalizador de forma temporal ya que es quemado en el regenerador.

- Sodio: Se deposita en el catalizador causando pérdida de actividad y baja de zeolita al neutralizar los sitios ácidos, lo cual se traduce en reducción del octanaje en gasolinas.

- Hidrógeno: Cargas aromáticas con hidrógeno deficiente resultan más difíciles de fraccionar. El punto de anilina se utiliza para medir la cantidad de hidrógeno, resultando buenas cargas cuando el punto de anilina es mayor a 93 grados centígrados, y cargas pobres cuando es menor de 71 grados centígrados.

- Asfaltenos: Son las partes más pobres de una carga ya que contienen una gran cantidad de átomos de azufre, nitrógeno, oxígeno y metales además de convertirse desproporcionadamente a coque durante el proceso FCC. Cuando es necesario se retira utilizando propano como solvente.

Ya que como se ha mencionado, el crudo es una mezcla de una amplia cantidad de distintos compuestos, es poco práctico obtener las propiedades de cada uno por separado. Lo que suele hacerse es dividirlo de acuerdo a rangos de destilación significativos, tratar a los compuestos que destilen en dicho rango como un solo compuesto o un "pseudocomponente", analizar las propiedades generales de cada fracción destilada y, de esta forma, conocer las propiedades generales de una mezcla específica. Cabe señalar que es habitual agrupar los componentes en torno a los "componentes clave", denominados así por su concentración dominante y sus propiedades conocidas; al hacer esto, la exactitud de las propiedades calculadas para una fracción dependerá de la similitud de la estructura química de los componentes presentes respecto al componente clave representativo de dicha fracción.

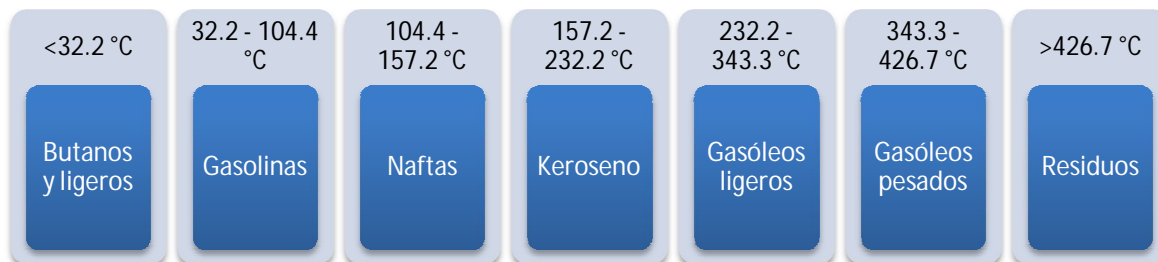


Figura 1: Temperaturas de destilación de distintas fracciones del petróleo crudo (2).



Se le llama “ensayo de crudo” al conjunto de datos de laboratorio y de planta recabados para definir sus propiedades. Los ensayos de crudo se utilizan durante la planeación de la producción y operación de la planta, siendo la curva de destilación el mínimo de datos necesarios para su elaboración, aunque por lo general suelen agregarse más datos (1):

- Curva de verdadero punto de ebullición (TBP): Es un gráfico constituido por los puntos de ebullición de los componentes presentes en el crudo o alguna de sus fracciones en forma casi pura. Se obtiene mediante una destilación batch a reflujo alto en laboratorio o mediante técnicas de espectrometría de masas. Su límite es alrededor de los 340 °C a presión atmosférica ya que comienza a ocurrir el efecto de craqueo térmico de las moléculas.

- Curva de destilación ASTM: Se utiliza rutinariamente para el control de la calidad y producción de la planta. Se obtiene al destilar y condensar una muestra de una fracción de crudo y registrar la temperatura de los vapores producidos contra la cantidad de destilado condensado. El punto inicial de destilación (IBP) resulta mayor que en la curva TBP, y el punto final de destilación (FBP) resulta menor que en la curva TBP. Existen varios tipos de métodos de destilación ASTM, los más relevantes para este proyecto son:

- Destilación ASTM D86: Se aplica en gasolinas, querosenos, gasóleos y productos con características similares. Las condiciones de la destilación se especifican en función de la muestra a tratar; el resultado se reporta como la temperatura obtenida a cierta cantidad de volumen destilado.

- Destilación ASTM D1160: Se aplica a fracciones pesadas y productos que pueden ser parcial o completamente vaporizados a una temperatura máxima de 400 °C en un intervalo de presión de 6.55 a 0.133 kPa. La muestra se destila en condiciones que simulen un fraccionamiento de un plato teórico y los resultados se reportan en una curva de destilación con la temperatura de ebullición a presión reducida para cada cierto porcentaje de volumen destilado, y su punto de ebullición corregido a presión atmosférica.

- Gravedad o grados API: Es la expresión de la densidad para el crudo y sus derivados a 60 °F (15.6 °C). Se relaciona con la gravedad específica de acuerdo a la expresión:

$$API^{\circ} = \frac{141.5}{\text{gravedad específica}} - 131.5$$

Entre más grados API tenga una mezcla, significa que es más rica en componentes ligeros, y por el contrario, entre menor sean los grados API, la mezcla contendrá un mayor número de componentes pesados.

- Número de octano: Es una medida de la resistencia de una gasolina a detonar dentro de un motor, entre mayor sea esta resistencia mayor es la eficiencia de la gasolina para producir trabajo. Se considera para métodos prácticos como el porcentaje de isoctano, en una mezcla de isoctano con n-heptano, que represente la capacidad de detonación de la gasolina a tratar. Los principales números de octanos que se determinan son el “research octane number” (RON) y el “motor octane number” (MON).

- Viscosidad: Es una medida de la resistencia al flujo y un indicador de la calidad de los lubricantes. Para pruebas de laboratorio las temperaturas de medición se establecen a 100 °F, 130 °F ó 210 °F, pero para combustibles se suele medir a 122 °F y 210 °F.

- Contenido de azufre: Es el total de azufre presente expresado en porcentaje peso.

### ***Tipos de crudos***

Dependiendo de la volatilidad de los compuestos que conforman un crudo, a una temperatura dada el vapor producido al calentarlo contendrá un cierto porcentaje de compuestos ligeros y compuestos pesados, y conforme aumente esta temperatura irán incorporándose cada vez más componentes pesados al vapor.

Mediante las curvas de destilación TBP se pueden conocer los rendimientos de los productos en una separación directa para distintos tipos de crudos. De forma mundial el tipo de crudo se clasifica de acuerdo a la densidad API que presente:

TIPO DE CRUDO	Grados API
Extrapesado	10.0
Pesado	10.0 – 22.3
Mediano	22.3 – 31.1
Ligero	31.1 - 39
Superligero	>39

Tabla 1: Clasificación general de los distintos tipos de crudos (3).

En México existen tres principales tipos de crudo para procesamiento:

Nombre	Tipo	Grados API	% de azufre
Olmeca	Superligero	39.3	0.8
Istmo	Ligero	33.6	1.3
Maya	Pesado	22	3.3

Tabla 2: Crudos principales procesados en México (3).

En el caso de la refinería Miguel Hidalgo, Tula, la mezcla normal de crudo procesado 60% Istmo y 40% Maya.

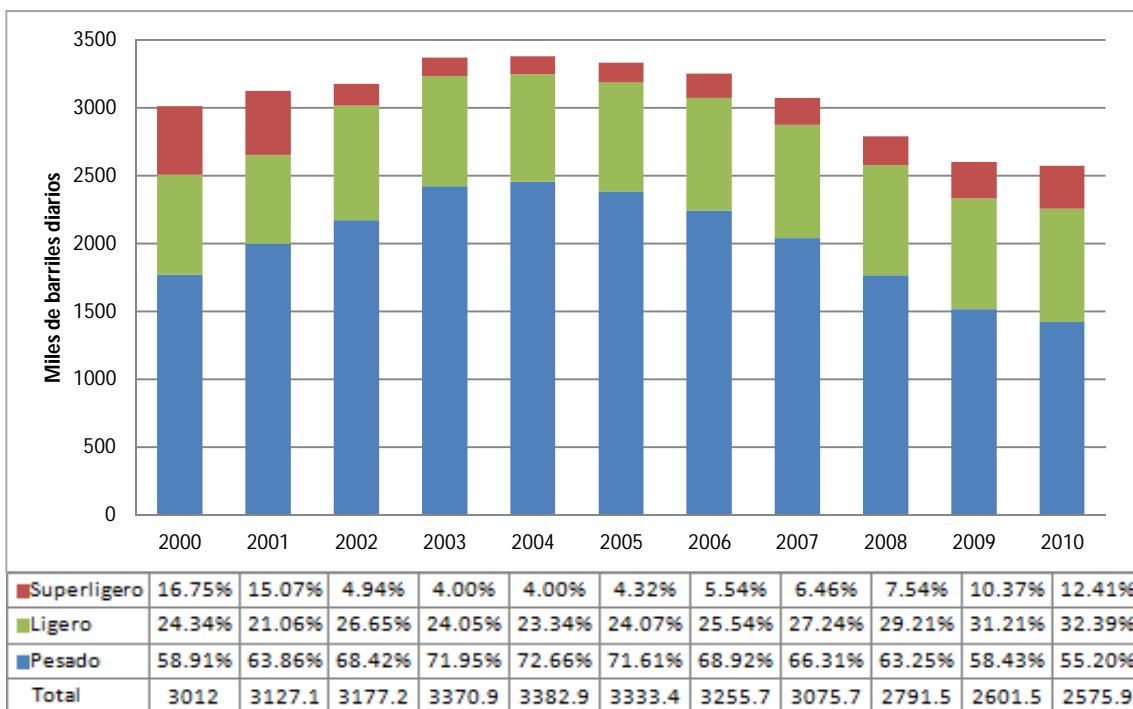
### **Industria de la refinación**

Una de las principales causas del incremento en la demanda de combustibles ha sido el incremento en el consumo automotriz y de transporte; esto ha provocado que se planteen proyectos de refinación a nivel mundial que incluyen temas de ampliaciones de capacidad, instalación de unidades de alta conversión y plantas de hidrotreatmento.

La manera en que se configura una refinería, por lo tanto, se basa en los procesos necesarios que debe completar para lograr los objetivos de producción, estrategia de mercado, y más recientemente, medidas ecológicas establecidas. La decisión de optar por una medida de ampliación, reconfiguración o apertura de nuevas plantas quedará establecida en gran medida por el perfil económico que la compañía tenga proyectado a futuro después de considerar diversos escenarios y configuraciones de los procesos de refinación.

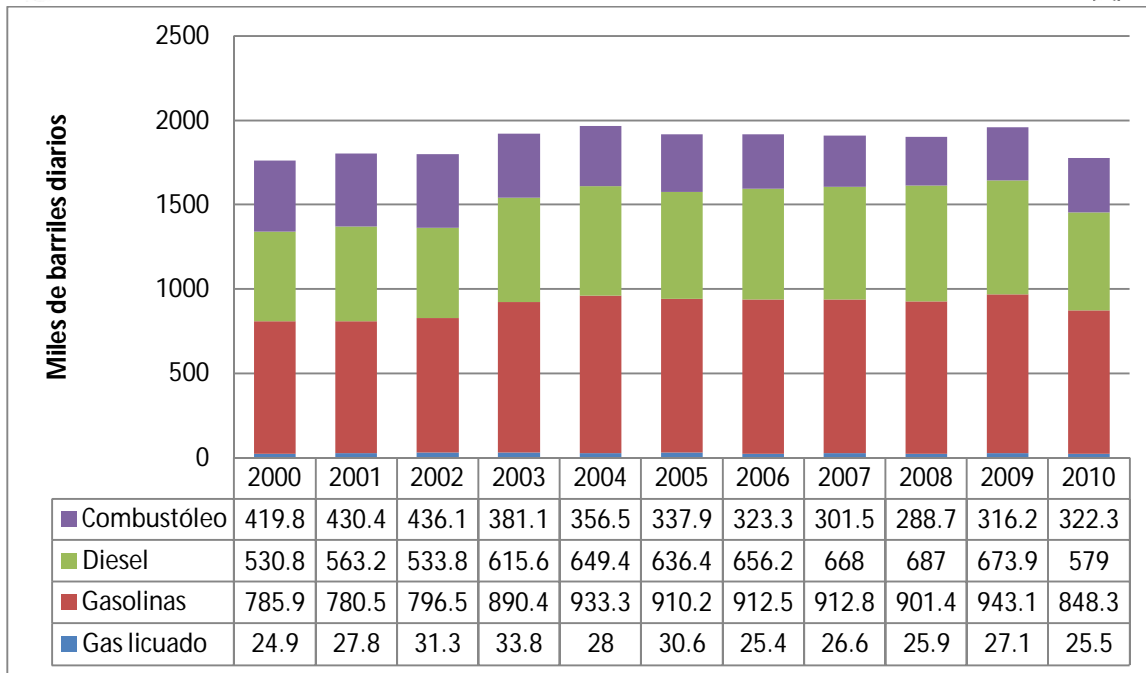
Es de esperar que al igual que en el resto del mundo, la demanda de destilados en el mercado nacional siga aumentando. En ámbitos de refinación México ocupa la posición número 15 a nivel mundial, los retos más importantes que se tienen están asociados con el crecimiento de la demanda y su desbalance con la oferta interna y las limitaciones de la infraestructura actual, ya que en su tiempo, las refinerías fueron diseñadas para procesar crudos con características distintas a las de los crudos procesados actualmente.

Por otra parte, de cada 10 litros de gasolina que se consumen en el país, 4 son importados debido a que no se tiene la capacidad adecuada para producirlos, lo cual se traduce en pérdidas monetarias, de empleos e inversiones internas.

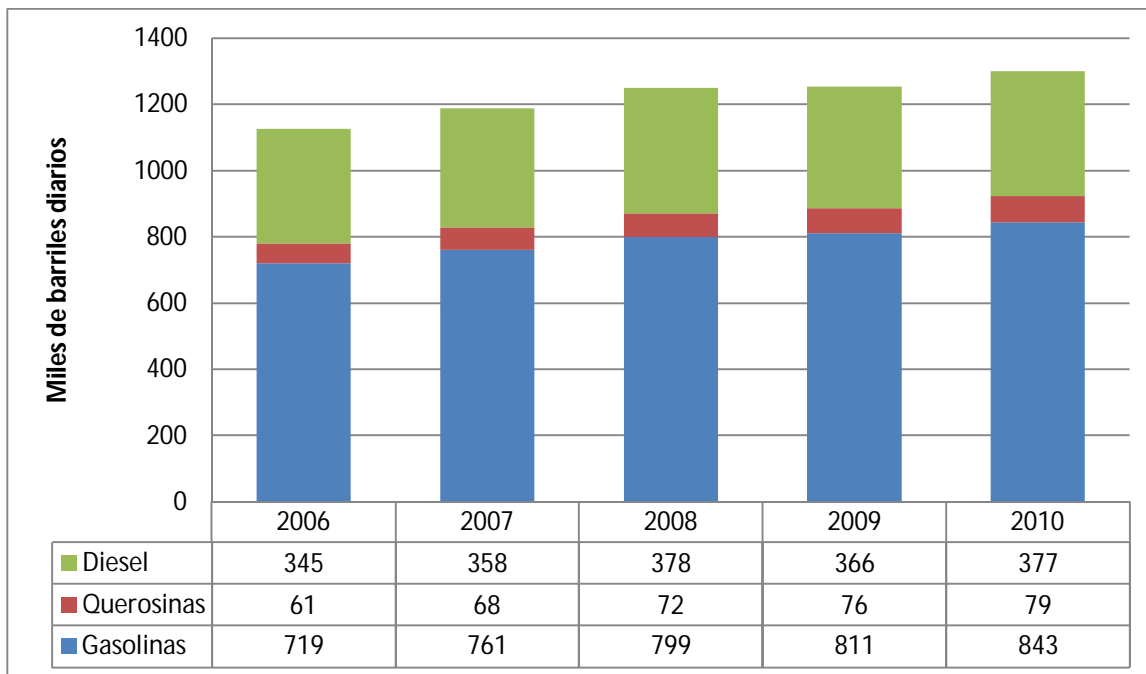


Gráfica 1: Producción de tipos de crudo en México, periodo 2000-2010 (4).

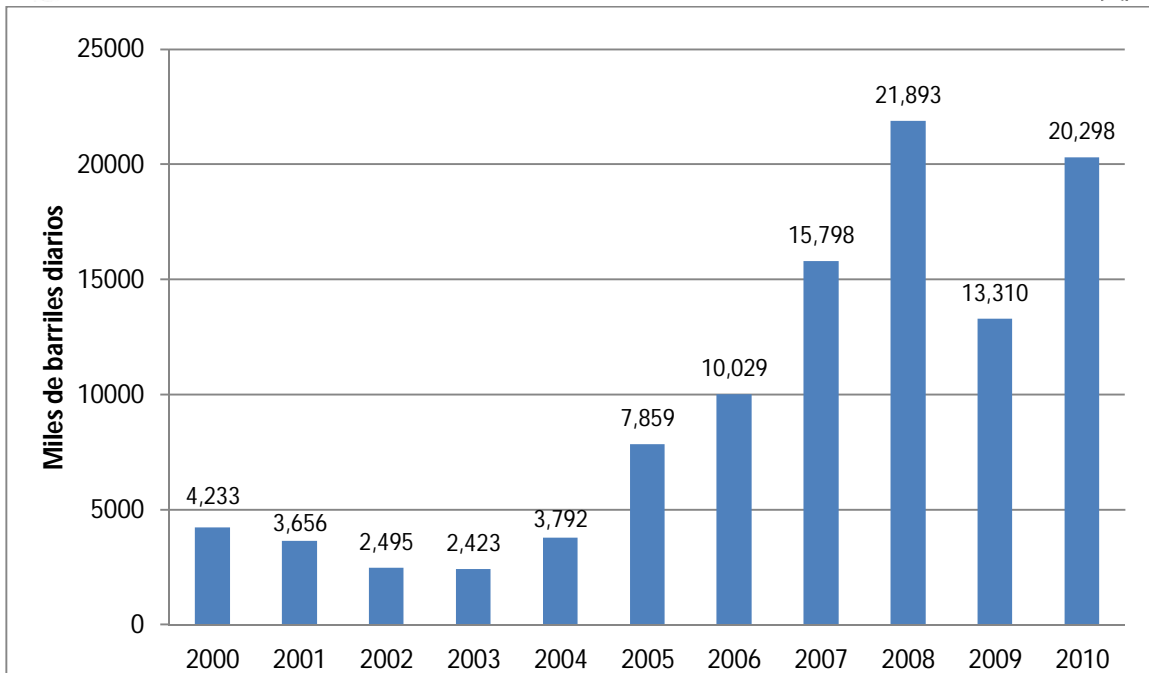




Gráfica 2: Producción de principales petrolíferos en México, periodo 2000-2010 (4).



Gráfica 3: Demanda de gasolinas y diesel en México, periodo 2006-2010 (3).



Gráfica 4: Importaciones de petrolíferos en México, periodo 2000-2010 (4).

Es por todos estos aspectos que los proyectos más urgentes en los que se estima que se debe invertir en los próximos años a nivel nacional, de preferencia de manera simultánea, son (3):

- Conversión de 3 de las 6 refinerías existentes.
- Ampliación de la capacidad de refinación en al menos 500 mil barriles diarios.
- Incrementar la capacidad de importación, almacenamiento y distribución.
- Mejora de calidad en los combustibles.
- Mejora del desempeño operativo de las instalaciones.

## REFINERÍA DE TULA, HIDALGO

La refinería Miguel Hidalgo se encuentra en el municipio de Tula de Allende, Hidalgo. La primera etapa de su construcción se inauguró el 18 de marzo de 1976 con una capacidad inicial de procesamiento de 150000 bpd. Se encarga de procesar alrededor del 24% del crudo total refinado en el país contando con una capacidad actual de 325000 bpd de crudo, y con una capacidad de alrededor de 80000 bpd en sus plantas catalíticas.

Es la abastecedora principal en la zona metropolitana del Valle de México, Estado de México, Hidalgo, Morelos y en menor medida de los estados de Guerrero, Guanajuato, Querétaro, Michoacán y Puebla.



Figura 2: Plano de localización de la refinería Miguel Hidalgo, Tula.



### ***Antecedentes***

La desintegración catalítica en lecho fluidizado (Fluid Catalytic Cracking) consiste en llevar a cabo la descomposición de moléculas pesadas o complejas en moléculas más ligeras o simples mediante el uso de calor, presión y en presencia de un catalizador, representando así uno de los procesos más importantes en la refinación del petróleo debido a la importancia estratégica y económica que tiene al convertir productos de bajo valor como residuos de destilación en productos de mayor valor, principalmente gasolinas y olefinas. Es por esta razón que continuamente las industrias buscan optimizar la operación de sus unidades FCC.

Otra razón importante por la cual el proceso FCC ha tomado importancia es por la capacidad que presenta para reducir emisiones tóxicas al medio ambiente al producir gasolinas más limpias con menos contaminantes (5).

El proceso de craqueo catalítico fue comercializado por primera vez en 1936; en sus inicios se utilizaban múltiples equipos alternando entre reactores de lecho fijo para el craqueo, agotadores, regeneradores y recirculaciones. En 1940 el proceso evolucionó incorporando un lecho móvil en vez del fijo mejorando con ello el intercambio de calor y la flexibilidad de la operación; hasta que en 1943 se puso en operación la primera unidad de desintegración catalítica de lecho fluidizado. En 1951 la compañía Kellogg puso en marcha la primera unidad Orthoflow, la cual elimina líneas externas del catalizador. En 1960 el desarrollo a fondo del proceso de craqueo catalítico fluidizado fue posible gracias a la innovación en el uso de catalizadores a base de zeolitas con gran actividad y selectividad, y la aparición de las técnicas de craqueo en elevadores verticales (riser); con estos desarrollos se logró producir destilados de mejor calidad a partir de productos de menor calidad y reducir el inventario y costos de uso de catalizadores (1) (5).

En México, la actividad de desintegración catalítica FCC se inició en 1958 en la ex-refinería de Azcapotzalco:

Localización	Año de diseño	Tecnología usada
<b>Cd. Madero</b>	1960-1972	ESSO IV
<b>Minatitlán</b>	1963	UOP
<b>Salamanca</b>	1972	Kellogg
<b>Tula FCC-I</b>	1972	Kellogg
<b>Salina Cruz FCC-I</b>	1975	Kellogg
<b>Cadereyta FCC-I</b>	1975	Kellogg
<b>Salina Cruz FCC-II</b>	1988	Kellogg
<b>Tula FCC-II</b>	1991	Kellogg
<b>Cadereyta FCC-II</b>	1958-1993	ESSO IV – S&W*

\*Unidad FCC trasladada a Cadereyta al cierre de la refinería de Azcapotzalco y rediseñada por S&W.

Tabla 3: Unidades FCC en México (6).

Las unidades FCC actualmente son capaces de procesar distintos tipos de cargas dependiendo los rendimientos globales de la refinería; en el caso de México, la mayoría de los crudos que son procesados son pesados (mayor contenido de contaminantes y compuestos de alto peso molecular), lo cual en consecuencia hace que las alimentaciones a la FCC sean más pesadas también.

### **Descripción general del proceso**

El proceso involucra una serie de sistemas que interactúan dinámicamente estableciendo equilibrios térmicos, materiales y mecánicos. La unidad FCC en su conjunto se compone por (5) (7):

- Convertidor de la FCC con reactor tubular vertical ascendente "riser", ciclones cerrados, agotador, separador, distribuidor del catalizador gastado, regenerador, cámara de orificios y sistema de recuperación de calor.



- Torre fraccionadora.
- Unidad de recuperación de vapores (torre agotadora-absorbedora, debutanizadora, depropanizadora y depentanizadora).
- Unidad de tratamiento de aminas.
- Unidades de tratamiento adicionales.

Por razones del alcance del proyecto solo se hablará del convertidor y sus componentes. Una pequeña descripción del resto del proceso se podrá encontrar en el apéndice II.

El proceso se inicia en el elevador vertical o "riser" al cual se inyecta una alimentación precalentada que por lo general es el residuo de vacío (HVGO) proveniente de alguna de las plantas de destilación al vacío. El precalentamiento se realiza mediante el intercambio de calor con los productos de la misma unidad FCC y la torre fraccionadora de ser posible (7).

La alimentación inyectada a la unidad entra en contacto con catalizador caliente proveniente del regenerador, el cual vaporiza y eleva la mezcla a la temperatura de reacción requerida.

Al mismo tiempo que es inyectada, la mezcla de catalizador e hidrocarburos es fluidizada y elevada en el riser mediante vapor de dispersión. Una vez que entran en contacto la carga y el catalizador caliente se lleva a cabo el craqueo conforme la mezcla avanza a través del riser y la reacción continúa hasta llegar al separador donde con ayuda de un sistema de ciclones se separa el producto gaseoso del catalizador.

Los gases productos de la reacción se trasladan a una torre fraccionadora para separarlos en sus distintos cortes finales mientras que el catalizador es canalizado a un equipo agotador en donde, mediante vapor de agotamiento en contraflujo, se retiran del catalizador los restos de gas que pudieron haber quedado atrapados y se mantiene la fluidización del lecho del reactor para evitar que dichos gases entren al regenerador y puedan causar un consumo extra de aire o una excesiva desactivación del catalizador.



En la última etapa el catalizador pasa a un regenerador en el cual se mantiene fluidizado mediante una corriente de aire mientras el coque superficial es quemado y convertido en gas de combustión, principalmente  $\text{CO}_2$ . El calor de combustión generado en esta etapa es suficiente para abastecer las necesidades de intercambio de calor de todo el proceso.

Por último, el catalizador caliente regenerado es retornado al riser para continuar siendo utilizado en la reacción de craqueo.

Los productos principales que se obtienen como resultado de la reacción de desintegración catalítica son (1) (8):

- Gas ácido: Generalmente compuesto por  $\text{H}_2\text{S}$  y dióxido de carbono, es de carácter corrosivo para el proceso.
- Gas combustible o LP: Es una mezcla de hidrocarburos ligeros como el propano y butano comprimidos y licuados cuyo uso como combustible puede ser tanto doméstico como industrial.
- Propano/propileno: Son compuestos con valor útil para varios otros tipos de industrias y como combustible.
- Butanos/butilenos: Al igual que el propano y propileno son de utilidad para otras industrias e incluso para procesos de la propia refinería como la tratadora de naftas.
- Gasolina catalítica: Es una mezcla de hidrocarburos líquidos volátil y habitualmente el producto que se busca obtener en el proceso.
- Aceite cíclico ligero: Es un producto pesado rico en compuestos aromáticos.
- Fondos obtenidos en la fraccionadora.

Las alimentaciones típicas que se inyectan a la unidad FCC contienen moléculas cuyo punto de ebullición está entre los 650 y 1500 °F. Los tipos de alimentaciones que generalmente se usan durante una operación normal son (1):



Aplicación	Alimentación	Productos principales
Craqueo de gasóleo	Gasóleos de vacío (VGO)	Gasolina de motor, LCO y LPG
Craqueo de residuo	Residuo atmosférico, VGO, residuo de vacío	Gasolina de motor, LCO y LPG
Craqueo para petroquímicos	Gasóleo de vacío y residuos añadidos	Olefinas ligeras (C <sub>2</sub> , C <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> ) y aromáticos

Tabla 4: Unidades FCC en México (1).

La Unidad Desintegradora de Lecho Catalítico Fluidizado tipo Orthoflow número 2 (FCC II) de Petróleos Mexicanos de Tula, Hidalgo, tiene una capacidad de 6380 m<sup>3</sup>/día (40000 BPD) cuya alimentación es una mezcla de gasóleos de vacío provenientes de procesar una mezcla de crudo 60% Istmo y 40% Maya (7).

### **Riser**

El tubo elevador o “riser” es la sección de la unidad que funciona como reactor. La carga es precalentada con intercambiadores de calor que aprovechan el calor de las salidas de la torre fraccionadora. Pueden agregarse recirculaciones a la carga fresca de la unidad que también son aprovechadas para precalentar la carga, sin embargo, estas recirculaciones suelen ser pequeñas en comparación al volumen total de la carga (alrededor del 5% en volumen) (5) (7).

