

UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI
ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“DESARROLLO DE MODELOS DE REGRESIÓN QUE
REPRESENTEN EL COMPORTAMIENTO DEL NÚMERO
DE OCTANO Y RENDIMIENTO DEL REFORMADO DE LA
UNIDAD DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA (U-20)
DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ-PDVSA”**

REALIZADO POR:

RUBISELA MARÍA CASTILLO MANAURE

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO ANTE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE
COMO REQUISITO PARCIAL PARA OPTAR AL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

Barcelona, Marzo de 2010

UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI
ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“DESARROLLO DE MODELOS DE REGRESIÓN QUE
REPRESENTEN EL COMPORTAMIENTO DEL NÚMERO
DE OCTANO Y RENDIMIENTO DEL REFORMADO DE LA
UNIDAD DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA (U-20)
DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ-PDVSA”**

Ing. Quím. Ronald Arias

Asesor Académico

Firma

Ing. Quím. Diego Astudillo

Asesor Industrial

Firma

Barcelona, Marzo de 2010

UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI
ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“DESARROLLO DE MODELOS DE REGRESIÓN QUE
REPRESENTEN EL COMPORTAMIENTO DEL NÚMERO
DE OCTANO Y RENDIMIENTO DEL REFORMADO DE LA
UNIDAD DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA (U-20)
DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ-PDVSA”**

Ing. Quím. Ronald Arias
Asesor Académico

Ing. José Cermeño
Jurado Principal

Ing. Fidelina Moncada M.Sc
Jurado Principal

Barcelona, Marzo de 2010

RESOLUCIÓN

De acuerdo con el reglamento de Trabajos de Grado de la Universidad de Oriente:

“Los trabajos de Grado son propiedad de la Universidad de Oriente y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, el cual participará al Consejo Universitario”

DEDICATORIA

A Dios mi creador, mi guía, mi fortaleza.

A mi madre Graciela Manaure, eres el más bello ejemplo de fortaleza, de superación, de lucha por alcanzar metas y seguir adelante, a pesar de que pasé por muchos obstáculos tú me diste la fuerza para no dejarme vencer y me hiciste ver que siempre se puede hallar un camino. Eres como madre la mejor! y como amiga eres excepcional, estoy muy muy orgullosa de ti, y me siento feliz de saber que cuento con la mejor aliada para ese gran camino que me espera. Te amo mucho mami, esto es sin dudas tuyo también.

A mi padre Rubén Castillo, que a pesar de estar siempre lejos de casa trabajando para que nunca nos faltara nada, sé que puedo contar contigo en lo que quiera y que en cualquier problema que se me presente estarás allí para ayudarme. Te amo mucho y este triunfo es tuyo también.

A mis hermanos: Rubén, Igor y Graciela; les dedico a ustedes mi triunfo de hoy porque este también es de ustedes, así como yo siento que sus logros son los míos y su felicidad también es la mía. Los adoro!

A mi novio hermoso Horacio Ruiz, eres mi fuerza, mis ganas de triunfar, mis ganas de seguir adelante, mi esperanza cuando creo que no la hay, mi refugio, mis ganas de reír, eres tantas cosas lindas en mi vida que le doy gracias a Dios por haberte puesto en mi camino. Gracias por tanto amor incondicional y comprensión que recibo de ti cada día, y por estar conmigo en todo momento. Este es nuestro triunfo! Te amo con todo mi corazón.

AGRADECIMIENTO

A Dios todopoderoso por acompañarme en todo momento, por darme una segunda oportunidad de vida llena de tantas cosas maravillosas y por colocar en mi camino a tantas personas espectaculares que hacen mi vida más hermosa cada día. Gracias.

A mi familia por estar siempre pendiente de todos mis pasos para lograr mis metas, porque me han apoyado enormemente en el desarrollo de mi tesis, gracias de todo corazón familia, ustedes son mi motivo, que Dios los bendiga.

A la Universidad de Oriente por permitirme la formación profesional y por ser mi casa de estudio, y a todos los profesores que formaron parte de mi preparación como Ingeniero Químico.

A mi asesor académico Ronald Arias por el gran apoyo y la ayuda recibida durante todo este período, por confiar en mí y darme ánimos para la culminación de este trabajo de grado, gracias por haber sido un gran asesor.

A mi asesor industrial Diego Astudillo por darme la oportunidad de realizar este trabajo que hoy me hace ser Ingeniero. Gracias por abrirme el camino para realizar esta pasantía y poder adquirir la gran experiencia que hoy me llevo conmigo. Mil gracias por confiar en mí para el desarrollo de este trabajo y por toda la ayuda recibida.

A mis amigos y compañeros de estudios y de pasantía con los que compartí no solo mi tiempo de estudio sino una gran amistad: Adriana, Graciela, Vicky, Yulby, Daniela, Astrid, José M., José P., Martha, Kelly, Melisa, Livinel, Harold; mil gracias

por ser las personas que son, por su ayuda incondicional en todo lo que necesité, por darme ánimo en los momentos difíciles, por preocuparse por mí, por sus consejos, por ayudarme en aquellos momentos de desesperación que fueron bastantes. A todos gracias de corazón por los buenos momentos compartidos, los quiero mucho.

A todo el personal de Refinería desde superintendentes hasta operadores e ingenieros, quienes me ayudaron en todo momento; David Lugo, Luis González, Carmen Gil, Yamilet Mago, Douglas Urbina, José Ruiz, Alejandra Ávila, los instrumentistas y todos y cada unos de los operadores de servicios industriales y de Hidroprocesos. A todos mil gracias por el cariño que recibí de cada uno de ustedes.

En general a todas las personas que formaron parte del desarrollo de esta tesis y que no son menos importantes por no ser nombradas aquí. A TODOS GRACIAS.

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrollaron modelos de regresión para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND) de la unidad de reformación catalítica de nafta de la refinería Puerto La Cruz, con el propósito de obtener una ecuación que describa satisfactoriamente el comportamiento de estos parámetros a través de la unidad ante variaciones tanto en la alimentación como en las variables de proceso. Inicialmente, se procesaron los datos operacionales de la unidad y se graficaron cada una de las variables entre ellas la gravedad API, temperatura del lecho catalítico, y las temperaturas y presiones de los tambores de recontacto, presentes en las secciones de alimentación, reacción, separación, recontacto y estabilización (variables independientes) con las variables RONC y REND (variables dependientes) seleccionando aquellas variables que presentaran un grado de relación lineal con las variables dependientes; resultando seleccionadas 17 y 20 variables para el RONC y REND respectivamente. Luego se procedió a realizar una matriz de correlación para verificar si las variables independientes presentaban o no problemas de multicolinealidad, teniéndose que entre los datos si existía multicolinealidad que según el criterio del valor de K tiene una severidad de moderada a fuerte. Para solucionar la existencia de este problema, se aplicó el análisis de los componentes principales (C.P), mediante el cual fue posible reducir la dimensionalidad del conjunto de datos interrelacionados; para ello se seleccionaron las componentes principales, bajo el criterio del porcentaje de la variabilidad explicada acumulada, teniéndose 9 y 10 componentes para el RONC y REND respectivamente, las cuales fueron sometidas a un análisis de mínimos cuadrados parciales obteniéndose así los coeficientes de estimación necesarios para la construcción de los modelos de regresión, donde el RONC obtuvo un coeficiente de determinación (R^2) de 0,4077 y para el REND fue de 0,8207. Finalmente, se realizó un análisis de sensibilidad a ambos modelos, aplicando el método por pasos, para reducir el número de variables y

mejorar los estadísticos de regresión, suprimiéndose 8 variables para el RONC y 6 para el REND, teniéndose que para ambos parámetros el mejor modelo que describió su comportamiento fue el obtenido por éste método.

.

CONTENIDO

RESOLUCIÓN	iv
DEDICATORIA	v
AGRADECIMIENTO	vi
RESUMEN.....	viii
CONTENIDO	x
LISTA DE TABLAS	xv
LISTA DE FIGURAS	xvi
CAPITULO I.....	18
INTRODUCCIÓN	18
1.1. Presentación de la empresa	18
1.2. Refinería Puerto La Cruz (RPLC).....	19
1.2.1 Breve reseña histórica	19
1.2.2. Descripción general.....	19
1.2.3 Ubicación geográfica	21
1.2.4 Procesos	22
1.2.4.1 Unidades de proceso	22
1.2.4.2 Unidades de tratamiento.....	23
1.2.4.3 Servicios industriales	23
1.2.4.4 VALCOR (unidades de hidrotratamiento).....	24
1.3 Planteamiento del problema.....	25
1.4 Objetivos	26
1.4.1 Objetivo General	26
1.4.2 Objetivos específicos	26
CAPITULO II	28
MARCO TEÓRICO.....	28
2.1 Antecedentes	28

2.2 Reformación catalítica de nafta.....	29
2.2.1 Generalidades de la reformación catalítica de nafta	29
2.2.2 Unidad de reformación catalítica de nafta de la RPLC.....	30
2.2.3 Descripción del proceso de la unidad 20.....	31
2.2.3.1. Sección de alimentación.....	31
2.2.3.2. Sección de reacción.....	32
2.2.3.3. Sección de separación	32
2.2.3.4. Sección de re-contacto	33
2.2.3.5. Sección de estabilización	34
2.3 Características de la alimentación del proceso de reformación catalítica.....	34
2.3.1. Gravedad API.....	35
2.3.2. Destilación ASTM	35
2.3.2.1. Punto inicial de ebullición (IBP).....	36
2.3.2.2 Punto final de ebullición (EBP)	36
2.3.3 Análisis PONA.....	37
2.3.4 Contenido de impurezas.....	38
2.4 Características del reformado.....	39
2.4.1 Rendimiento	40
2.4.2 Número de octano	40
2.4.3 Presión de vapor Reid (RVP).....	41
2.4.4 Contenido de benceno	41
2.4.5 Punto final de ebullición (EBP)	42
2.5 Equipos principales que conforman la unidad 20	43
2.5.1 Reactor	43
2.5.2 Separadores y tambores.....	44
2.5.3 Torre Desbutanizadora	46
2.6 Química del proceso de reformación	47
2.6.1 Principales reacciones de la reformación catalítica	47
2.6.1.1 Deshidrogenación de naftenos	47

2.6.1.2 Isomerización de naftenos y parafinas	48
2.6.1.3 Deshidrociclización de parafinas	49
2.6.1.4 Hidrocraqueo.....	49
2.6.2 Catalizador de reformación catalítica.....	50
2.7 Variables principales de la reformación catalítica	52
2.7.1 Temperatura del reactor	52
2.7.2 Velocidad espacial	52
2.7.3 Presión del reactor.....	53
2.7.4 Relación de hidrógeno/hidrocarburo.....	53
2.8 Efectos de las variables de operación sobre la calidad del producto	54
2.8.1 Temperatura del reactor	54
2.8.2 Presión del reactor.....	55
2.8.3 Velocidad espacial	55
2.8.4 Relación hidrógeno/ hidrocarburo	56
2.9 Estadística de regresión.....	57
2.9.1 Regresión lineal y correlación.....	57
2.9.2 Regresión lineal múltiple	57
2.9.3 Estimación de los parámetros del modelo de regresión.....	58
2.10 Parámetros estadísticos	59
2.10.1 Coeficiente de determinación (R^2)	59
2.10.2 Coeficiente de correlación (R)	60
2.10.3 Análisis de varianza	61
2.11 La multicolinealidad o alta correlación.....	63
2.12 Regresión con componentes principales	65
2.13 Statistical package for social sciences (SPSS).....	66
CAPITULO III.....	67
DESARROLLO DEL PROYECTO	67

3.1 Procesamiento de los datos operacionales de la sección de alimentación, reacción, separación, recontacto y estabilización de la unidad de reformación (U-20)	67
3.1.1 Revisión bibliográfica	67
3.1.2 Procesamiento de los datos de proceso	67
3.2 Selección de las variables a utilizar para el diseño de los modelos de regresión	73
3.3 Elaboración de la matriz de correlación con las variables involucradas en el desarrollo de los modelos matemáticos	76
3.3.1 Análisis, autovalores y factores infladores de varianza (V.I.F) de la matriz de correlación ($X^T X$)	79
3.3.2 Determinante de la matriz ($X^T X$)	80
3.4 Obtención de los modelos matemáticos mediante métodos estadísticos, respecto al número de octano y rendimiento del reformado	81
3.4.1 Selección de los componentes principales	81
3.4.2 Estimación de los modelos de regresión	83
3.5 Realización del análisis de sensibilidad a los modelos matemáticos obtenidos para los parámetros de calidad en estudio	85
3.6 Cálculo del porcentaje (%) de error relativo	86
CAPITULO IV	89
DISCUSIÓN DE RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	89
4.1 Variables de proceso seleccionadas para el desarrollo de los modelos matemáticos	89
4.1.1 Sección de alimentación	89
4.1.2 Sección de reacción	92
4.1.3 Sección de separación	93
4.1.4 Sección de recontacto	94
4.1.5 Sección de estabilización	96
4.2 Análisis del problema de multicolinealidad	98

4.2.1 Matriz de correlación	100
4.2.2 Autovalores y determinante de la matriz de correlación.....	101
4.2.3 Valores infladores de varianza (VIF).....	102
4.3 Análisis y selección de los componentes principales (C.P).....	103
4.4 Modelo de regresión obtenido por regresión cp para el número de octano y rendimiento del reformado.....	105
4.5 Análisis de sensibilidad a los modelos matemáticos obtenidos para los parámetros de calidad en estudio	108
4.6. Conclusiones	112
4.7. Recomendaciones.....	114
BIBLIOGRAFÍA	115
METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO	118

LISTA DE TABLAS

Tabla 1.1 Características de las unidades de destilación atmosféricas de la Refinería Puerto La Cruz.	22
Tabla 1.2 Unidades principales del proyecto VALCOR.....	24
Tabla 2.1 Características de la alimentación a reformación. ^[8]	39
Tabla 2.2 Características de los productos de la reformación. ^[8]	42
Tabla 2.3 Condiciones básicas de las reacciones de reformación catalítica. ^[8]	51
Tabla 2.4 Efectos de las variables de operación.	56
Tabla 2.5 Análisis de varianza para la significancia de la regresión lineal múltiple. ^[19]	62
Tabla 3.1 Variables operacionales de la sección de alimentación y reacción para los meses sometidos a estudio.	71
Tabla 3.2 Algunas funciones definidas para matrices por MATLAB.	80
Tabla 4.1 Coeficiente de determinación (R^2) y de correlación (R) de las variables independientes graficadas, asumiendo linealidad.	90
Tabla 4.2 Variables seleccionadas para la construcción de los modelos de regresión.	99
Tabla 4.3 Variables regresoras con problemas de multicolinealidad.....	100
Tabla 4.4 Determinante de la matriz de correlación y valor crítico de K para ambas variables dependientes.	102
Tabla 4.5 Componentes principales seleccionadas para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND).	104
Tabla 4.6 Parámetros estadísticos obtenidos en ambos métodos para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND).	107

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Dieta y productos de la Refinería Puerto La Cruz. ^[2]	20
Figura 1.2 Ubicación geográfica de la Refinería Puerto La Cruz.	21
Figura 2.1 Dinámica de las corrientes en los reactores de reformación catalítica de nafta.....	43
Figura 2.2 Separador Vertical. ^[15]	45
Figura 2.3 Esquema de flujo en los platos de la desbutanizadora. A) platos en la zona de enriquecimiento. B) platos en la zona de agotamiento. ^[16]	46
Figura 3.1 Vista de la zona de reacción de la unidad de reformación a través del programa Aspen Process Explorer.....	69
Figura 3.2 Diagrama de bloque de los equipos y secciones que conforman la unidad de Reformación.....	70
Figura 3.3 Gráfica de dispersión entre el RONC y API (ejemplo).....	73
Figura 3.4 Ajuste lineal de la relación RONC Vs API (ejemplo).....	74
Figura 3.5 Vista de la ventana de escogencias de análisis en el editor de datos.....	76
Figura 3.6 Vista de la ventana para la regresión lineal en el SPSS.....	77
Figura 3.7 Vista de la matriz generada por el programa SPSS en la ventana <i>visor</i>	78
Figura 3.8 Vista del cuadro de diálogo “Estadísticos” del menú regresión lineal en el SPSS.....	79
Figura 3.9 Vista de la ventana principal de MATLAB para el cálculo de la determinante de la matriz.....	81
Figura 3.10 Vista de las componentes principales (C.P) generadas por el software estadístico <i>R</i>	83
Figura 3.11 Vista del menú “Paquetes” en el software <i>R</i>	84
Figura 3.12 Vista del cuadro de diálogo “Método” del menú regresión lineal en el SPSS.....	86

Figura 4.1 Ajuste lineal de la relación RONC Vs IBP.....	89
Figura 4.2 Ajuste lineal de la relación REND Vs API.....	91
Figura 4.3 Ajuste lineal de la relación RONC Vs WAIT.	92
Figura 4.4 Ajuste lineal de la relación RONC Vs Tsep.	93
Figura 4.5 Ajuste lineal de la relación RONC Vs Psep.	94
Figura 4.6 Ajuste lineal de la relación REND Vs P D-2005.....	96
Figura 4.7 Ajuste lineal de la relación RONC Vs TentDeC4.	96

CAPITULO I

INTRODUCCIÓN

1.1. Presentación de la empresa

El 1° de enero de 1976, nació Petróleos de Venezuela S.A (PDVSA) como una de las corporaciones energéticas más importantes del mundo que se encarga del desarrollo de la industria petrolera, petroquímica y carbonífera, además de planificar, coordinar, supervisar y controlar las actividades operativas de sus divisiones. También lleva a cabo actividades de exploración, producción, manufactura, transporte y mercadeo de los hidrocarburos, de manera eficiente, rentable, segura, transparente y comprometida con la protección ambiental.

PDVSA se encuentra entre las primeras compañías energéticas en capacidad de refinación con un sistema que le permite procesar 3,3 millones de barriles diarios de crudo, distribuidos en seis complejos en Venezuela y la participación en una refinería en el Caribe, ocho en los Estados Unidos y nueve en Europa.

A finales de 1997, la corporación energética venezolana creó la empresa de PDVSA petróleo y gas, la cual está constituida por cuatro grandes divisiones, dedicadas a las actividades medulares del negocio: PDVSA exploración y producción, PDVSA gas, PDVSA manufactura y mercadeo y PDVSA servicios. Actualmente se encuentra dividida en cuatro grandes sectores: Occidente, Centro, Oriente y Sur. La zona PDVSA Oriente está conformada por cinco distritos operacionales que son: Puerto La Cruz, San Tomé, Punta de Mata, Anaco y Maturín.

1.2. Refinería Puerto La Cruz (RPLC)

1.2.1 Breve reseña histórica

En el año 1948 la empresa Venezuelan Gulf Refining Co. (VENGREF) inició la construcción de la Refinería Puerto La Cruz, utilizando el puerto de Guanta para recibir los materiales y equipos necesarios para su instalación. En 1950, inicia sus operaciones con la unidad de destilación atmosférica n° 1 (DA-1), con la capacidad de procesar 44 mil barriles por día (44 MBD), la unidad de polimerización de gasolina y la planta de tratamiento para productos blancos (gasolina y kerosén).

Paralelamente a la VENGREF, la compañía petrolera Sinclair de Venezuela Oil, optó por construir una refinería en Venezuela, trasladando desde Houston-Texas una de sus refinerías para instalarla en el Chaure a la orilla de la Bahía de Bergantín, a 5 Km de Puerto La Cruz, con una unidad de destilación atmosférica conocida como DA-3; y en el año de 1950, la empresa Phillips Petroleum inició también la construcción de la refinería San Roque, ubicada a 40 Km de Anaco.

Durante los años 1955 a 1962, se instalaron nuevas unidades orientadas a aumentar la capacidad de procesamiento de los crudos pesados y asimismo, aumentar el volumen de gasolina de alto octanaje.

1.2.2. Descripción general

La RPLC es uno de los centros de procesamientos de crudo más importantes de PDVSA e integra un circuito de manufactura del petróleo extraído en los campos de los estados Monagas y Anzoátegui.

