

**DESARROLLO DE UN ALGORITMO PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UNA  
UNIDAD DE RUPTURA CATALITICA EN MODELO EN ESTADO ESTABLE**

**JAVIER OSWALDO LIZCANO PRADA**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
POSGRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2013**



**DESARROLLO DE UN ALGORITMO PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UNA  
UNIDAD DE RUPTURA CATALITICA EN MODELO EN ESTADO ESTABLE**

**JAVIER OSWALDO LIZCANO PRADA**

Tesis de grado presentada para optar por el título de  
Magíster en Ingeniería Química

Director

**Dr. Sc. Viatcheslav Kafarov**

Profesor Titular Escuela de Ingeniería Química  
Universidad Industrial de Santander, UIS

Codirectora

**Ms.Sc. Tania Mireya Chanaga Quiroz**

Instituto Colombiano del Petróleo, ICP

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
POSGRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2013**

## DEDICATORIA

*A Dios, que me ha colmado de tantas bendiciones sin yo merecerlas,  
y siempre me muestra el camino correcto.*

*A Marlin, mi amada esposa, quien es mi refugio,  
mi compañía y mi complemento.*

## AGRADECIMIENTOS

Expreso mi más sincero agradecimiento a la Ing. Elizabeth Gómez y la Ing. Clemencia Vargas, por la oportunidad de iniciar el presente proyecto de investigación, y por todas las enseñanzas compartidas y la confianza otorgada.

A mis padres, hermanos y familia, en quienes siempre encuentro un apoyo incondicional.

A mi Codirectora de tesis, la Ing. Tania Chanaga por su apoyo y confianza en mi esfuerzo, por brindarme acompañamiento, información y buen consejo para el desarrollo exitoso del presente proyecto.

A mi director de tesis Dr Kafarov, por su constante respaldo en todo el proceso de investigación, y haberme recibido y acogido en el Centro de Investigación para el Desarrollo Sostenible en Industria y Energía.

A mis calificadores Dra. Debora NaBarlatz y Dr. Ramiro Martinez, por sus valiosos aportes e indicaciones en la terminación de la tesis.

A todos aquellos quienes amablemente compartieron su conocimiento y sentir sobre el presente proyecto, Alexander Guzman, Ing. Sandra Montagut, Ing. Omar Guerra, Ing. Ariel Flores, Ing. Gustavo Navas, compañeros y amigos.

A Ecopetrol-Instituto Colombiano del Petróleo (ICP) y la Universidad Industrial de Santander (UIS), por el financiamiento económico del presente proyecto de investigación.

## CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	
1. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE RUPTURA CATALÍTICA	24
2. ESTADO DEL ARTE	30
2.1 SIMULACIÓN DEL RISER	30
2.2 SIMULACIÓN DEL REGENERADOR	37
2.3 OPTIMIZACIÓN DE URC	40
3. SIMULACIÓN DE LA URC	44
3.1 VARIABLES INDEPENDIENTES	45
3.2 VARIABLES DEPENDIENTES	47
3.3 MODELO DEL REACTOR	49
3.4 MODELO DEL REGENERADOR	54
3.5 CASO BASE	57
3.6 SIMULACIÓN	63
4. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN	68
4.1 DEFINICIÓN DE TÉRMINOS	69
4.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	70
5. ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN	79
6. APLICACIÓN DEL ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN	91
6.1 OPTIMIZACIÓN CON DOS VARIABLES INDEPENDIENTES	91
6.2 OPTIMIZACIÓN CON VARIAS VARIABLES INDEPENDIENTES	111
6.3 OPTIMIZACIÓN ECONÓMICA VARIANDO EL ADITIVO	116
PROMOTOR DE PROPILENO	
7. CONCLUSIONES	120
BIBLIOGRAFÍA	122
ANEXOS	127

## LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Variación de la capacidad en carga a URC en U.S.	3
Figura 2. Diagrama esquemático de URC en refinería.	24
Figura 3. Principales secciones de la URC	26
Figura 4. Principales corrientes de flujo en la URC	28
Figura 5. Variables Independientes y Dependientes en la URC	44
Figura 6. Sistema de reacción para ruptura catalítico de cargas pesadas y naftas.	50
Figura 7. Relación entre los diferentes tipos de variables en las subrutinas.	59
Figura 8. Perfiles de rendimientos y temperatura en el riser	60
Figura 9. Perfiles de rendimientos y temperatura en el regenerador	61
Figura 10. Efecto del contenido de aditivo ZSM-5 en el rendimiento de GLP	62
Figura 11. Algoritmo de simulación	65
Figura 12. Variación de la conversión en la reacción	66
Figura 13. Variación de la Temperatura en Fase Densa del Regenerador	67
Figura 14. Restricciones operacionales en términos de la variable vector dirección.	73
Figura 15. Matrices de gradientes para restricciones.	74
Figura 16. Cambio de eje en problema cuadrático.	75
Figura 17. Configuración matricial del problema cuadrático	76
Figura 18. Algoritmo general para la optimización de modelos de URC	79
Figura 19. Generar Gradientes de función objetivo y restricciones	80

Figura 20.	Definición el subsector de búsqueda	81
Figura 21.	Planteamiento del problema cuadrático	82
Figura 22.	Algoritmo de corrección del eje de búsqueda	83
Figura 23.	Planteamiento del problema cuadrático	84
Figura 24.	Solución del problema cuadrático	85
Figura 25.	Identificación del tipo de problema cuadrático	86
Figura 26.	Búsqueda de la columna pivote	87
Figura 27.	Búsqueda de fila pivote en problemas tipo estándar.	88
Figura 28.	Determinar criterio de solución al problema cuadrático	89
Figura 29.	Algoritmo para la búsqueda de punto factible más cercano	90
Figura 30.	Perfil de conversión y restricción dentro del espacio de búsqueda	92
Figura 31.	Iteraciones realizadas por el algoritmo genético considerando 2 variables	96
Figura 32.	Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables	98
Figura 33.	Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables ajustada	99
Figura 34.	Iteraciones del algoritmo desarrollada considerando 2 variables	101
Figura 35.	Maximización del rendimiento de ALC aplicando GA	106
Figura 36.	Maximización del rendimiento de ALC aplicando SQP	107
Figura 37.	Maximización del rendimiento de ALC aplicando el algoritmo desarrollado.	108
Figura 38.	Iteraciones al maximizar el margen económico en función del aditivo y el aire	119

## LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Definición de Hidrocarburos producidos en URC	25
Tabla 2. Rango de calidad de carga procesada en la URC	47
Tabla 3. Variables operacionales obtenidas en monitoreos a la URC industrial	58
Tabla 4. Comparación entre rendimientos experimentales y los simulados.	59
Tabla 5. Restricciones operacionales	70
Tabla 6. Iteraciones realizadas por el algoritmo genético considerando 2 variables	96
Tabla 7. Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables.	99
Tabla 8. Iteraciones optimización con 2 variables independientes utilizando el algoritmo desarrollado	102
Tabla 9. Comparación entre los diferentes métodos de optimización evaluados	103
Tabla 10. Iteraciones en la maximización del rendimiento de ALC aplicando GA	106
Tabla 11. Iteraciones en la maximización del rendimiento de ALC aplicando SQP	107
Tabla 12. Maximización del rendimiento de ALC aplicando el algoritmo desarrollado.	109
Tabla 13. Comparación de métodos aplicados en la maximización del rendimiento de ALC	110
Tabla 14. Iteraciones de la optimización multivariable utilizando el algoritmo desarrollado	114
Tabla 15. Iteraciones de la optimización multivariable con SQP	115

Tabla 16.	Comparación Optimización multivariable en el modelo de URC	116
Tabla 17.	Precios de cargas, aditivo y productos	117
Tabla 18.	Optimización de la adición de aditivo de propileno	118
Tabla 19.	Maximización del Margen económico en función del aditivo y el aire	119

## LISTA DE ANEXOS

Anexo A. HERRAMIENTA COMUTACIONAL	pág. 127
-----------------------------------	-------------

## GLOSARIO

$A_{0r}$ : Factor preexponencial en la velocidad de la reacción  $r$ .

$A_{01}$ : Factor preexponencial de la velocidad de reacción de combustión 1.

$A_{02}$ : Factor preexponencial de la velocidad de reacción de combustión 2.

$A_{03}$ : Factor preexponencial de la velocidad de reacción de combustión 3.

$A_T$ : Área transversal del riser.

$A_{Tr}$ : Área transversal del regenerador.

$API_{OT}$ : Densidad API para la carga combinada

$\bar{A}$ : Vector que describe las restricciones del problema cuadrático,

$\bar{B}$ : Vector que describe las restricciones del problema cuadrático,

$\bar{C}$ : Vector que describe el gradiente problema cuadrático

$C_i$ : Valor del término en la posición  $i$  del vector  $\bar{C}$

$CI_O$ : Parámetro que relaciona el coque instantáneo con el carbón Conradson.

$Cp_{CR}$ : Capacidad calorífica del catalizador circulante.

$Cp_V$ : Capacidad calorífica del vapor

$C_{pvt}$ : Columna pivote

$C/O$ : Relación másica entre el catalizador circulante y la carga de hidrocarburos al riser.

$CC$ : Coque en catalizador en el riser.

$CCR$ : Coque en el catalizador regenerado.

$CRC$ : Carbón Conradson en la carga combinada.

$\bar{D}$ : Matriz Hessiana que describe el gradiente del problema cuadrático

$E_r$ : Energía de activación en la reacción  $r$ .

$dF(i, k)$ : Vector que Guarda los  $k$  valores de la función objetivo, utilizados para generar los gradientes de la función objetivo con respecto a la variable  $i$ .

$dY(j, k)$ : Vector que Guarda los  $k$  valores de la restricción dependiente  $j$ , utilizados para generar los gradientes de la restricción con respecto a la variable  $i$

$F(\bar{X})$ : Funcion Objetivo evaluada en  $\bar{X}$

$\dot{F}_A$ : Flujo volumétrico de aire al regenerador

$F_{pvt}$ : Fila pivote en la matriz  $\bar{W}$

$\Delta H_r$ : Energía de cracking asociada a la reacción  $r$

$h_g$ : Entalpia de la carga combinada en fase gaseosa

$h_l$ : Entalpia de la carga combinada en fase líquida

$i$ : Indicador de variables independientes

$j$ : Indicador de Restricciones

$k$ : Contador general

$\dot{m}_{CR}$ : Flujo de masa circulante de catalizador regenerado, catalizador + coque

$\dot{m}_{cat}$ : Flujo de masa de catalizador circulante sin coque

$\dot{m}_{CKO}$ : Flujo de masa de coque instantáneo proveniente de la carga combinada

$\dot{m}_{CKR}$ : Flujo de masa de coque no quemado proveniente del regenerador

$\dot{m}_l$ : Flujo de masa del lump  $l$  en el sistema de reacción del riser

$\dot{m}_{OT}$ : Flujo de masa total de hidrocarburos entrando al riser

$\dot{m}_{VA}$ : Flujo de masa del vapor de atomización

$\dot{m}_{VD}$ : Flujo de masa del vapor de despojo

$\dot{m}_{VF}$ : Flujo de masa del vapor de fluidización

$\sum m_t cp_t$ : Capacidad calorífica masa total presente en el riser

$m$ : Número total de restricciones

$n$ : Número de variables independientes

$PM_{cq}$ : Peso molecular del coque

$\dot{Q}_{OT}$ : Energía consumida asociada a la evaporación de las cargas al riser.

$\dot{Q}_V$ : Energía consumida asociada al calentamiento de todo el vapor al riser.

$\dot{Q}_{VA}$ : Energía consumida asociada al calentamiento del vapor de atomización.

$\dot{Q}_{VD}$ : Energía consumida asociada al calentamiento del vapor de despojo.

$\dot{Q}_{VF}$ : Energía consumida asociada al calentamiento del vapor de fluidización.

$R$ : Constante universal de los gases.

*Rest*: Variable tipo texto (String) que indica si existe alguna restricción activa durante la solución del problema cuadrático. "si" (Si existe restricción activa), "no" (No existe restricción activa).

*Sol*: Variable tipo texto (String) que indica cuando se encuentra la solución al problema cuadrático "no" (No se ha encontrado solución), "si" (Si se ha encontrado solución)

*Suma* : Variable utilizada para operaciones de sumatorias varias en el algoritmo.

$T_{(z)}$ : Temperatura a lo largo del riser.

$T_{CO}$ : Temperatura de la mezcla catalizador carga luego de la vaporización

$T_{Dil}$ : Temperatura de la fase diluida del regenerador.

$T_{OT}$ : Temperatura de precaliente de la carga combinada.

$T_{reg}$ : Temperatura de la fase densa del regenerador.

$T_{rxn}$  : Temperatura de reacción.

$T_{VA}$  : Temperatura de entrada del vapor de atomización.

$T_{VD}$  : Temperatura de entrada del vapor de despojo.

$T_{VF}$  : Temperatura de entrada del vapor de fluidización.

$UOPK_{OT}$ : Factor UOPK para la carga combinada

$\vartheta_g$ : Flujo volumétrico total.

$\bar{W}$ : Arreglo matricial que contiene el planteamiento del problema cuadrático

$w_i$ : Contador de filas en la matriz  $\bar{W}$

$w_{in}$ : Número máximo de filas en la matriz  $\bar{W}$

$w_j$ : Contador de columnas en la matriz  $\bar{W}$

$w_{jn}$ : Número máximo de columnas en la matriz  $\bar{W}$

$w_r$ : Concentración másica del reactivo en la reacción  $r$ .

$\overline{WID1}$ ,  $\overline{WID2}$ : Vectores utilizados para identificar las variables durante las operaciones para resolver el problema cuadrático matriz  $\bar{W}$ .

$x_i$  : Variable independiente  $i$ .

$\bar{X}_p$ : Vector que contiene el conjunto de variables independientes consideradas en un problema de optimización que se localizan en un punto P dentro del espacio de búsqueda.

$x_{i,p}$ : Valor de la variable independiente  $i$  en un punto  $p$  definido.

$xl_i$ : Límite inferior de la variable independiente  $i$ .

$xli_{i,p}$ : Límite inferior de la variable independiente  $i$ .

$xs_i$ : Límite superior de la variable independiente  $i$ .

$xsi_{i,p}$ : Límite superior de la variable independiente  $i$ .

$\Delta x_i$ : Delta de la variable  $i$  definido para generar los gradientes.

$\Delta x r_i$ : Delta de la restricción correspondiente a la variable  $i$ . Se requiere para especificar los subsectores de búsqueda.

$xli_0$ : Límite inferior de la variable independiente  $i$  en el planteamiento inicial del problema de optimización

$xli_i$ : Límite inferior de la variable independiente  $i$  en el planteamiento en los subsectores de búsqueda

$xso_0$ : Límite superior de la variable independiente  $i$  en el planteamiento inicial del problema de optimización

$xsi_i$ : Límite superior de la variable independiente  $i$  en el planteamiento en los subsectores de búsqueda

$\bar{X}$ : Vector que contiene las  $n$  variables independientes del modelo.

$Y_j(\bar{X})$ : Valor de la restricción  $j$  evaluada en  $\bar{X}$ .

$z$ : Longitud a lo largo del riser o el regenerador.

$\rho_{cat}$ : Densidad del catalizador.

$\epsilon$ : Fracción de vacío.

$\epsilon_D$ : Fracción vacía en la fase densa del regenerador.

$\phi$ : Función de desactivación del catalizador debido a la deposición de coque.

$\nu_{l,r}$ : Coeficiente estequiométrico del lump  $l$  en la reacción  $r$ .

$\delta_r$ : Orden de la reacción  $r$ .

$\phi_0, \phi_1$ : Parámetros que definen la función de desactivación del catalizador.

**TITULO:** DESARROLLO DE UN ALGORITMO PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UNA UNIDAD DE RUPTURA CATALITICA EN MODELO EN ESTADO ESTABLE\*

**AUTOR:** JAVIER OSWALDO LIZCANO PRADA\*\*

**PALABRAS CLAVE:** URC, Nafta, Aditivo de Propileno, Optimización, Simulación.

**DESCRIPCIÓN:**

La presente tesis de maestría trata sobre el desarrollo de un algoritmo propuesto para encontrar las condiciones operacionales que optimicen el desempeño de una Unidad de Ruptura Catalítica. Inicialmente la optimización implica maximizar o minimizar el valor de algún producto, o maximizar el beneficio económico de la URC. Para realizar la optimización se desarrollo un modelo de simulación en estado estable de la URC, que contempla la relación entre el Reactor y el Regenerador. El modelo desarrollado simula el efecto en rendimientos y condiciones operacionales, debido a la variación en tales como la calidad y cantidad de carga procesada, temperatura de reacción, aire al regenerador, aditivo de propileno, ruptura de nafta en la base del riser, entre otras. Un modelo de 6-lumps es usado para caracterizar la carga y los productos. El modelo es sintonizado con datos reales de la URC industrial que procesa una mezcla de cargas pesadas. Las simulaciones del modelo sintonizado muestran una desviación aceptable con los datos industriales.

El algoritmo desarrollado propone una mejora al método tradicional SQP, que reduce el tiempo de cálculo al disminuir la cantidad de puntos de simulación requeridos para encontrar el óptimo, comparando los resultados obtenidos aplicando los métodos tradicionales SQP y GA, se obtiene una reducción de entre el 26% y 86% en el tiempo de cálculo. El algoritmo de optimización es flexible y funciona en múltiples escenarios, es aplicado en la maximización del beneficio económico, la conversión de la carga y el rendimiento de ALC. Se consideraron restricciones en la temperatura de la fase densa y diluida del regenerador, y en la circulación de catalizador regenerador. Las variables independientes consideradas fueron la temperatura de precaliente, el flujo de carga, la temperatura de reacción y aditivo de propileno.

---

\* Tesis de Maestría.

\*\*Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Maestría en Ingeniería Química. Director. Dr. Sc. ViatcheslavKafarov. Codirectora Ms. Sc. Tania Mireya Chanaga Quiroz.

**TITLE:** DEVELOPMENT OF AN OPTIMIZATION ALGORITHM FOR A FLUID CATALYTIC CRACKING UNIT IN STEADY STATE MODEL \*

**AUTHOR:** JAVIER OSWALDO LIZCANO PRADA\*\*

**KEY WORDS:** FCC, Propylene, Naphtha Cracking, Optimization, Simulation.

**DESCRIPTION:**

In the present thesis, was developed, an optimization algorithm for a fluidized catalytic cracking unit (FCCU). A steady state model was developed for simulating the performance of the FCCU. The simulator includes the mass and energy balance for the riser reactor and the regeneration systems. The new model considerate the effect of naphtha cracking in the riser base, and the effect of propylene additive. A six-lump model is used to characterize the feed and the products. The model is tuned using industrial data. Model predictions were found to be in close agreement with the industrial data.

The sequential quadratic programming (SQP) is adapted, and the maximization of an objective function related to the developed steady state FCCU model is carried out by the new optimization procedure. The optimization algorithm is flexible and works with multiple scenarios, it was applied to maximize a profit function, feed conversion and LCO yield. The regenerator dense temperature, regenerator dilute temperature and regenerated catalyst circulation rate, were used as constrained dependent variables. The temperature of the feed entering the reactor riser, the naphtha base riser flow, propylene additive, feed flow, riser temperature and the air flowrate, were used as manipulated variables without violating any of the constraints. The number of objective function evaluations and computation time, required for this problem is found to reduce in 26 to 86%, as compared to when SQP and genetic algorithm (GA) are used.

---

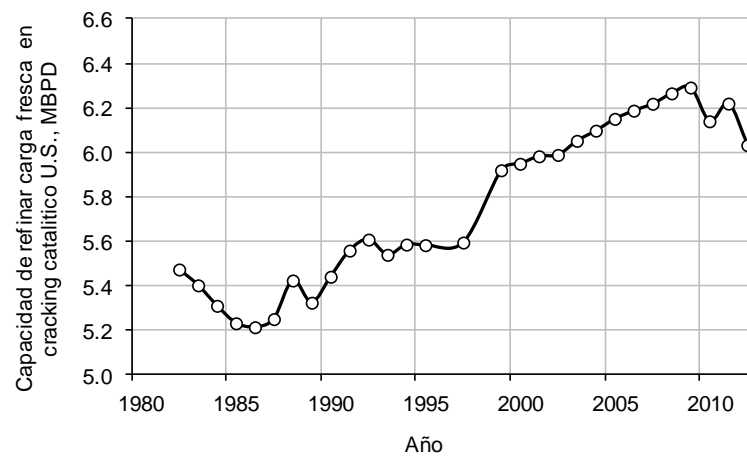
\* Research work.

\*\*Universidad Industrial de Santander. Physicochemical Engineering Faculty. Graduated Engineering Chemistry School. Master in Chemical Engineering. Director. Dr. Sc. ViatcheslavKafarov. Co-director Ms. Sc. Tania Mireya Chanaga Quiroz.

## INTRODUCCIÓN

Las Unidades de Ruptura Catalítica (URC), también conocidas como FCCU por sus siglas en inglés (*Fluid Catalytic Cracking Units*), forman parte de los procesos de conversión en la refinación del petróleo. La actividad principal de una URC es convertir fracciones de hidrocarburos (HC) con alto peso molecular y bajo valor comercial, en compuestos más livianos y valiosos por medio de la ruptura catalítica. Para realizar el proceso se requiere de un catalizador de origen zeolítico. La alta flexibilidad en el diseño de catalizadores y equipos, permiten que las URC puedan procesar un amplio rango de tipo de cargas. Por sus cualidades, la capacidad de procesar cargas frescas en URC en los U.S. se ha incrementado en un 15% desde la década de los 80's (Figura 1).

**Figura 1.** Variación de la capacidad en carga a URC en U.S.



Fuente: EIA, 2013

Las URC realizan un proceso caracterizado por sus complejas reacciones altamente no lineales de ruptura catalítica, que están sujetas a un conjunto de restricciones operacionales. A pesar de ser un proceso vigente por más de 50 años, debido a su complejidad, se mantienen los esfuerzos por avanzar en el estudio de operar las URC de forma óptima, incentivado por la gran cantidad de productos valiosos de alto valor que se obtienen.

## **JUSTIFICACIÓN**

Las unidades de ruptura catalítica producen gran parte de los combustibles líquidos que se consumen en el país, y también son la principal fuente de los petroquímicos como etileno y propileno. La planeación de la operación de las URC comprende indicar las condiciones operacionales que se deben fijar, con el objetivo de cumplir con la producción de algún producto deseado.

La versatilidad operacional de las URC le permite ajustar sus condiciones operacionales, con el objetivo de direccionar sus rendimientos hacia alguno de sus productos, una URC puede estar direccionada hacia la producción de GLP, Nafta ó ALC. Durante su operación, la URC debe afrontar variaciones en la calidad y cantidad de la carga suministrada, y estado del catalizador circulante, en ocasiones estas variaciones son programadas, y en otras son cambios inesperados que obstaculizan el cumplimiento de la planeación de la producción.

Son numerosos los modelos reportados en la literatura que pretenden simular la operación de las URC en estado estable, los cuales varían en su complejidad dependiendo de los fenómenos que consideran simular. Estos modelos pueden estar formados desde simples sistemas de ecuaciones algebraicas que no requieren ser resueltas de forma simultánea, hasta modelos más complejos compuestos por sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales que requieren de procesos iterativos para ser resueltos. Junto con el complicado proceso de

simulación del proceso de ruptura catalítica, está la preocupación de lograr utilizar el modelo para encontrar las mejores condiciones operacionales.

El presente trabajo discute sobre el problema de cómo encontrar las mejores condiciones operacionales que debe tener la URC, que maximicen una función objetivo de interés, respetando el conjunto de restricciones en sus variables operacionales, utilizando un modelo de simulación de la URC iterativo, que contempla varios fenómenos como la ruptura de nafta en la base del riser, y la presencia de aditivo de propileno, evitando considerar las simplificaciones en el modelo que reducen su capacidad de simulación. La particularidad de este tipo de modelo produce que el espacio de búsqueda no sea lineal, y no sea continuo. El caso de estudio al cual es aplicado este procedimiento de optimización es una refinería que procesa crudos pesados, y contempla la posibilidad de enviar varios tipos de cargas pesadas a la URC.

## **OBJETIVOS**

### Objetivo general

Desarrollar una herramienta computacional que permita realizar el seguimiento operacional de las Unidades de Ruptura Catalítica (URC), mediante la simulación y optimización de las condiciones operacionales.

### Objetivos específicos

Desarrollar un algoritmo de optimización, que permita maximizar el beneficio económico u optimizar rendimientos del reactor, considerando un determinado número de condiciones operacionales, y sujeto a restricciones operacionales, utilizando un simulador en estado estable de Unidades de Ruptura Catalítica que contemple la integración energética del Reactor y el Regenerador.

Desarrollar un software que aplique el algoritmo de optimización desarrollado, y permita utilizarlo como herramienta en el análisis operacional de URC comerciales.

## **PRESENTACIÓN DEL DOCUMENTO**

El desarrollo del texto plantea inicialmente en el capítulo 1 una descripción de los fenómenos que ocurren en el proceso de ruptura catalítica dentro de la URC, busca contextualizar la terminología y filosofía del proceso, con el objetivo de permitir una experiencia más enriquecedora de los capítulos posteriores. Se presenta el caso de estudio evaluado y el volumen de control sujeto a estudio, indicando las partes que componen la URC, y sus interacciones con las unidades inmediatas que envían carga y reciben productos.

En el capítulo 2 se presenta el análisis del estado del arte relacionado con el desarrollo de modelos para la simulación de las URC, y los métodos que normalmente son aplicados para la optimización de URC.

En el capítulo 3 se presenta una descripción detallada del modelo utilizado para la simulación de la URC en estado estable. El conocimiento profundo del funcionamiento del modelo, es fundamental para el desarrollo del proceso de optimización, ya que este proporciona el comportamiento de la función objetivo y las restricciones.

En el capítulo 4 se plantea el problema de optimización, identificando cuáles son las variables de función objetivo, las variables independientes y dependientes, y el conjunto de restricciones. Se presenta en detalle todo el desarrollo matemático que permite relacionar el módulo de simulación presentado en el capítulo 3 con el algoritmo de optimización desarrollado.

En el capítulo 5 se detalla el algoritmo desarrollado para resolver el problema planteado. La presentación del algoritmo en forma de diagramas de flujo permite consolidar el desarrollo matemático efectuado en el capítulo 4, en un conjunto de pasos claramente definidos que facilitan su comprensión, y reproducibilidad en cualquier lenguaje de programación.

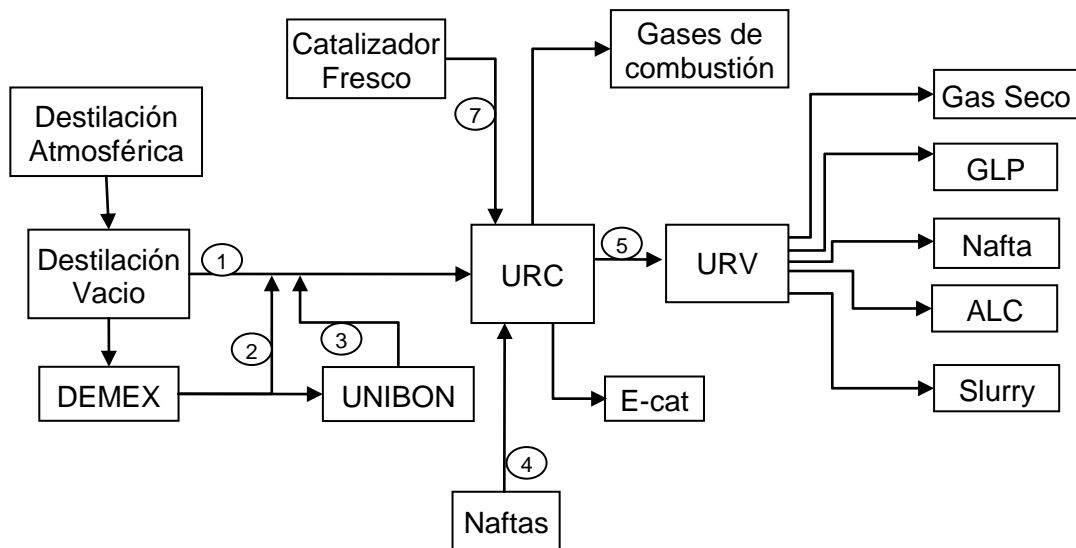
En el capítulo 6 se presenta la aplicación del algoritmo desarrollado en la solución de varios escenarios de optimización. Se comparan los tiempos de cálculo del algoritmo desarrollado con las metodologías de optimización más utilizadas, como lo son los Algoritmos Genéticos y la Programación Secuencial Cuadrática. Es en este capítulo en donde se logra apreciar con mayor claridad el aporte novedoso que este estudio generó.

## 1. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE RUPTURA CATALÍTICA

Las URC procesan cargas provenientes de diferentes partes de la refinería. En la Figura 2 se muestra como caso de estudio una URC que recibe las siguientes cargas:

- VGO (Vacuum Gas Oil), Gasóleo proveniente de la unidad de destilación al vacío. (1 en Figura 2)
- DMO (Demetalized Oil), Aceite Desmetalizado proveniente de DEMEX. (2 en Figura 2)
- DMOH (Demetalized Oil Hydrotreated), Aceite Desmetalizado Hidrotratado de Unibon. (3 en Figura 2)
- Naftas. (4 en Figura 2)

**Figura 2.** Diagrama esquemático de URC en refinería



Fuente: Autor

Estas cargas son sometidas al proceso de ruptura catalítica dentro de la URC. Los diferentes productos gaseosos de la reacción se envían todos mezclados en una misma corriente denominada “Producto Reactor” (5 en Figura 2) a la Unidad Recuperadora de Vapores (URV). En la URV se separa el producto reactor en las corrientes descritas en la Tabla 1.

**Tabla 1.** Definición de Hidrocarburos producidos en la URC

Corriente	Nombre del Lump	Compuestos
Gas Seco	GS	Hidrógeno, H <sub>2</sub> S, Metano, Etano, Etileno.
Gas Licuado del Petróleo	GLP	Propano, Propileno, N-Butano, I-Butano, Butilenos.
Nafta	NF	Desde C5 hasta 430°F.
Aceite Liviano de Ciclo	ALC	Desde 430°F hasta 650°F.
APC+Slurry	SI	Desde 650°F hasta el punto final de ebullición de la mezcla.

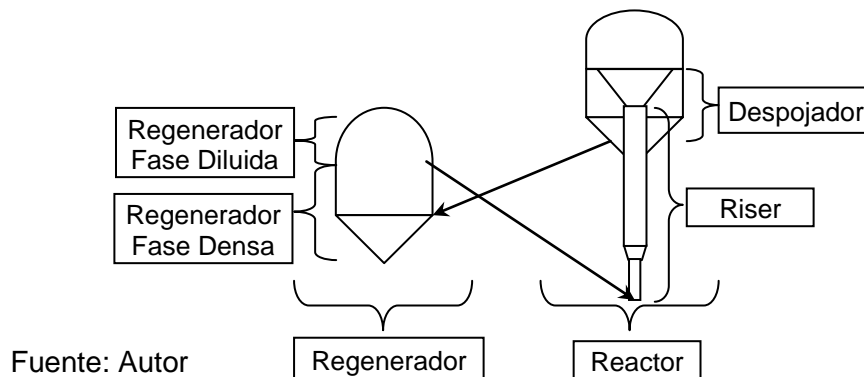
Fuente: Autor

De la definición de los productos de la reacción (Tabla 1) recuperados en la URV, es importante resaltar que para compuestos pesados se acostumbra utilizar intervalos de temperatura para diferenciarlos. En los productos livianos como GS y GLP, si es posible discriminar cada uno de sus principales compuestos. Para el caso de los compuestos más pesados que se constituyen de una compleja mezcla de HC, es más conveniente utilizar una temperatura de corte para definir su intervalo. Las temperaturas de corte de 430°F, 650°F y 750°F se conocen como temperaturas de corte estándar, por que sirven para definir un estándar en el punto inicial y final de cada producto pesado, y permitir realizar comparaciones entre diferentes estados operacionales de la planta. Esta agrupación de varios tipos de HC reunidos según el corte de temperatura es conocida como Lump.

Otro flujo de masa que ingresa a la URC es el catalizador de ruptura catalítico (7 en Figura 2). Se agrega constantemente durante la operación en forma de “Catalizador Fresco”, y es retirado en la forma de “Catalizador de Equilibrio” (E-Cat). El catalizador fresco es el catalizador nuevo que nunca ha sido utilizado en una URC, por otro lado, el E-Cat es el catalizador que se está utilizando en el proceso de ruptura, y permanece circulando dentro de la URC. Estos dos catalizadores poseen propiedades diferentes debido a los procesos que ocurren dentro de la URC.

El esfuerzo del presente estudio se concentra en la optimización de la sección URC. Se define por lo tanto como volumen de control para el estudio, a la URC cuyas principales partes se muestran esquemáticamente en la Figura 3.

**Figura 3.** Principales secciones de la URC



Existen diferentes tipos de URC, entre las cuales se destacan las de Modelo IV (MacFarlane *et al.*, 1993), UOPI y Orthoflow, todas ellas son diferentes en su configuración, pero comparten la misma filosofía de proceso. En general, toda URC está compuesta principalmente por una sección de reacción de la carga

(Reactor), y otra sección de regeneración del catalizador (Regenerador) que dependen íntimamente una de la otra.