La carga es inyectada en la parte inferior del riser a través de 6 boquillas, donde se mezcla con vapor de dispersión, vapor de fluidización lateral y catalizador caliente regenerado proveniente del regenerador, el cual vaporiza y eleva la temperatura de la carga hasta la temperatura requerida para la reacción.

El catalizador regenerado es ingresado al riser a través de una válvula tapón que regula su flujo. Esta válvula es controlada según la temperatura de salida que se requiera en el riser.



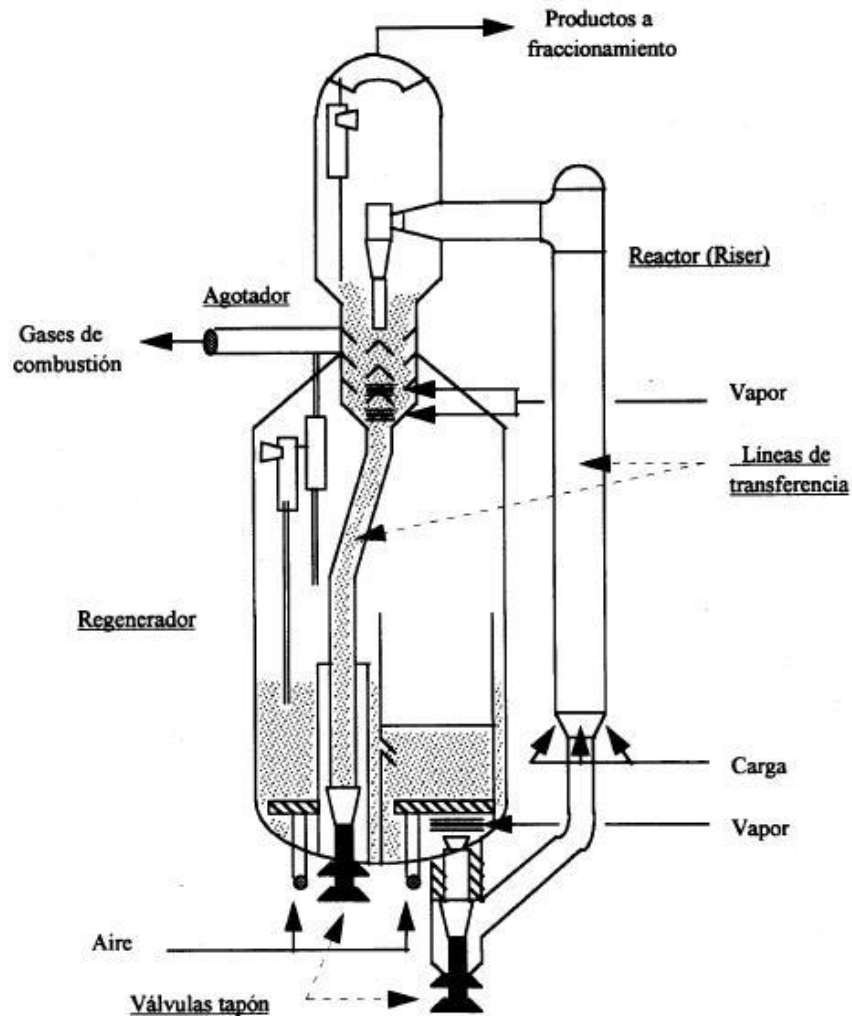


Figura 3: Convertidor catalítico modelo Orthoflow F, Kellogg (5).

El catalizador debe ser fluidizado antes de ser ingresado al riser mediante gas combustible tratado o vapor con el fin de buscar que el perfil de densidad sea uniforme a lo largo de la sección transversal del reactor y de esta forma asegurar un contacto óptimo catalizador-carga; además, el tiempo de contacto entre el catalizador y la carga debe ser corto para poder lograr la conversión deseada y evitar que ocurra una desintegración excesiva de la alimentación.

El riser a grandes rasgos puede dividirse en una sección donde la carga vaporizada es acelerada verticalmente y otra donde el diámetro interno es aumentado con el fin de manejar adecuadamente la expansión de los vapores de reacción y lograr mantener un tiempo de contacto adecuado.



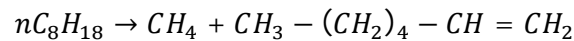
Al final del riser la estructura consta de codos de 90° que desvían el flujo saliente hacia el separador y el sistema de ciclones; dichos codos están diseñados para formar una cama de catalizador que actúe como recubrimiento y así minimizar la erosión del equipo (7).

### Reacción

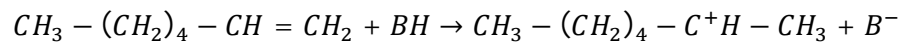
La principal diferencia entre una reacción de craqueo catalítico y una de craqueo térmico consiste en que el craqueo térmico se lleva a cabo vía radicales libres, mientras que el craqueo catalítico se realiza vía iones de carbono, los cuales se asocian con los sitios ácidos de Bronsted en el catalizador (1).

El mecanismo de reacción general está dado por los siguientes pasos (8):

- a) Craqueo térmico inicial:

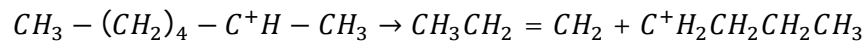


- b) Cambio de protones:

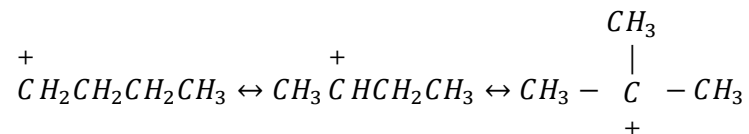


\*BH = Sitio Bronsted del catalizador (proporciona protones para la formación de iones carbenio).

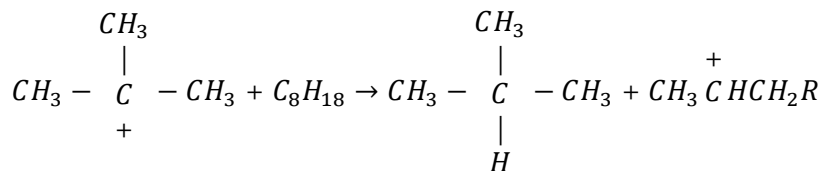
- c) Ruptura del enlace  $\beta$ :



- d) Reordenamiento de la estructura (orden de estabilidad del ión carbonio: terciario>secundario>primario):

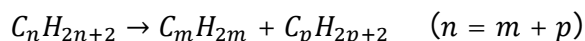


- e) Transferencia de ión hidrógeno:

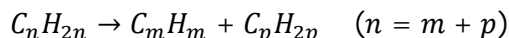


Durante la reacción de desintegración en la unidad FCC, lo primero que sucede es la desintegración de los gasóleos en parafinas y olefinas cuyos intervalos de ebullición se encuentran en el rango de las gasolinas (C<sub>5</sub>-C<sub>12</sub>), n-butanos, butenos y propileno; los compuestos aromáticos con radical alquilo pierden su alquilo para dar lugar a compuestos aromáticos y olefinas, y los componentes de aromáticos grandes pueden condensarse y formar aromáticos más grandes (coque) (1).

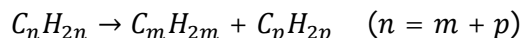
- Desintegración de parafinas en parafinas y olefinas ligeras:



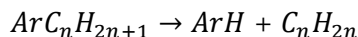
- Desintegración de naftenos (parafinas cíclicas) a olefinas más ligeras:



- Desintegración de olefinas a olefinas más ligeras:

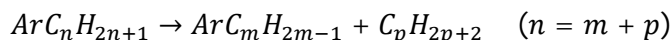


- Desalquilación de alquil aromáticos:



\*Ar = Aromático

- Reacciones de las cadenas lineales de los anillos aromáticos:



Las reacciones secundarias consisten en la degradación o fraccionamiento subsecuente de los productos de las reacciones primarias hasta llegar incluso a producir ciertas cantidades de grafito e

hidrógeno dependiendo del tiempo y las condiciones de la reacción, es por ello que estas reacciones resultan indeseables en el proceso.

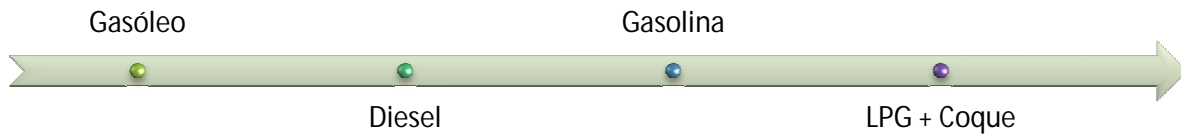


Figura 4: Principales productos obtenidos por orden de fraccionamiento catalítico a partir de gasóleo (1).

### **Reactor-Separador**

En el separador del convertidor se alojan los ciclones superiores y los ciclones del riser. Los ciclones se encargan de separar el catalizador de los vapores producidos, lo cual impide que la reacción continúe y se produzca un fraccionamiento térmico excesivo de los hidrocarburos. Un aproximado del 95% al 97% de los vapores de los ciclones del riser son dirigidos directamente a los ciclones superiores, mientras que del 3% al 5% de los vapores queda retenido en el catalizador y es arrastrado a las piernas de los ciclones del riser, las cuales están sumergidas en el catalizador que forma el lecho del agotador con el fin de que se forme un sello que impida el flujo de los vapores hacia las piernas y se mantenga así dentro del rango de 3% a 5% previamente mencionado.

Es importante que las piernas de los ciclones no se encuentren excesivamente sumergidas en la cama del catalizador ya que se podrían "inundar" y causar un arrastre excesivo de catalizador hacia la fraccionadora (7).

Los vapores de los ciclones superiores son dirigidos a la torre fraccionadora mientras que el catalizador gastado se dirige al lecho del agotador.

### **Agotador**

Al pasar el catalizador gastado al agotador es tratado con vapor de agotamiento en contracorriente con el fin de eliminar los vapores de los hidrocarburos que hayan sido arrastrados ya que de llegar al regenerador causarían un aumento en los requerimientos de aire, en la temperatura de la cama del regenerador y en la cantidad de hidrógeno contenida en el coque.

El agotador está diseñado con dos anillos de distribución de vapor de media presión, uno en la parte superior, que distribuye aproximadamente el 40% del vapor de agotamiento total utilizado, y otro en la parte inferior (7).



En la parte superior se remueve la mayoría de los vapores de hidrocarburos arrastrados mientras que en la sección inferior se cuenta con mamparas para asegurar una combinación lo suficientemente eficiente en el contacto, tiempo de residencia y presión parcial del vapor, para que los hidrocarburos sean difundidos fuera de los poros del catalizador hacia el vapor.

Después de pasar por el anillo inferior, el catalizador es dirigido hacia el cono del agotador donde es fluidizado con vapor de aireación para lograr un flujo estable y una densidad equivalente uniforme. La cantidad de vapor de aireación puede variar continuamente dependiendo de las características del catalizador que se esté tratando (densidad de bulto, velocidad de desgaste o dureza estructural, forma estructural, tamaño de partícula, su habilidad para arrastrar gases, nivel de desaireación, etc.

Es esencial que desde el cono se asegure una adecuada distribución del flujo de catalizador hacia el regenerador ya que de no hacerse resulta muy complicado corregir problemas de fluidización solamente con el vapor de aireación.

Al final del equipo una válvula de tapón controla el nivel de la cama del agotador y el flujo de catalizador que entra al regenerador.

Los niveles de las camas de catalizador dentro de las distintas secciones del convertidor se calculan mediante la cabeza estática o peso que ejerce la columna de catalizador mediante medidores de presión diferencial, y la densidad del lecho del catalizador.

### ***Regenerador***

El catalizador gastado fluye del cono del agotador a la pierna de catalizador gastado para llegar al pozo del regenerador. Mediante un compresor de aire se fluidiza el catalizador hasta la parte superior del pozo, donde es distribuido uniformemente en la parte superior de la cama del regenerador.

En el regenerador, el coque depositado en el catalizador es quemado para poder regresar al catalizador a condiciones en las que pueda ser reutilizado. El coque generado en la reacción y



depositado en el catalizador se quema para restaurar la actividad del catalizador a la vez que funciona como combustible formando gases de combustión,  $\text{SO}_x$  y  $\text{NO}_x$ . Para llevar a cabo esta combustión un soplador de aire se encarga de suministrar el oxígeno requerido.

El calor producido por la reacción generalmente es suficiente para mantener la temperatura requerida durante una operación normal (mayor a  $427^\circ\text{C}$  para lograr la combustión del coque); sin embargo, hay veces en que la cantidad de coque que es quemado no es suficiente para mantener la temperatura de operación requerida, en este caso puede optarse por adicionar un exceso de oxígeno y aumentar la temperatura de salida del riser, recircular fondos de la fraccionadora al riser, modificar la temperatura de precalentamiento de la carga, disminuir la cantidad de vapor de agotamiento o de dispersión, o en último caso, alimentar aceite de antorcha (esto disminuye la actividad del catalizador). Durante una operación de arranque, además del aceite de antorcha, se suele utilizar un calentador de aire para elevar la temperatura del catalizador (7).

El regenerador opera en balance térmico, es decir, la carga de calor que entra es la misma que se remueve, de forma tal que la temperatura del regenerador se mantenga constante. Esto debe ser así porque la temperatura influirá en la carga térmica que lleve el catalizador que es regresado al riser y por tanto en todo el balance energético y material de la unidad.

El regenerador cuenta con un sistema de ciclones para separar los gases de la combustión del catalizador regenerado. En el domo del regenerador se suministra vapor para purgar los gases que puedan quedar estancados y no ocasionen combustión adicional.

Los gases producidos en la combustión fluyen hacia ciclones donde son separados del catalizador que arrastran, se recolectan en un anillo externo (cámara plenum), pasan por una válvula deslizable a la cámara de orificios y al enfriador de gases de combustión, y por último son llevados a una chimenea.

Casi todo el monóxido de carbono que sale de la cama del catalizador en la fase densa es convertido a dióxido de carbono en la fase diluida del regenerador, de tal forma que los gases que entran a los ciclones deberán estar esencialmente libres de  $\text{CO}$ . Este modo de operar se conoce



como a combustión completa de CO. Al operar existe una diferencia de temperatura entre la fase densa y la fase diluida del regenerador la cual se debe a lo que se conoce como combustión retardada controlada. El catalizador recuperado en los ciclones se junta con el resto del catalizador regenerado y es recirculado al reactor tubular.

El nivel de la cama de catalizador del regenerador queda establecido en base al nivel de la cama en el agotador y el inventario de catalizador del convertidor en general; la presión se controla modificando la apertura de una válvula deslizable de gases de combustión para lograr un valor definido entre la presión diferencial del separador y el regenerador (la presión del regenerador más alta que la del separador).

Las principales variables que influyen en la temperatura del regenerador son (9) (7):

- El flujo y temperatura del catalizador que ingresa.
- La temperatura y flujo del aire suministrado.
- La carga térmica aportada por la combustión producida.
- El uso de aceite de antorcha (en el caso del arranque del equipo).
- El flujo de catalizador que es suministrado al riser.
- El flujo de los gases de combustión que salen del regenerador.

### ***Catalizador***

En un principio, cuando el proceso operaba en lecho fijo, se utilizaban catalizadores granulados o extruidos. Más tarde en los 40's se desarrollaron catalizadores a base de sílico-aluminatos amorfos sintéticos, en 1950 se incorporaron catalizadores de alta actividad, mayor estabilidad y mejores propiedades de fluidización, hasta que en los 60's surgieron catalizadores con sílico-aluminatos cristalinos (zeolitas tipo Y) como componentes activos (5).

Las propiedades del componente activo en el catalizador para el proceso FCC están en función de la cantidad de sitios ácidos que presenta, tamaño de poro, resistencia a envenenamientos, y estabilidad térmica e hidrodinámica; siendo elegido en base al costo y a los requerimientos de la unidad de producción, ya sea para maximizar la producción de gasolina, destilados ligeros, olefinas, octanaje, etc. (5)



Mientras que el componente activo representa del 10% al 40% del peso del catalizador, el resto del catalizador consiste en una matriz conformada por sílico-aluminatos amorfos. La matriz sirve de soporte y medio de dispersión para el componente activo, además de generar un tamaño adecuado de partícula para la fluidización, minimizar pérdidas de sitios activos, proveer de buena transferencia de calor según los requerimientos necesarios y captar y neutralizar contaminantes (5).

Hay catalizadores a los que se les agrega cierta cantidad de tierras raras (del 2% al 5% del peso del catalizador) con el fin de aportar estabilidad térmica e hidrodinámica a la zeolita y generar un aumento en la actividad para causar una mayor conversión, aunque algunos inconvenientes de esto son el aumento de la selectividad por el coque y la disminución por las olefinas y gasolinas. También suelen agregarse componentes llamados aditivos para mejorar ciertas características del catalizador, como por ejemplo (5):

- Promotores de combustión de CO: Disminuyen el carbón en el catalizador regenerado y emisiones de CO, mejoran la actividad, selectividad y estabilidad.
- Aditivos de octano: Incrementan el octano de gasolinas y el rendimiento de isobutileno y olefinas.
- Reductores de  $SO_x$ : Reducen emisiones de  $SO_x$
- Pasivadores de metales.

Algunos ejemplos de aditivos comunes son las arcillas, las cuales se utilizan para mejorar la porosidad; alúmina o sílica-alúmina para mejorar la actividad o unión de los componentes; y titanio o azufre para mejorar el rendimiento obtenido.

Los catalizadores preferidos para el proceso FCC son los hechos a base de zeolitas cristalinas de sílica-alúmina, ya que se ha encontrado que proporcionan buena estabilidad y actividad a las condiciones que requiere el proceso, además de una estructura tridimensional y poros que permiten la reacción de craqueo de manera sencilla. Actualmente el componente activo utilizado comúnmente suele ser un sílico-aluminato cristalino llamado Zeolita Faujasita Y (1).



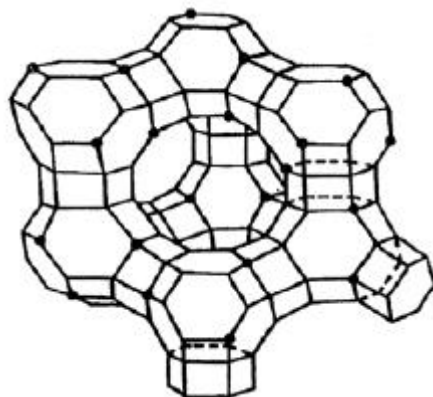


Figura 5: Estructura de una zeolita Faujasita Y (1).

En general, para poder considerar el uso de un catalizador en el proceso FCC, este debe contar con las siguientes propiedades (1):

- Alta estabilidad al calor y al vapor (>1600 °F).
- Estructura tridimensional.
- Alta actividad (acidez).
- Poros amplios (7.5 Å).
- De ser posible se prefiere reemplazar los átomos de sodio presentes en la estructura con otros iones.
- Bajos tamaños de la celda unitaria del catalizador incrementarán la generación de olefinas C<sub>3</sub> y C<sub>4</sub>, octanaje en la gasolina y reducción de la formación de coque.
- Para los catalizadores usados comercialmente, la actividad varía entre 58 a 77 MAT, más comúnmente entre 62 y 72 MAT.

Idealmente, cada alimentación requiere una formulación única de relación zeolita/matriz en el catalizador para poder lograr los productos requeridos.

En la unidad FCC de Tula, el catalizador fresco y el catalizador gastado son almacenados en dos silos distintos, el silo de catalizador fresco puede almacenar el suministro de 30 días (190 Ton m.) mientras que el de catalizador gastado puede almacenar el inventario máximo del convertidor



(240 Ton). El catalizador de los silos es transportado al regenerador con ayuda de un soplador de aire, y de igual forma es descargado del regenerador al silo de catalizador gastado (7).

El catalizador utilizado varía en tamaño de partícula desde los 5 a los 200 micrones, siendo el promedio de 60 micrones, y siendo de especial importancia las partículas de 0 a 40 micrones para mantener una buena circulación de catalizador (generalmente deben representar más del 8% del inventario de catalizador en el convertidor); la existencia de estas partículas de menor tamaño en el catalizador recirculado dependerá de la eficiencia de los ciclones (7).

Algunos de los metales que se adhieren al catalizador durante el proceso, como el vanadio y el níquel, actúan por sí mismos como catalizadores de desintegración pero reducen la selectividad del catalizador.

El catalizador también puede sufrir desgaste o ruptura de su estructura debido a las condiciones de operación o el roce con las paredes de los equipos y con las otras partículas presentes.

La actividad del catalizador en este caso, puede definirse como la habilidad que tiene para llevar a cabo la reacción de desintegración en una alimentación de gasóleo a ciertas condiciones de operación; sin embargo, la medición de la actividad varía de acuerdo a las condiciones más aceptables y aprovechables para el usuario.

Es común que el catalizador fresco sea agregado periódica o continuamente para compensar la desactivación progresiva del catalizador regenerado y posibles pérdidas durante la operación normal, además de poder remover del inventario el catalizador que se encuentre excesivamente gastado.

### ***Variables de operación principales***

Existen principalmente cuatro variables de operación que afectan el grado de conversión que se logra en la unidad (9) (7):

- Actividad del catalizador.
- Temperatura de salida del riser.
- Tiempo de contacto del hidrocarburo y el catalizador.



- Proporción hidrocarburos-catalizador en el riser.

Estas variables deben controlarse con el fin de evitar consecuencias como un fraccionamiento excesivo de la alimentación para evitar la formación de gas y coque, y uso excesivo de catalizador fresco.

Por otro lado, el balance de calor del convertidor en general quedará condicionado por 3 aspectos (9) (7):

- Los requerimientos de calor en el riser para llevar a cabo la reacción a la conversión deseada.
- La cantidad de coque formado en el catalizador, combustible que determinará en cierta medida la temperatura que adquiera el catalizador en el regenerador.
- El flujo de catalizador regenerado caliente que es devuelto al riser.

Si alguno de estos aspectos es cambiado, alguno o ambos de los otros aspectos se verán modificados para mantener el balance térmico existente.

Para identificar los productos, generalmente se definen temperaturas ASTM para cada fracción obtenida, por ejemplo, al aceite cíclico ligero (LCO) se le define como un material líquido que hierve arriba de los 221 °C ASTM, mientras que los fondos de fraccionadora se definen como un material más pesado que los 343 °C ASTM.

Las variables de operación más importantes de la FCCU y que por tanto, pueden ser controladas directamente por los operadores para modificar el proceso, son (9) (7):

- Temperatura del riser.
- Flujos de recirculación.
- Temperatura de precalentamiento de la carga.
- Flujo de la carga.
- Flujo de aire al regenerador.
- Flujo de reposición de catalizador.
- Flujos de aire o gas para fluidización.



## ENTORNO DE SIMULACIÓN

Algunos de los errores más comunes respecto al uso de modelos computarizados es que se piensa que cualquier persona con mínima experiencia puede utilizarlos y que cualquier dato obtenido o medido puede ser ingresado y simulado con el algoritmo adecuado, sin embargo, un equipo instalado en una planta difícilmente actúa de forma idéntica al modelo del diseño original. Al realizar una reconfiguración del diseño de una planta o algún cambio en un proceso es necesario cuantificar el desempeño actual de los equipos de manera fidedigna para no llevarlos a un punto de operación más allá de su límite, sin mencionar que dicho estudio del desempeño debe ser efectivo y con el menor costo posible.

Al trabajar con un simulador de proceso, algunos de los principales puntos que deben asegurarse para obtener resultados confiables son:

- 1) Que los datos ingresados representen correctamente el proceso y la operación de los equipos a modelar o simular mediante la comprobación de su fuente.
- 2) Que el modelo matemático que utiliza el simulador represente de forma adecuada el comportamiento de las sustancias con las distintas condiciones de operación a implementar. Esto a través de las recomendaciones que cada método indica según el tipo de proceso a tratar.
- 3) Que el operador del simulador sepa interpretar de forma adecuada los resultados reportados para detectar y corregir "sin sentidos" o datos erróneos.

El simulador Aspen Refsys representa una opción bastante buena para realizar simulaciones y optimizaciones de las distintas unidades que conforman a una refinería ya que utiliza modelos integrados de cada planta presentados en una interfase de usuario sencilla pero que posibilita cambios en su ejecución y modelaje dependiendo de las necesidades del operador y de la precisión de los resultados requeridos (ver apéndice I).

Durante la ejecución del programa el usuario interactúa con una serie de distintas ventanas en las cuales deberá ingresar los datos requeridos para la simulación. A continuación se describirá la secuencia en la ejecución y captura de datos realizada para el presente proyecto de tesis.



### **Componentes**

Al iniciar un nuevo proyecto la primera ventana que se nos presenta es la de "simulation basis manager", en ella, en la primera pestaña, el simulador da la opción de crear grupos de componentes según se necesiten de acuerdo a las especificaciones de cada proyecto.

Debido a que se va a tratar con un gasóleo derivado de las sucesivas destilaciones del crudo que, como ya se mencionó en puntos anteriores, es una mezcla compleja de varios componentes, existen dos formas principales de indicar los componentes a utilizar:

1.- En la pestaña de "components" del "basis manager" se hace click sobre el botón de "Import..." y dentro de la carpeta "Paks" del simulador se elige el archivo "petroleumComp1.cml". Este archivo contiene todos los componentes básicos que comúnmente se encuentran en los distintos procesos de refinación del petróleo por lo que resulta muy conveniente para realizar simulaciones estándar y semi complejas para una refinería.

2.- En la pestaña de "components" del "basis manager" se hace click sobre el botón de "add", lo cual abre la biblioteca o base de datos del programa donde se pueden ingresar uno por uno los componentes a utilizar.

Se decidió utilizar el primer método ya que la complejidad de la simulación concuerda con la cantidad de componentes que dicha opción presenta, además de tener la ventaja de que incluye componentes hipotéticos previamente creados que serán necesarios para la simulación para representar las mezclas complejas obtenidas.

### **Componentes hipotéticos**

Son componentes que no están dentro de la biblioteca normal de componentes de Hysys y pueden representar componentes puros, mezclas, sustancias complejas o incluso sólidos.

La forma más sencilla de crear un componente hipotético solamente requiere que sean especificados el tipo de grupo funcional predominante de la molécula (alcohol, hidrocarburo, amina, etc.), su punto de ebullición, su gravedad específica (o densidad del líquido) y el método de

estimación para sus propiedades. Si se requiere un estimado más certero del componente hipotético pueden especificarse otras de sus propiedades y, en caso de tratar con componentes para los cuales se conoce su estructura molecular, puede describirse su estructura con la opción “UNIFAC component builder”.

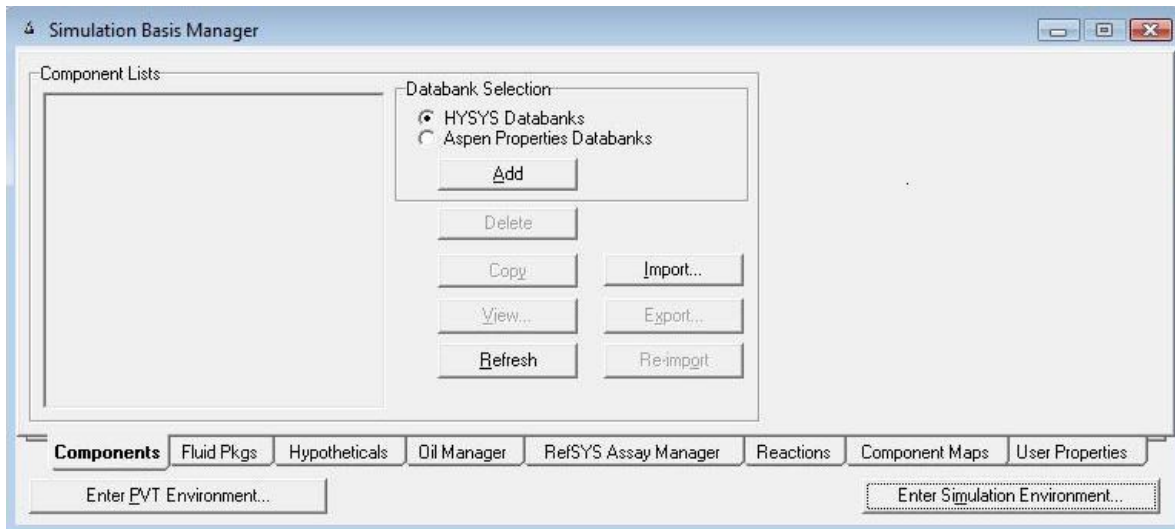


Figura 6: Pantalla de selección de componentes en Hysys.