Esta planta abarca tres áreas operacionales: Puerto La Cruz, El Chaure y San Roque, ubicadas en el Norte y centro del estado Anzoátegui, con una capacidad nominal para procesar 180 MBD de crudo (45% corresponde a crudo pesado) en sus tres unidades de destilación, de los cuales se obtienen 73 mil barriles de gasolina y nafta, 12 mil barriles de kerosene-jet, 43 mil barriles de gasoil y 73 mil barriles de residual, insumos y requeridos para la mezcla de combustibles comercializados en los mercados internos y de exportación.

La figura 1.1 muestra la variedad en la dieta de la Refinería, así como los principales crudos que en ella se procesan.

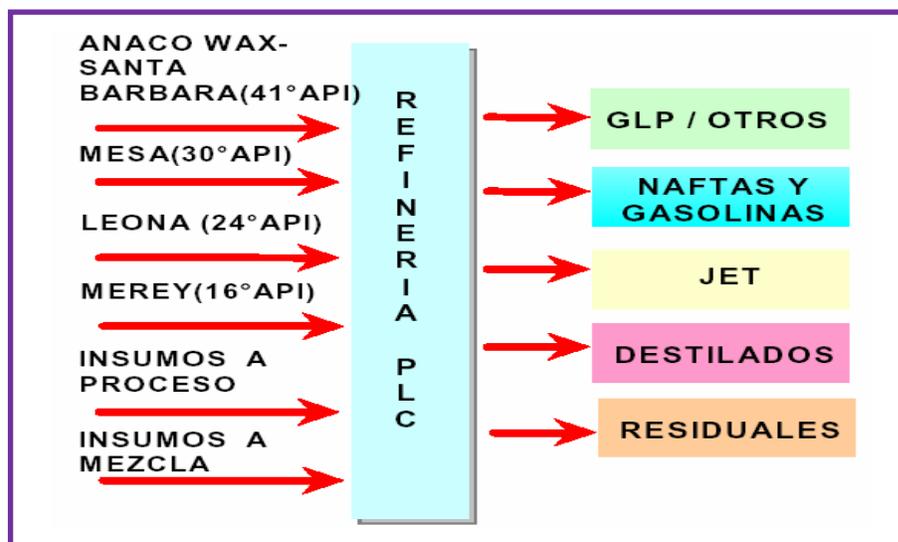


Figura 1.1 Dieta y productos de la Refinería Puerto La Cruz. ^[2]

Como insumos a procesos se usan principalmente: isobutano, nafta pesada, gasóleo de vacío y residuo desparafinado; y los insumos a mezcla: gas natural, gasolina natural, naftas, alquilato, gasolinas sin plomo y destilados.

1.2.3 Ubicación geográfica

Está ubicada en la costa Nor-Oriental del país, específicamente al Este de la ciudad de Puerto La Cruz en la calle El Taladro del sector el Pensil; municipio Sotillo del estado Anzoátegui, con una latitud Norte de $10^{\circ} 14' 33''$ y una longitud Oeste de $64^{\circ} 37' 48''$; tiene facilidades de acceso desde el Mar Caribe y esta conectada por oleoductos con los campos de producción de Oriente, como se observa en la figura 1.2.



Figura 1.2 Ubicación geográfica de la Refinería Puerto La Cruz.

Por su ubicación geográfica, es un complejo refinador estratégico que cumple con los siguientes roles principales:

- ◆ Suplir la demanda del mercado interno de la región Sur-Oriental del país.

- ◆ Colocar los productos excedentes en el mercado de exportación.
- ◆ Manejar y distribuir la producción de crudos del Oriente del país hasta los mercados de exportación y a las otras filiales.

1.2.4 Procesos

La RPLC está constituida por unidades de proceso, unidades de tratamiento y recuperación de azufre, servicios industriales, sistemas de almacenaje y distribución de crudo y productos, además cuenta con una sección llamada valorizaciones de corriente (VALCOR) donde se encuentran las unidades de hidrotreatmento.

1.2.4.1 Unidades de proceso

- Unidades de destilación atmosféricas (DA)

El complejo de destilación atmosférica de la RPLC, está conformado por tres unidades cuyas características más importantes se citan en la tabla 1.1.

Tabla 1.1 Características de las unidades de destilación atmosféricas de la Refinería Puerto La Cruz.

Unidades de destilación	Capacidad de diseño, MBD	Crudos Procesados	Gravedad API	Tipo de crudo procesado
DA-1	80	Liviano/Mediano	29-30	Mesa
DA-2	90	Pesado	16-24	Merey
DA-3	40	Liviano/Extra liviano	36-51	Anaco Wax/ Santa Bárbara

- Unidades de conversión

- ◆ Unidad de craqueo catalítico de lecho fluidizado (FCC).
- ◆ Unidad de alquilación.

- Unidad de fraccionamiento de nafta (U-03)**1.2.4.2 Unidades de tratamiento**

- ◆ Unidad Merox.
- ◆ Unidad de tratamiento con amina o sistema de tratamiento de gases (STG).
- ◆ Unidad de despojamiento de aguas agrias (DAA).
- ◆ Unidad recuperadora de azufre (URA).

1.2.4.3 Servicios industriales

- ◆ Sistema de agua potable.
- ◆ Sistema de agua de enfriamiento.
- ◆ Sistema de osmosis inversa.
- ◆ Sistema de generación de vapor.
- ◆ Sistema de aire comprimido.
- ◆ Sistema de generación eléctrica.
- ◆ Sistema de tratamiento de aguas servidas.
- ◆ Sistema de tratamiento de efluentes.

1.2.4.4 VALCOR (unidades de hidrotratamiento)

El proyecto VALCOR es una respuesta a la necesidad de modernizar la RPLC, reforzar la refinación en el Oriente del país, aprovechar la infraestructura existente constituida por las unidades de destilación y conversión media, así como todos los sistemas de servicios industriales y sus facilidades de almacenaje, con la finalidad de mejorar la calidad de productos que allí se obtienen, de acuerdo con las exigencias de calidad tanto del mercado interno como el de exportación. En la tabla 1.2 se tienen las unidades de proceso y las unidades ambientales contempladas en este proyecto. En la figura A.1 del anexo A, se puede apreciar las principales unidades de VALCOR y la refinería Puerto La Cruz.

Tabla 1.2 Unidades principales del proyecto VALCOR.

Unidades de proceso	Capacidad
Hidrotratamiento de nafta pesada (NHT)	35,0 MBD
Reformación catalítica de nafta pesada (PLT)	35,0 MBD
Hidrotratamiento de diesel (DHT)	38,0 MBD
Unidades ambientales	-
Despojadora de aguas agrias	250 GPM
Regeneración de amina	813 GPM
Recuperación de azufre	100,0 TON/D

1.3 Planteamiento del problema

En los últimos años se han hecho cambios en la composición de la gasolina para adaptarla a las nuevas leyes ambientales que a escala mundial rigen, en cuanto a contenido de aromáticos, compuestos de azufre, nitrógeno y plomo. La unidad de reformación catalítica, es una de las plantas de alta tecnología que se crearon para cumplir con estas nuevas medidas, es decir, es relativamente nueva, razón por la cual no se cuenta con suficientes herramientas adecuadas para predecir el funcionamiento de la zona de reacción. Debido a esta alta tecnología, desarrollar modelos para reactores de reformación es engorroso y complicado debido al gran número de componentes y pseudo-componentes presentes en la alimentación, las altas temperaturas de operación de los reactores y las muchas reacciones complejas envueltas, condiciones que no facilitan un adecuado estudio cinético. Todo esto dificulta su aplicación en simuladores tradicionales los cuales manejan alimentaciones y diseños muy específicos y predicen comportamientos entre rangos de operación muy limitados. De esta forma, la refinería, apoyándose en experiencia pasada, ha necesitado usar herramientas empíricas. Esta situación es aun más crítica cuando se requiera de renovación y modernización pues basándose en estas herramientas superficiales la oportunidad de lograr un mejor diseño disminuyen.

En la actualidad, con operaciones cada vez más competitivas, esta situación ya no es factible requiriéndose desarrollar un modelo que permita predecir el comportamiento de los parámetros de la corriente de reformado (número de octano y rendimiento del reformado) ante variaciones tanto en la alimentación como en las variables de proceso, que puedan alterar el correcto funcionamiento de la unidad, y por ende su efecto sobre la calidad y producción, el cual debe cumplir con ciertas especificaciones como un número de Octano (RONC) entre 95-102, una presión de vapor Reid (PVR) no mayor a 2,9 psia, un contenido de benceno entre 2-3 % vol., entre otros. De no ser así, una corriente de reformado fuera de especificación tendría

que ser enviada al sistema de SLOP (productos y crudo fuera de especificación) o degradarse y ser usada para otros fines, generando para el año 2008, una pérdida para la empresa de alrededor 130,54 \$ por cada barril de reformado que no sea utilizado en la mezcla para la gasolina.

Para solventar esta situación y debido a la importancia técnica y económica que tiene para la empresa aprovechar al máximo dicha unidad, se plantea desarrollar modelos de regresión que representen el comportamiento del número de octano y rendimiento del reformado de la unidad de reformación catalítica. En este sentido se procesarán los datos operacionales de la sección de reacción, separación, recontacto y estabilización de la unidad de reformación y se seleccionaran las variables a ser involucradas en el modelo para luego ser analizados en el programa estadístico SPSS, del cual se elaborará la matriz de correlación y posteriormente, haciendo uso de métodos estadísticos, se obtendrán los modelos matemáticos, realizando a su vez un análisis de sensibilidad que permita disminuir la diversidad de variables y así facilitar el uso de esta valiosa herramienta al personal autorizado.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Desarrollar modelos de regresión que representen el comportamiento del número de octano y rendimiento del reformado de la unidad de Reformación Catalítica de Nafta (U-20) de la Refinería Puerto La Cruz-PDVSA.

1.4.2 Objetivos específicos

1. Procesar los datos operacionales de la sección de alimentación, reacción, separación, recontacto y estabilización de la unidad de reformación.

1. Seleccionar las variables que serán involucradas en el desarrollo de los modelos matemático
2. Elaborar una matriz de correlación con las variables involucradas en el desarrollo de los modelos matemáticos.
3. Obtener modelos matemáticos mediante métodos estadísticos, respecto al número de octano y rendimiento del reformado.
4. Realizar análisis de sensibilidad a los modelos matemáticos obtenidos para los parámetros de calidad en estudio.

CAPITULO II

MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes

Malavé, F.^[4], empleando el método convencional de ajustes de datos por mínimos cuadrados, desarrolló un estudio estadístico a fin de generar modelos satisfactorios que le permitieran estimar los rendimientos máxicos de los productos de la unidad de coquificación retardada de Petrozuata, en función del carbón Conradson de la alimentación. Además, estableció modelos matemáticos para la estimación de propiedades fisicoquímicas de los productos de fraccionamiento, obteniendo como resultado modelos que adoptaron comportamientos acordes con lo teóricamente esperado con niveles de error entre 4 y 11%, menores a 5% y menores a 14% para los modelos de rendimiento del carbón Conradson, el rendimiento de coque y el de la densidad de los residuos de fraccionamiento respectivamente.

Martínez, K.^[5], estableció una serie de correlaciones empíricas, para la conversión en función de la temperatura del aire de regeneración, la carga de alimentación de isobutano y los días de reacción, así como también para la selectividad en función de los días en reacción de los reactores de deshidrogenación de isobutano de la planta MTBE, con el propósito de mejorar las actividades de evaluación y optimización en los reactores. Para ello, realizó balances de materia y energía e hizo uso del programa estadístico STAGRAPHICS, aplicando el método de los mínimos cuadrados. Los resultados del coeficiente de determinación (R^2), número de Fischer y % de error relativo para las 24 correlaciones obtenidas estuvieron dentro

de los rangos permitidos para cada prueba, concluyendo que los datos se ajustaron muy bien a los modelos de regresión diseñados.

Gil, D. y Rodríguez, O.^[6], realizaron un análisis de la variabilidad de los parámetros más importantes involucrados en la estabilidad de la Orimulsión como lo son: el pH, diámetro de la gota, viscosidad y porcentaje de bitumen libre; obteniendo modelos matemáticos que reproducen de manera confiable el comportamiento de los mismos, en función del porcentaje de contaminación y tiempo, así como un modelo para hallar la dosificación más conveniente de Monoetanolamina durante el proceso. Para el desarrollo de los modelos matemáticos utilizaron el paquete estadístico STATGRAPHICS y previo a éste paso, realizaron un diseño factorial con el fin de verificar si las variables independientes ejercían efecto sobre las variables dependientes; y aplicaron un análisis de comparación múltiple que sirvió para establecer los rangos de datos donde existían diferencias estadísticamente significativas a través del método de la mínima diferencia significativa, LSD. Los coeficientes de determinación (R^2) resultantes fueron superiores al 90%, indicando que los modelos matemáticos describen la tendencia del comportamiento de las mezclas de Orimulsión.

2.2 Reformación catalítica de nafta

2.2.1 Generalidades de la reformación catalítica de nafta

Desde que la Environmental Protection Agency adoptó los reglamentos para reducir el plomo, este proceso se ha vuelto esencial, porque no es posible obtener suficiente combustible de alto octanaje para motores, sin que se empleen componentes de elevado número de octanos.

El índice de octano es sin duda una de las propiedades más importantes de las gasolinas. Los cortes de nafta que se obtienen por destilación del petróleo presentan un número de octano muy bajo (45 a 55), siendo estas inaplicables para la gasolina que requieren los automóviles modernos (octanos de 80 a 100). Es necesario entonces modificar la estructura química de los compuestos que integran las naftas y para ello se utiliza el proceso de reformación. ^[4]

En este proceso los hidrocarburos saturados lineales y cíclicos, mediante numerosas reacciones se transforman en hidrocarburos aromáticos, compuestos con altos valores antidetonantes (de mayor octano), produciendo además una importante cantidad de hidrógeno que se utiliza en otros procesos de refino como el hidrotratamiento o el hidrocraqueo. Se trata de un proceso catalítico, que se realiza a alta temperatura y presión moderada, sobre catalizadores basados en platino y renio o platino y estaño, soportados sobre un material ácido (alúmina clorada). En el anexo A.2 se muestra el diagrama general de este proceso.

En la reformación catalítica el número de átomos de carbono de los constituyentes de la carga no varía, es decir, conservan su tamaño molecular. Es posible convertir ciclohexanos sustituidos en bencenos sustituidos, parafinas lineales como el n-heptano se convierten en tolueno y también los ciclopentanos sustituidos pueden convertirse en aromáticos. ^[7]

2.2.2 Unidad de reformación catalítica de nafta de la RPLC

El propósito del proceso de reformación catalítica es producir aromáticos a partir de los naftenos y las parafinas para aumentar el octanaje de la nafta con la finalidad de producir gasolina en un rango de 95 a 102 RONC. La capacidad de procesamiento de la unidad está entre 17,5 MBD (mínima) y 35,0 MBD (máxima) de nafta hidrotratada proveniente de la unidad de hidrotratamiento de nafta (NHT), en

donde son removidos los contaminantes de la carga que puedan dañar el catalizador de reformación, como son: azufre, nitrógeno, oxígeno y metales. ^[8]

La unidad de reformación cuenta con una sección de regeneración continua del catalizador (CCR), con el fin de eliminar el coque depositado en el mismo. Esta sección de regeneración permite la flexibilidad de operar la sección de reacción a condiciones de alta severidad sin tener que parar la planta para una regeneración debido a la desactivación del catalizador inducida por el coque. Los objetivos de la regeneración son: quemar el coque, oxidar y dispersar los metales, ajustar el contenido de cloruro, secar la humedad excesiva y reducir los metales. La sección de regeneración cumple con dos funciones principales la circulación y la regeneración del catalizador. El catalizador es recirculado desde la sección de regeneración al tope de los reactores y movido hacia abajo a otro reactor por gravedad manteniendo 4796 pie³ de catalizador en el lecho del reactor. ^[9]

2.2.3 Descripción del proceso de la unidad 20

Esta unidad es separada en 5 secciones que describen detalladamente el proceso de obtención del reformado. Para su mejor entendimiento esta descripción debe ser consultada en conjunto con el anexo A.3 donde se encuentra el diagrama de flujo del proceso de la unidad de reformación catalítica de nafta de la RPLC.

2.2.3.1. Sección de alimentación

La carga es nafta pesada hidrotratada proveniente del fondo de la despojadora D-1909 de NHT. La corriente entra bajo flujo controlado y se combina con la corriente de gas de reciclo rico en hidrógeno, proveniente del compresor de gas de reciclo G-2002, antes de entrar al intercambiador de carga combinada E-2002. De allí

la carga combinada sigue al horno de calentamiento de carga B-2001, donde alcanza la temperatura de reacción entre 950-1020 °F, para luego pasar al primer reactor.

2.2.3.2. Sección de reacción

La carga combinada vaporizada fluye por el lecho catalítico de tres reactores, D-2001/2002/2003. La temperatura de entrada a cada reactor es la misma. El efluente de cada reactor se calienta en los hornos, B-2002/2003, antes de entrar al siguiente reactor para mantener constante la temperatura de entrada ya que la mayoría de las reacciones son endotérmicas. Generalmente en el primer reactor y en el segundo se produce todo el gas neto (el hidrógeno) gracias a las reacciones de los naftenos, y en el último reactor ocurren las reacciones más difíciles que requieren por lo general el 50% del volumen del catalizador del proceso; estas son la deshidrociclización de parafinas y las de alquilación y desmetilación de aromáticos. Los diferenciales de temperaturas en cada reactor indican el grado de conversión de las reacciones. Los hornos operan con gas combustible y los pasos son verticales. Al salir el efluente del último reactor, éste se enfría intercambiando calor con la alimentación combinada en el E-2002. El catalizador circula de reactor en reactor, según la circulación del CCR, y se purga antes de salir del último reactor con hidrógeno (parte de gas de reciclaje) para despojar el hidrocarburo del catalizador gastado antes de que sea regenerado.

2.2.3.3. Sección de separación

El efluente del reactor se enfría adicionalmente en el condensador de productos E-2003, luego va al separador D-2004, el cual separa la fase gaseosa y líquida. La fase gas pasa al compresor de gas de reciclaje G-2002, el cual envía una parte de vuelta a la sección de reacción y la restante sigue hacia la sección de re-contacto. Mientras que la fase líquida, reformado inestable, es bombeado a re-contacto por la bomba G-2001 A/B. Adicionalmente una corriente de gas de la tolva de cierre del CCR es

enviada a la corriente de efluente del reactor para entrar al E-2003.

2.2.3.4. Sección de re-contacto

La corriente gaseosa es dirigida hacia la sección de re-contacto de gas neto la cual comprende una compresión a tres etapas, removiendo el GLP y reformado contenido en el gas. El gas es enfriado en los enfriadores de gas neto E- 2004 y E-2005 A/B, luego se mezcla con la corriente de gases de exceso del tambor de tope de la desbutanizadora y sigue al tambor separador de succión D-2005 del compresor de gas neto, el líquido de este tambor es circulado al tambor separador D-2004 junto al efluente del reactor.

El gas es dirigido al compresor de gas neto G- 2003 A/B/C a la primera etapa, luego se enfría en el E-2006, para recontactarse con la corriente de líquido del segundo tambor de re-contacto D-2007, además es condensado en el E-2007A/B y enviado al primer tambor horizontal de re-contacto D-2006, el líquido es bombeado por la G-2004 A/B a la desbutanizadora D-2011. La corriente de gas entra a la segunda etapa de compresión del compresor de gas neto, enfriándose en el E-2008, para recontactarse por segunda vez con la corriente líquida del tambor D-2006 y enfriándose posteriormente en los E-2009 A/B para seguir al segundo tambor de re-contacto D-2007. El gas de salida es enviado a la unidad de recuperación de livianos (Recovery Plus), donde se recuperan los cortes livianos (GLP) por contacto con líquido a baja temperatura.

El gas rico en H₂ es tratado en el tratador de cloruro de gases, D-2008 A/B, donde los cloruros son removidos antes que el gas neto sea enviado al cabezal de refinería. La corriente gaseosa continua al separador de succión de la tercera etapa D-2009, se envía a la sección de re-contacto, el cual se comprime en la tercera etapa del compresor de gas neto, seguidamente es enfriado en los intercambiadores E-2010 y

E-2011 para seguir al separador D-2010, en donde el gas neto con alta pureza sale al cabezal de hidrógeno que suministrará a los procesos de hidrotratamiento. Tanto el líquido (reformado inestable) de la unidad de recuperación de livianos (Recovery Plus), como de los tambores D-2009 y D-2010 son enviados como carga a la desbutanizadora D-2011.