En el reactor ocurren principalmente las reacciones de ruptura catalítica. Posee un Riser con uno o más puntos de inyección de carga de hidrocarburos, seguido en la parte superior de un sistema de ciclones y un despojador.

En el regenerador ocurre la combustión del coque depositado en la superficie del catalizador durante las reacciones de ruptura. El Regenerador se puede describir separándolo en dos secciones, una inferior denominada Fase Densa del Regenerador, y una superior denominada Fase Diluida del Regenerador donde están ubicados otro sistema de ciclones, esta separación se genera gracias a que en la fase densa se almacena la mayor cantidad de catalizador de la unidad.

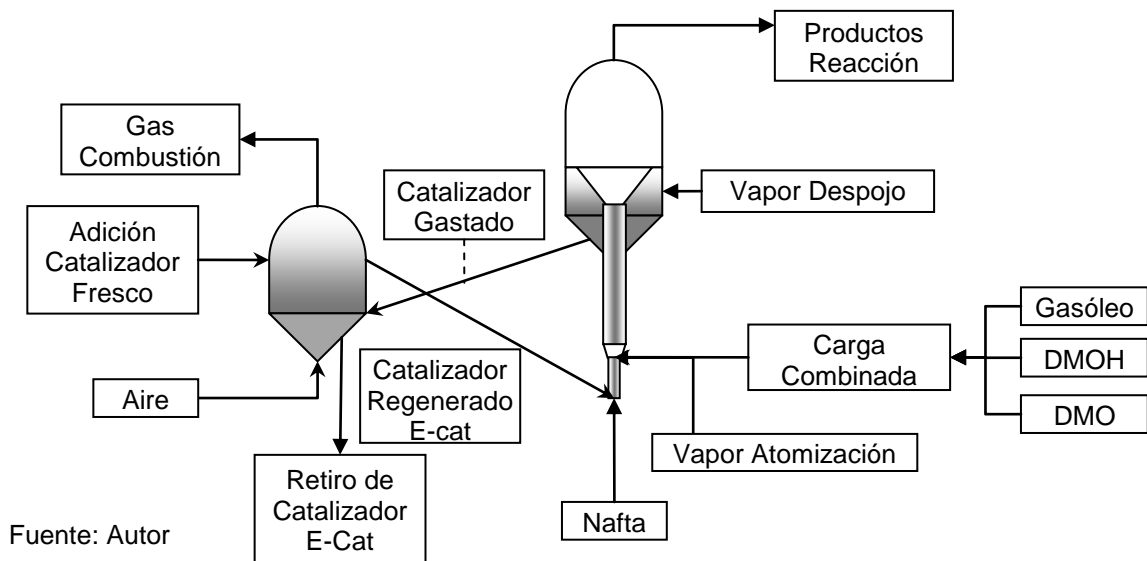
El reactor y el regenerador de toda URC están relacionados por la constante circulación del catalizador de equilibrio (E-cat), que fluye entre los dos recipientes. A continuación se describe el funcionamiento del ciclo de Reacción & Regeneración al cual está sometido el catalizador.

En la Base del Riser (Figura 4), el catalizador regenerado (E-Cat) proveniente de la fase densa del regenerador, se pone en contacto con la Nafta que es inyectada. En este punto el E-Cat posee una alta temperatura debido al proceso de combustión en el regenerador, logrando vaporizar instantáneamente la Nafta e iniciar el proceso endotérmico de ruptura catalítica.

En el segundo punto de inyección, la mezcla de las cargas pesadas conocida como “Carga Combinada” es atomizada con la ayuda de vapor, para entrar en contacto con el E-Cat que mantiene una alta temperatura. El catalizador suministra la energía suficiente para evaporar la Carga Combinada, y realizar las reacciones endotérmicas de ruptura catalítica. Durante el proceso de ruptura catalítica en el

Riser ocurren una compleja serie de reacciones endotérmicas que convierten la carga en los productos deseados (Tabla 1). Durante las reacciones de ruptura catalítica también se produce “coque”, que se deposita de forma sólida en la superficie del catalizador. El coque generado desactiva el catalizador al cubrir sus puntos activos, esta desactivación temporal se puede recuperar quemando el coque depositado.

**Figura 4.** Principales corrientes de flujo en la URC



Fuente: Autor

La mezcla de catalizador y gases que abandonan el riser, ingresan a un sistema de ciclones que separa el catalizador de los productos gaseosos. El catalizador desactivado es enviado al despojador, y la mezcla de “Productos de Reacción” es enviada del reactor hacia la URV. En el despojador el catalizador entra en contacto con “Vapor de Despojo” que ayuda a recuperar hidrocarburos ocluidos dentro del catalizador.

El catalizador que abandona el despojador se conoce como catalizador gastado, debido a que su actividad es menor. Para lograr recuperar la actividad del catalizador, este es enviado al regenerador. El Regenerador cumple la función de quemar el coque depositado en el catalizador y regenerarlo parcialmente. El proceso de combustión del coque se realiza inyectando aire al regenerador, que entra en contacto con el catalizador gastado y produce la reacción de combustión. Este proceso se realiza de tal modo que la mayor cantidad de catalizador se acumula en el fondo del regenerador, creando una interface que permite separar al regenerador en fase diluida y densa.

En la fase densa el aire atraviesa el lecho, el oxígeno se consume, y se convierte en gases de combustión, los cuales abandonan la fase densa del regenerador e ingresan a la fase diluida, en donde dependiendo de las condiciones de operación, puede o no ocurrir la reacción de poscombustión. Parte del catalizador que reposa en la fase densa es arrastrado por los gases de combustión a la fase diluida, para separarlos se utiliza un sistema de ciclones que regresa el catalizador a la fase densa y libera los gases de combustión a la atmósfera.

Es así como con ayuda del catalizador, la masa de hidrocarburos que entra al reactor se convierte en coque y en los productos descritos en la Tabla 1. El coque abandona el sistema en forma de gases de combustión, y los hidrocarburos son enviados todos mezclados en la corriente "Producto Reactor".

## 2. ESTADO DEL ARTE

El estudio realizado sobre el estado del arte en la optimización de URC se presenta en tres partes, la primera trata los temas relacionados a la simulación de la sección de reacción, la segunda aborda el planteamiento de la sección del regenerador, y la tercera expone los temas relacionados a la optimización aplicada al proceso.

El análisis de los modelos del reactor y regenerador comprenden la definición de la cinética de reacción, describiendo la relación entre la carga y los productos de la ruptura catalítica, junto con los modelos matemáticos que se aplican para simular el comportamiento de los principales fenómenos que ocurren en ambas secciones. En la parte dedicada a la optimización, se indican los métodos reportados en la literatura que son usados habitualmente en los diferentes tipos de simuladores. Pinheiro *et al.* 2011 presentan una recopilación más profunda de publicaciones relacionadas con los desarrollos en los temas de modelamiento, monitoreo, control y optimización aplicados al proceso de rupturacatalítica.

### 2.1 SIMULACIÓN DEL RISER

En la Figura 3 se presenta de forma esquemática las partes más importantes de las URC, conformadas principalmente por un reactor y un regenerador. La simulación de la URC comprende definir los modelos para ambas secciones, donde en el reactor es de crucial importancia la cinética de la reacción.

En el modelo se deben definir las reacciones que se llevan a cabo en el reactor, y que describen la forma en que los reactivos se convierten en productos. Debido a la complejidad del sistema que reacciona, el problema de plantear un modelo cinético que describa las reacciones, y permita simular los rendimientos ha sido

abordado desde múltiples puntos de vista. A lo largo del tiempo se observa en la literatura que tres posibles planteamientos son normalmente asumidos (Zong *et al.*, 2010) los modelos semi-empíricos, los modelos cinéticos de lumps y los modelos cinéticos a nivel molecular.

Los modelos que contemplan la cinética de reacción basada en lumps, son un balance entre el planteamiento teórico complejo del nivel molecular y la practicidad del planteamiento semi-empírico. Agrupar los sistemas compuestos por mezclas complejas en lumps que presentan un comportamiento similar ha dado buenos resultados, permitiendo describir los fenómenos de las reacciones de ruptura catalítica (Gomez *et al.*, 2009). La definición de la cantidad de lumps que conforman el sistema de reacción está relacionada con la información que se desea simular, el presente caso de estudio contempla una unidad industrial, que se simula por medio de un sistema de 6 lumps, describiendo los cinco principales productos mencionados en la Tabla 1 y el coque.

Dentro de los primeros trabajos publicados sobre la simulación de los productos en cracking catalítico se destaca el desarrollado por Voorhies, 1945, al desarrollar expresiones empíricas que permiten describir la formación de coque en función del tiempo de residencia. La simulación del rendimiento de coque es una de las primeras preocupaciones, debido a que este se quema en el regenerador suministrando la energía que se consume en todos los procesos del reactor, principalmente la vaporización de la carga, y las reacciones endotérmicas de ruptura, el trabajo de Voorhies permite obtener una relación entre la cantidad de coque depositado y la severidad de la reacción. El lump de coque es uno de los más importantes, y siempre debe estar presente en cualquier sistema de reacción. Uno de los 6 lumps del sistema de reacción aplicado corresponde al rendimiento de coque, forma parte de un sistema de ecuaciones diferenciales y no de expresiones empíricas.

Como en toda reacción, es de interés conocer la conversión de los reactivos en productos, Blanding 1953, propuso uno de los primeros modelos de conversión al separar el sistema en reactivos y productos, obteniendo expresiones cinéticas que relacionan la conversión de la carga con el tiempo de residencia. La definición de conversión de este sistema de reacción se acostumbra a definirse con base a la temperatura estándar de 430°F, que representa el punto final de la nafta, separando los compuestos que se encuentran por debajo de esta temperatura y junto al coque, como productos de la reacción, y por encima a 430°F como carga que no reacciona. Esta misma definición de conversión es aplicada en el modelo, pero a diferencia de existir un solo lump para simular la conversión, ésta se obtiene al determinar los rendimientos de los productos individuales de APC+Slurry y ALC.

El planteamiento de estos sistemas de reacción en base a lumps, como el desarrollado por Weekman & Nace 1970, de tres lumps, donde se describen los fondos, el coque y los productos, permitieron ser utilizados en la creación de modelos que contemplaban las secciones de reactor y regenerador, como el propuesto por Lee & Groves, 1985. Esta misma filosofía de simulación es aplicada en el modelo desarrollado en esta investigación, complementándolo principalmente con el fenómeno de procesamiento de la nafta y carga por separado, y la adición de aditivo de propileno.

La conversión y el coque, no son la única información que se desea simular, también son importantes los rendimientos de los principales productos, como los descritos en la Tabla 1. Son los modelos de 4 o más lumps los que empiezan a ampliar la discriminación de los productos de interés, como el modelo de 4 lumps propuesto por Liang 1989, conformado por coque, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>, nafta y carga no convertida, o el propuesto por Ancheyta *et al.* 1999, de 5-lumps agrupados en Gasóleo, nafta, GLP, gas seco y coque, conformando un sistema de 7 reacciones, considerando un modelo isotérmico de reactor tipo flujo pistón, calibrándolo con

datos experimentales obtenidos a partir de pruebas MAT, variando la velocidad espacial de la carga. Dentro de la familia de los modelos de 5 lumps también se encuentra el propuesto por Bollas *et al.* 2007, este modelo divide el sistema nuevamente entre gasóleo, nafta, GLP, gas seco y coque, a diferencia de los anteriores, propone 9 diferentes reacciones entre los lumps, la determinación de los parámetros es realizada utilizando pruebas en planta piloto, que brindan resultados más representativos a la planta industrial en comparación con las pruebas MAT. Dupain *et al.* 2003, estudia la craqueabilidad de los compuestos aromáticos utilizando un modelo de 5 lumps, proponiendo un sistema conformado por 6 reacciones, revelando que la probabilidad de reacción de un anillo aromático es baja a las condiciones existentes dentro de una URC. Estos modelos son presentados con aplicaciones a tratamientos de datos a nivel de laboratorio, utilizando equipos como el MAT, DCR o ACE, para validar el modelo cinético, no se pueden aplicar directamente en la simulación de la planta industrial hasta no ser acoplado al sistema de reacción y regeneración.

Guerra & Mountagut, 2005, aplicaron un modelo de 5 lumps en la determinación de parámetros cinéticos utilizando pruebas en planta piloto DCR, utilizando las mismas cargas procesadas en la planta industrial sujeta a estudio. Este modelo fue utilizado posteriormente por Montagut 2009, en el desarrollo de una metodología para escalar los datos desde pruebas planta piloto a rendimientos planta industrial sujeta a estudio. Este modelo agrupa en los fondos al ALC y el Slurry, por lo que se propone en el presente estudio separarlos agregando el sexto lump correspondiente al ALC.

Los sistemas de lumps se pueden diseñar para aplicaciones específicas, como el caso del proceso MIP (*maximizing iso-paraffins*), donde se desea controlar el contenido de olefinas y aromáticos en la gasolina. Zong *et al.* 2010, proponen un sistema de reacción de 12 lumps, donde se contempla discriminar los hidrocarburos presentes en los fondos y el ALC entre los grupos alquilo, cicló-

alquilo y aromáticos, la nafta se divide entre saturados, alquenos y aromáticos, el propileno y el coque poseen sus propios lumps, el resto de gases que conforman el GLP y más livianos se agrupan en otro, este modelo requiere determinar 72 parámetros correspondientes a los factores preexponencial y de energía de activación. Este modelo es diseñado para ser aplicado en una unidad que cuenta con dos riser separados, cada uno con tiempos de residencia diferentes. El caso de estudio utilizado en la presente investigación, contempla una URC con un solo riser.

Debido al creciente número de sistemas de reacción propuestos, persiste la inquietud de cuál es el más indicado para aplicado, existen estudios donde se analizan los sistemas de reacción para determinar su viabilidad, Oliveira & Biscaia 1989, compararon cuatro modelos de 4, 10, 11 y 12 lumps, reportando que el modelo de 4 presenta mejor predicción para la simulación del rendimiento de nafta, comprobando que un sistema de mas lumps no necesariamente es mejor.

Dentro del modelo cinético de reacción se debe contemplar la desactivación del catalizador. Weekman 1968-1970, presenta un modelo que describe la conversión como una reacción de segundo orden, junto con un decaimiento de primer orden en la actividad del catalizador, la expresión matemática para la conversión es resuelta analíticamente, asumiendo un modelo reactor flujo tipo pistón con mezcla perfecta con la fase sólida. En el modelo de 6 lumps planteado no es posible resolver el sistema de forma analítica, por lo que la expresión de desactivación forma parte del conjunto de ecuaciones diferenciales que se resuelven de forma conjunta por métodos numéricos.

Fernandes *et al.* 2012, compara los dos tipos de funciones de desactivación más utilizadas, una donde se relaciona con el tiempo de residencia del catalizador, y otra relacionada con el coque en el catalizador, utilizando un sistema de reacción de 6 lumps y 10 reacciones, reportando que no hay diferencias apreciables en

describir el mismo fenómeno de desactivación utilizando alguna de las dos diferentes funciones. En el sistema de reacción utilizado en el presente estudio, se considera la desactivación del catalizador en función de la cantidad de coque depositado.

La mayoría de los modelos de lumps consideran que al reaccionar un lump se convierte en otro lump, Gupta *et al.* 2007 propone un sistema de reacción en donde un lump se craquea en otros 2 lumps, y la producción de coque está asociada con cada reacción, creando un sistema compuesto por 50 lumps, caracterizando cada uno con la temperatura media de ebullición. Este modelo fue mejorado por Gupta & Kumar, 2008, al considerar un sistema de reacción en el riser de tres fases, resistencia a la transferencia de masa entre las fases, y el calor de adsorción del coque en la superficie del catalizador, simplificando con expresiones algebraicas para simular la variación de la temperatura en las fases del riser. El tiempo de cálculo de la optimización, depende del tiempo requerido en cada simulación, se requiere utilizar un sistema de reacción que posea un balance entre información suministrada y rapidez, un sistema de muchos lumps consume más tiempo, y no aporta información adicional valiosa.

Otro tipo de agrupamiento es el realizado en base a la estructura molecular de los compuestos del sistema reaccionante, una muestra de este planteamiento es el aplicado en la creación de un modelo que describe las reacciones secundarias que ocurren en la ruptura de la nafta (Wang *et al.*, 2005, Chen *et al.*, 2007). A diferencia de los cortes pesados de hidrocarburos, en la nafta es posible determinar con mayor detalle su composición, logrando identificar el contenido de parafinas, olefinas, aromáticos, naftenos e iso-parafinas, permitiendo proponer un sistema conformado por 8 lumps compuestos por gases, GLP, ALC + pesados, coque, y la nafta es dividida entre parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos, no se discriminan las olefinas presentes en el GLP y los gases. El proceso de ruptura catalítica de la nafta inyectada en la base del riser, es simulada utilizando un

nuevo sistema de reacción desarrollado, a partir del estudio del comportamiento de los promotores petroquímicos publicado por Gomez *et al.* 2009.

Dentro de los fenómenos que se desean simular, se encuentra el efecto del aditivo promotor de propileno ZSM-5. Degnan *et al.* 2000, presentan un recuento de los sucesos que acaecieron desde su descubrimiento en 1965 por Mobil, su primera prueba industrial en 1983 y posterior comercialización. Zhao & Roberie 1999, evalúan el efecto del aditivo ZSM-5 y la temperatura de reacción en la selectividad de las reacciones de ruptura de gasóleos, concluyendo que el efecto del aditivo es más efectivo para incrementar el rendimiento de propileno. Gomez *et al.* 2009, identifican los promotores de petroquímicos valiosos en la ruptura de naftas y gasóleos pesados, discriminando el efecto que cada familia de hidrocarburo produce sobre los rendimientos. En estos estudios se reporta el comportamiento del aditivo, pero no se proponen expresiones que puedan ser utilizadas para simular su presencia en el catalizador, en el presente estudio se desarrolló un sistema de expresiones que permiten simular el efecto del aditivo de propileno sobre las selectividades del catalizador.

El trabajo desarrollado por Gupta, 2006, en el planteamiento del modelo cinético basado en las estructuras moleculares, es aplicado en la simulación del sistema de reactor regenerador, validando el modelo utilizando información reportada en la literatura. Dentro del modelo de simulación se discriminan una serie de parámetros denominados de sintonización, los cuales permiten ajustar los rendimientos del modelo a los rendimientos reales obtenidos de la planta industrial. En la etapa de simulación se realiza un proceso iterativo donde se busca encontrar los valores de la temperatura de la fase densa del regenerador, y el coque en el catalizador regenerado. La iteración se realiza de forma separada para ambas variables, aumentando considerablemente el tiempo de cálculo. El modelo propuesto selecciona del mismo modo, un conjunto de parámetros que se utilizan para minimizar la diferencia entre los rendimientos medidos y los simulados, pero

mejora el proceso de iteración al proponer la minimización de una función residual, que involucra el efecto de los dos términos, temperatura del regenerador y carbón en el catalizador, reduciendo el tiempo de cálculo en cada simulación.

Fernandes *et al.*, 2007, presentan un modelo que simula el comportamiento en estado estable y dinámico, de una URC que posee dos regeneradores (R2R), donde consideran que la vaporización de la carga en la base del riser es instantánea, debido a que este fenómeno requiere solamente 3% del tiempo de residencia en el riser. En el modelo aplicado al presente caso de estudio, se realiza un balance de energía en el que se involucra la vaporización de la carga, la disminución de temperatura del catalizador y el incremento de temperatura del vapor que ingresa, en donde la predicción del cambio de entalpía de la carga asociado al fenómeno de cambio de fase, es cuantificado utilizando las correlaciones reportadas por Montgomery, 1993, donde se relaciona la energía requerida para vaporizar una carga de hidrocarburos con su caracterización.

## **2.2 SIMULACIÓN DEL REGENERADOR**

El regenerador cumple como principal función la de quemar el coque que se deposita en la superficie del catalizador, y de esta forma recuperar su actividad perdida. La interrelación del regenerador con el reactor, radica principalmente que es el lugar donde se produce la energía que consume el reactor, por lo tanto, en una operación estable la energía producida en el regenerador, proveniente de la combustión del coque, debe ser igual a la consumida en todos los demás fenómenos del proceso, estos incluyen principalmente la vaporización de la carga al riser, las reacciones endotérmicas de ruptura, y el calentamiento del aire al regenerador y los vapores al reactor.

En la simulación del regenerador se desea principalmente describir el comportamiento de combustión del coque, ya que este determina la cantidad de

energía liberada y por lo tanto que es enviada al reactor, la temperatura del regenerador, y la cantidad de coque que permanece en el catalizador regenerado.

El regenerador posee la cualidad de poder ser operado en dos estados, un modo donde la combustión del coque es total, y otro donde la combustión es parcial. La combustión total es el estado operacional más frecuente, se caracteriza por producir un catalizador regenerado con menor contenido de coque, y liberar más energía que se refleja en temperaturas mayores de las fases densa y diluida, los gases de combustión que son liberados a la atmósfera contienen un mínimo de monóxido de carbono, factor importante para disminuir las emisiones de gases contaminantes. La desventaja de este estado operacional es que no permite procesar cargas con un alto contenido de carbón conradson, en comparación con un hipotético estado de combustión parcial, sin embargo, la ventaja de evitar incrementar las emisiones de gases contaminantes son una fuerte razón para mantener este tipo de operación.

La operación del regenerador en estado de combustión parcial, puede permitir procesar cargas más pesadas contaminadas con carbón conradson y metales. Esta operación produce un catalizador con menor actividad al contener mayor cantidad de coque, Han *et al.* 2004, reporta un estudio comparando los dos estados operacionales del regenerador para un mismo modelo, mostrando que la operación en combustión total presenta ventajas económicas sobre la operación en combustión parcial. Los escenarios evaluados son aplicables a una unidad que posee un soplador con la suficiente capacidad para suplir los requerimientos de exceso de oxígeno en la combustión y las temperaturas generadas se encuentran dentro del rango de tolerancia del regenerador, este es un escenario en el que se encuentra la planta industrial que es sometida a estudio.

Dentro del desarrollo de los modelos para simular el regenerador se encuentra el presentado por De Lasa & Grace 1979, donde se presenta el modelo del

regenerador considerando la fase diluida separada de la fase densa, resaltando la importancia de la influencia que la fase diluida ejerce sobre la operación del regenerador. En algunos de los modelos del regenerador reportados en la literatura, se considera que parte del aire que ingresa al regenerador no reacciona con el coque, debido a fenómenos de canalización de flujo dentro del lecho, Errazu *et al.*, 1979, propone un modelo tipo CSTR para la fase del catalizador que no considera el bypass del aire, demostrando que este modelo brinda buena representación para una planta industrial. Este mismo modelo del tipo CSTR es comparado por los autores De Lasa *et al.*, 1981, con otros modelos en una unidad industrial que posee temperaturas en el regenerador de alrededor de 1292°F y bajas relaciones CO/CO<sub>2</sub>, considerando dentro de los análisis las zonas de burbujeo y entrada del aire, como resultado se reporta que el modelo tipo CSTR presenta el mejor desempeño. El modelo del regenerador utilizado contempla la simulación de la fase del catalizador como un CSTR, asumiendo que la cantidad de coque en el catalizador regenerado es uniforme en toda la fase densa del regenerador, y se complementa la simulación al asumir que los gases atraviesan la fase densa en forma de flujo tipo pistón, permitiendo generar los perfiles de gases de combustión a lo largo de la fase densa.

Krishna & Parkin 1985, describen al regenerador como un sistema separado por tres regiones, la primera región es la línea de transferencia que transporta al catalizador gastado desde el despojador hasta el regenerador, la segunda es la fase densa del regenerador donde ocurre la combustión del coque, y por último la tercera región formada por la fase diluida que se encuentra inmediatamente encima de la fase densa, en donde puede ocurrir la reacción de postcombustión del monóxido de carbono. Los resultados de las simulaciones reportadas, mostraron que el aporte de la combustión en la línea de transferencia del catalizador gastado es despreciable, consumiendo menos del 4% del total del coque depositado. La fase densa del regenerador se considera como un sistema donde las partículas de catalizador se encuentran en mezcla, asumiendo que la

conversión de coque y la temperatura del sólido a lo largo del lecho son constantes, despreciando la combustión en las líneas de transferencia.

Zhang *et al.*, 2012, proponen un modelo de simulación del regenerador donde se consideran tres zonas, la fase diluida y la fase densa, esta última es separada entre la zona de ingreso del aire y la zona de burbujeo, el sistema cinético de reacción asumido por el autor no tiene en cuenta la combustión del hidrógeno, considerando que el coque está formado solo por carbono. La relación entre el dióxido de carbono y el monóxido de carbono se simplifica, considerándola constante determinado por una medición experimental, origen que no puede determinarse al momento de realizar simulaciones, esta relación varía fuertemente del estado operacional del regenerador entre combustión total y parcial. Arthur 1950, desarrolló una expresión que describe la velocidad relativa de producción entre el monóxido / dióxido de carbono, en función de la temperatura de reacción, para la combustión de dos tipos diferentes de coque. Esta correlación es utilizada en el modelo para considerar el cambio en la composición de los gases de combustión.

### **2.3 OPTIMIZACIÓN DE URC**

La optimización de las URC puede realizarse para diferentes objetivos, como la optimización en línea dirigida al control avanzado, y la optimización dirigida a la planeación de la producción que se realiza fuera de línea. Este estudio está dirigido hacia la optimización de modelos fuera de línea y no contempla el control avanzado de la unidad.

Existen numerosos estudios relacionados con la optimización de la URC. Rhemann & Schwarz 1989, aplicaron el método de Gradiente Reducido Generalizado (*Generalized Reduced Gradient*, GRG), para maximizar el rendimiento económico considerando las siguientes cinco variables

independientes: flujo de carga fresca, reciclo de APC, reciclo de Slurry, temperatura de reacción y temperatura de precaliente. La optimización se realizó considerando las siguientes restricciones: Temperatura del regenerador, flujo de aire al regenerador, flujo del compresor de gas húmedo en la cima de la fraccionadora principal, carga a la des-etanizadora, flujo a la des-propanizadora y flujos de productos. La función objetivo definida consideraba el precio de los productos, más incentivo por octano en la calidad de la gasolina en el pool, menos el costo de las cargas, servicios y otros costos de operación, utilizando un modelo de análisis operacional para la simulación de la planta industrial. Los autores no reportan detalles del tipo de ecuaciones que contiene el modelo, y tampoco del método aplicado para solucionarlo. Lasdon *et al.*, 1974, describen los principios en que se basa el algoritmo GRG para resolver problemas de optimización que poseen estructuras no lineales, sin embargo es un método poco referenciado y aplicado en la optimización de este tipo de modelos.

Lid & Strand, 1997, desarrollaron un modelo compuesto por 40 ecuaciones algebraicas y 20 variables independientes para simular una unidad de ruptura de residuos, las ecuaciones son obtenidas a partir de regresiones con datos de 235 monitoreos realizados a la planta industrial, el método de optimización empleado es la programación secuencial cuadrática (*Sequential Quadratic Programming, SQP*), utilizando la función NPSOL contenida en las subrutinas de FOTRAN 77. El modelo utilizado en el presente estudio está compuesto por expresiones cinéticas de la reacción, que brindan mayor confianza en la simulación de los fenómenos.

El estudio reportado por Han *et al.*, 2004, utiliza nuevamente el método de optimización SQP en la optimización de modelos en estado estable de URC. El modelo utilizado en la optimización es una simplificación del modelo dinámico en donde los sistemas de ecuaciones diferenciales que describen los fenómenos de reacción en el reactor y el regenerador, son reducidos a sistemas de ecuaciones algebraicas. El modelo es sintonizado utilizando simulaciones obtenidas a partir

del modelo dinámico original, un modelo en estado estable permite simular los estados estacionarios del modelo dinámico, permitiendo optimizar la unidad utilizando los modelos en estado estable, en lugar de los modelos dinámicos que consumen un tiempo de cálculo considerablemente mayor. El algoritmo aplicado en la optimización requiere evaluar el modelo entre 1489 y 10351 oportunidades, para obtener la respuesta a un problema planteado con 7 variables independientes. Como se mostrará, el algoritmo desarrollado mejora el método SQP, requiriendo una menor cantidad de simulaciones.

Otro algoritmo reportado en la literatura es el desarrollado por Luus-Jaakola (LJ) descrito por Sundaralingam, 2001 y aplicado en la optimización de una unidad Modelo IV, considerando un sistema de reacción de 4 lumps, el método LJ consiste en los siguientes pasos:

1. Seleccionar un número aleatorio de puntos alrededor del punto inicial.
2. Evaluar la factibilidad de cada punto seleccionado con respecto a las restricciones consideradas, seleccionando la mejor respuesta.
3. Actualizar el punto inicial por el mejor punto factible encontrado en el paso 2, y se reduce el espacio de búsqueda, se continúa con el paso 1 hasta alcanzar la tolerancia en la función objetivo.

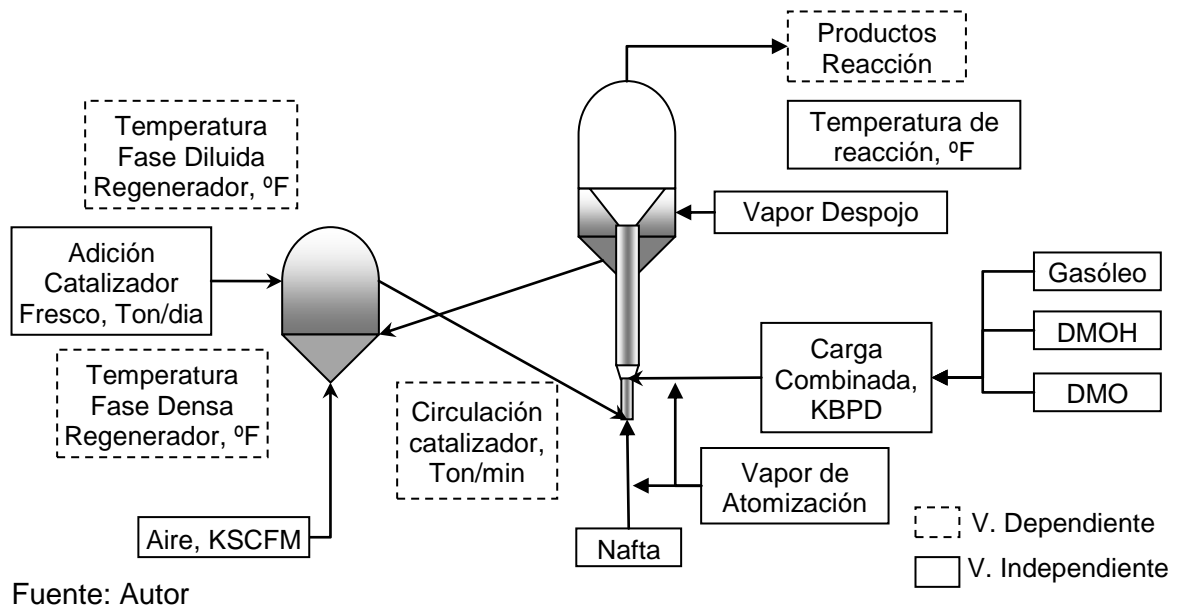
Esta optimización reporta la evaluación de 85 puntos aleatorios en cada iteración y 15 iteraciones, para encontrar el óptimo en un problema con 7 variables. El método LJ también es aplicado por Liao, 2005, en la optimización de un modelo conformado por 4 lumps, reportando que el tiempo de cálculo requerido permanece razonablemente rápido. La búsqueda aleatoria de la dirección hacia el óptimo de este método, requiere de una cantidad mayor de puntos, en comparación con los requeridos para generar los gradientes que describen mejor la función objetivo, y restricciones en inmediaciones al punto evaluado.

Más recientemente Cuadros *et al.* 2013, combinan las técnicas de diseño factorial y optimización con algoritmos genéticos, para aplicarlos en la optimización de URC. Inicialmente se aplica el diseño factorial para generar un conjunto de puntos que evalúan al modelo riguroso, obteniendo información que permite generar un modelo lineal simplificado que correlaciona la función objetivo con las variables de interés. La optimización por medio de algoritmos genéticos (GA) es aplicada a este sistema de ecuaciones lineales que simplifican el problema. Los escenarios de optimización reportados contemplan variar el porcentaje de apertura de la válvula de catalizador regenerador, y el flujo de carga al reactor, con el objetivo de maximizar la conversión, configurando el GA con una población inicial de 100 individuos, y porcentaje de cruzamiento del 50-70%, se requiere en promedio de 26 generaciones, que representan aproximadamente 2600 simulaciones. Esta cantidad de simulaciones en un sistema de ecuaciones lineal pueden realizarse rápidamente, sin embargo, en modelos iterativos se convierte en un proceso que consume un tiempo prohibitivo.

### 3. SIMULACIÓN DE LA URC

El éxito de optimizar la URC depende en gran parte del funcionamiento del modelo de simulación empleado. Los términos que se utilizan en el planteamiento de los modelos del reactor y el regenerador, se pueden separar entre variables independientes (VI), variables dependientes (VD) y parámetros de simulación (PS). Las VI son aquellas variables conocidas, las VD son las variables que se desean simular y los PS son términos que están presentes en el sistema de ecuaciones que conforman los modelos. En la Figura 5 se muestra esquemáticamente el listado de algunas de las VI y VD más importantes durante el proceso de rupturacatalítica.