Para el presente caso no es necesario ingresar nuevos componentes hipotéticos ya que como se mencionó, la opción elegida para indicar los componentes a utilizar incluye los componentes hipotéticos necesarios para la simulación.

### **Paquete de fluidos**

Los paquetes de fluidos contienen la información necesaria para el cálculo de las propiedades termodinámicas dentro de la simulación y constituyen el corazón de la simulación ya que son los modelos matemáticos que representarán el cambio en las propiedades de los componentes a lo largo de todo el proceso.

El entorno de simulación permite utilizar distintos paquetes de fluidos en un mismo proyecto pero siempre es necesario elegir al menos uno. Dependiendo del paquete que se elija será o no necesario especificar información adicional como entalpías, factores de corrección, coeficientes binarios, etc.

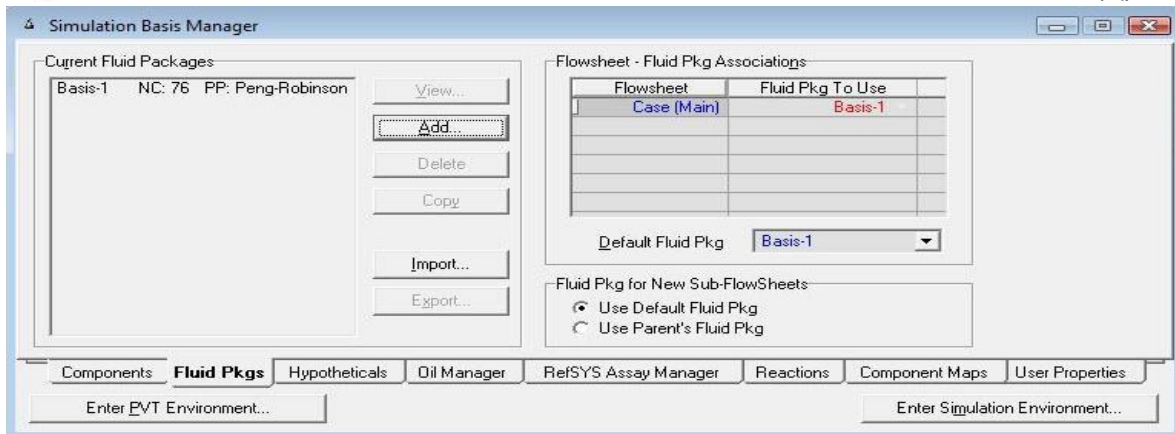


Figura 7: Pantalla de selección de paquetes de fluidos en Hysys.

Los distintos paquetes de fluidos que Hysys ofrece se dividen por su naturaleza en 5 grupos y un listado general de éstos:

- "All types": Muestra todos los paquetes disponibles.
- "EOS": Muestra solo aquellos paquetes basados en ecuaciones de estado.
- "Activity models": Muestra solo aquellos paquetes basados en modelos de actividad de líquidos.
- "Chao Seader Models": Muestra paquetes de métodos semi empíricos basados en Chao Seader.
- "Vapour Pressure Models": Muestra modelos que utilizan valores de K de vapor de presión.
- "Miscellaneous": Muestra el resto de paquetes que no encuadran en las categorías antes descritas (excepto "all types").

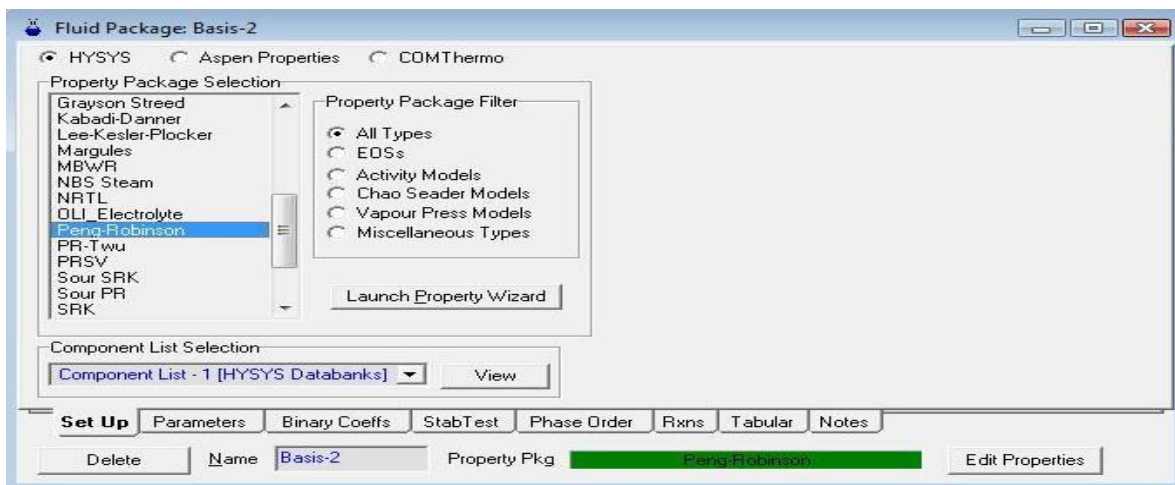


Figura 8: Pantalla de paquetes de fluidos en Hysys.



Ya que el paquete de fluidos es una de las partes centrales de la simulación, aunque existe una amplia bibliografía sobre el tipo de ecuaciones que los conforman, para este caso vale la pena hablar un poco más a fondo sobre las ecuaciones de estado. Muchas ecuaciones de estado se generan tomando como base la ecuación del gas ideal:

$$PV = nRT \dots\dots\dots [1]$$

En esta ecuación se considera que las moléculas tienen un volumen molecular igual a cero y por lo tanto no interactúan entre sí, por lo que se modifica agregando factores basados en las leyes de la termodinámica y estimaciones teóricas y/o empíricas de tal forma que se puedan representar matemáticamente los efectos de las fuerzas intermoleculares, tamaño de las partículas, etc. y se puedan mostrar así de forma más realista los cambios que sufre un fluido al ser modificadas sus propiedades, ya sea que se trate de una sustancia pura o de una mezcla.

Para el caso de los gases, la desviación cuantitativa que sufren respecto del comportamiento ideal a una temperatura dada queda establecida por el factor de compresibilidad Z estimado a esa misma temperatura para una cantidad específica del gas. El comportamiento general que se ha observado es que la desviación de la idealidad se encuentra más marcada a temperaturas bajas y/o presiones altas. Dada esta definición del factor de compresibilidad, la ecuación para un gas ideal se corrige de la siguiente forma:

$$PV = ZnRT \dots\dots\dots [2]$$

donde el factor de compresibilidad queda definido como:

$$Z = \frac{PV}{nRT} \dots\dots\dots [3]$$

Ya que el factor de compresibilidad mide la desviación respecto de la idealidad, también puede describirse como:

$$Z = \frac{V}{V_{ideal}} \dots\dots\dots [4]$$

La explicación común que se da para comprender porque se presentan estas desviaciones es que a presiones altas las moléculas se encuentran más cercanas entre sí, con lo cual las fuerzas y





propiedades intermoleculares cobran mayor importancia y es necesario tomarlas en consideración.

Dependiendo de la naturaleza de las sustancias con que se esté tratando, existen ecuaciones que por su conformación matemática logran representar mejor que otras un comportamiento observado a las condiciones especificadas del proceso, inclusive, muchas ecuaciones de estado son desarrolladas para mejorar la predicción de una determinada región del comportamiento experimental.

Las ecuaciones cúbicas de estado provienen de la asignación de distintos valores para los términos a, b, η, δ y ε en la ecuación cúbica general:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(v-\eta)}{(v-b)(v^2+\delta v+\epsilon)} \dots\dots\dots [5]$$

Los parámetros más importantes en esta ecuación son a y b, llamados respectivamente parámetro de atracción y parámetro de repulsión o volumen molar efectivo; en base a estos, la ecuación queda compuesta por dos términos que describen estas fuerzas moleculares:

$$\frac{RT}{v-b} = \textit{término repulsivo}$$
$$\frac{a(v-\eta)}{(v-b)(v^2+\delta v+\epsilon)} = \textit{término atractivo}$$

Este tipo de ecuaciones suelen considerarse las más simples para representar comportamientos líquido-vapor. De las tres raíces que se generan para el volumen solamente dos tienen un sentido físico en el caso de existir tanto las fases líquido como vapor, siendo la más pequeña representativa del líquido y la más grande representativa del vapor; en el caso de solo existir una de estas fases, solamente habrá una raíz significativa, ya sea para líquido o para vapor. Como regla, los valores del volumen que tienen un significado físico son siempre reales, positivos y mayores al valor de la constante "b".

Aunque las ecuaciones cúbicas de estado pueden resolverse para el volumen de forma explícita, suelen utilizarse métodos iterativos.

Por otra parte, si se considera la inflexión que se presenta en el punto crítico de la isoterma crítica, matemáticamente en la ecuación se puede igualar la primera y segunda derivada de la presión respecto del volumen a cero y con ello generar las ecuaciones correspondientes para el cálculo de los términos  $a$  y  $b$  en términos de la presión y la temperatura crítica, datos que son posibles de obtener experimentalmente o estimarse en la mayoría de los casos para sustancias puras.

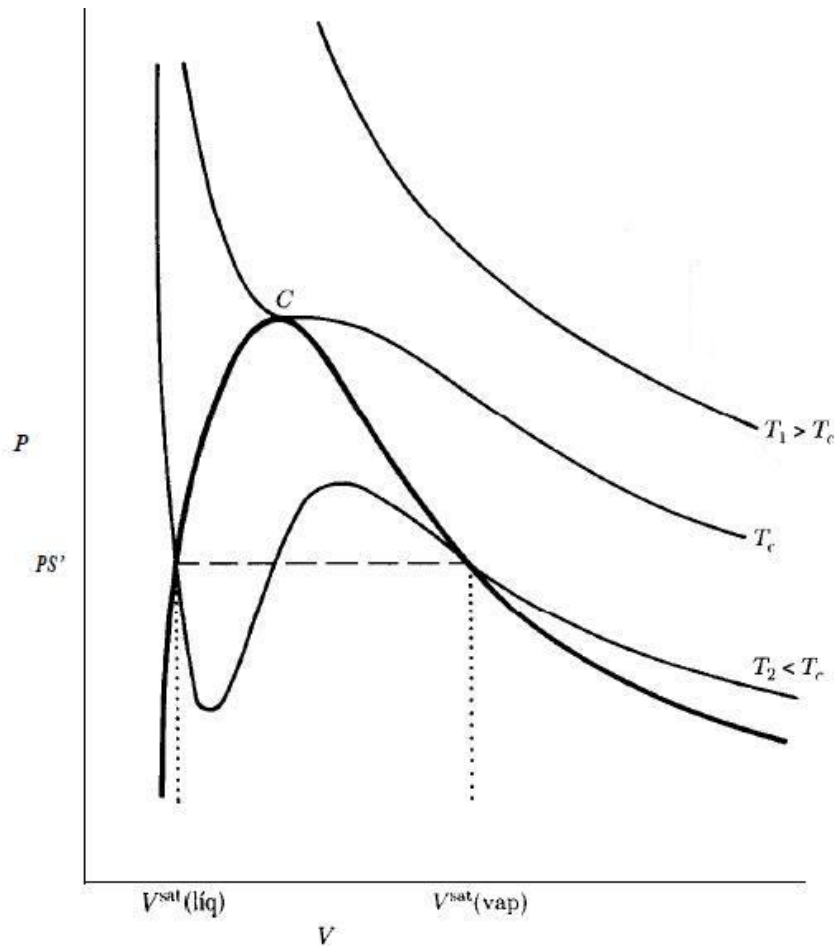


Figura 9: Isotermas generadas por una ecuación cúbica.  $T_c$  = Isoterma crítica,  $V_{sat}$  = vapor saturado,  $PS'$  = Presión de saturación,  $P$  = Presión,  $V$  = Vapor,  $C$  = punto crítico (10).

Para el caso de mezclas deben considerarse los distintos componentes para determinar los valores de los parámetros  $a$  y  $b$ . La solución más simple es la que postula la existencia de las llamadas "propiedades pseudocríticas", las cuales consisten en considerar a la mezcla como una sustancia pura cuyas propiedades críticas quedan definidas mediante relaciones de las propiedades críticas de sus componentes, por ejemplo:

$$Tc_m = \sum_{i=1}^N y_i Tc_i; \quad Pc_m = \sum_{i=1}^N y_i Pc_i; \quad etc.$$

La desventaja de este postulado es que no existe una certeza de que una mezcla demuestre un comportamiento de este tipo.

Comúnmente la solución que se plantea para las ecuaciones cúbicas involucran el concepto de reglas de mezclado, en donde los parámetros  $a$  y  $b$  dependen de la composición y quedan definidos mediante interacciones binarias entre sus componentes:

$$b_m = \sum_i x_i b_i \dots\dots\dots [6]$$

$$a_m = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij} \dots\dots\dots [7]$$

$$a_{ij} = (a_i a_j)^{1/2} (1 - K_{ij}) \dots\dots\dots [8]$$

donde los subíndices "i" y "j" denotan algún componente de la mezcla siendo  $i \neq j$ .

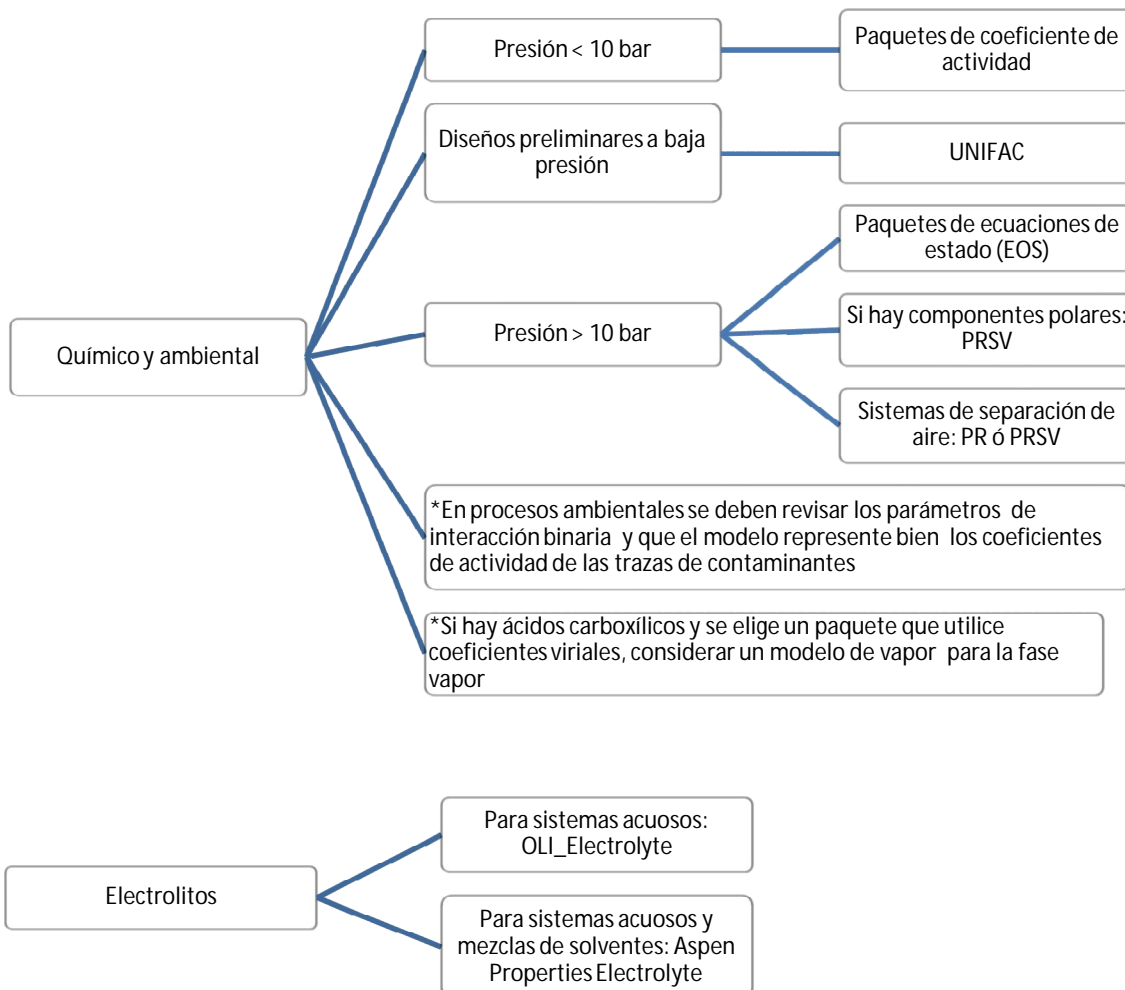
Una vez establecida la ecuación de estado que represente mejor el comportamiento P-V-T de nuestro sistema, simplemente se reemplaza en ecuaciones generadas a partir de las ecuaciones fundamentales de la termodinámica y las relaciones de Maxwell para calcular propiedades como la entalpía o entropía, y en el caso de equilibrio de fases, coeficientes de fugacidad.

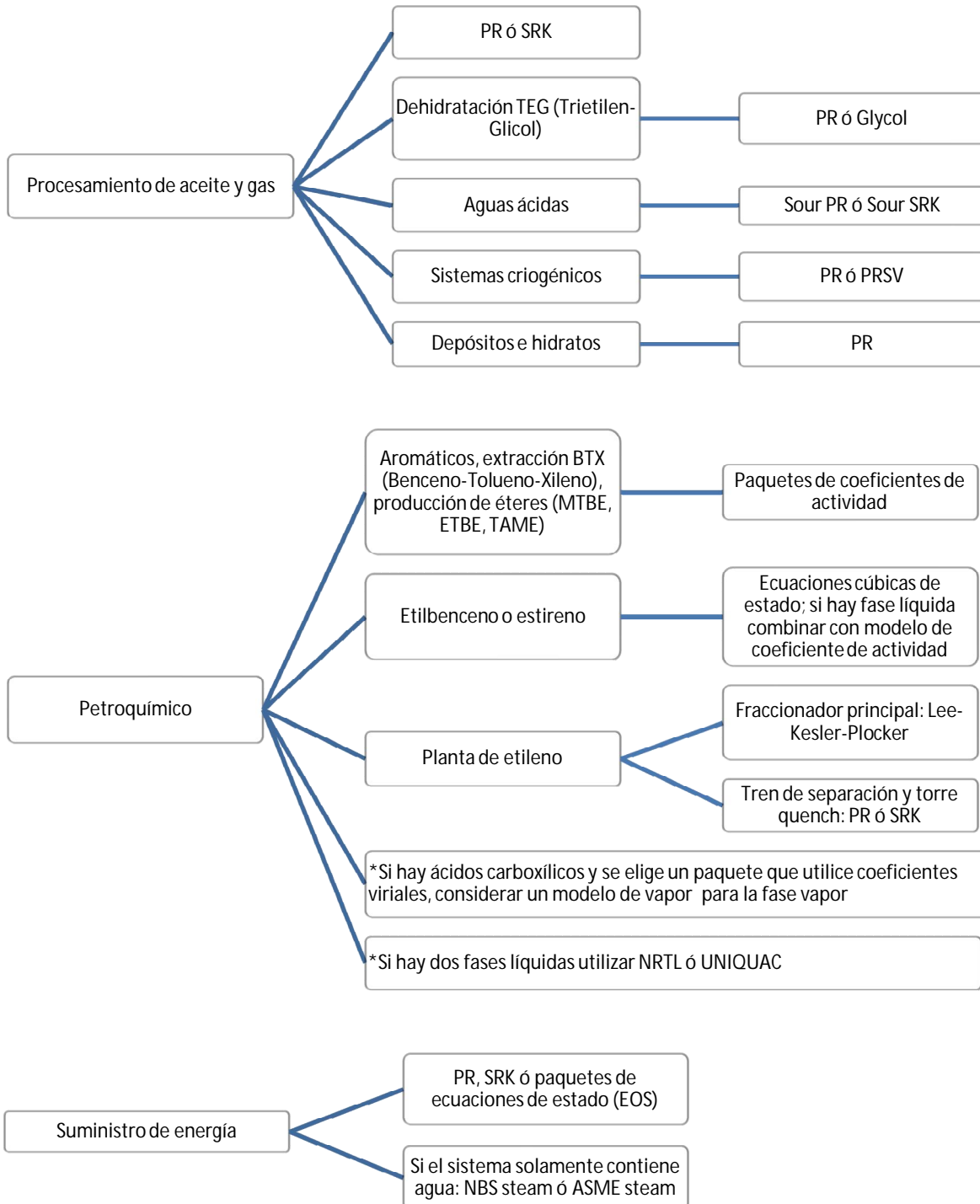
La elección del paquete de fluidos a utilizar generalmente se realiza en base a tres factores:

- a) La naturaleza de los compuestos que intervienen.
- b) La naturaleza del proceso.
- c) La disponibilidad de datos.

En la literatura se han estudiado también ampliamente las ventajas y limitantes de los modelos más comunes en base a la experiencia de su uso y/o su análisis matemático.

El número de ecuaciones de estado desarrolladas es bastante amplio, inclusive dentro del simulador, por lo tanto a veces resulta difícil determinar que paquete de fluidos elegir para la simulación en turno, en estos casos, en la pantalla de elección del paquete de fluidos puede hacerse click en el botón "launch property wizard", el cual nos llevará una pantalla de ayuda donde se nos darán las opciones de paquetes que el programa considera más adecuadas, pero esto no excluye el hecho de que el usuario debe conocer las limitantes de su proceso y del paquete de fluidos elegido ya que esta opción, como se mencionó, solo es una sugerencia y en último caso, debería utilizarse solo para reducir el rango de opciones a elegir. Las opciones presentadas por tipo de proceso son:





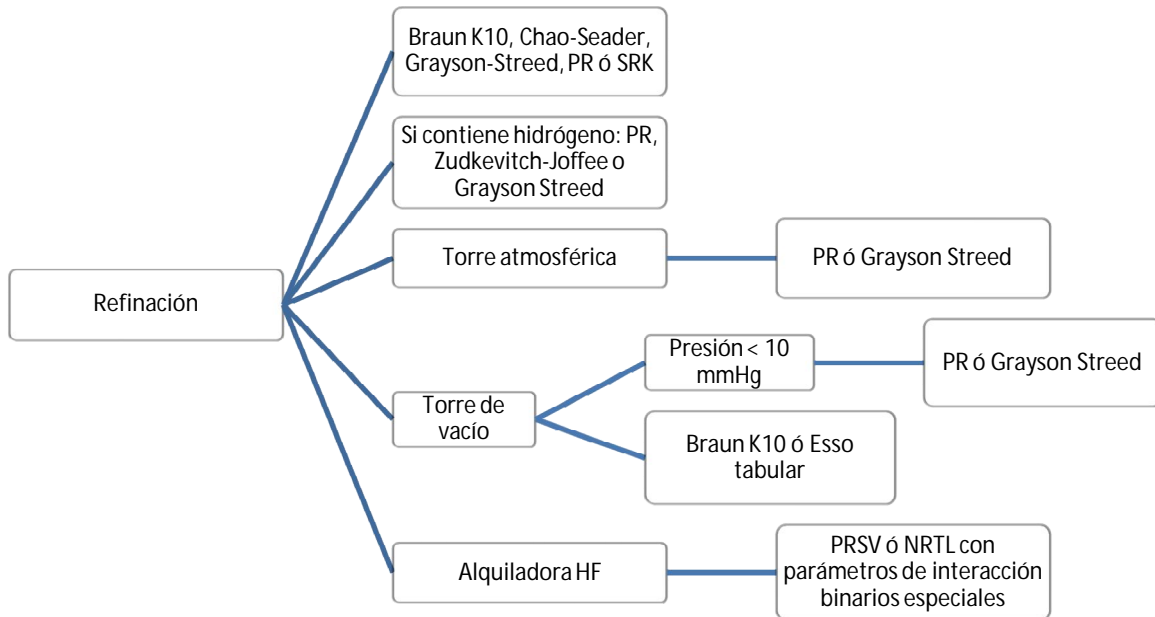


Figura 10: Diagrama de elección de paquetes de fluidos (2) (11).

En el caso de este proyecto, el paquete de fluidos que se eligió para la simulación es el de la ecuación de estado de Peng-Robinson ya que representa bien las propiedades vapor-líquido de sistemas no ideales de hidrocarburos a las condiciones del proceso FCC, además de ser una ecuación cúbica usada comúnmente en problemas de ingeniería relacionados con este tipo de compuestos y resultar relativamente sencilla de resolver, lo cual en este caso se traduce tiempos aceptables de cálculo por parte del sistema computacional. Por otra parte es la ecuación que contiene una mayor base de datos en el programa por lo que al menos en este aspecto se puede asegurar de mejor forma una simulación más certera.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2+2bv-b^2} \dots\dots\dots [9]$$

*Ecuación de Peng-Robinson*

Originalmente la ecuación de Peng-Robinson se desarrollo para cumplir ciertos objetivos:

- a) Contener parámetros en función de las propiedades críticas y factores acéntricos.



- b) Ser razonablemente precisa cerca del punto crítico, principalmente en el cálculo de factores de compresibilidad y densidad de líquido.
- c) Ser aplicable a los cálculos de todas las propiedades de los gases.

En el caso de mezclas, el parámetro  $a$  para cada componente se define como:

$$a_i = a_{ci} \alpha_i \dots \dots \dots [10]$$

donde  $a_{ci}$  es el parámetro  $a$  de la especie "i" calculado mediante sus propiedades críticas y  $\alpha_i$  es una función introducida por Soave en 1972 dependiente de la temperatura y del factor acéntrico ( $\omega$ ) de la especie "i", función concebida para cuadrar con los datos de las presiones de vapor de los hidrocarburos. Así, se tiene que para mezclas la ecuación de Peng-Robinson [9] toma la forma:

$$P = \frac{RT}{v-b_m} - \frac{a_m}{v^2+2b_mv-b_m^2} \dots \dots \dots [11]$$

donde:

$$b_i = 0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$$

$$a_{ci} = 0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}}$$

$$\alpha_i = \left( 1 + (0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2) \left( 1 - \left( \frac{T}{T_{ci}} \right)^{0.5} \right) \right)^2$$

Cuando el factor acéntrico es mayor a 0.49, el simulador Hysys utiliza la ecuación corregida:

$$\alpha_i = \left( 1 + (0.379642 + 1.48503\omega_i - 0.164423\omega_i^2 + 1.016666\omega_i^3) \left( 1 - \left( \frac{T}{T_{ci}} \right)^{0.5} \right) \right)^2$$

Existen otras pestañas en el "basis manager" para ingresar datos de la simulación pero para este caso no es necesario entrar en gran detalle de su uso ya que no serán requeridas:

- Hypoteticals: Sirve para ingresar datos y crear componentes hipotéticos en caso de que se necesiten.

- Oil manager: Se utiliza para ingresar datos de ensayos de aceites en base a datos de bulto y el tipo de caracterización a utilizar (TBP, Destilación ASTM D1160).
- RefSYS Assay Manager: Es una opción para ingresar datos de crudos y poder generar una caracterización según la composición indicada.
- Reactions: Se utiliza para describir la cinética de reacciones químicas a simular que no se encuentren previamente ingresadas en el programa.

Una vez que se han terminado de ingresar los datos necesarios en el “basis manager” se deberá pasar a la pantalla PFD del programa para continuar con la configuración.

En la pantalla PFD se debe hacer click en la pestaña “flowsheet” en el menú y a continuación otro click en la opción “RefSYS Operations...” para desplegar la paleta de opciones dentro de la cual está la unidad FCC a utilizar.