2.2.3.5. Sección de estabilización

El reformado inestable se calienta en los calentadores E-2012 A/B que intercambia calor con la corriente de fondo de la desbutanizadora, para luego entrar a la desbutanizadora D-2011, a nivel del plato 10, para remover los componentes livianos del reformado.

Por el tope de la torre se condensan los gases en el E-2015 Y E-2016 A/B, y son separados en el tambor de tope D-2012, del cual se envían los gases incondensables a re-contacto, la corriente líquida de tope es GLP (C_3/C_4), que es bombeada por la bomba G-2005 A/B, una parte a la sección de fraccionamiento de GLP, mientras que la otra es el reflujo de la torre desbutanizadora para rectificar y estabilizar el reformado.

El reformado sale por el fondo debido al fraccionamiento, una parte se recircula al horno rehervidor B-2004, a través de la bomba G-2011A/B, y la otra parte es enfriada en los E-2012 A/B, E-2013 y E-2014 A/B y finalmente es enviado el reformado al almacenaje. ^[10]

2.3 Características de la alimentación del proceso de reformación catalítica

Las alimentaciones empleadas para reformación catalítica están mayormente compuestas de nafta pesada del fraccionamiento inicial del crudo. Esta nafta pesada

contiene hidrocarburos parafínicos, nafténicos y aromáticos con un número de átomos de carbono en la molécula generalmente en el rango de 6 a 10 (C_6 a C_{10}) [7]. A continuación se describen las propiedades físicas tomadas en consideración para analizar la carga introducida a la unidad, las cuales se encuentran reflejadas junto a sus respectivos valores típicos en la tabla 2.1.

2.3.1. Gravedad API

Es la escala de medición empírica utilizada específicamente en materia petrolera, para medir la densidad de los crudos y sus derivados, adoptada por el Instituto Americano del Petróleo (API, por sus siglas en inglés). Mediante ella el crudo se clasifica en liviano, mediano, pesado y extrapesado; teniéndose que a mayor °API el crudo es más liviano y, a menor °API es más pesado. La relación de esta escala con la densidad relativa, esta expresada mediante la siguiente ecuación [11]:

$$^{\circ}\text{API} = \frac{141,5}{\text{Gravedad específica}} - 131,5 \quad (\text{Ec. 2.1})$$

Esta propiedad obviamente depende del intervalo de destilación de la alimentación pero más especialmente sobre su naturaleza química. A un mismo intervalo de destilación, una alimentación parafínica tendrá una gravedad específica más baja que una alimentación nafténica.

2.3.2. Destilación ASTM

La caracterización del crudo y de sus fracciones se realiza utilizando los métodos de destilación de laboratorio estandarizados de la Sociedad Americana de Ensayo de Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés), siendo la prueba ASTM D-86, realizada a fracciones livianas, la aplicada a la alimentación de reformación.

La destilación ASTM de un corte de petróleo es su vaporización a presión atmosférica. Por lo tanto las temperaturas registradas durante la prueba son directamente relacionadas a la temperatura de ebullición normal de los componentes en este corte. Las dos temperaturas registradas más importantes son: el punto inicial de ebullición (IBP, por sus siglas en inglés), registrado cuando la primera gota de líquido es observada y; el punto final de ebullición (EBP, por sus siglas en inglés), el cual es la temperatura máxima registrada durante la prueba.

2.3.2.1. Punto inicial de ebullición (IBP)

La conversión de hidrocarburos de bajo número de octano en componentes con alto número de octano, el cual es el propósito de la reformación catalítica, puede sólo ser útilmente realizada con hidrocarburos que puedan ser convertidos en aromáticos. Esta es la razón por la cual la alimentación no debe contener hidrocarburos con cinco átomos de carbonos (C_5) que no puedan ser aromatizados y que no son fáciles de isomerizar bajo las condiciones de operación del reformador.

En el caso de los naftenos C_6 (ciclohexanos y metilciclopentanos) pueden ser componentes deseables ya que ellos aumentan el potencial de aromatización de la alimentación. Sin embargo, las especificaciones actuales de contenido de benceno en las gasolinas comerciales imponen limitar la presencia de benceno y sus precursores en la alimentación. En vista de estas diferentes consideraciones, el límite más bajo del punto inicial es generalmente 170 °F (75 °C).

2.3.2.2 Punto final de ebullición (EBP)

Está relacionado con las especificaciones de volatilidad requeridas en la gasolina automotriz. El punto final debe ser limitado debido a la dificultad de combustión de los componentes pesados, al riesgo de ensuciamiento de la cámara de

combustión y a problemas de dilución del aceite lubricante que consecuentemente provocará el desgaste del motor.

Existe un número de factores envueltos en la determinación del valor límite del punto final, entre ellos se encuentra las diferentes especificaciones de la gasolina de acuerdo a cada país, la demanda de gasolina y productos intermedios (diesel, aceite de calentamiento) y la más importante para efectos de la unidad de reformación es el control de la velocidad de coquificación del catalizador, la cual aumenta rápidamente con el incremento del punto final de la alimentación debido a que los componentes pesados (poliaromáticos y polinaftenos) promueven las reacciones causantes de la formación de coque. Por esta razón, el valor máximo del punto final no debe sobrepasar 419 °F (215 °C).

2.3.3 Análisis PONA

La composición de las naftas empleadas para reformación y producción de combustible automotor generalmente contienen hidrocarburos parafínicos, nafténicos y aromáticos y dependiendo de su origen variará grandemente su “fácil reformación”. Esta “facilidad de reformación” está primordialmente determinada por el contenido de estos tipos de hidrocarburos, empleándose el vocablo nafta rica para describir a una alimentación con mayor contenido de naftenos; y nafta pobre, a una con mayor contenido de parafinas.

La naturaleza química de la alimentación es frecuentemente determinada por el análisis PONA (Parafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos), el cual simplemente proporciona el porcentaje volumen de los diferentes tipos de hidrocarburos. Conociendo los resultados PONA se hace posible determinar el índice de reformabilidad ($N+2A$), donde el contenido de naftenos (N) se suma con dos veces el contenido de aromáticos (A). El índice de reformabilidad proporciona un significado

práctico de la caracterización de una alimentación y de ilustrar su análisis químico mediante un simple valor.

Entonces un valor bajo de N+2A representa un contenido alto de parafinas, el cual requerirá reformar la alimentación bajo condiciones relativamente severas para la obtención de la calidad del reformado. Por el contrario, un valor alto de N+2A indica una proporción alta de naftenos y aromáticos, lo que permite operar a menores condiciones de severidad para la misma calidad de reformado. El valor del índice de reformabilidad normalmente varía entre 30 y 80.

2.3.4 Contenido de impurezas

La nafta pesada de corte directo contiene componentes que pueden envenenar el catalizador de reformación, tales como:

- **Sulfuro** es transformado en ácido sulfídrico (H_2S), siendo este un veneno que desactiva temporalmente el platino contenido en el catalizador. Bajo condiciones normales de operación, el contenido de sulfuro no debe exceder de 0.5 partes por millón (ppm) en peso de la alimentación.
- **Nitrógeno** es transformado en amonio (NH_3), el cual forma cloruro de amoníaco (NH_4Cl) sólido con el ácido clorhídrico (HCl). Esta sal se deposita en todos lados del catalizador causando bloqueos o incrustaciones. El contenido de compuestos nitrogenados tiene que ser limitado a valores no mayores de 0.5 ppm en peso.
- Una **concentración muy grande de agua** en la alimentación aumenta su concentración en el gas de reciclo. Además despoja el cloro que se encuentra

sobre el catalizador, disminuyendo su actividad y, por lo tanto, el RONC resultante. El contenido de agua es expresado en ppm en volumen y está generalmente en el rango de 5 a 30.

- **Compuestos clorados**, si están muy concentrados en la alimentación, provocan una cloración excesiva del catalizador, entonces se favorecen las reacciones de hidrocraqueo y disminuye el rendimiento del reformado. La concentración de cloro está normalmente entre un porcentaje (%) 0.8 y 1.4 del peso del catalizador. ^[12]

Tabla 2.1 Características de la alimentación a reformación. ^[8]

PROPIEDADES FÍSICAS	NAFTA PESADA HIDROTRATADA
Gravedad API	51,8
Destilación (°F) IBP / 50% / EP	181 / 267 / 395
PONA (%V)	44,3 / 0 / 33,6 / 22,1
Contenido de Azufre (ppm peso)	0
Contenido de Nitrógeno (ppm peso)	0
RONC (octanos)	65

2.4 Características del reformado

El reformado es un líquido muy rico en aromáticos que contiene hidrocarburos de cinco átomos de carbono y más pesados (C_5^+), y por lo tanto de alto octanaje. Pueden producirse los reformados con concentraciones muy altas de tolueno, benceno, xileno, y otros aromáticos útiles en la gasolina y la industria petroquímica. En la tabla 2.2 se muestran los valores de las propiedades físicas analizadas para caracterizar a los productos obtenidos en el proceso de reformación. Al ser el

reformado un producto, éste debe cumplir con ciertas especificaciones entre las cuales se tienen:

2.4.1 Rendimiento

El rendimiento se refiere a la cantidad de producto, en este caso reformado, que se obtiene durante el proceso de reformación catalítica específicamente de las reacciones químicas presentes en el reactor. El rendimiento de una reacción se expresa en porcentaje (%) y se calcula mediante la siguiente fórmula: ^[13]

$$\text{Rendimiento}(\%) = \frac{\text{Cantidad real del producto}}{\text{Cantidad teórica del producto}} \cdot 100 \quad (\text{Ec.2.2})$$

El rendimiento del reformado depende del origen de la alimentación, las reacciones secundarias que puedan tener lugar, la naturaleza y estado del catalizador y las condiciones de operación que fijan la severidad requerida del tratamiento para alcanzar la propiedad esencial del reformado (número de octano). Generalmente tiene un rango de 65 a 85% peso con respecto a la alimentación, aunque en el caso de reformadores con regeneración continua este porcentaje es mucho mayor, alrededor de 90 %. ^[12]

2.4.2 Número de octano

Es una de las principales propiedades de la gasolina ya que esta altamente relacionado al rendimiento del motor del vehículo. El octanaje indica la presión y temperatura a que puede ser sometido un combustible carburado (mezclado con aire) antes de auto-detonarse al alcanzar su temperatura de autoignición debido a la ley de los gases ideales. En otras palabras, se refiere a la resistencia que presenta el combustible a detonar en el motor. Ésta se mide como el golpeteo o detonación que

produce la gasolina comparada con los patrones de referencia conocidos de iso octano y n-heptano, cuyos números de octano son cien (100) y cero (0) respectivamente. Mientras más alto es el número de octano menor es la tendencia al pistoneo.

Los dos métodos comúnmente usados para la gasolina automotriz son: el número de octano research (RON, por sus siglas en inglés) y el número de octano motor (MON, por sus siglas en inglés), los cuales difieren esencialmente en la velocidad de rotación del motor y en la temperatura de la mezcla de combustible-aire en la entrada del mismo.

La calidad de un producto, referido a operaciones como combustible para motor se define como Número de Octano Limpio sin tetraetilo de plomo (RONC, por sus siglas en inglés). Para la unidad de reformación catalítica de la RPLC, el RONC se encuentra en un rango de 95 a 102.

2.4.3 Presión de vapor Reid (RVP)

La presión de vapor Reid (RVP, por sus siglas en inglés) es una propiedad relacionada con la volatilidad, y es la presión que ejerce la porción vaporizada de un líquido en un recipiente. Específicamente es un término utilizado para referirse a la presión de vapor en las gasolinas. Esta medida se utiliza para controlar la pérdida de productos por vaporización y así evitar un peligro latente debido a que se crea una atmósfera explosiva por la liberación del gas. En cuanto al reformado, el valor máximo de RVP manejado es 2,9 psia.

2.4.4 Contenido de benceno

El benceno es un componente básico para la industria petroquímica, para producir estireno o xilenos y tolueno; pero debido a su toxicidad las leyes ambientales

han limitado su contenido en las gasolinas. El contenido máximo de benceno se encuentra en el rango de 2-3% volumen, y seguramente este valor será reducido en un futuro próximo. Por tal motivo, las refinerías tienen que reducir el contenido de benceno presente en la gasolina ya sea produciendo menos benceno, separando el benceno de los componentes de la gasolina o hidrogenando el benceno en ciclohexano.

2.4.5 Punto final de ebullición (EBP)

Esta propiedad es directamente dependiente de las condiciones de punto final de la alimentación, por lo tanto su control será realizado desde los inicios de la operación, en la caracterización de la carga. ^[12]

Tabla 2.2 Características de los productos de la reformación. ^[8]

PROPIEDADES FÍSICAS	VALORES
Reformado	
RONC (octanos)	95-102
Contenido de benceno (% V)	1,5
EP (°F)	435
RVP (Psia)	2,9 máx.
Hidrógeno	
Contenido de H ₂ (% molar)	90-94
Peso molecular	3,31
GLP	
Peso molecular	50.2
Flujo volumétrico (BPD)	1833
Densidad API	131.49

2.5 Equipos principales que conforman la unidad 20

2.5.1 Reactor

Los reactores de reformación catalítica, son tres reactores de lecho móvil de flujo ascendente. En cada uno de los reactores la mezcla de gases de recirculación y alimentación vaporizada fluye anularmente a lo largo del lecho del catalizador donde esta última es reformada para formar los diferentes productos. La alimentación entra por la parte superior fluyendo descendentemente a través del lecho del catalizador así como radialmente a través del espacio anular; el producto fluye entonces en forma ascendente a través de la tubería central y sale por medio de un codo de extracción localizado en la parte alta del reactor. Posteriormente el producto se dirige aguas abajo a los calentadores de fuego directo donde se recalienta antes de entrar al siguiente reactor. El mismo proceso ocurre en los otros dos reactores hasta el reactor 3 en donde sale finalmente el producto (efluente inestable), como se observa en la figura 2.1. [8]

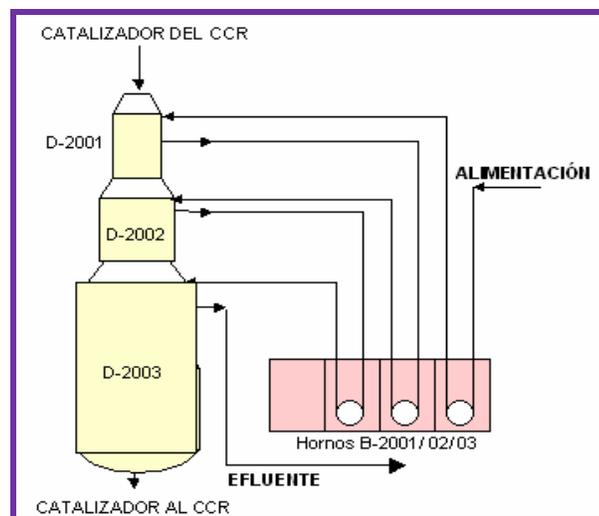


Figura 2.1 Dinámica de las corrientes en los reactores de reformación catalítica de nafta

La mayoría de las reacciones son endotérmicas y, en consecuencia, existe una caída significativa de temperatura a lo largo de cada reactor. El diseño de los reactores de reformación está basado sobre una velocidad espacial total que proporciona el volumen de catalizador necesitado. El catalizador debe ser distribuido entre los varios reactores (3, 4 o 5) para compensar la naturaleza altamente endotérmica de las reacciones; como resultado de esto, el tamaño del reactor aumenta progresivamente y la distribución para tres reactores es comúnmente: 15-25-60. ^[14]

En este tipo de proceso, se tiene que los hidrocarburos aromáticos pasan a través de la unidad esencialmente sin cambios. La mayoría de los naftenos reaccionan rápidamente y eficientemente a aromáticos, esta es la reacción básica de reformación. Las parafinas son los componentes más difíciles de convertir; en la mayoría de las aplicaciones a baja severidad, sólo una pequeña cantidad de parafinas se convierte a aromáticos. En aplicaciones de alta severidad, la conversión es mayor, pero todavía lenta e ineficiente. ^[8]

2.5.2 Separadores y tambores

El término separador es aplicado a una gran variedad de equipos usados para separar mezclas de dos o más fases. Estas mezclas pueden estar formadas por una fase vapor y una líquida; una fase vapor y una sólida; dos fases líquidas inmiscibles (aceite/agua); una fase vapor y dos líquidas u otra combinación, siempre y cuando las fases de los fluidos sean inmiscibles y de diferentes densidades para que ocurra la separación. ^[15]

Todas las unidades catalíticas que tienen una corriente de gas de reciclaje tienen un separador de baja presión, el cual está diseñado principalmente para separar hidrógeno de hidrocarburo. Hay una o dos “boquillas” en el tope del separador. En el caso de dos “boquillas”, una boquilla dirige el gas neto rico en hidrógeno al

compresor de recicló. La otra “boquilla” dirige el gas neto rico en hidrógeno a la succión de la primera etapa del compresor de gas neto.

Como se muestra en la figura 2.2, uno de los componentes básicos del separador es una malla (demister pad), la cual está construida de Monel (aleación de Níquel/Cobre).

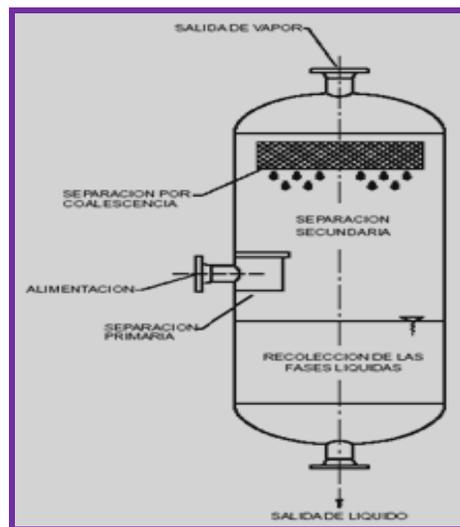


Figura 2.2 Separador Vertical. [15]

La misma está encerrada en un deflector horizontal en el tope del separador para coalescer, o ayudar a remover gotas de hidrocarburo arrastradas por la corriente de gas. Hay un distribuidor de entrada, generalmente localizado en alguna parte en el medio del recipiente, este ayudará a distribuir el gas igualmente a través del recipiente entero. Un visor de vidrio muestra el nivel de hidrocarburo. Un controlador de nivel controla el flujo de hidrocarburo desde el separador a las bombas del líquido del separador. La línea de salida de líquido generalmente tendrá un rompe vértice, menos en los casos donde el líquido está presurizado.