**Figura 5.** Variables Independientes y Dependientes en la URC



### 3.1 VARIABLES INDEPENDIENTES

Las variables independientes son todas aquellas variables cuyo valor es conocido antes de ejecutar la simulación. A continuación se describen las variables más importantes en el proceso operacional de la URC, y que serán utilizadas a lo largo del texto.

**Temperatura de reacción ( $T_{rxn}$ ):** es la temperatura a la cual la mezcla de productos en estado gaseoso y catalizador abandonan el riser. En la base del riser el catalizador regenerado ingresa a una temperatura cercana a la de la fase densa del regenerador, a medida que asciende a lo largo del riser y se encuentra con los HC de la Nafta y la Carga Combinada, la temperatura decae debido al consumo energético de vaporización decarga, y reacciones endotérmicas de rupturacatalítica. Este proceso genera un perfil de temperatura en el riser, que inicia en la temperatura del regenerador y finaliza en la temperatura de reacción. La temperatura de reacción es una variable que posee un comportamiento particular, debido a que es el resultado de los fenómenos que ocurren en el riser se podría interpretar como una VD, pero es tratada como una VI debido a que en la operación industrial de la planta es una variable controlada. Durante el proceso de simulación la temperatura de reacción debe permanecer igual a la indicada en el proceso.

**Aire al regenerador ( $\dot{F}_A$ ):** El aire al regenerador es capturado de la atmósfera y enviado por medio de un compresor al regenerador. Cumple la función de suministrar el oxígeno necesario para efectuar el proceso de combustión. Normalmente la URC opera con un exceso de aire necesario para quemar el coque del catalizador, sin embargo, un incremento demasiado alto de aire, provoca el enfriamiento no deseado del regenerador.

**Flujo de masa de cargas al Riser ( $\dot{m}_{OT}$ ):** La carga procesada en la URC es de mucha importancia para el proceso, porque esta afecta la distribución de los

productos obtenidos y las condiciones operacionales de la unidad. La carga de Nafta es inyectada en la base del riser, las cargas pesadas de VGO, DMO y DMOH se mezclan formando la “Carga Combinada” antes de ingresar a la URC, y se inyectan al riser en un segundo punto.

Las cargas pesadas procesadas en la URC son una compleja mezcla de HC de alto peso molecular, la descripción detallada de su composición es difícil. Existe un conjunto de pruebas de especial interés en el proceso de rupturacatalítica que miden propiedades de la carga relacionadas con la operación de la URC (Tabla 2). Debido a la complejidad del sistema de extracción, transporte y dietas de crudos a la refinería, junto con las dificultades operacionales de las unidades que entregan carga a la URC, la composición de las cargas no se mantiene constante. En la Tabla 2 se muestra el rango típico de variación para un conjunto de pruebas de laboratorio que permiten describir la calidad de las cargas procesadas.

**Temperatura de precaliente** ( $T_{OT}$ ). La carga de hidrocarburos es precalentada antes de ingresar al riser. Por medio de un tren de intercambiadores de calor con el fondo de la fraccionadora principal en la URV, la carga es calentada hasta alcanzar una temperatura deseada, denominada temperatura de precaliente.

**Tabla 2.** Rango de calidad de carga procesada en la URC

Propiedad	Unidad	Carga Combinada
Densidad a 15 °C	g/ml	0,9345 – 0,9446
Densidad API	°API	18,2 – 19,8
Carbón Conradson	%wt	1,80 – 2,62
Azufre	ppm	7750 - 9580
Nitrógeno Básico	ppm	591 – 790
Níquel	ppm	2,5 – 6,9
Vanadio	ppm	2,8 – 8,6
<b>Distribución Destilación D-7169</b>		
ALC < 650 °F	%wt	7,2 – 15,0
APC 650 – 750 °F	%wt	11,2 – 13,4
Slurry > 750 °F	%wt	71,6 – 81,6
<b>Aromáticos</b>		
Mono – Aromáticos	%wt	4,6 – 5,1
Di – Aromáticos	%wt	3,1 – 3,6
Tri – Aromáticos	%wt	3,1 – 4,1
Tetra – Aromáticos	%wt	3,2 – 4,8
Totales	%wt	13,9 – 16,7

Fuente: Autor

### 3.2 VARIABLES DEPENDIENTES

Las variables dependientes son los valores de todas aquellas variables que se calculan durante el proceso de simulación. A continuación se describen las variables más importantes en el proceso operacional de la URC, y que serán utilizadas a lo largo del texto.

**Temperatura Fase Densa Regenerador ( $T_{reg}$ ):** En la fase densa del regenerador ocurre el proceso de combustión del coque depositado en la superficie del catalizador. El catalizador gastado proveniente del despojador con un alto contenido de coque en su superficie, es puesto en contacto con aire que ocasiona su combustión, liberando grandes cantidades de energía que es capturada por el catalizador, aumentando su temperatura desde la temperatura de reacción, hasta la temperatura de la fase densa del regenerador. Se considera que el catalizador

E-cat que abandona el regenerador e ingresa al riser, posee la temperatura de la fase densa.

**Temperatura Fase Diluida Regenerador ( $T_{Dil}$ ):** La fase diluida del regenerador se encuentra inmediatamente sobre la fase densa. Está compuesta principalmente por gases de combustión, y en menor proporción de catalizador arrastrado por los gases. En esta fase puede ocurrir el proceso de poscombustión, donde el CO se convierte en CO<sub>2</sub>. La postcombustión es un proceso exotérmico que aumenta la temperatura de los gases de combustión a medida que estos ascienden hacia los ciclones, en donde el catalizador arrastrado es recuperado y regresa a la fase densa.

**Relación catalizador aceite ( $C/O$ ):** Es la relación másica entre la masa circulante de catalizador en la unidad, y la masa total de hidrocarburos que están en contacto en el catalizador en el riser. Esta variable es utilizada ampliamente como una medida proporcional a la severidad de la reacción, una alta severidad es asociada con mayores conversiones de la carga.

**Coque en el catalizador regenerado ( $CCR$ ):** Es el coque que permanece en el catalizador luego del proceso de combustión en el regenerador. En el regenerador el catalizador recupera la actividad que se pierde por el bloqueo de los sitios ácidos debido a la deposición de coque en su superficie, dependiendo de las condiciones operacionales del regenerador, una pequeña parte de este coque permanece en su superficie en el momento de retornar al reactor. Esta variable es de importancia para el seguimiento operacional de la planta, y la conversión de la carga, valores altos de  $CCR$  indican un deficiente proceso de regeneración que puede estar asociado a múltiples situaciones tales como bajo flujo de aire, aumento en el carbón Conradson de la carga, deficiente despojo, entre otros. Es de gran interés predecir el comportamiento de esta variable en función de las variaciones operacionales, y mantenerla en valores bajos.

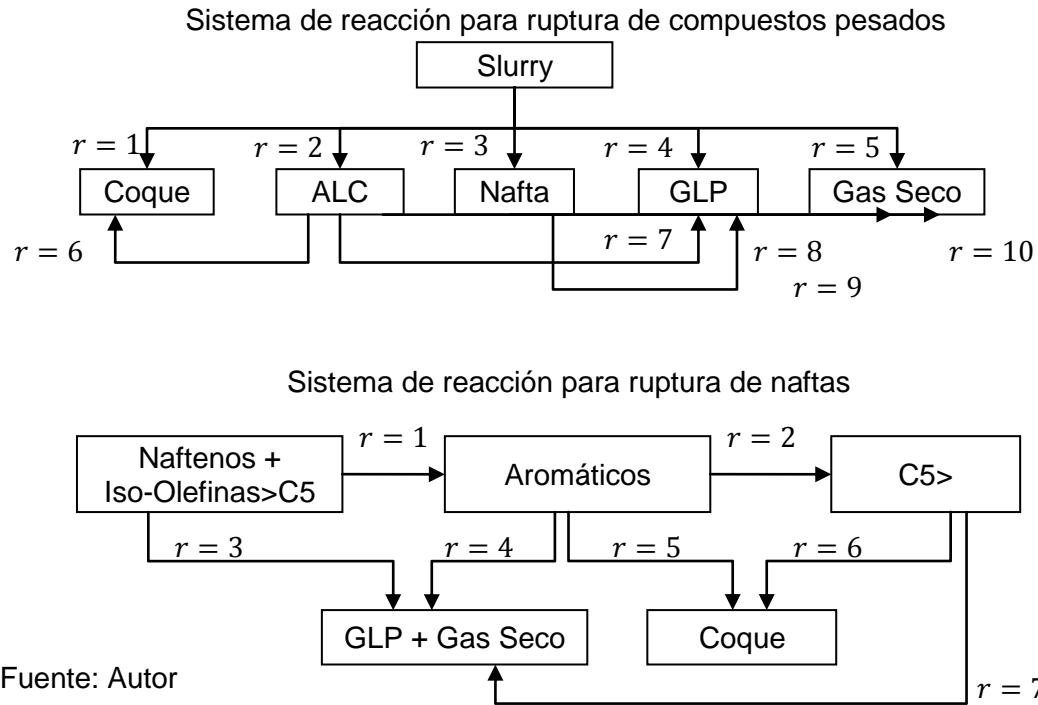
**Conversión** (*Conv*): La conversión de la planta se reporta como un porcentaje en peso de la carga que se convierte en productos, con respecto a la carga total que ingresó a la unidad. Los productos de la reacción que se consideran en la definición de conversión son el Gas Seco, el GLP, la Nafta y el coque.

### 3.3 MODELO DEL REACTOR

En el reactor ocurren simultáneamente varios fenómenos como la atomización y vaporización de la carga, la fluidización del catalizador, reacciones de ruptura térmico, reacciones de rupturacatalítica en la superficie del catalizador, desactivación del catalizador, entre otros. El objetivo principal del modelo del reactor utilizado en este estudio, está enfocado a simular la distribución de los productos de las reacciones de rupturacatalítica.

El modelo utilizado en el presente estudio para simular la cinética de rupturacatalítica de la carga combinada contempla 6-Lumps (Figura 6), que permite describir la distribución de la carga en los productos de mayor interés. Los 6 Lumps conforman un total de 10 reacciones ( $rt = 10$ ). Para la simulación de la ruptura de la nafta en la base del riser, se propone un modelo de reacción de 5 lumps y 7 reacciones (Figura 6), el agrupamiento de los lumps se fundamenta en el estudio de los promotores petroquímicos desarrollado por Gomez *et al.*, 2009.

**Figura 6.** Sistemas de reacción para rupturacatalítica de cargas pesadas y naftas



El modelo matemático del reactor en estado estable, donde se aplica la cinética de la reacción de 6-Lumps para la ruptura de cargas pesadas, y 5-lumps para las naftas, puede ser asumido por el modelo de reactor tubular de flujo pistón (McGreavy & Isles-Smith, 1986, Montagut, 2009, Moro, 1995). El balance de masa está descrito por la ecuación (1), donde se considera la desactivación del catalizador por coque según la ecuación (2), y el balance de energía descrito por la ecuación (3)

$$\frac{d\dot{m}_l}{dz} = A_T \rho_{cat} (1 - \epsilon) \phi \sum_{r=1}^{rt} v_{l,r} A_{0r} e^{\left(\frac{-E_r}{RT(z)}\right)} w_r \delta_r \quad (1)$$

$$\phi = \phi_0 e^{(-CC \cdot \phi_1)} \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dz} = - \frac{\sum \Delta H_r v_{l,r} A_{0r} e^{\left(\frac{-E_r}{RT(z)}\right) w_r^{\delta_r}}}{\sum m_t c p_t} \quad (3)$$

Dónde:

$\dot{m}_l$  : Flujo de masa del lump  $l$ .

$z$ : Longitud a lo largo del riser.

$A_T$ : Área transversal del riser.

$\rho_{cat}$ : Densidad del catalizador.

$\epsilon$ : Fracción de vacío.

$\phi$ : Función de desactivación del catalizador debido a la deposición de coque.

$r$ : Contador de reacciones en el sistema de lumps de la Figura 6.

$v_{l,r}$ : Coeficiente estequiométrico del lump  $l$  en la reacción  $r$ .

$A_{0r}$ : Factor preexponencial en la velocidad de la reacción  $r$ .

$E_r$ : Energía de activación en la reacción  $r$ .

$T_{(z)}$ : Temperatura a lo largo del riser.

$R$ : Constante universal de los gases.

$\delta_r$ : Orden de la reacción  $r$ .

$w_r$ : Concentración másica del reactivo en la reacción  $r$ .

$CC$ : Coque en catalizador en el riser.

$\phi_0, \phi_1$ : Parámetros que definen la función de desactivación del catalizador.

$\Delta H_r$ : Energía de cracking asociada a la reacción  $r$ .

$\sum m_t c p_t$ : Capacidad calorífica de la masa fluyendo en el riser.

El cambio de estado que se presenta en los hidrocarburos al entrar en contacto con el catalizador caliente, consume cerca del 50% de la energía producida por la combustión del coque, y que es transportada del regenerador al reactor por medio del catalizador. Se considera que el proceso de evaporación de las cargas es

instantáneo. La energía consumida por la carga combinada para evaporarse ( $\dot{Q}_{OT}$ ) está dada por las ecuaciones (4 – 6)(Montgomery, 1993).

$$\dot{Q}_{OT} = \dot{m}_{OT}(h_g - h_l) \quad (4)$$

$$h_l = -13,5 + 0,31T_{OT} + 0,00024T_{OT}^2 + 0,0025(API_{OT} - 10)(T_{OT} - 100) + 0,04(UOPK_{OT} - 10)(T_{OT} - 150) \quad (5)$$

$$h_g = 135 + 0,29T_{rxn} + 0,000161T_{OT}^2 + 1,3(API_{OT} - 10) + 0,075(UOPK_{OT} - 10)(T_{rxn} - 450) \quad (6)$$

Dónde:

$h_g$  : Entalpía de la carga combinada en fase gaseosa.

$h_l$  : Entalpía de la carga combinada en fase líquida.

$UOPK_{OT}$ : Factor UOPK para la carga combinada

$API_{OT}$ : Densidad API para la carga combinada

El consumo energético asociado al calentamiento de los vapores que ingresan al reactor para los procesos de atomización ( $VA$ ), despojo ( $VD$ ) y fluidización ( $VF$ ), se consideran para el balance de energía (7-10).

$$\dot{Q}_V = \dot{Q}_{VA} + \dot{Q}_{VD} + \dot{Q}_{VF} \quad (7)$$

$$\dot{Q}_{VA} = \dot{m}_{VA}Cp_V(T_{rxn} - T_{VA}) \quad (8)$$

$$\dot{Q}_{VD} = \dot{m}_{VD}Cp_V(T_{rxn} - T_{VD}) \quad (9)$$

$$\dot{Q}_{VF} = \dot{m}_{VF}Cp_V(T_{rxn} - T_{VF}) \quad (10)$$

Dónde:

$Cp_V$ : Capacidad calorífica del vapor de agua.

$\dot{m}_V$ : Flujo másico de vapor hacia los diferentes servicios industriales.

$\dot{Q}_V$ : Consumo energético asociado al calentamiento del vapor.

$T_V$ : Temperatura de vapor.

La temperatura resultante del contacto entre el catalizador caliente y la carga, se obtiene considerando que el proceso ocurre de forma adiabática (11-14).

$$T_{CO} = \frac{-B_{TCO} + \sqrt{B_{TCO}^2 - 4A_{TCO}C_{TCO}}}{2A_{TCO}} \quad (11)$$

$$A_{TCO} = 0,000161\dot{m}_{OT} \quad (12)$$

$$B_{TCO} = \dot{m}_{OT}(0,075UOPK_{OT} - 0,46) + \dot{m}_{CR}Cp_{CR} + Cp_V(\dot{m}_{VF} + \dot{m}_{VA}) \quad (13)$$

$$C_{TCO} = \dot{m}_{OT}(459,5 + 1,3API_{OT} - 33,75UOPK_{OT} - h_l) - (\dot{m}_{CR}Cp_{CR}T_{Dil} + Cp_V(\dot{m}_{VF}T_{VF} + \dot{m}_{VA}T_{VA})) \quad (14)$$

Dónde:

$T_{CO}$ : Temperatura de la mezcla catalizador carga luego de la vaporización.

$\dot{m}_{CR}$ : Masa de catalizador circulante.

$Cp_{CR}$ : Capacidad calorífica del catalizador circulante.

Se considera que el coque depositado sobre la superficie del catalizador proviene de diferentes fuentes:

- Coque del regenerador ( $\dot{m}_{ckR}$ ): Es el coque que ingresa al reactor debido a que permaneció en el catalizador luego de ser regenerado. Se cuantifica por medio de la propiedad Coque en el Catalizador Regenerado ( $CCR$ ) del E-cat, que cuantifica el porcentaje másico de coque en el catalizador circulante.

$$\dot{m}_{ckR} = \frac{CCR}{100} C/O\dot{m}_{OT} \quad (15)$$

- Coque instantáneo ( $\dot{m}_{ckO}$ ): Es el coque que proviene de la carga combinada, y se deposita en el catalizador durante el proceso de vaporización que se da en el punto de inyección. Este tipo de coque está relacionado con la propiedad de la carga denominada Carbón Conradson

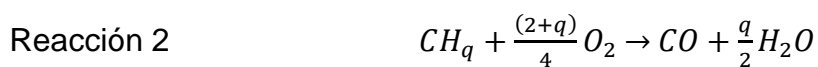
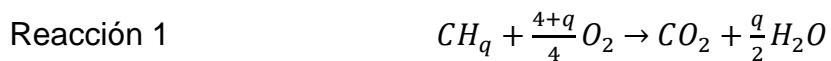
(CRC) por medio del parámetro de simulación “Coque Instantáneo de la carga”  $CI_O$ .

$$\dot{m}_{cko} = \frac{\dot{m}_{OT} CI_O CRC}{100} \quad (16)$$

- **Coque Catalítico:** Es el coque que se deposita en el catalizador fruto de las diferentes reacciones de rupturacatalítica que se dan a lo largo del riser. Se determina resolviendo el sistema de ecuaciones diferenciales que describen las reacciones de rupturacatalítica. El presente modelo contempla que el coque catalítico contiene el aporte del coque producido debido a las reacciones promovidas por la presencia de metales contaminantes en catalizador.

### 3.4 MODELO DEL REGENERADOR

Se considera que el regenerador está conformado por dos fases. La fase densa en la parte baja, y la fase diluida en parte superior. En el presente modelo se considera que en la fase densa ocurren las siguientes reacciones de combustión del coque (Krishna 1985).



El sistema de reacción aplicado considera que el coque está compuesto por Carbono e Hidrógeno, permitiendo describir el contenido de hidrógeno en el coque  $q$ . El modelo matemático que simula los perfiles de flujos en los compuestos gaseosos que reaccionan en el regenerador está dada por un reactor tipo flujo pistón, y la fase sólida del catalizador se considera como un reactor

C.S.T.R.manteniendo uniforme la temperatura y el contenido de carbón en el catalizador regenerado:

$$\frac{d\dot{n}_l}{dz} = A_{Tr}(\nu_l r_1 + \nu_l r_2) \quad (17)$$

$$r_1 = \rho_{cat}(1 - \varepsilon_D) \frac{\dot{m}_{CKR}}{PM_{Cq}} \frac{\dot{n}_{O_2}}{\vartheta_g} A_{01} e^{\left(-\frac{E_1}{RT}\right)} \quad (18)$$

$$r_2 = \rho_{cat}(1 - \varepsilon_D) \frac{\dot{m}_{CKR}}{PM_{Cq}} \frac{\dot{n}_{O_2}}{\vartheta_g} A_{02} e^{\left(-\frac{E_2}{RT}\right)} \quad (19)$$

Dónde:

$\dot{n}_l$ : Flujo molar de los  $l$  compuestos en las reacciones 1 y 2.

$$\beta = \frac{\text{molCO}}{\text{molCO}_2}$$

$A_{Tr}$ : Área transversal del regenerador.

$\dot{m}$ : Flujo másico.

$PM_{Cq}$ : Peso molecular del coque.

$\vartheta_g$ : Flujo volumétrico total.

$\varepsilon_D$ : Fracción vacía en la fase densa del regenerador.

En la fase diluida del regenerador se considera que ocurre la siguiente reacción de postcombustión:



Los perfiles de flujo molar a lo largo de la fase diluida se consideran como un reactor flujo tipo pistón, y están dados por la ecuación (20).

$$\frac{d\dot{n}_l}{dz} = A_{Tr} \nu_l \dot{n}_{CO} \frac{\dot{n}_{O_2}^{0,5}}{\vartheta_g^{1,5}} A_{03} e^{\left(-\frac{E_3}{RT}\right)} \quad (20)$$

En la fase diluida se presenta un cambio en la temperatura de los gases. Cuando abandonan la fase densa se inicia el proceso de postcombustión, aumentando su temperatura y generando un perfil a medida que ascienden hacia los ciclones. El perfil de temperatura está dado por la ecuación (21).

$$\frac{dT}{dz} = \frac{A_{Tr} \dot{n}_{CO} \frac{\dot{n}_{O_2}^{0,5}}{\vartheta_g^{1,5}} k_3 e^{\left(\frac{-E_3}{RT}\right)} \Delta H_{rxn} \sum v_l c_{pl} (T_z - T_{ref})}{\sum v_t c_{pt}} \quad (21)$$

Dónde:

$\Delta H_{rxn}$ : Energía liberada en la reacción de postcombustión a condiciones estándar

$c_{pl}$ : Capacidad calorífica de los lumps que participan en la reacción.

$T_{ref}$ : Temperatura de referencia a la energía estándar de reacción.

$\sum v_t c_{pt}$ : Capacidad calorífica de todos los compuestos gaseosos presentes en la fase diluida

Al terminar de evaluar los modelos de reactor y regenerador, se debe conocer si la respuesta es coherente. Se define la función *Residual* (22), que brinda una medida de la consistencia de la información al indicar la diferencia entre la energía generada en el regenerador ( $\dot{Q}_{reg}$ ) y la consumida en el reactor ( $\dot{Q}_{reac}$ ), así como, la diferencia entre la temperatura de reacción definida por el usuario ( $T_{rxn}$ ) y la calculada ( $T_{rxncal}$ ).

$$Residual = (\dot{Q}_{reg} - \dot{Q}_{reac})^2 + (T_{rxn} - T_{rxncal})^2 \quad (22)$$

Se puede observar que para evaluar el sistema de ecuaciones del reactor y del regenerador, se requiere además de las variables independientes y parámetros de simulación, asignar un valor inicial a tres de las variables dependientes ( $C/O$ ,  $T_{reg}$  y  $CCR$ ).

### 3.5 CASO BASE

Para aplicar el modelo de reactor y regenerador anteriormente planteado, se requieren datos experimentales de la URC real. Los valores reales de las variables independientes y dependientes se obtienen a partir de monitoreos a la URC industrial, en momentos de operación estable. La información recopilada en cada monitoreo está sujeta a errores experimentales, por lo que su coherencia debe ser analizada. En la Tabla 3 se muestran las variables más importantes obtenidas durante dos monitoreos a la URC industrial.

Se define el término “Caso Base” como el conjunto de condiciones operacionales reales que describen a la URC en estado estable. El caso base es por lo tanto escogido de entre los monitoreos realizados a la planta, y define el valor de las variables independientes, dependientes y los parámetros de simulación. En el transcurso del texto se presentan algoritmos en los que se utilizan subrutinas que se identifican por estar en cursiva, subrayadas, y no contener espacios, como:

*CasoBase*: Es el procedimiento de ingresar el valor de cada una de las variables independientes, dependientes y parámetros de simulación. Los datos de VI y VD provienen de los monitoreos de estados operacionales estables de la URC real. Los valores de los PS son inicialmente obtenidos de la literatura o pruebas planta piloto, para luego ser actualizados a su valor final por medio de la calibración del modelo.

*Reactor&Regenerador*: Es el procedimiento de determinar el valor de las variables dependientes. Especificando el valor de VI y de los PS, se evalúan los modelos ya expuestos del reactor y del regenerador, obteniendo como resultado el valor de las VD. Para evaluar los modelos también se debe ingresar un valor inicial de  $C/O$ ,  $T_{reg}$  y  $CCR$ , que para el *CasoBase* son conocidos del monitoreo, y en simulación se suponen inicialmente.

**Tabla 3.** Variables operacionales obtenidas en monitoreos a la URC industrial

Variable	Unidad	Caso 1*	Caso 2**
Temp de reacción	°F	977	976
Temp de precaliente	°F	370	370
Vapor al riser	Klb/h	20	20
Vapor al despojador	Klb/h	9	9
Temp. Fase Densa	°F	1335	1335
Temp. Fase Diluida	°F	1390	1393
O2 en Gas de combustión	%mol	2,4	2,4
CO en Gas de combustión	%mol	0,04	0,04
CO2 en Gas de combustión	%mol	16,4	16,4
Aire al Regenerador	kSCFM	66,8	67,3
Circulación Catalizador	Ton/min	19,5	19,6
<b>Rendimientos del Reactor</b>			
Gas Seco	%wt	4,3	4,2
GLP	%wt	11,5	11,3
Nafta (C5-430°F)	%wt	39,3	38,9
ALC (430-650°F)	%wt	19,9	20,0
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,2	19,6
Coque	%wt	5,9	5,9
Conversión (100-Slurry-APC-ALC)	%wt	60,9	60,4

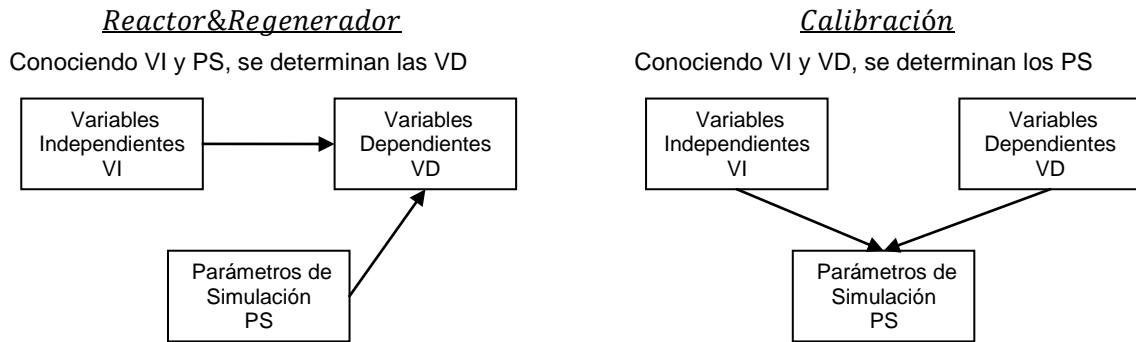
\*Caso 1 Corresponde a un día de monitoreo a la URC

\*\*Caso 2 Corresponde a un monitoreo realizado 1 día después del Caso 1.

Fuente: Autor

*Calibración:* Es el procedimiento de determinar el valor de los Parámetros de Simulación (PS). A partir del Caso Base se conocen los valores de VI y VD para uno o varios estados operacionales de la URC en estado estable, se considera que existe un conjunto de PS que relacionan a las VI con las VD por medio de los modelos *Reactor&Regenerador*. El procedimiento de *Calibración* concierne a determinar el mejor valor para los PS. La calibración del modelo es un procedimiento extenso, con el que se asegura que el modelo es una representación aceptada de la URC real (Figura 7).

**Figura 7.** Relación entre los diferentes tipos de variables en las subrutinas



Fuente: Autor

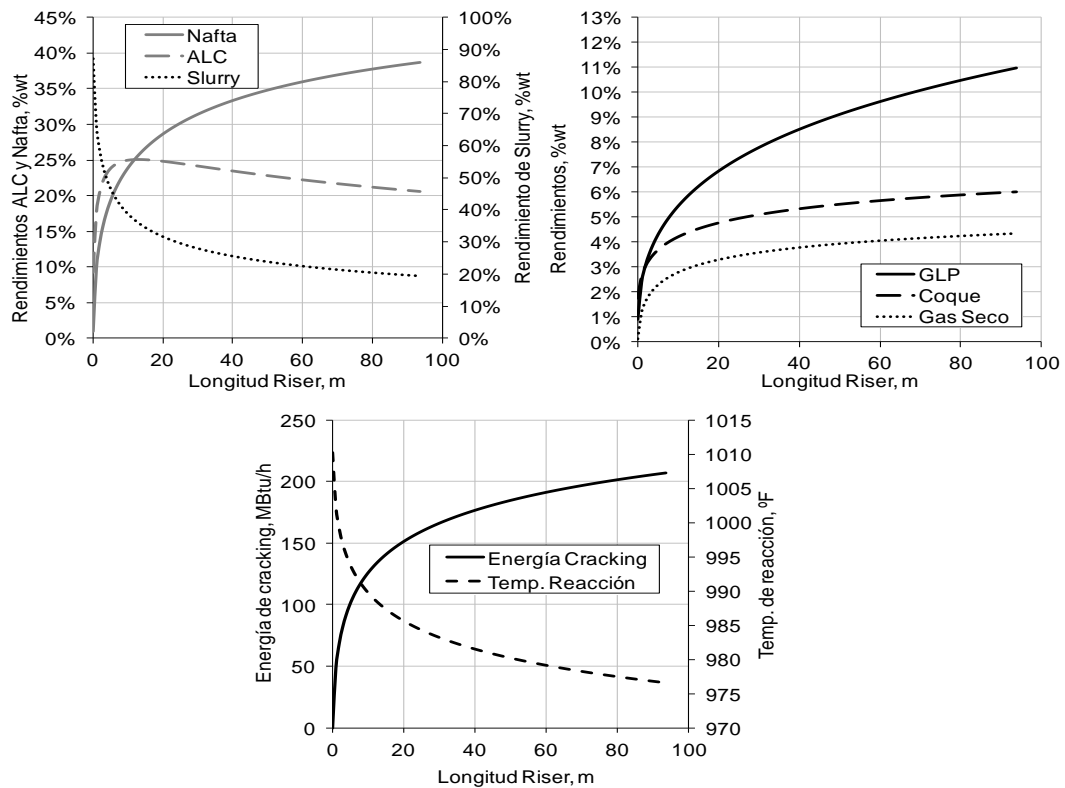
**Tabla 4.** Comparación entre rendimientos experimentales y los simulados

		Caso 1			Caso2		
		Medido	Simulado	Delta	Medido	Simulado	Delta
<b>Variables independientes</b>							
Temp. de reacción	°F	977	977		976	976	
Aire al regenerador	kSCFM	66,8	66,8		67,3	67,3	
Temp. Precaliente	°F	370	370		370	370	
Flujo de VGO	kBPD	14,4	14,4		14,4	14,4	
Flujo de DMOH	kBPD	10,6	10,6		10,6	10,6	
Flujo de nafta	kBPD	0,7	0,7		0,7	0,7	
<b>Variables dependientes</b>							
Temp. fase densa	°F	1335	1337	2	1335	1333	-2
Temp. fase diluida	°F	1390	1392	2	1393	1391	-2
Circulación catalizador	Ton/min	19,5	19,3	-0,2	19,6	19,7	0.1
Flujo de Combinada	kBPD	25,7	25,7	0	25,7	25,7	0
O2	%mol	2,4	2,4	0	2,4	2,4	0
CO	%mol	0,04	0,04	0	0,04	0,04	0
CO2	%mol	16,3	16,4	0,1	16,4	16,4	0
<b>Rendimientos Reactor</b>							
Gas Seco	%wt	4,3	4,3	0	4,2	4,3	0,1
GLP	%wt	11,5	10,9	-0,6	11,3	11,9	0,6
Nafta (C5-430°F)	%wt	39,3	38,7	-0,6	38,9	39,4	0,5
ALC (430-650°F)	%wt	19,9	20,6	0,7	20,0	19,3	-0,7
Slurry (>650°F)	%wt	19,2	19,6	0,4	19,6	19,2	-0,4
Coque	%wt	5,9	5,9	0	5,9	5,9	0

En la Tabla 4 se reportan la diferencia entre los valores de las variables dependientes más importantes, obtenidas como resultado de la sintonización del modelo de simulación para los simular los dos casos de estudio. El error más grande de simulación se reporta en el rendimiento de ALC con un +0,7%wt para la simulación del caso1, y un -0,7%wt para la simulación del caso 2.

Al ejecutar la rutina *Reactor&Regenerador* se generan los perfiles en el riser y en el regenerador. La variación de los rendimientos de la reacción y la temperatura a lo largo del riser para el caso 1 se muestran en la Figura 8.