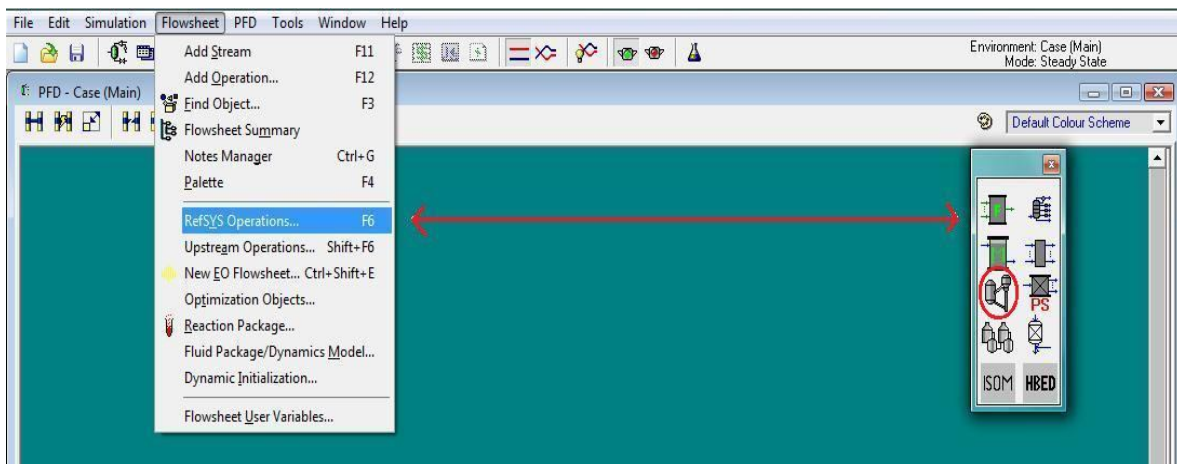


Figura 11: Pantalla de selección de operaciones de Refsys.

Al seleccionar la unidad FCC se nos presentará una nueva ventana con dos opciones para configurar la unidad, una proponiéndonos partir de un archivo ya existente en la biblioteca del programa o la opción de configurar desde cero nuestra propia unidad.



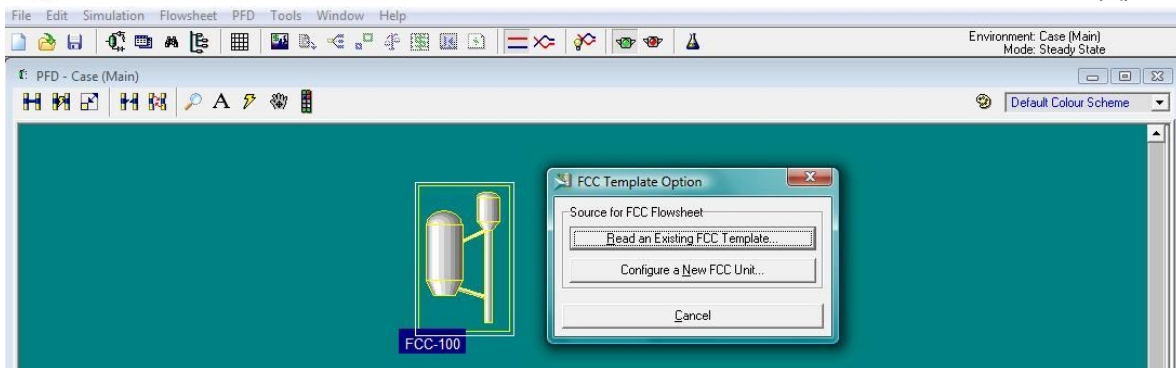


Figura 12: Pantalla de selección de la configuración de la unidad FCC en Refsys.

Eligiendo la opción para configurar una nueva unidad aparecerá una ventana donde se podrán ir colocando los datos a ingresar.

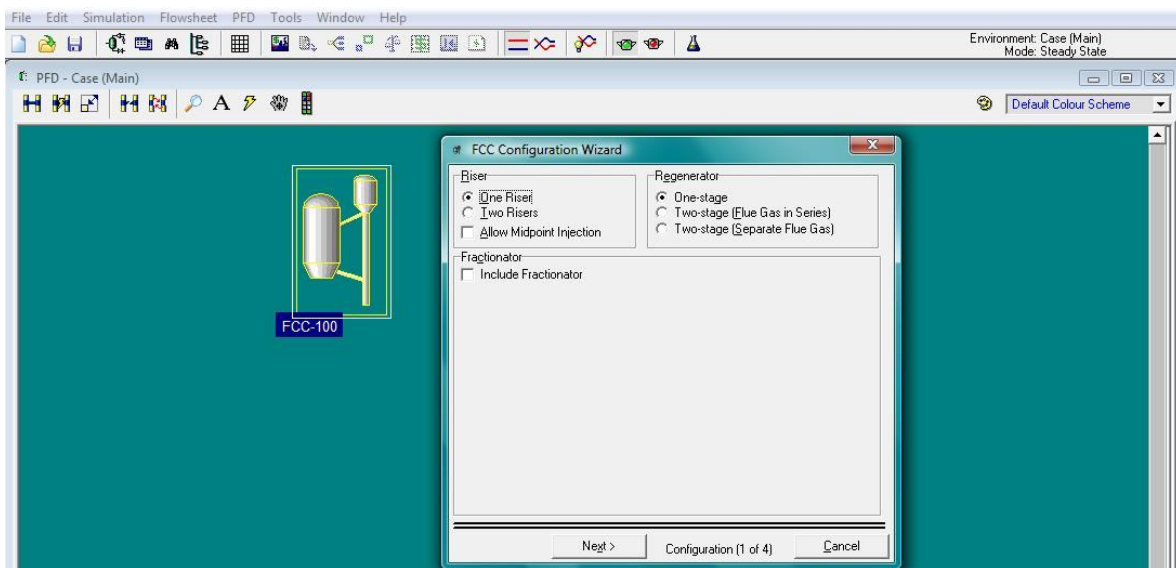


Figura 13: Pantalla de la selección del tipo de convertidor de la unidad FCC en Refsys.

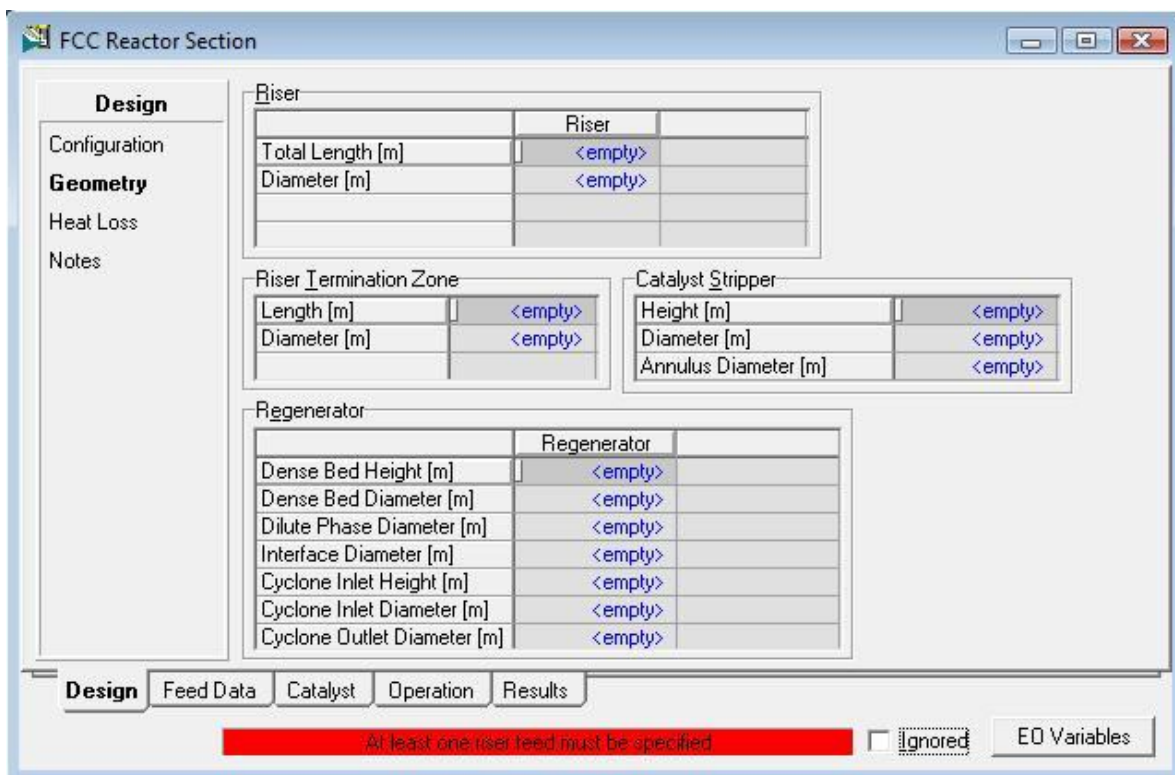
En esta pantalla se podrá seleccionar de forma general como se encuentra constituido el riser y regenerador de la unidad; al hacer click en la opción "next" la figura de la unidad quedará indicada en rojo. En la siguiente ventana se dará directamente click en la opción "close".

Una vez hecho esto, al hacer doble click sobre el dibujo de la unidad se abrirá la ventana de datos y se deberá hacer click en el botón "FCC environment". Haciendo esto aparecerá de nuevo la

pantalla del entorno de simulación con la unidad en rojo pero con una corriente de salida unida a él; en este momento se hará doble click de nuevo en la imagen de la unidad con lo cual aparecerá la ventana en la que se ingresarán todos los datos.

En la primera pestaña de esta ventana llamada “design” hay dos apartados que deberán ser llenados, el de la geometría y especificaciones de la unidad, y el de pérdidas de calor.

Para los datos de dimensiones que solicita el programa se utilizaron datos de diseño obtenidos del manual de dicha unidad. Cabe señalar que en el caso del riser es recomendable ingresar estos datos en base al tiempo de residencia de los vapores más que al del diseño establecido, es por ello que los datos de dimensionamiento se ajustaron después durante la simulación para que el tiempo de residencia correspondiera al rango que se describe en el manual de operación de la unidad.



The screenshot shows the 'FCC Reactor Section' software window. The 'Design' tab is active, and the 'Geometry' section is selected in the left sidebar. The interface contains several data entry tables:

Riser	
Total Length [m]	<empty>
Diameter [m]	<empty>

Riser Termination Zone	
Length [m]	<empty>
Diameter [m]	<empty>

Catalyst Stripper	
Height [m]	<empty>
Diameter [m]	<empty>
Annulus Diameter [m]	<empty>

Regenerator	
Dense Bed Height [m]	<empty>
Dense Bed Diameter [m]	<empty>
Dilute Phase Diameter [m]	<empty>
Interface Diameter [m]	<empty>
Cyclone Inlet Height [m]	<empty>
Cyclone Inlet Diameter [m]	<empty>
Cyclone Outlet Diameter [m]	<empty>

At the bottom of the window, there is a red error message: "At least one riser feed must be specified". To the right of this message is a checkbox labeled "Ignored" and a button labeled "EO Variables".

Figura 14: Pantalla de ingreso de datos de diseño de los equipos de la unidad FCC en Refsys.

En cuanto a los datos de pérdidas de calor, siguiendo la premisa de que la unidad opera en equilibrio térmico, es decir, las pérdidas de calor que sufre en algún equipo la unidad son sustituidas por alguna otra fuente manteniendo así una temperatura constante en los equipos, es por ello que se indica como valor de cero todas las casillas de datos en este apartado. Es necesario aclarar que esta premisa es teórica ya que en la realidad no se puede asegurar que no se presenten variaciones de temperatura durante la operación, sin embargo, puede asumirse que estas variaciones son lo suficientemente pequeñas y controladas en una operación normal como para asumir dicho equilibrio.

La segunda pestaña "feed data" corresponde a los datos del ensayo del crudo. Aquí primero en la opción "library" se selecciona el tipo de crudo a procesar; haciendo click en el botón "import..." el archivo a seleccionar será el correspondiente a un gasóleo de vacío. Este archivo contiene datos sobre los distintos cortes del crudo según el porcentaje que ocupa cada uno dentro de la mezcla; estos datos pueden ser modificados si se requiriera.

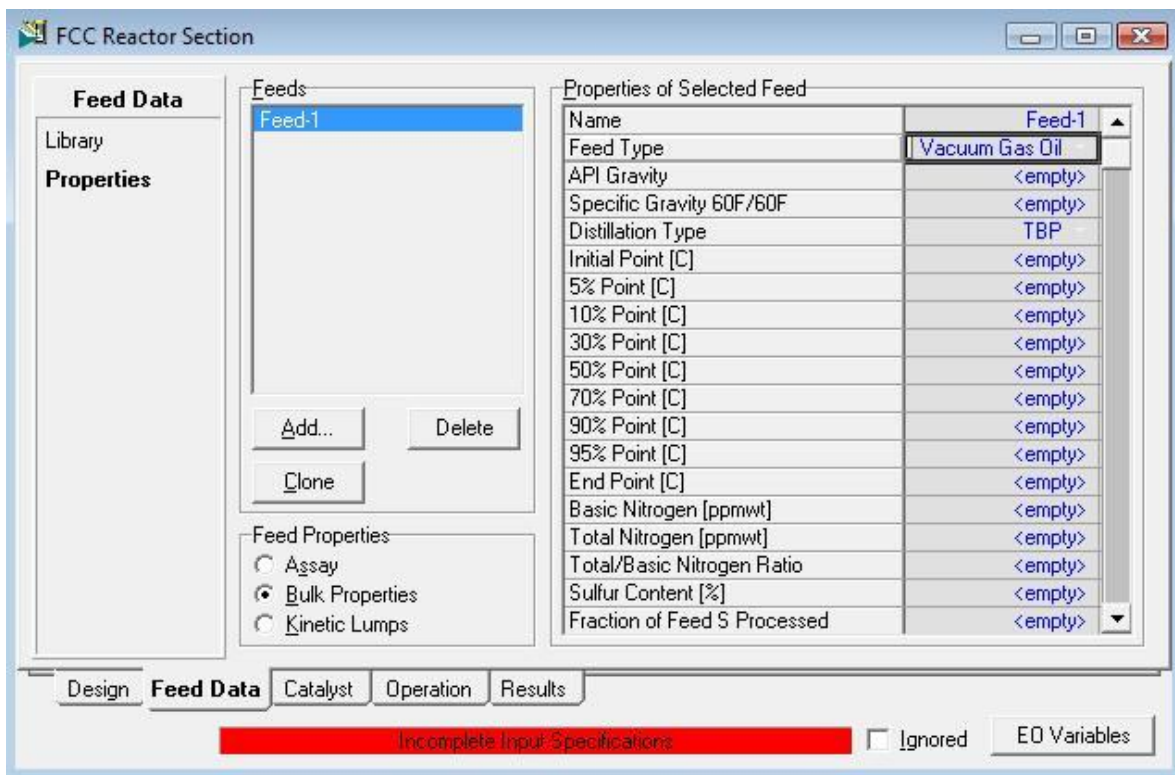
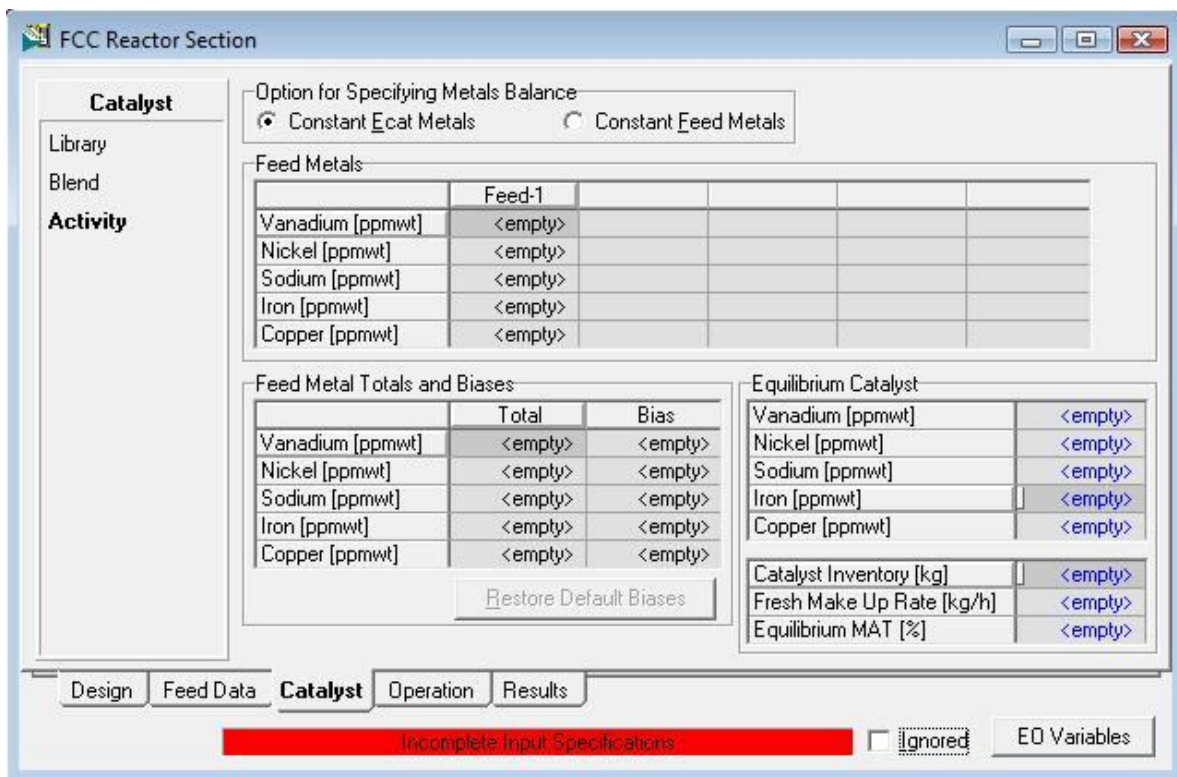


Figura 15: Pantalla de ingreso de las propiedades de la alimentación de la unidad FCC en Refsys.

Posteriormente en la opción "properties" se hace selección al botón "add" para agregar la corriente de entrada a la unidad FCC. En esta opción es donde se agregarán los datos correspondientes a la caracterización del crudo (grados API, gravedad específica, tipo de destilación, etc.), para este caso los datos fueron obtenidos del manual de operación de la unidad FCC de Tula.

En Pemex suelen utilizarse catalizadores desarrollados por el Instituto Mexicano del Petróleo, sin embargo, por falta de detalles acerca de las características específicas del catalizador para esta simulación se decidió utilizar el catalizador A/F-3 de la biblioteca del programa el cual se añade en la tercera pestaña de "catalyst" de forma similar a como se seleccionaron los datos del tipo de crudo en la primera pestaña. Esta selección se tomó con base a otros ejemplos de simulaciones en la biblioteca del propio programa. Una vez hecho esto se ingresan los datos del catalizador en las opciones de "blend" y "activity"; estos datos se obtuvieron del manual de operación de la unidad FCC.



**FCC Reactor Section**

**Catalyst**

Library  
Blend  
**Activity**

Option for Specifying Metals Balance  
 Constant Ecat Metals     Constant Feed Metals

Feed Metals

	Feed-1			
Vanadium [ppmwt]	<empty>			
Nickel [ppmwt]	<empty>			
Sodium [ppmwt]	<empty>			
Iron [ppmwt]	<empty>			
Copper [ppmwt]	<empty>			

Feed Metal Totals and Biases

	Total	Bias
Vanadium [ppmwt]	<empty>	<empty>
Nickel [ppmwt]	<empty>	<empty>
Sodium [ppmwt]	<empty>	<empty>
Iron [ppmwt]	<empty>	<empty>
Copper [ppmwt]	<empty>	<empty>

Equilibrium Catalyst

Vanadium [ppmwt]	<empty>
Nickel [ppmwt]	<empty>
Sodium [ppmwt]	<empty>
Iron [ppmwt]	<empty>
Copper [ppmwt]	<empty>
Catalyst Inventory [kg]	<empty>
Fresh Make Up Rate [kg/h]	<empty>
Equilibrium MAT [%]	<empty>

Restore Default Biases

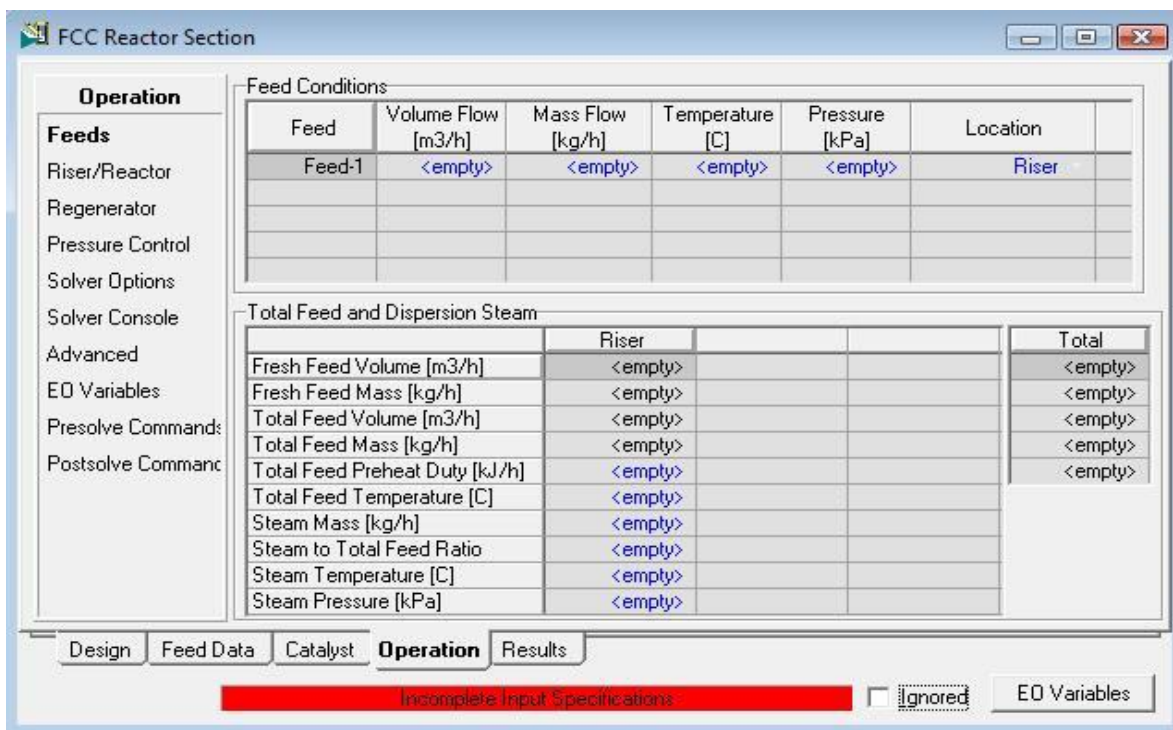
Design    Feed Data    **Catalyst**    Operation    Results

Incomplete Input Specifications     ignored    EO Variables

Figura 16: Pantalla de ingreso de datos del catalizador de la unidad FCC en Refsys.

Por último, dentro de la pestaña “operation” se registran los datos correspondientes a la operación del convertidor en cada una de las opciones que presenta. Las opciones de resolución por iteración y la tolerancia de la convergencia de los resultados calculados también pueden ser ajustadas dentro de las opciones de esta pestaña.

Cuando todos los datos necesarios se encuentren registrados la banda roja de la parte inferior de la ventana se tornará verde indicando que la simulación encontró resultados convergentes, o en su caso contrario, amarilla si los resultados no fueron convergentes, con lo que deberá buscarse el problema, revisar los datos y corregir la simulación.



**FCC Reactor Section**

**Operation**

**Feeds**

- Riser/Reactor
- Regenerator
- Pressure Control
- Solver Options
- Solver Console
- Advanced
- EO Variables
- Presolve Commands
- Postsolve Commands

**Feed Conditions**

Feed	Volume Flow [m3/h]	Mass Flow [kg/h]	Temperature [C]	Pressure [kPa]	Location
Feed-1	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	Riser

**Total Feed and Dispersion Steam**

	Riser		Total
Fresh Feed Volume [m3/h]	<empty>		<empty>
Fresh Feed Mass [kg/h]	<empty>		<empty>
Total Feed Volume [m3/h]	<empty>		<empty>
Total Feed Mass [kg/h]	<empty>		<empty>
Total Feed Preheat Duty [kJ/h]	<empty>		<empty>
Total Feed Temperature [C]	<empty>		
Steam Mass [kg/h]	<empty>		
Steam to Total Feed Ratio	<empty>		
Steam Temperature [C]	<empty>		
Steam Pressure [kPa]	<empty>		

Design | Feed Data | Catalyst | **Operation** | Results

Incomplete Input Specifications  Ignored EO Variables

Figura 17: Pantalla de ingreso de datos de la operación de la unidad FCC en Refsys.



## SIMULACIÓN

Es necesario mencionar que al no contar con algunos de los datos necesarios para completar la simulación, sobre todo datos del diseño geométrico y del catalizador, se procedió a ingresar valores similares obtenidos de la literatura y variarlos de tal forma que los resultados obtenidos fueran los más cercanos posibles a los datos de operación real de la unidad FCC (1) (12). A continuación se presenta un listado de los datos finales utilizados para la simulación (7):

Tipo	Gasóleo de Vacío
Flujo (m <sup>3</sup> /h)	265.800
Temperatura (°C)	177
Presión (kPa)	237.900
Grados API	19.700
Tipo de destilación	D1160
Punto inicial (°C)	344
Punto a 5% (°C)	356
Punto a 10% (°C)	369
Punto a 30% (°C)	390
Punto a 50% (°C)	419
Punto a 70% (°C)	455
Punto a 90% (°C)	494
Punto a 95% (°C)	504
Punto Final (°C)	546
Fracción de azufre en alimentación procesado	0.500
Residuo de Carbón Ramsbottom (%)	1.130
Contenido de azufre (%)	2.400
Contenido de vanadio (ppm)	4.360
Contenido de níquel (ppm)	1.290
Contenido de sodio (ppm)	2.110
Contenido de hierro (ppm)	0.140
Contenido de cobre (ppm)	0.180

Tabla 5: Datos de la corriente de alimentación para la simulación.



Catalizador	A/F-3
Contenido de aditivo ZSM-5	0.00
Capacidad calorífica del catalizador (kJ/kg°C)	1.10
Capacidad calorífica del coque (kJ/kg°C)	1.67
Vanadio en catalizador de equilibrio (ppm)	750
Níquel en catalizador de equilibrio (ppm)	500
Sodio en catalizador de equilibrio (ppm)	2030
Hierro en catalizador de equilibrio (ppm)	1800
Cobre en catalizador de equilibrio (ppm)	20
Inventario de catalizador (toneladas)	221
Catalizador fresco de reposición (ton/día)	6.4

Tabla 6: Datos del catalizador para la simulación.

Flujo de vapor de dispersión (kg/h)	9888
Temperatura del vapor de dispersión (°C)	271
Presión del vapor de dispersión (kPa)	1897
Temperatura a la salida del riser (°C)	521
Flujo de gas de aireación (kg/h)	1165
Temperatura del gas de aireación (°C)	26.670
Presión de gas de aireación (kPa)	151.700
Flujo de vapor de agotamiento (kg/h)	4083
Temperatura de vapor de agotamiento (°C)	271
Presión de vapor de agotamiento (kPa)	1897
Oxígeno en gas de combustión seco (%)	1.5
Flujo de aire húmedo al regenerador (kg/h)	193000
Flujo de oxígeno de enriquecimiento (kg/h)	4200
Presión del oxígeno de enriquecimiento (kPa)	300
Temperatura del oxígeno de enriquecimiento (°C)	100
Flujo de agua al quench (kg/h)	0.00
Temperatura de descarga del soplador de aire (°C)	380

Densidad de bulto de la cama densa del regenerador (kg/m <sup>3</sup> )	400
Presión del reactor (kPa)	206.800
Presión del regenerador (kPa)	275.800
Temperatura ambiente (°C)	25
Presión ambiental (kPa)	101
Humedad relativa ambiental (%)	70

Tabla 7: Datos de operación para la simulación.

Altura del riser (m)	28
Diámetro del riser (m)	1.4
Longitud de la zona de terminación del riser (m)	5.5
Diámetro de la zona de terminación del riser (m)	4.5
Altura del agotador (m)	8
Diámetro del agotador (m)	2
Anillo del agotador (m)	1
Altura de la fase densa del regenerador (m)	4
Diámetro de la fase densa del regenerador (m)	13
Diámetro de la fase diluida del regenerador (m)	13
Diámetro de la interfase (m)	13
Altura de la entrada a los ciclones del regenerador (m)	6.2
Diámetro de la entrada de los ciclones del regenerador (m)	2.5
Diámetro de la salida de los ciclones del regenerador (m)	1

Tabla 8: Datos de diseño del equipo para la simulación.