Los tambores de recontacto son esencialmente el mismo diseño que el separador pero generalmente más pequeños en dimensión. [8]

2.5.3 Torre Desbutanizadora

La torre desbutanizadora es un tipo de columna fraccionadora cerrada muy sencilla en la que se realiza una separación física, generalmente entre gas butano y propano que se mueven en la columna hacia arriba y gasolina que, en cambio, viaja hacia el fondo de la torre misma. Esta separación se logra sometiendo la corriente de hidrocarburos a condiciones de presión y temperatura apropiadas a lo largo de la columna, de modo que la fracción líquida, que es más pesada, baja por gravedad, mientras que la fracción gaseosa, que es más liviana, sube y se condensa en las partes superiores. Este tipo de columna es utilizada para controlar la presión de vapor de la gasolina por fraccionamiento, menos una cantidad predeterminada de butanos. La cantidad de butano restante en la gasolina ayudará a determinar la presión de vapor de la misma. Esta torre posee 30 platos del tipo perforado, de los cuales los 20 platos de la zona de enriquecimiento son de un solo paso y los 10 platos de la zona de agotamiento son de dos pasos, ver figura 2.3. ^[16]

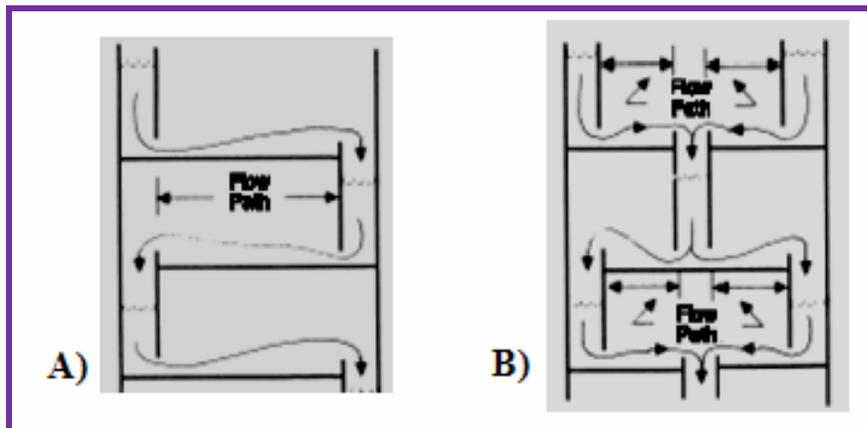


Figura 2.3 Esquema de flujo en los platos de la desbutanizadora. A) platos en la zona de enriquecimiento. B) platos en la zona de agotamiento. ^[16]

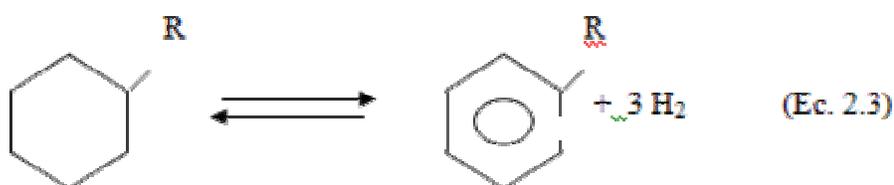
2.6 Química del proceso de reformación

2.6.1 Principales reacciones de la reformación catalítica

Las conversiones químicas que toman lugar en los reactores de reformación catalítica son numerosas y complejas, sin embargo las siguientes son las reacciones dominantes que ocurren durante el proceso a través de las cuales la carga es mejorada. Debido a la amplia gama de parafinas y naftenos contenidas en la alimentación al reformador catalítico, y debido a que las ratas de reacción varían considerablemente con el número de átomos de carbón del reactante, estas reacciones se suceden en serie y en paralelo. En la tabla 2.3 se muestra tanto las condiciones de operación de todas las reacciones de reformación como la parte del catalizador por las que son promovidas.

2.6.1.1 Deshidrogenación de naftenos

Estas reacciones son balanceadas, extremadamente rápidas y esencialmente cuantitativas. Obviamente, los naftenos son los componentes de alimentación más deseados, porque la reacción de deshidrogenación es fácil de promover y produce hidrógeno como subproducto, así como hidrocarburos aromáticos. Esta reacción es muy endotérmica, promovida por la función metálica del catalizador y favorecida por alta temperatura y baja presión.



Nota:



Anillos saturados (naftenos)

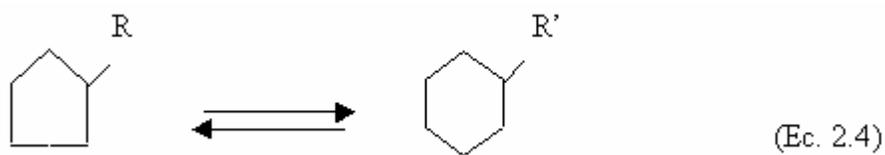


Anillo deshidrogenado (aromático)

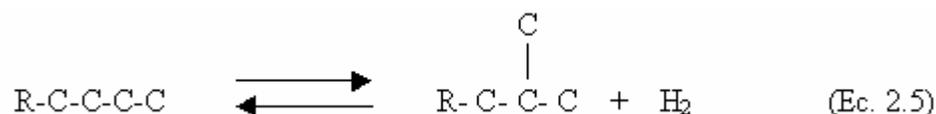
R, R', R'' Radicales o lado de cadenas atadas al anillo,
por ejemplo un radical etil $-\text{CH}_2\text{CH}_3$

2.6.1.2 Isomerización de naftenos y parafinas

La isomerización de un ciclopentano a ciclohexano debe ocurrir como el primer paso en convertir el ciclopentano en un aromático. La isomerización envuelve un rearrreglo del anillo, y la probabilidad de la apertura de este para formar parafina es bastante alta. Por lo tanto, la reacción de alquilciclopentanos a ciclohexanos no es 100% selectiva. Esta reacción es fuertemente dependiente de las condiciones de proceso.

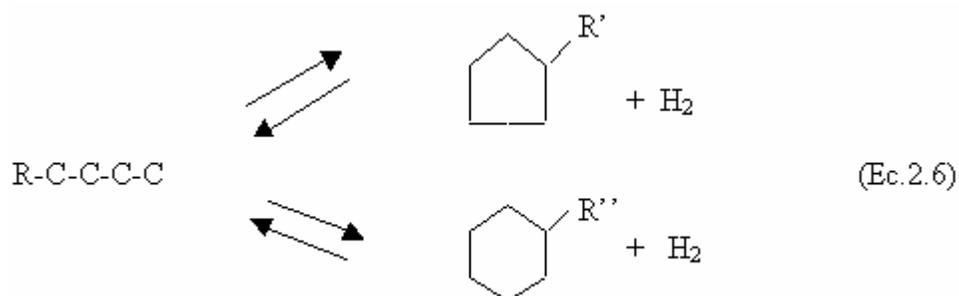


La isomerización de parafinas ocurre rápidamente en las operaciones comerciales de reformación catalítica, pero a temperaturas típicas operacionales, el equilibrio termodinámico no está fuertemente a favor de los isómeros ramificados más deseados (de más alto octanaje). Estas reacciones son promovidas por la función ácida del catalizador, y son poco dependientes de la presión de operación.



2.6.1.3 Deshidrociclización de parafinas

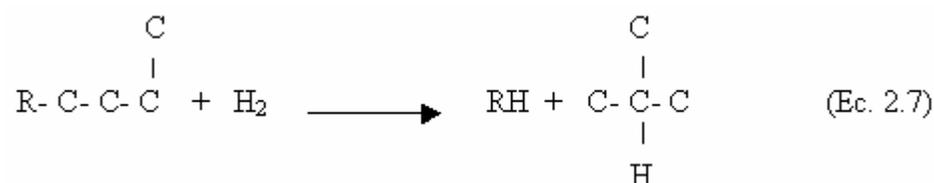
Es la reacción de reformación catalítica más difícil de promover. Estas consisten en un complicado rearrreglo molecular partiendo de una parafina a un nafteno. La etapa de ciclización de parafinas viene a ser más fácil a medida que el peso molecular de la parafina aumenta, debido al incremento de la probabilidad estadística para la formación de un nafteno. Aunque contrarrestando este efecto, para parafinas más pesadas la probabilidad de hidrocrqueo también aumenta. La deshidrociclización es favorecida por bajas presiones y altas temperaturas. Tanto la función ácida como metálica del catalizador son necesarias para promover esta reacción.



2.6.1.4 Hidrocrqueo

Debido a las complicadas reacciones de isomerización y ciclización que los naftenos y parafinas deben realizar y ya que el catalizador debe tener una función ácida para las mismas, la posibilidad de reacciones de hidrocrqueo promovidas por

la función ácida es fuerte. El hidrocrqueo de parafinas es relativamente rápido y es favorecido por alta presión y alta temperatura. La desaparición de las parafinas del rango de ebullición de la gasolina por hidrocrqueo, concentra los aromáticos en el producto y por lo tanto contribuye a un incremento del octanaje. La reacción, sin embargo, consume hidrógeno y reduce la producción de reformado.



2.6.2 Catalizador de reformación catalítica

Un catalizador es una sustancia que aumenta la velocidad de una reacción química pero sin modificar la velocidad del equilibrio de conversión, la cual es determinada por las condiciones de operación.

El catalizador empleado en la reformación catalítica es del tipo bifuncional UOP R-234 y está soportado sobre una base de alúmina clorada. Es conocido como catalizador bifuncional porque presenta dos tipos de actividad: una ácida y otra metálica; mediante las cuales puede promover fácilmente dos tipos de mecanismos químicos: la deshidrogenación e hidrogenación y modificación de la estructura molecular.

La función ácida, proporcionada por el soporte de alúmina impregnada en Cloro (Cl), es la principal responsable de la formación de iones de carbono tanto por la extracción de iones de hidrógeno o la adición de protones a dobles enlaces. Los iones de carbono, son por lo tanto, los intermediarios en tales reacciones como la

isomerización e hidrocrqueo. El mantenimiento de esta función se realiza con un control adecuado en las relaciones de agua-Cl.

La función metálica, representada por el Platino (Pt), es responsable de la extracción de Hidrógeno (H) de los hidrocarburos, la separación de las moléculas de H y la subsecuente adición de átomos de H a las especies insaturadas, por lo tanto es responsable de las reacciones de hidrogenación y deshidrogenación. Para mantener dicha función se realiza una redispersión del Pt en la superficie del catalizador con la presencia de Cl en una atmósfera oxidada.

Para una correcta operación se debe mantener un balance entre estas dos funciones. Un desbalance hacia la función ácida, promueve el hidrocrqueo; mientras que un desbalance hacia la función metálica favorece la desmetilación. Un balance correcto entre estas dos funciones tiene a favorecer las reacciones de deshidrogenación, deshidrociclización e isomerización. ^[9]

Tabla 2.3 Condiciones básicas de las reacciones de reformación catalítica. ^[8]

Reacciones	Función del catalizador	Temperatura	Presión
Deshidrogenación de naftenos	M	Alta	Baja
Isomerización de parafinas y naftenos	A	Baja	-
Deshidrociclización de parafinas	M/A	Alta	Baja
Hidrocrqueo	A	Alta	Alta
Desmetilación	M	Alta	Alta
Desalquilación de aromáticos	M/A	Alta	Alta

2.7 Variables principales de la reformación catalítica

2.7.1 Temperatura del reactor

La temperatura de los lechos del catalizador en el reactor de reformación es el principal parámetro de control que las refinerías utilizan para cumplir con los requerimientos de calidad del producto. Los catalizadores de reformación son capaces de operar en un amplio rango de temperatura con pocos efectos adversos en el rendimiento del producto y estabilidad del catalizador.

La temperatura del reactor puede definirse de dos formas, bien sea temperatura promedio de entrada por peso (WAIT) o temperatura promedio de lecho por peso (WABT).

$$\text{WAIT} = \sum (\text{fracción peso del lecho catalítico}) \cdot (\text{temperatura de entrada al lecho}) \quad (\text{Ec. 2.8})$$

$$\text{WABT} = \sum (\text{fracción peso del lecho catalítico}) \cdot (\text{temperatura promedio del lecho}) \quad (\text{Ec. 2.9})$$

2.7.2 Velocidad espacial

Es la medida del volumen de nafta que se procesa en una cantidad determinada de catalizador durante un periodo de tiempo. Esta variable tiene un efecto importante en la calidad del producto (p.e, el octanaje). Mientras más alta sea la velocidad espacial, el tiempo de residencia es menor y por ende la calidad del producto (RONC) disminuye. La velocidad espacial (LHSV, por sus siglas en inglés) viene dada por la siguiente ecuación: ^[8]

$$\text{LHSV (h}^{-1}\text{)} = \frac{\text{Flujo de alimentación al reactor (m}^3\text{/h)}}{\text{Volumen total de catalizador (m}^3\text{)}} \quad (\text{Ec.2.10})$$

2.7.3 Presión del reactor

Generalmente, la presión por sí misma no es usada como una variable de operación en una unidad existente; sin embargo, tiene una influencia considerable sobre el funcionamiento de la unidad, y es más discutida como un parámetro clave durante la fase de diseño de un proyecto nuevo. ^[12]

Debido a su efecto inherente sobre las velocidades de reacción, la presión parcial del hidrógeno es la variable básica, pero por facilidad de uso, la presión total del reactor puede utilizarse, no siendo entonces necesaria la pureza del hidrógeno. UOP utiliza la presión de entrada al último reactor como la presión promedio, puesto que el 50 % del catalizador por lo general se encuentra en el último reactor.

La presión del reactor no tiene limitaciones teóricas pero sí de diseño; afecta los rendimientos de la unidad, los requerimientos de temperatura del reactor y la estabilidad del catalizador. Al disminuir la presión del reactor, aumentará el rendimiento del hidrógeno y del reformado, disminuirá la temperatura requerida para que el producto sea de calidad y aumentará la velocidad de coquificación del catalizador.

2.7.4 Relación de hidrógeno/hidrocarburo

Está definida como los moles de hidrógeno de reciclo por cada mol de nafta cargada a la unidad. El hidrógeno de reciclo tiene el efecto de barrer los productos de

reacción y los materiales condensables que se encuentran en el catalizador y suplir el catalizador con hidrógeno fácilmente disponible.

Un incremento en la relación hidrógeno/hidrocarburo (H_2/HC) hará desplazar la nafta a través del reactor a una velocidad más rápida y proporcionará una mayor fuente de calor para las reacciones endotérmicas. El resultado final es la disminución de la velocidad de coquificación del catalizador con poco efecto en la calidad y cantidad del producto. Este efecto no es solo por el gas de reciclo sino también se debe al hidrógeno producido en los reactores. Esta relación está definida como sigue

$$(H_2/HC) = \frac{\text{moles de hidrógeno de reciclo}}{\text{mol de carga de nafta a la unidad}} \quad (\text{Ec.2.11})$$

2.8 Efectos de las variables de operación sobre la calidad del producto

De las reacciones químicas que ocurren en el proceso de reformación, existen dos que deben controlarse dentro de ciertos límites para obtener productos de alta calidad, alto rendimiento de producto líquido, suficiente producción de hidrógeno y larga vida del catalizador. Estas dos reacciones son la deshidrogenación y el hidrocrackeo. Es importante conocer los efectos que tienen las principales variables de operación sobre estas dos reacciones. En la tabla 2.4 se muestra el efecto del aumento de las variables de operación sobre la calidad del producto.

2.8.1 Temperatura del reactor

La temperatura a la cual se mantienen los lechos del catalizador en el reactor es la variable principal que se tiene disponible para controlar la calidad del producto. Al aumentar la temperatura se aumenta la velocidad de todas las reacciones de reformación, pero en particular las de deshidrogenación (aromatización) e

hidrocraqueo. El hidrocraqueo aumenta en mayor medida que la deshidrogenación, y por lo tanto, el mejoramiento de la calidad del producto (aumento de RONC) está a expensas del rendimiento del producto. Entonces la temperatura del reactor debe ajustarse solo para proporcionar el octanaje deseado y no uno mayor.

2.8.2 Presión del reactor

Es otra variable importante debido a su efecto en las proporciones del reactor. Al aumentar la presión del reactor aumentará el hidrocraqueo y disminuirá la deshidrogenación, es decir, se reducirá el rendimiento de hidrógeno y la calidad del producto (RONC). Su disminución tendrá efecto opuesto, pero adicionalmente, favorecerá la coquificación del catalizador y disminuirá el requerimiento de temperatura del reactor para cumplir con la calidad del producto.

2.8.3 Velocidad espacial

La velocidad espacial tiene un gran efecto sobre la calidad del producto (RONC), mientras más alta la velocidad espacial, disminuirá el RONC debido a la disminución del tiempo de reacción y tendrá que ser compensada por un aumento apropiado de temperatura en el reactor. Dentro de los parámetros normales de diseño de la unidad de reformación, la velocidad espacial tiene poco efecto sobre los rendimientos del producto y la estabilidad del catalizador. A velocidades espaciales muy bajas, las reacciones térmicas pueden ocurrir a un grado suficiente para disminuir los rendimientos del reformado. Mientras no se conozca un límite máximo en la velocidad espacial, las temperaturas del reactor deben aumentarse para mantener la calidad del producto y por encima de cierto punto esto puede nuevamente causar reacciones térmicas desfavorables que disminuirán el rendimiento del reformado. Cambios normales en el volumen de carga requeridos por la disponibilidad de la

alimentación y la demanda del producto pueden compensarse por cambios en la temperatura. ^[11]

2.8.4 Relación hidrógeno/ hidrocarburo

La relación H_2/HC es importante solo desde el punto de vista de la estabilidad del catalizador y tiene pocos efectos sobre la calidad o el rendimiento del producto. Sin embargo las refinerías tienden a disminuir esta relación para reducir costos de energía, necesitados en el compresor de reciclo, y también para promover las reacciones químicas productoras de aromáticos (deshidro ciclización de parafinas); lo que trae como consecuencia un aumento en la velocidad de coquificación, RONC y aumento ligero en la producción de hidrógeno. ^[17]

Tabla 2.4 Efectos de las variables de operación.

	Rendimiento del reformado	RONC	Rendimiento del Hidrógeno	Formación del coque
↑ Temperatura del reactor	↓	↑	↑	↑
Presión	↓	↓	↓	↓
Velocidad Espacial	↑	↓	↓	↑
Relación H_2/HC	—	↓	↓	↓

2.9 Estadística de regresión

2.9.1 Regresión lineal y correlación

La regresión y la correlación son dos técnicas estrechamente relacionadas que comprenden una forma de estimación. La correlación considera que dos variables cuantitativas están relacionadas entre sí cuando los valores de una de ellas varían de forma sistemática con respecto a los valores homónimos de la otra; la regresión es un procedimiento mediante el cual se trata de determinar si existe o no relación de dependencia entre dos variables, es decir, conociendo los valores de una variable independiente, se trata de estimar los valores, de una o más variables dependientes. En otras palabras, la correlación mide la intensidad de una relación entre variables y la regresión da lugar a una ecuación que describe dicha relación en términos de una ecuación matemática. ^[18]

2.9.2 Regresión lineal múltiple

El modelo de regresión lineal múltiple es una generalización del modelo de regresión lineal simple, en el que relacionamos la variable que queremos explicar, Y , con las k variables explicativas X_1, X_2, \dots, X_k . El objetivo de las variables independientes adicionales es incrementar la capacidad predictiva sobre la de la regresión lineal simple. El método incluye la posibilidad de establecer ajustes lineales, polinómicos, exponenciales, logarítmicos, potenciales, etc. El modelo matemático se encontrará a partir de los valores (x_i, y_i) que toman estas variables sobre los elementos de una muestra y mediante la expresión general siguiente:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k + \varepsilon \quad (\text{Ec. 2.12})$$

donde:

Y : variable dependiente o explicada.

X_i : variables independientes o explicativas.

β_0 : intersección o término constante.

β_i : parámetros respectivos a cada variable independiente.

k : número de parámetros independientes a tener en cuenta en la regresión.

ε : error aleatorio o residuo.