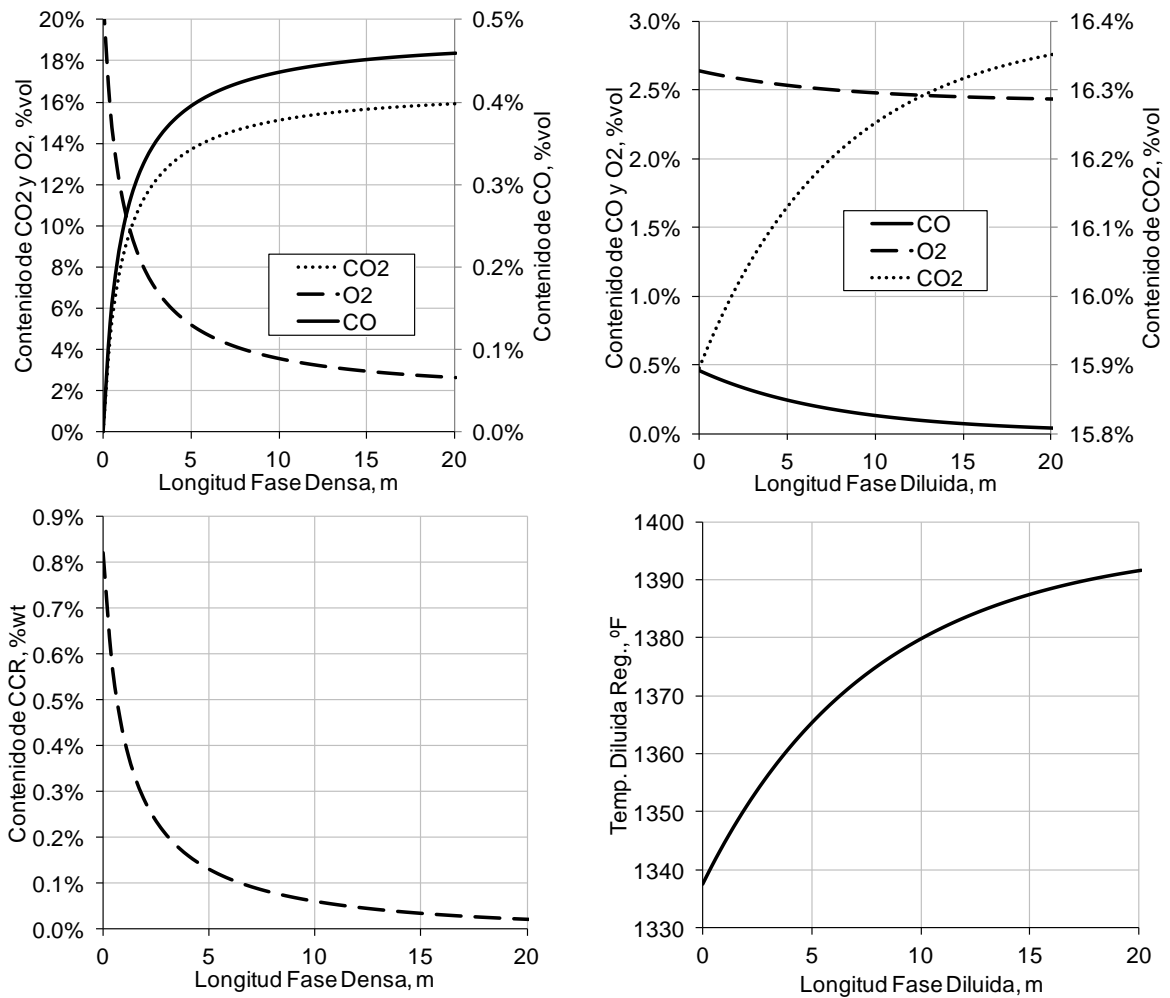
**Figura 8.** Perfiles de rendimientos y temperatura en el riser



Fuente: Autor

En el caso del regenerador se obtienen perfiles para la fase densa y diluida (Figura 9). En la fase densa la concentración de CO alcanza el 0,6%vol, mucho menor al CO<sub>2</sub> con un 14%vol, sin embargo, esta pequeña cantidad de CO que ingresa a la fase diluida, reacciona en el proceso de postcombustión aumentando la temperatura de los gases en +55°F.

**Figura 9.** Perfiles de rendimientos y temperatura en el regenerador



Fuente: Autor

La relación entre el incremento en el rendimiento de GLP y el contenido de aditivo de ZSM-5 en el catalizador se muestra en la Figura10, los resultados experimentales son obtenidos a partir de pruebas planta piloto con una misma carga, y un mismo catalizador variando del contenido de aditivo (Gomez *et al.*, 2009). El aditivo posee un impacto inicial fuerte en el incremento de los rendimientos de GLP, para adiciones más altas el rendimiento tiende a estabilizarse hacia un valor constante. El efecto del aditivo de propileno en la selectividad de la reacción se correlaciona mediante la ecuación.

$$\frac{\Delta \dot{m}_{GLP}}{\dot{m}_{OT}} = P_{Max} (1 - e^{(-P_r \cdot Adit)})$$

Donde:

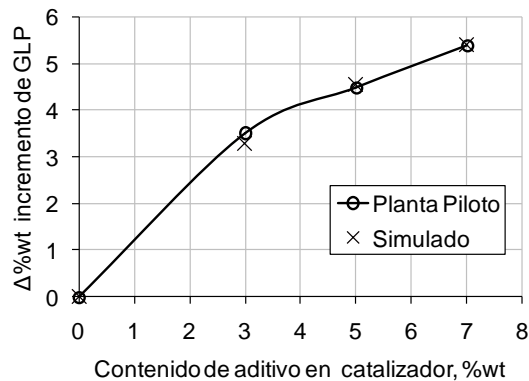
$\Delta \dot{m}_{GLP}$ : Delta en la masa de GLP producida en la reacción.

$P_{Max}$ : Parámetro de calibración que indica el incremento máximo que produce el aditivo.

$P_r$ : Parámetro de calibración que se relaciona con la velocidad a la que se consigue el máximo.

$Adit$ : Es el contenido de aditivo de ZSM-5 en el catalizador

**Figura 10.** Efecto del contenido de aditivo ZSM-5 en el rendimiento de GLP



### 3.6 SIMULACIÓN

En el Caso Base calibrado la función *Residual* posee un valor bajo, indicando que los valores en el modelo son coherentes. Cuando se presenta un cambio en el valor de alguna variable independiente, el *Residual* aumenta debido a que al evaluar el modelo *Reactor&Regenerador*, se obtiene que la energía consumida en el reactor es diferente a la producida por el regenerador, y la temperatura de reacción ingresada definida es diferente a la predicha por el modelo. Es entonces cuando se requiere ejecutar el algoritmo de simulación.

El algoritmo de *Simulación* (Figura 11) busca encontrar una combinación nueva de las variables  $C/O$ ,  $T_{reg}$  y  $CCR$ , que minimicen el *Residual* del modelo para el nuevo estado operacional. La respuesta se considera factible cuando se logra reducir el valor del *Residual* por debajo de un Error de Simulación (*ESim*) establecido. Es posible que se especifiquen las variables independientes de tal forma que no exista un conjunto de  $C/O$ ,  $T_{reg}$  y  $CCR$ , que disminuya el *Residual* por debajo de *ESim*. Los escenarios de simulación que no tienen respuesta factible ( $Residual > ESim$ ) se interpretan como estados operacionales inestables de la planta.

La *Simulación* de un estado operacional implica encontrar un punto en un espacio de búsqueda en 3 dimensiones ( $C/O$ ,  $T_{reg}$  y  $CCR$ ), que minimice una función *Residual* conformada por un conjunto de ecuaciones no lineales algebraicas y diferenciales. Con el objetivo de simplificar el problema se agregan dos nuevas ecuaciones que permiten relacionar el valor de  $T_{reg}$  y  $CCR$  con  $C/O$ .

La temperatura de la fase densa del regenerador calculada ( $T_{reg_{cal}}$ ), está relacionada con  $C/O$  por medio de la energía consumida en el reactor ( $\dot{Q}_{reac}$ ), y que es suministrada por la masa de catalizador circulante.

$$Treg_{cal} = \frac{\dot{Q}_{reac}}{Cp_{cat}C/O\dot{m}_{OT}} + T_{rxn} \quad (23)$$

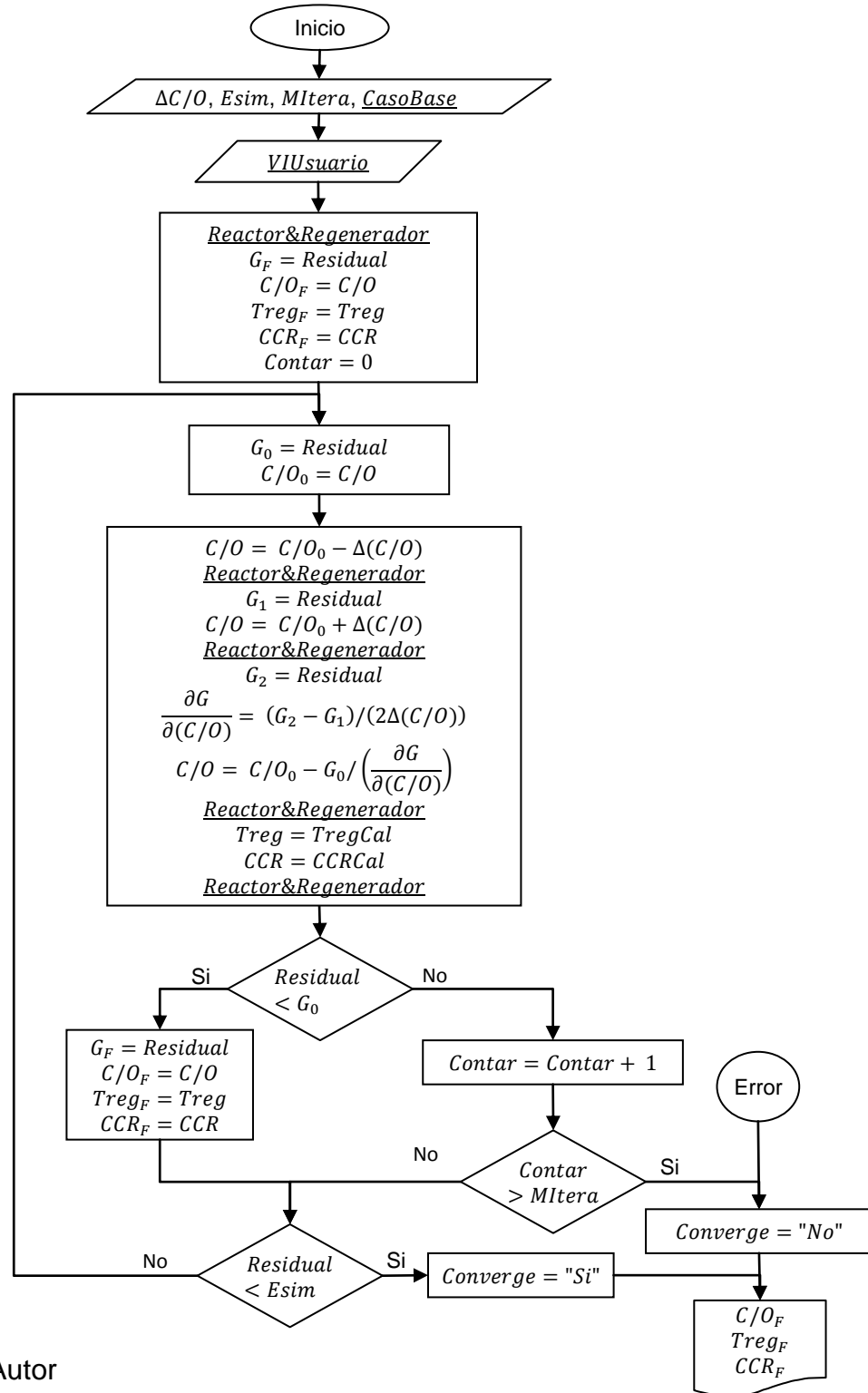
El coque en el catalizador regenerado calculado ( $CCR_{cal}$ ), se determina como la relación entre la masa de coque saliendo del regenerador ( $\dot{m}_{ckReg}$ ), y la masa total de catalizador circulando ( $\dot{m}_{OT}C/O$ ).

$$CCR_{cal} = \frac{\dot{m}_{ckReg}}{\dot{m}_{OT}C/O} 100 \quad (24)$$

Las ecuaciones de predicción 23 y 24, permiten que el problema de simulación se pueda resolver utilizando el método de Newton en una dimensión (Figura 11). Ambos valores ( $Treg_{cal}$  y  $CCR_{cal}$ ) se calculan luego de evaluar los modelos de Reactor&Regenerador, permitiendo en cada iteración corregir el valor que deben tener las variables en la siguiente iteración. Al final del algoritmo las variables  $Treg$  y  $Treg_{cal}$  convergen hacia un mismo valor de la temperatura de la fase densa del regenerador final, y las variables  $CCR$  y  $CCR_{cal}$  convergen hacia el coque en el catalizador regenerado.

El procedimiento por medio del cual el usuario ingresa cambios en las VI se denomina VIUsuario. Una simulación ocurre cuando hay un cambio en las VI del Caso Base, por ejemplo un incremento en la temperatura de reacción, una disminución en el flujo de carga combinada, etc. Si la VI que ingresa el usuario son iguales a las VI del Caso Base, y el modelo está correctamente calibrado, las VD respuesta del simulador tienen que ser iguales a las VD del Caso Base dentro de un margen de error definido en la calibración del modelo.

Figura 11. Algoritmo de simulación

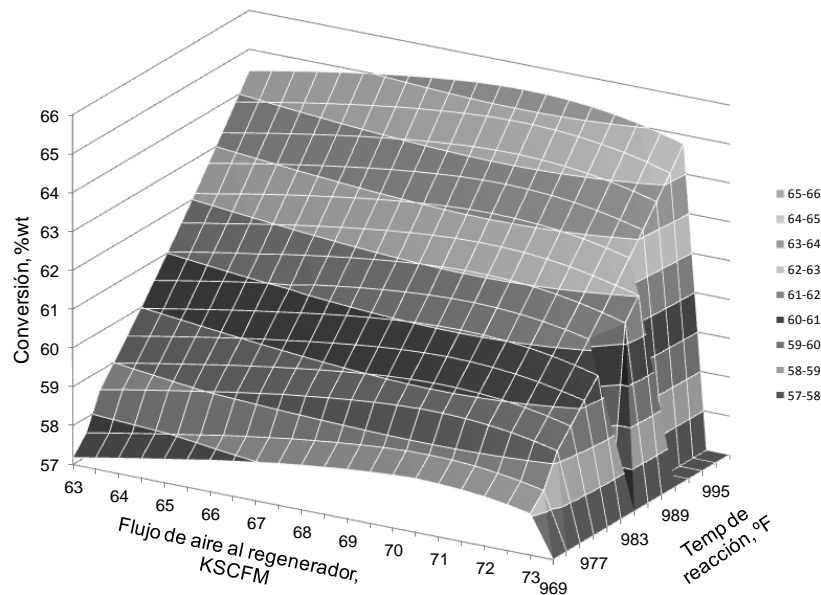


Fuente: Autor

El algoritmo de simulación contempla la presencia de zonas de no convergencia del modelo. Escenarios en los que se identifican luego de realizar un número máximo de iteraciones (*MItera*), o cuando se presenta algún error de cálculo en las ecuaciones del modelo, como divisiones en cero, exponenciales muy grandes, etc.

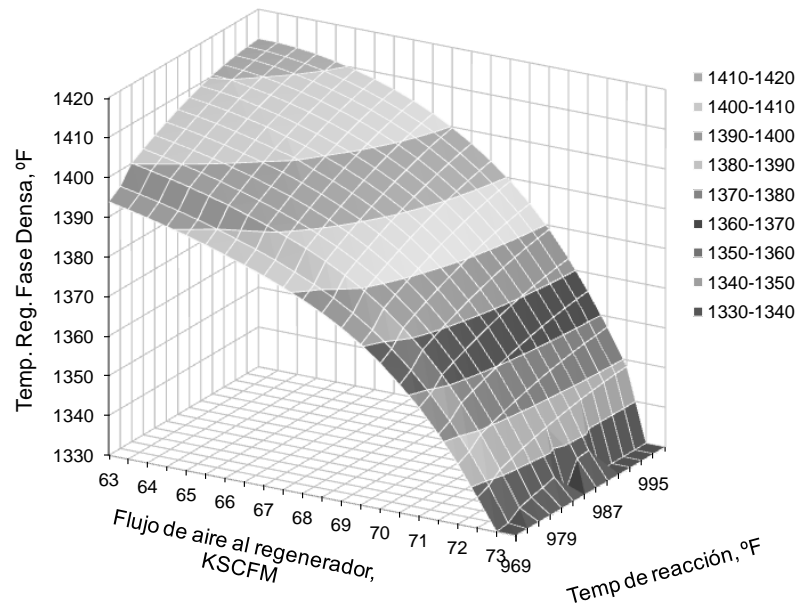
Seleccionando como “Caso Base” al “Caso 1” de la Tabla 3, se simularon variaciones en el flujo de aire al regenerador y la temperatura de reacción, evaluado su efecto sobre la conversión de la carga (Figura 12) y la temperatura de la fase densa del regenerador (Figura 13). Las superficies obtenidas muestran ser continuas dentro de un intervalo de las variables independientes, para un alto flujo de aire al regenerador (>73KSCFM), no se encuentra una respuesta que cumpla con el requisito para considerarse factible.

**Figura 12.** Variación de la conversión en la reacción.



Fuente: Autor

**Figura 13.** Variación de la Temperatura en Fase Densa del Regenerador



Fuente: Autor

#### 4. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

Como se mencionó en el estado del arte, los principales métodos aplicados en la optimización de URC son la Programación Secuencial Cuadrática (SQP), los Algoritmos Genéticos (AG) y el procedimiento de Luus-Jaakola (LJ). El método de búsqueda directa como SQP y LJ, son más rápidos que los AG (Liao, 2005), debido a que AG requiere de muchos más puntos de simulación para encontrar el óptimo. El método LJ es una simplificación de SQP, que evita generar los gradientes considerando una búsqueda aleatoria para encontrar la dirección del óptimo, requiriendo en ocasiones más simulaciones que los necesarios para determinar los gradientes. El método SQP no es utilizado directamente en los modelos más rigurosos debido a que el tiempo de cálculo permanece siendo prohibitivo.

El algoritmo desarrollado se basa en la metodología SQP, con la diferencia que minimiza la cantidad de puntos de simulación, el método SQP indica que los gradientes deben ser actualizados en cada iteración, tarea que consume el mayor tiempo de cálculo, se propone un método en el que el gradiente indica la dirección del óptimo, y utilizarla para encontrar la respuesta que este más cercana al óptimo, y solo hasta entonces actualizar los gradientes.

Junto con la reducción de la cantidad de simulaciones, que se traduce en menor tiempo de cálculo, se resuelve el problema de las zonas de no convergencia del modelo que no se contempla en el método SQP, desarrollando un algoritmo nuevo que permite encontrar el punto factible más cercano al óptimo. La solución al problema cuadrático es utilizada extensamente en el método, por lo que en el presente capítulo se desarrolla de forma detallada su planteamiento en términos del modelo de simulación, y su posterior solución.

#### 4.1 DEFINICIÓN DE TÉRMINOS

Las variables independientes descritas en el capítulo 2 se identificarán con el término:

$$x_i, \quad i = 1, \dots, n$$

Dónde:

$i$ : Subíndice contador del número de variables independientes.

$n$ : Número total de variables independientes consideradas para optimizar en el problema.

$x_i$ : Variable independiente  $i$ .

El conjunto de las  $n$  variables independientes especifican la ubicación del modelo dentro del espacio de búsqueda. El conjunto de las variables independientes está contenido en el vector:

$$\bar{X}^T = \{x_1, \dots, x_i, \dots, x_n\}$$

Las variables dependientes se identificarán con el término:

$$Y_j(\bar{X}), \quad j = 1, \dots, m$$

Dónde:

$j$ : Subíndice contador del número de variables dependientes.

$m$ : Número total de variables dependientes que se considera poseen restricciones.

$Y_j(\bar{X})$ : Variable dependiente  $j$  evaluada en  $\bar{X}$ .

La función objetivo es una variable dependiente en la que se tiene un interés especial de maximizar su valor ( $Y_F$ ). Puede ser el margen económico, alguno de los rendimientos producto de la reacción o cualquier otra variable dependiente. La función objetivo por lo tanto depende de las variables independientes según el modelo descrito anteriormente, y se representa según:

Escenario de maximizar la función objetivo  $F(\bar{X}) = -Y_F(\bar{X})$

Escenario de minimizar la función objetivo  $F(\bar{X}) = Y_F(\bar{X})$

El problema de optimización considera restricciones en las variables dependientes e independientes. Ambos conjuntos de variables VI y VD, deben permanecer dentro de un rango limitado por un valor máximo y mínimo (Tabla 5).

**Tabla 5.** Restricciones operacionales

Variable	Límite		
	Inferior	Superior	
Independiente	$x_i \geq xi_i$	$x_i \leq xs_i$	$i = 1, 2, \dots, n$
Dependiente	$Y_j(\bar{X}) \geq yi_j$	$Y_j(\bar{X}) \leq ys_j$	$j = 1, 2, \dots, m$

Fuente: Autor

$xi_i$ : Límite inferior de la variable independiente  $i$ .

$xs_i$ : Límite superior de la variable independiente  $i$ .

$yi_j$ : Límite inferior de la variable dependiente  $j$ .

$ys_j$ : Límite superior de la variable dependiente  $j$ .

El problema contempla un total de  $2n + 2m$  restricciones.

## 4.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El planteamiento del problema dentro del espacio de búsqueda en términos de las variables  $\bar{X}$  es:

Encontrar  $\bar{X}$  que maximice la función objetivo  $Y_F(\bar{X})$

Sujeto a las siguientes restricciones:

$$x_i \geq xi_i$$

$$x_i \leq xs_i$$

$$Y_j(\bar{X}) \geq yi_j$$

$$Y_j(\bar{X}) \leq ys_j$$

El planteamiento general de un problema cuadrático para la solución al problema propuesto por medio del método de optimización secuencial cuadrática es:

Minimizar la función objetivo:

$$Q(\bar{S}) = \bar{C}^T \bar{S} + \frac{1}{2} \bar{S}^T [H] \bar{S}$$

Sujeto a las restricciones en VI:  $\nabla R_i(\bar{X})^T \bar{S} < R_i(\bar{X})^T$

Sujeto a las restricciones en VD:  $\nabla R_j(\bar{X})^T \bar{S} < R_j(\bar{X})^T$

Dónde:

$\bar{S}$ : Vector que indica la dirección hacia el óptimo.

$Q(\bar{S})$ : Función objetivo en términos de la variable  $\bar{S}$ .

$\bar{C}$ : Gradiente que contiene las primeras derivadas de la función objetivo para las  $n$  variables independientes.

$$\bar{C}^T = \nabla F(\bar{X})^T = \left\{ \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_1}, \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_i}, \dots, \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_n} \right\}$$

$$C_i = \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$H$ : Matriz Hessiana que contiene las segundas derivadas de la función objetivo con respecto a las variables independientes.

$$\bar{H} = \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{\partial^2 F(\bar{X})}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 F(\bar{X})}{\partial x_1 x_n} \\ \vdots & \frac{\partial^2 F(\bar{X}_p)}{\partial x_i^2} & \vdots \\ \frac{\partial^2 F(\bar{X})}{\partial x_n x_1} & \dots & \frac{\partial^2 F(\bar{X})}{\partial x_n^2} \end{array} \right\} H_{(i, k)} = \frac{\partial^2 F(\bar{X})}{\partial x_i x_k}$$

Las restricciones presentadas en la Tabla 4 en función de las variables independientes se transforman para ser planteadas en el problema cuadrático (Figura 14).

Por lo tanto el Sub problema cuadrático queda planteado de la siguiente forma:

$$Q(\bar{S}) = \bar{\nabla}F(\bar{X})^T \bar{S} + \frac{1}{2} \bar{S}^T [H] \bar{S}$$

Restricciones

$$\bar{\nabla}R1_i(\bar{X}_P)^T \bar{S} \leq x_{i,P} - x_{i_i}$$

$$\bar{\nabla}R2_i(\bar{X}_P)^T \bar{S} \leq -x_{i,P} + x_{S_i}$$

$$-\bar{\nabla}Y_j(\bar{X}_P)^T \bar{S} \leq Y_j(\bar{X}_P) - y_{i_j}$$

$$\bar{\nabla}Y_j(\bar{X}_P)^T \bar{S} \leq -Y_j(\bar{X}_P) + y_{S_j}$$

Debido a la complejidad de la simulación de la URC no se cuenta con la función explícita de la función objetivo en términos de las VI. La evaluación de los gradientes se realiza utilizando métodos numéricos (26-28).

$$\left. \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \right|_{\bar{x}} = \frac{-Y_j(x_i - 2\Delta x_i) + 8 \cdot Y_j(x_i - \Delta x_i) - 8 \cdot Y_j(x_i + \Delta x_i) + Y_j(x_i + 2\Delta x_i)}{12 \cdot \Delta x_i} \quad (26)$$

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial x_i^2} \right|_{\bar{x}} = \frac{F(x_i - 2\Delta x_i) + 16 \cdot F(x_i - \Delta x_i) - 30 \cdot dF(i, 3) + 16 \cdot F(x_i + \Delta x_i) + F(x_i + 2\Delta x_i)}{12 \cdot (\Delta x_i)^2} \quad (27)$$

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_k} \right|_{\bar{x}} = \frac{-\left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{(x_i-2\Delta x_i)} + 16 \cdot \left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{(x_i-\Delta x_i)} - 30 \cdot \left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{(x_i)} + 16 \cdot \left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{(x_i+\Delta x_i)} + \left. \frac{\partial F}{\partial x_i} \right|_{(x_i+2\Delta x_i)}}{12 \cdot (\Delta x_k)^2} \quad (28)$$

Los términos que contemplan la descripción de las restricciones del problema cuadrático se agrupan en los vectores  $\bar{A}$  y  $\bar{B}$  mostrados en la Figura 15.

**Figura 14.** Restricciones operacionales en términos de la variable vector dirección.

$x_i \geq x_{i,l}$	$x_{i,p} \leq x_{s_i}$	$Y_j(\bar{X}) \geq y_{i,j}$	$Y_j(\bar{X}) \leq y_{s_i}$
$-x_i + x_{i,l} \leq 0$	$x_i - x_{s_i} \leq 0$	$-Y_j(\bar{X}) + y_{i,j} \leq 0$	$Y_j(\bar{X}) - y_{s_i} \leq 0$
Definiendo $R1_i(\bar{X}) = -x_i + x_{i,l}$ Reemplazando	Definiendo $R2_i(\bar{X}) = x_i - x_{s_i}$ Reemplazando	Definiendo $R3_j(\bar{X}) = -Y_j(\bar{X}) + y_{i,j}$ Reemplazando	Definiendo $R4_j(\bar{X}) = Y_j(\bar{X}) - y_{s_i}$ Reemplazando
$\bar{\nabla}R1_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq -R1_i(\bar{X})$	$\bar{\nabla}R2_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq -R2_i(\bar{X})$	$\bar{\nabla}R3_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq -R3_i(\bar{X})$	$\bar{\nabla}R4_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq -R4_i(\bar{X})$
$\bar{\nabla}R1_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq x_{i,l} - x_i$	$\bar{\nabla}R2_i(\bar{X})^T \bar{S} \leq -x_{i,l} + x_{s_i}$	$-\bar{\nabla}Y_j(\bar{X})^T \bar{S} \leq Y_j(\bar{X}) - y_{i,j}$	$\bar{\nabla}Y_j(\bar{X})^T \bar{S} \leq -Y_j(\bar{X}) + y_{s_i}$
$i = 1$ $\bar{\nabla}R1_1(\bar{X})^T = \{-1, 0, \dots, 0\}$	$i = 1$ $\bar{\nabla}R2_1(\bar{X})^T = \{1, 0, \dots, 0\}$	$\bar{\nabla}Y_j(\bar{X}) = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial Y_j}{\partial x_1} \Big _{\bar{X}} \\ \frac{\partial Y_j}{\partial x_2} \Big _{\bar{X}} \\ \vdots \\ \frac{\partial Y_j}{\partial x_n} \Big _{\bar{X}} \end{array} \right\}$	
$i = 2$ $\bar{\nabla}R1_2(\bar{X})^T = \{0, -1, \dots, 0\}$	$i = 2$ $\bar{\nabla}R2_2(\bar{X})^T = \{0, 1, \dots, 0\}$		
$i = n$ $\bar{\nabla}R1_n(\bar{X})^T = \{0, 0, \dots, -1\}$	$i = n$ $\bar{\nabla}R2_n(\bar{X})^T = \{0, 0, \dots, 1\}$		

Fuente: Autor

Figura 15. Matrices de gradientes para restricciones.

$$\bar{A} = \left( \begin{array}{cccccc} \hline -1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ 0 & \dots & -1 & \dots & 0 & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ 0 & \dots & 0 & \dots & -1 & \\ \hline 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 0 & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & \\ \hline -\frac{\partial Y_1}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_1}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_1}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ -\frac{\partial Y_j}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_j}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ -\frac{\partial Y_m}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_m}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & -\frac{\partial Y_m}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \hline \frac{\partial Y_1}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_1}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_1}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \frac{\partial Y_j}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_j}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \frac{\partial Y_m}{\partial x_1} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} & \dots & \frac{\partial Y_m}{\partial x_n} \Big|_{\bar{X}} & \\ \hline \end{array} \right) \bar{B} = \left( \begin{array}{c} \hline x_1 \\ -x_{i_1} \\ \vdots \\ x_i - x_{i_i} \\ \vdots \\ x_n \\ -x_{i_n} \\ \hline -x_1 \\ +x_{s_1} \\ \vdots \\ -x_i \\ +x_{s_i} \\ \vdots \\ -x_n \\ +x_{s_n} \\ \hline Y_1(\bar{X}) \\ -y_{i_1} \\ \vdots \\ Y_j(\bar{X}) \\ -y_{i_j} \\ \vdots \\ Y_m(\bar{X}) \\ -y_{i_m} \\ \hline -Y_1(\bar{X}) \\ +y_{s_1} \\ \vdots \\ -Y_j(\bar{X}) \\ +y_{s_j} \\ \vdots \\ -Y_m(\bar{X}) \\ +y_{s_m} \\ \hline \end{array} \right)$$

Fuente: Autor

La solución al problema cuadrático se plantea realizar utilizando el método de Wolf (Rao 2009). El método de Wolf se basa en el método simplex para resolver el problema cuadrático. Debido a que el método simplex tiene implícita la restricción que la respuesta obtenida será siempre mayor que cero, el planteamiento del problema cuadrático en términos de la variable dirección  $\bar{s}$ , debe ajustarse cambiando el origen del eje del espacio de búsqueda. En la Figura 16 se muestran las ecuaciones requeridas para ajustar las restricciones al nuevo eje. Los términos descritos en este capítulo se condensan en la construcción del arreglo matricial mostrada en la Figura 17, que se denominará matriz de Wolf ( $\bar{W}$ ).

**Figura 16.** Cambio de eje en problema cuadrático

$$\bar{B} = \left\{ \begin{array}{ll} B_i = 0 & i = 1, \dots, n \\ B_{n+i} = xs_i - xi_i & i = 1, \dots, n \\ B_{2n+j} = Y_j(\bar{X}) - yi_j - \sum_{i=1}^n \left[ \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} \cdot (x_i - xi_i) \right] & j = 1, \dots, m \\ B_{2n+m+j} = -Y_j(\bar{X}) + ys_j + \sum_{i=1}^n \left[ \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \Big|_{\bar{X}} \cdot (x_i - xi_i) \right] & j = 1, \dots, m \end{array} \right\}$$

Fuente: Autor

Figura 17. Configuración matricial del problema cuadrático

$$\sum_{l=1}^n x_l H_{li} + \sum_{j=1}^{2n+2m} \lambda_j A_{ji} - \theta_i + Z_i = -C_i \quad , \quad i = 1, \dots, n$$

$$\sum_{i=1}^n A_{ji} x_i + Y_j = B_j, \quad j = 1, 2, \dots, 2n + 2m$$

	$x_1$	$x_i$	$x_n$	$\lambda_1$	$\lambda_j$	$\lambda_{2n+2m}$	$\theta_1$	$\theta_i$	$\theta_n$	$Z_1$	$Z_i$	$Z_n$	$Y_1$	$Y_j$	$Y_{2n+2m}$		
$Z_1$	$H_{11}$	$H_{1i}$	$H_{1n}$	$A_{11}$	$A_{j1}$	$A_{2n+2m,1}$	-1			1						$-C_1$	
$Z_i$	$H_{1i}$	$H_{ii}$	$H_{in}$	$A_{1i}$	$A_{ji}$	$A_{2n+2m,i}$		-1			1					$-C_i$	
$Z_n$	$H_{1n}$	$H_{in}$	$H_{nn}$	$A_{1n}$	$A_{jn}$	$A_{2n+2m,n}$			-1			1				$-C_n$	
$Y_1$	$A_{11}$	$A_{1i}$	$A_{1n}$											1		$B_1$	
$Y_j$	$A_{j1}$	$A_{ji}$	$A_{jn}$												1	$B_j$	
$Y_{2n+2m}$	$A_{2n+2m,1}$	$A_{2n+2m,i}$	$A_{2n+2m,n}$													1	$B_n$
	$-\sum_{i=1}^{3n+2m} w_{ij}$																

Fuente: Rao 2009

La matriz presentada en la Figura 17 se resuelve utilizando el método desarrollado por Wolf, descrito a continuación:

1. **Identificar si el problema es estándar.** La existencia de valores negativos en la última columna de la matriz, indican que el problema no es del tipo estándar, y debe resolverse de una forma especial. En caso de existir más de un valor negativo, se selecciona la fila con el valor menos negativo. Cuando no existen valores negativos en la última columna se selecciona la última fila para continuar con la solución del problema.
2. **Localizar la columna pivote** ( $C_{pvt}$ ). Dentro de la fila seleccionada del paso anterior se busca el término más negativo. Para el caso particular de la solución por el método de Wolf, esta columna debe seleccionarse de tal forma que siempre se cumplan las siguientes restricciones:

$$\lambda_j \cdot Y_j = 0$$

$$\theta_i \cdot x_i = 0$$

Es decir, si en alguna etapa de la solución, dentro de las filas se existe el término  $\lambda_1$ , entonces, no se puede seleccionar como columna pivote a  $Y_1$ . En el caso de no existir un valor negativo en la fila seleccionada, o de que exista, pero no cumpla con la restricción, indica que el problema no tiene solución. Las razones para que un problema no tenga solución, pueden estar asociadas principalmente a que está planteado de forma muy restrictiva en los límites de las variables.