**RESULTADOS Y ANÁLISIS**

Mezcla del catalizador			
	Zeolita	Alúmina	Tierras raras
A/F-3	26.69	37.20	0.037

Tabla 9: Resultados para el catalizador.

Operación		
	Datos de simulación	Datos de operación
Gravedad específica de la alimentación	0.9358	0.936
Vapor de dispersión en la alimentación (% peso)	4.04	4.00
Tiempo de residencia del vapor en el riser (s)	1.85	1 a 2
Tiempo de residencia del vapor en la fase diluida del reactor (s)	2.99	-----
Tiempo de residencia de sólidos en el riser (s)	1.88	-----
Tiempo de residencia de sólidos en la fase diluida del reactor (s)	3.38	-----
Velocidad superficial en la entrada del riser (m/s)	8.474	-----
Velocidad superficial en la salida del riser (m/s)	17.89	-----
Temperatura del regenerador (°C)	703.1	703
Temperatura de los gases de combustión en el regenerador (°C)	709	708.9
Microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio (%)	68.80	69
Relación catalizador/carga (peso/peso)	8.232	6.6
Coque en catalizador regenerado (% peso)	0.05	0.05
Coque en catalizador gastado (% peso)	0.78	-----
Total de metales en el catalizador de equilibrio (ppm)	5100	5100
Flujo de catalizador de la fase diluida a los ciclones del regenerador (kg/h)	466600	-----
Emisiones de CO <sub>2</sub> en el gas de combustión (kg/h)	48520	-----
Emisiones de SO <sub>x</sub> en el gas de combustión (kg/h)	690.6	-----
Hidrógeno en el coque de producto (% peso)	7.92	-----
Calor de combustión del coque (kJ/kg)	38470	-----



Calor de craqueo aparente mediante balance de calor (kJ/kg)	512.3	----
Calor de craqueo teórico (kJ/kg)	484.9	----

Tabla 10: Comparación de los resultados de operación de la simulación y resultados teóricos esperados (7).

Distribución del azufre total en los productos (%)	
H <sub>2</sub> S	52.26
Nafta	6.12
LCO	16.68
Fondos	19.14
Coque	5.80

Tabla 11: Distribución de azufre en productos.

Distribución de las fuentes de generación de coque en el proceso (%)	
Alimentación	14.10
Reacción	62.37
Metales en el catalizador	2.13
Agotador del catalizador	21.40

Tabla 12: Distribución de las fuentes de generación de coque en el proceso.

	Flujo volumétrico (m <sup>3</sup> /h)	Flujo másico (kg/h)	Porcentaje en volumen	Porcentaje en peso
H <sub>2</sub> S	----	3316.2830	----	1.3332
Gas combustible	10.1826	8679.6924	3.8230	3.4894
Propano	9.9439	5051.5495	3.7334	2.0308
Propileno	22.9401	11903.8569	8.6128	4.7855
nButano	6.5388	3820.1612	2.4549	1.5358
iButano	13.6742	7713.4977	5.1339	3.1009
Butenos	27.3801	16674.9163	10.2797	6.7035
Nafta	145.2021	111125.5799	54.5155	44.6740
LCO	42.6013	38411.6179	15.9945	15.4420



Fondos	24.4340	26963.1396	9.1736	10.8396
Coque	-----	15087.3614	-----	6.0653
Total	292.7144	248747.6559	109.8984	100.0000
*Conversión	-----	-----	74.8319	73.7184

\*Conversión = 100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos

Tabla 13: Flujos y porcentajes obtenidos para los distintos cortes de productos en la simulación.

	Naftas ligeras	Naftas pesadas	LCO	Fondos
Grados API	62.59	38.36	26.57	-----
Gravedad específica	0.7290	0.8330	0.8951	-----
% de azufre	0.17	0.52	2.59	4.24
RON	94.20	91.29	-----	-----
MON	84.09	79.52	-----	-----
(R+M)/2	89.15	85.41	-----	-----
Parafinas (%)	32.63	11.07	2.56	0.00
Olefinas (%)	50.25	17.00	0.00	0.00
Naftenos (%)	9.25	8.17	4.17	0.06
Aromáticos (%)	7.87	63.76	93.28	100
Carbón Conradson (%)	0.01	0.05	0.10	0.38

Tabla 14: Composición en porcentaje y calidad de naftas y cortes pesados obtenidos en la simulación.

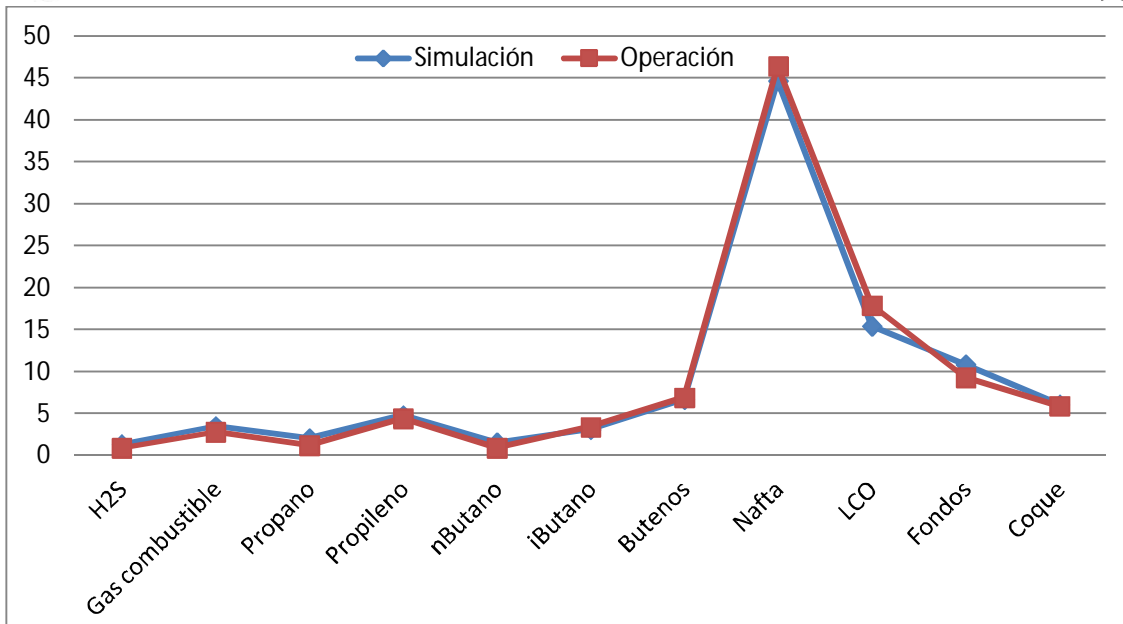
Como puede apreciarse, conforme aumentan los grados API de una fracción la composición de componentes ligeros también aumenta mientras que los componentes pesados disminuyen. De la misma manera también se puede observar que el porcentaje de azufre aumenta entre más pesada es la fracción.

	Operación (7)	Simulación	% de error	Literatura 1 (1)	% de error	Literatura 2 (12)	% de error
H <sub>2</sub> S	0.9	1.3332	0.4813	2.1	0.8035	0.16	0.8222
Gas combustible	2.8	3.4894	0.2462			3.19	0.1393
Propano	1.2	2.0308	0.6923	15.2	0.9047	2.35	0.9583
Propileno	4.4	4.7855	0.0876			4.66	0.0591
nButano	0.9	1.5358	0.7064			1.74	0.9333
iButano	3.4	3.1009	0.0880			2.47	0.2735
Butenos	6.9	6.7035	0.0285			3.90	0.4348
Nafta	46.4	44.6740	0.0372	46.2	0.0043	48.54	0.0461
LCO	17.9	15.4420	0.1373	16.3	0.0894	18.42	0.0291
Fondos	9.3	10.8396	0.1655	13.7	0.4731	10.43	0.1215
Coque	5.9	6.0653	0.0280	6.5	0.1017	4.14	0.2983
Conversión	72.8	73.7184	0.0126	70	0.0385	71.15	0.0227

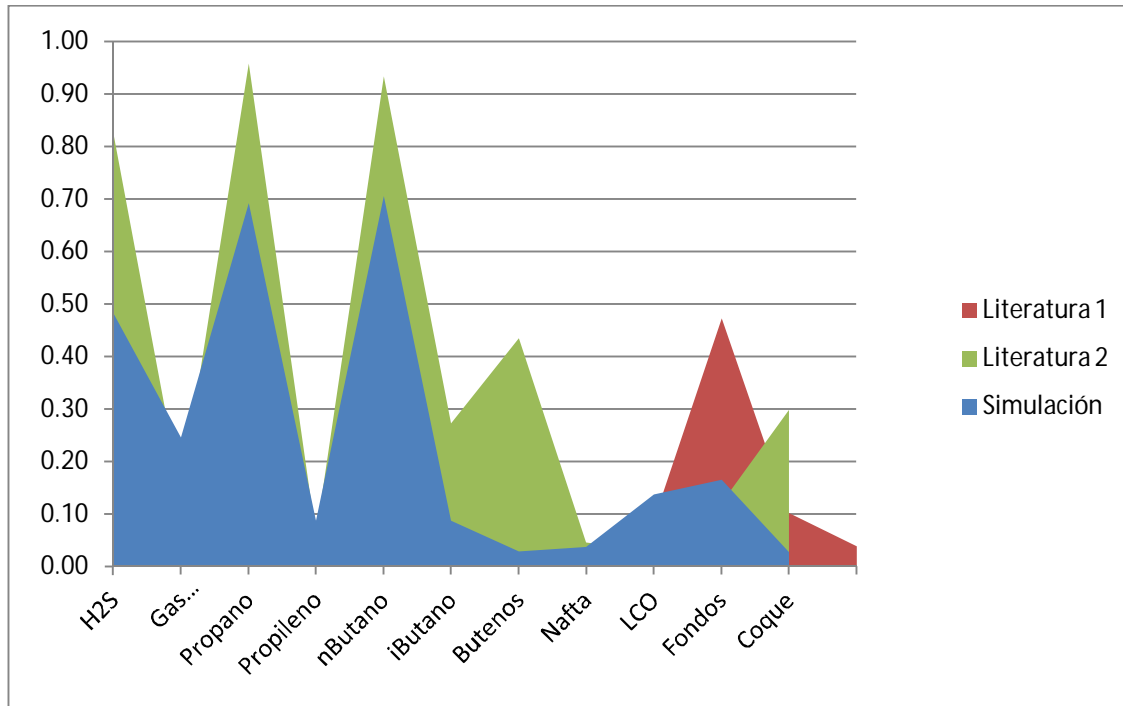
*Tabla 15: Comparación de porcentajes peso de los distintos cortes obtenidos en la simulación y los porcentajes peso esperados según la literatura.*

En cuanto a la composición de los productos obtenidos en la reacción puede observarse que el comportamiento que se sigue es muy similar al de operación manteniendo porcentajes muy similares.

Si se compara el porcentaje de error de los datos de la simulación y de la literatura respecto de los de operación queda en evidencia que la simulación presenta un error menor en la gran mayoría de los porcentajes calculados, sin embargo, todos están por debajo del 1% de error.



Gráfica 5: Comparación de los porcentajes peso de los productos obtenidos en la simulación contra los porcentajes peso de los productos de la operación real.



Gráfica 6: Comparación de los porcentajes de errores respecto de los datos de la operación real en los porcentajes peso de la literatura y la simulación.



Una vez concluida la simulación pueden obtenerse datos del comportamiento de la unidad cuando se modifican los valores de las variables ingresadas. A continuación se presentan algunos de los datos obtenidos más representativos del proceso al modificar alguna de las principales variables de operación siendo importante mencionar para la correcta interpretación en este caso que los demás valores ingresados al desarrollar la simulación permanecen con sus valores originales.

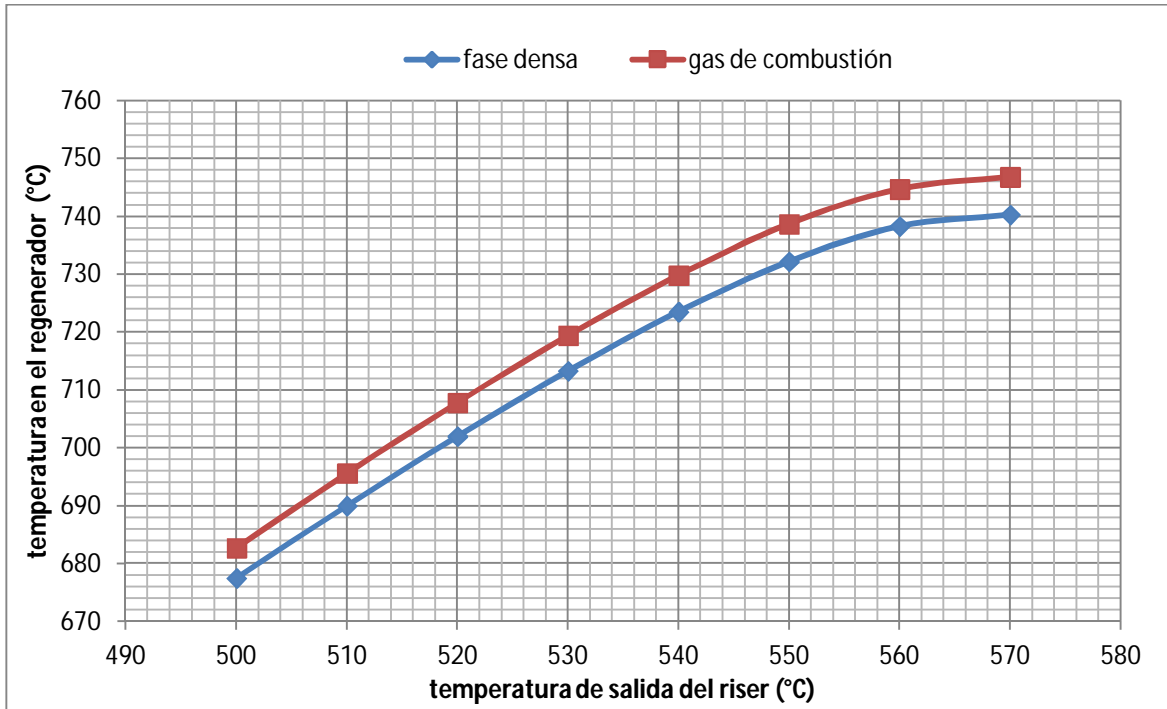
### ***Temperatura de salida del riser***

Para aumentar la temperatura de salida del riser se requiere un aumento del flujo de catalizador desde el regenerador y/o un aumento de la temperatura del regenerador para que el catalizador regenerado regrese al riser con una mayor carga térmica; en este caso la medida que toma el programa es la de aumentar el flujo de catalizador de regenerado al riser y disminuir el valor final de coque depositado con el que sale del regenerador, lo cual quiere decir que se modificaron las condiciones del regenerador de tal forma que se quemase más coque y por consecuencia aumentara la temperatura y se produjeran mayores emisiones de gases de combustión.

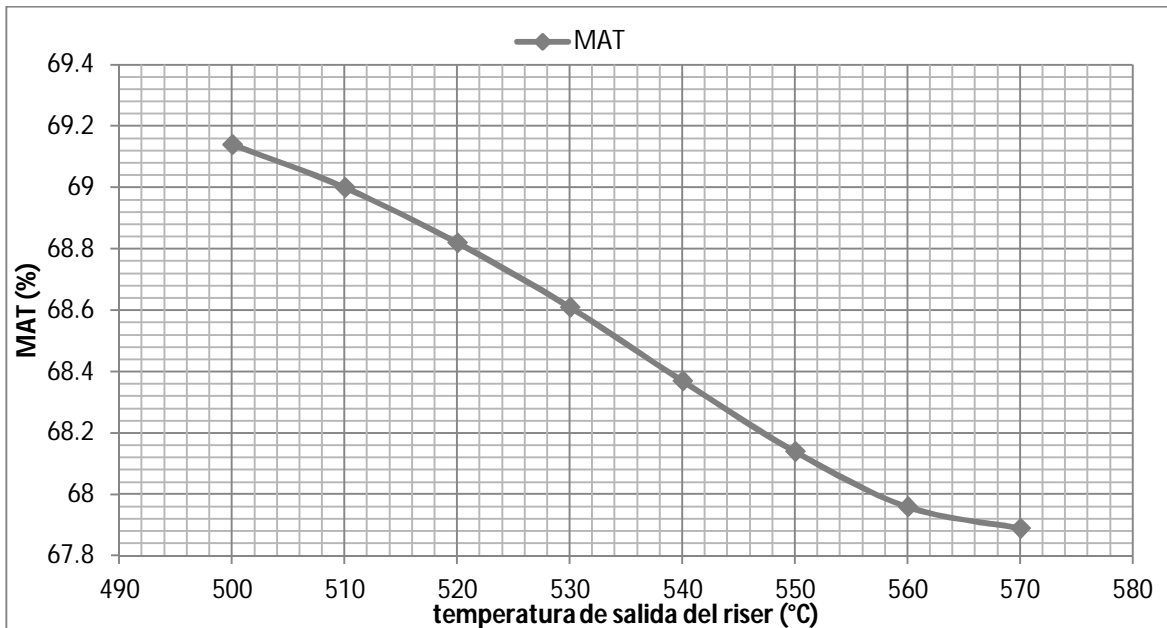
Al aumentar la temperatura en el riser aumenta la formación de componentes más ligeros como el gas combustible pues el craqueo que sufre el gasóleo es mayor. Como se puede apreciar las naftas sufren una reducción importante de su porcentaje en la mezcla mientras que los componentes pesados se craquean en menor medida evidenciando que las naftas son más fáciles de descomponer.

Otra consecuencia del aumento de la temperatura en el riser y el regenerador es la baja en la actividad del catalizador en equilibrio, sin embargo en este caso esta baja se ve sobrecompensada con la mayor cantidad de catalizador presente y el aumento del craqueo producido, generándose aún así un aumento en la conversión.

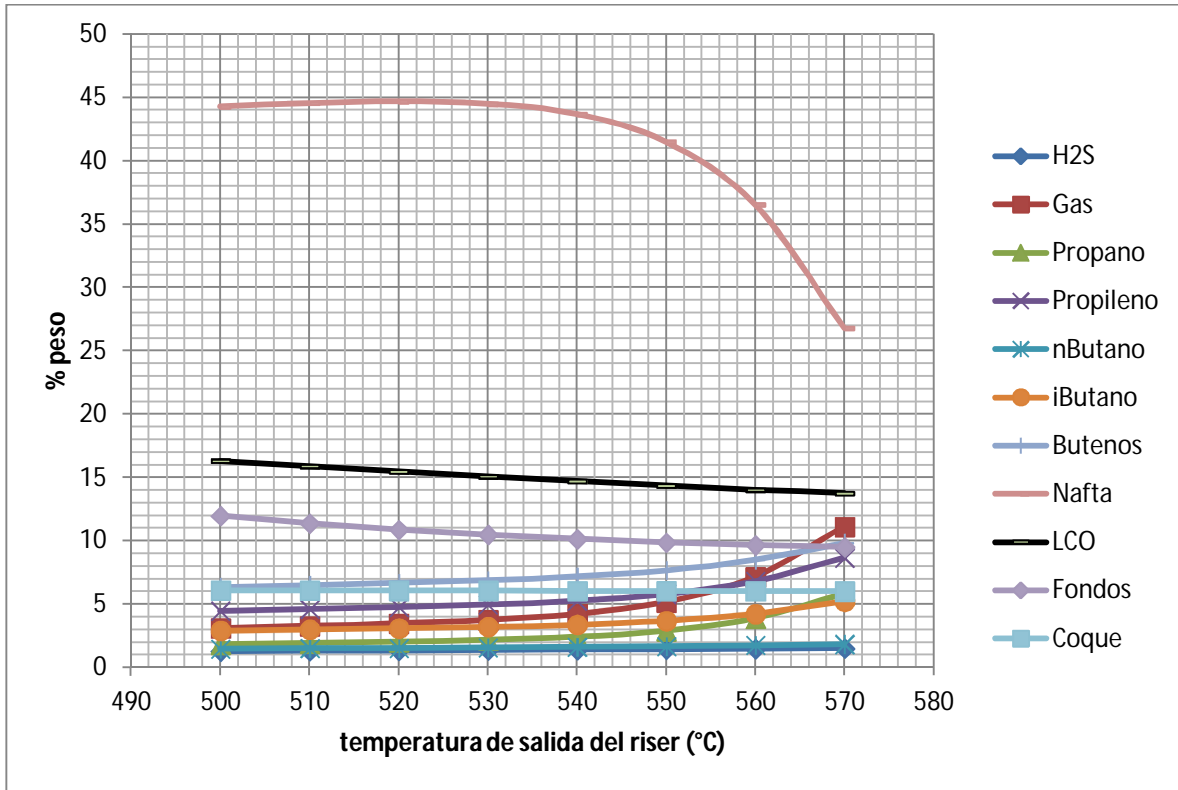
Es conveniente señalar que de seguir aumentando el valor de la temperatura de salida del riser el programa comienza a calcular flujos negativos, así que al menos en estas condiciones de simulación no es posible obtener datos a mayores temperaturas sin provocar un error en los cálculos.



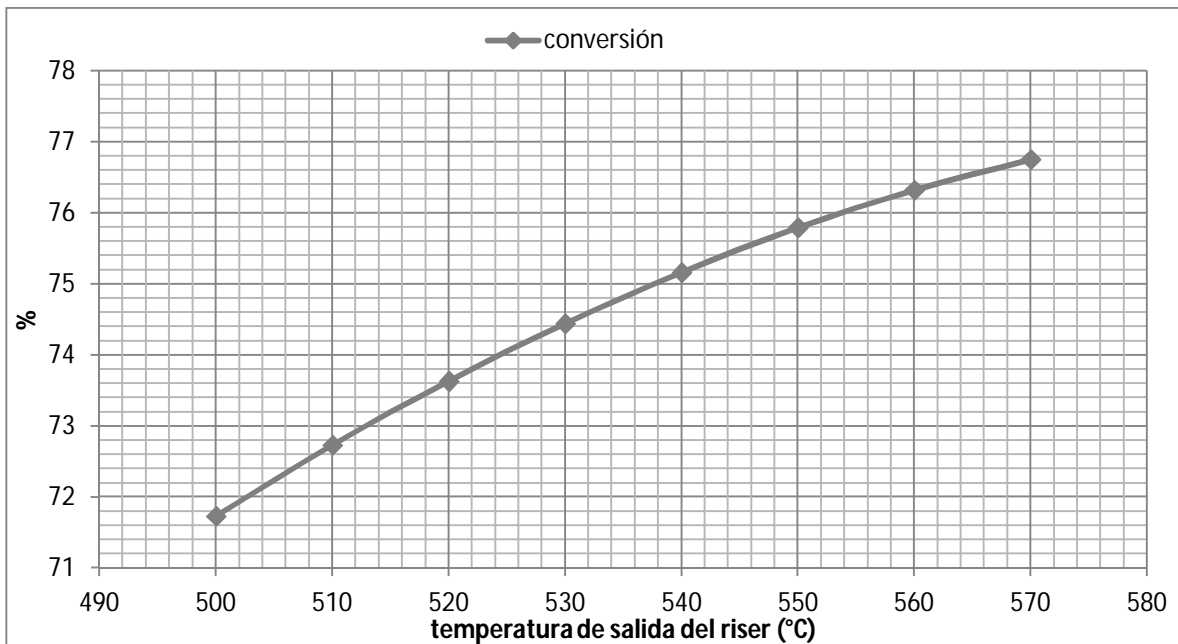
Gráfica 7: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs temperatura de salida del riser.



Gráfica 8: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs temperatura de salida del riser.



Gráfica 9: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs temperatura de salida del riser.



Gráfica 10: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO - porcentaje de fondos) vs temperatura de salida del riser.

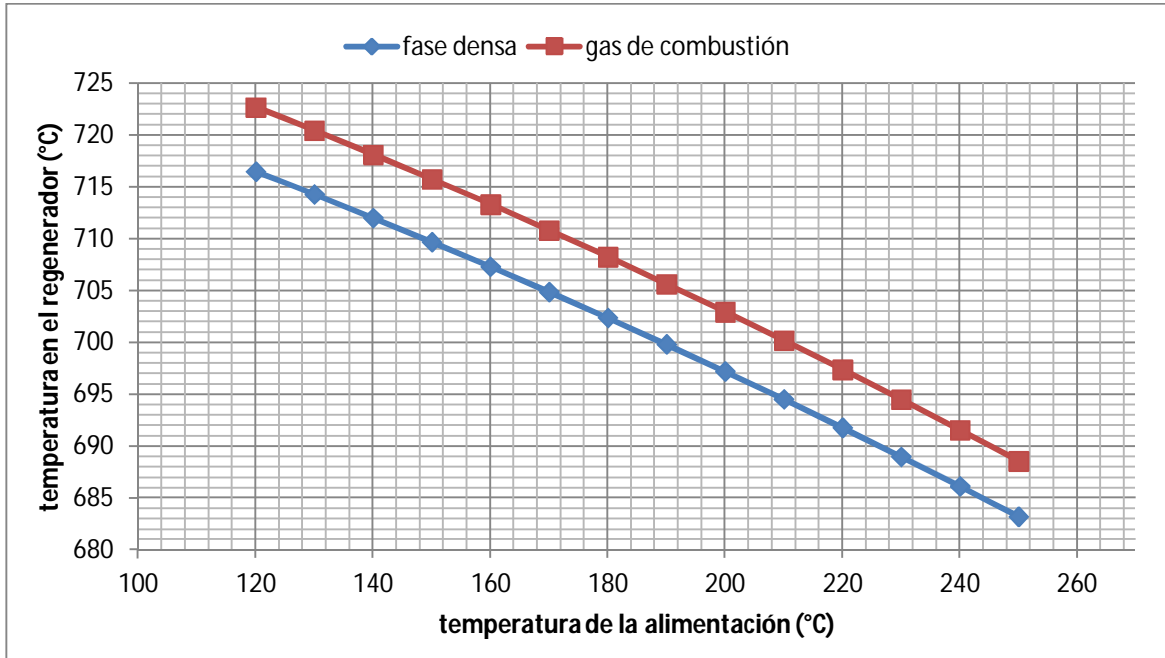


### Temperatura de la alimentación al entrar al riser

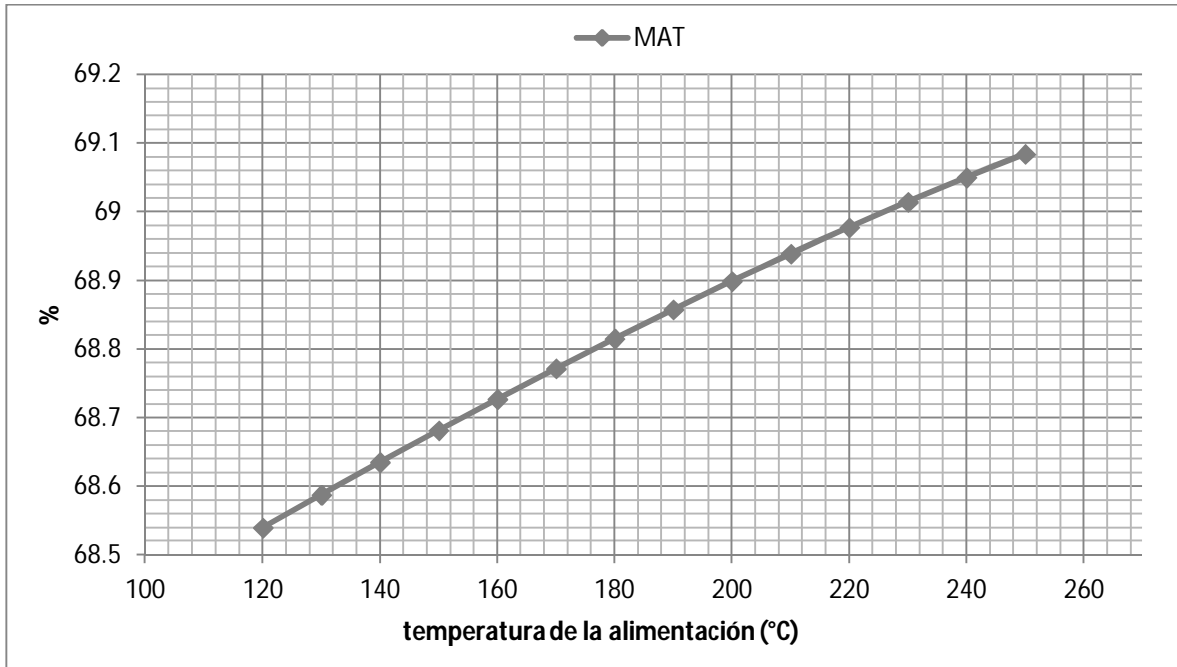
Al contrario del aumento de la temperatura de salida del riser, el cambio en la temperatura con la que ingresa la carga al riser significa la necesidad de una menor cantidad de catalizador regenerado circulante y por tanto una baja en la temperatura del regenerador y, posiblemente, un aumento en la cantidad de coque sin quemar. Para este caso lo que sucede en el programa es que efectivamente se reduce la cantidad de catalizador regenerado al riser mientras que la cantidad de coque depositado aumenta.

