MÁSTER EN INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA DE PROCESOS Y SISTEMAS

CURSO 2013-2014



Universidad de Valladolid

Modelado de un sistema de Fluid Catalytic Cracking (FCC)

Autora: Jéssica González de la Puente

Tutor: Cesar de Prada

NOMENCLATURA

Letras griegas

α="Alfa para calcular los coeficientes de la ecuación de Antoine" α1 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" αc "Coeficiente de desactivación del catalizador" αc_0 "Factor preexponencial de αc " *αce=* "Exponente para representar *αc*" β1 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" pbCY1 "densidad de la masa de catalizador o burbuja" ρ_c "Densidad del catalizador (Kg/m³)" ρ_{gFS} "Densidad del gas en la sección de vaporización (Kg/m³)" ρgRS "Densidad del gas en el riser (Kg/m³)" μ_{gRS} "viscosidad del gas en el riser (Kg/ms)" µgRT "viscosidad del gas en la sección disengaging" \mathcal{E}_{cCL1} "Fracción de volumen del catalizador en la línea de transporte del catalizador en la línea de transporte del catalizador regenerado" Ecrs "Fracción de volúmen del catalizador en el riser" ϵ_{cRS0} EgRS "Fracción de volúmen del gas en el riser" n_{CY1} "Eficiencia de colección del ciclón" φ_c "Función desactivación del catalizador" ωcCY1 "holdup del catalizador en el ciclón" ωcCY1 "holdup del catalizador en los ciclones" ωcRT "Holdup del catalizador en la sección disengaging (Kg)" Ω_{RS} "Área transversal del riser (m²)"

<u>Notación</u>

ACY1d "área transversal de cada ciclón el el dip-leg (m²)" ACY1i "Area transversal del ciclón a la entrada (m²)" Alg "Coeficiente de la ecuación de Antoine" ApRSe "Área efectiva de TC (m²)" ARTe "Area efectiva de TC entre el reactor y los alrededores"

Blg "Coeficiente de la ecuación de Antoine" \bar{C}_{pds} "Capacidad calorifica del vapor de dispersión (KJ/KgK)" \bar{C}_{pwv} "Capacidad calorifica del vapor de agua (KJ/KgK)" $\overline{C_{pc}}$ "Capacidad calorifica media del catalizador (KJ/Kg)" $ar{C}_{
m phg}$ "Capacidad calorífica de los gases de hidrocarburo (KJ/KgK)" \bar{C}_{plg} "Capacidad calorífica de la alimentación (KJ/KgK)" C_{ckCL1} "coke residual del regenerador (Kg coke/Kg catalizador)" C_{ckRS}"Coke en el catalizador (Kg coke/Kg catalizador)" CckRSsal "Coke en el catalizador a la salida del riser (Kg coke/Kg catalizador)" C_{ckRT} "Coke en el catalizador en la sección disengaging" C_{ckST} "coke en el catalizador en la seccion de stripping" CckST0 "Coke inicial en el catalizador en la sección de stripping " CdRS "COEFICIENTE DE ARRASTRE" C_{fRS} "Coeficiente de fricción catalizador-gas" Clg "Coeficiente de la ecuación de Antoine" C_{pc} "Capacidad calorífica del catalizador (KJ/KgK)" CpgRS"Capacidad calorífica del gas en el riser" C_{pgRT} "Capacidad calorífica del gas en la sección de disengaging" dc "Diámetro medio del catalizador (m)" dcm "minimo tamaño de partícula que debe ser separado" D_{RS} "Diámetro del riser (m)" Ec "Energía cinética de desactivación (KJ/Kgmol)" Eirs "Energía de activación de las reacciones de los lumps (KJ/Kgmol)" Ess "Exponente en la función de stripping (s/Kg)" F_{cCL1} "Flujo de catalizador regenerado en la línea de transporte (Kg/s)" F_{CMF} "Caudal de catalizador del fraccionador principal (Kg/s)" FcRS "Flujo másico del catalizador en el riser (Kg/s)" f_{cRS} "Fracción molar o coeficiente de fricción" F_{cSV2} "Caudal de catalizador en la válvula de distribución de la línea de transporte de catalizador gastado (Kg/s)" Fds "Flujo másico del vapor de dispersión (Kg/s)" F_{gRS} "Flujo másico del gas en el riser (Kg/s)" f_{gRS} "Fracción molar o coeficiente de fricción del gas en el riser"

 F_{gRT} "Caudal de gas en la sección de disengaging (Kg/s)"

FhgRT "Caudal másico de HC en el disengaging"

Flg "Flujo masico de alimentación (Kg/s)"

Fss "Caudal másico del vapor de stripping que entra en sección disengaging (Kg/s)"

g "aceleración de la gravedad (m/s²)"

Gc "Módulo de estrés del catalizador"

HcRTent "Entalpia del catalizador a la entrada del disengaging"

HcRTsal "Entalpia del catalizador a la salida del disengaging"

h_{CY1i} "altura de entrada del ciclón (m)"

Hds "Entalpia especifica del vapor de dispersión"

HhgRTent "Entalpia de los gases de HC a la entrada del disengaging"

HhgRTsal "Entalpia de los gases de HC a la salida del disengaging"

H_{iRS} "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

h_{pRS} "Coeficiente de TC entre el catalizador y las gotas del gas"

 h_{RT} "altura de la sección disengaging (m)"

Hss "Entalpía especifica del vapor de stripping"

h_{ST} "altura de la sección stripping (m)"

H_{stripST} "Calor de stripping (KJ/Kg)"

 H_{vlg} "Calor de vaporización del líquido de la alimentación en la sección de vaporizacion (KJ/Kg)"

HwvRTsal "Entalpia del vapor de agua a la salida del disengaging"

Kf "Factor de caracterizacion de Watson ($K^{1/3}$)"

Kg "conductividad térmica de los hc"

 k_{i0RS} "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s⁻¹)"

 k_{iRS} "coeficiente de velocidad de reacción de los lumps (1/s)"

K_{SS0}"Factor de frecuencia en la función de stripping (Kg coke/Kg cat)"

KvCY1 "Factor de clasificación de flujo del ciclón (Kg/sm^{2.5})"

 K_{vMF} "Factor de clasificación de flujo de la válvula del fraccionador principal (Kg/sKPa^{0.5})"

Mwg "Peso molecular del gas"

N_{CY1} "Numero de ciclones en el reactor"

N_{tCY1} "Número de giros de 360º"

PFS "Presión en la sección de vaporización (KPa)"

Pg "Presión de vapor para el cálculo de los coeficientes de la ecuación de Antoine"

PMF "presión en el fraccionador principal (KPa)"

Ppc "Presión pseudo-critica"

P_{pr} "Presión pseudo-reducida"

P_{RS}"Presión en el riser"

P_{RS0} "Presión inicial en el riser (KPa)"

P_{RS}^{hRS} "Presión a la salida del riser (KPa)"

P_{RT} "Presión en la sección de disengaging-stripping (KPa)"

PRTb "Presión a la salida del disengaging (KPa)"

QlossRT "Tasa de pérdida de calor a los alrededores"

QreactRS "Calor de reacción en el riser"

R "Constante de los gases ideales (KPam³/KgmolK)"

R_{AN} "Relación aromáticos a naftenos en la alimentación"

Rec "Reynolds catalizador"

Reg "Reynolds del gas"

R_{iRS} "Coeficiente de velocidad"

Sc "Esfericidad media de las partículas de catalizador"

Sg "Gravedad específica"

 T_{cCL1} "Temperatura del catalizador en la linea de transporte del catalizador regenerado al reactor (K)"

T_{cFS} "Temperatura del catallizador en la sección de vaporización (K)"

T_{cRS} "Temperatura del catalizador en el riser (K)"

TcRSsal "Temperatura del catalizador a la salida del riser (K)"

T_{ds} "Temperatura del vapor de dispersión (K)"

Te "Temperatura ambiente (K)"

TgFS "Temperatura del gas en la sección de vaporización (K)"

T_{gRS}"Temperatura del gas en el riser (K)"

TgRSsal "Temperatura del gas a la salida del riser (K)"

Tlg "Temperatura de la alimentación (K)"

TMABP " Temperatura de ebullición media molal (K)"

TMeABP "Temperatura media de ebullición (K)"

Tpc "temperature pseudo-critica"

T_{pr} "Temperatura pseudo-reducida"

- T_{ref} "Temperatura de referencia (K)"
- T_{RT} "Temperatura en el disenganging (K)"

Tss "Temperatura del vapor de stripping que entra en la sección disengaging (K)"

Tv "Temperatura de ebullición (K)"

URT "Coeficiente de TC en la sección de disengaging (KJ/m²sK)"

vcCY1 "velocidad interticial del catalizador en los ciclones"

vcFS "velocidad del catalizador en la sección de vaporización (m/s)"

vcRS"velocidad superficial del catalizador en el riser"

vgFS "velocidad del gas en la sección de vaporización (m/s)"

vgRS "VElocidad superficial del gas (m/s)"

VgRT "Volúmen de gas en el disengaging (m3)"

VRT "Volúmen del disengaging (m²)"

Ycc "Fracción másica de carbono conradson en la alimentación (%wt)"

yckRSsal "Fracción másica de coke a la salida del riser"

Y_{convRT} "Conversión de gasoil en el disengaging"

yglRSsal "Fracción másica de gl en la salida del riser"

ygoFS "Fracción en peso del gasoleo en la sección de vaporización"

ygoRSsal "Fracción másica de go en la salida del riser"

ygsRSsal "Fracción másica de gs en la salida del riser"

yigRT "Holdup del gas en la sección disengaging (Kg)"

yiRS "Fracción másica de los lumps en el riser"

ywvRT "Fracción másica del vapor de agua en el disengaging"

 Z_{gFS} "Factor de compresibilidad del gas en la seccionde vaporización"

ZgRS "Factor de compresibilidad del gas"

ZgRT "Factor de compresibilidad"



Índice

MÁSTER EN INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA DE PROCESOS Y SISTEMAS	1
NOMENCLATURA	4
1 INTRODUCCIÓN	2
1.1 Estado del arte	4
1.2 Objetivos de la memoria	8
1.1 Estructura	8
2 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO Y MODELO.	8
2.1 Descripción del proceso FCC	9
2.2 Modelado matemático	11
2.2.1Sección de vaporización	11
2.2.2Riser	12
2.2.3 Sección de disengaging-stripping	16
2.2.4 Ciclones del reactor	19
2.2.5 Correlaciones de propiedades físicas y parámetros de transporte[10]	19
3 SIMULACIÓN Y RESULTADOS	23
3.1 Implementación del modelo en Ecosimpro	24
3.1.1 Modelos de componentes	24
3.2.2 Modelos de sistemas	24
3.2.3 Definición de una partición	24
3.1.4 Simulación de un experimento	25
3.2 MODELO EN ECOSIMPRO DEL RISER	25
3.3Simulación y Experimentos	39
4 CONCLUSIONES	43
5 BIBLIOGRAFÍA	44



1.- INTRODUCCIÓN

El refino del petróleo comienza con la destilación, o fraccionamiento, de los crudos en grupos de hidrocarburos separados. Los productos resultantes están directamente relacionados con las características del petróleo crudo que se procesa. La mayoría de estos productos de la destilación se convierten a su vez en productos más útiles cambiando sus estructuras físicas y moleculares mediante craqueo, reforma y otros procesos de conversión. A continuación, estos productos se someten a diversos procesos de tratamiento y separación (extracción, hidrotratamiento y desmercaptanización), para obtener productos terminados. Mientras que las refinerías más sencillas se limitan generalmente a la destilación atmosférica y al vacío, en las refinerías integradas se hace fraccionamiento, conversión, tratamiento y mezda con lubricante, combustibles pesados y fabricación de asfalto, y, en ocasiones, procesado petroquímico[1].

Los procesos de refino en general son:

- 1. **Separación por destilación**. Separación mediante calor, de los diversos componentes del crudo.
- Conversión. Transformación de los productos intermedios de cara a adecuar la producción a la demanda existente y/o mejorar sus propiedades.
- 3. **Purificación**. Eliminación o transformación de los compuestos (agua, sal, azufre...).
- 4. **Mezclado o Blending**. Mezclado de productos intermedios de cara a obtener los productos finales especificados.

La demanda de productos derivados del petróleo está fundamentalmente centrada en gasolinas, queroseno y gasóleo que componen la fracción del crudo con intervalos de ebullición <360 °C. En conjunto, estos productos representan más del 70% de la demanda total de derivados petrolíferos. Este porcentaje es, en general, muy superior al que se puede obtener directamente por destilación del crudo.