3. **Localizar la fila pivote** ( $F_{pvt}$ ). En los problemas de tipo no estándar, la fila pivote es igual a la seleccionada en el paso 1. Para los tipo estándar se selecciona calculandopara cada fila, la relación entre el término de la última columna, y el término de la columna pivote, la fila que posea la relación positiva más pequeña es seleccionada como la fila pivote. En la selección de la fila pivote los términos de relación conformados por valores de cero divididos en valores negativos no se tienen en cuenta.

4. **Solución:** Identificados la fila y la columna pivote se procede a iniciar los cálculos para generar la nueva matriz, el valor del término pivote ubicado en la posición  $\bar{W}(F_{pvt}, C_{pvt})$  se guarda en otra variable que se denominará *Pivote*.

$$Pivote = \bar{W}(F_{pvt}, C_{pvt})$$

Todos los términos de la fila pivote son divididos por el término *Pivote*,

$$\bar{W}(F_{pvt}, w_j) = \frac{\bar{W}(F_{pvt}, w_j)}{Pivote} \quad w_j = 1, \dots, w_{jn}$$

Por último, el valor de todas las otras filas, excluyendo a la fila pivote se calculan se calculan según:

$$W(w_i, w_j) = W(w_i, w_j) - \frac{Pivote}{W(F_{pvt}, w_j)}$$

$$w_j = 1, \dots, w_{jn}$$

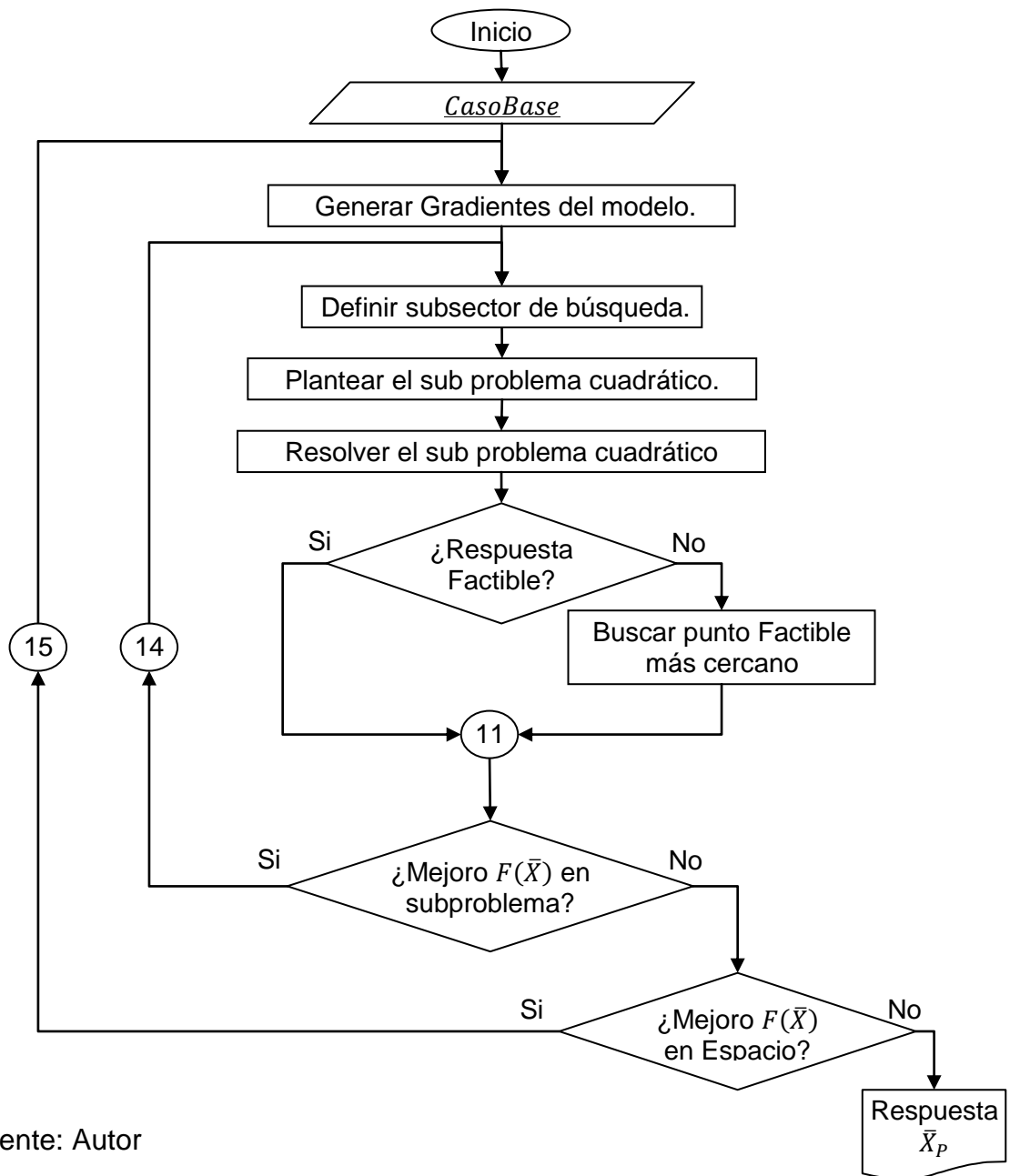
$$w_i = 1, \dots, w_{in} \quad w_i \neq F_{pvt}$$

El procedimiento se realiza hasta que en la última fila no existan valores negativos.

## 5. ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN

En el presente capítulo se muestra el algoritmo de optimización desarrollado en forma de diagramas de flujo (Figura 18), describiendo en forma detallada cada una de sus etapas.

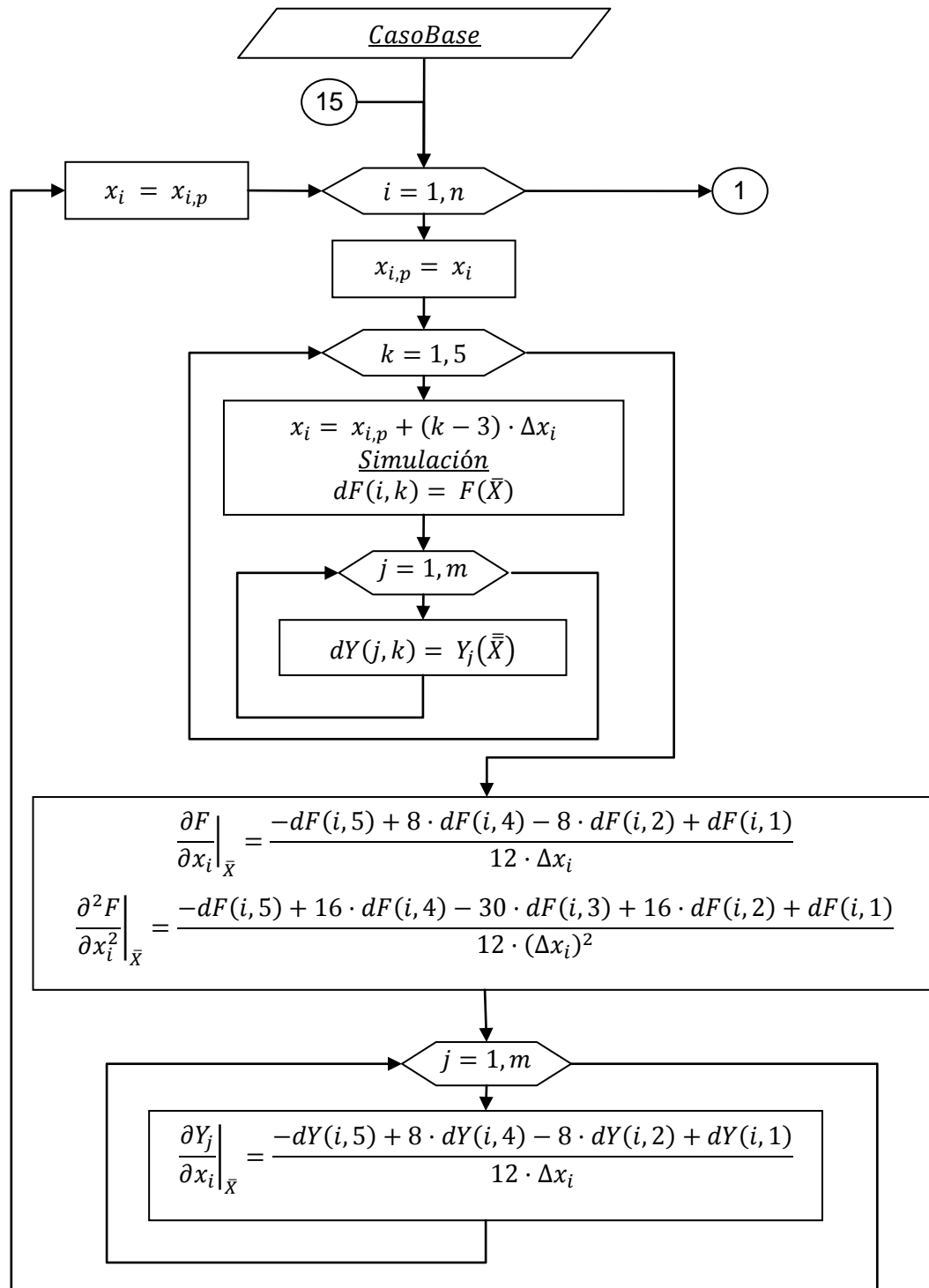
**Figura 18.** Algoritmo general para la optimización de modelos de URC



Fuente: Autor

Inicialmente se ingresa la información del *CasoBase*, y se determinan los gradientes utilizando las ecuaciones 26-28 (Figura 19).

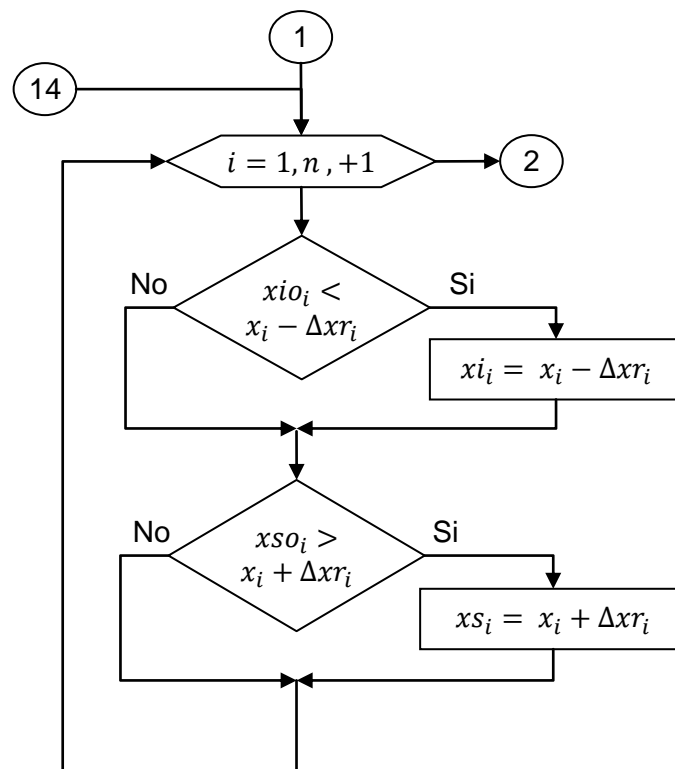
**Figura 19.** Generar Gradientes de función objetivo y restricciones



Fuente: Autor

Los gradientes obtenidos del modelo indican la dirección de búsqueda hacia el óptimo. El avance hacia la búsqueda del óptimo se realiza de forma discreta, definiendo subsectores (Figura 20) que están contenidos dentro del espacio limitado por los límites iniciales. En cada subsector de búsqueda, se plantea y resuelve el problema cuadrático, asegurando que la dirección de búsqueda respeta las restricciones operacionales de las variables independientes y dependientes. Sin embargo, el problema cuadrático es una aproximación al problema real, ocasionando que a medida que nos alejamos del punto inicial, la diferencia entre las restricciones reales y las aproximadas se incrementa. La definición de subsectores de búsqueda permite evaluar progresivamente el comportamiento de estas diferencias, permitiendo identificar si en algún punto de la dirección de búsqueda se viola alguna restricción en el modelo real, y que no se aprecia en la aproximación cuadrática.

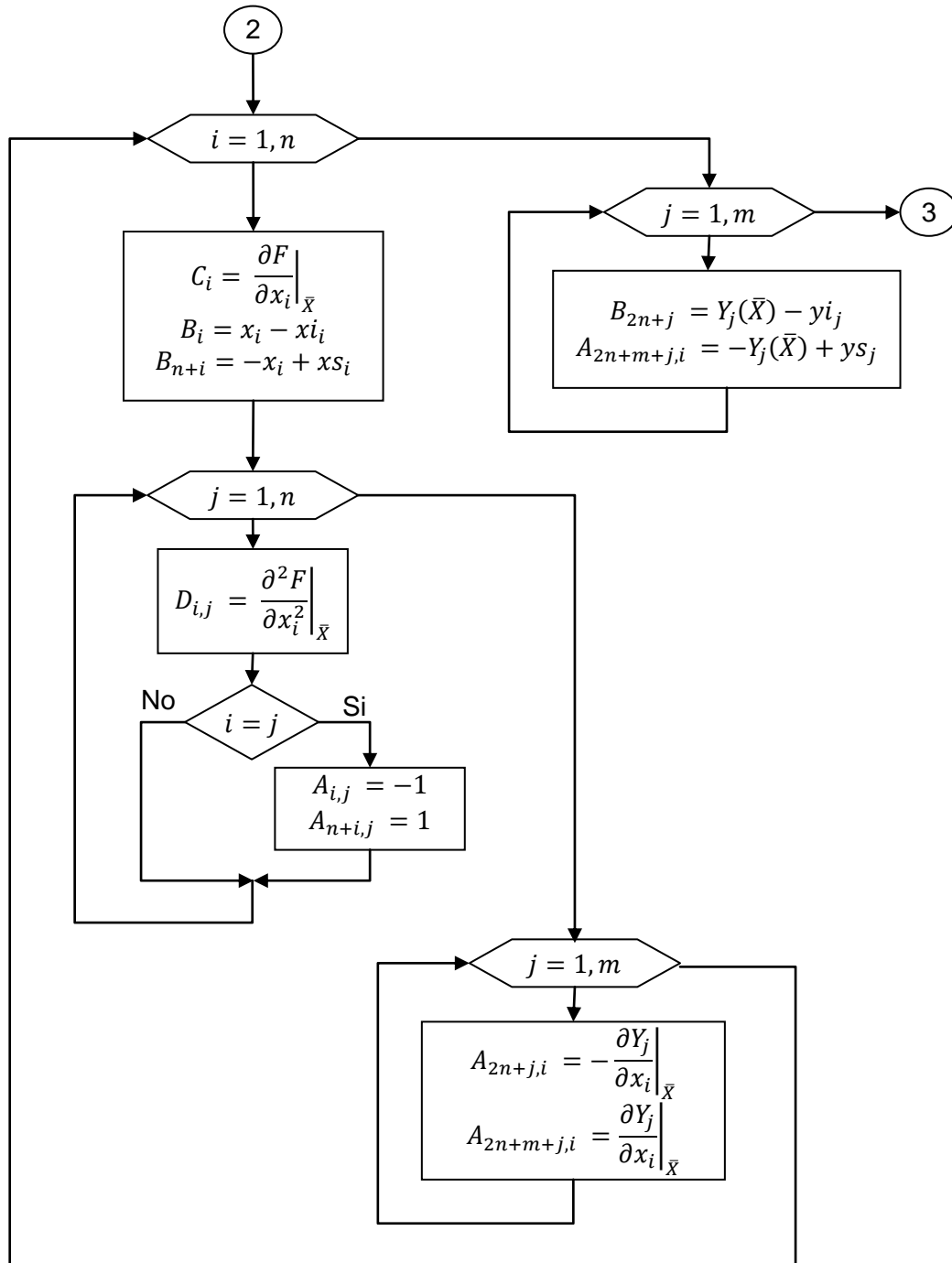
**Figura 20.** Definición el subsector de búsqueda



Fuente: Autor

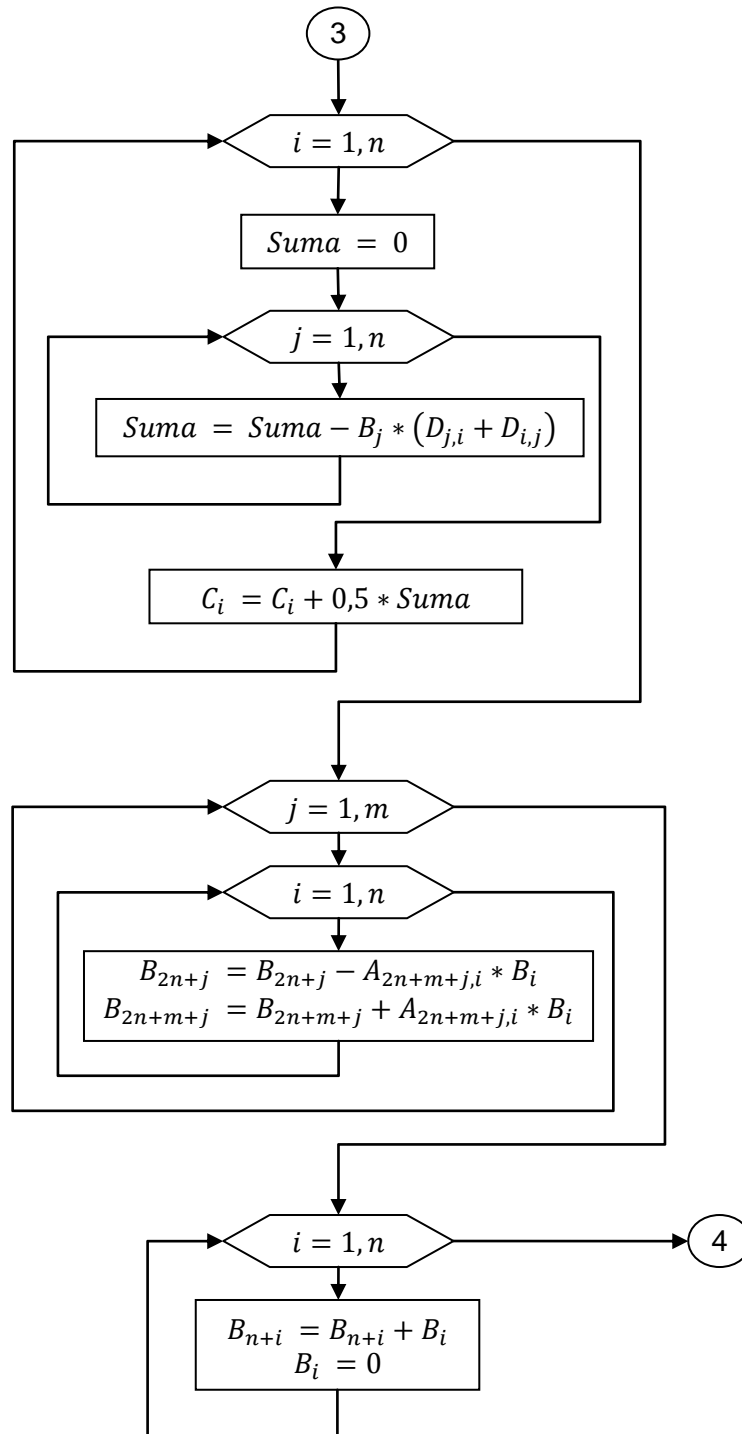
La continua evaluación del espacio de búsqueda en la dirección que indica el gradiente inicial no agrega un tiempo de cálculo apreciablemente mayor, ya que en cada paso de búsqueda la *Simulación* se ejecuta solo una vez, y los deltas  $\Delta x r_i$  son relativamente grandes.

**Figura 21.** Planteamiento del problema cuadrático



Las fórmulas mostradas en la Figura 16, se aplican para generar el algoritmo de corrección del eje en el problema cuadrático (Figura 22), y así poder utilizar el método simplex para resolverlo.

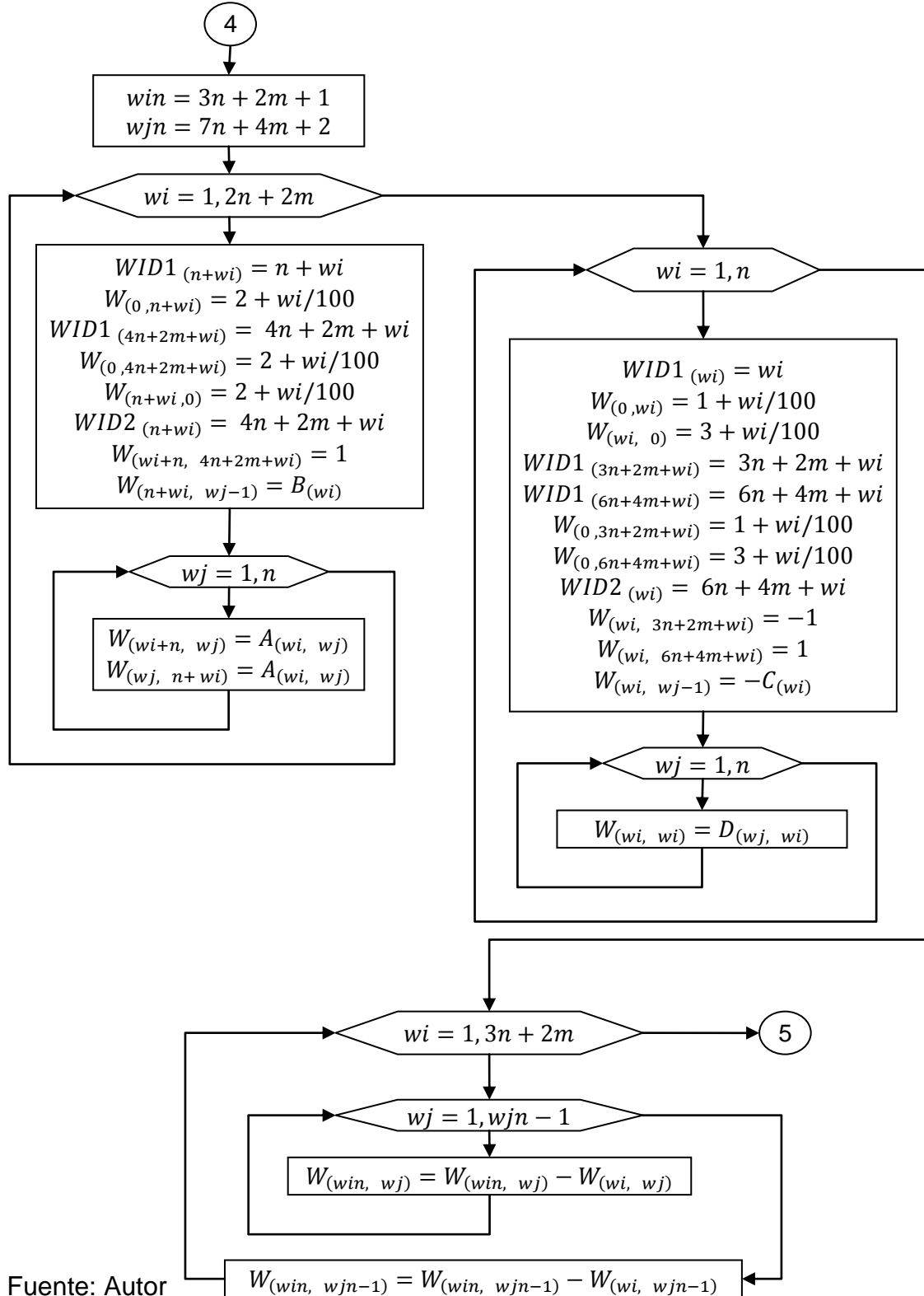
**Figura 22.** Algoritmo de corrección del eje de búsqueda



Fuente: Autor

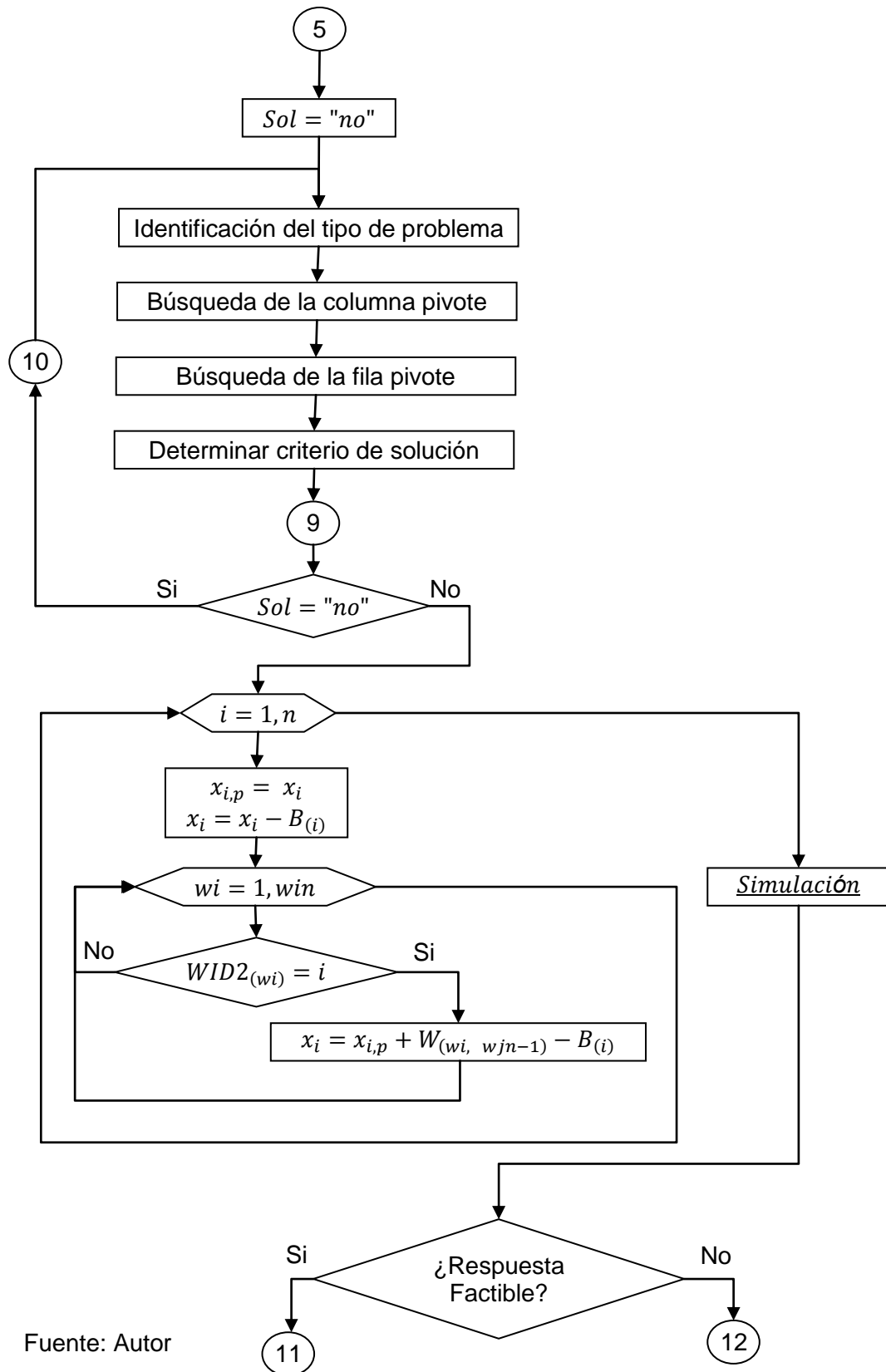
En la Figura 23 se muestra procedimiento para la construcción del arreglo matricial  $\bar{W}$  descrito en la Figura 17.