Aún con este aumento de coque en el catalizador regenerado la disminución en la temperatura es un poco más significativa por lo que la actividad del catalizador en equilibrio y la conversión aumentan levemente.

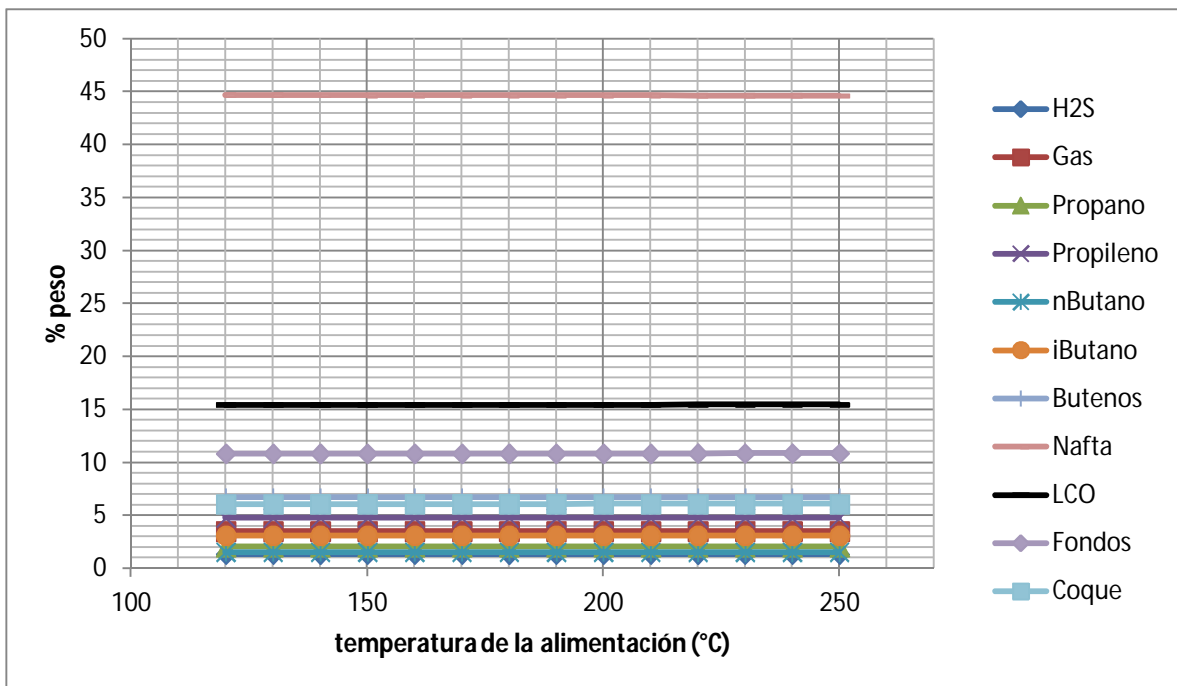
Los flujos de los productos no cambian significativamente ya que la disminución de catalizador se compensa con el aumento de la temperatura de entrada principalmente.



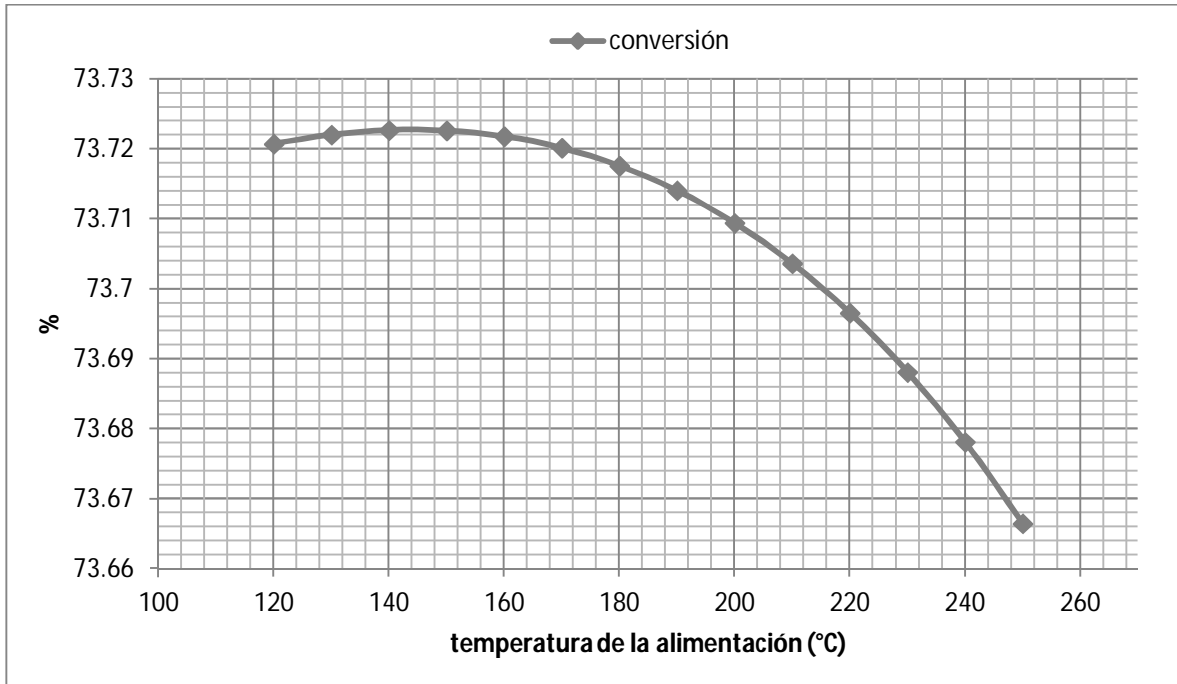
Gráfica 11: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs temperatura de la alimentación.



Gráfica 12: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs temperatura de la alimentación.



Gráfica 13: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs temperatura de la alimentación.

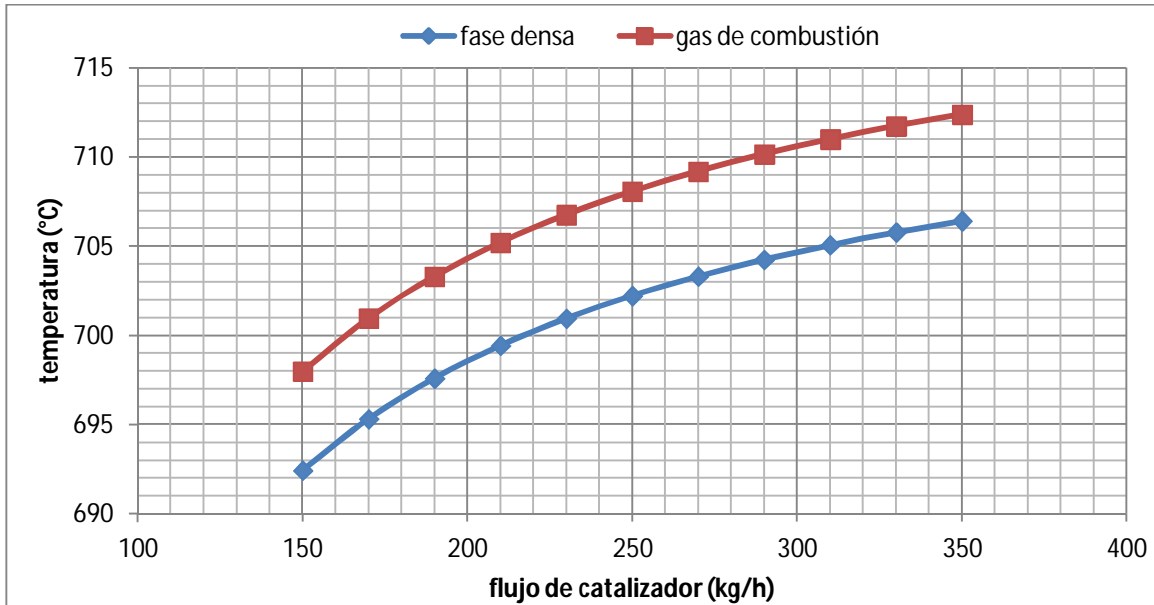


Gráfica 14: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs temperatura de la alimentación.

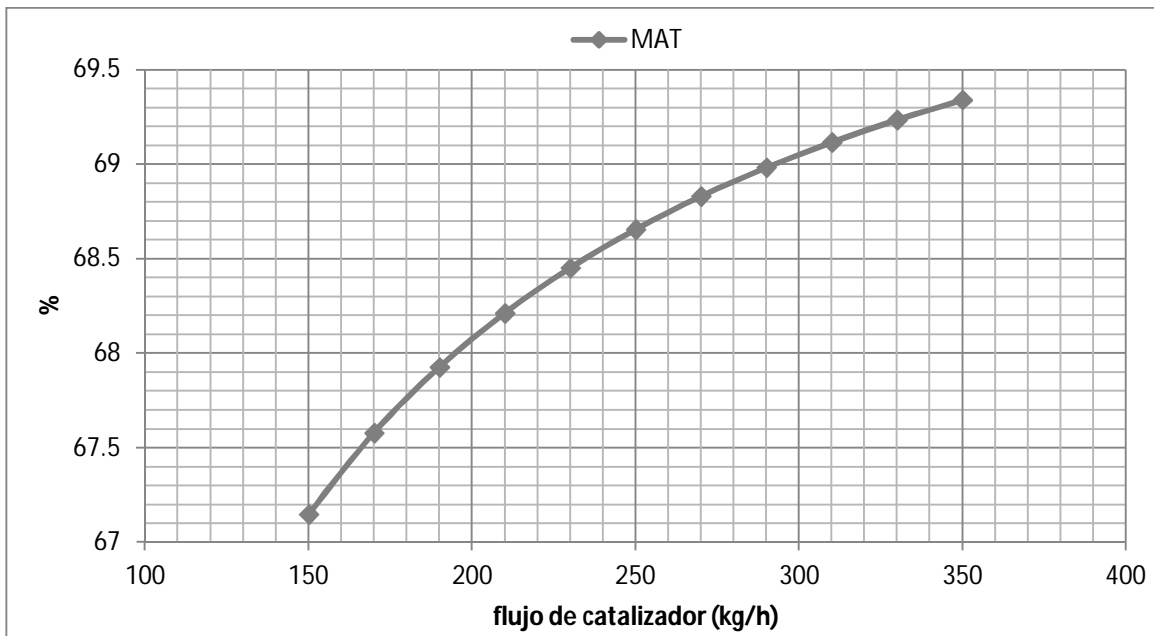
### **Flujo de catalizador fresco de reposición**

Agregar mayor cantidad de catalizador fresco en circulación aumentará en consecuencia la actividad del catalizador de equilibrio, este aumento en la actividad a su vez causará gradualmente una mayor conversión. Sin embargo este aumento de conversión se ve disminuido ya que el flujo de catalizador regenerado se ve reducido también, es decir, hay mayor actividad del catalizador en el riser pero menor cantidad de catalizador en circulación.

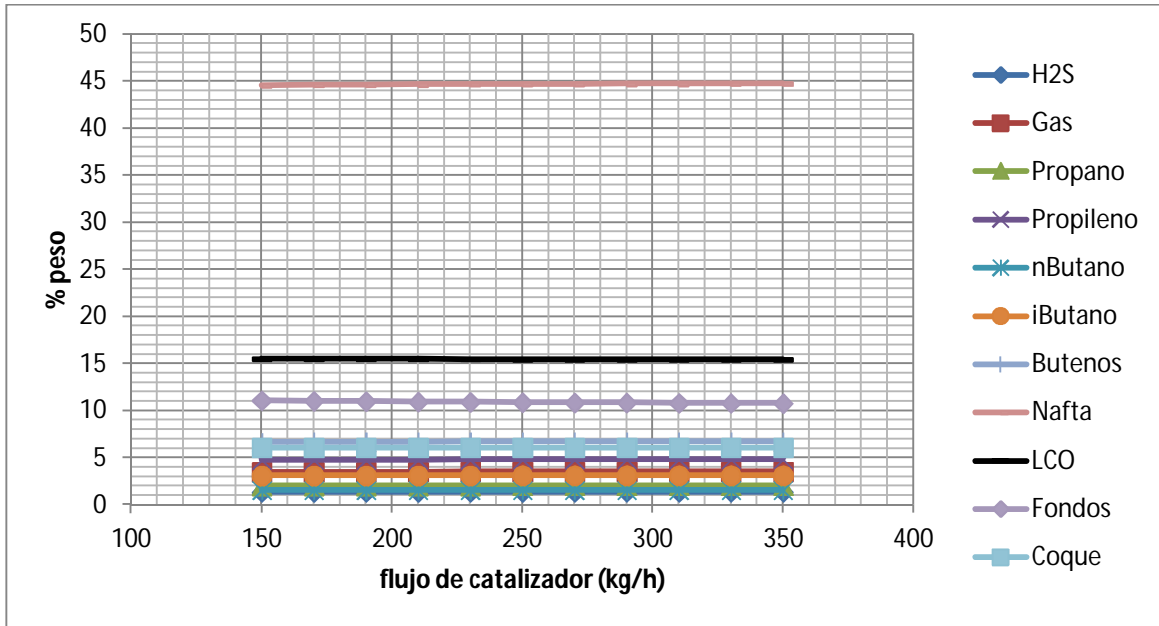
El balance material del catalizador y la alimentación genera una modificación del balance térmico que se necesita para llevar la carga a la temperatura requerida, esto se logra aumentando la temperatura del regenerador al reducir el valor asignado al enfriador de catalizador.



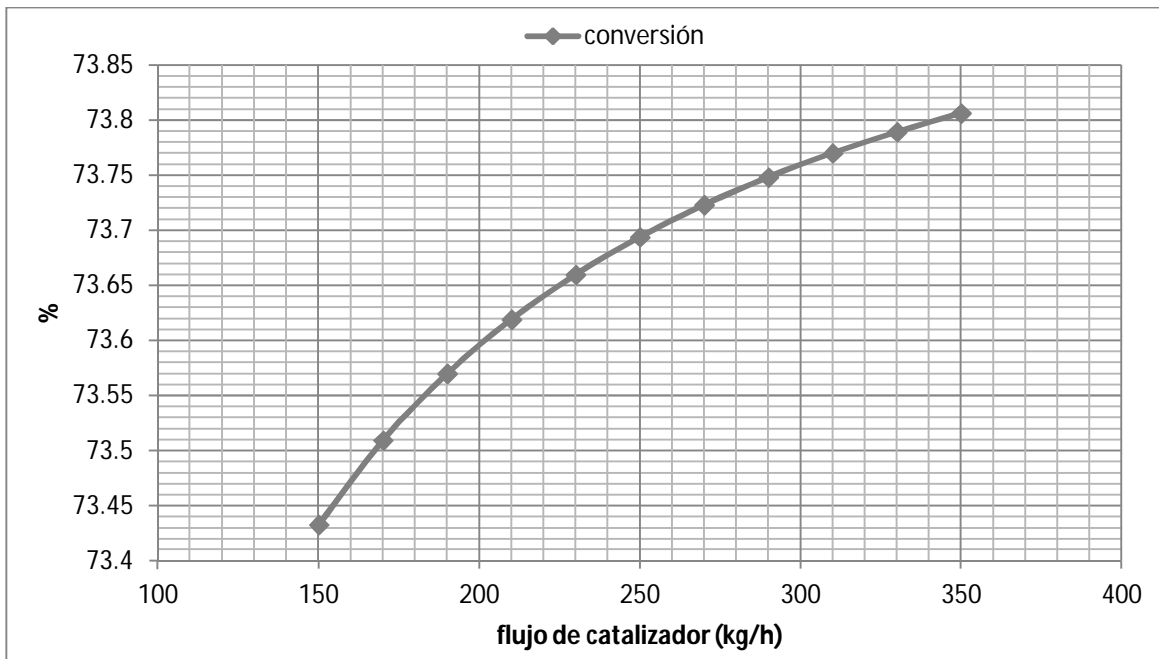
Gráfica 15: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de catalizador fresco de reposición.



Gráfica 16: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de catalizador fresco de reposición.



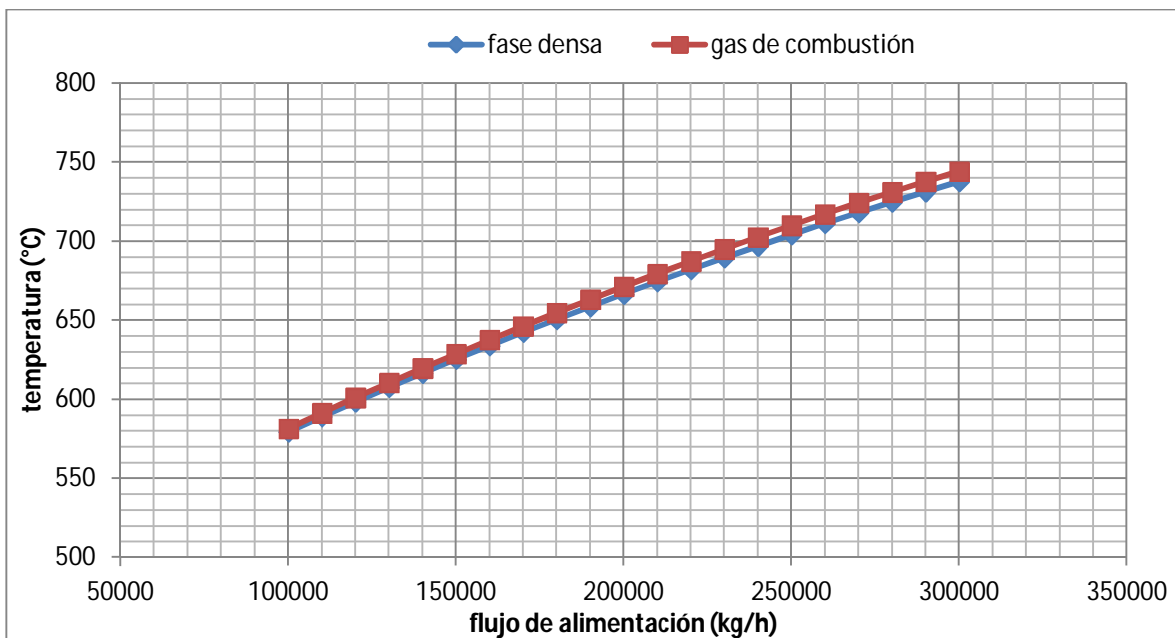
Gráfica 17: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de catalizador fresco de reposición.



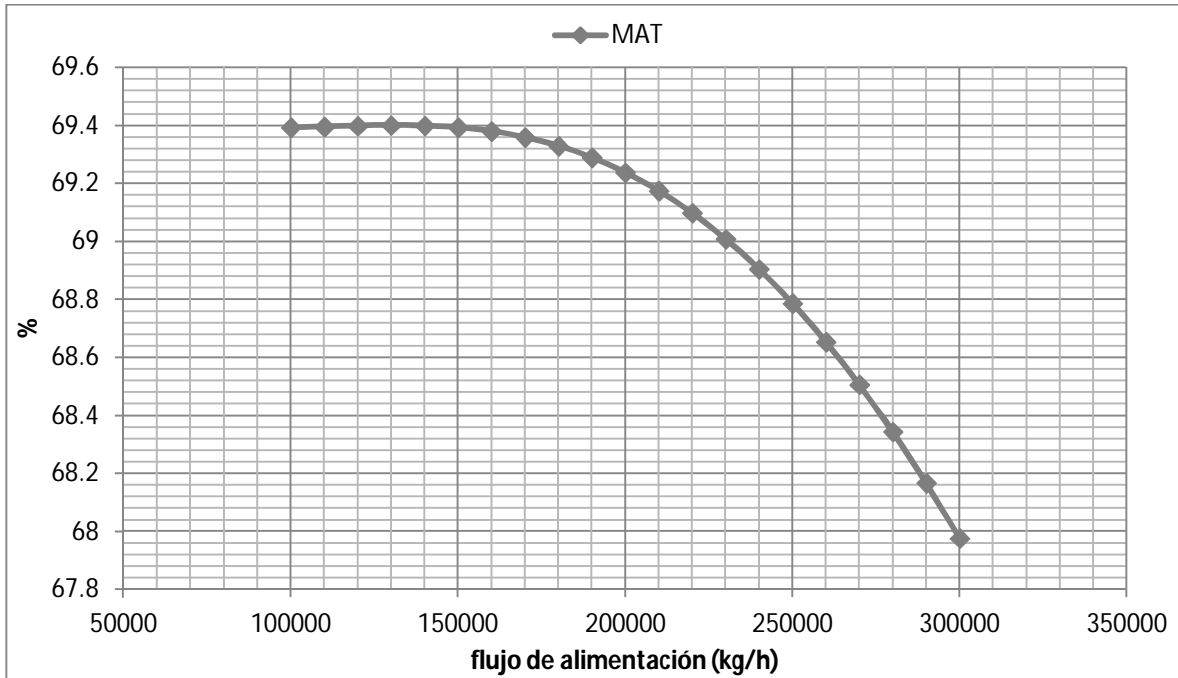
Gráfica 18: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO - porcentaje de fondos) vs flujo de catalizador fresco de reposición.

### Flujo de alimentación del gasóleo de vacío

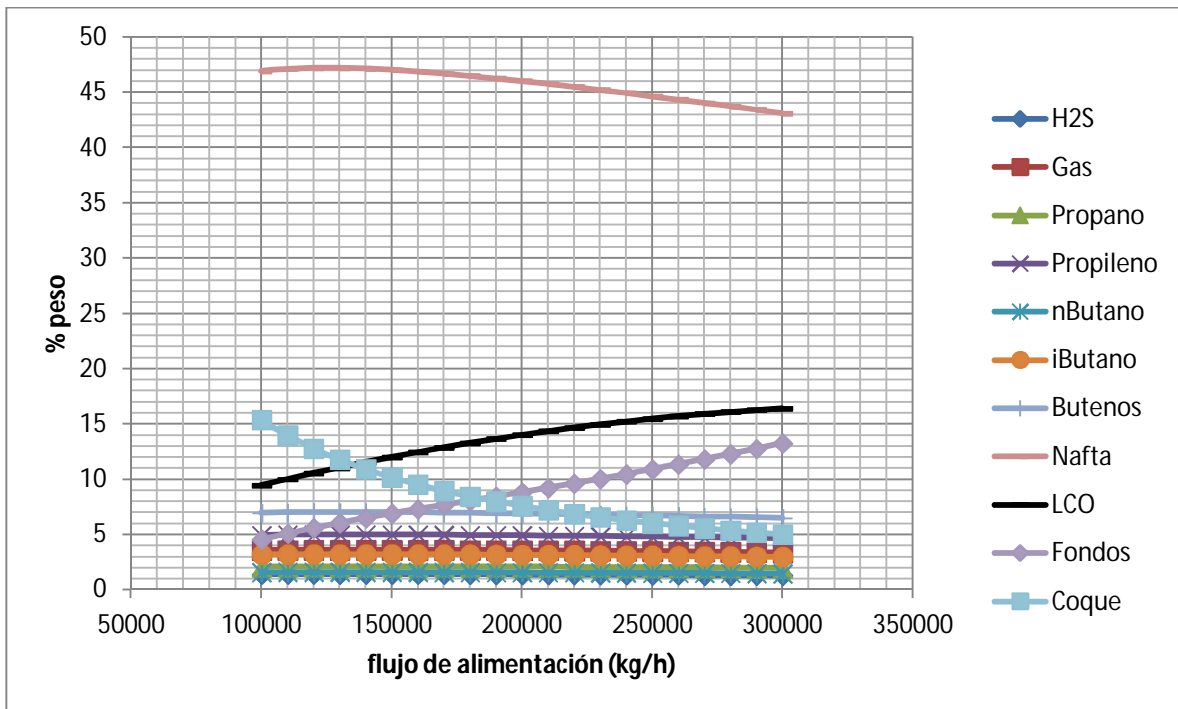
Cuando la carga al riser es aumentada se necesita más flujo de catalizador para llevar la carga a la temperatura final deseada o aumentar la temperatura del catalizador regenerado, en este caso el programa lo que hace es calcular la cantidad de calor removida con el enfriador de catalizador en el regenerador y realiza el ajuste del balance reduciendo la cantidad de calor removida para aumentar la temperatura y reduciendo la cantidad de catalizador regenerado recirculado para establecer el flujo adecuado necesario. Por esta razón se puede apreciar que la temperatura en el regenerador aumenta a pesar de que la cantidad de coque generada se reduce. Disminuir el catalizador regenerado también provoca que la fase densa en el regenerador se reduzca y por tanto aumente poco a poco la diferencia de temperatura entre la fase densa y los gases de combustión. Un efecto adverso de esa situación es que al disminuir la cantidad de catalizador y aumentar la carga, la cantidad de catalizador tarde o temprano será insuficiente en términos del balance de materia para realizar la reacción de craqueo, es por ello que se observa que la cantidad de LCO y fondos sin craquear aumenta y el rendimiento de la nafta se reduce provocando una disminución en la conversión obtenida, además de que al ser excesiva la carga, la actividad del catalizador empieza a disminuir también.



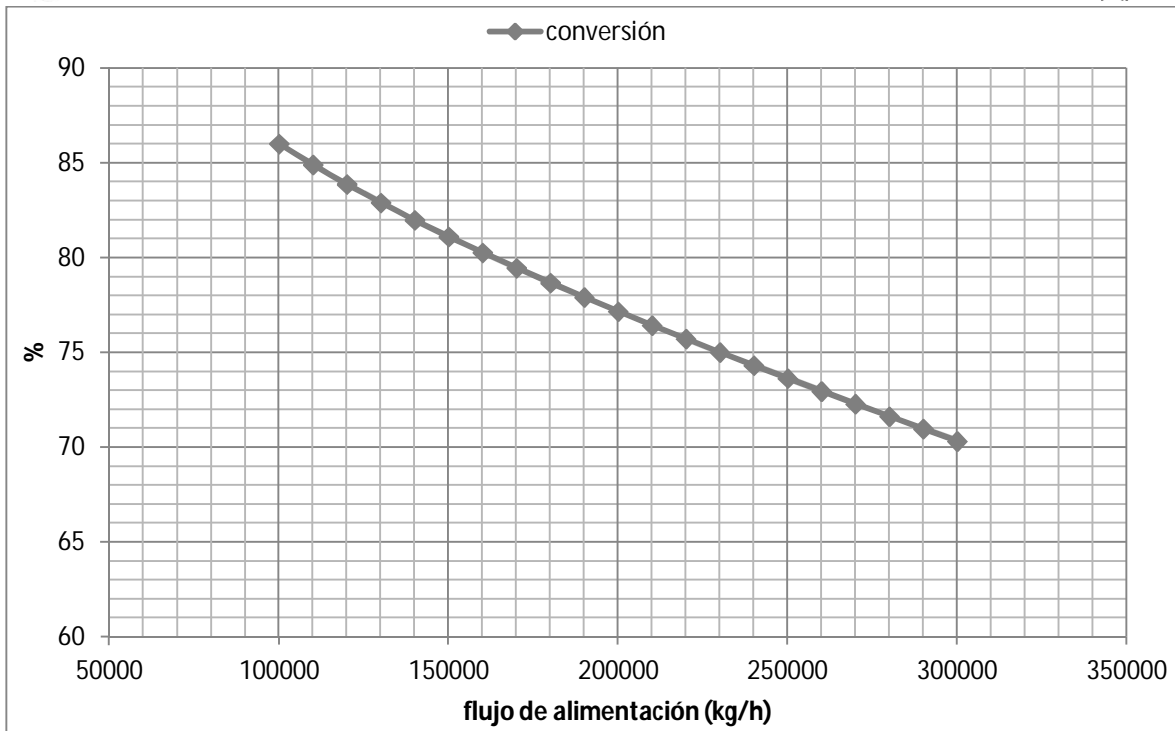
Gráfica 19: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de la alimentación al riser.