La fracción que se destila por encima de 360 ºC, se utiliza como alimentación a procesos de conversión cuyo **objetivo** es la transformación de fracciones hidrocarbonadas de peso molecular elevado en otras de menor peso molecular y características adecuadas para su utilización en la formulación de gasolinas y gasóleos.



Las unidades de conversión forman el núcleo central de las operaciones de refinamiento modernas debido a que [2]:

- Permiten que las refinerías alcancen altos rendimientos de transporte de combustibles y otros productos livianos valiosos.
- Brindan flexibilidad operativa para mantener la elaboración de productos livianos conforme a las fluctuaciones normales en la calidad del petróleo crudo.
- Permiten el uso económico de los crudos sulfurosos pesados.

Los procesos de conversión de mayor interés son el *craqueo catalítico fluidizado* (FCC), el *hidrocraqueo* y la *coquización*.

El proceso de conversión catalítica por excelencia es el **craqueo catalítico** (FCC). La alimentación al proceso consiste fundamentalmente de fracciones con intervalo de destilación 360-550 ºC.

En la Figura 1 se muestra un esquema de una refinería de conversión, donde está integrado el FCC, el objeto de estudio de esta investigación.



Figura 1. Esquema de una refinería.

La unidad de FCC es un proceso de conversión que ante la presencia de catalizadores y temperaturas moderadas transforma moléculas de elevado peso molecular en hidrocarburos más ligeros con mayor valor añadido.



El aumento de la demanda de productos de refinería combinado con la disminución de la calidad del crudo y la mayor restricción de las especificaciones de los productos debido a las restricciones ambientales está obligando a las refinerías a realizar inversiones significativas. De hecho, durante las pasadas décadas, se han construido nuevas unidades de hidroprocesos, junto con el *revamping* de viejas refinerías para satisfacer la demanda. En este contexto, el uso de avanzadas herramientas de ingeniería de procesos ha llegado a ser esencial para las refinerías, no solo para el diseño sino también en tareas de control de procesos, optimización, *scheduling* y planificación. Además de aplicación a unidades de proceso específicas, estas técnicas también se están empleando para toda la cadena de suministro de la refinería [3].

Debido a la importancia de la unidad de FCC en el refino, se ha hecho un importante esfuerzo en el modelado de esta unidad para una mejor comprensión y una mayor productividad. En últimos cincuenta años, el modelado matemático de la unidad de FCC ha madurado en muchos aspectos, pero el modelado sigue evolucionando para mejorar la proximidad de los modelos de predicciones con el proceso real cuyo hardware es siempre cambiante para satisfacer las necesidades del refinado de petróleo. La complejidad del proceso de FCC debida a que el mecanismo de reacción es desconocido, a la hidrodinámica compleja y a la fuerte interacción entre reactor y regenerador, ha hecho casi imposible desarrollar un modelo general para el proceso integrado. Por este motivo, los investigadores de este campo han trabajado en diferentes partes del proceso por separado con fines de modelado (Gupta et al., 2005). Sin embargo, se ha prestado especial atención al modelado del riser (reactor) que es la parte más importante de la unidad de FCC [4].

1.1.- Estado del arte

El modelado del riser de una unidad FCC es bastante complejo debido a la presencia de tres fases (sólido, líquido y vapor) en el reactor, la implicación de variables físicas y químicas, y su fuerte interacción con el regenerador. No obstante, en diferentes investigaciones se han hecho considerables esfuerzos en conocer todos los aspectos mencionados para el modelado del riser.

Cinética del Riser

Describir el mecanismo cinético para el craqueo de fracciones de petróleo ha sido, y sigue siendo, un desafío para los investigadores en el campo de la modelización del craqueo catalítico fluidizado. La presencia de miles de componentes desconocidos en la alimentación al



riser y las reacciones en paralelo y en serie de estos componentes hace que el modelado de la cinética sea difícil.

En las reacciones cinéticas de desintegración catalítica resulta impráctico caracterizar al sistema reactivo en cada uno de sus componentes puros, ya que está constituido por un gran número de especies químicas y la caracterización de cada una de estas especies requiere de análisis de laboratorio muy costosos, como la espectrometría de masa, y que difícilmente están disponibles en una planta industrial. Debido a lo anterior, en la desintegración catalítica de gasóleos es útil expresar a los modelos cinéticos en términos de *lumps o pseudocomponentes en lugar de especies químicas puras*. En los primeros modelos basados en el *lumping*, los *lumps* eran definidos como un agrupamiento de componentes con características afines. Sin embargo, algunos *lumps* podían contener componentes de naturaleza diferente, por ejemplo, el *lump* de gases más coque (Blanding 1953, Weekman 1968, 1969; y Nace *et al.* 1971) [5].

Blanding (1953) fue quien propuso el primer modelo cinético para describir la desintegración catalítica del gasóleo. Su modelo consistió en dos *lumps*, el reactivo (gasóleo) y el producto (gasolina, gases y coque). Posteriormente, varios modelos cinéticos se han propuesto para describir las reacciones de desintegración catalítica en el proceso FCC.

Weekman y Nace (1970) desarrolló un esquema cinético simple, basado en la teoría de Wei y Prater (1963), para el modelado cinético de las reacciones de craqueo que se producen en el riser. Este trabajo puede ser considerado como pionero en el desarrollo del mecanismo cinético simple para propósitos de modelado de la FCC. Los autores dividen la alimentación de carga y de los productos en tres componentes, a saber, la materia prima original, la gasolina (intervalo de ebullición C_5 - 210 º C), y el restante de C_4 (gas seco y coque), y por lo tanto simplificado el esquema de reacción. El modelo predijo la conversión de gasóleo (la materia prima) y el rendimiento de la gasolina en condiciones isotérmicas en reactores de lecho fijo y fluidizado. Los parámetros cinéticos del modelo se evaluaron utilizando los datos experimentales. Dado que las velocidades de craqueo de gasóleo y de gasolina, tienen diferentes energías de activación, también se determinó una temperatura óptima de reacción para el sistema. Este esquema cinético de tres "lumps" sencillo fue utilizado por varios investigadores (Lee et al, 1989a;. Theologos y Markatos, 1993; Fligner, Schipper, Sapre, y Krambeck, 1994) para el análisis de muchos otros aspectos del modelado de FCC. Así un "lump" individual es una colección de todos los compuestos que poseen puntos de ebullición similares. Este plan se amplió a varios otros esquemas cinéticos. Entre ellos el modelo global



de cuatro *lumps* (Yen et al, 1988;.. Lee et al, 1898a)., Cinco *lumps* (. Larocca et al, 1990), seis *lumps* (Coxon y Bischoff, 1987, Takatsuka et al, 1987), diez *lumps* (, once *lumps* Jacob et al, 1976) (Mao et al, 1985;.. Sa et al, 1985;.. Zhu et al, 1985), doce *lumps* (Oliviera, 1987), trece *lumps* (Sa et al., 1995), 14 lumps (Lan, Xu, Wang, Wu, Gao, 2009) y el modelo de diecinueve *lumps* (Pitault et al., 1994) se utilizan ampliamente [6]. En la Tabla 1 se resumen algunos ejemplos de modelos cinéticos que se han empleado.



Tabla 1. Resumen comparativo de las principales características de algunos modelos del riser de FCC [7].

	Corella y Frances (1991)	Martín, Derouin, Forissier, Wild y Bernard (1992)	Fligner, Schipper, Sapre, y Krambeck (1994)	Ali, Rohani, y Corriou (1997)	Derouin, Nevicato, Forissier, Wild, y Bernard (1997)	Theologos, Lygeros, y Markatos (1999)
Vaporización	Instantánea	Instantánea	Instantánea	Instantánea	Instantánea	Vaporización seguida de craqueo
Variación de Temperatura	Adiabático	Isotermo	Isotermo	Adiabático	Isotermo	Adiabático
Expansión molar	Considerado	Considerado	No considerado	No considerado	Considerado	No considerado
Axial catalyst holdup	Factor de deslizamiento varía entre 1.15 y 1.05 a lo largo del riser	Correlación del factor de deslizamiento a lo largo del riser ajustado a los datos de la planta	Cluster model approach	Constante	Correlación del factor de deslizamiento a lo largo del riser ajustado a los datos de la planta	Dinámica de partículas individuales
Resistencia a la transferencia de materia	No considerada	No considerada	Ajustada a datos de planta	No considerada	No considerada	No considerada
Modelo cinético	Cinco lump	Cinco lump	Tres lump	Cuatro lump	Diecinueve lump	tres lump
Deactivation	No selectivo. Basado en el tiempo de paso del catalizador.	No selectivo. Basado en la concentración de coke en el catalizador.	No selectivo. Basado en el tiempo de paso del catalizador.	Variación a lo largo del riser no considerada	No selectivo excepto en reacciones que producen coke.Basado en la concentración de coke en el catalizador.	No selectivo. Basado en el tiempo de paso del catalizador.



1.2.- Objetivos de la memoria

La técnica de la simulación se usa asiduamente dentro del ámbito de la ingeniería. Se simulan toda clase de sistemas, como pueden ser eléctricos, mecánicos, químicos, de control, etc. El objetivo principal de este proyecto consiste en desarrollar una librería empleando una herramienta de modelado y simulación llamada EcosimPro. EcosimPro, es una herramienta de simulación con la que se pueden modelar desde los más simples a los más complejos procesos físicos, en términos de ecuaciones diferenciales algebraicas o ecuaciones diferenciales ordinarias y eventos discretos. Este proyecto se va a centrar en el campo de la simulación de sistemas dinámicos.

En primer lugar se desarrolla un modelo cinético del riser usando las suposiciones comunes hechas por diferentes investigadores sobre diversos aspectos del modelado del riser. A continuación se desarrollará la simulación en base a este modelo, para así poder estudiar el efecto de diferentes variables en el proceso.

1.1.- Estructura

El presente Proyecto de Fin de Carrera consta de seis capítulos, siendo el primero de ellos la presente introducción.

En el *capítulo 2* se describe el proceso de craqueo catalítico, describiendo las variables implicadas. Asimismo se desarrolla el modelo matemático, que posteriormente se implementará en Ecosimpro.

En el *capítulo 3* se describe el programa de modelado EcosimPro. Se definen las propiedades más relevantes en las que se basa y se exponen los conceptos fundamentales que definen este software, para que el lector pueda seguir el proyecto con la mayor claridad posible. Al final de este capítulo se implementa el modelo y se lleva a cabo la simulación, presentando los resultados.

2.- DESCRIPCIÓN DEL PROCESO Y MODELO.

El proceso FCC (Fluid Catalytic Cracking) es uno de los más importantes dentro de los esquemas modernos de refinación debido a su capacidad de convertir las fracciones pesadas



del petróleo de bajo valor comercial a productos con valor añadido como la gasolina de elevado índice de octano. Este proceso es uno de los más complejos, dado que está constituido por una serie de etapas que interactúan dinámicamente estableciendo equilibrios químicos, térmicos y mecánicos. A continuación se describe el proceso para el entendimiento del mismo.

2.1.- Descripción del proceso FCC.

El craqueo catalítico fluidizado (FCC) es un proceso en el que las moléculas de hidrocarburos pesados se convierten en moléculas más ligeras. La alimentación de hidrocarburos entra en un reactor de lecho tubular de transporte (riser) a través de boquillas de atomización de alimentación y se mezcla con el catalizador caliente procedente del regenerador. La reacción tiene lugar a lo largo del riser. A la salida, un ciclón separa el catalizador de los vapores de hidrocarburos.

Tras ello, el catalizador pasa por el stripper, un lecho fluidizado con vapor, para recuperar los hidrocarburos adsorbidos. El catalizador cae por gravedad al regenerador, un lecho fluidizado con aire, donde se da la combustión de coque y, a su vez, se calienta el catalizador. El catalizador se envía al comienzo del riser, reiniciando el proceso.

Los vapores que salen de la sección de craqueo son enfriados con una fracción pesada procedente del fraccionamiento, para que no continúe el craqueo.

Uno de los productos más deseados es la nafta, que es el principal constituyente de las gasolinas. Las condiciones de operación comprenden temperaturas de reacción de 480-540 °C y de regeneración de 600-700 °C y presiones cercanas a la atmosférica. Es capaz de procesar una amplia variedad de alimentaciones. Actualmente, más de 400 unidades de FCC están operativas en todo el mundo.