Los residuos o errores aleatorios, es un término que de alguna manera recoge todos aquellos factores de la realidad no controlables u observables y que por tanto se asocian con el azar; y es la que confiere al modelo su carácter estocástico. [19]

2.9.3 Estimación de los parámetros del modelo de regresión

De modo que los coeficientes β se estiman siguiendo el criterio de mínimos cuadrados ordinarios (M.C.O), método que consiste en encontrar la recta que hace mínima la suma de los residuos al cuadrado, se tiene la siguiente expresión:

$$\min \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_{i1} - \beta_2 X_{i2} - \dots - \beta_k X_{ik})^2 \quad (\text{Ec. 2.13})$$

La obtención aquí de las expresiones de los estimadores mínimos cuadráticos de dichos coeficientes exigen reescribir la expresión (2.13) utilizando notación matricial, obteniéndose:

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (\text{Ec. 2.14})$$

donde:

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}; \quad X = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1k} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nk} \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_n \end{pmatrix}; \quad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Donde los estimadores mínimo cuadráticos se obtienen a partir de la ecuación:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (\text{Ec. 2.15})$$

y mantiene una interpretación análoga al caso de la regresión lineal simple, es decir, represente el incremento o disminución por término medio en la variable respuesta por cada unidad adicional en la variable.^[20]

2.10 Parámetros estadísticos

2.10.1 Coeficiente de determinación (R^2)

El coeficiente de determinación R^2 , también conocido como *grado de correlación*, define la proporción de variabilidad explicada por el modelo con respecto a la variabilidad total, razón por la cual se usa mucho para juzgar la calidad del ajuste del modelo de regresión. Su valor está comprendido entre 0 y 1, siendo un valor de $R^2=1$, cuando toda la variabilidad de Y se explica por el modelo de regresión y un $R^2=0$, cuando el modelo no explica absolutamente nada de Y . Una fuerte correlación puede ser dudosa y aleatoria si el número de datos es pequeño, mientras que una débil correlación puede ser significativa si el número de datos es suficientemente grande.

$$R^2 = \frac{SCR}{SCT} \quad \text{o} \quad R^2 = 1 - \frac{SCE}{SCT} \quad (\text{Ec. 2.16})$$

La suma de cuadrados totales (SCT) se descompone en la suma de cuadrados de la regresión (SCR) y en la suma de cuadrados de los errores (SCE):

$$SCT = SCR + SCE \quad (\text{Ec.2.17})$$

2.10.2 Coeficiente de correlación (R)

El coeficiente de correlación es, al igual que el coeficiente de determinación, un parámetro estadístico que indica la importancia de la relación entre dos variables, y tales coeficientes determinan el grado y sentido de la relación. Se determina a partir de la siguiente ecuación:

$$R = \sqrt{R^2} \quad (\text{Ec. 2.18})$$

El coeficiente de correlación varía entre -1 y 1. Si R es positivo, indica que al aumentar el valor de unas de esas variables la otra también lo hace en el mismo sentido, todo lo contrario ocurre cuando R es negativo, al aumentar el valor de una variable el valor de la otra disminuye; es decir, el signo sólo expresa información acerca del sentido de la relación. Existe una escala la cual es tomada como una orientación para la interpretación de los coeficientes de correlación:^[20]

$0.0 \pm 0.20 \Rightarrow$ despreciable

± 0.21 a $\pm 0.40 \Rightarrow$ existe pero baja

± 0.41 a $\pm 0.70 \Rightarrow$ significativa

± 0.71 a $\pm 1.0 \Rightarrow$ alta

2.10.3 Análisis de varianza

Para probar la significación de la regresión se utiliza lo que se conoce como el método del *análisis de varianza*. A menudo el experimentador debe probar hipótesis que se refieren a los parámetros del modelo de regresión lineal múltiple, esto se logra a través del criterio de la *prueba de F* o *prueba de Fischer*. Por medio de esta prueba Fischer (F_0), se comparan las varianzas entre la variable dependiente y la variable independiente para hallar el número de Fischer. ^[21]

$$F_0 = \frac{SCR/k}{SCE/(n-k-1)} = \frac{MSR}{MSE} \quad (\text{Ec. 2.19})$$

donde:

MSR : cuadrado medio de la regresión.

MSE : cuadrado medio del error.

Una hipótesis estadística, o simplemente hipótesis, es una suposición o conjetura concerniente a la población. Antes de aceptar o rechazar una hipótesis, el experimentador debe probar la validez de la misma, puesto que puede o no ser verdadera. Un modo práctico sería probar la hipótesis usando una muestra de acuerdo con la teoría de la probabilidad. El resultado de la prueba conducirá a un estadístico ya sea a aceptar la hipótesis o rechazarla. La aceptación o rechazo conducirá al experimentador a tomar una decisión. Las hipótesis estadísticas que son establecidas para el propósito de posible rechazo o nulificación son llamadas hipótesis nulas. Una hipótesis nula es usualmente denotada por el símbolo H_0 . Cualquier hipótesis, la cual

difiera de la hipótesis nula, es llamada una hipótesis alternativa y es denotada por H_1 . [24]

La hipótesis nula y la alternativa para probar la contribución de la variable X_1 al modelo son:

- H_0 : la variable X_1 no mejora en forma significativa el modelo, una vez incluidas las variables X_2, X_3, \dots, X_k .
- H_1 : la variable X_1 mejora de forma significativa el modelo, una vez incluidas las variables X_2, X_3, \dots, X_k .

El procedimiento se resume en una tabla de análisis de varianza (ANOVA), como la que se muestra en la tabla 2.5.

Tabla 2.5 Análisis de varianza para la significancia de la regresión lineal múltiple. [19]

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Media de cuadrados	F_0
Regresión	SCR	K	MSR	MSR/MSE
Error	SCE	n-k-1	MSE	-
Total	SST	n-1	-	-

La forma de cada distribución F depende del número de grados de libertad que estén asociados a ella. Por lo general, en la práctica, el número de grados de libertad es igual al número de datos menos uno. Es conveniente señalar lo publicado en un trabajo realizado por J. M. Wetz en 1964 “*Criterio para juzgar adecuadamente la estimación mediante una función de respuesta aproximada*” donde se sugiere que una regresión deber ser considerada satisfactoria para predecir cuando el valor de F_0 exceda por lo menos 4 veces el valor de $F(\alpha, k, n-k-1)$, obtenido por la tabla. [2]

2.11 La multicolinealidad o alta correlación

Cuando se aplica un análisis de regresión se presenta un problema muy frecuente, como el caso donde las variables se encuentran correlacionadas. Si esta correlación es pequeña, la consecuencia puede ser considerada de índole menor, sin embargo si existe una correlación muy fuerte entre dos o más variables de predicción, los resultados obtenidos a través de la regresión serán ambiguos con respecto a los valores de los coeficientes de regresión estimados (β_i). Un coeficiente de correlación muy alto entre dos o más variables de predicción es lo que se conoce como multicolinealidad.

El efecto de la multicolinealidad no evita tener un buen ajuste (R^2), pero si afecta de forma severa las estimaciones de mínimos cuadrados, las cuales tienden a ser menos precisas para los efectos individuales de las variables de predicción; es decir, los coeficientes de regresión estimados no miden los efectos individuales sobre la respuesta sino que reflejan un efecto parcial sobre la misma, sujeto a todo lo que pase con las demás variables de predicción.

La multicolinealidad se estudia mediante los siguientes criterios:

- ***El análisis de la matriz de correlación***, en la cual los elementos que se encuentran en la diagonal son iguales a uno (1), indicando que cada variable está correlacionada de forma perfecta con sí misma; y los elementos que se encuentran fuera de la diagonal son los valores de los coeficientes de correlación simple, los cuales representan la dependencia entre variables; teniéndose que aquellos valores muy cercano a uno, sugieren una fuerte asociación lineal entre las variables.

- **La determinante de la matriz**, indicando la existencia de multicolinealidad en los datos cuando su valor tiene cercana aproximación a cero.

- **Autovalores de la matriz de correlación**, donde el indicativo son aquellos valores muy pequeños aunque ello no indica la severidad de la presencia de multicolinealidad. En vista de esto, es conveniente utilizar el criterio del valor de K , representado mediante la siguiente ecuación:

$$K = \text{autovalor}_{\text{máximo}} / \text{autovalor}_{\text{mínimo}} \quad (\text{Ec. 2.20})$$

- Si $0 < K < 100$, no existe problema serio de multicolinealidad.
- Si $100 \leq K \leq 1000$, la multicolinealidad se considera de moderada a fuerte.
- Si $K > 1000$, se esta en presencia de multicolinealidad severa.

- **Los factores infladores de la varianza**, son los elementos de la diagonal principal de la inversa de la matriz de correlación ($X'X$), siendo aquellos valores mayores que cinco (5) indicadores de multicolinealidad.

Cuando se presenta el problema de la multicolinealidad en el análisis de regresión se proponen varias alternativas para resolverlo, tales como: el aumento de datos, la estimación de mínimos cuadrados con restricciones, la selección de variables, regresión ridge, raíces latentes y regresión con componentes principales. ^[23]

2.12 Regresión con componentes principales

Supongamos que disponemos de m variables y n observaciones para cada una de las variables. La situación de estas variables podría representarse geoméricamente identificando cada variable con un vector y la no correlación lineal de dos variables como la ortogonalidad (ángulo de 90°) entre los vectores correspondientes. Por tanto estarán tanto más correladas cuanto más difiera su posición relativa del ángulo recto.

Mediante el *análisis de componentes principales* (PCA) se lleva a cabo una diagonalización de la matriz de covarianzas, que transforma las m variables originales en m nuevas variables incorreladas. En ese proceso se busca que la primera de las variables obtenidas explique la mayor variabilidad posible de todas las variables originales. Las demás estarán en posiciones sucesivas en este sentido, siempre conservando la incorrelación entre ellas. De este modo unas pocas variables explicarán un porcentaje suficientemente alto como para prescindir de las variables originales y trabajar a partir de ese momento con las nuevas. Así se podría reducir considerablemente la dimensión del análisis posterior.

El PCA se basará en la matriz de correlaciones más que en la de covarianzas o en la matriz de productos cruzados. Sus autovalores representan la variabilidad explicada por las componentes principales. Llegados a este punto es conveniente destacar la conveniencia de establecer un criterio para elegir unas pocas componentes que sean las más representativas. Los más utilizados son los siguientes:

- a) Autovalores mayores que 1 cuando se utiliza la matriz de correlación.
- b) Porcentaje de variabilidad explicada.
- c) Gráfico de sedimentación o de ladera: Momento en el que acaba el descenso y se estabiliza o bien cuando se alcanza el valor medio de los autovalores. ^[24]

2.13 Statistical package for social sciences (SPSS)

SPSS es la suite estadística más accesible en el mundo utilizado por organizaciones comerciales, gubernamentales o académicas para solucionar negocios y problemas de investigación. Es uno de los paquetes estadísticos más comúnmente empleado, debido a que posee un conjunto de potentes herramientas de tratamiento de datos y análisis estadístico. Permite realizar informes y gráficos estadísticos sin tener que conocer la mecánica del cálculo.

Existen diversos tipos de ventanas SPSS, aunque no todas ellas poseen la misma importancia desde el punto de vista de su utilidad para el usuario. Las dos ventanas principales (imprescindibles para trabajar con el SPSS) son:

- ***El editor de datos***: es una ventana de aspecto similar a una hoja de cálculo que contiene el archivo de datos sobre el que se basa la mayor parte de las acciones que es posible llevar a cabo con el SPSS. Ésta puede mostrar dos contenidos diferentes, los datos propiamente dichos y las variables del archivo acompañadas del conjunto de características que las definen.

- ***El visor de resultados***: recoge toda la información (estadísticos, tablas, gráficos, etc.) que el SPSS genera como consecuencia de las acciones que lleva a cabo.

Además para cargar la matriz de datos, este programa estadístico nos permite múltiples opciones, lo que da visión de su flexibilidad, ya que podemos obtener los datos desde un archivo de Word (eso si, con un determinado formato), desde archivos Excel, o propios de SPSS. Dentro de los métodos estadísticos disponibles en SPSS se encuentran: tablas de contingencia, descriptivos, frecuencias, estadísticos bivariantes, pruebas no paramétricas, regresión lineal, análisis factorial, entre otras. ^[25]

CAPITULO III

DESARROLLO DEL PROYECTO

3.1 Procesamiento de los datos operacionales de la sección de alimentación, reacción, separación, recontacto y estabilización de la unidad de reformación (U-20)

3.1.1 Revisión bibliográfica

La fase inicial para el desarrollo del proyecto fue la búsqueda de información referente a la unidad de Reformación de Nafta (U-20); el proceso en general que se lleva a cabo en la unidad y los equipos que la conforman, haciendo énfasis en los reactores D-2001, D-2002 y D-2003 de la zona de reacción, pues es en estos equipos donde ocurre la transformación química de la alimentación (Nafta) y por ende dependiendo de su correcto funcionamiento se logrará obtener un reformado entre un rango de 95 a 102 RONC, el cual es el objetivo principal de la unidad. Para ello se utilizaron los manuales de operación, diagramas y planos de la unidad, visitas a planta y la información suministrada por la consola de control de la planta, el ingeniero y los operadores de la planta.

3.1.2 Procesamiento de los datos de proceso

Aspen Technology Inc. tiene reservados los derechos sobre distintos programas computacionales útiles en el área de Ingeniería de Procesos, entre los que se encuentra el Aspen Process Explorer, el cual permite realizar un seguimiento diario

del comportamiento de distintas variables operativas de interés, a través de instrumentos de medición conectados en línea desde la planta, ver figura 3.1.

El seguimiento que realiza el ingeniero de las variables de proceso a través de este programa, puede ser de modo gráfico o en modo meramente numérico mediante valores que pueden tabularse en Excel; es decir, el programa identifica cada variable con un código o “tags”, el cual funciona como un vínculo a través del cual se puede tener acceso a la variable de particular interés, desde una hoja de cálculo Excel, lográndose de este modo establecer una base de datos.

Las propiedades de las corrientes, tanto de alimentación como reformado, requeridas para el diseño de las correlaciones, se obtuvieron por medio de pruebas rutinarias y especiales realizadas en las instalaciones del laboratorio PDVSA – Puerto La Cruz. El seguimiento de estos parámetros los realiza el ingeniero mediante el programa SQL+Lims, en el cual se reportan todos los resultados de laboratorio realizados en la refinería; estos valores, al igual que las variables operativas, son incluidos en la hoja de cálculo elaborada por éste. Entre los análisis correspondientes elaborados por el laboratorio están: la destilación atmosférica según el método ASTM D-86, gravedad API, presión de vapor Reid (RVP), contenido de benceno, entre otros.

A partir de esto, se verificó en la hoja de cálculo elaborada por el ingeniero de proceso encargado de la unidad, la cual se encuentra estructurada diariamente, que los días mantuvieran una secuencia lógica al comienzo y final de cada mes, para de esta manera poder asegurar la continuidad del proceso y además evitar seleccionar grupos de datos con valores no correspondientes a los esperados en una operación normal de la planta ya sea por causas imprevistas como una parada de planta, cambio de operación de los reactores a lecho fijo por falta de Nitrógeno a la sección de regeneración, entre otros

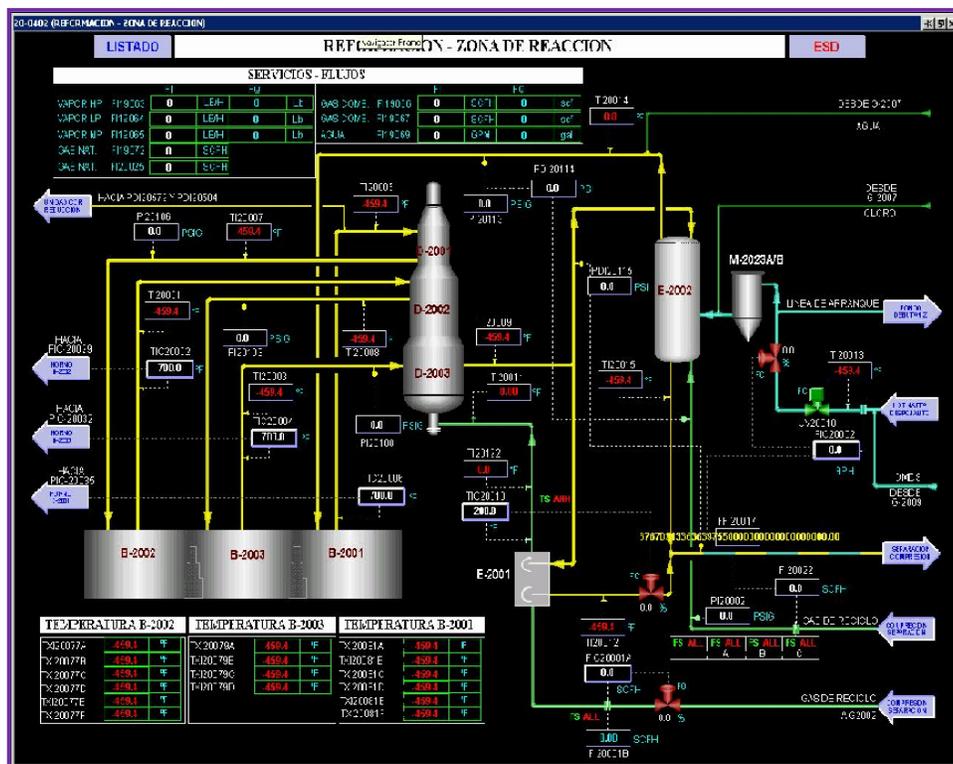


Figura 3.1 Vista de la zona de reacción de la unidad de reformación a través del programa Aspen Process Explorer.

En vista de que en la planta no se cuenta con una toma de muestra para el efluente líquido inestable proveniente de la sección de reacción y que dicha toma para el efluente líquido ya estable (reformado) se encuentra a la salida de la torre desbutanizadora D-2011, fue necesaria la inclusión no sólo de las variables operativas de la zona de reacción, considerada la sección más importante del proceso, sino también de las variables claves correspondientes a las secciones tanto de separación, recontacto y estabilización, como se muestra en la figura 3.2.

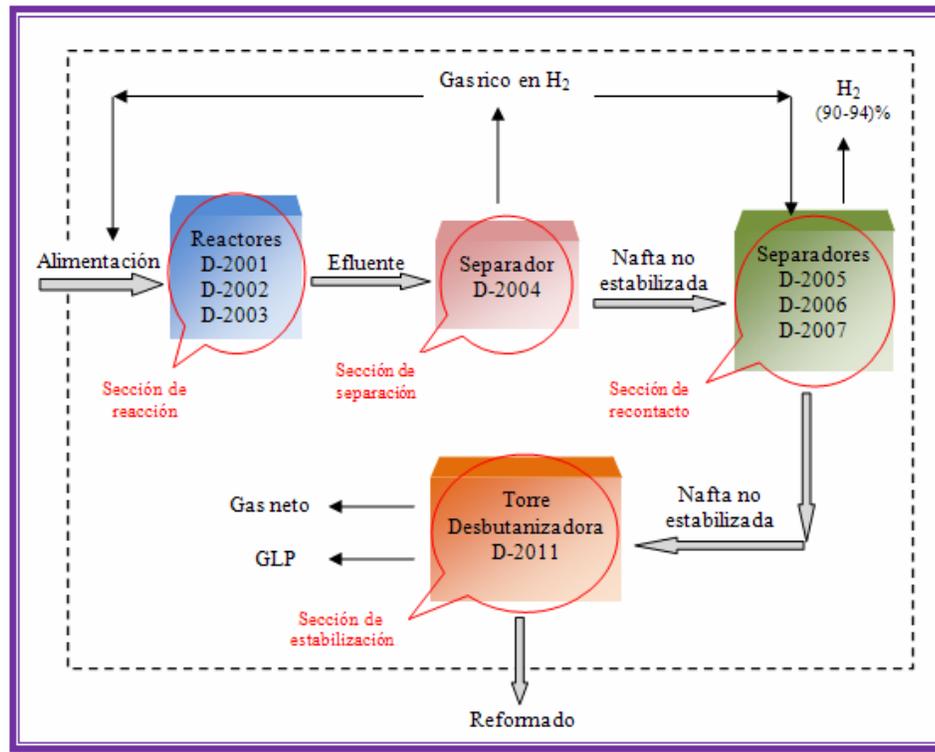


Figura 3.2 Diagrama de bloque de los equipos y secciones que conforman la unidad de Reformación.

Una vez verificado estos puntos, se procedió a tomar la data previamente descrita y elaborar una nueva hoja de cálculo, como se muestra en parte en la tabla 3.1. En ella se plasmó la data correspondiente a tres meses (Mayo, Junio y Julio) del año 2008, teniéndose de esta manera un tamaño de muestra lo suficientemente grande para lograr obtener correlaciones de alto grado de confiabilidad y además por poseer ésta una información estable de los parámetros operacionales en estudio de la unidad 20. Los espacios en blanco observados en dicha tabla, para la data del contenido de azufre (S), se debe a que el análisis de laboratorio aplicado a éste parámetro se realiza dos o tres veces por semana o cuando el ingeniero así lo requiera.

Tabla 3.1 Variables operacionales de la sección de alimentación y reacción para los meses sometidos a estudio.