**Figura 23.** Planteamiento del problema cuadrático

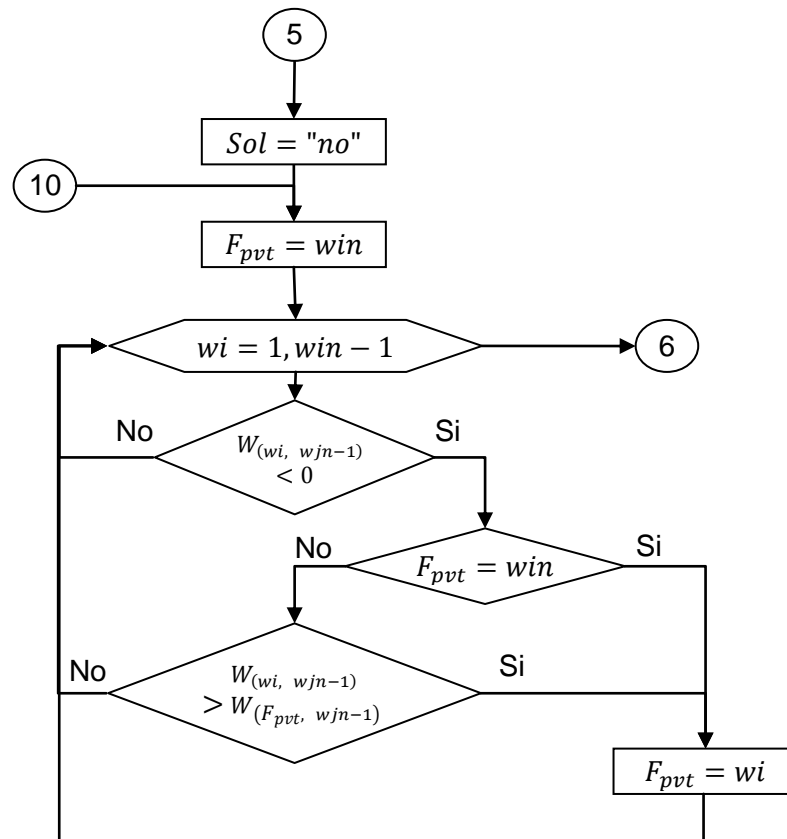


Fuente: Autor

Figura 24. Solución del problema cuadrático



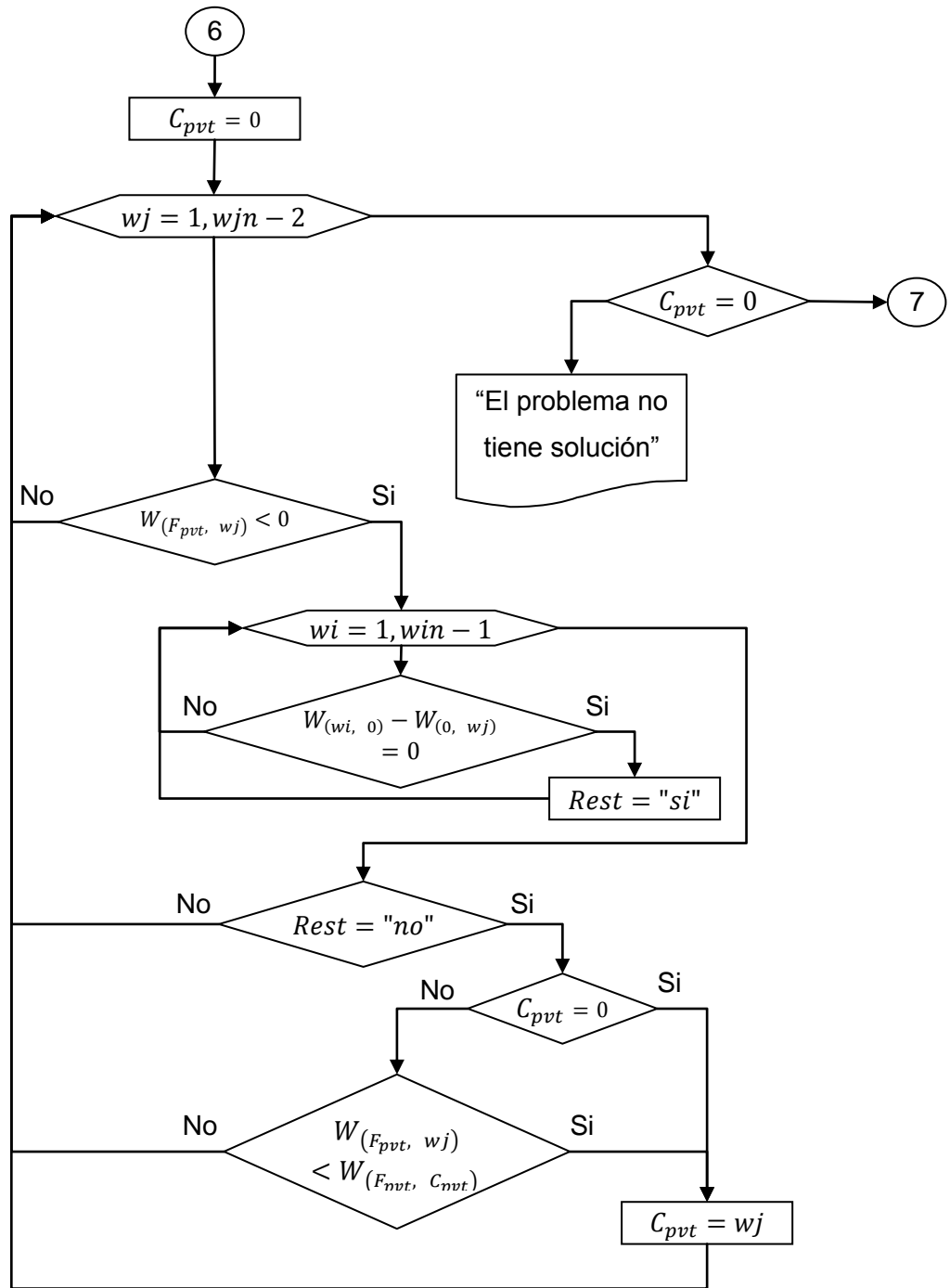
**FIGURA 25.** Identificación del tipo de problema cuadrático



Fuente: Autor

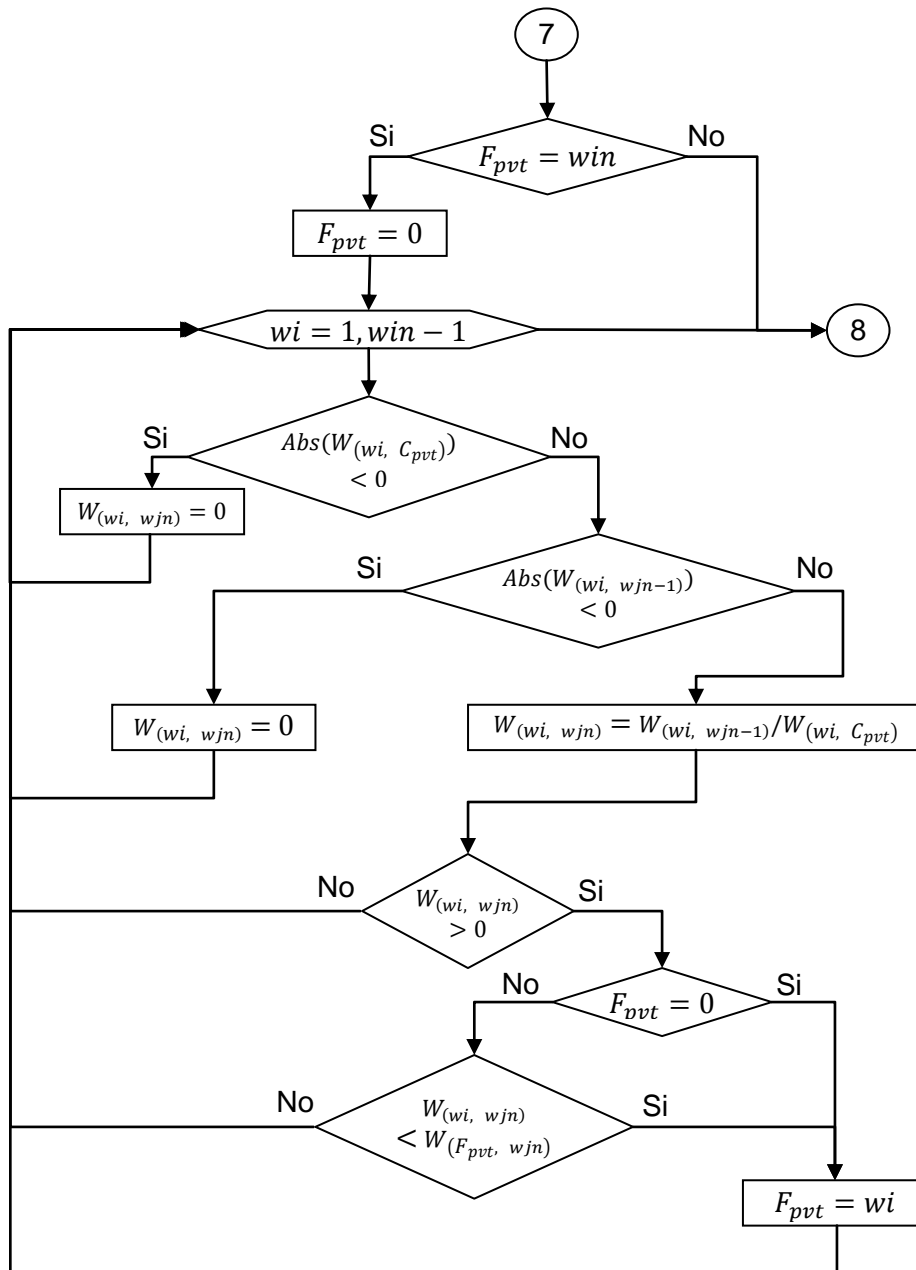
El algoritmo de solución al problema cuadrático en el subsector de búsqueda, se muestra en la Figura 24, el cual utiliza los algoritmos descritos en las Figuras desde la 25 hasta 28.

Figura 26. Búsqueda de la columna pivote



Fuente: Autor

Figura 27. Búsqueda de la fila pivote en problemas tipo estándar



Fuente: Autor

Figura 28. Determinar criterio de solución al problema cuadrático

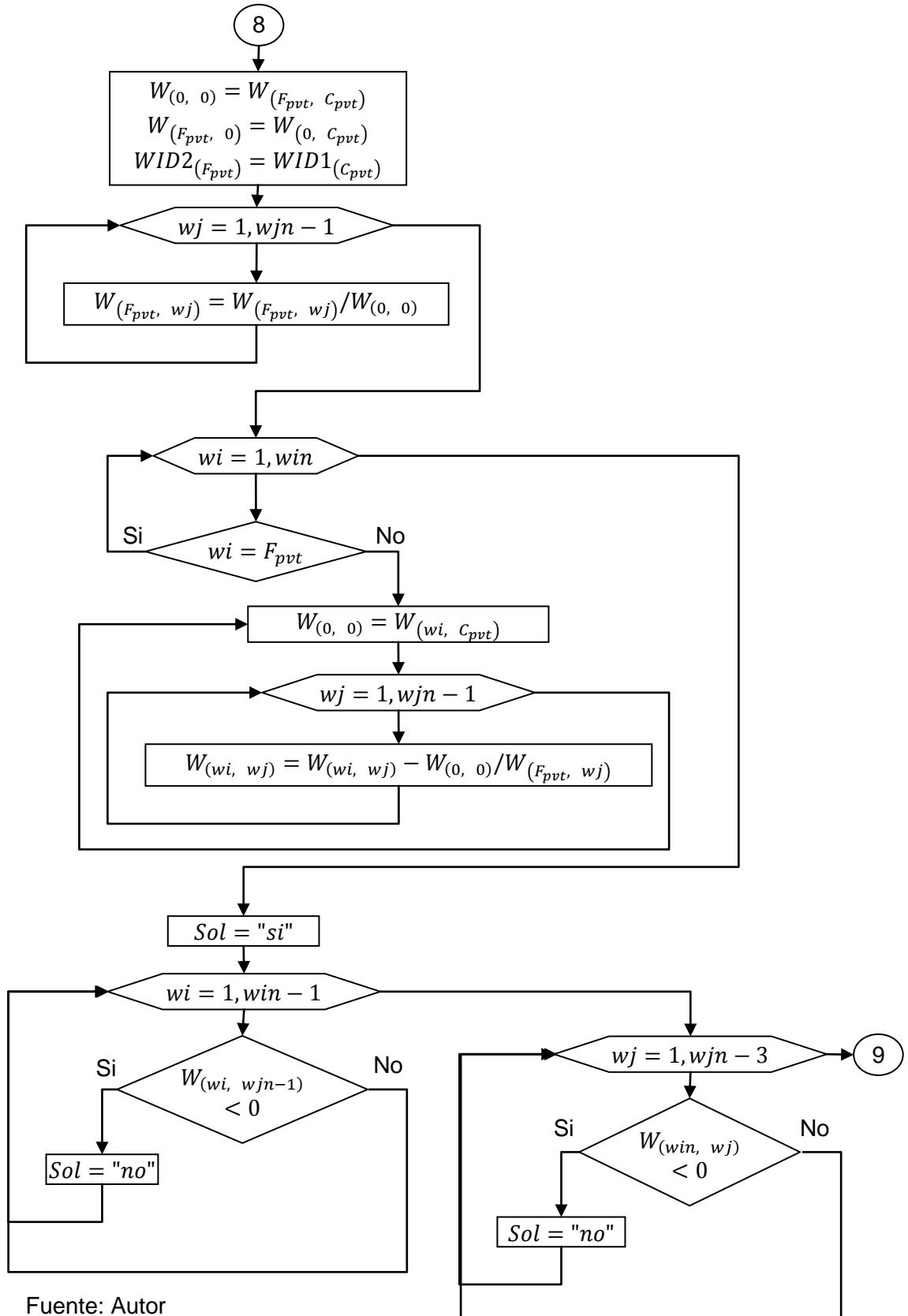
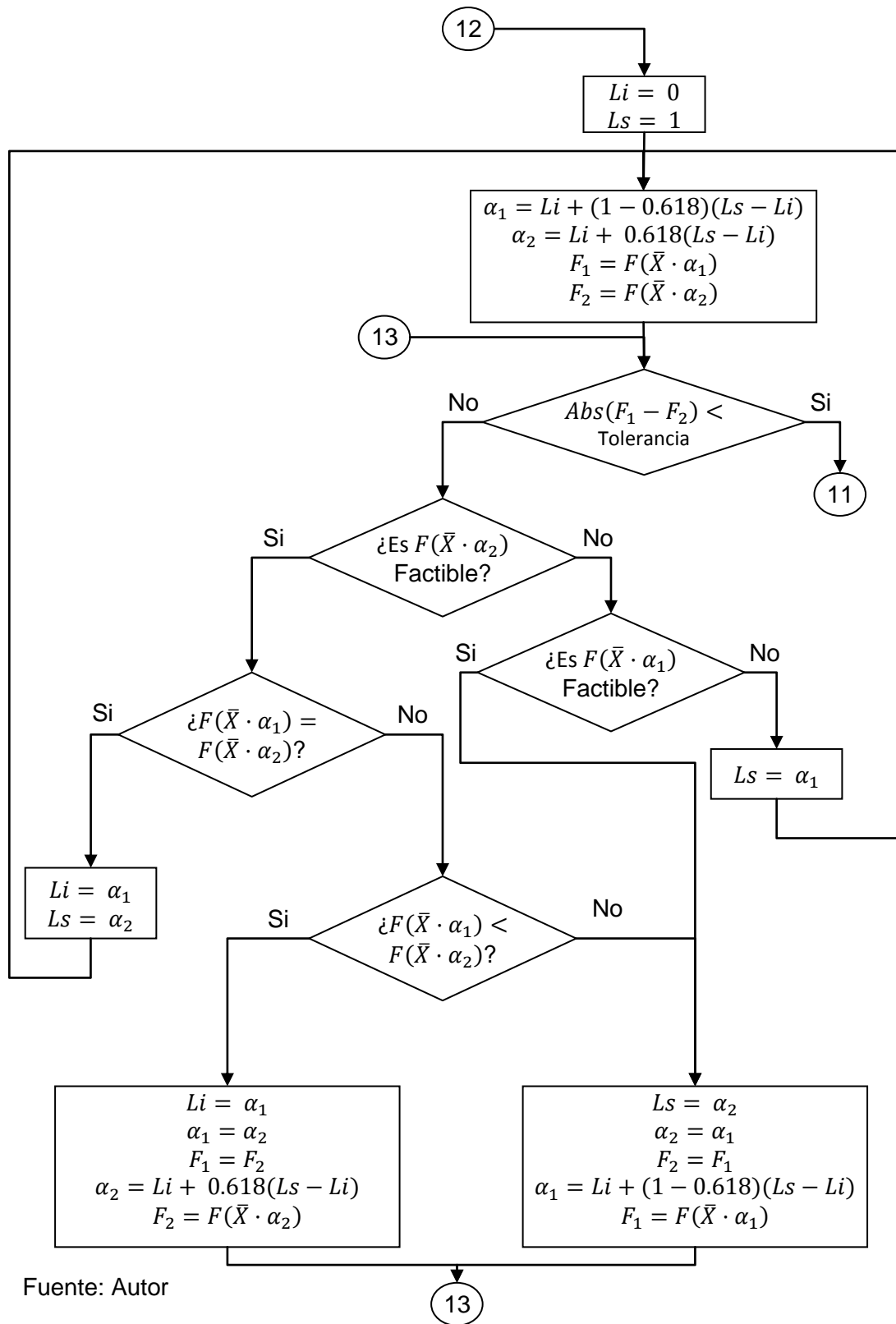


Figura 29. Algoritmo para la búsqueda de punto factible más cercano



Fuente: Autor

## 6. APLICACIÓN DEL ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN

En el presente capítulo se aplica el algoritmo desarrollado en la optimización de una función objetivo, dentro de un conjunto de restricciones operacionales. El algoritmo es comparado con los métodos más reportados en la literatura aplicados a la optimización de URC, como lo son los Algoritmos Genéticos (GA) y la Programación Secuencial Cuadrática (SQP). Se utilizan los optimizadores presentes en Matlab basados en los métodos GA y SQP, como herramienta computacional de comparación.

Se muestra, cómo el algoritmo desarrollado logra encontrar la respuesta óptima superando el fenómeno de no linealidad en la función objetivo y restricciones, junto con la no continuidad de las funciones, reduciendo el tiempo de cálculo al requerir evaluar el modelo en una cantidad menor de puntos. El modelo de la URC y el algoritmo de optimización desarrollados, son programados en la herramienta computacional mostrada en el Anexo A, con la ayuda de esta herramienta se generó la información que es presentada en este capítulo.

### 6.1 OPTIMIZACIÓN CON DOS VARIABLES INDEPENDIENTES

Como primer escenario de evaluación se plantea inicialmente maximizar la conversión de la carga considerando 2 variables independientes:

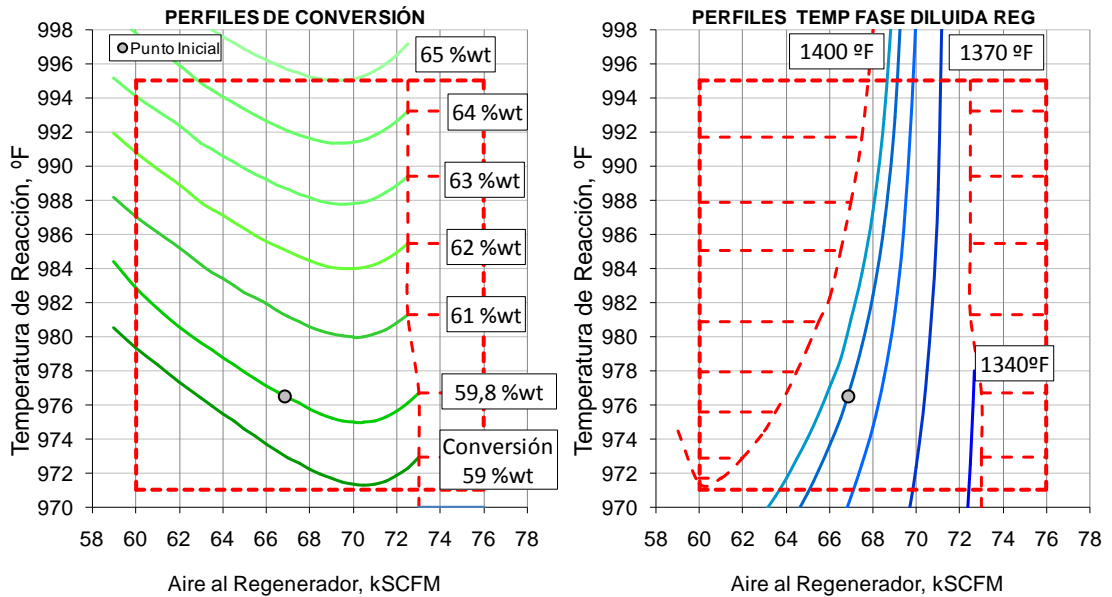
- Temperatura de reacción entre 971 y 995 °F
- Aire al regenerador entre 60 y 76 KSCFM

Y 3 restricciones operacionales en variables dependientes:

- Temperatura fase densa del regenerador entre 1280 y 1360 °F
- Temperatura fase diluida del regenerador entre 1295 y 1400 °F
- Circulación de catalizador entre 18 y 30 Ton/min

En la Figura 30 se muestra el espacio de búsqueda para la función objetivo (conversión de la carga), y la restricción en variable dependiente que presenta la mayor limitante operacional (Temperatura de la fase diluida del regenerador).

**Figura30.** Perfil de conversión y restricción dentro del espacio de búsqueda.



Se ubica el punto inicial correspondiente al monitoreo a la planta industrial, que posee una temperatura de reacción de 976,5°F y un flujo de aire al regenerador de 66,9kSCFM (Punto gris). A partir del punto inicial se generan los perfiles de variación para la conversión y la temperatura diluida del regenerador, en función de las dos variables independientes consideradas en el planteamiento de este problema, (la temperatura de reacción y el aire al regenerador). Se observa como para un flujo de aire constante, el incremento en la temperatura de reacción provoca un aumento tanto en la conversión de la carga, como en la temperatura diluida del regenerador, en cambio, para una temperatura de reacción constante, el incremento en el flujo de aire al regenerador aumenta la conversión hasta un punto máximo para luego disminuir, y la temperatura de la fase diluida se enfría a medida que el aire al regenerador aumenta.

El espacio de búsqueda está limitado inicialmente por las restricciones en las variables independientes, conformando para este problema en particular, un rectángulo formado por el flujo de aire entre 60 y 76kSCFM, y la temperatura de reacción entre 971 y 995°F. La respuesta del óptimo debe estar dentro o en el borde de esta área. El problema también contempla la restricción en la temperatura de fase diluida del regenerador, la cual se observa en su grafica correspondiente a la curva no continua de color rojo(1400°F). Debido a la naturaleza iterativa del modelo que simula el comportamiento de la URC, la función objetivo no es continua dentro de todo el espacio de búsqueda, creando zonas como las mostradas en la figura limitadas por un flujo de aire superior a los 71kSCFM.

Es en la zona limitada por las restricciones de color rojo (Figura 30) dentro de la cual se debe buscar la máxima conversión, en este caso que conocemos el comportamiento de las funciones, es posible visualizar que la máxima conversión para el conjunto de restricciones consideradas corresponde aproximadamente a 65%wt, se ubica en el límite superior de temperatura de reacción de 995°F, con un flujo de aire intermedio de aproximadamente 69kSCFM. Este punto óptimo es posible encontrarlo de forma gráfica, debido a que la función objetivo ha sido evaluada 364 veces permitiendo graficar los perfiles mostrados en la Figura 30. La finalidad del algoritmo radica en encontrar el punto óptimo con la menor cantidad posible de evaluaciones del modelo.

La presencia del óptimo en el límite superior de la temperatura de reacción es reportada por Ellis *et al.*, (1998), en la optimización de una unidad Modelo IV, utilizando como función objetivo el rendimiento económico, considerando la variación en la temperatura del regenerador, la temperatura de reacción y el flujo de carga. Maximizando el rendimiento económico en un escenario de precios valorando la gasolina como principal producto, se obtiene el incremento de la temperatura de reacción hasta alcanzar el límite superior de 994°F, la

disminución de la temperatura del regenerador hasta el límite inferior de 1267°F, y un leve incremento en el flujo de carga al reactor.

No en todas las ocasiones se logra alcanzar las máximas restricciones operacionales, como en el caso de los resultados reportados por Han *et al.*, (2004), en donde se muestra que la optimización económica de una URC provoca el incremento de la temperatura de reacción, pero debido a una limitante en el manejo de los gases que se producen en el reactor, la temperatura no alcanza el límite superior, logrando incrementar de 795 K hasta 803, y no alcanza los 820K de límite superior.

La unidad de ruptura catalítica considerada en el presente estudio, presenta una capacidad en el flujo de aire al regenerador suficiente para quemar el coque producido en el reactor, logrando alcanzar un punto de máxima conversión. El incremento continuo del flujo de aire luego del punto de máxima conversión, provoca una disminución en la temperatura del regenerador y del catalizador regenerado, haciendo necesario el incremento de la circulación de catalizador para compensar la pérdida de energía debida a la disminución de la temperatura del catalizador, y de esta forma satisfacer el balance de energía entre el regenerador-reactor, la relación C/O disminuye junto con la conversión y el coque producido, esta tendencia se mantiene hasta el punto en el que la disminución del coque provoca que el regenerador no logre suministrar la energía necesaria para satisfacer al reactor, y no exista un flujo de catalizador que permita lograr el balance de energía, es en este punto donde se genera la discontinuidad del espacio de búsqueda asociado a una operación no estable.

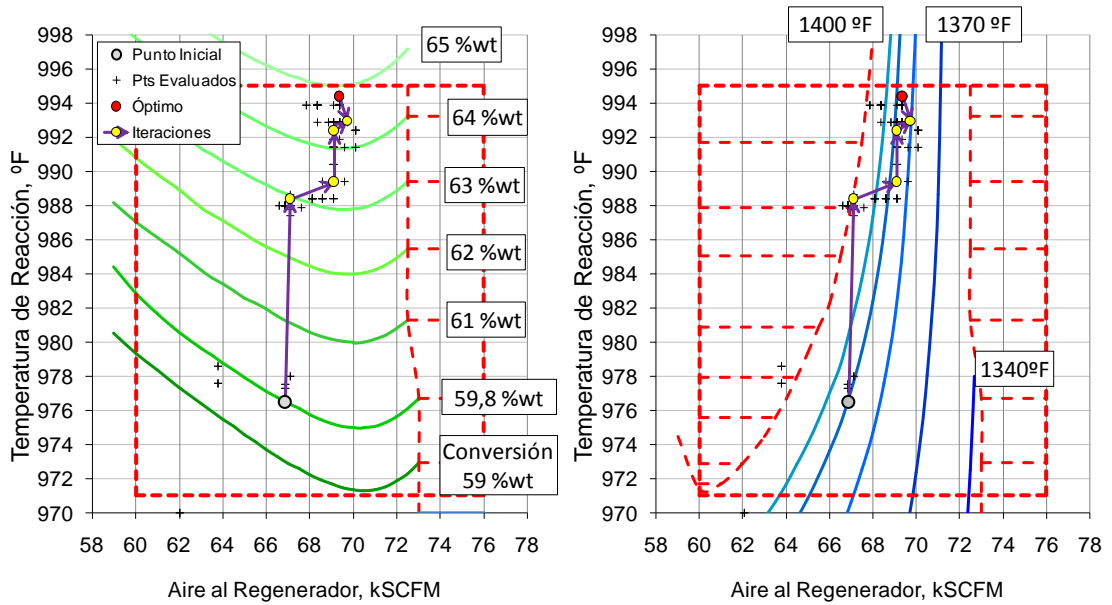
La solución al problema de optimización por medio de algoritmos genéticos se realizó utilizando la siguiente configuración de la función de optimización “ga()” suministrada en el software Matlab:

Propiedad	Valor	Sintaxis en Matlab
Función		ga()
Número de variables	2	nvar
Configuración de Opciones		gaoptimset()
Población inicial	5	'PopulationSize', 5
Población generada en cruces	0,8	'CrossoverFraction', 0.8
Descendencia elite	2	'EliteCount', 2

El algoritmo genético requiere de 5 generaciones para encontrar la respuesta óptima (Figura 31, Tabla 6), cada generación está conformada por 55 individuos, los cuales se obtienen de la siguiente manera: 2 individuos provienen de descendencia élite, que corresponden a las dos mejores respuestas de la anterior generación, un 80% del restante de la población proviene del cruce entre los padres en cada generación, y el 20% faltante es resultado de mutaciones.

Para encontrar el punto óptimo, en total se evalúa la función objetivo en 280 oportunidades, con un tiempo promedio de 1,5s por simulación, el algoritmo genético tarda 431s ó 7,2min en encontrar la respuesta. En la Figura 31 se muestra en color amarillo la mejor respuesta obtenida en cada generación, en color negro los puntos que corresponden a los demás miembros de cada generación, y en color rojo el punto óptimo resultante. El punto óptimo encontrado por el GA está ubicado a una temperatura de reacción de 994,4°F y 69,4kSCFM, con una conversión de 64,8%wt, que representa un incremento de +5%wt en la función objetivo.

**Figura 31.** Iteraciones realizadas por el algoritmo genético considerando 2 variables.



**Tabla 6.** Iteraciones realizadas por GA considerando 2 variables

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5
Acumulación de puntos evaluados		5	60	115	170	225	280
Tiempo acumulado, s		8	80	153	269	352	431
<b>Variables independientes</b>							
Temp. de reacción	°F	976,5	988,4	989,4	992,4	992,9	994,4
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	67,1	69,1	69,1	69,7	69,4
<b>Variables dependientes</b>							
Temp. fase densa	°F	1337	1346	1335	1337	1332	1336
Temp. fase diluida	°F	1392	1400	1389	1391	1386	1389
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	20,0	20,7	20,9	21,2	21,1
<b>Función objetivo</b>							
Conversión	%wt	59,8	63,0	63,4	64,3	64,4	64,8
<b>Rendimientos Reactor</b>							
Gas Seco	%wt	4,3	4,6	4,7	4,8	4,8	4,8
GLP	%wt	10,9	11,7	11,9	12,1	12,2	12,3
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	40,6	40,8	41,3	41,4	41,6
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	18,8	18,5	18,1	18,0	17,8
Slurry (>750°F)	%wt	19,6	18,3	18,0	17,7	17,6	17,4
Coque	%wt	5,9	6,0	6,0	6,1	6,1	6,1
<b>Gases de Combustión</b>							
O2	%mol	2,4	2,1	2,6	2,5	2,6	2,5
CO	%mol	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
CO2	%mol	16,4	16,6	16,2	16,3	16,2	16,3

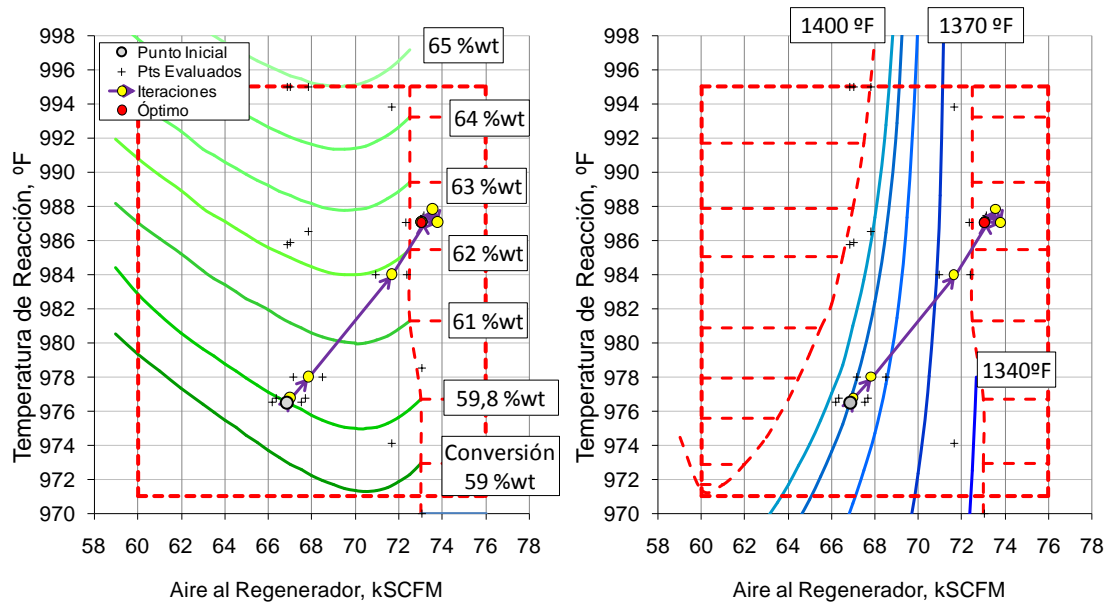
Este mismo problema es resuelto utilizando el método SQP presente en Matlab, con la siguiente configuración de la función de optimización “fmincon”:

Propiedad	Valor	sintaxis en Matlab
Función		fmincon()
Tipo Algoritmo de optimización	sqp	'Algorithm', 'sqp'
Tipo de diferencia finita	Central	'FinDiffType', 'central'
Delta en evaluación del gradiente	0,01	'FinDiffRelStep', 0.01
Tolerancia función objetivo	0,001	'TolFun', 0.001

En la Figura 32 se muestran las iteraciones realizadas por el método SQP para buscar el óptimo. En el punto inicial se genera el conjunto de gradientes que especifican el problema de optimización. La respuesta al primer problema cuadrático indica que el óptimo está ubicado en la dirección hacia el incremento de temperatura de reacción y flujo de aire al regenerador. Las siguientes iteraciones conducen hacia la zona de no convergencia donde no es posible evaluar correctamente los gradientes, provocando que el método no converja hacia la respuesta óptima.

El método estándar SQP falla al buscar el punto óptimo debido a la no continuidad del espacio de búsqueda. Gracias a que conocemos con anterioridad el comportamiento de la función objetivo y las restricciones, es posible para este problema en particular definir el rango donde el modelo es continuo, de este modo si indicamos en el planteamiento del problema que la restricción en el flujo de aire al regenerador debe ser inferior a 71kSCFM, el método estándar SQP puede encontrar la respuesta óptima Figura 33.

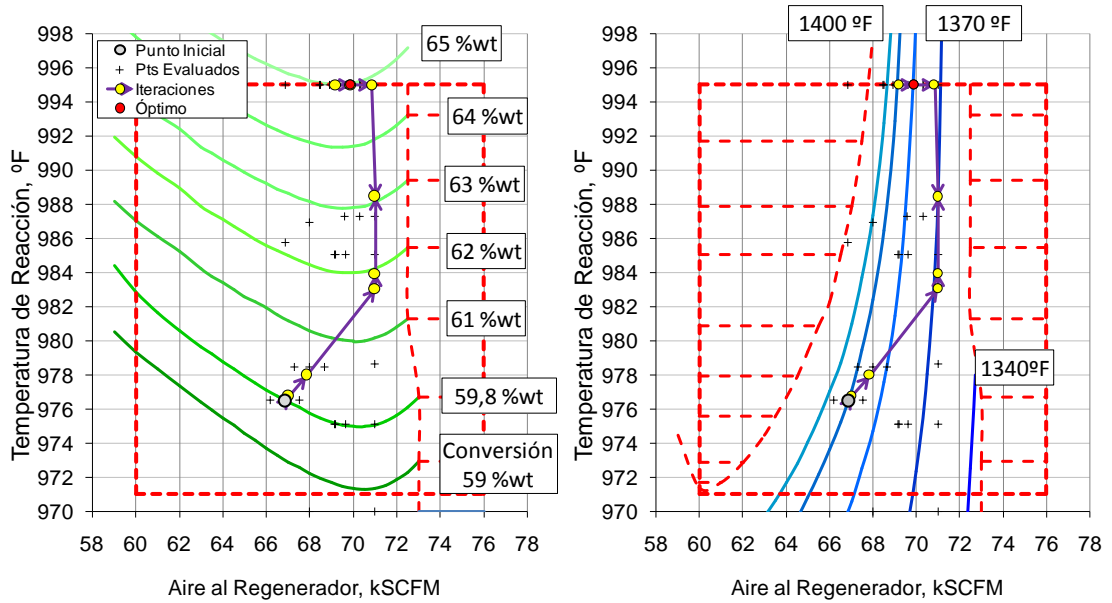
**Figura 32.** Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables



En la solución del problema especificando el máximo flujo de aire al regenerador en 71kSCFM, el método inicia con la evaluación de los gradientes en el punto inicial, para lo que requiere explorar 5 puntos alrededor, el método requiere de 8 iteraciones para encontrar la respuesta óptima (Figura 33, Tabla 7), en cada iteración se calculan los gradientes para la función objetivo y restricciones, evaluando el modelo en 5 ocasiones en cada iteración, como resultado se necesita evaluar 45 puntos, que tardan en total 60s para terminar de localizar el punto óptimo.

La respuesta encontrada por el método SQP se encuentra ubicada en la máxima temperatura de reacción de 995°F, con un flujo de aire intermedio de 69,9kSCFM, y el incremento en la función objetivo es de +5,2%wt. Esta respuesta es obtenida gracias a que fue posible indicar el rango de continuidad del modelo, sin embargo, esta información no es posible determinarla con anterioridad para cada escenario de optimización que se desee resolver.