Un catalizador multicomponente que por lo general contiene una zeolita ácida USHY, una matriz de alúmina activa, una matriz inerte (caolín), y un aglutinante es el responsable del gran número de reacciones implicadas en el proceso de FCC. Se pueden añadir diferentes aditivos al catalizador con el propósito de modificar los rendimientos o reducir las emisiones contaminantes. Los más comunes son promotores de combustión, octano y estimuladores de olefinas ligeras y reductores de SO_x y NO_x.

Como todos los procesos industriales en los que está implicada la catálisis heterogénea, también se ocupa de la desactivación del catalizador. Actualmente, una fracción significante de la alimentación del FCC es convertida en una mezcla de compuestos (llamado



coque) que permanecen retenidos en la estructura del catalizador después del *stripping*. Estos compuestos desactivan rápidamente los centros ácidos del catalizador, llevando a una perdida significante de actividad del mismo. Por esta razón, la unidad de FCC fue diseñada para permitir una recirculación continua del catalizador entre el reactor y el regenerador, dónde el coque es eliminado del catalizador por combustión a elevadas temperaturas. Una de las ventajas de esta recirculación continua del catalizador es que las unidades de FCC operan en balance de calor; esto significa que el calor liberado durante la combustión del coque depositado en el catalizador gastado es utilizado para calentar el efluente gas del regenerador para vaporizar y calentar la alimentación a la temperatura de reacción [8].

El catalizador en la sección de agotamiento es sometido a la acción del vapor de agua para separar los hidrocarburos que aún se encuentran atrapados en la superficie catalítica. Para ello se usa de 2 a 5 kg de este vapor por cada 1000 kg de catalizador en circulación. El contacto se realiza en contracorriente, con una velocidad del vapor de 0.25 m/s y un flujo de catalizador de 40 a 60 kg/m²s.

La relación catalizador/alimentación (C/A) se encuentra dentro del intervalo de 4:1 y 9:1 en peso. El reactor-regenerador es el corazón del proceso FCC. En las unidades de FCC modernas, las reacciones de desintegración catalítica se llevan a cabo en el *riser* con un tiempo de contacto muy corto, de 2 a 4 segundos, antes que los productos de reacción sean separados del catalizador en el reactor. Este tiempo de contacto tan corto se debe a la elevada actividad de los catalizadores zeolíticos. Las reacciones de desintegración catalítica, de naturaleza endotérmica, se efectúan en fase vapor tan pronto la alimentación se vaporiza. El catalizador regenerado, con un elevado contenido energético, satisface el calor endotérmico para llevar a cabo la desintegración. La velocidad de los vapores de hidrocarburo es de 15 a 25 m/s y el volumen de expansión de éstos provoca el arrastre del catalizador a través del tubo.

Los ciclones separan de 75 al 99% del catalizador el cual es enviado a la *sección de agotamiento* mientras que los productos gaseosos son enviados a la *torre de destilación fraccionadora* [5].

En la Figura 2 se muestra el esquema simplificado del riser, con todos sus componentes.

Modelado de un sistema de Fluid Catalytic Cracking DESCRIPCIÓN DEL PROCESO Y MODELO



Universidad deValladolid



Figura 2. Esquema del riser.

2.2.- Modelado matemático.

Para la realización del modelo se ha tomado como referencia el modelo desarrollado por *In-Su Han, Chang-Bock Chung*(2001) [9]. En este proyecto, el modelado se concentra únicamente en el riser. A lo largo de este capítulo, se describen las estructuras y características de nuestro modelo y las suposiciones establecidas.

2.2.1.-Sección de vaporización

La alimentación se vaporiza cuando se mezcla con el catalizador regenerado en la sección de vaporización de la alimentación situado en la parte inferior del riser. La sección de



vaporización de alimentación es modelada como un pseudo-sistema de transferencia de calor en el que las corrientes de catalizador y alimentación se mezclan. La expansión de volumen y la variación de temperatura causada por la vaporización de la alimentación líquida son consideradas en el modelado de la alimentación de la sección de vaporización.

Debido a que las unidades modernas de FCC tienen un número de boquillas de alimentación diseñadas para ayudar a vaporizaciones rápidas de la alimentación, es posible suponer que la alimentación se vaporiza al instante al contacto con el catalizador caliente. Se supone además que el vapor de la alimentación está saturado después de la vaporización y que el riser trabaja adiabáticamente.

$$T_{cFS} = T_{cCL1} - \frac{F_{lg}}{F_{cCL1}\overline{C_{pc}}} \left[\bar{C}_{plg} (T_{gFS} - T_{lg}) + \frac{F_{ds}\bar{C}_{pds}}{F_{lg}} (T_{gFS} - T_{ds}) + \Delta H_{vlg} \right]$$
$$T_{gFS} = \frac{B_{lg}}{A_{lg} - \log(P_{FS}y_{goFS})} - C_{lg}$$

Donde

$$P_{FS} = P_{RT} + \Delta P_{RS} = P_{RT} + \left[P_{RS}^{(0)} - P_{RS}^{(h_{RS})} \right]$$
$$F_{lg}$$

$$y_{goFS} = \frac{lg}{F_{ds} + F_{lg}}$$

Para el cálculo de la velocidad del vapor y del catalizador a la entrada se emplean las ecuaciones:

$$v_{gFS} = \frac{F_{ds} + F_{lg}}{\rho_{gFS} (1 - \varepsilon_{cCL1})\Omega_{RS}}$$
$$v_{cFS} = \frac{F_{cCL1}}{\rho_c \varepsilon_{cCL1}\Omega_{RS}}$$

Dónde:

$$\rho_{gFS} = \frac{P_{FS}M_{wgFS}}{RT_{gFS}Z_{gFS}}$$

2.2.2.-Riser

El riser se modela como un reactor tubular unidimensional sin dispersión radial ni axial. Las ecuaciones del momento, de masa y balance de energía se realizan para la fase de catalizador y la fase gaseosa asumiendo las siguientes suposiciones:



- o las reacciones de craqueo sólo tienen lugar en el riser.
- la pared vertical es adiabática.
- o la dispersión y adsorción dentro de las partículas de catalizador son despreciables;.
- el coque depositado en el catalizador no afecta al flujo del fluido.
- o el coque tiene las mismas propiedades que el catalizador.
- la dinámica del riser es lo suficientemente rápida como para justificar un modelo de equilibrio cuasi-estacionario.

Las ecuaciones de momento están incluidas en el riser modelización para describir la variación de velocidades lineales de las fases de catalizador y de gas a lo largo del riser. Hay una significativa expansión molar con el aumento de la conversión de la alimentación y la consiguiente aceleración de las fases de catalizador y gas (Theologos y Markatos, 1993; Theologos et al., 1997). Pero, la mayoría de los estudios sobre el modelado del riser en la literatura asumen que velocidad lineal es constante a lo largo del tubo riser.

Se utilizan las ecuaciones del balance de materia para predecir las fracciones en peso de los componentes de los cuatro lumps: gasóleo, gasolina, gases ligeros (C_1 - C_4), y coque.

Se asume que el craqueo de gasoil es una reacción de segundo orden, pero la de la gasolina es de primer orden, y que las reacciones tienen lugar sólo en la fase gas. Dado que la velocidad de craqueo total se ver afectada por la actividad del catalizador, su efecto debería incorporarse en las expresiones cinéticas. Sin embargo, la actividad del catalizador es muy difícil de modelar con precisión ya que la actividad intrínseca del catalizador y la velocidad de coquización dependen de la composición de la alimentación, la adición de modificadores de actividad, y la velocidad a la que se sustituye el catalizador por catalizador fresco. En este proyecto se asume que el coque depositado en el catalizador es la principal causa de la desactivación del catalizador.

Con estas suposiciones y consideraciones se realiza el modelo del riser. A continuación se muestran las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento:

$$\frac{dv_{cRS}}{dx} + G_c \frac{\Omega_{RS}}{F_{cRS}} \frac{d\varepsilon_{cRS}}{dx} - \frac{C_{fRS}(v_{gRS} - v_{cRS})\Omega_{RS}}{F_{cRS}} + \frac{2f_{cRS}v_{cRS}}{D_{RS}} + \frac{g}{v_{cRS}} = 0$$
$$\frac{dv_{gRS}}{dx} + \frac{\Omega_{RS}}{F_{gRS}} \frac{dP_{RS}}{dx} - \frac{C_{fRS}(v_{cRS} - v_{gRS})\Omega_{RS}}{F_{gRS}} + \frac{2f_{cRS}v_{gRS}}{D_{RS}} + \frac{g}{v_{gRS}} = 0$$



$$\varepsilon_{cRS} = \frac{F_{cRS}}{v_{cRS}\rho_c\Omega_{RS}}$$
$$\varepsilon_{gRS} = 1 - \varepsilon_{cRS}$$
$$\rho_{gRS} = \frac{F_{gRS}}{\varepsilon_{gRS}v_{gRS}\Omega_{RS}}$$
$$P_{RS} = \rho_{gRS}\frac{RT_{gRS}}{M_{wgRS}}Z_{gRS}$$

Dónde:

 $F_{cRS} = F_{cCL}$ $F_{gRS} = F_{lg} + F_{ds}$

 $v_{cRS}^{(0)} = v_{cFS}$

 $v_{gRS}^{(0)} = v_{gFS}$

B.C:

En la ecuación [1] y [2] aparecen los coeficientes de fricción interfacial, su cálculo está basado en la siguiente ecuación de Ergun (Tsuo & Gidaspow, 1990):

$$C_{fRS} = 150 \frac{\varepsilon_{cRS}^2 \mu_{gRS} \rho_c}{\left(\varepsilon_{gRS} d_c s_c\right)^2 \left(\rho_c - \rho_{gRS}\right)} + 1.75 \frac{\rho_{gRS} \rho_c \left|v_{gRS} - v_{cRS}\right| \varepsilon_{cRS}}{\varepsilon_{gRS} d_c s_c \left(\rho_c - \rho_{gRS}\right)} \quad para \ \varepsilon_{gRS} \le 8$$
$$C_{fRS} = \frac{3}{4} C_{dRS} \frac{\left|v_{gRS} - v_{cRS}\right| \rho_{gRS} \rho_c \varepsilon_{cRS}}{d_c s_c \left(\rho_c - \rho_{gRS}\right)} \varepsilon_{gRS}^{-2.65} \quad para \ \varepsilon_{gRS} > 8$$

Dónde:

$$C_{dRS} = \frac{24}{Re_c} (1 + 0.15Re_c^{0.687}) \quad para Re_c \le 1000$$
$$C_{dRS} = 0.44 \quad para Re_c > 1000$$
$$Re_c = \frac{|v_{gRS} - v_{cRS}|d_c F_{gRS}}{\mu_{gRS} v_{gRS} \Omega_{RS}}$$

El módulo de estrés del catalizador se calcula con la siguiente ecuación (Tsuo & Gidaspow, 1990):

$$G_c = 10^{-8.76\varepsilon_{gRS} + 5.43}$$



$$\begin{split} f_{gRS} &= \frac{16}{Re} \quad para \ Re_g \leq 2100 \\ f_{gRS} &= 0.0791 Re_g^{-0.25} \quad para \ 2.1 \cdot 10^3 < Re_g \leq 10^5 \\ f_{gRS} &= 0.0008 + 0.0552 Re_g^{-0.237} \quad para \ 10^5 < Re_g < 10^8 \\ f_{cRS} &= \frac{0.05}{v_{cRS}} \end{split}$$

Dónde:

$$Re_g = \frac{D_{RS} v_{gRS} \rho_{gRS} \varepsilon_{gRS}}{\mu_{gRS}}$$

Las fracciones en peso de los 4 lumps implicados en la reacción se estiman con un balance de materia:

$$\frac{\partial y_{iRS}}{\partial x} = \frac{\rho_c \varepsilon_{cRS} \Omega_{RS} \phi_c}{F_{gRS}} R_{iRS} \quad i = go, gl, gs, ck y wv.$$

$$R_{goRS} = -(k_{1RS} + k_{2RS} + k_{3RS})y_{goRS}^{2}$$

$$R_{glRS} = (k_{1RS}y_{goRS}^{2} - k_{4RS}y_{glRS} - k_{5RS}y_{glRS})$$

$$R_{gsRS} = (k_{2RS}y_{goRS}^{2} + k_{4RS}y_{glRS})$$

$$R_{ckRS} = (k_{3RS}y_{goRS}^{2} + k_{5RS}y_{glRS})$$

$$R_{wvRS} = 0$$

Se utilizan como condiciones de contorno las siguientes:

$$y_{goRS}^{(0)} = 1 - \frac{(F_{lg}Y_{cc} + F_{ds})}{F_{gRS}}$$
$$y_{glRS}^{(0)} = 0$$
$$y_{gs}^{(0)} = 0$$
$$y_{ckRS}^{(0)} = \frac{F_{lg}Y_{cc}}{F_{gRS}}$$
$$y_{wvRS}^{(0)} = \frac{F_{ds}}{F_{gRS}}$$

Así mismo, el coeficiente de desactivación del catalizador ($\varphi_c)$ se obtiene con la ecuación:

15



$$\phi_c = \exp(-\alpha_c C_{ckRS})$$
$$\alpha_c = \alpha_{c0} exp\left(\frac{-E_c}{RT_{gRS}}\right) (R_{AN})^{\alpha_c^*}$$

.