FECHA	API	N+2A	IBP	EP	S	WAIT	DT1	DT2	DT3	LHSV	H2/HC
1/5/08	53,200	71,980	208,100	364,000		965,002	175,220	112,390	67,470	1,766	4,075
2/5/08	52,900	71,980	207,700	343,800		966,820	180,930	111,000	69,570	1,802	3,823
3/5/08	53,100	72,590	214,000	346,100	0,450	970,993	186,290	114,030	66,480	1,902	3,588
4/5/08	53,500	72,590	204,300	344,100		971,033	188,640	115,320	67,200	1,904	3,557
5/5/08	53,500	72,590	205,200	343,600		971,000	187,360	114,950	68,460	1,904	3,643
6/5/08	53,400	69,720	200,600	354,500	0,500	971,007	187,810	114,000	67,580	1,904	3,581
7/5/08	53,600	69,720	206,600	346,600	1,330	972,557	189,090	113,850	66,640	1,940	3,565
8/5/08	53,400	69,050	206,000	355,300	0,560	974,023	192,160	115,810	65,550	1,970	3,057
9/5/08	53,700	69,050	203,900	345,400		974,084	191,280	114,830	64,050	1,970	2,968
10/5/08	53,800	69,300	201,000	344,300	0,550	974,573	185,250	109,840	58,610	1,971	2,733
11/5/08	53,100	69,300	205,000	347,400		975,045	180,990	114,590	61,830	1,968	2,808
12/5/08	53,200	69,300	205,500	353,300	0,440	973,114	186,800	98,190	58,770	1,906	3,006
13/5/08	53,400	68,800	208,500	345,400		964,898	171,250	82,400	47,760	1,700	4,721
14/5/08	53,000	68,800	211,300	350,200	0,440	967,217	165,900	76,980	45,010	1,699	4,787
15/5/08	53,000	70,730	210,900	351,000	0,680	968,973	164,200	81,660	45,110	1,699	4,630
16/5/08	53,000	70,730	213,400	345,700	0,950	977,736	176,800	106,580	48,060	1,800	4,060
17/5/08	53,000	72,450	208,000	349,600	0,850	989,911	199,560	104,340	55,680	1,969	3,533
18/5/08	53,800	72,450	203,400	352,200		989,989	199,620	116,470	49,300	1,973	3,448
19/5/08	53,800	72,450	186,700	350,200		990,004	198,990	117,070	60,500	1,970	3,320
20/5/08	53,600	70,340	202,900	350,000	0,940	989,965	197,510	117,500	61,390	1,971	3,042
21/5/08	53,800	70,340	202,600	359,800		948,156	156,370	90,530	43,850	1,601	3,632
22/5/08	53,300	71,370	209,300	345,000		964,961	172,890	100,500	52,590	1,637	3,870
23/5/08	53,300	71,370	209,200	345,000		964,877	180,470	107,590	58,210	1,636	3,963
24/5/08	52,900	71,370	216,700	363,700		963,021	178,190	106,510	62,360	1,635	3,908
25/5/08	52,900	71,370	212,500	348,100		963,089	176,730	106,530	60,380	1,635	3,901
26/5/08	53,000	71,370	210,000	348,600		963,006	177,600	108,170	60,680	1,635	3,835
27/5/08	53,100	72,190	214,500	352,800		963,004	178,850	109,010	63,350	1,635	4,327
28/5/08	53,000	72,190	216,700	351,000	0,790	963,726	171,950	103,860	59,380	1,636	4,567
29/5/08	53,100	72,190	216,500	350,000	0,600	966,080	166,120	99,250	55,530	1,635	4,641
30/5/08	53,200	72,190	208,200	365,100		966,125	159,340	92,100	51,340	1,634	4,857
31/5/08	53,100	69,660	214,000	349,700	0,600	965,808	158,510	98,870	52,360	1,634	4,364

donde:

API: Gravedad API

N+2A: Índice de reformabilidad

IBP: Punto inicial de ebullición

EP: Punto final de ebullición

S: Azufre

WAIT: Temperatura promedio de entrada al reactor por peso

DT1, DT2, DT3: Delta de temperatura del primer, segundo y tercer reactor

LHSV: Velocidad espacial

H2/HC: Relación hidrógeno e hidrocarburo

La tabla 3.1 se encuentra de forma completa en el anexo B, así como las demás tablas correspondientes a cada una de las secciones que conforman la unidad de reformación.

Cabe destacar que la muestra fue sometida a una purificación de datos donde se eliminaron todos aquellos valores extremos que pudieran afectar los resultados de los estadísticos de regresión, con la finalidad de obtener datos consistentes. Para ello se elaboraron gráficas de dispersión entre las variables dependientes (RONC y REND) y cada una de las variables independientes, utilizando la herramienta Excel, donde podían ser observados los puntos atípicos a eliminar. Las celdas sombreadas de las tablas del anexo B fueron los datos eliminados, quedando una muestra de 89 datos de un total de 92, para realizar posteriormente los análisis necesarios para la construcción de los modelos. En la figura 3.3 se muestra un ejemplo de dos puntos atípicos que posteriormente fueron eliminados, estos pertenecen a los días 12/07/08 y 17/07/08.

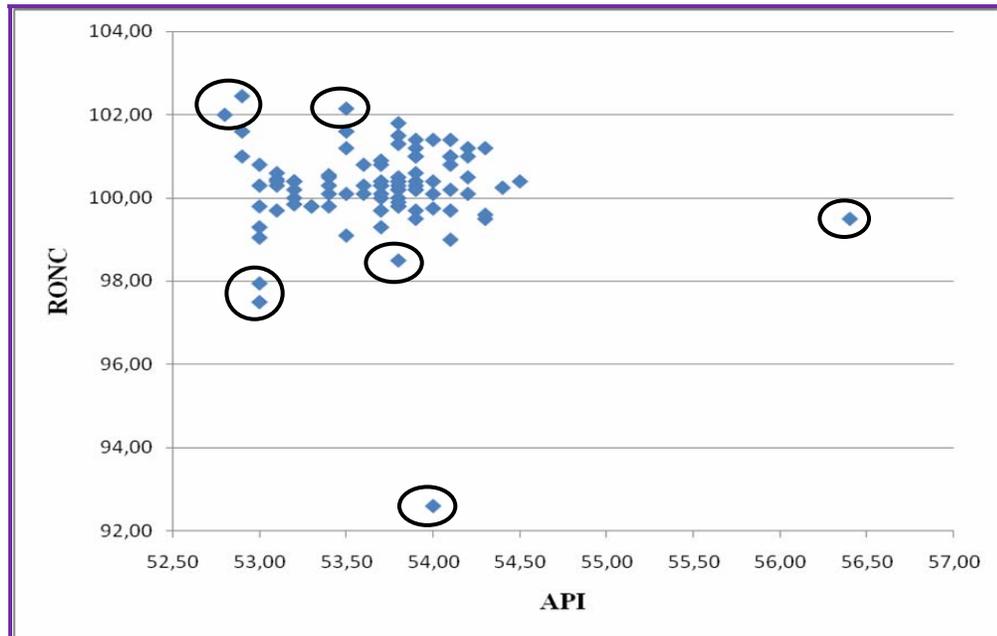


Figura 3.3 Gráfica de dispersión entre el RONC y API (ejemplo).

3.2 Selección de las variables a utilizar para el diseño de los modelos de regresión

Como el desempeño de la unidad se mide generalmente a través del número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND), éstos fueron entonces los parámetros seleccionados para el análisis del comportamiento de la unidad de reformación (variables dependientes) y las variables operativas consideradas, tanto por los manuales de operación del licenciante de la unidad como por el ingeniero encargado de la unidad, las de mayor relevancia para representar el comportamiento de éstos parámetros en el proceso de reformación (variables independientes o regresoras) son las mostradas en el anexo B. Es importante señalar que para la selección de las variables operativas del separador, tambores de recontacto y torre estabilizadora, se aplicó un criterio básico donde se escogieron las variables operacionales intrínsecas de cada equipo y las de más fácil medición como la temperatura, presión y nivel, las cuales describen de manera satisfactoria el comportamiento de cada uno de estos equipos y en general afectan directamente al

proceso; esto teniendo en cuenta que los reactores son los equipos de interés pues es en ellos donde se obtienen los compuestos aromáticos que aumentarán el número de octano de la nafta y por ende la cantidad de éstos como líquido reformado, es decir, su rendimiento.

Para la selección de las variables independientes a utilizar en el diseño de los modelos se aplicó el método gráfico, el cual consiste en graficar cada una de las variables dependientes con cada una de las demás variables independientes implicadas en el proceso de reformación, esto con la finalidad de distinguir la relación que existe entre ellas y así poder hacer una selección adecuada de las variables independientes que más aporten para la construcción de los modelos siendo seleccionadas aquellas que presentaron mayor grado de relación con las variables dependientes RONC y REND, para ello se usó el programa Excel. Las gráficas obtenidas, como por ejemplo la figura 3.4, se muestran en los anexos C-G y las variables seleccionadas mediante este método se encuentran en la tabla 4.2 del capítulo 4.

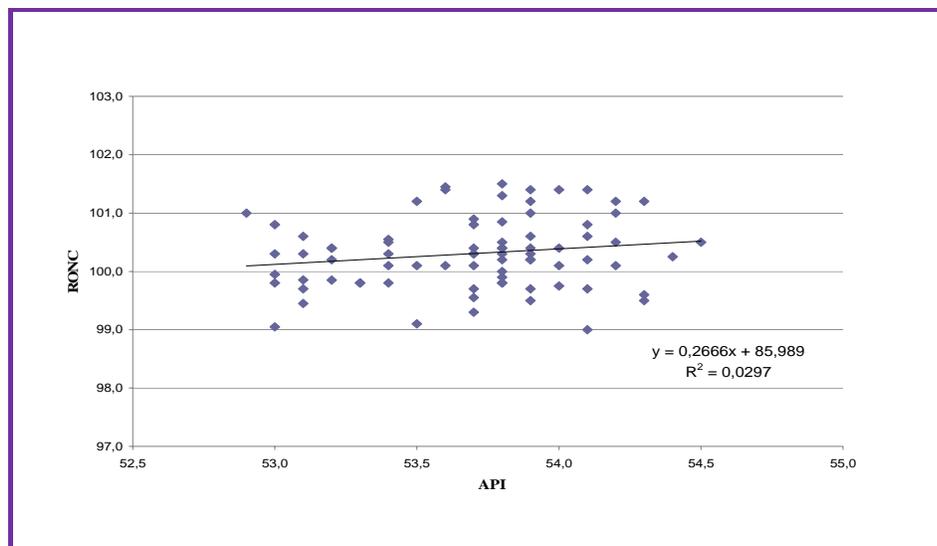


Figura 3.4 Ajuste lineal de la relación RONC Vs API (ejemplo).

De acuerdo a la data operativa, la carga de alimentación se mantiene en un rango de (21,58-29,04) MBD, cuyos valores se encuentran dentro de los límites de capacidad mínima (17,5 MBD) y máxima (35,0 MBD) de procesamiento de la unidad, entonces este mismo rango es válido para el uso de cada uno de los modelos de regresión a diseñar. Por otra parte, la presión de los lechos catalíticos de los reactores de la sección de reacción por ser una variable de diseño no manipulada operacionalmente y mantenerse dentro de este rango (46,02-48,69) psig, se asumió constante para efectos de este trabajo y no fue considerada en el estudio; sin embargo, es importante mencionar que la presión tiene una influencia considerable sobre el funcionamiento de la unidad pues afecta los rendimientos de la unidad, los requerimientos de temperatura del reactor y la estabilidad del catalizador. En el anexo B.4 se encuentran los rangos correspondientes para cada variable involucrada en estos modelos.

De igual manera, la sección de regeneración del catalizador y sus variables no fueron tomadas en cuenta en la realización de este proyecto debido a la complejidad de su funcionamiento el cual amerita una atención exclusiva y dedicada pues es un proceso completo que posee otras reacciones y mecanismos que implican el estudio de una cantidad extra de variables. Por los motivos antes expuestos, se manejó el catalizador a condiciones ideales, es decir, no se tomó en cuenta el envejecimiento que experimenta el catalizador con el tiempo y sus consecuencias inminentes en el desempeño de la sección de reacción y por ende en el reformado. Esta consideración fue posible porque en los meses considerados para realizar el estudio, la torre de regeneración realizó un buen desempeño, manteniendo el contenido de coque del catalizador regenerado en un valor muy bajo alrededor de 0,01 %, lo que garantiza que el funcionamiento de los reactores se mantenga dentro de los estándares deseados para el proceso.

3.3 Elaboración de la matriz de correlación con las variables involucradas en el desarrollo de los modelos matemáticos

El paquete estadístico a utilizar para obtener la matriz de correlación con las variables seleccionadas para el desarrollo de los modelos de regresión es el programa SPSS versión 17.0, el cual aplica el método de los mínimos cuadrados ordinarios (M.C.O). Se consideró que la dependencia del número de octano y rendimiento del reformado con cada una de las variables en estudio era lineal (ver gráficas de los anexos C-G) empleando para el análisis de su comportamiento el método de la regresión lineal múltiple.

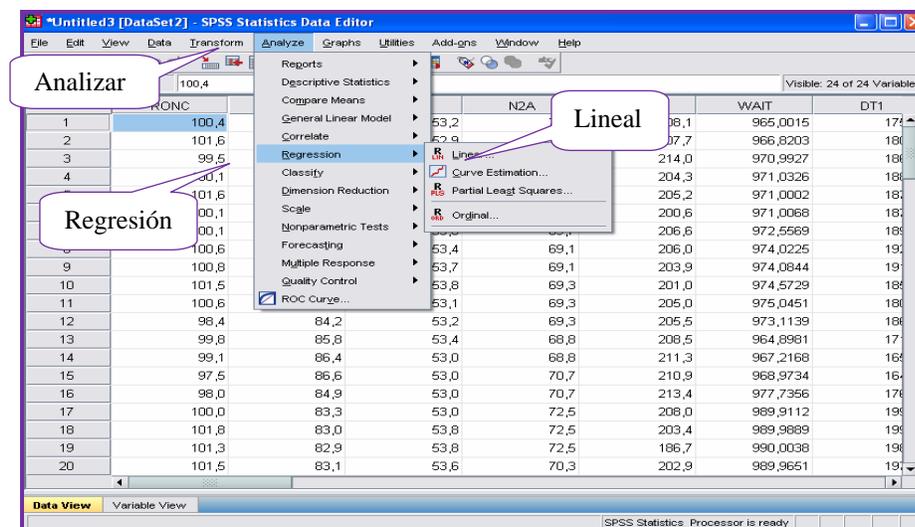


Figura 3.5 Vista de la ventana de escogencias de análisis en el editor de datos.

Para la elaboración de la matriz de correlación en SPSS, se procedió a ejecutar el procedimiento siguiente:

- a) Se introducen los datos en el *editor de datos*, cuyo aspecto y metodología es similar al de una hoja de cálculo Excel.

b) Se selecciona el tipo de análisis que se requiera, para el caso en cuestión se escogió el análisis de regresión lineal siguiendo los comandos: **Analizar -> Regresión -> lineal** (Figura 3.5)

c) Tras la realización de la operación anterior aparecerá el cuadro de diálogo mostrado en la figura 3.6, en el cual se procederá a introducir la variable o variables dependientes del modelo (Y) así como las variables independientes del mismo (X). Para el caso en estudio, la variable dependiente es el número de octano (RONC) y las variables independientes son las seleccionadas en la etapa anterior. En este paso, en la opción *Estadísticos*, se seleccionan los análisis que se desean aplicar a los datos.

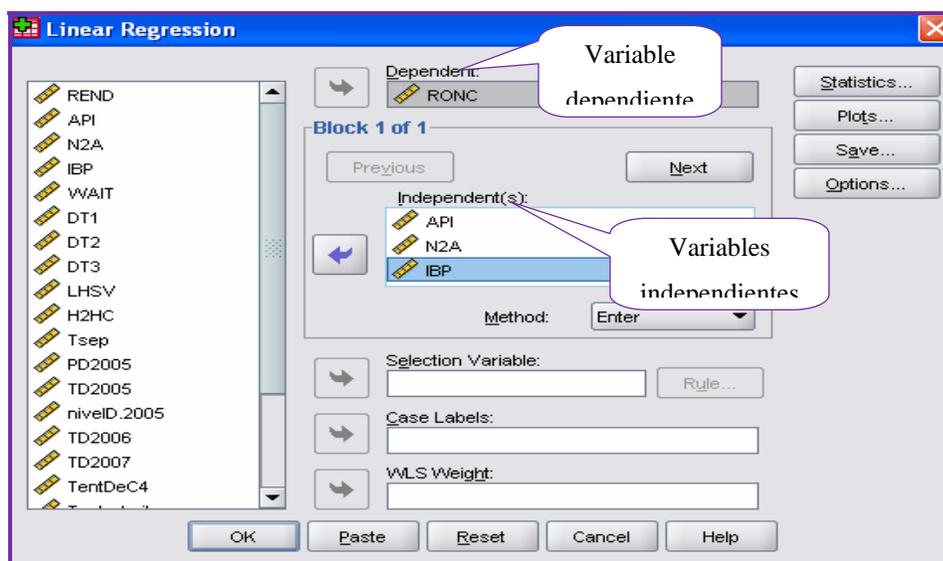


Figura 3.6 Vista de la ventana para la regresión lineal en el SPSS.

a) Una vez determinados todos estos pasos se procederá a buscar posibles relaciones entre las variables independientes, para ello se selecciona la opción OK y

aparecerá la ventana *visor* en la que se muestra la matriz de correlación deseada, mostrada en la figura 3.7.

	RONC	API	NZA	IBP	EP	S	DWAIT	D1	D2	D3	LHSV	H2HC	Tsep
Pearson Correlation	1,000	,467	-,150	-,397	-,079	,092	,332	,116	,402	,470	,179	-,232	,179
	API	1,000	-,629	-,752	,071	,478	,373	,044	,303	,351	,401	-,313	-,101
	NZA	-,159	-,629	1,000	,514	-,329	-,099	-,240	,109	,096	,002	-,214	-,237
	IBP	-,397	-,752	,514	1,000	-,160	-,269	-,337	,015	-,150	-,225	-,310	,246
	EP	-,078	,071	-,328	-,160	1,000	-,085	,087	-,111	-,172	-,102	-,146	,057
	S	,092	,478	-,099	-,269	-,095	1,000	,028	,099	,344	,196	,158	,049
	DWAIT	,332	,373	-,240	-,337	,097	,028	1,000	-,111	,192	,292	-,096	-,071
	D1	,116	,044	-,109	,015	-,111	,099	-,111	1,000	,747	,657	,931	-,709
	D2	,402	,303	,096	-,150	-,172	,344	,192	,747	1,000	,872	,754	-,643
	D3	,470	,351	,002	-,225	-,102	,196	,292	,657	,872	1,000	,780	-,833
	LHSV	,179	,401	-,214	-,310	-,146	,158	-,096	,931	,754	,780	1,000	-,834
	H2HC	-,232	-,313	-,237	,246	,057	,049	-,071	-,709	-,643	-,633	-,834	1,000
	Tsep	,098	,025	-,151	-,025	-,084	-,280	,139	,821	,389	,388	,517	-,458
	PD2005	-,491	-,410	,013	,292	,148	-,299	-,347	-,594	-,659	-,897	-,858	-,598
	TD2005	,302	,378	-,251	-,181	-,104	,128	,270	,616	,611	-,594	,577	-,514
	PD2006	-,183	-,426	-,390	,488	-,183	,045	-,372	,626	,429	,344	,371	-,147
	TD2006	-,157	-,027	-,125	,061	,179	,086	-,108	,272	,190	,199	,186	,063
	PD2007	-,189	-,426	-,395	,485	-,172	,028	-,390	,630	,441	,362	,389	-,181
	TD2007	-,123	-,038	-,116	,054	,142	,052	-,066	,307	,227	,248	,224	,012
	ToppDec4	,310	,599	-,424	-,573	,217	,292	,401	-,546	-,176	-,101	-,244	,161
	PhppDec4	-,156	-,471	-,373	,470	-,167	,999	-,257	,588	,384	,247	-,253	-,002
	TotDec4	,411	-,150	,326	,206	-,201	,189	,278	,351	,616	,695	,241	-,099
	PbotDec4	-,017	-,199	-,324	,330	-,132	,388	-,208	,353	,379	,366	,164	-,159
Sig. (1-tailed)	RONC	,005	,200	,015	,341	,333	,000	,270	,014	,004	,172	,109	,200
	API	,005	,000	,000	,000	,354	,004	,021	,499	,052	,028	,014	,046
	NZA	,200	,000	,002	,038	,302	,100	,284	,308	,497	,128	,104	,104
	IBP	,015	,000	,002	,199	,075	,034	,468	,215	,116	,040	,095	,095
	EP	,341	,354	,038	,199	,327	,324	,279	,181	,297	,220	,282	,282
	S	,333	,304	,302	,075	,327	,441	,319	,031	,319	,150	,202	,398
	DWAIT	,000	,034	,000	,034	,354	,441	,319	,168	,066	,036	,064	,364

Figura 3.7 Vista de la matriz generada por el programa SPSS en la ventana *visor*.