**Figura 33.** Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables.



**Tabla 7.** Iteraciones realizadas por método SQP considerando 2 variables

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	7	8
Acumulación de puntos evaluados		5	10	15	20	25	30	35	40	45
Tiempo acumulado, s		7	14	20	27	33	40	47	53	60
<b>VARIABLES INDEPENDIENTES</b>										
Temp, de reacción	°F	976,5	976,8	978,0	983,1	984,0	988,4	995,0	995,0	995,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	67,0	67,8	71,0	71,0	71,0	70,8	69,2	69,9
<b>VARIABLES DEPENDIENTES</b>										
Temp, fase densa	°F	1337	1337	1335	1314	1315	1317	1321	1337	1331
Temp, fase diluida	°F	1392	1392	1389	1368	1369	1371	1375	1391	1385
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	19,4	19,6	21,3	21,4	21,7	22,2	21,1	21,5
<b>Función objetivo</b>										
Conversión	%wt	59,8	59,9	60,3	61,7	61,9	63,1	64,9	65,0	65,0
<b>Rendimientos Reactor</b>										
Gas Seco	%wt	4,3	4,3	4,3	4,5	4,5	4,6	4,8	4,8	4,8
GLP	%wt	10,9	10,9	11,1	11,4	11,5	11,8	12,3	12,4	12,4
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	38,8	39,0	39,9	40,0	40,7	41,6	41,7	41,7
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,6	20,3	19,5	19,4	18,7	17,7	17,7	17,7
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	19,5	19,3	18,8	18,7	18,2	17,4	17,3	17,3
Coque	%wt	5,9	5,9	5,9	6,0	6,0	6,0	6,1	6,1	6,1
<b>Gases de Combustión</b>										
O2	%mol	2,4	2,5	2,6	3,2	3,2	3,1	2,9	2,4	2,6
CO	%mol	0,1	0,1	0,1	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	0,1
CO2	%mol	16,3	16,3	16,2	15,6	15,7	15,8	16,0	16,3	16,2

Por último se aplica el algoritmo desarrollado en la solución del problema planteado. En la primera etapa del algoritmo se determinan los gradientes que conforman la matriz  $\bar{H}$ , y los vectores  $\bar{C}$  y  $\bar{A}$ .

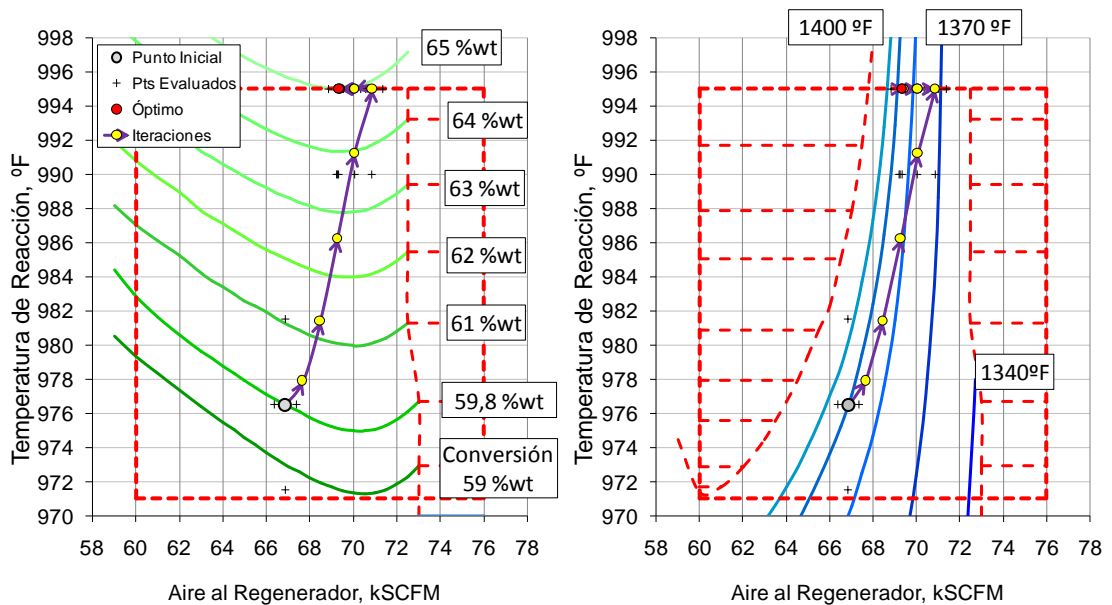
$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial F}{\partial \dot{F}_A} \right|_{\bar{x}} &= -1,01275 & \left. \frac{\partial F}{\partial T_{rxn}} \right|_{\bar{x}} &= -1,77107 \\ \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \dot{F}_A^2} \right|_{\bar{x}} &= -0,14345 & \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T_{rxn}^2} \right|_{\bar{x}} &= -0,03646 \\ \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \dot{F}_A T_{rxn}} \right|_{\bar{x}} &\approx 0 & \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T_{rxn} \dot{F}_A} \right|_{\bar{x}} &\approx 0 \\ \\ \left. \frac{\partial T_{reg}}{\partial \dot{F}_A} \right|_{\bar{x}} &= -3,45434 & \left. \frac{\partial T_{reg}}{\partial T_{rxn}} \right|_{\bar{x}} &= 0,95912 \\ \left. \frac{\partial T_{Dil}}{\partial \dot{F}_A} \right|_{\bar{x}} &= -3,64413 & \left. \frac{\partial T_{Dil}}{\partial T_{rxn}} \right|_{\bar{x}} &= 0,95785 \\ \left. \frac{\partial C/O}{\partial \dot{F}_A} \right|_{\bar{x}} &= 0,18630 & \left. \frac{\partial C/O}{\partial T_{rxn}} \right|_{\bar{x}} &= 0,03945 \end{aligned}$$

Estos gradientes que requieren el mayor tiempo de cómputo, permanecen constantes a lo largo de la primera búsqueda, avanzando de un subsector a otro, hasta localizar un cambio en la dirección de búsqueda debido a la presencia de alguna restricción, o no continuidad del modelo. El resultado de la búsqueda en el primer subsector corresponde a la iteración 1 en el cual se requieren 5 simulaciones, las siguientes iteraciones 2, 3 y 4, evalúan el modelo en 1 ocasión cada una.

En la 5 iteración, en la dirección indicada por el primer gradiente generado, se encuentra la restricción de máxima temperatura en la variable independiente de la temperatura de reacción. El algoritmo indica que en este punto se genera nuevamente los gradientes que describen la nueva dirección de búsqueda. La generación del nuevo gradiente requiere evaluar el modelo en 7 nuevas ocasiones.

La respuesta del problema cuadrático en la segunda generación de gradientes indica la existencia de un punto óptimo, en la dirección de la disminución de aire al regenerador, ubicando la respuesta en un flujo de 69,3 KSCFM.

**Figura 34.** Iteraciones del algoritmo desarrollado considerando 2 variables



En la Tabla 9 se muestra la comparación entre los resultados obtenidos utilizando GA, SQP y el algoritmo desarrollado. La solución encontrada por los tres métodos indican que la máxima conversión dado el conjunto de restricciones, se ubica al aumentar al máximo la temperatura de reacción hasta los 995°F, y aumentar el flujo de aire hasta un valor intermedio de aproximadamente 69,5kSCFM.

El método GA con respecto al algoritmo desarrollado, requiere de 248 simulaciones adicionales para encontrar el óptimo, provocando que consuma la mayor cantidad de tiempo. El método SQP no logra resolver el problema en los escenarios donde el espacio de búsqueda contiene zonas de no continuidad del modelo, y en los escenarios donde la función es siempre continua requiere de 14 simulaciones adicionales para encontrar el óptimo. El algoritmo desarrollado representa una reducción en la cantidad de simulaciones del 86 y 29%, con respecto a los métodos GA y SQP respectivamente.

**Tabla 8.** Iteraciones optimización con 2 variables independientes utilizando el algoritmo desarrollado

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	8	9	10
Acumulación de puntos evaluados		5	6	7	8	9	16	17	24	26	32
Tiempo acumulado, s		7	8	10	12	13	23	25	34	38	46
Variables independientes											
Temp. de reacción	°F	976,5	977,9	981,4	986,2	991,2	995,0	995,0	995,0	995,0	995,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	67,7	68,5	69,3	70,1	70,9	70,1	70,1	69,4	69,3
Variables dependientes											
Temp. fase densa	°F	1337	1336	1335	1333	1328	1321	1330	1330	1336	1336
Temp. fase diluida	°F	1392	1390	1388	1386	1382	1374	1383	1383	1389	1390
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	19,6	19,9	20,5	21,3	22,2	21,6	21,6	21,2	21,2
Función objetivo											
Conversión	%wt	59,8	60,3	61,3	62,6	63,9	64,9	65,0	65,0	65,0	65,0
Rendimientos Reactor											
Gas Seco	%wt	4,3	4,3	4,4	4,6	4,7	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8
GLP	%wt	10,9	11,0	11,3	11,6	12,0	12,3	12,4	12,4	12,4	12,4
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	39,0	39,6	40,4	41,1	41,6	41,7	41,7	41,7	41,7
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,4	19,8	19,0	18,3	17,7	17,7	17,7	17,7	17,7
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	19,3	18,9	18,4	17,8	17,4	17,3	17,3	17,3	17,3
Coque	%wt	5,9	5,9	5,9	6,0	6,1	6,1	6,1	6,1	6,1	6,1
Gases de Combustión											
O2	%mol	2,43	2,58	2,66	2,70	2,76	2,86	2,65	2,65	2,48	2,46
CO	%mol	0,04	0,04	0,03	0,03	0,03	0,03	0,04	0,04	0,04	0,04
CO2	%mol	16,35	16,23	16,16	16,12	16,07	15,98	16,16	16,16	16,31	16,32

**Tabla 9.** Comparación entre los diferentes métodos de optimización evaluados

Variable	Unidad	Punto inicial	Solución óptimo		
			Algoritmo Genético	SQP	Algoritmo Desarrollado
Puntos evaluados del modelo			280	45	32
Tiempo de calculo	s		431	60	46
<b>Variables independientes</b>					
Temp de reacción	°F	977	994,4	995	995
Aire al Reg	kSCFM	66,9	69,4	69,9	69,3
<b>Variables dependientes</b>					
Temp. Fase Densa	°F	1337	1336	1331	1336
Temp. Fase Diluida	°F	1392	1389	1385	1390
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	21,1	21,5	21,2
Función objetivo					
Conversión	%wt	59,8	64,8	65,0	65,0
<b>Rendimientos Reactor</b>					
Gas Seco	%wt	4,2	4,8	4,8	4,8
GLP	%wt	10,9	12,3	12,4	12,4
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	41,6	41,7	41,7
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	17,8	17,7	17,7
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	17,4	17,3	17,3
Coque	%wt	5,9	6,1	6,1	6,1
<b>Gases combustión</b>					
O2	%mol	2,4	2,5	2,6	2,5
CO	%mol	0,01	0,04	0,04	0,04
CO2	%mol	16,4	16,3	16,2	16,3

En este capítulo se presentó la solución al problema de optimización utilizando como función objetivo la maximización de la conversión, considerando la variación en 2 variables independientes y 3 restricciones operacionales. El planteamiento del algoritmo desarrollado permite seleccionar varios tipos de funciones objetivo, como por ejemplo maximizar el rendimiento de ALC, que corresponde a un estado operacional contrario al de maximizar la conversión.

Considerando el problema de maximizar el rendimiento de ALC utilizando 2 variables independientes:

- Temperatura de reacción entre 971 y 995 °F

- Aire al regenerador entre 60 y 76 KSCFM

Y 3 restricciones operacionales en variables dependientes:

- Temperatura fase densa del regenerador entre 1280 y 1360 °F
- Temperatura fase diluida del regenerador entre 1295 y 1400 °F
- Circulación de catalizador entre 18 y 30 Ton/min

En la Figura 35 y Tabla 10 se muestra la solución al problema aplicando el método GA, con las mismas especificaciones del problema anterior, se observan los espacios de búsqueda para la función objetivo (Rendimiento de ALC), y la restricción en la variable dependiente que presenta la mayor limitante operacional (Temperatura de la fase diluida del regenerador). En este escenario diferente a la máxima conversión, el máximo rendimiento de ALC se obtiene al disminuir la temperatura de reacción y el flujo de aire al regenerador. En esta oportunidad el GA requiere de 1 iteraciones y 60 simulaciones para localizar el punto óptimo.

En el estado operacional de la plata direccionada hacia la producción de ALC, se presenta una disminución en la severidad de la reacción, que en este caso de estudio se logra reduciendo la temperatura de reacción, provocando una menor conversión de la carga. Este estado operacional consume menos energía de craqueo en el reactor, obligando a reducir el flujo de catalizador que transporta la energía del regenerador al reactor, los fenómenos de menor conversión y disminución de circulación de catalizador, reducen la cantidad de coque enviada al regenerador, el flujo de aire al regenerador es una variable independiente la cual es seleccionada en este problema para maximizar el rendimiento de ALC, al existir menos coque entrando al regenerador, se requiere menos aire para quemarlo, este fenómeno provoca un ligero aumento en la temperatura del regenerador.

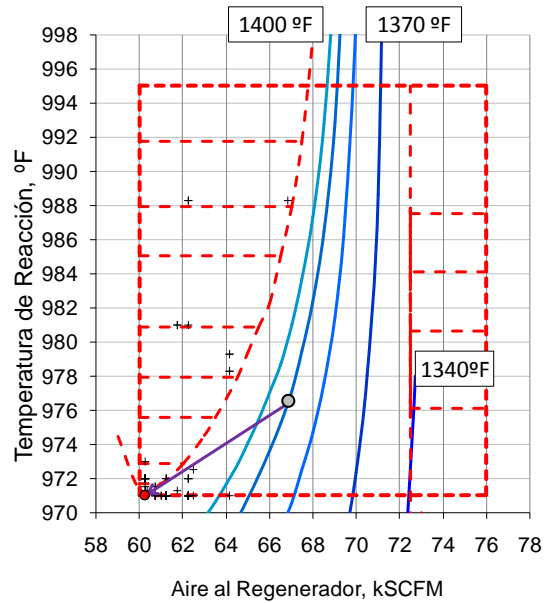
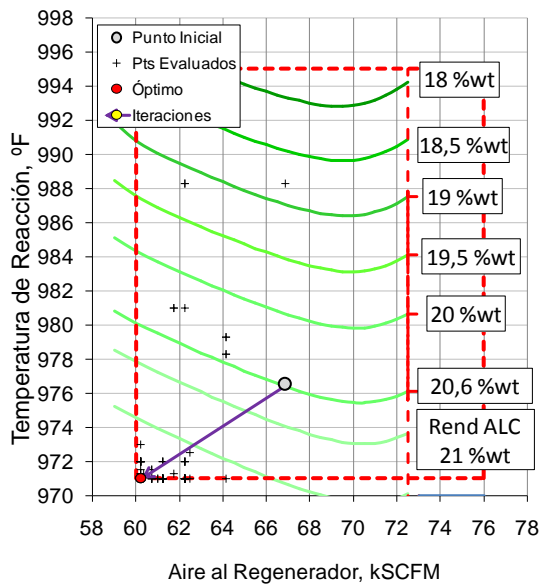
Para el caso del método SQP Figura 36 y Tabla 11, se aprecia como requiere de 7 iteraciones, equivalentes a 40 simulaciones para encontrar el punto óptimo, nuevamente se resalta cómo el método actualiza el gradiente en cada iteración, incrementando en 5 simulaciones en cada iteración. Entre mayor número de variables independientes, mayor será el incremento en el número de simulaciones que se requieren en la actualización de los gradientes.

Del mismo modo que en el problema anterior, el algoritmo desarrollado presenta una disminución en la cantidad de simulaciones requeridas (Figura 37 y Tabla 12), a pesar de necesitar más iteraciones, el número de simulaciones se reduce gracias a la metodología desarrollada que permite identificar el momento oportuno en el que se puede actualizar el gradiente, de esta forma se obtiene el mayor provecho a cada simulación.

**Figura 35. Maximización del rendimiento de ALC aplicando GA**

Rendimiento de ALC

Temperatura Fase Diluida Regenerador



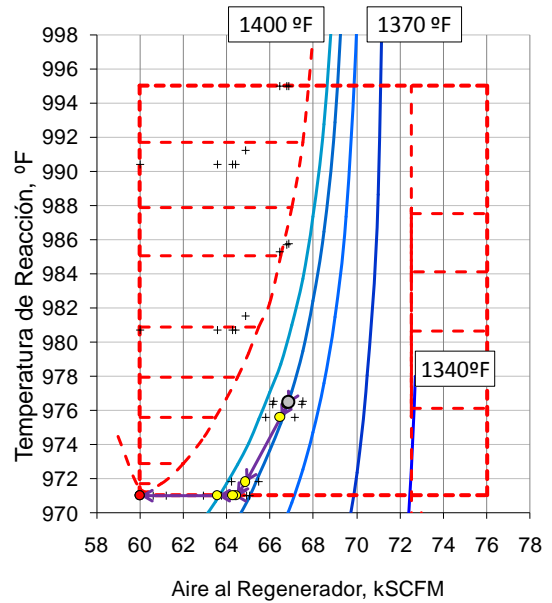
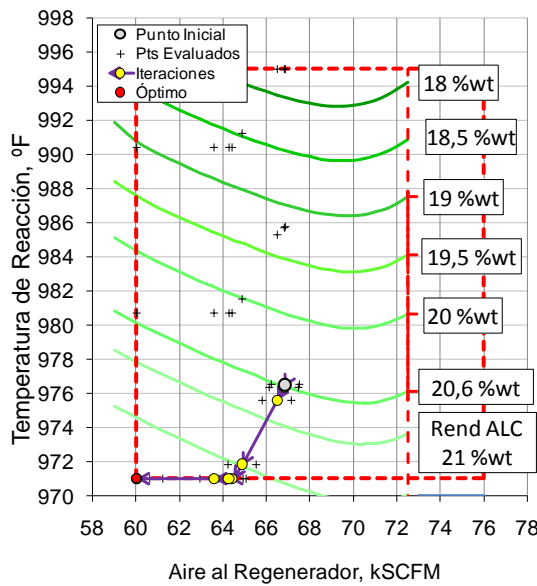
**Tabla 10. Iteraciones en maximización del rendimiento de ALC aplicando GA**

Iteración		Punto Inicial	1
Acumulación de puntos evaluados		5	60
Tiempo acumulado, s		8	85
<b>Variables independientes</b>			
Temp. de reacción	°F	976,5	971,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	60,2
<b>Variables dependientes</b>			
Temp. fase densa	°F	1337	1347
Temp. fase diluida	°F	1392	1398
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	18,4
<b>Función objetivo</b>			
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	22,0
<b>Rendimientos Reactor</b>			
Gas Seco	%wt	4,3	4,0
GLP	%wt	10,9	10,3
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	37,1
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	22,0
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	20,9
Coque	%wt	5,9	5,7
Conversión	%wt	59,8	57,1
<b>Gases de Combustión</b>			
O <sub>2</sub>	%mol	2,4	1,0
CO	%mol	0,1	0,1
CO <sub>2</sub>	%mol	16,3	17,6

**Figura 36. Maximización del rendimiento de ALC aplicando SQP**

Rendimiento de ALC

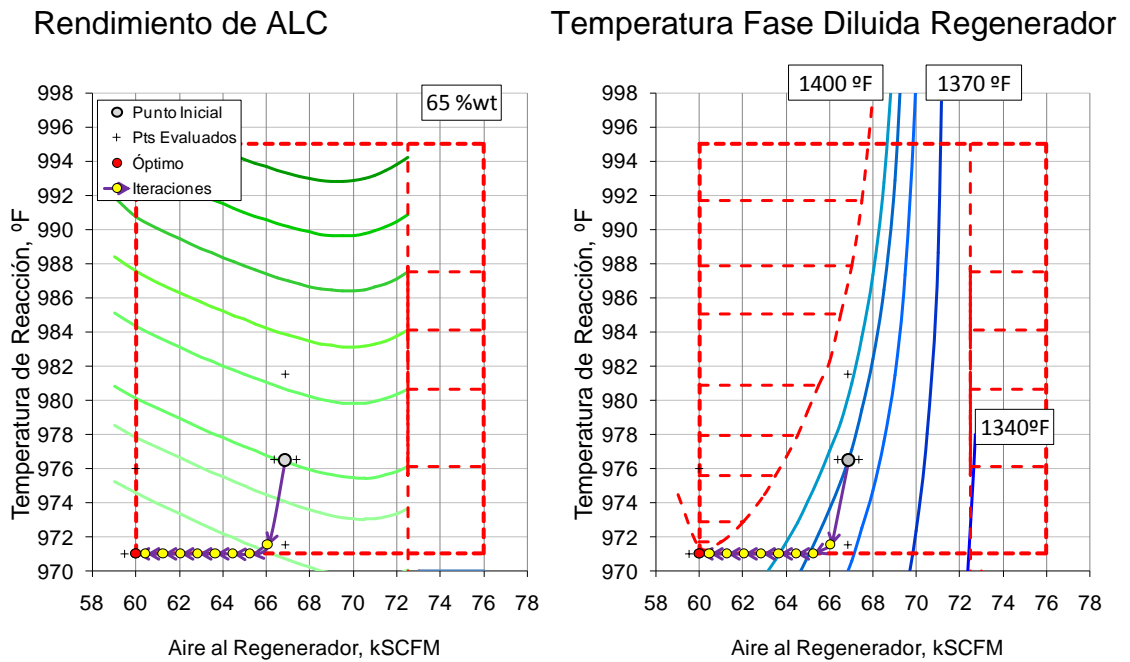
Temperatura Fase Diluida Regenerador



**Tabla 11. Iteraciones en maximización del rendimiento de ALC aplicando SQP**

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	7
Acumulación de puntos evaluados		5	10	15	20	25	30	35	40
Tiempo acumulado, s		7	15	22	30	37	44	52	59
<b>VARIABLES INDEPENDIENTES</b>									
Temp. de reacción	°F	976,5	976,4	975,6	971,8	971,0	971,0	971,0	971,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	66,8	66,5	64,9	64,4	64,3	63,6	60,0
<b>VARIABLES DEPENDIENTES</b>									
Temp. fase densa	°F	1337	1338	1338	1339	1339	1339	1341	1348
Temp. fase diluida	°F	1392	1392	1392	1393	1393	1394	1395	1399
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	19,3	19,2	18,8	18,8	18,7	18,7	18,3
<b>FUNCIÓN OBJETIVO</b>									
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,7	20,8	21,5	21,6	21,7	21,7	22,0
<b>RENDIMIENTOS REACTOR</b>									
Gas Seco	%wt	4,3	4,3	4,2	4,1	4,1	4,1	4,1	4,0
GLP	%wt	10,9	10,9	10,9	10,6	10,5	10,5	10,5	10,2
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	38,7	38,6	37,8	37,7	37,7	37,6	37,1
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,7	20,8	21,5	21,6	21,7	21,7	22,0
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	19,6	19,7	20,2	20,3	20,3	20,4	21,0
Coque	%wt	5,9	5,9	5,9	5,8	5,8	5,8	5,8	5,7
Conversión	%wt	59,8	59,8	59,5	58,3	58,0	58,0	57,9	57,0
<b>GASES DE COMBUSTIÓN</b>									
O <sub>2</sub>	%mol	2,4	2,4	2,4	2,1	2,0	2,0	1,8	0,9
CO	%mol	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
CO <sub>2</sub>	%mol	16,3	16,3	16,4	16,6	16,7	16,7	16,9	17,6

**Figura 37.** Maximización del rendimiento de ALC aplicando el algoritmo desarrollado



En la Tabla 13 se reporta la comparación entre los tres métodos de optimización utilizados en la solución del problema propuesto, de maximizar el rendimiento de ALC considerando 2 variables independientes y 3 restricciones en variables dependientes. En este ejemplo, la reducción de los puntos de simulación al aplicar el algoritmo desarrollado es del 43% con respecto al método SQP, y del 62% con respecto a la optimización con GA.

**Tabla 12.** Maximización del rendimiento de ALC aplicando el algoritmo desarrollado.

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Acumulación de puntos evaluados		5	6	7	8	9	10	11	12	13	23
Tiempo acumulado, s		7	9	10	12	13	15	16	17	19	33
Variables independientes											
Temp, de reacción	°F	976,5	971,5	971,0	971,0	971,0	971,0	971,0	971	971	971
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	66,1	65,3	64,5	63,7	62,9	62,1	61,3	60,5	60
Variables dependientes											
Temp, fase densa	°F	1337	1335	1337	1339	1341	1342	1344	1346	1347	1348
Temp, fase diluida	°F	1392	1389	1391	1393	1395	1397	1398	1399	1400	1400
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	19,0	18,9	18,8	18,7	18,6	18,5	18,4	18,3	18,3
Función objetivo											
Conversión	%wt	20,6	21,4	21,6	21,6	21,7	21,8	21,8	21,9	22,0	22,0
Rendimientos Reactor											
Gas Seco	%wt	4,3	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,0	4,0	4,0	4,0
GLP	%wt	10,9	10,6	10,6	10,5	10,5	10,4	10,4	10,3	10,3	10,2
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	37,9	37,8	37,7	37,6	37,5	37,4	37,2	37,1	37,1
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	21,4	21,6	21,6	21,7	21,8	21,8	21,9	22,0	22,0
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	20,1	20,2	20,3	20,4	20,5	20,6	20,8	20,9	21,0
Coque	%wt	5,9	5,8	5,8	5,8	5,8	5,8	5,7	5,7	5,7	5,7
Conversión	%wt	59,8	60,3	61,3	62,6	63,9	64,9	65,0	65,0	65,0	65,0
Gases de Combustión											
O2	%mol	2,43	2,40	2,23	2,04	1,84	1,64	1,43	1,23	1,01	0,89
CO	%mol	0,04	0,04	0,04	0,04	0,05	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09
CO2	%mol	16,35	16,38	16,53	16,70	16,87	17,04	17,22	17,40	17,58	17,68

**Tabla 13.** Comparación de métodos aplicados en la maximización del rendimiento de ALC

		Punto Inicial	Algoritmo Genético	SQP	Algoritmo Desarrollado
Iteraciones			1	7	9
Puntos evaluados			60	40	23
Tiempo,s			85	59	33
<b>Variables independientes</b>					
Temp, de reacción	°F	976,5	971,0	971,0	971
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	60,2	60,0	60
<b>Variables dependientes</b>					
Temp, fase densa	°F	1337	1347	1348	1348
Temp, fase diluida	°F	1392	1399	1399	1400
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	18,3	18,3	18,3
<b>Función objetivo</b>					
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	22,0	22,0	22,0
<b>Rendimientos Reactor</b>					
Gas Seco	%wt	4,3	4,0	4,0	4,0
GLP	%wt	10,9	10,2	10,2	10,2
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	37,1	37,1	37,1
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	22,0	22,0	22,0
Slurry (>650°F)	%wt	19,6	20,9	21,0	21,0
Coque	%wt	5,9	5,7	5,7	5,7
Conversión	%wt	59,8	57,1	57,0	65,0
<b>Gases de Combustión</b>					
O2	%mol	2,4	1,0	0,9	0,89
CO	%mol	0,1	0,1	0,1	0,09
CO2	%mol	16,3	17,6	17,6	17,68

## 6.2 OPTIMIZACIÓN CON VARIAS VARIABLES INDEPENDIENTES

Anteriormente se planteó maximizar la conversión de la carga considerando únicamente 2 variables independientes, en esta ocasión se propone comparar las herramientas aumentando en 5 las variables independientes. Se considera la optimización de la conversión en un escenario multivariable, utilizando las siguientes variables independientes junto con sus respectivas restricciones:

- Flujo de VGO entre 12 y 17 KBPD
- Flujo de DMOH entre 8 y 10 KBPD
- Temperatura de reacción entre 970 y 995 °F
- Temperatura de carga entre 355 y 420 °F
- Aire al regenerador entre 60 y 71 KSCFM

Del mismo modo se contemplan las siguientes restricciones operacionales en variables dependientes:

- Flujo total de carga entre 20 y 29 KBPD
- Temperatura fase densa del regenerador entre 1280 y 1360 °F
- Temperatura fase diluida del regenerador entre 1295 y 1400 °F
- Circulación de catalizador entre 18 y 30 Ton/min

El tiempo de cálculo requerido por los algoritmos genéticos en el ejercicio anterior, resultó ser muy superior al método SQP y algoritmo desarrollado, por lo tanto se descarta utilizarlo para un problema que posee mayor cantidad de variables. La configuración del método SQP es la misma utilizada en el problema anterior.

El método SQP realiza 17 iteraciones, y requiere un total de 200 puntos para encontrar el óptimo, estas simulaciones se realizan en 330s ó 5,5 min (Tabla 15). Por otro lado el algoritmo desarrollado solo necesita de 7 iteraciones y 44 puntos para encontrar la misma respuesta óptima (Tabla 14), disminuyendo el

tiempo de cálculo hasta los 64s, presentando una reducción del 78% en la cantidad de puntos requeridos para solucionar el problema.

En la Tabla 14 se presentan las 7 iteraciones realizadas por el algoritmo desarrollado para localizar el punto de máxima conversión. En el punto inicial se requiere evaluar la función objetivo en 11 oportunidades para generar los gradientes que especifican al problema de optimización, proceso que toma 16s, luego de generar los gradientes. Se avanza en la búsqueda del óptimo en la dirección indicada por la solución al problema cuadrático en el punto inicial. En 5 iteraciones se consigue la mejor respuesta utilizando los gradientes generados en el punto inicial, cada una de estas iteraciones requiere evaluar la función objetivo en una oportunidad aumentando el tiempo de cálculo hasta los 23s. En las iteraciones 6 y 7 se actualizan los gradientes que representan al problema cuadrático, evaluando en cada iteración la función objetivo en 14 oportunidades e incrementando el tiempo hasta los 64s.

Las dos herramientas obtienen el mismo punto de máxima conversión (Tabla 12). La respuesta de ambos optimizadores plantea realizar cambios operacionales direccionados hacia el incremento en la severidad de reacción, como lo son la disminución del flujo de carga combinada hasta los 20,7kBPD, la disminución de la temperatura de precaliente y el aumento de la temperatura de reacción. Estos cambios extremos en las variables operacionales son posibles gracias a la variación en el flujo de aire al regenerador que se incrementa hasta los 71,3kSCFM. El aumento de la severidad de la reacción, como método para incrementar la conversión de la carga en productos valiosos da como resultado, un incremento de la conversión de +12,9%wt, que se ve reflejado en el aumento de la Nafta (+6,9%wt) y de GLP (+4,6%).

La disminución en el flujo de carga al riser reduce el consumo de energía en el reactor debido a que se requiere vaporizar menor masa de carga. En el punto óptimo el flujo de catalizador al riser es igual al caso base, pero transporta menos energía del regenerador al reactor debido a la disminución de la

temperatura de la fase densa. En este escenario donde se presenta un mismo flujo de catalizador y una disminución del flujo de carga, se presenta un aumento en la relación C/O, permitiendo un mejor contacto entre los hidrocarburos y los sitios activos del catalizador, promoviendo el craqueo de los hidrocarburos. En contraposición a la disminución del flujo de carga, se presenta la disminución en la temperatura de precaliente y el aumento en la temperatura de reacción, que permiten mantener la circulación en su valor inicial al aumentar el requerimiento energético del reactor. El aumento en la conversión provoca mayor producción de coque catalítico por unidad de carga, reflejada en el incremento del rendimiento de coque que es enviado al regenerador para ser quemado, cambiando el balance de coque en el regenerador provocando un aumento en el flujo de aire que quema el coque adicional que ingresa, y disminuye la temperatura del regenerador.