El coque en el catalizador se calcula como la suma del coque residual del regenerador y el coque generado durante las reacciones de craqueo:

$$C_{ckRS} = C_{ckCL1} + \frac{F_{gRS} y_{ckRS}}{F_{cRS}}$$

La dependencia de la temperatura de los 5 parámetros cinéticos está representada por la siguiente relación de Arrhenius:

$$k_{iRS} = k_{i0RS} exp\left(\frac{-E_{iRS}}{RT_{gRS}}\right) \quad i = 1, ..., 5$$

Por otro lado, los perfiles de temperatura del catalizador y del gas a lo largo del riser se obtienen mediante los siguientes balances de energía:

$$\frac{\partial T_{cRS}}{\partial x} = \frac{\Omega_{RS} h_{pRS} A_{pRSe}}{F_{cRS} C_{pc}} (T_{gRS} - T_{cRS})$$

$$\frac{\partial T_{gRS}}{\partial x} = \frac{\Omega_{RS}}{F_{gRS}C_{pgRS}} [h_{pRS}A_{pRSe}(T_{cRS} - T_{gRS}) + \rho_c \varepsilon_{cRS}Q_{reactRS}]$$

Dónde:

$$Q_{reactRS} = -(\Delta H_{1RS}k_{1RS}y_{goRS}^2 + \Delta H_{2RS}k_{2RS}y_{goRS}^2 + \Delta H_{3RS}k_{3RS}y_{goRS}^2 + \Delta H_{4RS}k_{4RS}y_{glRS} + \Delta H_{5RS}k_{5RS}y_{glRS})\phi_c$$

Las condiciones de contorno empleadas para el balance de energía son las siguientes:

$$T_{cRS}^{(0)} = T_{cFS}$$
$$T_{gRS}^{(0)} = T_{gFS}$$

2.2.3.- Sección de disengaging-stripping

El disengagin y el stripping del reactor se combinan en una sola sección llamada sección de disengagingstripping. La sección se modela como un tanque continuo de mezcla perfecta sin reacción. Debido a que el catalizador se separa inmediatamente del producto vapor a través de los ciclones, reacción de craqueo rara vez ocurre en sección de disengaginstripping.



Una parte de los hidrocarburos queda atrapada en los poros del catalizador en el riser. Los hidrocarburos que no se eliminan se convierten en coque en el regenerador y por lo tanto producen diminución de rendimiento y un incremento en el aire necesario para la regeneración del catalizador. Algunos de los hidrocarburos pueden ser separados en el stripper. Se ha desarrollado la siguiente exponencial para calcular la cantidad de catalizador a coque:

$$C_{ckST} = C_{ckST0} + k_{ss0} exp \left[-\frac{E_{ss}F_{cRS}F_{ss}}{F_{lg}} \right]$$

En el modelado de una unidad de FCC, la presión debe ser tratada como una de las variables de proceso más importantes, porque la diferencia de presión entre el reactor y el regenerador determina la velocidad de circulación del catalizador y por lo tanto el grado de interacción entre las dos corrientes. La presión en la sección de desacoplamiento-stripping se calcula a partir de la ley de los gases ideales y la presión de fondo del reactor se estima usando la presión ejercida por las partículas de catalizador.

Para obtener la presión de la fase gas (P_{RT}) en la sección de disengaging-stripping se emplea la siguiente ecuación:

$$P_{RT} = \frac{w_{gRT} R T_{RT}}{M_{wgRT} V_{gRT}} Z_{gRT}$$

Dónde:

$$V_{gRT} = V_{RT} - \frac{W_{cRT}}{\rho_c}$$

$$P_{RTb} = P_{RT} + \frac{(w_{cRT} - w_{cCY1})g(h_{RT} - h_{ST})}{1000V_{RT}}$$

El coque depositado en el catalizador en la sección de stripping puede ser calculada según la ecuación:

$$\frac{dC_{ckRT}}{dt} = \frac{F_{cRS}}{w_{cRT}} \left(C_{ckRS}^{(h_{RS})} + C_{ckST} - C_{ckRT} \right)$$

Se realiza el balance de materia para los gases y el catalizador:



$$\frac{dw_{gRT}}{dt} = F_{gRS} \left(1 - y_{ckRS}^{(h_{RS})} \right) + F_{SS} - F_{gRT} - F_{cRS} C_{ckST}$$
$$\frac{dw_{cRT}}{dt} = F_{cRS} - F_{cSV2} - F_{cMF}$$

Las fracciones en peso de los componentes gaseosos presentes en el fraccionador principal, se obtienen con las ecuaciones siguientes:

$$\frac{dy_{iRT}}{dt} = \frac{1}{w_{gRT}} \left[y_{iRS}^{(h_{RS})} \left(F_{gRS} - \frac{F_{cRS}C_{ckST}}{\sum_{i=go,gly \ gs} y_{jRS}^{(h_{RS})}} \right) - y_{iRT} \left(F_{gRT} + \frac{dw_{gRT}}{dt} \right) \right]$$

 $y_{wvRT} = 1 - y_{goRT} - y_{glRT} - y_{gsRT}$

Para obtener la conversión de gasoil:

$$Y_{convRT} = 1 - \frac{F_{gRS} \, y_{goRT}}{F_{lg}}$$

El balance de energía en esta sección es el que se desarrolla a continuación:

$$(w_{cRT}C_{pc} + w_{gRT}C_{pgRT})\frac{dT_{RT}}{dt}$$

$$= F_{ss}H_{ss} + F_{ds}H_{ds} - (F_{ss} + F_{ds})H_{wvRT}^{out} + F_{cRS}(H_{cRT}^{in} - H_{cRT}^{out})$$

$$+ (F_{gRS} - F_{ds})(H_{hgRT}^{in} - H_{hgRT}^{out}) - F_{ss}\Delta H_{stripST} + Q_{lossRT}$$

Dónde:

$$H_{ss} = \bar{C}_{pwv} (T_{ss} - T_{ref})$$

$$H_{ds} = \bar{C}_{pwv} (T_{gRS}^{(h_{RS})} - T_{ref})$$

$$H_{hgRT}^{in} = \bar{C}_{phg} (T_{gRS}^{(h_{RS})} - T_{ref})$$

$$H_{hgRT}^{out} = \bar{C}_{phg} (T_{RT} - T_{ref})$$

$$H_{cRT}^{in} = \bar{C}_{pc} (T_{cRS}^{(h_{RS})} - T_{ref})$$

$$H_{cRT}^{out} = \bar{C}_{pc} (T_{RT} - T_{ref})$$

$$H_{wvRT}^{out} = \bar{C}_{pwv} (T_{RT} - T_{ref})$$

$$H_{wvRT}^{out} = \bar{C}_{pwv} (T_{RT} - T_{ref})$$

$$Q_{lossRT} = U_{RT} A_{RTe} (T_e - T_{RT})$$



2.2.4.- Ciclones del reactor

Los ciclones se consideran como un tanque agitado continuo (CST). Se supone que todos los ciclones del reactor tienen la mismas dimensiones y que el holdup del catalizador en cada ciclón es igual en todos.

Debido a que no tiene lugar ninguna reacción, los ciclones están en equilibrio térmico con la sección de disengagin-stripping. Por lo tanto, sólo son necesarios los balances de materia para calcular las variables de estado: la velocidad de entrada al ciclón, el holdup de catalizador y el flujo másico que sale del reactor.

El catalizador acumulado en los ciclones se puede expresar como:

$$\eta_{CY1} v_{cCY1} \Omega_{CY1i} \frac{w_{cRT}}{V_{RT}} - k_{\nu CY1} \left(\frac{w_{cCY1} \Omega_{CY1d} / N_{CY1}}{\rho_{bCY1}} \right)^{1/2}$$

Reordenando esta ecuación, se obtiene lo siguiente:

$$w_{cCY1} = \frac{\rho_{bCY1N_{CY1}}}{\Omega_{CY1d}} \left(\frac{\eta_{CY1}v_{cCY1}\Omega_{CY1i}w_{cRT}}{k_{\nu CY1}V_{RT}}\right)^2$$

Donde la velocidad de entrada a los ciclones es calculada con la ecuación de Rosin, Rammler, y Intelmann (Schweitzer et al., 1988):

$$v_{cCY1} = \frac{9\mu_{gRT}\Omega_{CY1i}}{d_{cm}^2 \pi N_{tCY1}(\rho_c - \frac{w_{gRT}}{V_{gRT}})h_{CY1i}}$$

Por último, se calculan los caudales másicos de catalizador y de los gases en el fraccionador principal:

$$F_{cMF} = (1 - \eta_{CY1}) v_{cCY1} \Omega_{CY1i} \frac{W_{cRT}}{V_{RT}} N_{CYi}$$
$$F_{gRT} = k_{\nu MF} \sqrt{P_{RT} - P_{MF}}$$
$$F_{hgRT} = F_{gRT} (1 - y_{w\nu RT})$$

2.2.5.- Correlaciones de propiedades físicas y parámetros de transporte [10].



$$T_{TBP} = a(T_{ASTM})^b$$
$$T_{ASTM} = a^{-\frac{1}{b}}(T_{TBP})^{\frac{1}{b}}$$
$$T_{VABP} = 0.2(T_{10} + T_{30} + T_{50} + T_{70} + T_{90})$$

 $T_{MABP} = T_{VABP} - 0.5556$

$$exp[-0.5638 - 0.0080(1.8T_{VABP} - 491.67)^{0.6667} + 3.0473(SI)^{0.3333}]$$

Dónde:

$$(SI) = 0.0225(T_{90} - T_{10})$$

El factor de caracterización de Watson (Kf) se calcula con la gravedad especifica que es una media del punto de ebullición definido de la siguiente manera:

$$S_g = \frac{141.5}{(API) + 131.5}$$
$$K_f = \frac{(1.8T_{MeABP})^{1/3}}{S_g}$$

Para calcular los pesos moleculares del gasoil y de la gasolina, se pu eden estimar según (Riazi, 1988)

$$\begin{split} M_{wg} &= 42.965 \Big[\exp(2.097 * 10^{-4} T_{MeABP} - 7.787 S_g + 2.085 * 10^3 T_{MeABP} S_g) \Big] \\ &\quad * T_{MeABP}^{1.26007} S_g^{4.98308} \end{split}$$

Las capacidades caloríficas de la fase liquida y gas del gasoil y la gasolina se estiman empleando la correlación de Lee-Kesler modificada (Lee and Kesler, 1988) que desprecia el efecto de la presión ya que los procesos de FCC operan a presiones relativamente bajas (200-300 Kpa):

$$C_{plg} = \alpha_1 + \alpha_2 T + \alpha_3 T^2$$
$$C_{pg} = \beta_1 + \beta_2 T + \beta_3 T^2$$

Dónde:

$$\alpha_1 = -4.90383 + (0.099319 + 0.104281S_g)K_f + \frac{(4.814066 - 0.194833K_f)}{S_g}$$



$$\begin{aligned} \alpha_2 &= (7.53624 * 10^{-4}) \left(1 + 0.82463K_f\right) * \left(1.12172 - \frac{0.27634}{S_g}\right) \\ \alpha_3 &= (-1.356523 * 10^{-7}) \left(1 + 0.82463K_f\right) * \left(2.9027 - \frac{0.70958}{S_g}\right) \\ \beta_1 &= -1.492343 + 0.124432K_f + \beta_4 * \left(1.23519 - \frac{1.04025}{S_g}\right) \\ \beta_2 &= (-7.53624 * 10^{-4}) \left[2.9247 - (1.5524 - 0.05543K_f)K_f + \beta_4 \left\{6.0283 - \frac{5.0694}{S_g}\right\}\right] \\ \beta_3 &= (1.356523 * 10^{-6})(1.6946 + 0.0884\beta_4) \\ \beta_4 &= \left[\left(\frac{12.8}{K_f} - 1\right) \left(1 - \frac{10}{K_f}\right) * \left(S_g - 0.885\right) \left(S_g - 0.7\right) (10^4) \right]^2 para \ 10 < K_f < 12.8 \end{aligned}$$