En esta matriz obtenida, mostrada en la tabla H.2 del anexo H, se observó indicios de multicolinealidad entre las variables regresoras ya que se observan altas correlaciones en un número considerable de ellas, esto es indicativo de que existe información redundante y, por tanto pocos factores explicarán gran parte de la variabilidad total, razón por la cual se procede al estudio de este problema tan frecuente en análisis de regresión donde se encuentran involucradas tantas variables. La detección del problema de la multicolinealidad se estudia mediante los siguientes criterios:

3.3.1 Análisis, autovalores y factores infladores de varianza (V.I.F) de la matriz de correlación ($X^T X$)

Esta matriz es proporcionada por el programa SPSS y muestra el valor del coeficiente de correlación, en las filas se muestra el grado de relación que existe entre una variable y las demás; así por ejemplo la primera fila muestra el grado de relación del número de octano (RONC) con el resto de las variables estudiadas. Estos valores extraídos de la matriz que presentan altas correlaciones entre las variables independientes se muestran en la tabla 4.3 del capítulo 4.

En cuanto a los autovalores (Eigenvalue) de la matriz de correlación y los factores infladores de la varianza (V.I.F), éstos también se obtienen directamente a partir del programa SPSS seleccionando en el menú “*Estadísticos*”, cuyo cuadro de diálogo aparece en la figura 3.8, la opción “*diagnóstico de colinealidad*”. Los resultados se encuentran en el anexo H.

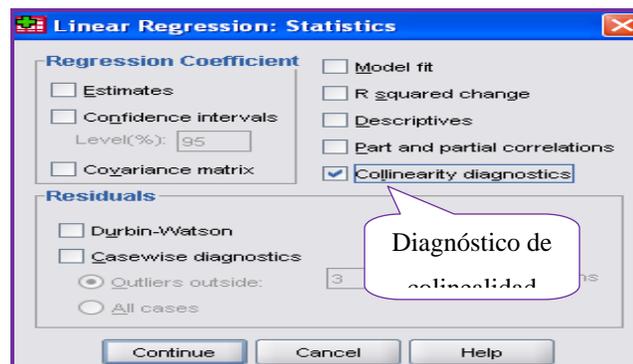


Figura 3.8 Vista del cuadro de diálogo “Estadísticos” del menú regresión lineal en el SPSS.

Para conocer la severidad de la multicolinealidad entre las variables, se utilizó el criterio del valor de K . Empleando la ecuación 2.20 y los valores de la tabla H.3 del anexo H, se tiene para el RONC:

$$K = 6,4437/0,0260 = 247,8346$$

De manera análoga se procede para el rendimiento del reformado. Estos valores se encuentran en la tabla 4.4 del capítulo 4.

3.3.2 Determinante de la matriz ($X'X$)

Para obtener el valor de la determinante se procedió a utilizar el programa MATLAB (abreviatura de *MATrix LABoratory*, "laboratorio de matrices") versión 7.0, el cual es un programa de cálculo numérico orientado al manejo de matrices que ofrece un entorno de desarrollo integrado con un lenguaje de programación propio. La elaboración de un programa para MATLAB es muy sencilla, basta abrir un documento de texto y escribir las instrucciones tal como se pondrían en la ventana de comandos. En la tabla 3.2 se muestran algunos de los comandos establecidos para trabajar con matrices en MATLAB.

Tabla 3.2 Algunas funciones definidas para matrices por MATLAB.

FUNCIÓN	DEFINICIÓN
<code>det</code>	Determinante
<code>inv</code>	Matriz inversa
<code>Poly</code>	Polinomio característico
<code>'</code>	Transpuesta

Una vez terminado el proceso de inicialización de MATLAB, aparece en pantalla la ventana principal del programa donde se procedió a cargar la matriz de correlación ($X'X$) obtenida en SPSS, como se muestra en la figura 3.9, y luego se calcula el valor de la determinante de la matriz ($X'X$) introduciendo el comando `det`, el cual es el establecido por MATLAB para calcular la determinante de una matriz.

Los valores de la determinante tanto para el RONC como para el REND están reflejados en la tabla 4.4 del capítulo 4.

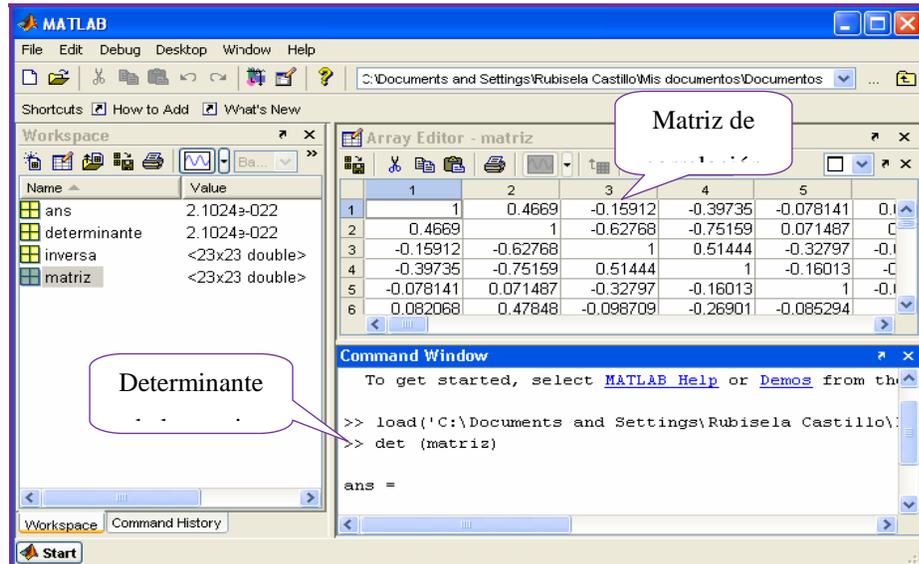


Figura 3.9 Vista de la ventana principal de MATLAB para el cálculo de la determinante de la matriz.

3.4 Obtención de los modelos matemáticos mediante métodos estadísticos, respecto al número de octano y rendimiento del reformado

En vista de los posibles problemas de multicolinealidad presente entre las variables, la estimación de los coeficientes estadísticos por el método de los mínimos cuadrados no es la más indicada, razón por la cual dichos coeficientes serán determinados mediante el método alternativo de las componentes principales (C.P).

3.4.1 Selección de los componentes principales

En la estimación del modelo de regresión se empleó el análisis de C.P., mediante el cual se buscarán unas pocas variables nuevas (componentes principales)

que resuman la información contenida en la totalidad de las variables originales seleccionadas.

Para la obtención de dichos componentes principales se hizo uso del software de análisis estadístico *R* versión 2.10.0. Éste es un software de código abierto altamente recomendable por lo robusto y potente de las rutinas que tiene implementadas en su paquete base y de rutinas especializadas. El paquete *R*, es un programa muy parecido a MATLAB a diferencia de ser un software diseñado para uso exclusivo en aplicaciones estadísticas. Para obtener las componentes principales se procede a cargar, en la ventana principal del programa *R*, el conjunto de datos de las variables seleccionadas para el RONC mostradas en la tabla 4.2 y luego, se introduce el comando *princomp* (ver figura 3.10), el cual proporciona el conjunto de componentes junto a su desviación estándar, proporción de la varianza y varianza acumulada. Éstos resultados tanto para el RONC como para el REND se muestran en el anexo I.

La selección de los factores o componentes principales se realizará de tal forma que el primero recoja la mayor proporción posible de la variabilidad original; el segundo factor debe recoger la máxima variabilidad posible no recogida por el primero, y así sucesivamente. Del total de factores se elegirán aquéllos que recojan el porcentaje de variabilidad que se considere suficiente. No hay una regla definida sobre el número que se debe utilizar, por lo cual se debe aplicar algún tipo de criterio para su selección, en este caso, se estableció el criterio del porcentaje de la variabilidad explicada acumulada (cumulative proportion en inglés) para elegir los componentes que serán los más representativos para la construcción de los modelos de regresión. Los componentes seleccionados se encuentran reflejados en la tabla 4.5 del capítulo 4.

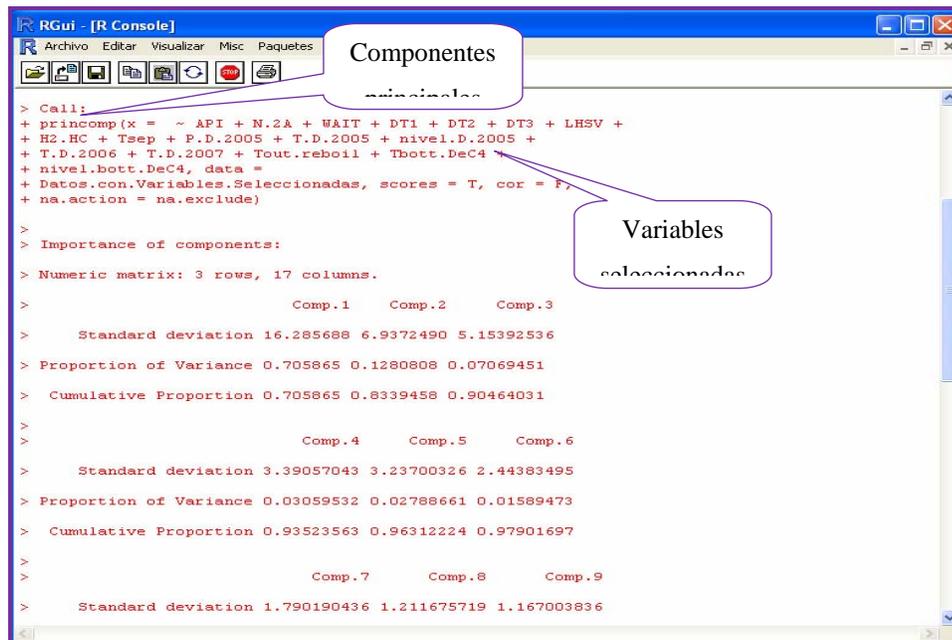


Figura 3.10 Vista de las componentes principales (C.P) generadas por el software estadístico *R*.

3.4.2 Estimación de los modelos de regresión

Para la estimación de los coeficientes y establecimiento de los modelos de regresión con los componentes principales seleccionados, se aplicó el método de los mínimos cuadrados parciales (PLS, por sus siglas en inglés) debido a que es el método más adecuado para analizar datos que se caracterizan por muchas variables predictoras, con problemas de multicolinealidad. La metodología PLS generaliza y combina características del análisis de componentes principales y análisis de regresión múltiple.

Para calcular estos coeficientes de estimación, se utilizó el paquete *R*. De manera análoga al procedimiento empleado para obtener las C.P, inicialmente se cargó en la ventana principal las componentes principales seleccionadas para el RONC, mostradas en la tabla 4.5. Después se seleccionó en la barra de herramienta

siguiendo los comandos **paquetes -> cargar paquetes**, el paquete *pcr* disponible en la librería de *R*, el cual contiene éste método PLS (ver figura 3.11). De esta manera se obtiene además de dichos coeficientes, la variabilidad explicada por cada uno de los componentes y los parámetros que permitirán la construcción del modelo de regresión, entre ellos: coeficiente de determinación, prueba de Fischer, cuadrado medio del error. Igualmente se procede para el REND. Todos estos resultados se encuentran en el anexo I y en forma general en la tabla 4.6 del capítulo 4.

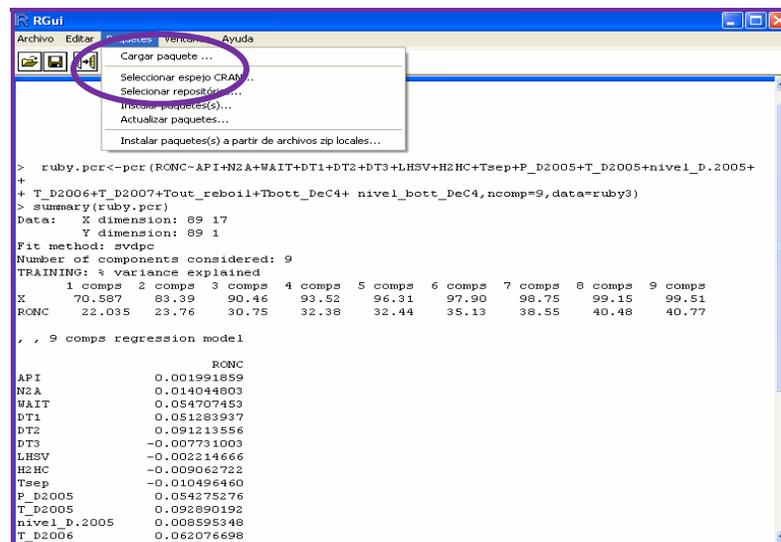


Figura 3.11 Vista del menú “Paquetes” en el software *R*.

En esta etapa, para contrastar el modelo de forma global, se establecen las hipótesis nula y alternativa:

- Hipótesis nula: $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_k = 0$. Nos indica que no existe relación lineal entre las variables Y (RONC, REND) y ninguna de las variables X_i (variables independientes seleccionadas).
- Hipótesis alternativa: H_1 : al menos una $\beta_k \neq 0$

Luego se calculará el estadístico de contraste, que es una observación de una distribución F , donde se buscará una relación entre la variación explicada por el modelo de regresión múltiple y la no explicada por el mismo modelo. Si el valor de F obtenido por el programa (calculado) supera el valor crítico (tabulado) de la distribución F , entonces rechazamos la hipótesis nula (H_0). Este valor de F tabulado se obtiene de la tabla de valores de la prueba de Fischer (anexo J), sabiendo los grados de libertad del numerador (regresión) y los del denominador (error) que se encuentran en los anexos I y K.

Para el caso del RONC, se tiene 17 grados de libertad para la regresión y 71 para el error, ver tabla I.4 del anexo I. Con estos valores y haciendo uso de la tabla de la prueba de Fischer, se ubica el valor y se obtiene una F tabulada de 1,557. De igual modo se procede con el REND. Todos estos valores se encuentran en la tabla 4.6 del capítulo 4.

3.5 Realización del análisis de sensibilidad a los modelos matemáticos obtenidos para los parámetros de calidad en estudio

En esta situación donde se dispone de un conjunto grande de posibles variables regresoras, se quiere saber si todas las variables deben entrar en el modelo de regresión y, en caso negativo, cuales deben entrar y que variables no deben entrar en el modelo de regresión. Es por esto que se hace necesario aplicar el análisis de sensibilidad, pues este análisis sirve para detectar parámetros a los que el modelo resulta insensible, en este caso será necesario eliminar algunos para simplificar el modelo.

Para ello se dispone de diferentes procedimientos estadísticos de construcción de la ecuación, en el caso en cuestión, bajo la hipótesis de que la relación entre las variables regresoras y la variable respuesta es lineal. Se escogió el procedimiento

“paso a paso” (Stepwise), el cual es una combinación de los métodos “Hacia delante” (Forward) y “Hacia atrás” (Backward), que permiten elegir el subconjunto de variables regresoras que deben entrar en el modelo de regresión. Este método es el más usado ya que realiza una reconsideración de las variables incluidas al realizar una inclusión nueva. Para la realización de este análisis se empleó el programa SPSS, donde se seleccionó el subcomando “*Método*”, cuyo cuadro de diálogo aparece en la figura 3.12, y luego especificando la opción *Stepwise*. En el anexo K, se encuentran tanto las variables seleccionadas mediante este método para las variables dependientes RONC y REND como los demás estadísticos necesarios para su análisis y en forma general en la tabla 4.6 del capítulo 4.

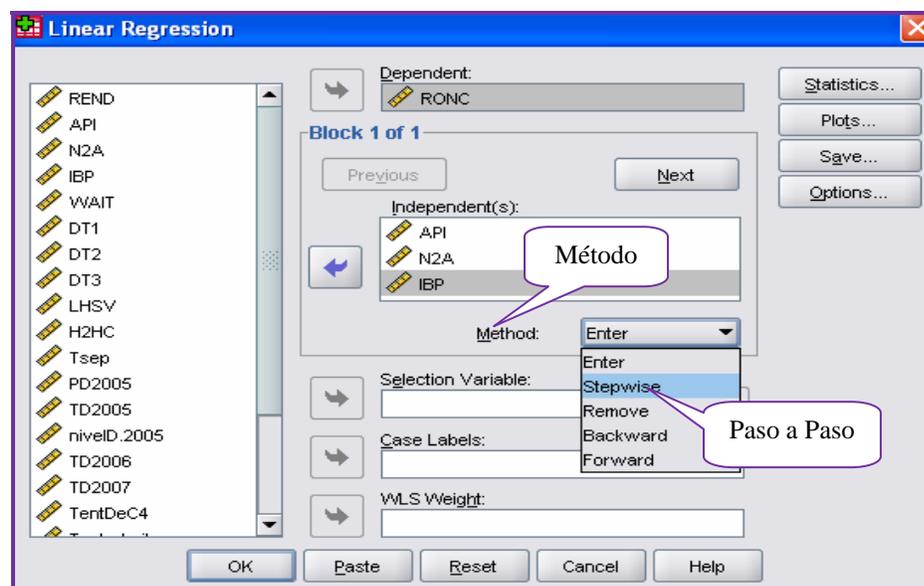


Figura 3.12 Vista del cuadro de diálogo “Método” del menú regresión lineal en el SPSS.

3.6 Cálculo del porcentaje (%) de error relativo

Se calculó el % de error relativo para cada una de las correlaciones obtenidas (RONC y REND) por el método C.P y Paso a Paso con la finalidad de verificar que el

modelo sea el más representativo y también observar que tanto se alejan los valores arrojados por estos métodos con respecto al valor real obtenido a través del proceso, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\% \text{Error} \cdot \text{relativo} = \left| \frac{Vobs - Vcal}{Vobs} \right| \times 100 \quad (\text{Ec. 3.1})$$

donde:

Vobs: valor observado o valor real.

Vcal: valor calculado por el modelo de regresión.

Los datos utilizados para estos cálculos fueron obtenidos de las tablas que se encuentran en el anexo L y no forman parte de la matriz de datos base para la obtención de los modelos, esto con la intención de conocer que tan confiables son ellos en la estimación del RONC y REND. Cabe destacar que estos nuevos datos se encuentran dentro del rango establecido en la tabla B.4 del anexo B y por lo tanto cumplen con las condiciones con las que fueron elaborados los modelos finales.

Por ejemplo, el modelo de regresión obtenido correspondiente al número de octano mediante la regresión de componentes principales (C.P) fue el siguiente:

$$\begin{aligned} \text{RONC} = & 0,00199 \mathbf{X}_1 + 0,01404 \mathbf{X}_2 + 0,05471 \mathbf{X}_4 + 0,05128 \mathbf{X}_5 + 0,09121 \mathbf{X}_6 \\ & - 0,00773 \mathbf{X}_7 - 0,00221 \mathbf{X}_8 - 0,00906 \mathbf{X}_9 - 0,01050 \mathbf{X}_{10} + 0,05428 \mathbf{X}_{11} \\ & + 0,09289 \mathbf{X}_{12} + 0,00860 \mathbf{X}_{13} + 0,06208 \mathbf{X}_{14} + 0,05957 \mathbf{X}_{15} - 0,02035 \mathbf{X}_{17} \\ & + 0,00993 \mathbf{X}_{19} + 0,12978 \mathbf{X}_{20} \end{aligned}$$

(Ec. 3.2)

Sustituyendo los valores correspondientes a la primera celda de la tabla L.1 en la ecuación 3.2 y luego sustituyendo este valor de RONC en la ecuación 3.1, se tiene:

$$\% \text{Error} \cdot \text{relativo} = \left| \frac{99,750 - 94,504}{99,750} \right| \times 100 = 5,259\%$$

Los valores del porcentaje de error arrojados por ambos métodos para el número de octano y rendimiento del reformado (incluyendo este resultado), así como los valores reportados por la empresa se encuentran en el anexo M.