Gráfica 20: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de la alimentación al riser.



Gráfica 21: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de la alimentación al riser.

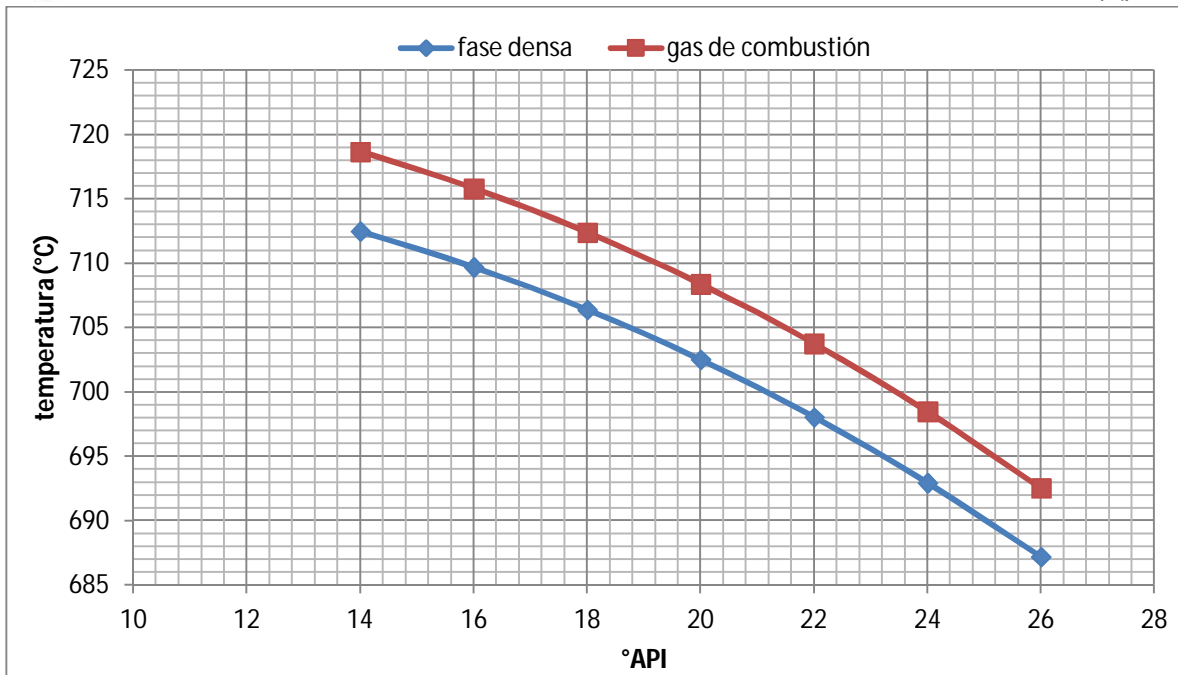


Gráfica 22: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs flujo de la alimentación al riser.

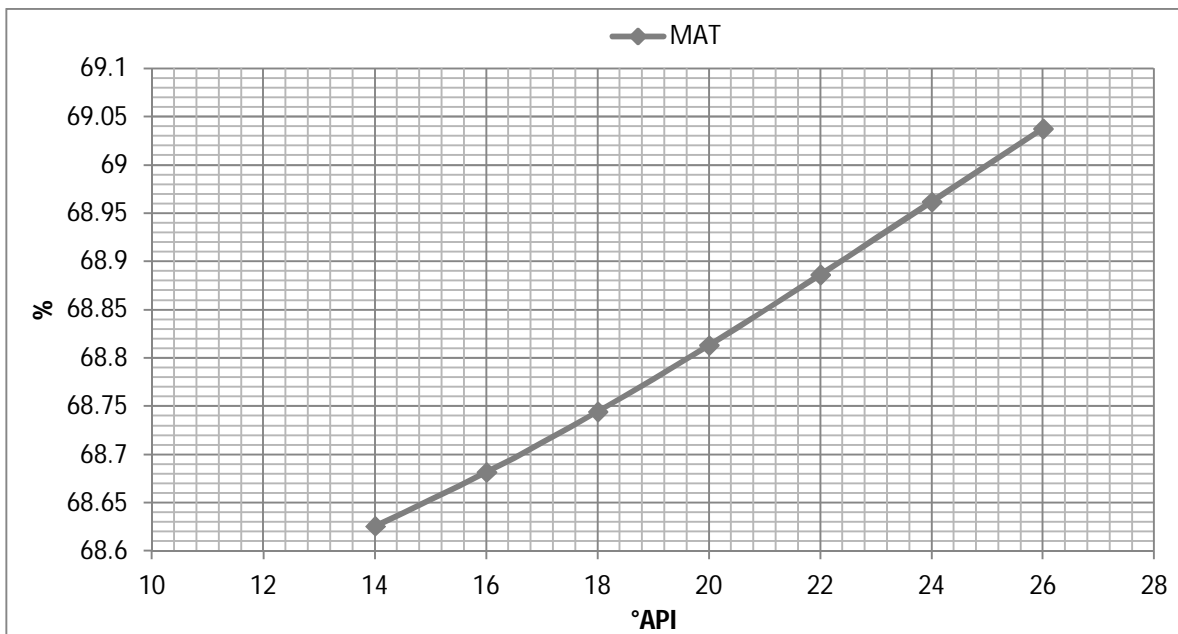
### Calidad de la alimentación (grados API)

Entre mayor sea la calidad de la alimentación, es decir, mientras contenga menos componentes pesados, más sencillo es el fraccionarla en componentes ligeros sin necesidad de tener una temperatura tan alta en el regenerador, y ya que la actividad del catalizador depende en gran medida de la cantidad de componentes que quedan depositados y de la temperatura a la que es sometido, al ser mejor la alimentación también ésta mejora. Por tanto se puede decir que una de las maneras más sencillas de mejorar los rendimientos de los productos de interés a condiciones más viables de operación es alimentar el riser con una carga más ligera, sin embargo, ya que lo que se pretende con el proceso FCC es justamente obtener productos ligeros a partir de alimentaciones lo más pesadas y menos valiosas posibles, no tiene mucho sentido alimentar cargas ligeras.

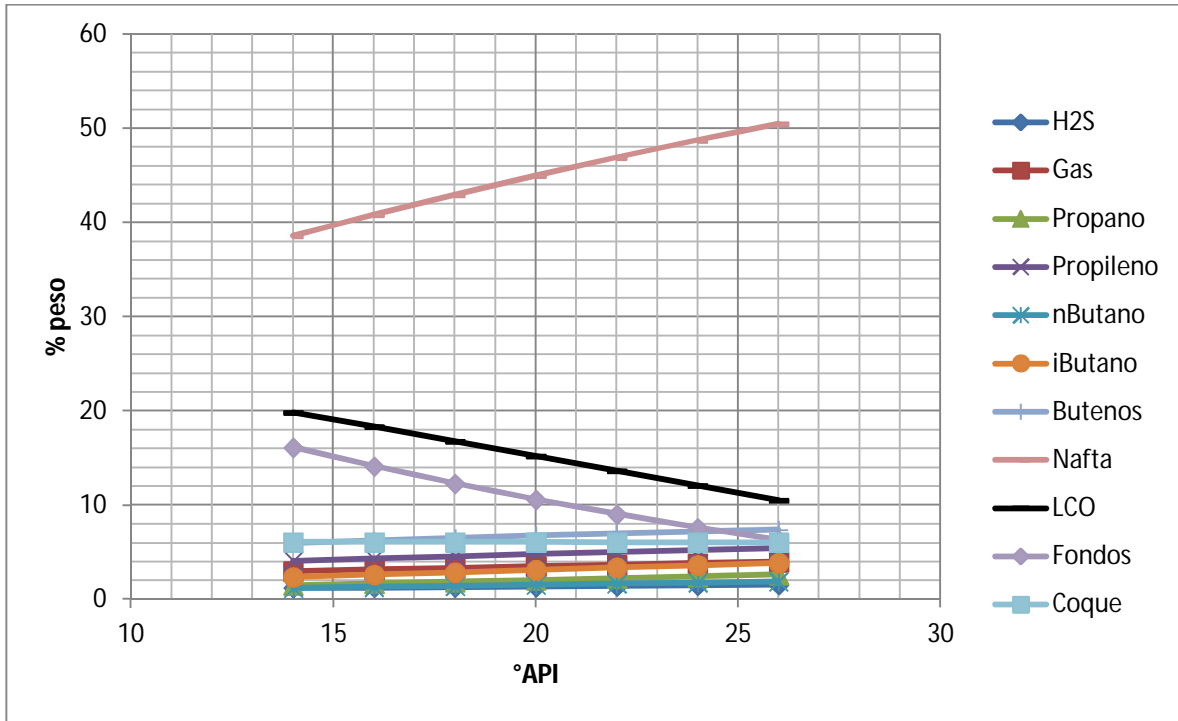




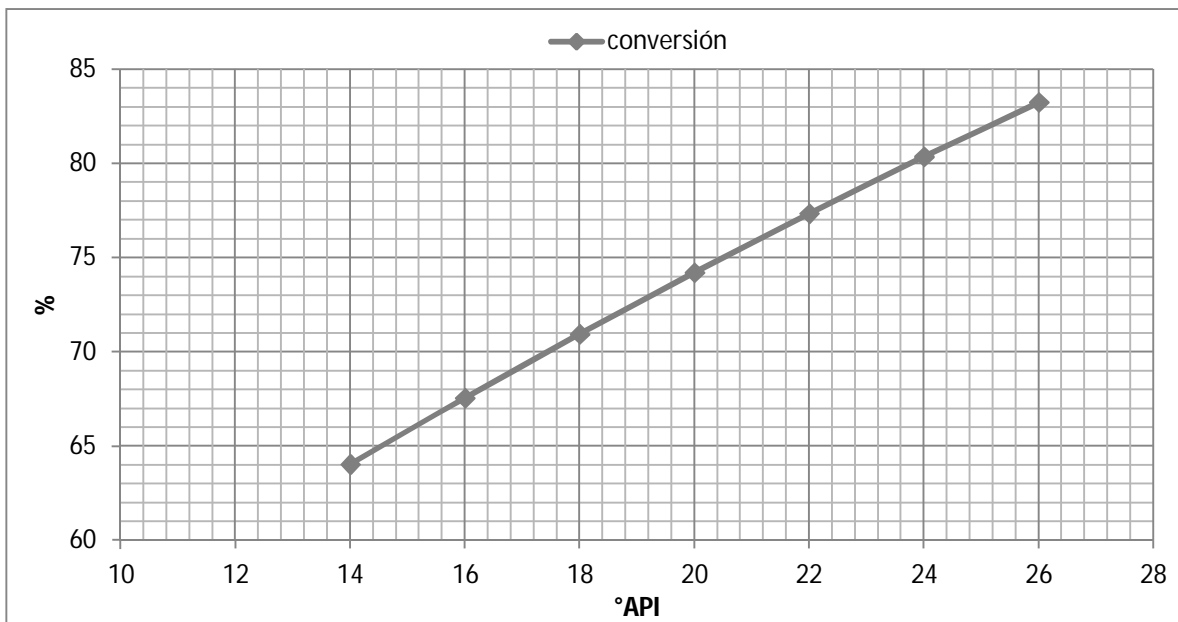
Gráfica 23: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs grados API de la alimentación.



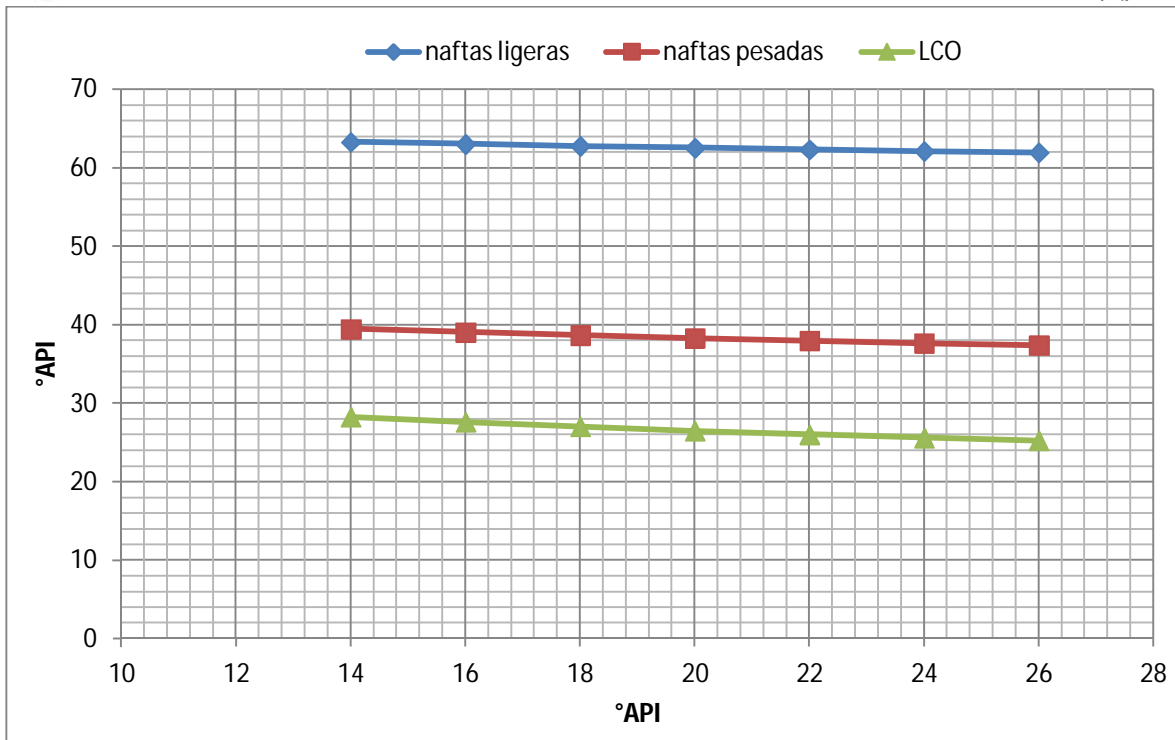
Gráfica 24: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs grados API de la alimentación.



Gráfica 25: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs grados API de la alimentación.



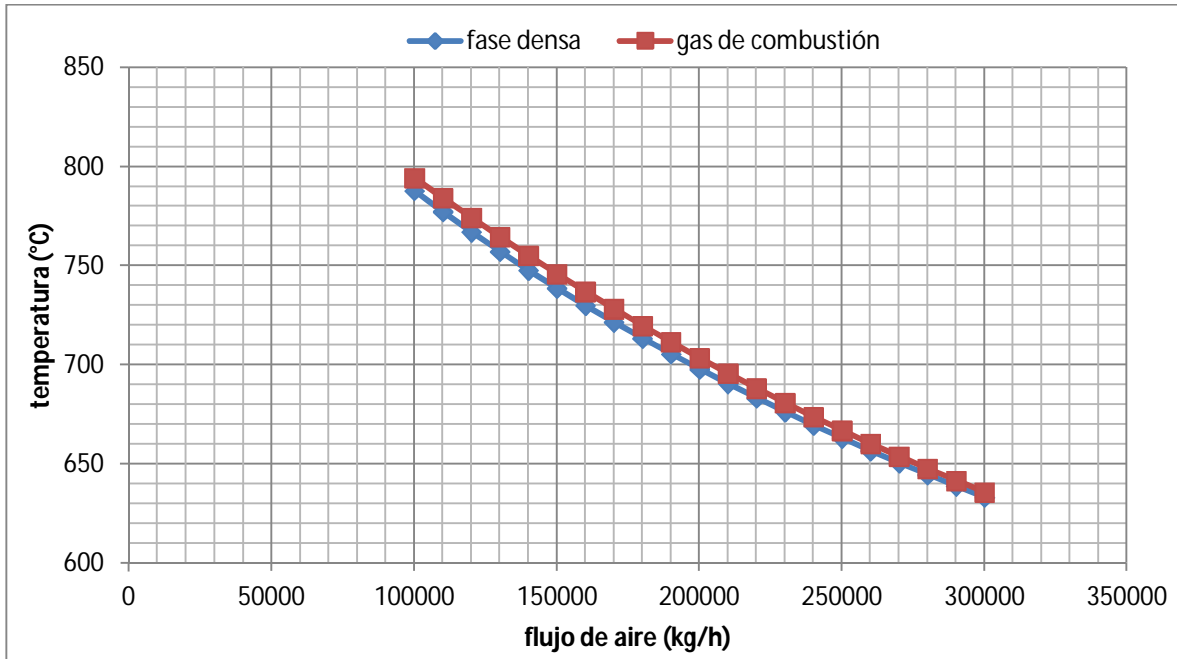
Gráfica 26: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO - porcentaje de fondos) vs grados API de la alimentación.



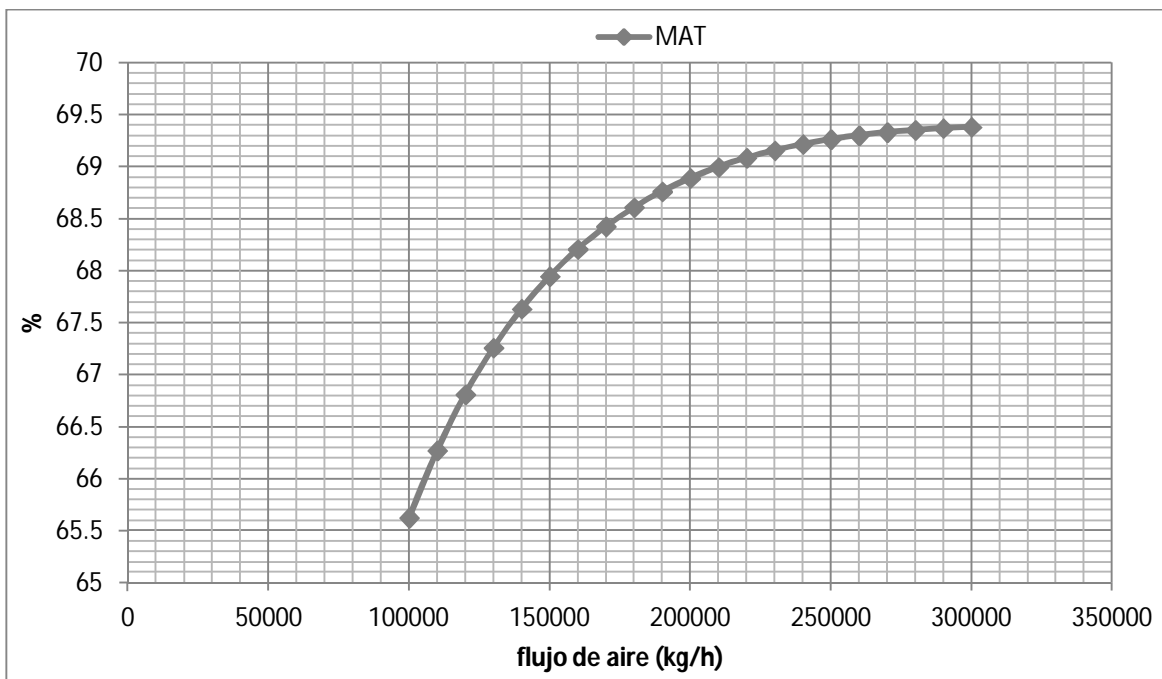
Gráfica 27: Grados API de los productos vs grados API de la alimentación.

### Flujo de aire al regenerador

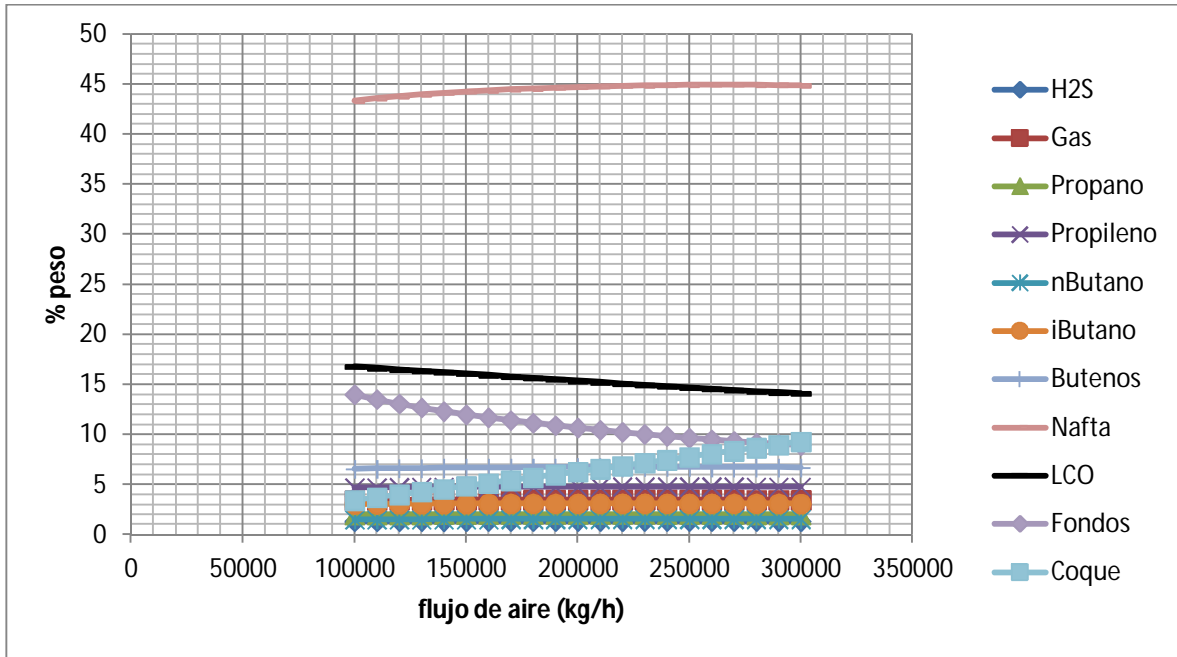
Al aumentar el flujo de aire se mejora la combustión del coque depositado, lo que provoca que la actividad del catalizador de equilibrio aumente. A la vez, se provoca que el regenerador se enfríe (siempre y cuando la temperatura del aire sea menor) así que para que se mantenga la carga de calor necesaria para llevar a cabo la reacción es necesario aumentar el flujo de catalizador regenerado al riser. Al aumentar el catalizador en circulación llega un momento en el que el vapor del agotador se vuelve insuficiente para remover hidrocarburos y los componentes pesados como el LCO se comienzan a condensar y causan más formación de coque depositado. Como puede observarse, el flujo de aire modifica significativamente las condiciones de combustión en el regenerador y a pesar de que hay más coque, la temperatura y cantidad de aire en este caso es más significativa para determinar la temperatura de operación. Además otro efecto adverso es que los gases de combustión producidos aumentan gradualmente.



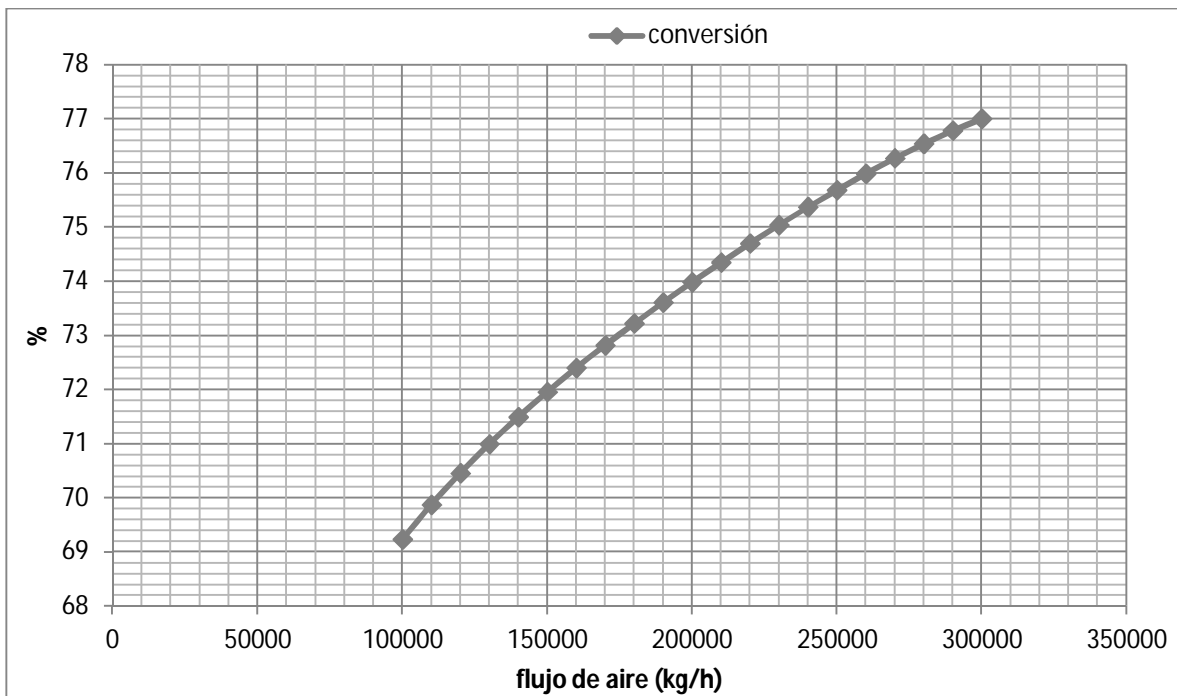
Gráfica 28: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de aire al regenerador.



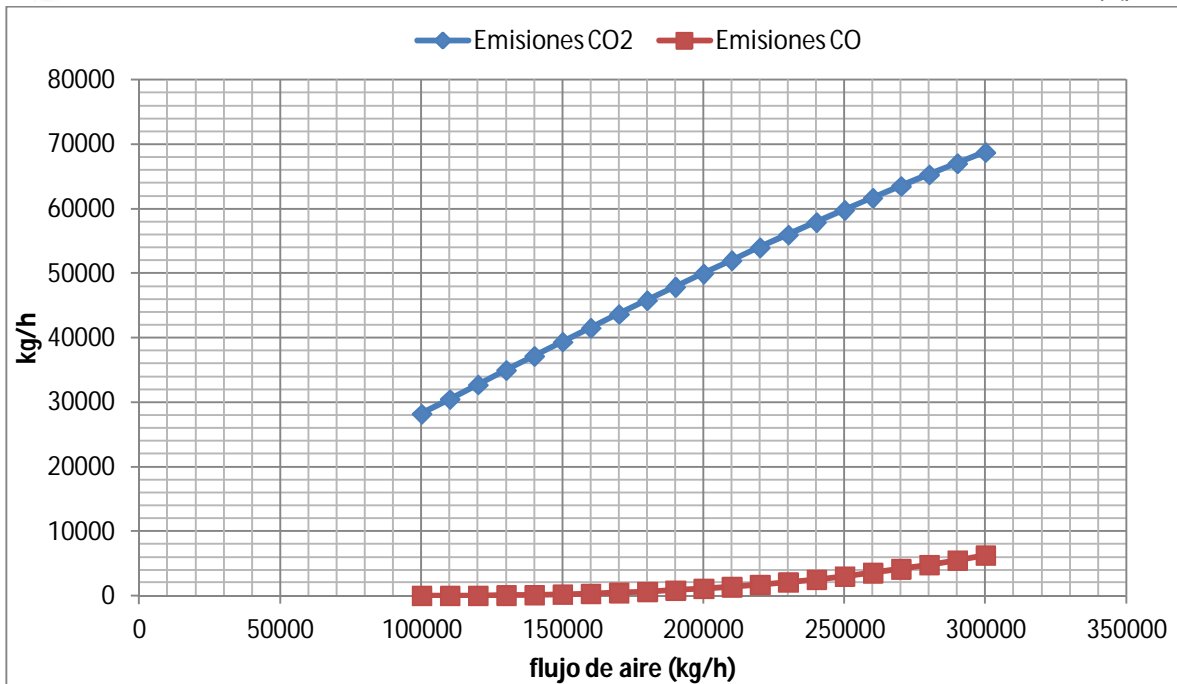
Gráfica 29: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de aire al regenerador.