 $\beta_4 = 0$ para los demás casos

La capacidad de calor de los lumps de los gases ligeros se calcula con la ecuación siguiente (Mcketta and Cunning-ham, 1976):

$$C_{pgs} = 0.2457 + 5.3 * 10^{-3}T - 2.1527 * 10^{-6}T^2$$

Para la estimación de las viscosidades de los hidrocarburos se emplean la viscosidad pseudo-reducida y la la viscosidad pseudo-critica (Nelson, 1958):

$$\mu_g = \mu_{pr} \mu_{pc} = 3.515 * 10^{-8} \mu_{pr} \frac{\sqrt{M_{wm} * P_{pc}^{2/3}}}{T_{pc}^{1/6}}$$

La correlación para obtener la viscosidad pseudo-reducida se obtiene por una regresión no-linear de datos de literatura (Nelson, 1958) para un rango de T_{pr} y P_{pr} dado en la ecuación:

$$\mu_{pr} = 0.435 exp \left[(1.3316 - T_{pr}^{0.6921}) P_{pr} \right] T_{pr} + 0.0155$$
$$0.75 < T_{pr} = \frac{T}{T_{pc}} < 3 \quad y \quad 0.01 < P_{pr} = \frac{P}{P_{pc}} < 0.2$$

Donde las propiedades críticas de los hidrocarbonos se estiman con las siguientes ecuaciones:



$$\begin{split} T_{pc} = & \\ 17.1419 \big[\exp(-9.3145 * 10^{-4} T_{MeABP} - 0.54444 S_g + 6.4791 * 10^{-4} T_{MeABP} S_g \big] * \\ T_{MeABP}^{0.81067} S_g^{0.53691} \end{split}$$

$$P_{pc} = 14.6352 * 10^{6} \left[\exp(-8.505 * 10^{-3} T_{MeABP} - 4.8014S_{g} + 5.749 * 10^{-3} T_{MeABP} S_{g} \right]$$

* $T_{MeABP}^{-0.4844} S_{g}^{4.0846}$

La correlación para el calor de vaporización del gasoil se obtiene como una regresión no linear de datos de la literatura (Nelson, 1958). Esta ecuación es aplicable cuando el peso molecular tiene valores entre 200 y 400.

$$\Delta H_{vlg} = 0.3843 T_{MeABP} + 1.0878 * 10^3 exp\left(\frac{-M_{wg}}{100}\right) - 98.153$$

La presión de vapor del gasoil se calcula resolviendo el sistema de las siguientes correlaciones obtenidas de la literatura (Technical Data Committee, 1988):

$$\begin{split} P_g &= 0.13322 * 10^{\frac{3000.53\omega - 6.761560}{43\omega - 0.987672}} \quad para \; \omega > 0.0022 \\ P_g &= 0.13322 * 10^{\frac{2663.19\omega - 5.994296}{95.76\omega - 0.972546}} \quad para \; 0.0013 \leq \omega \leq 0.0022 \\ P_g &= 0.13322 * 10^{\frac{2770.085\omega - 6.412631}{36\omega - 0.989679}} \quad para \; \omega < 0.0013 \end{split}$$

Donde:

$$\omega = \frac{\frac{T_{weABP}^{*} - 0.00051606T_{MeABP}^{*}}{T_{v}}}{748.1 - 0.3861T_{MeABP}^{*}}$$

 $T_{MeABP}^{*} = T_{MeABP} - 1.3889\alpha * (K_{f} - 12)\log(0.0098684P_{g})$ $\alpha = 1 \quad para \ T_{MeABP} > 477.8K$

$$\alpha = 0$$
 para $T_{MeABP} < 333.3K$

$$\alpha = \frac{1.8T_{MeABP} - 659.7}{200} \quad para \ 366.7K \le T_{MeABP} \le 477.8K$$

Para calcular los tres coeficientes de la ecuación de Antoine, se evalúan las presiones de vapor a tres temperaturas (T_{MeABP} , $T_{MeABP-15}$, $T_{MeABP+15}$) usando las ecuaciones (X-Y) y sustituyéndolas en la siguiente ecuación:



$$F_i(A_{lg}, B_{lg}, C_{lg}) = (T_{vi} + C_{lg})[A_{lg} - \log(P_{gi})] - B_{lg} = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

La conductividad térmica de los hidrocarbonos que se necesita para calcular la difusividad térmica, se calcula por una regresión no linear de los datos en API technical data book (Technical Data Committee, 1988):

$$k_g = 1 * 10^{-6} (1.9469 - 0.374 M_{wm} + 1.4815 * 10^{-3} M_{wm}^2 + 0.1028 T_{wm}^2 + 0.1028 T_{w$$

Con ello se calcula el coeficiente de transmisión de calor entre sólidos y los gase de hidrocarbono. Se estima de la correlación entre los números de Nusselt y Reynolds (Kunii y Levenspiel, 1991):

$$h_p 0.03 rac{k_g}{d_c^{2/3}} \left[rac{|v_g - v_c| \rho_g \varepsilon_g}{\mu_g}
ight]^{1/3}$$

3.- SIMULACIÓN Y RESULTADOS.

EcosimPro es una herramienta matemática de modelado y simulación de sistemas dinámicos desarrollada por un equipo de ingenieros de Empresarios Agrupados Internacional S.A. (EAI). Fundada en 1971 Empresarios Agrupados es una organización de ingeniería líder en España y con notable experiencia internacional.

EcosimPro permite representar sistemas mediante un lenguaje de modelado o gráficamente. Para el modelado se ha creado un lenguaje muy sencillo de aprender que toma ideas de los lenguajes orientados al objeto de uso común hoy día, como el C++.

El usuario modela componentes como un tanque de agua, una bomba, una válvula, una tubería, etc. con las variables que se intercambian y con las ecuaciones que las rigen. Después, otro usuario puede modelar un nuevo sistema basado en esos componentes sencillos. Por ejemplo, una red hidráulica con varias tuberías, bombas, etc. EcosimPro se encarga de extraer las ecuaciones del conjunto, ordenarlas y resolverlas numéricamente.

El usuario final, se libra de calcular el modelo matemático final y evita tener que recurrir a resolvedores programáticamente [11].



3.1.- Implementación del modelo en Ecosimpro.

Para implementar un modelo en EcosimPro y simularlo, deben seguirse cuatro pasos, si bien desaparece el primero de ellos cuando se utiliza una biblioteca predefinida. En este proyecto se va a construir una librería.

3.1.1.- Modelos de componentes

En una biblioteca (LIBRARY) se encuentran funciones (FUNCTION), puertos (PORT), componentes (COMPONENT), así como variables y tipos de enumeración globales, almacenándose en un archivo con extensión .el, de texto plano sin formato. Se pueden utilizar elementos de otras bibliotecas mediante el comando USE. A continuación se compila este archivo, que un código binario con los componentes, sobre el que se podrán construir particiones y experimentos.

Nos centraremos en la descripción de componentes, que son los que se va a emplear en este proyecto.

Componentes

Son los elementos de modelado más importantes. Un componente representa un sistema o parte del mismo por medio de constantes, variables, ecuaciones algebraicodiferenciales, topología, puertos y eventos discretos.

Las variables (declaradas en DECLS) y constantes (DATA) locales son privadas. Las ecuaciones se incluyen en la sección CONTINUOUS, existiendo la posibilidad de modelos discretos (DISCRETE), así como secuencias de inicialización de componentes (INIT), en las que no entraremos.

3.2.2.- Modelos de sistemas

Dada la estructura modular de EcosimPro, se construyen los modelos de los sistemas a partir de los modelos de componentes de las bibliotecas existentes (o creadas por el usuario). Se crea, por tanto, un COMPONENT para cada sistema a simular. En primer lugar se declaran los componentes, en la sección TOPOLOGY, asignándoles un nombre y dando valores a los parámetros que los caracterizan. La interconexión de los mismos, a través de sus puertos, se realiza mediante la sentencia CONNECT, también en la sección TOPOLOGY.

3.2.3.- Definición de una partición

La partición (PARTITION) completa el modelo matemático de un componente. En este sentido, se pueden realizar hasta cuatro operaciones distintas en esta estructura:



- Determinar las variables sobre las que se impondrán las condiciones de contorno (se extablecen en el experimento).
- Indicar a EcosimPro cómo romper los lazos algebraicos, seleccionado la variable a utilizar en el algoritmo de rotura de lazos.
- Seleccionar las variables de estado que se utilizarán para realizar la reducción del modelo en el caso de índice superior.
- o Cambiar una constante para realizar simulaciones paramétricas.

3.1.4.- Simulación de un experimento

En el experimento es donde se realiza la simulación en sí. Se fijan las condiciones iniciales (INIT) y de contorno (BOUNDS), consistentemente con la partición realizada. Se establece el paso de integración y valor final para cada variable (u otra información equivalente) sobre la que se realiza la integración. Se pueden definir experimentos complejos, utilizando funciones que proporciona el programa. Se puede seleccionar qué variables del modelo mostrar, ya sea en forma numérica o gráfica. Para el manejo de estos parámetros existe un interfaz gráfico que ayuda al usuario.

3.2.- MODELO EN ECOSIMPRO DEL RISER.

Para implementar el modelo del riser en EcosimPro, se ha partido de las ecuaciones que se han descrito en el capítulo anterior. A continuación se detallan estas ecuaciones en lenguaje de programación orientada a objetos:

USE MATH

COMPONENT riser

DATA

REAL ARS=0.95 "Área transversal del riser (m2)"

REAL DRS=1.1 "Diámetro del riser (m)"

REAL Fds=1.6 "Flujo másico del vapor de dispersión (Kg/s)"

REAL dcat=1410 "Densidad del catalizador (Kg/m3)"

REAL dc=0.00007 "Diámetro medio del catalizador (m)"

REAL Sc=0.72 "Esfericidad media de las partículas de catalizador"

REAL Ycc=0.5 "Fracción másica de carbono conradson en la alimentación (%wt)"

REAL aco=0.000011 "Factor preexponencial de alfac"

REAL Ec=49000 "Energía cinética de desactivación (KJ/Kgmol)"

REAL RAN=2.1 "Relación aromáticos a naftenos en la alimentación"



REAL ace=0.1177 "Exponente para representar alfac" REAL k1oRS=1457.5 "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s-1)" REAL k2oRS=127.59 "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s-1)" REAL k3oRS=1.98 "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s-1)" REAL k4oRS=256.81 "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s-1)" REAL k5oRS=6.29e-4 "Factor de frecuencia en la ecuación de Arrhenius (s-1)" REAL E1RS=57359 "Energía de activacion de la reacción 1 de los lumps (KJ/Kgmol)" REAL E2RS=52754 "Energía de activacion de la reacción 2 de los lumps (KJ/Kgmol)"

REAL E3RS=31820 "Energía de activacion de la reacción 3 de los lumps (KJ/Kgmol)"

REAL E4RS=65733 "Energía de activacion de la reacción 4 de los lumps (KJ/Kgmol)"

REAL E5RS=66570 "Energía de activacion de la reacción 5 de los lumps (KJ/Kgmol)"

REAL Cpc=1.15 "Capacidad calorífica del catalizador (KJ/KgK)"

REAL H1RS=195 "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

REAL H2RS=670 "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

REAL H3RS=745 "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

REAL H4RS=530 "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

REAL H5RS=690 "Calor de reacción para el modelo de 4 lumps (KJ/Kg)"

REAL Tlg=535 "Temperatura de la alimentación (K)"

REAL Tds=430 "Temperatura del vapor de dispersión (K)"

REAL Ksso=0.0054 "Factor de frecuencia en la función de estripping (Kg coke/Kg cat)"

REAL CckSTo=0.0004 "Coke inicial en el catalizador en la sección de stripping "

REAL Ess=0.3311 "Exponente en la función de stripping (s/Kg)"

REAL Fss=1.1 "Caudal másico del vapor de stripping que entra en sección disengaging (Kg/s)"

REAL HstripST=0 "Calor de stripping (KJ/Kg)"