**Tabla 14.** Iteraciones de la optimización multivariable utilizando el algoritmo desarrollado

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	7
Acumulación de puntos evaluados		11	12	13	14	15	16	30	44
Tiempo acumulado, s		16	17	19	20	22	23	44	64
Variables independientes									
Temp. de reacción	°F	976,5	981,5	986,5	991,5	995,0	995,0	995,0	995,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	67,7	68,5	69,3	70,1	70,9	71,7	71,3
Temp. Precaliente	°F	370,0	365,0	360,0	355,0	355,0	355,0	355,0	355,0
Flujo de VGO	kBPD	14,4	13,4	12,4	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0
Flujo de DMOH	kBPD	10,6	9,6	8,6	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0
Variables dependientes									
Temp. fase densa	°F	1337	1331	1320	1312	1311	1307	1301	1304
Temp. fase diluida	°F	1392	1384	1371	1362	1361	1356	1350	1353
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	18,8	18,3	18,4	18,8	19,1	19,5	19,3
Flujo de Combinada	kBPD	25,7	23,7	21,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7
Función objetivo									
Conversión	%wt	59,8	63,9	68,3	71,6	72,6	72,7	72,7	72,7
Rendimientos Reactor									
Gas Seco	%wt	4,3	4,5	4,7	5,0	5,1	5,1	5,1	5,1
GLP	%wt	10,9	12,2	13,8	15,1	15,5	15,5	15,5	15,5
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	41,1	43,4	45,0	45,5	45,6	45,6	45,6
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	18,8	16,8	15,2	14,6	14,6	14,6	14,6
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	17,3	14,9	13,2	12,8	12,8	12,8	12,7
Coque	%wt	5,9	6,1	6,3	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5

**Tabla 15.** Iteraciones de la optimización multivariable con SQP

Iteración		Punto Inicial	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
Acumulación de puntos evaluados		11	23	34	45	56	67	78	89	100	111	122	134	145	156	167	178	189	200
Tiempo acumulado, s		15	31	45	60	75	89	104	119	133	149	162	220	235	250	264	279	306	330
Variables independientes																			
Temp. de reacción	°F	976,5	976,5	977,1	977,7	979,1	980,4	981,1	981,5	983,5	993,8	995,0	995,0	995,0	995,0	995,0	995,0	995,0	995,0
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	66,9	67,5	68,3	70,0	71,0	71,0	71,0	71,0	71,0	71,0	70,9	70,9	70,6	69,5	69,3	69,9	71,0
Temp. Precaliente	°F	370,0	370,0	369,9	369,7	369,4	369,1	369,0	368,9	368,4	366,1	365,8	365,7	365,5	364,2	358,2	355,0	355,0	355,0
Flujo de VGO	kBPD	14,4	14,4	13,7	13,7	13,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0	12,0
Flujo de DMOH	kBPD	10,6	10,7	85,1	8,0	8,0	81,7	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0	8,0
Variables dependientes																			
Temp. fase densa	°F	1337	1338	1321	1315	1307	1299	1298	1299	1300	1307	1308	1309	1308	1310	1314	1315	1312	1306
Temp. fase diluida	°F	1392	1392	1375	1368	1358	1349	1348	1348	1350	1357	1358	1359	1359	1361	1365	1366	1363	1356
Circulación catalizador	Ton/min	19,3	19,4	18,2	18,1	18,2	18,1	18,1	18,1	18,2	18,8	18,9	18,8	18,8	18,8	18,6	18,6	18,8	19,2
Flujo de Combinada	kBPD	25,7	25,8	22,9	22,4	21,7	20,9	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7	20,7
Función objetivo																			
Conversión	%wt	59,8	59,7	64,1	65,3	66,7	68,1	68,6	68,7	69,2	71,9	72,2	72,2	72,2	72,3	72,4	72,5	72,6	72,7
Rendimientos Reactor																			
Gas Seco	%wt	4,3	4,3	4,4	4,5	4,5	4,6	4,6	4,6	4,7	5,0	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1
GLP	%wt	10,9	10,9	12,5	12,9	13,4	13,9	14,1	14,2	14,3	15,2	15,3	15,3	15,3	15,3	15,4	15,4	15,5	15,5
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	38,7	41,2	41,8	42,6	43,3	43,6	43,6	43,9	45,2	45,4	45,4	45,4	45,4	45,4	45,5	45,5	45,6
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,7	19,1	18,6	17,9	17,2	16,9	16,8	16,6	15,0	14,8	14,8	14,8	14,8	14,7	14,7	14,6	14,6
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	19,7	16,8	16,1	15,4	14,7	14,4	14,4	14,2	13,1	13,0	13,0	13,0	13,0	12,9	12,8	12,8	12,7
Coque	%wt	5,9	5,9	6,1	6,1	6,2	6,3	6,3	6,3	6,4	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5

**Tabla16.** Comparación Optimización multivariable en el modelo de URC

Variable	Unidad	Punto inicial	Óptimo SQP	Óptimo Algoritmo Desarrollado
Puntos evaluados del modelo			200	44
Tiempo de calculo	s		330	64
Flujo de VGO	kBPD	14,4	12,0	12,0
Flujo de DMOH	kBPD	10,6	8,0	8,0
Nafta en la base del riser	kBPD	0,7	0,7	0,7
Flujo Total	kBPD	25,7	20,7	20,7
Temp de reacción	°F	977	995	995
Temp de precaliente	°F	370	355	355
Temp. Fase Densa	°F	1337	1306	1304
Temp. Fase Diluida	°F	1392	1356	1353
<b>Gases combustión</b>				
O2	%mol	2,4	5,47	5,53
CO	%mol	0	0,02	0,01
CO2	%mol	16,4	13,7	13,6
Aire al Reg	kSCFM	66,8	71	71,3
Circulación Catalizador	Ton/min	19,3	19,2	19,2
<b>Rendimientos producto reactor</b>				
Gas Seco	%wt	4,2	5,1	5,1
GLP	%wt	10,9	15,5	15,5
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	45,6	45,6
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	14,6	14,6
APC + Slurry (>650°F)	%wt	19,6	12,7	12,7
Coque	%wt	5,9	6,5	6,5
Conversión	%wt	59,8	72,7	72,7

Fuente: Autor

### 6.3 OPTIMIZACIÓN ECONÓMICA VARIANDO EL ADITIVO PROMOTOR DE PROPILENO

El modelo de la URC que se considera en el estudio contempla los fenómenos de la ruptura de la nafta en la base del riser, y el efecto de la adición del aditivo de propileno sobre la selectividad de las reacciones. A continuación se considera el problema de optimizar el rendimiento económico de la URC variando el flujo de nafta en la base del riser y la adición de aditivo de propileno, la función objetivo del rendimiento económico está dada por la siguiente ecuación:

$$ME = \sum (\dot{F}_{Pdtos} \cdot P_{Pdtos}) - \sum (\dot{F}_{Cargas} \cdot P_{Cargas}) - \dot{m}_{cat} \cdot P_{Cat}$$

Dónde:

ME : Margen económico de la URC

$\dot{F}_{Pdtos}$ : Flujo volumétrico de productos

$\dot{F}_{Cargas}$ : Flujo volumétrico de las cargas

$P_{Pdtos}$ : Precio de los productos

$P_{Cargas}$ : Precio de las cargas

$P_{Cat}$ : Precio del aditivo de propileno

$\dot{m}_{cat}$ : Masa de aditivo agregado

Los precios considerados de productos, carga y aditivo se muestran en la Tabla 17. La adición del aditivo promotor de propileno convierte la nafta en GLP, dependiendo del escenario de precios que posean los productos, puede existir un valor de adición de aditivo óptimo, como el mostrado en la Tabla 18 donde la adición óptima de aditivo se ubica en 3,6%wt en el catalizador E-cat.

**Tabla 17.** Precios de cargas, aditivo y productos

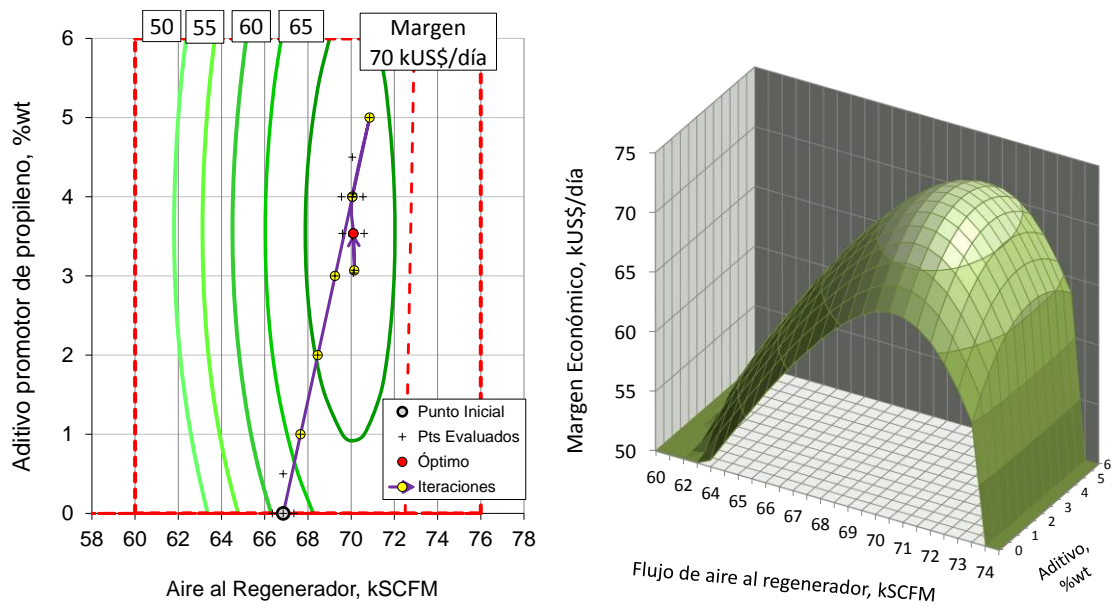
	unidad	Precio
<b>Productos</b>		
Gas Seco	US\$/BBL	30
GLP	US\$/BBL	70
Propileno	US\$/BBL	81
Nafta (C5-430°F)	US\$/BBL	65
ALC (430-650°F)	US\$/BBL	38
APC + Slurry (>650°F)	US\$/BBL	23
<b>Cargas</b>		
Gasóleo	US\$/BBL	58
DMOH	US\$/BBL	58
Nafta	US\$/BBL	55
<b>Catalizador</b>		
Aditivo	US\$/lb	70

**Tabla 18.** Optimización de la adición de aditivo de propileno.

Variable	Unidad	Punto inicial	Ótimo	Delta
Incremento Margen Económico	kUS\$/día	61,6	78,3	+17
Nafta en la base del riser	kBPD	0,7	1	+0,3
Aditivo de propileno	%wt	0	3,6	+3,6
Temp. Fase Densa	°F	1337	1327	-10
Temp. Fase Diluida	°F	1392	1381	-11
O <sub>2</sub>	%mol	2,4	2,3	-0,1
CO	%mol	0,04	0,04	0
CO <sub>2</sub>	%mol	16,4	16,4	0
Circulación Catalizador	Ton/min	19,3	20,1	+0,8
Rendimientos producto reactor				
Gas Seco	%wt	4,2	4,3	+0,1
Propileno	%wt	3,8	4,9	+1,1
GLP	%wt	10,9	14,1	+3,2
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	36,0	-2,7
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,7	+0,1
Slurry (>750°F)	%wt	19,6	19,0	-0,6
Coque	%wt	5,9	5,9	0
Conversión	%wt	59,8	60,3	+0,5

Un ejemplo de función objetivo con un óptimo que se encuentra dentro del espacio de búsqueda y no en los extremos operacionales, se presenta al considerar la maximización del rendimiento económico, en función del flujo de aire al regenerador y la adición de aditivo promotor de propileno (Figura 38). Aplicando el algoritmo desarrollado, se encuentra el punto máximo luego de 7 iteraciones, aumentando el margen económico en +11kUS\$/día.

**Figura 38.** Iteraciones al maximizar el margen económico en función del aditivo y el aire



**Tabla 19.** Maximización del Margen económico en función del aditivo y el aire

Variable	Unidad	Punto inicial	Óptimo	Delta
Incremento Margen Económico	kUS\$/día	62	73	+11
Aire al regenerador	kSCFM	66,9	70,1	+3,2
Aditivo de propileno	%wt	0	3,5	+3,5
Temp. Fase Densa	°F	1337	1319	-18
Temp. Fase Diluida	°F	1392	1373	-19
O2	%mol	2,4	3,2	+0,8
CO	%mol	0,04	0,03	-0,01
CO2	%mol	16,4	15,7	-0,7
Circulación Catalizador	Ton/min	19,3	20,3	+1
Rendimientos producto reactor				
Gas Seco	%wt	4,2	4,4	+0,2
Propileno	%wt	3,8	4,7	+0,9
GLP	%wt	10,9	13,7	+2,8
Nafta (C5-430°F)	%wt	38,7	36,1	-2,6
ALC (430-650°F)	%wt	20,6	20,5	-0,1
Slurry (>650°F)	%wt	19,6	19,3	-0,3
Coque	%wt	5,9	5,9	0
Conversión	%wt	59,8	60,2	+0,4

A diferencia de los ejemplos anteriormente expuestos, el efecto combinado del comportamiento del flujo de aire y el aditivo de propileno provocan la presencia del óptimo global dentro del espacio de búsqueda

## 7. CONCLUSIONES

Se desarrolló un nuevo modelo para la simulación de Unidades de Ruptura Catalítica en estado estable, que posee como componente novedoso simular el efecto del procesamiento de nafta en la base del riser, y la adición de aditivo de propileno en el catalizador, contemplando la interacción del sistema Reactor y Regenerador por medio de la solución iterativa del sistema de ecuaciones. El modelo resultante se caracteriza por describir un comportamiento no lineal en las variables dependientes, y la presencia de discontinuidades contenidas dentro de los límites operacionales de la URC.

Se desarrolló un algoritmo de optimización que es aplicado con éxito en una función objetivo definida a partir del nuevo modelo de la URC. El algoritmo de optimización desarrollado es comparado con los métodos de optimización de Programación Secuencial Cuadrática y Algoritmos Genéticos, como resultado se demostraron las siguientes ventajas:

- El algoritmo de optimización desarrollado logra encontrar el punto óptimo en escenarios donde se presentan discontinuidades en la función objetivo y en las restricciones, superando a otros algoritmos que no convergen hacia el óptimo.
- El algoritmo de optimización desarrollado reduce el tiempo de cálculo entre un 26 y 86%, el porcentaje de reducción depende del planteamiento del escenario de optimización. Esta disminución en el tiempo permite efectuar la optimización sobre el modelo iterativo original de la URC, y evita realizar simplificaciones que reducen su capacidad de simulación.

La aplicación del algoritmo de optimización en el modelo de la URC industrial considerado como caso de estudio, permite concluir que el flujo de aire al

regenerador posee un valor óptimo que maximiza la conversión de la carga, comportamiento que se presenta en los escenarios donde se desea aumentar la severidad de la reacción.

## BIBLIOGRAFIA

Ancheyta, J., López, F., y Aguilar, E. (1999). 5-Lump kinetic model for gas oil catalytic cracking. *Appl. Cat. A: Gen.*, 177, 227-235.

Arthur, JR. (1951) Reactions between carbon and oxygen, *Trans. Faraday Soc.* 47:164-178

Blanding, F.H. (1953) Reaction rates in catalytic cracking of petroleum. *Ind. Eng. Chem.* 45 (6): 1186-1197

Bollas, G.M., Lappas A.A., Latridis D.K. & Vasalos, I.A., (2007). Five-lump kinetic model with selective catalyst deactivation for the prediction of the product selectivity in the fluid catalytic cracking Process. *Catal. Today* 127: 31-43.

Chen, C., Yang, B., Yuan, J. Wang, Z. & Wnag, Longyan, (2007). Establishment and solution of eight-lump kinetic model for FCC gasoline secondary reaction using particle swarm optimization. *Fuel*, 2007 : 2325-2332

Cuadros, J. F., Melo, D. C., Rubens, M. F, & Wolf, M. R. (2013). Fluid catalytic cracking optimisation using factorial design and genetic algorithm techniques. *Can. J. Chem. Eng.*, 91: 279-290.

De Lasa, H.I., Errazu A., Barreiro, E. & Solioz, S., (1981) Analysis of fluidized bed catalytic cracking regenerator models in an industrial scale unit. *Can. J. Chem. Eng.* 59 (4): 549-553

De Lasa, H.I. & Grace, J.R. (1979) The influence of the freeboard region in a fluidized bed catalytic cracking regenerator. *AIChE J.* 25 (6): 984-991

Degnan, T.F., Chitnis, G.K. & Schipper, P.H. (2000) History of ZSM-5 fluid catalytic cracking additive development at Mobil.

Dupain, X., Gamas, E.D., Madon R., Kelkar, C.P., Makkee, M. & Moulijn. (2003). Aromatic gas oil cracking under realistic FCC conditions in a microriser reactor, FUEL. 13: 1559-1569.

Errazu, A.F., De Lasa, H.I. & Sarti, F. (1979) A fluidized bed catalytic cracking regenerator model grid effect, Can. J. Chem. Eng. 57(2) 191-197

Fernandes, J.L., Domingues, L.H., Pinheiro, C.I.C., Oliveira, N.M.C. & Ribeiro, F.R., (2012) Influence of different catalyst deactivation models in a validated simulator of an industrial UOP FCC unit with high-efficiency regenerator. Fuel, 9: 97-108

Gomez, M. E., Vargas, C. & Lizcano, J. (2009). Petrochemical promoters in catalytic cracking. CT&F. 3:143-158

Guerra, Omar y Montagut, Sandra. (2005). Estimación de los parámetros cinéticos de un modelo de 5-seudocomponentes para el ruptura catalítico fluidizado (FCC) con datos de planta piloto. Tesis. Escuela de Ingeniería Química. Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga, Colombia.

Gupta, R.K. (2006) Modeling and simulation of a fluid catalytic cracking unit, Ph. D. Thesis Department of chemical engineering, Thapar institute of engineering and technology, Patiala, India

Gupta, R.K. & Kumar, V. (2008) Fluid catalytic cracking riser modeling in heat transfer mode. Chem. Prod. Proc. Model. 3 (1): 1-20

Gupta, R.K., Kumar, V.&Srivastava, V.K.(2007) A new generic approach for the modeling of fluid catalytic cracking (FCC) riser reactor. Chem. Eng. Sci. 62: 4520-4528

Han, I.-S., Riggs, JB.&Chung, C.-B., (2004) Modeling and optimization of a fluidized catalytic cracking process under full and partial combustion modes. Chem. Eng. Pross. 43: 1063-1084

Krishna, A. S. &Parkin, E. S. (1985).Modeling the regenerator in commercial fluid catalytic cracking units.Chem.Eng.Prog. 4:57-62

Lasdon, L.S., Fox, R.L. & Ratner, M.W. (1974) Nonlinear optimization using the generalized reduced gradient method. R.A.I.R.O. 3: 73-104

Lee, E., GrovesJr, F. R. (1985) Mathematical model of the fluidized bed catalytic cracking plant. Trans. Soc. Comput. Simul., 2 (3), 219-236

Liang, S. L., Yu-Wen, C., Tsung-N.H. & Pan, W.-Y., Four-lump kinetic model for fluid catalytic cracking process. Can. J. Chem. Eng., 1989, 67 (4), 615-619

Liao, Bo &Luus, Rein, Comparison of the Luus-Jaakola optimization procedure and the genetic algorithm.Engineering Optimization. 2005, 37 (4), 381-398

Liao Bo, Time optimal control of fluid catalytic cracking unit. Ph.D. thesis University of Toronto. 2008

Lid, T. & Strand, S. (1997) Real-time optimization of a car cracker unit.Comp.& Chem. Eng. 21: S887-S892

McFarlane, R. C., Reineman, R. C., Bartee, J. F. &Georgakis, C. (1993), Dynamic simulator for a Model IV fluid catalytic cracking unit. Computers Chem. Eng., 17, 275-300

McGreavy, C. & Isles-Smith, P. C., Modeling of a fluid catalytic cracker. *Trans. Inst. Meas. Control*, 1986, 8 (3), 130-136

Montagut, S. M. (2009). Desarrollo y evaluación de una propuesta metodológica para escalar datos del reactor de planta piloto FCC a planta industrial. M.Sc. Tesis Universidad Industrial de Santander.

Montgomery, J.A. (1993). The grace davison guide to fluid catalytic cracking: Part one. W.R. Grace & Co.-Conn.

Moro, L. F. L. & Odloak, D. J. (1995) Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters. *J. Process Control*, 5: 29-39.

Oliveira, O.L. & Biscaia E. (1989). Catalytic cracking kinetic models. Parameter estimation and model evaluation. *Ind. End. Chem. Res.* 3: 264-271.

Pinheiro, C. I., Fernandes, J. L., Domingues, L., Chambel, A., Graca, I., Oliveira, N., Cerqueira, H. & Ribeiro, F. (2012) Fluid catalytic cracking (FCC) process modeling, simulation, and control. *Ind. Eng. Chem. Res.* 51:1-29.

Rhemann, H. & Schwarz, G. (1989) On-line FCCU advanced control and optimization. *Hydrocarbon Processing*, 6: 64-71

Robert C. Ellis, Xuan li & James B. R., (1998) Modeling and optimization of a Model IV fluidized catalytic cracking unit. *AIChE J*, 9: 2068-2079

Sundaralingam R. (2001) Optimization of a model IV fluidized cracking unit, University of Toronto.

U.S. Energy Information Administration (2013). Refinery Catalytic Cracking, Fresh Feed Downstream Capacity

[http://www.eia.gov/dnav/pet/hist/LeafHandler.ashx?n=PET&s=8\\_NA\\_8CCF\\_NUS\\_5&f=A](http://www.eia.gov/dnav/pet/hist/LeafHandler.ashx?n=PET&s=8_NA_8CCF_NUS_5&f=A)

Voorhies, A Jr. (1945) Carbon formation in catalytic cracking, *Ind. Eng. Chem.* 37 (4):318-322

Wang, L., Yang, B. & Wang, Z. (2005) Lumps and kinetics for the secondary reactions in catalytically cracked gasoline. *Chem. Eng. J.* 109: 1-9

Weekman, V.W. Jr. (1968) A model of catalytic cracking conversion in fixed, moving, and fluid-bed reactors, *Ing.Eng.Process Des. Dev.* 7 (1): 90-95

Weekman, V.W.Jr.&Nace, D.M. (1970). Kinetics of catalytic cracking selectivity in fixed, moving, and fluid bed reactor. *AIChE J.* 16(3):397-404.

Zhang, Y., Lu, C. & Li, T. (2011) A practical countercurrent fluid catalytic cracking regenerator model for in situ operation optimization. *AIChE J.* 57:

Zhao, X. &Roberie, T.G. (1999) ZSM-5 additive in fluid catalytic cracking. 1. Effect of additive level and temperature on light olefins and gasoline olefins, *Ind. Eng. Chem. Res.* 38: 3847-3853

Zong, G., NING, H., JIANG, H., & OUYANG, F. (2010).The lumping kinetic model for the heavy oil catalytic cracking MIP process. *Petr. Sci. Tech.* 28:1778-1887.

Rao, S. S. (2009) *Engineering Optimization: Theory and Practice.* John Wiley&Sons.NewJersey.E.U.

## ANEXO A. HERRAMIENTA COMPUTACIONAL

El algoritmo propuesto y presentado en el capítulo 5, se programó como un complemento a la herramienta computacional que actualmente se utiliza en apoyo al seguimiento operacional de la planta. La herramienta opera en un ambiente de Excel que hace uso de las hojas de cálculo, y del lenguaje Visual Basic de Excel. Como resultado se desarrollo una herramienta computacional en un ambiente amigable, y una interfaz visual que permite al usuario manipular las diferentes opciones que brinda el algoritmo de optimización propuesto.

En la Figura A-1 se muestra la configuración de la hoja de cálculo donde se almacena toda la información operacional de la planta, en donde las filas contienen valores que describen propiedades y condiciones operacionales. En este caso la columna “G” contiene la información relacionada al “Caso Base”, que posee un Margen Económico de 47,9KUS\$/día, y un flujo de Gasóleo de 14,4KBPD. Las columnas siguientes a la “G” permiten ingresar información de otros casos adicionales, así como el resultado de simulaciones y optimizaciones.

**Figura A1.** Configuración general de la hoja de cálculo en la herramienta computacional.

Columnas que contienen la caracterización de un estado operacional de la planta industrial

	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	SIMULADOR y OPTIMIZADOR	MENU			Caso N°:	1					
2					Planta:	UOPI					
3					N° Monitoreo Caso Base:	70					
4					Fecha Caso Base:						
5					Calcular: 1 - Columnas						
6					Nombre Caso Base:						
7											
8					Descripción simulación	Caso Base					
9					Descripción						
10					Desbalance de Energía	0%					
11					Margén Económico	US\$/KBPD	1,9				
12					Margén Económico	KUS\$/día	47,9				
13					Producto Reactor	Klb/hr					
14											
15											
16											
17											
18											
19											
20											
21											
22											
23											
24											
25											
26											
27											
28											
29											
30											
31											
32											
33											
34											
35											
36											
37											
38											
39											
40											
41											
42											
43											
44											
45											
46											
47											
48											
49											
50											
51											
52											
53											
54											
55											
56											
57											
58											
59											
60											
61											
62											
63											
64											
65											
66											
67											
68											
69											
70											
71											
72											
73											
74											
75											
76											
77											
78											
79											
80											
81											
82											
83											
84											
85											
86											
87											
88											
89											
90											
91											
92											
93											
94											
95											
96											
97											
98											
99											
100											
101											
102											
103											
104											
105											
106											
107											
108											
109											
110											
111											
112											

La configuración de la hoja de cálculo permite mostrar en cada columna toda la información relacionada con un estado operacional de la planta en un escenario determinado, pero debido a la gran cantidad de información, el entorno no es amigable para realizar el proceso de optimización. Se creó un entorno visual donde se permite configurar los diferentes escenarios de optimización según las necesidades del usuario. Para ingresar al entorno se realiza el siguiente procedimiento mostrado en la Figura A-2.

**Figura A-2.** Procedimiento para ingresar al entorno visual del optimizador.

Dar click en el botón "menú"

Ingresar el número del "Caso Base" y dar click en el botón "Simulador y Optimizador Visual"

**Menú del Simulador y Optimizador**

Simulación

Simulador y Optimizador Visual 1

Opciones Balance BASE

Nueva Simulación 28

**UOPI**

Simulación | Cargas | Optimización

Cargar Caso Nuevo

Nº Simulación : 1

Nombre de la Planta: UOPI

Caso Base Nº : 70

Caso Base Fecha :

Descripción: Caso Base

1 UOPI 70

Seleccionar la función objetivo: [ ] Base Actual Delta [ ] [ ] [ ]

SELECCIONAR LAS VARIABLES INDEPENDIENTES

	Base	Actual	Delta	Límites	
				Inferior	Superior
<input type="checkbox"/> Temp. Reacción	976.52	976.52	0	970	995
<input type="checkbox"/> Temp. Precaliente	370	370	0	355	420
<input type="checkbox"/> Aire al Regenerador	66856	66856	0	60000	71000
<input type="checkbox"/> Flujo de WGO	14423	14423	0	13000	17000
<input type="checkbox"/> Flujo de DMOH	10600	10600	0	8000	12000

SELECCIONAR LAS RESTRICCIONES

	Base	Actual	Delta	Límites	
				Inferior	Superior
<input type="checkbox"/> Temp. Densa del Reg	1337	1337	0	1280	1360
<input type="checkbox"/> Temp. Diluida del Reg	1392	1392	0	1295	1400
<input type="checkbox"/> Circulación de Catalizador	19.3	19.3	0	18	30
<input type="checkbox"/> Flujo Total al Riser	25714	25714	0	17000	29000

1. Dar click en el botón "Menú" ubicado en la hoja de simulación. Se desplegará la ventana "Menú del Simulador y Optimizador".

2. Ingresar en la celda ubicada junto al botón “Simulador y Optimizador Visual”, el número correspondiente al caso base con el que se desea iniciar la optimización. Este número se muestra en la fila “1” de la hoja de cálculo.
3. Dar click en el botón “Simulador y Optimizador Visual”. Se desplegará la ventana que contiene las opciones para iniciar el proceso de optimización.

El entorno visual del optimizador (Figura A-3) permite configurar los escenarios de estudio seleccionando las siguientes opciones:

**Figura A-3.** Configuración del entorno visual del optimizador.

**Selección del caso base**

**Selección de la función objetivo**

Seleccionar la función objetivo: Rendimiento de Nafta, Rendimiento Económico, Rendimiento de ALC, Rendimiento de ALC

	Base	Actual	Delta	Límites	
				Inferior	Superior
<input type="checkbox"/> Temp. Reacción	976.52	976.52	0	970	995
<input type="checkbox"/> Temp. Precalentante	370	370	0	355	420
<input type="checkbox"/> Aire al Regenerador	66856	66856	0	60000	71000
<input type="checkbox"/> Flujo de VGO	14423	14423	0	13000	17000
<input type="checkbox"/> Flujo de DMOH	10600	10600	0	8000	12000

	Base	Actual	Delta	Límites	
				Inferior	Superior
<input type="checkbox"/> Temp. Densa del Reg	1337	1337	0	1280	1360
<input type="checkbox"/> Temp. Diluida del Reg	1392	1392	0	1295	1400
<input type="checkbox"/> Circulación de Catalizador	19.3	19.3	0	18	30
<input type="checkbox"/> Flujo Total al Riser	25714	25714	0	17000	29000

**Selección variables independientes**

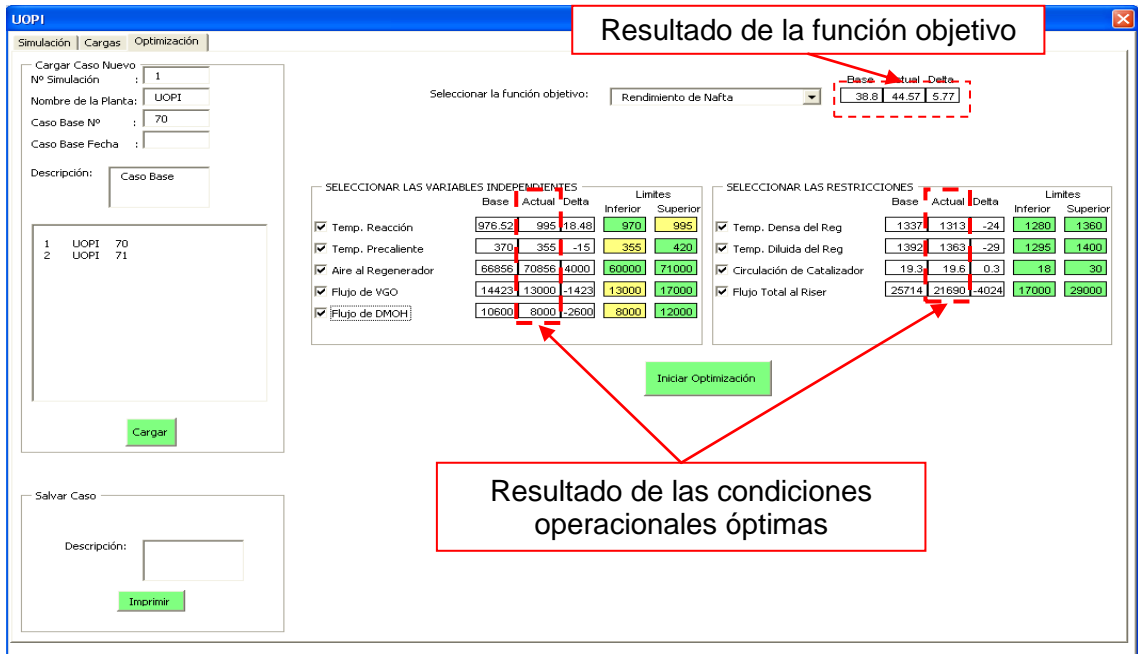
**Selección de Restricciones Operacionales**

**Opciones para guardar la totalidad de la información del resultado de la optimización**

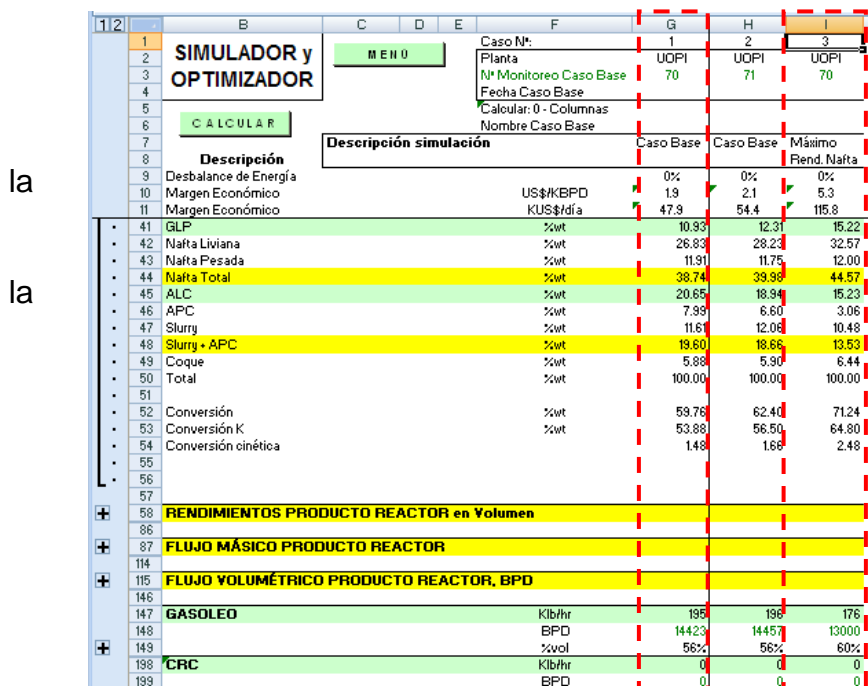
- Selección del caso base: el caso base se puede cambiar, seleccionándolo dentro de la lista de los casos presentes en la hoja de cálculo.
- Selección de la función objetivo: Permite definir la función objetivo que se desea optimizar, en la figura se muestran tres opciones: Maximizar rendimiento económico, Maximizar rendimiento de nafta ó maximizar el rendimiento de ALC.
- Selección de variables independientes: permite seleccionar de una lista las variables independientes formaran parte del problema de optimización. Junto a cada variable se indica el rango mínimo y máximo dentro del cual se permite variar su valor, definiendo el espacio de búsqueda del óptimo.
- Selección de restricciones operacionales: permite seleccionar de una lista las variables dependientes, que se consideran poseen restricciones operacionales. Junto a cada variable se indica el rango mínimo y máximo dentro del cual se permite variar su valor.
- Salvar Caso: permite guardar el resultado de la optimización, la información es impresa en una columna de la hoja de cálculo, permitiendo analizar la totalidad de la información.

Luego de realizar la configuración del escenario, se da click en el botón “Iniciar Optimización”. En la Figura A-4 se muestra el resultado de la optimización para un escenario seleccionando las 5 variables independientes, y las 4 dependientes habilitadas en el modulo visual, el cual corresponde al ejemplo mostrado en el capítulo 6.3

**Figura A-4.** Maximización del rendimiento de Nafta visto en la interfaz visual en un escenario multivariable.



Luego de concluir con el proceso de optimización, se utiliza la opción de guardar, imprimiendo la totalidad de la información en la última columna, permitiendo comparar con mayor detalle los valores del caso base con el resultado de la optimización.



**Figura A-5.** Resultado de optimización mostrada en hoja de cálculo.

El resultado de la optimización se compara con el caso base