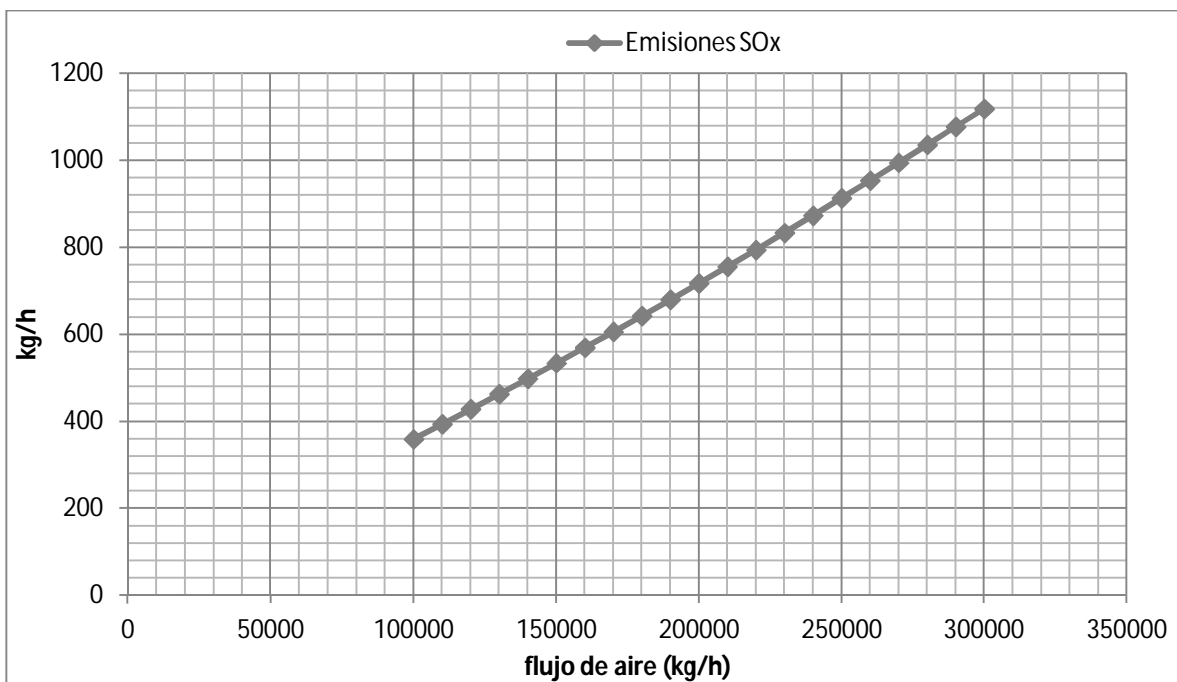
Gráfica 30: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de aire al regenerador.



Gráfica 31: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs flujo de aire al regenerador.



Gráfica 32: Emisiones de CO<sub>2</sub> y CO en el gas de combustión vs flujo de aire al regenerador.



Gráfica 33: Emisiones de SO<sub>x</sub> en el gas de combustión vs flujo de aire al regenerador.



## CONCLUSIONES

De acuerdo a los resultados obtenidos se puede afirmar que los porcentajes de los cortes son suficientemente aproximados para decir que la simulación es confiable, excepto en cuanto al catalizador, el cual presentó una desviación importante respecto a los datos teóricos en la relación carga/catalizador. Esta diferencia entre los datos posiblemente es causada debido a que se utilizaron parte de las propiedades del catalizador A/F-3 de la biblioteca del programa para completar los datos faltantes del catalizador así como otros datos de la biblioteca para completar el diseño de los equipos de la unidad.

En relación al comportamiento de la simulación se pueden obtener distintos resultados para distintos valores ingresados los cuales son resultados razonables en su mayoría para el modo en que opera la unidad, pero cabe señalar que para realizar un análisis exacto de si es el comportamiento observado en la realidad se tendrían que comparar con datos experimentales de la unidad real a esas condiciones y probablemente se necesitaría realizar también la calibración de la unidad en el programa de simulación. Cabe señalar que los resultados obtenidos al variar los datos ingresados solo son representativos del estado estacionario que se alcanza con ellos y no de la variación producida físicamente en la unidad para alcanzar dicho estado, para representar estas variaciones existe la opción de realizar una simulación de la dinámica de la unidad pero ese punto se encuentra fuera del alcance de este proyecto.

Se detectaron algunos detalles propios del programa que pueden causar datos erróneos en la simulación:

- Hay un cierto número de grados de libertad que se deben cubrir con los datos ingresados para que la simulación se pueda llevar a cabo. En sistemas complejos con muchas variables el conjunto de datos con los que se inicie la simulación afectará los resultados obtenidos debido al proceso de iteración, de esta forma, en algunas ocasiones no se obtendrán los mismos resultados si se inicia con un conjunto de datos para variables diferentes, es por ello que deben conocerse que datos son los más significativos del proceso y basar la simulación en ellos.



- Durante la modificación de un dato puede suceder que dicho dato sea función de otras dos o más variables que fueron calculadas por el simulador y no especificadas, en este sentido el programa no define en qué proporción modifica estas variables o a cuales les da más prioridad, por lo que es recomendable verificar si los resultados obtenidos son lógicos y de ser posible comparar con datos experimentales. Una forma de corregir relativamente fácil este problema es definir la simulación de forma que solo una de las variables dependientes resulte calculada por el programa.
- Cuando ocurre un error en la simulación o se obtiene un aviso de no convergencia es recomendable cerrar completamente el programa antes de volver a utilizarlo ya que puede suceder que se obtengan datos erróneos más fácilmente en la siguiente corrida si se prosigue con la simulación.

En cuanto a la operación de la unidad se llegó a las siguientes conclusiones:

- En general, existen variables que al ser modificadas afectan en mayor medida las condiciones de operación del proceso, como por ejemplo la calidad de la alimentación, la cual mejora casi todas las condiciones de operación, sin embargo, el grado final en el que afecten al proceso dependerá también en gran medida del rango en que las otras variables puedan ser modificadas.
- Las principales variables capaces de modificar el balance térmico y material de la unidad, es decir, que causan más impacto en las condiciones de operación a lo largo del convertidor, son la cantidad de catalizador circulante, la temperatura de ingreso de la carga al riser, la cantidad de carga de gasóleo alimentada y la cantidad de coque depositado en el catalizador. El resto de las variables deben modificarse en la medida de lo posible para cumplir con las condiciones de operación que marquen estas 3 variables. Cabe señalar que los posibles costos que esto involucre no están considerados en el alcance de este proyecto.
- Ya que generalmente el objetivo principal de este proceso es la obtención de productos ligeros, la modificación de las condiciones de operación quedará marcada por las reacciones que se llevan a cabo en el riser, por lo que resulta de especial interés también





conocer como se ven afectadas las cinéticas de estas reacciones a distintas condiciones, sin embargo el programa a primera vista no especifica la forma en que realiza el cálculo de estas reacciones, pues es algo que ya viene integrado en la simulación de la unidad, pero que es posible modificar a través de los datos del catalizador y posiblemente también a través de los datos de calibración, más esto involucra un conocimiento más a fondo que excede el alcance de este proyecto.

- El paquete de fluidos elegido fue suficiente para asegurar una buena exactitud a las condiciones de operación especificadas por lo que no se realizó una comparación contra otro paquete de fluidos, sin embargo, si los resultados se desviaran más de los datos reales se tendría que utilizar el paquete con la ecuación Grayson-Streed.
- No se consideró el efecto que tendrían los cambios de presión en los flujos y equipos del convertidor ya que para estos no se encontró un rango en específico de operación indicado. En el caso de los flujos involucrados solamente se debe cuidar que las presiones sean adecuadas para mantener las fluidizaciones de las corrientes del proceso, y en el caso de los equipos simplemente debe mantenerse un perfil de presiones tal que garantice el flujo correcto de las corrientes de un equipo a otro, es decir, que el proceso avance del riser al reactor, del reactor al regenerador, y del regenerador al riser; para esto es útil conocer las densidades relativas del catalizador fluidizado en cada parte del proceso.

Queda claro que por la gran cantidad de datos manejados el realizar una simulación computarizada es mucho más eficiente que su realización a mano en términos de tiempo, sin embargo, en procesos complejos como este en el que existen muchas variables relacionadas entre sí es de gran importancia conocer previamente lo más a fondo posible el proceso pues para obtener un cierto resultado deseado pueden llegar a existir varias distintas formas de llegar a él, más no quiere decir que todas estas formas sean correctas o viables en el mundo real. La experiencia adquirida previamente sobre las mejores condiciones de operación y el grado en que la modificación de una variable afecta a las demás resulta muy útil para determinar si existe alguna mejor opción que otra, más esta decisión por consecuencia queda en manos de la persona que



realiza la simulación y no del programa, es por esta razón que los conocimientos del operador del simulador deben estar debidamente fortalecidos.

Cada proceso involucrará detalles que lo harán distinto de los demás, pero de forma general, los pasos identificados para realizar una simulación simple confiable en Aspen Hysys son:

- 1) Conocer las corrientes involucradas en el proceso y las características y propiedades de sus componentes.
- 2) Conocer el proceso en sí, las entradas y salidas, alimentaciones y efluentes, equipos involucrados, su diseño y propósito.
- 3) Conocer las condiciones de operación de temperatura y presión que requiere el proceso y como afectan a los componentes.
- 4) Determinar si el proceso involucra condiciones especiales o reacciones.
- 5) Determinar lo más a fondo posible como afectarán al balance material y energético las distintas corrientes involucradas, equipos y condiciones de operación.
- 6) Elegir los componentes y el paquete de fluidos que se utilizará para calcular las propiedades de las corrientes en base al paso 1.
- 7) Determinar las principales variables en torno a las cuales se desarrollará la simulación.
- 8) Desarrollar el proceso en el entorno de simulación de acuerdo a los pasos anteriores.
- 9) Analizar los resultados obtenidos en base a los conocimientos de los pasos anteriores y de ser posible comparar con datos reales o de la literatura.
- 10) Corregir "sin sentidos" de la simulación y ajustar los datos ingresados y paquete de fluidos para "optimizar" los resultados reportados.



## BIBLIOGRAFÍA

1. Jones, David S.J. and Pujadó, Peter R. *Handbook of Petroleum Processing*. Holanda : Springer, 2006.
2. Aspen Technology Inc. Simulation Basis HYSYS 2004.2. Octubre 2005.
3. PEMEX. Portal de internet.
4. *Anuario Estadístico. PEMEX*. 2011.
5. Juárez, Jorge Ancheyta. *Tesis para el grado de doctor en ciencias: Estudio cinético de las reacciones de desintegración catalítica de gasóleos*. [ed.] Universidad Autónoma Metropolitana. México : s.n., Octubre 1998.
6. *Hydrocarbon Processing ERTC daily. Hydrocarbon Processing*. U.S.A. : Gulf, Noviembre 2003, pp. 9-10.
7. **Petroleos Mexicanos**. Manual de operación planta catalítica No. 2. 1993.
8. Paredes, Rodrigo Rafael Ricardo. *Petroleum Refining*. s.l. : Atlantic International University, 2011.
9. **Petroleos Mexicanos**. Manual de operación planta catalítica No. 1. 2002.
10. Smith, J. M., Van Ness, H. C. and Abbott, M. M. *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. 5ta. México : McGraw-Hill, 1996.
11. Guerra, María Jesús. [Online] Octubre 16, 2006.  
<http://sites.poli.usp.br/d/pqi2408/BestPracticesOptimumSimulationsHYSYSPropertyPackages.pdf>.
12. Sadeghbeigi, Reza. *Fluid Catalytic Cracking Handbook: An Expert Guide to the Practical Operation, Design, and Optimization of FCC Units*. 3ra edición. Estados Unidos : Elsevier, 2012.
13. *Pushing plant limits. Test runs, plant expectations and performance confidence*. Golden, Scott W. USA : Hart Publications, Marzo/Abril 1999, Special focus on Hydroprocessing options, pp. 1-12.
14. Golden, Scott W., Kowalczyk, Dennis C. and Compagna, Bob J. *Increase FCC propylene production and recovery*. USA : s.n.
15. Torres, Alma Delia Hernández. *Tesis para el título de ingeniera química: Análisis del comportamiento de la planta combinada No. 2 de la refinería Miguel Hidalgo, para el manejo del crudo Maya*. [ed.] Facultad de química UNAM. México : s.n.
16. Wauquier, J. P. *El refino del petróleo*. Madrid, España : Díaz de Santos, 2004. Vol. I.
17. Smith, Robin. *Chemical Process Design and Integration*. USA : John Wiley & Sons, 2005.



18. **Poling, Bruce E., Prausnitz, John M. and O'Connell, John P.** *The Properties of Gases and Liquids*. 5ta. USA : McGraw-Hill, 2004.
19. **IMP.** Portal de internet.
20. **Chang, Ai-Fu, Pashikanti, Kiran and Liu, A.** *Refinery Engineering: Integrated Process Modeling and Optimization*. Virginia : John Wiley & Sons, 2012.



**ANEXO I: ÍNDICE DE TABLAS**

Tabla 1: Clasificación general de los distintos tipos de crudos.....	9
Tabla 2: Crudos principales procesados en México. ....	9
Tabla 3: Unidades FCC en México.....	15
Tabla 4: Unidades FCC en México.....	18
Tabla 5: Datos de la corriente de alimentación para la simulación.....	48
Tabla 6: Datos del catalizador para la simulación.....	49
Tabla 7: Datos de operación para la simulación.....	50
Tabla 8: Datos de diseño del equipo para la simulación.....	50
Tabla 9: Resultados para el catalizador.....	51
Tabla 10: Comparación de los resultados de operación de la simulación y resultados teóricos esperados.....	52
Tabla 11: Distribución de azufre en productos.....	52
Tabla 12: Distribución de las fuentes de generación de coque en el proceso. ....	52
Tabla 13: Flujos y porcentajes obtenidos para los distintos cortes de productos en la simulación..	53
Tabla 14: Composición en porcentaje y calidad de naftas y cortes pesados obtenidos en la simulación. ....	53
Tabla 15: Comparación de porcentajes peso de los distintos cortes obtenidos en la simulación y los porcentajes peso esperados según la literatura.....	54



## ANEXO II: ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Temperaturas de destilación de distintas fracciones del petróleo crudo. ....	6
Figura 2: Plano de localización de la refinería Miguel Hidalgo, Tula. ....	13
Figura 3: Convertidor catalítico modelo Orthoflow F, Kellogg .....	19
Figura 4: Principales productos obtenidos por orden de fraccionamiento catalítico a partir de gasóleo. ....	22
Figura 5: Estructura de una zeolita Faujasita Y.....	27
Figura 6: Pantalla de selección de componentes en Hysys. ....	32
Figura 7: Pantalla de selección de paquetes de fluidos en Hysys.....	33
Figura 8: Pantalla de paquetes de fluidos en Hysys.....	33
Figura 9: Isotermas generadas por una ecuación cúbica. Tc = Isoterma crítica, Vsat = vapor saturado, PS' = Presión de saturación, P = Presión, V = Vapor, C = punto crítico .....	36
Figura 10: Diagrama de elección de paquetes de fluidos .....	40
Figura 11: Pantalla de selección de operaciones de Refsys. ....	42
Figura 12: Pantalla de selección de la configuración de la unidad FCC en Refsys.....	43
Figura 13: Pantalla de la selección del tipo de convertidor de la unidad FCC en Refsys. ....	43
Figura 14: Pantalla de ingreso de datos de diseño de los equipos de la unidad FCC en Refsys.....	44
Figura 15: Pantalla de ingreso de las propiedades de la alimentación de la unidad FCC en Refsys. ....	45
Figura 16: Pantalla de ingreso de datos del catalizador de la unidad FCC en Refsys. ....	46
Figura 17: Pantalla de ingreso de datos de la operación de la unidad FCC en Refsys. ....	47



### ANEXO III: ÍNDICE DE GRÁFICAS

Gráfica 1: Producción de tipos de crudo en México, periodo 2000-2010 .....	10
Gráfica 2: Producción de principales petrolíferos en México, periodo 2000-2010 .....	11
Gráfica 3: Demanda de gasolinas y diesel en México, periodo 2006-2010.....	11
Gráfica 4: Importaciones de petrolíferos en México, periodo 2000-2010.....	12
Gráfica 5: Comparación de los porcentajes peso de los productos obtenidos en la simulación contra los porcentajes peso de los productos de la operación real. ....	55
Gráfica 6: Comparación de los porcentajes de errores respecto de los datos de la operación real en los porcentajes peso de la literatura y la simulación.....	55
Gráfica 7: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs temperatura de salida del riser. ....	57
Gráfica 8: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs temperatura de salida del riser.....	57
Gráfica 9: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs temperatura de salida del riser. .....	58
Gráfica 10: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs temperatura de salida del riser. ....	58
Gráfica 11: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs temperatura de la alimentación.....	59
Gráfica 12: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs temperatura de la alimentación.....	60
Gráfica 13: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs temperatura de la alimentación.....	60
Gráfica 14: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs temperatura de la alimentación.....	61
Gráfica 15: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de catalizador fresco de reposición. ....	62
Gráfica 16: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de catalizador fresco de reposición.....	62
Gráfica 17: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de catalizador fresco de reposición.....	63



Gráfica 18: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs flujo de catalizador fresco de reposición. ....	63
Gráfica 19: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de la alimentación al riser. ....	64
Gráfica 20: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de la alimentación al riser. ....	65
Gráfica 21: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de la alimentación al riser. ....	65
Gráfica 22: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs flujo de la alimentación al riser. ....	66
Gráfica 23: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs grados API de la alimentación. ....	67
Gráfica 24: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs grados API de la alimentación. ....	67
Gráfica 25: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs grados API de la alimentación. ....	68
Gráfica 26: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs grados API de la alimentación. ....	68
Gráfica 27: Grados API de los productos vs grados API de la alimentación. ....	69
Gráfica 28: Temperatura de la fase densa y de los gases de combustión en el regenerador vs flujo de aire al regenerador. ....	70
Gráfica 29: Porcentaje de microactividad (MAT) del catalizador en equilibrio vs flujo de aire al regenerador. ....	70
Gráfica 30: Porcentaje de los productos obtenidos en el proceso vs flujo de aire al regenerador. ....	71
Gráfica 31: Porcentaje de conversión (100% - porcentaje de LCO – porcentaje de fondos) vs flujo de aire al regenerador. ....	71
Gráfica 32: Emisiones de CO <sub>2</sub> y CO en el gas de combustión vs flujo de aire al regenerador. ....	72
Gráfica 33: Emisiones de SOX en el gas de combustión vs flujo de aire al regenerador. ....	72





#### ANEXO IV: ÍNDICE DE ECUACIONES

Ecuación [1] .....	34
Ecuación [2] .....	34
Ecuación [3] .....	34
Ecuación [4] .....	34
Ecuación [5] .....	35
Ecuación [6] .....	37
Ecuación [7] .....	37
Ecuación [8] .....	37
Ecuación [9] .....	40
Ecuación [10] .....	41
Ecuación [11] .....	41



## APÉNDICE I: PROGRAMA ASPEN REFSYS

Aspen Hysys surgió a finales de los años 70's creado por investigadores del departamento de Ingeniería Química y Petróleo de la Universidad de Calgary (Canadá) en conjunto con la empresa "Hyprotech". En el 2002 la empresa Hyprotech fue comprada por Aspen Technologies Inc. la cual integra el simulador con otros paquetes de aplicación específica como Aspen PipeSys y Aspen Pims, creando el programa AspenOne (Suite).

El simulador Aspen Refsys es uno de estos programas de aplicación específica diseñado para la simulación, optimización y comprensión de las interacciones de múltiples unidades de plantas usadas en la refinación de petróleo. Combina para su desempeño el entorno de simulación del programa Aspen Hysys con los principios más actuales en modelado de reactores y equipos de refinación de petróleo, como por ejemplo, unidades FCC, reformadores, hidrocraqueadores, e hidrotratamientos. Estos modelos pueden usarse tanto para generar simulaciones de proceso como para análisis de casos de estudio, individuales o junto con otras unidades.

El programa utiliza modelos cinéticos rigurosos y un sistema de cálculo orientado en ecuaciones.

Es un simulador secuencial modular, es decir, realiza los cálculos unidad por unidad, además de permitir realizar simulaciones en estado estacionario y dinámico, realizar el cálculo de propiedades fisicoquímicas, balances de materia y energía, dimensionamiento de equipos, cálculo de cargas de calor, requerimientos de energía, equilibrio químico y de fases. También es bidireccional, es decir, puede calcular tanto condiciones de entrada a partir de las salidas como salidas a partir de entradas. Presenta la posibilidad de adicionar códigos de programación con Visual Basic.

Sus desventajas son que cuentan aún con modelos cinéticos y de transferencia poco fiables, no tiene mucha aplicabilidad para sólidos y el software de optimización está limitado en comparación con otros simuladores comerciales.

Algunas herramientas con las que cuenta AspenRefsys para el diseño de los modelos son la elección de reglas de mezclado, caracterización de crudos, ecuaciones para cálculo de propiedades termodinámicas, base de datos de propiedades para distintos componentes, capacidad de tratar con múltiples alimentaciones y productos, modelos robustos de calibración para ajustar con datos de planta precisos, etc.



## APÉNDICE II: COMPLEMENTO DEL PROCESO FCC

El proceso completo de craqueo catalítico fluidizado (FCC) puede dividirse en 3 etapas distintas (7):

- Convertidor: Compuesto por el reactor-regenerador.
- Fraccionamiento principal: Compuesto por la torre fraccionadora principal.
- Unidades de destilación elementales y de tratamiento: Torre agotadora-absorbedora, debutanizadora, depropanizadora, depentanizadora, unidad de tratamiento de aminas y unidades de tratamiento adicionales.

Una vez que salen del riser, los vapores de hidrocarburo del domo del convertidor entran a la parte inferior de la fraccionadora a una temperatura alrededor de 521 °C y se ponen en contacto con la recirculación de los fondos de la misma fraccionadora con lo cual baja su temperatura y las partículas de catalizador existentes son arrastradas hacia los fondos, este arrastre se asegura manteniendo un flujo mayor en la recirculación que en la alimentación. El flujo de recirculación de la fraccionadora se debe ajustar según las condiciones de operación para mantener la temperatura de fondos entre 343 y 359 °C y el reflujo del domo a un mínimo de 60% del diseño.

El vapor de hidrocarburos que entra al equipo se separa en cinco fracciones de acuerdo a su punto de ebullición: "Lodos" o fondos en la parte más baja, aceite cíclico pesado, aceite cíclico ligero, nafta pesada y, por la parte más elevada, vapores de hidrocarburo compuestos por gasolina, gases de hidrocarburo ligero, vapor de agua y gases inertes.

En el fondo de la fraccionadora hay también un distribuidor de vapor de agotamiento que ayuda a mantener las partículas de catalizador y coque en suspensión, reducir la presión parcial y extraer los componentes ligeros atrapados. Un flujo pequeño de los fondos puede ser recirculado al riser para evitar también la acumulación de catalizador en la fraccionadora, generalmente provocando únicamente la formación de coque adicional y gas seco al fraccionarse en el riser.

La recirculación de aceite cíclico pesado ayuda a lavar los platos que se encuentran por debajo de dicha recirculación, además de remover posibles partículas de catalizador que lleve consigo el vapor en contracorriente que sube por la torre. El aceite cíclico pesado producto es enfriado



mediante intercambiadores de calor con la carga fresca. Suele usarse también como aceite de limpieza para los equipos.

El aceite cíclico ligero que se extrae de la torre es llevado a un agotador donde entra en contracorriente con un flujo ascendente de vapor de media presión. El vapor de agua e hidrocarburos ligeros son regresados a la fraccionadora mientras que el aceite cíclico ligero producto es enfriado mediante intercambiadores de calor con la carga fresca e intercambiadores con agua de alimentación a calderas. Se puede utilizar como aceite de sello mecánico para las bombas.

La nafta pesada extraída puede simplemente enviarse de vuelta a la torre fraccionadora, o ser mezclada con aceite de absorción de la torre absorbidora secundaria e intercambiar calor con algunos rehervidores antes de ser devuelta a la fraccionadora, o también ser dirigida al absorbedor secundario e intercambiar calor con el aceite de absorción. De la mezcla con aceite de absorción que es regresada a la torre se obtienen cantidades importantes de hidrocarburos dentro del rango de ebullición de los butanos y pentanos.

El vapor de domo contiene gasolina y componentes ligeros, este es condensado parcialmente en un condensador; parte de los hidrocarburos líquidos se regresan como reflujo a la fraccionadora y el resto es enviado al absorbedor primario. Los hidrocarburos gaseosos fluyen al compresor de gas húmedo y son enviados a la sección de recuperación de vapores. El agua amarga es bombeada a tratamiento para eliminación de ácido sulfhídrico.

Las variables más críticas de la torre fraccionadora que el operador puede controlar para obtener las condiciones deseadas de operación son:

- Las relaciones de reflujo a la torre: Su aumento causará una concentración mayor de componentes ligeros en el domo y menor en los fondos, pero un descenso en el flujo de producto.
- La carga térmica suministrada: De ella dependerá la cantidad de líquido-vapor formado para un cierto flujo de alimentación.



La presión por lo general no debe variarse de la de diseño ya que el sistema es muy sensible a cualquier cambio, es por ello que no se considera como una variable de proceso, sin embargo, en el caso de que no puedan obtenerse los resultados deseados al modificar las otras variables, es posible cambiar el valor de la presión. Cabe señalar que en la práctica cualquier cambio que se realice en alguna de las variables debe ser lento y darse el tiempo suficiente para que el sistema se compense y estabilice.

En la unidad de recuperación de vapores se procesan los gases producto provenientes del domo de la fraccionadora con el fin de maximizar la obtención de componentes de valor. Los vapores pasan del tanque de reflujo al tanque de succión de baja presión, donde los posibles líquidos arrastrados son bombeados de regreso al tanque de reflujo. Los vapores entran al compresor de gas húmedo donde después de una primera etapa, se condensan con agua de enfriamiento los hidrocarburos más pesados y se recolectan en un tanque separador interetapa, y por último pasan a una segunda etapa donde en la descarga se mezcla con agua de lavado para disolver los componentes en la corriente de gas antes de pasar al condensador de presión alta.

De aquí en adelante, las corrientes de productos son llevadas a distintos equipos dependiendo su composición para así obtener los productos finales deseados:

- Absorbedor/agotador: Su función es separar los  $C_2$  y fracciones ligeras de las alimentaciones de la unidad recuperadora de vapor. Los componentes pesados son removidos mediante aceite de absorción y los  $C_2$  son removidos en el agotador.
- Debutanizadora: Extrae los  $C_3$  y  $C_4$  de los fondos del agotador.
- Depropanizadora: Separa la alimentación  $C_3/ C_4$  en corrientes individuales de  $C_3$  (propano/propileno) y  $C_4$  (butano/butilenos). Los  $C_4$  son enviados a almacenamiento mientras que los  $C_3$  se envían a la fraccionadora de propano/propileno.
- Depentanizadora: Separa la alimentación cruda de gasolina debutanizada en corrientes de gasolina de catalizador ligero y de catalizador pesado.
- Fraccionadora propano/propileno: Optimiza la calidad del LPG al aumentar la concentración del propileno mediante el retiro de propano y  $C_4$  de su alimentación.
- Tratamiento de aminas: Elimina el sulfuro de hidrógeno ( $H_2S$ ) y dióxido de carbono ( $CO_2$ ) de los gases del domo del absorbedor secundario y del líquido del domo del debutanizador.