REAL Tss=430 "Temperatura del vapor de stripping que entra en la sección disengaging (K)"



REAL URT=0.035 "Coeficiente de TC en la sección de disengaging (KI/m2sK)" REAL Te=300 "Temperatura ambiente (K)" REAL VRT=173.64 "Volúmen del disengaging (m2)" REAL g=9.8 "aceleración de la gravedad (m/s2)" REAL hRT=8.5 "altura de la sección disengaging (m)" REAL hST=6.2 "altura de la sección stripping (m)" REAL rtoCY1=1 "Eficiencia de colección del ciclón" REAL KvCY1=120 "Factor de clasificación de flujo del ciclón (Kg/sm2.5)" REAL NCY1=2 "Numero de ciclones en el reactor" REAL NtCY1=10 "Número de giros de 360º" REAL hCY1i=0.8 "altura de entrada del ciclón (m)" REAL KvMF=4.35 "Factor de clasificación de flujo de la valvula del fraccionador principal (Kg/sKPa0.5)" REAL R=8.3143 "Constante de los gases ideales (KPam3/KgmolK)" REAL Tref=298 "Temperatura de referencia (K)" REAL Sg=0.894 "Gravedad específica" REAL Kf=11.688 "Factor de caracterizacion de Watson (K^1/3)" REAL MwgRS=294.27 "Peso molecular del gas en el riser" REAL MwgRT=50 "Peso molecular en el disengaging" REAL MwgFS=294.27 "Peso molecular del gas en la sección de vaporización" REAL a=1 "Alfa para calcular los coeficientes de la ecuación de Antoine" REAL Tv1=633.82 "Temperatura de ebullición (K)" REAL Tv2=618.82 "Temperatura de ebullición (K)" REAL Tv3=648.82 "Temperatura de ebullición (K)" REAL TMeABP=633.82 "(K)" REAL TMABP=623.186 "(K)" REAL Cpcm=1.15 "Capacidad calorifica media del catalizador (KI/Kg)" REAL Cpdsm=1.84 "Capacidad calorifica del vapor de dispersión (KJ/KgK)" REAL Cpwvm=1.84 "Capacidad calorifica del vapor de agua (KJ/KgK)" REAL tau[15]=1DECLS REAL Flg "Flujo masico de alimentación (Kg/s)"



REAL TcFS "Temperatura del catallizador en la sección de vaporización (K)" REAL TcCL1 "Temperatura del catalizador en la linea de transporte del catalizador regenerado al reactor (K)" REAL FcCL1 "Flujo de catalizador regenerado en la línea de transporte (Kg/s)" REAL TgFS "Temperatura del gas en la sección de vaporización (K)" REAL PFS "Presión en la sección de vaporización (KPa)" REAL PRT "Presión en la sección de disengaging-stripping (KPa)" REAL PRS0 "Presión inicial en el riser (KPa)" REAL ecRS0 REAL PRShRS "Presión a la salida del riser (KPa)" REAL ygoFS "Fracción en peso del gasoleo en la sección de vaporización" REAL dengFS "Densidad del gas en la sección de vaporización (Kg/m3)" REAL ecCL1 "Fracción de volumen del catalizador en la línea de transporte del catalizador en la línea de tpte del cat.regenerado" REAL vgFS "velocidad del gas en la sección de vaporización (m/s)" REAL vcFS "velocidad del catalizador en la sección de vaporización (m/s)" REAL Hvlg "Calor de vaporización del líquido de la alimentación en la sección de vaporizacion (KJ/Kg)" REAL ZgFS "Factor de compresibilidad del gas en la seccionde vaporización" REAL vcRS[15] "velocidad superficial del catalizador en el riser" REAL Gc[15] "Módulo de estrés del catalizador" REAL ecRS[15] "Fracción de volúmen del catalizador en el riser" REAL FcRS "Flujo másico del catalizador en el riser (Kg/s)" REAL CfRS[15] "Coeficiente de fricción catalizador-gas" REAL vgRS[15] "VElocidad superficial del gas (m/s)" REAL fcRS[15] "Fracción molar o coeficiente de fricción" REAL PRS[15] "Presión en el riser" REAL FgRS "Flujo másico del gas en el riser (Kg/s)" REAL fgRS[15] "Fraccion molar o coeficiente de fricción del gas en el riser" REAL egRS[15] "Fracción de volúmen del gas en el riser" REAL dengRS[15] "Densidad del gas en el riser (Kg/m3)" REAL TgRS[15] "Temperatura del gas en el riser (K)" REAL ZgRS "Factor de compresibilidad del gas"

REAL CdRS[15] "COEFICIENTE DE ARRASTRE" REAL viscgRS[15] "viscosidad del gas en el riser (Kg/ms)" REAL Rec[15] "Reynolds catalizador" REAL Reg[15] "Reynolds del gas" REAL ygoRS[15] "Fracción másica del go en el riser" REAL yglRS[15] "Fracción másica del gl en el riser" REAL ygsRS[15] "Fracción másica del gs en el riser" REAL yckRS[15] "Fracción másica del ck en el riser" REAL ywvRS[15] "Fracción másica del wv en el riser" REAL RgoRS[15] REAL RglRS[15] REAL RgsRS[15] REAL RckRS[15] REAL RwvRS[15] REAL desactc[15] "Función desactivación del catalizador" REAL k1RS[15] "coeficiente de velocidad de reacción 1 (1/s)" REAL k2RS[15] "coeficiente de velocidad de reacción 2 (1/s)" REAL k3RS[15] "coeficiente de velocidad de reacción 3 (1/s)" REAL k4RS[15] "coeficiente de velocidad de reacción 4 (1/s)" REAL k5RS[15] "coeficiente de velocidad de reacción 5 (1/s)" REAL ac[15] "Coeficiente de desactivación del catalizador" REAL CckRS[15] "Coke en el catalizador (Kg coke/Kg catalizador)" REAL CckCL1 "coke residual del regenerador (Kg coke/Kg catalizador)" REAL CckST "coke en el catalizador en la seccion de stripping" REAL hpRS[15] "Coeficiente de TC entre el catalizador y las gotas del gas" REAL ApRSe "Área efectiva de TC (m2)" REAL TcRS[15] "Temperatura del catalizador en el riser (K)" REAL CpgRS[15] "Capacidad calorífica del gas en el riser" REAL QreactRS[15] "Calor de reacción en el riser" REAL CckRSsal "Coke en el catalizador a la salida del riser (Kg coke/Kg catalizador)" REAL yckRSsal "Fracción másica de coke a la salida del riser" REAL FgRT "Caudal de gas en la sección de disengaging (Kg/s)"



REAL FcSV2 "Caudal de catalizador en la válvula de distribución de la línea de tpte de catalizador gastado (Kg/s)" REAL FcMF "Caudal de catalizador del fraccionador principal (Kg/s)" REAL ygoRSsal "Fracción másica de go en la salida del riser" REAL yglRSsal "Fracción másica de gl en la salida del riser" REAL ygsRSsal "Fracción másica de gs en la salida del riser" REAL ywvRT "Fracción másica del vapor de agua en el disengaging" REAL YconvRT "Conversión de gasoil en el disengaging" REAL CpgRT "Capacidad calorífica del gas en la sección de disengaging" REAL Hss "Entalpía especifica del vapor de stripping" REAL Hds "Entalpia especifica del vapor de dispersión" REAL HwvRTsal "Entalpia del vapor de agua a la salida del disengaging" REAL HcRTent "Entalpia del catalizador a la entrada del disengaging" REAL HcRTsal "Entalpia del catalizador a la salida del disengaging" REAL HhgRTent "Entalpia de los gases de HC a la entrada del disengaging" REAL HhgRTsal "Entalpia de los gases de HC a la salida del disengaging" REAL QlossRT "Tasa de pérdida de calor a los alrededores" REAL TgRSsal "Temperatura del gas a la salida del riser (K)" REAL TcRSsal "Temperatura del catalizador a la salida del riser (K)" REAL ARTe "Area efectiva de TC entre el reactor y los alrededores" REAL ZgRT "Factor de compresibilidad" REAL VgRT "Volúmen de gas en el disengaging (m3)" REAL PRTb "Presión a la salida del disengaging (KPa)" REAL wcCY1 "holdup del catalizador en los ciclones" REAL vcCY1 "velocidad interticial del catalizador en los ciclones" REAL ACY1i "Area transversal del ciclón a la entrada (m2)" REAL WcCY1 "holdup del catalizador en el ciclón" REAL ACY1d "área transversal de cada ciclón el el dip-leg (m2)" REAL denbCY1 "densidad de la masa de catalizador o burbuja" REAL viscgRT "viscosidad del gas en la sección disengaging" REAL dcm "minimo tamaño de partícula que debe ser separado" REAL PMF "presión en el fraccionador principal (KPa)" REAL FhgRT "Caudal másico de HC en el disengaging"



Modelado de un sistema de Fluid Catalytic Cracking DESCRIPCIÓN DEL PROCESO Y MODELO

Universidad de Valladolid

REAL a1 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL a2 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL a3 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL b1 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL b2 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL b3 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL b4 "coeficiente cálculo de la capacidad calorífica" REAL viscprRS[15] REAL viscprRT **REAL Tpc REAL Ppc** REAL TprRS[15] REAL TprRT REAL PprRS[15] REAL PprRT REAL TMeABPx1 REAL TMeABPx2 REAL TMeABPx3 REAL omega1 REAL omega2 REAL omega3 REAL Pg1 REAL Pg2 REAL Pg3 REAL Alg **REAL Blg REAL Clg** REAL Cplgm "Capacidad calorifica de la alimentación (KJ/KgK)" REAL Cphgm "Capacidad calorífica de los gases de hidrocarburo (KJ/KgK)" REAL Kg[15] "conductividad térmica de los hc" REAL TRT "Temperatura en el disenganging (K)" REAL wcRT "Holdup del catalizador en la sección disengaging (Kg)" REAL CckRT "Coke en el catalizador en la sección disengaging"



REAL wgRT "Holdup del gas en la sección disengaging (Kg)" REAL ygoRT "Fracción masica de go en el disengaging" REAL yglRT "Fracción masica de gl en el disengaging" REAL ygsRT "Fracción masica de gs en el disengaging" REAL ygoRS0 REAL yglRS0 REAL yglRS0 REAL ygsRS0 REAL yckRS0 REAL yckRS0 REAL TcRS0 REAL TcRS0 REAL TcRS0 REAL vcRS0 REAL vcRS0 REAL vgRS0

a1=-4.90383+((0.099319+0.104281*Sg)*Kf)+((4.814066-0.194833*Kf)/Sg) a2=0.000753624*(1+0.82463*Kf)*(1.12172-(0.27634/Sg)) --REVISAR a3=(-0.0000001356523)*(1+0.82463*Kf)*(2.9027-(0.70958/Sg)) b1=(-1.492343+(0.124432*Kf)+(b4*(1.23519-(1.04025/Sg)))) b2=(-0.000753624)*(2.9247-(1.5524-0.05543*Kf)*Kf+b4*(6.0283-(5.0694/Sg)))

```
b3=(0.000001356523)*(1.6946+0.0884*b4)
```

```
b4=(((12.8/Kf)-1)*(1-(10/Kf))*(Sg-0.885)*(Sg-0.7)*(10**4))**2
```

--Correlaciones de propiedades físicas y parámetros de transporte

```
Cplgm=a1+(a2*Tlg)+(a3*(Tlg**2))
```

```
EXPAND( i IN 1,15) CpgRS[i]=b1+(b2*TgRS[i])+(b3*(TgRS[i]**2))
```

```
CpgRT=b1+(b2*TRT)+(b3*(TRT**2))
```

Cphgm=0.2457+(0.0053*TRT)-(0.0000021527*(TRT**2))

```
Tpc=17.1419*(exp((-0.00093145*TMeABP)-
```

```
(0.5444*Sg)+(0.00064791*TMeABP*Sg)))*(TMeABP**0.81067)*(Sg**0.53691)
```

```
Ppc=(4635200*(exp(((-0.008505)*TMeABP)-
```

(4.8014*Sg)+((0.005749)*TMeABP*Sg))))*(TMeABP**(-0.4844))*(Sg**4.0846)

EXPAND_BLOCK (i IN 1,15)

TprRS[i]=(TgRS[i]/Tpc)

```
PprRS[i]=(PRS[i]/Ppc)
END EXPAND BLOCK
TprRT=(TRT/Tpc)
PprRT=(PRT/Ppc)
EXPAND( i IN 1,15) viscprRS[i]=(0.435*(exp((1.3316-
TprRS[i]**0.6921)*PprRS[i]))*TprRS[i])+0.0155
viscprRT=(0.435*(exp((1.3316-TprRT**0.6921)*PprRT))*TprRT)+0.0155
EXPAND( i IN 1,15)
viscgRS[i]=0.0000003515*viscprRS[i]*((sqrt(MwgRS*(Ppc**(2/3))))/(Tpc**(1/6
)))
viscgRT=0.00000003515*viscprRT*((sqrt(MwgRT*(Ppc**(2/3))))/(Tpc**(1/6)))
Hvlg=0.3843*TMABP+1087.8*exp(-MwgRS/100)-98.153
TMeABPx1=TMeABP-(1.3889*a*(Kf-12)*log(0.0098684*Pg1))
TMeABPx2=TMeABP-(1.3889*a*(Kf-12)*log(0.0098684*Pg2))
TMeABPx3=TMeABP-(1.3889*a*(Kf-12)*log(0.0098684*Pg3))
omega1=(TMeABPx1/Tv1-0.00051606*TMeABPx1)/(748.1-0.3861*TMeABPx1)
omega2=(TMeABPx2/Tv2-0.00051606*TMeABPx2)/(748.1-0.3861*TMeABPx2)
omega3=(TMeABPx3/Tv3-0.00051606*TMeABPx3)/(748.1-0.3861*TMeABPx3)
Pg1=IF (omega1>0.0022) 0.133322*10**((3000.538*omega1-
6.761560)/(43*omega1-0.987672))
ELSEIF (omega1>=0.0013 AND omega1<=0.0022)
0.133322*10**((2663.129*omega1-5.994296)/(95.76*omega1-0.972546))
ELSE 0.133322*10**((2770.085*omega1-6.412631)/(36*omega1-0.989679))
Pg2=IF (omega2>=0.0022) 0.133322*10**((3000.538*omega2-
6.761560)/(43*omega2-0.987672))
ELSEIF (omega2>0.0013 AND omega2<0.0022)
0.133322*10**((2663.129*omega2-5.994296)/(95.76*omega2-0.972546))
ELSE 0.133322*10**((2770.085*omega2-6.412631)/(36*omega2-0.989679))
Pg3=IF (omega3>=0.0022) 0.133322*10**((3000.538*omega3-
6.761560)/(43*omega3-0.987672))
ELSEIF (omega3>0.0013 AND omega3<0.0022)
0.133322*10**((2663.129*omega3-5.994296)/(95.76*omega3-0.972546))
ELSE 0.133322*10**((2770.085*omega3-6.412631)/(36*omega3-0.989679))
```

(Tv1+Clg)*(Alg-log(Pg1))-Blg=0 (Tv2+Clg)*(Alg-log(Pg2))-Blg=0 (Tv3+Clg)*(Alg-log(Pg3))-Blg=0 EXPAND_BLOCK (i IN 1,15) Kg[i]=0.000001*(1.9469-0.374*MwgRS+(0.0014815*MwgRS**2)+0.1028*TgRS[i]) //Kg[i] hpRS[i]=0.03*(Kg[i]/(dc**(2/3)))*(((abs(vgRS[i]vcRS[i])*dengRS[i]*egRS[i])/(viscgRS[i]))**(1/3)) END EXPAND_BLOCK

--SECCIÓN DE VAPORIZACIÓN DE LA ALIMENTAACIÓN

--Estado cuasi estacionario. Operación adiabática.

```
TcFS=TcCL1-(Flg/(FcCL1*Cpcm)*(Cplgm*(TgFS-Tlg)+((Fds*Cpdsm)/Flg)*(TgFS-
```

Tds))+Hvlg)

```
TgFS=Blg/(Alg-log(PFS*ygoFS))-Clg
```

```
PFS=PRT+(PRS[1]-PRShRS)
```

```
ygoFS=Flg/(Fds+Flg)
```

```
vgFS=(Flg+Fds)/(dengFS*(1-ecCL1)*ARS) //Cálculo de la velocidad del gas
```

```
vcFS=FcCL1/(dcat*ecCL1*ARS)
```

```
dengFS=(PFS*MwgFS)/(R*TgFS*ZgFS)
```

--REACTOR RISER

--Estado cuasi estacionario.

```
--ECUACIONES DEL MOMENTO LINEAL
```

```
EXPAND_BLOCK ( i IN 2,15 )
```

```
tau[i]*vcRS[i]'=((vcRS[i]-vcRS[i-1])/2)+(Gc[i]*(ARS*((ecRS[i]-ecRS[i-
```

```
1])/2)/FcRS))-(CfRS[i]*(vgRS[i]-
```

```
vcRS[i])*ARS/FcRS)+((2*fcRS[i]*vcRS[i])/DRS)+(g/vcRS[i])
```

```
tau[i]*vgRS[i]'=((vgRS[i]-vgRS[i-1])/2)+(ARS*((PRS[i]-PRS[i-1])/2)/FgRS)-
```

```
(CfRS[i]*(vcRS[i]-vgRS[i])*ARS/FgRS)+(2*fgRS[i]*vgRS[i]/DRS)+(g/vgRS[i]) --
```

BLOCK

```
END EXPAND_BLOCK
```



```
tau[1]*vcRS[1]'=(vcRS[1]-vcRS0)/2+(Gc[1]*(ARS*((ecRS[1]-ecRS0)/2)/FcRS))-
(CfRS[1]*(vgRS[1]-vcRS[1])*ARS/FcRS)+((2*fcRS[1]*vcRS[1])/DRS)+(g/vcRS[1])
tau[1]*vgRS[1]'=(vgRS[1]-vgRS0)/2+(ARS*((PRS[1]-PRS0)/2)/FgRS)-
(CfRS[1]*(vcRS[1]-vgRS[1])*ARS/FgRS)+(2*fgRS[1]*vgRS[1]/DRS)+(g/vgRS[1])
PRS0=dengRS[1]*(R*TgRS0/MwgRS)*ZgRS
ecRS0=FcRS/(vcRS0*dcat*ARS)
FcRS=FcCL1
FgRS=Flg+Fds
EXPAND_BLOCK ( i IN 1,15 )
ecRS[i]=FcRS/(vcRS[i]*dcat*ARS)
egRS[i]=1-ecRS[i]
dengRS[i]=FgRS/(egRS[i]*vgRS[i]*ARS)
END EXPAND BLOCK
EXPAND( i IN 1,15) PRS[i]=dengRS[i]*(R*TgRS[i]/MwgRS)*ZgRS //PRS[i] BLOCK
--Calculo de los coeficientes de friccion
EXPAND BLOCK ( i IN 1,15 )
CfRS[i] = IF (egRS[i] <= 0.8)
(150*(((ecRS[i]**2)*viscgRS[i]*dcat)/(((egRS[i]*dc*Sc)**2)*(dcat-
dengRS[i]))))+(1.75*(dengRS[i]*dcat*ecRS[i]*(abs(vgRS[i]-
vcRS[i])))/(egRS[i]*dc*Sc*(dcat-dengRS[i])))
ELSE 3/4*CdRS[i]*((abs(vgRS[i]-vcRS[i])*dcat*dengRS[i]*ecRS[i])/dc*Sc*(dcat-
dengRS[i]))*(egRS[i]**(-2.65))
CdRS[i]=IF (Rec[i]<=1000) (24/Rec[i])*(1+0.15*(Rec[i]**(0.687)))
ELSE 0.44
Rec[i]=(abs(vgRS[i]-vcRS[i])*dc*FgRS)/(viscgRS[i]*vgRS[i]*ARS)
fgRS[i]=IF (Reg[i]<=2100) 16/Reg[i]
ELSEIF (Reg[i]<100000 AND Reg[i]>2100) 0.0791*(Reg[i]**(-0.25))
ELSE 0.0008+0.0552*(Reg[i]**(-0.237))
END EXPAND BLOCK
EXPAND_BLOCK ( i IN 1,15 )
Gc[i]=10**((-8.76*egRS[i])+5.43)
```

```
fcRS[i]=0.05/vcRS[i]
```



END EXPAND_BLOCK

EXPAND(i IN 1,15) Reg[i]=(DRS*vgRS[i]*dengRS[i]*egRS[i])/viscgRS[i]

```
--Cálculo de la fracciñon en peso de los 4 lumps
EXPAND_BLOCK ( i IN 2,15 )
tau[i]*ygoRS[i]'=(ygoRS[i]-ygoRS[i-1])/2-
(dcat*ecRS[i]*ARS*desactc[i]/FgRS)*RgoRS[i]
tau[i]*yglRS[i]'=(yglRS[i]-yglRS[i-1])/2-
(dcat*ecRS[i]*ARS*desactc[i]/FgRS)*RglRS[i]
tau[i]*ygsRS[i]'=(ygsRS[i]-ygsRS[i-1])/2-
(dcat*ecRS[i]*ARS*desactc[i]/FgRS)*RgsRS[i]
tau[i]*yckRS[i]'=(yckRS[i]-yckRS[i-1])/2-
(dcat*ecRS[i]*ARS*desactc[i]/FgRS)*RckRS[i]
tau[i]*ywvRS[i]'=(ywvRS[i]-ywvRS[i-1])/2-
(dcat*ecRS[i]*ARS*desactc[i]/FgRS)*RwvRS[i]
END EXPAND BLOCK
tau[1]*ygoRS[1]'=(ygoRS[1]-ygoRS0)/2-
(dcat*ecRS[1]*ARS*desactc[1]/FgRS)*RgoRS[1]
tau[1]*yglRS[1]'=(yglRS[1]-yglRS0)/2-
(dcat*ecRS[1]*ARS*desactc[1]/FgRS)*RglRS[1]
tau[1]*ygsRS[1]'=(ygsRS[1]-ygsRS0)/2-
(dcat*ecRS[1]*ARS*desactc[1]/FgRS)*RgsRS[1]
tau[1]*yckRS[1]'=(yckRS[1]-yckRS0)/2-
(dcat*ecRS[1]*ARS*desactc[1]/FgRS)*RckRS[1]
tau[1]*ywvRS[1]'=(ywvRS[1]-ywvRS0)/2-
(dcat*ecRS[1]*ARS*desactc[1]/FgRS)*RwvRS[1]
EXPAND BLOCK ( i IN 1,15 )
RgoRS[i] = -(k1RS[i] + k2RS[i] + k3RS[i])*(ygoRS[i] **2)
RgRS[i] = (k1RS[i]*(ygoRS[i]**2)-k4RS[i]*ygRS[i]-k5RS[i]*ygRS[i])
RgsRS[i] = (k2RS[i]*(ygoRS[i]**2)+k4RS[i]*yglRS[i])
RckRS[i]=(k3RS[i]*(ygoRS[i]**2)+k5RS[i]*yglRS[i])
RwvRS[i]=0
desactc[i]=exp(-ac[i]*CckRS[i])
```



ac[i]=aco*(exp(-Ec/(R*TgRS[i])))*((RAN)**ace) k1RS[i]=k1oRS*(exp(-E1RS/(R*TgRS[i]))) k2RS[i]=k2oRS*(exp(-E2RS/(R*TgRS[i]))) k3RS[i]=k3oRS*(exp(-E3RS/(R*TgRS[i]))) k4RS[i]=k4oRS*(exp(-E4RS/(R*TgRS[i]))) k5RS[i]=k5oRS*(exp(-E5RS/(R*TgRS[i]))) CckRS[i]=CckCL1+((FgRS*yckRS[i])/FcRS) END EXPAND_BLOCK --Perfiles de temperatura EXPAND BLOCK (i IN 2,15) tau[i]*TcRS[i]'=((TcRS[i]-TcRS[i-1])/2)-((ARS*hpRS[i]*ApRSe)/(FcRS*Cpc))*(TgRS[i]-TcRS[i]) $tau[i]^TgRS[i]'=((TgRS[i]-TgRS[i-1])/2)$ -((ARS/(FgRS*CpgRS[i]))*(hpRS[i]*ApRSe*(TcRS[i]-TgRS[i])))+(dcat*ecRS[i]*QreactRS[i]) END EXPAND BLOCK tau[1]*TcRS[1]'=((TcRS[1]-TcRS0)/2)-((ARS*hpRS[1]*ApRSe)/(FcRS*Cpc))*(TgRS[1]-TcRS[1]) tau[1]*TgRS[1]'=((TgRS[1]-TgRS0)/2)-((ARS/(FgRS*CpgRS[1]))*(hpRS[1]*ApRSe*(TcRS[1]-TgRS[1])))+(dcat*ecRS[1]*QreactRS[1]) EXPAND_BLOCK(i IN 1,15) QreactRS[i]=-((H1RS*k1RS[i]*(ygoRS[i]**2))+(H2RS*k2RS[i]*(ygoRS[i]**2))+(H3RS*k3RS[i]*(y goRS[i]**2))+(H4RS*k4RS[i]*yglRS[i])+(H5RS*k5RS[i]*yglRS[i]))*desactc[i] END EXPAND BLOCK

```
--SECCIÓN DE DISENGAGING-STRIPPING
CckST=CckSTo+Ksso*exp(-(Ess*FcRS*Fss/Flg))
CckRT'=FcRS/wcRT*(CckRSsal+CckST-CckRT)
wgRT'=FgRS*(1-yckRSsal)+Fss-FgRT-(FcRS*CckST)
wcRT'=FcRS-FcSV2-FcMF
```



ygoRT'=(1/wgRT)*(ygoRSsal*(FgRS-(FcRS*CckST/(ygoRSsal+yglRSsal+ygsRSsal)))-ygoRT*(FgRT+wgRT')) yglRT'=(1/wgRT)*(yglRSsal*(FgRS-(FcRS*CckST/(ygoRSsal+yglRSsal+ygsRSsal)))yglRT*(FgRT+wgRT')) ygsRT'=(1/wgRT)*(ygsRSsal*(FgRS-(FcRS*CckST/(ygoRSsal+yglRSsal+ygsRSsal)))-ygsRT*(FgRT+wgRT')) ywvRT=1-ygoRT-yglRT-ygsRT YconvRT=1-(FgRS*ygoRT/Flg) (wcRT*Cpc+wgRT*CpgRT)*TRT'=Fss*Hss+Fds*Hds-((Fss+Fds)*HwvRTsal)+FcRS*(HcRTent-HcRTsal)+((FgRS-Fds)*(HhgRTent-HhgRTsal))-Fss*HstripST+QlossRT Hss=Cpwvm*(Tss-Tref) Hds=Cpwvm*(TgRSsal-Tref) HhgRTent=Cphgm*(TgRSsal-Tref) HhgRTsal=Cphgm*(TRT-Tref) HcRTent=Cpcm*(TcRSsal-Tref) HcRTsal=Cpcm*(TRT-Tref) HwvRTsal=Cpwvm*(TRT-Tref) QlossRT=URT*ARTe*(Te-TRT) PRT=(wgRT*R*TRT/(MwgRT*VgRT))*ZgRT VgRT=VRT-(wcRT/dcat) PRTb=PRT+(((wcRT-wcCY1)*g*(hRT+hST))/(1000*VRT)) --CICLONES DEL REACTOR

```
wcCY1=(denbCY1*NCY1/ACY1d)*((rtoCY1*vcCY1*wcRT*ACY1i/(KvCY1*VRT))**2
)
vcCY1=9*viscgRT*ACY1i/((dcm**2)*PI*NtCY1*(dcat-wgRT/VgRT)*hCY1i)
FcMF=(1-rtoCY1)*vcCY1*ACY1i*(wcRT/VRT)*NCY1
FgRT=KvMF*sqrt(PRT-PMF)
FhgRT=FgRT*(1-ywvRT)
```

```
ygsRSsal=ygsRS[15]
ygoRSsal=ygoRS[15]
```



```
yglRSsal=yglRS[15]
yckRSsal=yckRS[15]
TcRSsal=TcRS[15]
TgRSsal=TgRS[15]
--PRS0=PRS[1]
PRShRS=PRS[15]
CckRSsal=CckRS[15]
TcRS0=TcFS
TgRS0=TgFS
vcRS0=vcFS
vgRS0=vgFS -
ygoRS0=1-((Flg*Ycc+Fds)/FgRS)
vglRS0=0
ygsRS0=0
yckRS0=(Flg*Ycc)/FgRS
ywvRS0=Fds/FgRS
```

END COMPONENT

3.3.-Simulación y Experimentos

Una vez que está escrito y compilado el modelo, se genera una partición. Cuando se ha creado la partición, se implementa un experimento en Ecosim, como se detalla a continuación:

```
EXPERIMENT exp1 ON riser.viernes1agosto
DECLS
OBJECTS
INIT
-- initial values for state variables
TgRS[01] = 675
vcRS[01] = 3
vgRS[01] = 10
ygoRS[01] = 0.95
ygsRS[01]=0.01
ygIRS[01]=0.1
vckRS[01]=0.01
ywvRS[01]=0.1
vcRS[02] = 9
vcRS[03] = 11.3
vcRS[04] = 12.1
```



vcRS[05] = 12.5
$v_{\rm c} RS[06] - 13.8$
$v_{0} PS[07] = 13.0$
$v_{\rm CNS}[07] = 14$ $v_{\rm CNS}[09] = 14.2$
VCKS[00] = 14.3
VCKS[09] = 15
VCRS[10] = 15.5
vcRS[11] = 16
vcRS[12] = 16.3
vcRS[13] = 16.8
vcRS[14] = 17
vcRS[15] = 17.4
vgRS[02] = 7.9
vgRS[03] = 11
vgRS[04] = 11.9
vgRS[05] = 12.1
vgRS[06] = 13.4
$v_{g}RS[07] = 19.6$
$v_{\rm g} RS[07] = 13.0$ $v_{\rm g} RS[08] = 13.0$
vgRS[00] = 13.7 vgRS[00] = 14.6
vgRS[09] = 14.0 vgRS[10] = 15.1
vgKS[10] = 13.1
VgKS[11] = 15.0
vgRS[12] = 15.9
vgRS[13] = 16.4
vgRS[14] = 16.6
vgRS[15] = 17
ygoRS[02] = 0.8
ygoRS[03] = 0.68
ygoRS[04] = 0.55
ygoRS[05] = 0.5
vgoRS[06] = 0.46
vgoRS[07] = 0.4
$v_{0}RS[08] = 0.39$
$v_{0} RS[00] = 0.39$
ygoRS[07] = 0.30 ygoRS[10] = 0.37
yg0KS[10] = 0.37
yg0KS[11] = 0.50
ygoRS[12] = 0.35
ygoRS[13] = 0.34
ygoRS[14] = 0.33
ygoRS[15] = 0.32
yg[RS[02] = 0.1
yg[RS[03] = 0.2
ygIRS[04] = 0.3
vgRS[05] = 0.32
vg[RS[06] = 0.34
vg[RS[07] = 0.36
voRS[08] = 0.36
$v_0 RS[00] = 0.30$
$y_0 [RS[10] = 0.37$
ygins[10] = 0.37
ygIRS[11] = 0.38



ygIRS[13] = 0.40
ygIRS[14] = 0.41
yg[RS[15] = 0.42
ygsRS[02] = 0.01
vgsRS[03] = 0.01
vgsRS[04] = 0.02
vgsRS[05] = 0.03
vgsRS[06] = 0.04
ygsRS[07] = 0.05
$v_{0} = 0.05$ $v_{0} = 0.06$
$v_{00} RS[00] = 0.00$
ygsRS[07] = 0.07 ygsRS[10] = 0.08
ygsRS[10] = 0.00
ygsKS[11] = 0.09
ygsKS[12] = 0.1
ygsRS[13] = 0.11
ygsRS[14] = 0.12
ygsRS[15] = 0.13
yckRS[02] = 0.01
yckRS[03] = 0.02
yckRS[04] = 0.02
yckRS[05] = 0.02
yckRS[06] = 0.02
yckRS[07] = 0.02
yckRS[08] = 0.03
yckRS[09] = 0.03
yckRS[10] = 0.03
yckRS[11] = 0.04
yckRS[12] = 0.04
yckRS[13] = 0.04
yckRS[14] = 0.04
yckRS[15] = 0.04
ywvRS[02] = 0.1
ywvRS[03] = 0.1
ywvRS[04] = 0.1
ywvRS[05] = 0.1
vwvRS[06] = 0.1
vwvRS[07] = 0.1
vwvRS[08] = 0.1
vwvRS[09] = 0.1
vwvRS[10] = 0.1
vwvRS[11] = 0.1
VRS[11] = 0.1 VRVRS[12] = 0.1
ywvRS[12] = 0.1
ywvRS[13] = 0.1
ywvKS[14] = 0.1
$y w v \mathbf{N} \mathbf{S} [13] = 0.1$ $\mathbf{T}_{\alpha} \mathbf{D} \mathbf{S} [02] = 700$
1gKS[02] = 780
1gKS[03] = 800
1gKS[04] = 810
TgKS[05] = 810
TgRS[06] = 809



TgRS[07] = 808
TgRS[08] = 807
TgRS[09] = 806
TgRS[10] = 805
TgRS[11] = 804
TgRS[12] = 803
TgRS[13] = 802
$T_{g}RS[14] = 801$
$T_{2}RS[15] = 800$
$T_{c}RS[01] = 915$
$T_{c}RS[02] = 860$
$T_{c}RS[03] = 840$
$T_{c}RS[04] = 830$
$T_{c}RS[05] = 825$
$T_{c}RS[06] = 820$
$T_{c}RS[07] = 815$
$T_{c}RS[08] = 810$
$T_{c}PS[00] = 808$
$T_{c}RS[10] = 807$
$T_{c}RS[11] = 806$
$T_{c}PS[12] = 805$
$T_{c}PS[12] = 803$
$T_{c}PS[14] = 802$
$T_{c}PS[15] = 802$
$C_{ck}PT = 0.000$
UCKR1 = 0.009
$w_{g} RT = 463$
WCRT = 38000
ygOKT = 0.27
ygIKI = 0.51
ygSK1 = 0.14 TDT = 797
$IKI = /\delta/$
initial values for algebraics
Pg2 = 106
PgI = 100
Pg3 = 100
Alg = 4
Blg = 1000
BOUNDS
Set equations for boundaries: bound Var = $f(TIME;)$
ACY1d = 0.1257
ACY11 = 0.32
ARTe = 136.188
ApRSe = 85714
CckCL1 = 0.001
FcRS = 310
FcSV2 = 300
Flg = 49.3
PMF = 100
TcCL1 = 990
WcCY1 = 50000



ZgFS = 0.3ZgRS = 0.3ZgRT = 0.3dcm = 0.00002denbCY1 = 350ecCL1 = 0.5BODY -- report results in file reportAll.rpt REPORT_TABLE("reportAll.rpt", "*") -- Set the tolerances (relative and absolute); $REL_ERROR = 1e-006$ $ABS_ERROR = 1e-006$ -- Integrate the model TIME = 0TSTOP = 0.01IMETHOD=DASSL CINT = 0.1INTEG() END EXPERIMENT

Se debe alcanzar estado estacionario de todas las variables para estudiar cómo afecta

la variación de algunas de ellas al sistema.



4.- BIBLIOGRAFÍA

[1]

http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/TextosOnline/EnciclopediaOIT/to mo3/78.pdf

[2] <u>http://www.repsol.com/es_es/corporacion/conocer-repsol/canal-tecnologia/aplicamos-</u> nuevas-tecnologias/refino-productos/procesos-conversion.aspx

[3] Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process Modeling, Simulation, and control. Ind. Eng. Chem. Res. 2012, 51, 1-29.

[4] (Modeling and simulation of Fluid catalytic cracking unit - Gupta Rajkumar Satyapal).

[5] *Tesis: Simulación del proceso fcc: caracterización de las corrientes de alimentación y productos del riser a través de la función de distribución gamma.* Ma. guadalupe félix flores.

[6] Modeling and simulation of fluid catalytic cracking unit. Gupta Rajkamar Satyapal.

[7] *Model for the performance of a fluid catalytic cracking (FCC) riser reactor: effect of feed atomization.* Ajay Gupta, D. Subba Rao. Chemical Engineering Science 56 (2001) 4489–4503

[8] *Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process Modeling, Simulation, and Control.* Ind.Eng.Chem.Res. 2012, 51, 1-29)

[9] Dynamic modeling and simulation of a fluidized catalytic cracking process. Part I: Process modeling. In-Su Han, Chang-Bock Chung*. Chemical Engineering Science 56 (2001) 1951}1971.

[10] Dynamic modeling and simulation of a #uidized catalytic cracking process. Part II: Property estimation and simulation. In-Su Han, Chang-Bock Chung*. Chemical Engineering Science 56 (2001) 1973}1990