CAPITULO IV

DISCUSIÓN DE RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Variables de proceso seleccionadas para el desarrollo de los modelos matemáticos

A continuación se muestran los resultados obtenidos de la relación lineal entre las variables dependientes e independientes para cada una de las secciones que conforman la unidad de Reformación.

4.1.1 Sección de alimentación

En la sección de alimentación, inicialmente se consideraron las variables: gravedad API, índice de reformabilidad (N+2A), punto inicial de ebullición (IBP), punto final de ebullición (EBP) y contenido de azufre (S); las cuales fueron graficadas con cada una de las variables dependientes, ver figuras en el anexo C.

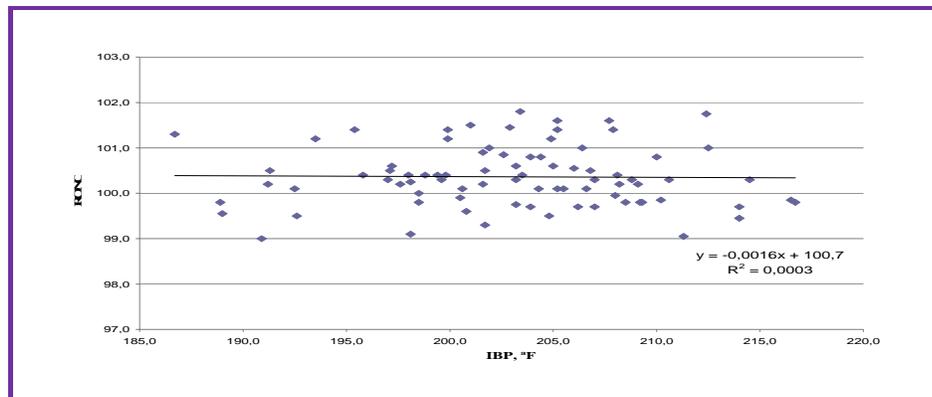


Figura 4.1 Ajuste lineal de la relación RONC Vs IBP.

En la figura 4.1 se tiene la gráfica de punto inicial de ebullición (IBP) en función del número de octano (RONC), donde el coeficiente de determinación (R^2) resultó poco significativo y por ende el coeficiente de correlación (R) como se muestra en la tabla 4.1, lo que indica que entre estas variables el grado de correlación es despreciable, reflejándose esto en la gran dispersión de los puntos en la gráfica. A continuación se muestra parte de la tabla 4.1, ella se encuentra de forma completa en la tabla H.1 del anexo H.

Tabla 4.1 Coeficiente de determinación (R^2) y de correlación (R) de las variables independientes graficadas, asumiendo linealidad.

Sección	Variables	RONC		REND	
		R^2	R	R^2	R
Alimentación	API	0,0297	0,1723	0,2537	0,5037
	N+2A	0,0296	0,1720	0,0444	0,2107
	IBP	0,0003	0,0173	0,1250	0,3536
	EP	0,0004	0,0200	0,0008	0,0283
	S	0,0007	0,0265	0,0007	0,0265
Reacción	WAIT	0,0205	0,1432	0,2047	0,4524
	DT1	0,1304	0,3697	0,5193	0,7206
	DT2	0,2061	0,3143	0,3528	0,5940
	DT3	0,0245	0,1565	0,1187	0,3445
	LHSV	0,0448	0,2117	0,2952	0,5433
	H2/HC	0,0509	0,2256	0,2198	0,4688

De manera similar, el punto final de ebullición (EBP), figuras C.7 y C.8, y contenido de azufre (S), figuras C.9 y C.10, resultaron con un R^2 y R poco significativo tanto para el RONC como para el REND, razón por la cual fueron

extraídas pues estos valores indican que estas variables guardan una relación lineal despreciable con las variables dependientes en estudio.

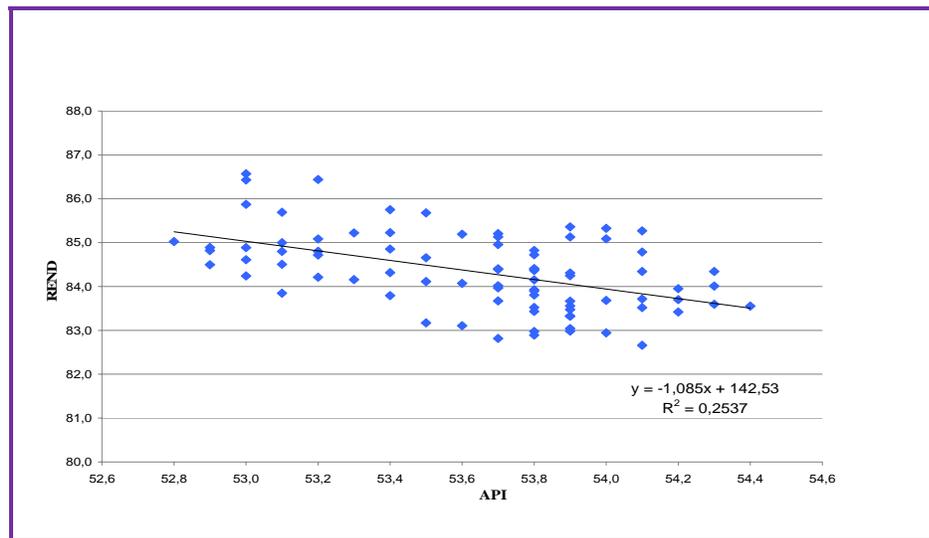


Figura 4.2 Ajuste lineal de la relación REND Vs API.

Por otro lado, debido a que la conversión de hidrocarburos de bajo número de octano en componentes con alto número de octano (el cual es el propósito de la reformación catalítica) puede sólo ser efectiva con hidrocarburos que puedan ser convertidos en aromáticos, razón por la cual la alimentación no debe contener hidrocarburos con cinco átomos de carbonos (C_5) que no puedan ser aromáticos y que no son fáciles de isomerizar bajo las condiciones de operación del reformador, se tiene que la gravedad API (figura 4.2) e índice de reformabilidad ($N+2A$) tanto para el RONC como para el REND, variables representadas en las figuras C.1-C.4, sí mostraron tener relación lineal con dichas variables dependientes. También presentó un grado de relación distinto de cero (ver figura C.6), el punto inicial de ebullición (IBP) para el REND.

4.1.2 Sección de reacción

Para la sección de reacción, las variables independientes inicialmente consideradas fueron: temperatura promedio de entrada (WAIT), delta de temperatura en primer reactor (DT_1), en el segundo reactor (DT_2) y en el tercer reactor (DT_3), velocidad espacial (LHSV) y relación hidrógeno/hidrocarburo (H_2/HC), ver figuras en el anexo D.

Como se observa en la figuras 4.3 y en el resto de las figuras del anexo D, todas las variables consideradas en esta sección mostraron significativa relación lineal con las variables dependientes RONC y REND, por lo tanto fueron seleccionadas para ser incluidas en la construcción de los modelos.

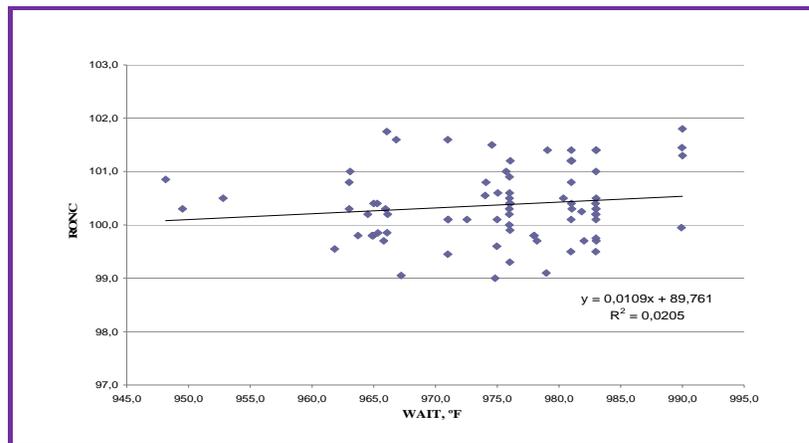


Figura 4.3 Ajuste lineal de la relación RONC Vs WAIT.

Los valores de coeficiente de determinación y de correlación se muestran en la tabla 4.1, donde se observan los valores más altos alcanzados para el RONC y REND de dichos parámetros estadísticos. Es lógico obtener estos resultados debido a que esta sección es el corazón de la planta de reformación pues es aquí donde ocurren las diversas reacciones, que hacen posible la transformación molecular de los

componentes de la alimentación convirtiéndolos en compuestos de cadena ramificada y aromática con altos valores anti-detonantes.

Como se puede apreciar en la tabla 4.1, la variable que presenta la mayor relación lineal en función del RONC ($R = 0,2061$) es el delta temperatura del segundo reactor (DT_2), donde principalmente toman lugar las reacciones de isomerización y deshidrociclización de parafinas que consisten en un complicado rearrreglo molecular partiendo de una parafina a un nafteno lográndose así un incremento en el número de octanos; y en función del REND ($R = 0,5193$) es el delta de temperatura del primer reactor (DT_1), donde ocurren las reacciones de deshidrogenación de naftenos las cuales son fáciles de promover y producen cuantitativamente hidrocarburos aromáticos.

4.1.3 Sección de separación

Para la sección de separación, las variables originales analizadas fueron la presión, temperatura y nivel del separador D-2004. Las gráficas de esta sección se encuentran en el anexo E.

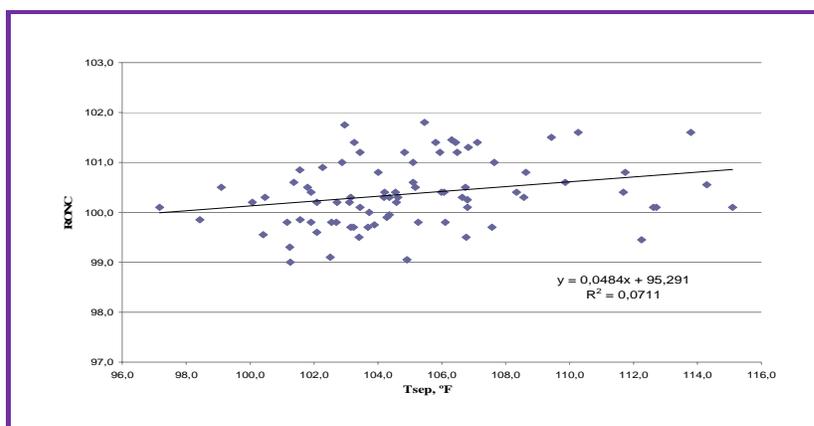


Figura 4.4 Ajuste lineal de la relación RONC Vs Tsep.

Tomando en cuenta que el volumen de gas que un separador removerá del petróleo crudo depende de las características físico-químicas del crudo, la presión de operación, la temperatura de operación, tamaño y configuración del separador, entre otros factores; para este caso se tiene que únicamente la temperatura del separador (T_{sep}), figura 4.4, siguió un mejor comportamiento lineal para ambas variables dependientes donde el coeficiente de determinación resultó ser 0,0711 para el RONC y 0,0624 para el REND (ver tabla 4.1); a diferencia de la presión del separador (P_{sep}), como se muestra en la figura 4.5 para el caso del RONC, y el nivel del separador (L_{sep}), figuras E.5 y E.6, en cuyas figuras no se evidencia una significativa relación lineal, observándose que la mayoría de los puntos se encuentran acumulados en una zona específica debido a que ambas variables mantienen valores casi constantes en el proceso de reformación.

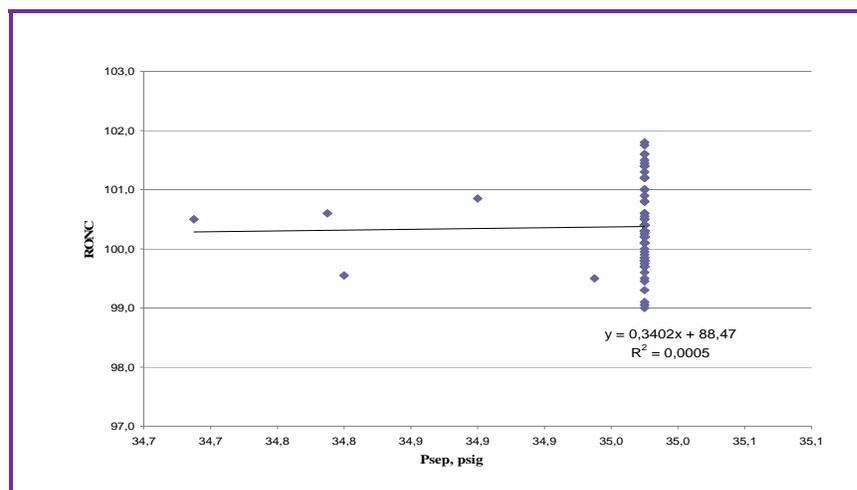


Figura 4.5 Ajuste lineal de la relación RONC Vs Psep.

4.1.4 Sección de recontacto

La sección de recontacto está conformada por la presión, temperatura y nivel de líquido de los tambores de recontacto D-2005, D-2006, D-2007. Las gráficas de cada

una de estas variables con las variables dependientes RONC y REND se encuentran reflejadas en las figuras del anexo F.

De este grupo las variables extraídas fueron la presión y nivel de los tambores de recontacto D-2006 y D-2007 (figuras F.9-F.12, F.15-F.18), pues estas 8 variables como se puede observar no reflejaron una buena relación lineal con respecto al número de octano y rendimiento del reformado, siendo pocos significativos sus valores de coeficiente de determinación y correlación, como se muestra en la tabla 4.1 y en sus respectivas gráficas. Cabe destacar, que al igual que en la sección de separación, la presión y nivel de estos tambores de recontacto siguen un comportamiento casi constante, como se evidencia en sus respectivas figuras con la acumulación de los puntos en un solo sector.

Debido a que los tambores de recontacto son esencialmente del mismo diseño y similar funcionamiento que el separador, pero generalmente más pequeños en dimensión, se tiene que la temperatura fue una variable que sí experimentó una relación lineal significativa en función del RONC y REND, ver figura 4.6, para los tres tambores de recontacto en estudio (D-2005, D-2006, D-2007) y también la presión y nivel del tambor de recontacto D-2005; por lo tanto fueron variables seleccionadas para ser incluidas en los análisis y construcción de los modelos de regresión.

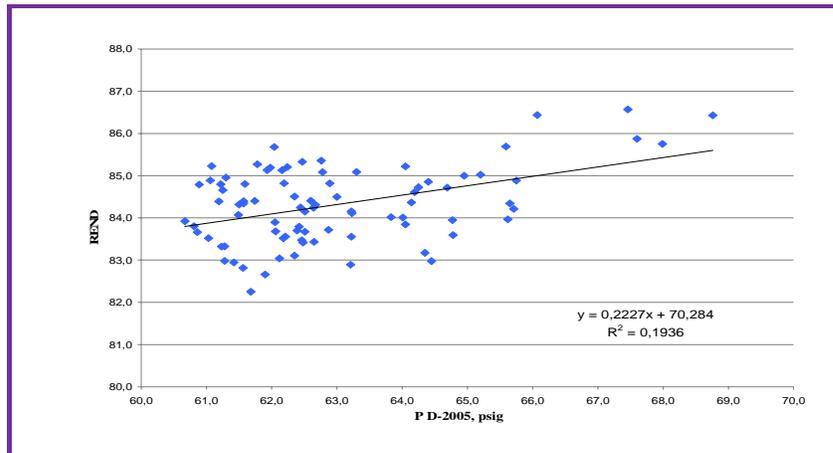


Figura 4.6 Ajuste lineal de la relación REND Vs P D-2005.

4.1.5 Sección de estabilización

En cuanto a la sección de estabilización, constituida por la torre desbutanizadora D-2011, las variables consideradas a análisis fueron la temperatura y presión tanto de tope como de fondo así como la temperatura del fluido inestable a la entrada de la torre y la temperatura de salida del horno rehervidor B-2004. Las figuras de esta sección se encuentran en el anexo G.

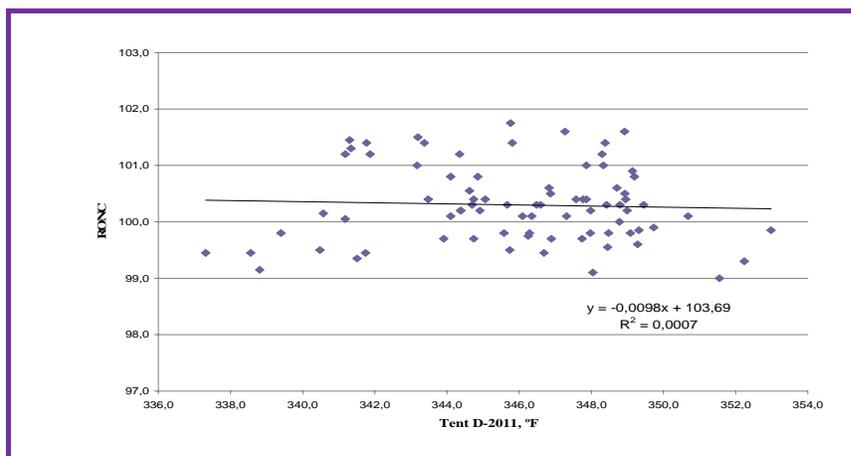


Figura 4.7 Ajuste lineal de la relación RONC Vs TentDeC4.

Para el número de octano, la temperatura del fluido a la entrada del D-2011 y la temperatura y presión del tope así como la presión del fondo mostraron una despreciable relación lineal en función de esta variable dependiente. En la figura 4.7, así como en las figuras G.1, G.5, G.7, G.11 se muestra una notable dispersión de los puntos en estas gráficas lo que conlleva a unos valores de R^2 y R poco significativos, ver tabla 4.1, reflejando la poca afinidad lineal que presentan estas variables con respecto al RONC. Una de las razones de peso para la obtención de estos resultados es que la torre desbutanizadora es un tipo de columna fraccionadora muy sencilla usada generalmente para controlar la presión de vapor de la gasolina (RVP) por fraccionamiento de una parte predeterminada de butano que sale con los productos de cabeza, por lo tanto en ella no se va a producir una variación significativa en el número de octano el cual es obtenido mediante las reacciones que tienen lugar en la sección de reacción. Para el rendimiento del reformado, la cantidad de variables que presentaron un grado de correlación pocos significativos son menores que en el caso del RONC siendo sólo la presión de tope y fondo las variables que no mostraron buena relación al ajuste lineal realizado a sus gráficas, como se observa en las figuras G.8 y G.12.

La alta dispersión de puntos observada en todas las gráficas de ajuste expuestas en los anexos C-G señala que existen otras variables externas que están muy relacionadas con las variables independientes pero que éstas no fueron consideradas en el estudio. Vale mencionar que ninguna de las variables analizadas presentó un coeficiente de correlación mayor a 0,7, lo que indica que no poseen una relación lineal fuerte con estas variables dependientes, pero de igual modo fueron tomadas en cuenta para diseñar los modelos porque sí existe una relación funcional de ellas con las variables dependientes en estudio. Además, se usó una aproximación lineal entre las variables para el cálculo del coeficiente de determinación y el coeficiente de correlación, puesto que el programa SPSS ofrece sólo el método de regresión lineal

múltiple entre las variables, y esta limitante del programa fue la premisa al usar la relación lineal entre las variables.

Luego de analizadas las gráficas con respecto al RONC y REND, fue posible seleccionar las variables que serían incluidas en la construcción del modelo de regresión para cada una de estas variables dependientes. De un total de 30 variables independientes, 17 fueron seleccionadas para conformar el modelo de regresión para el número de octano y 20 fueron seleccionadas para el rendimiento del reformado. Se realiza la selección de las variables como paso inicial porque generalmente existe la tendencia a incluir en modelos de regresión todas las variables científicamente relevantes, independientemente de su contribución al modelo. El problema con esta posición es que el modelo puede sobredimensionarse y producir estimados numéricamente inestables. Esta sobredimensión se manifiesta en coeficientes estimados y/o desviaciones estándar demasiado grandes. Las variables seleccionadas se muestran a continuación en la tabla 4.2.

4.2 Análisis del problema de multicolinealidad

Para lograr detectar si existía o no problemas de multicolinealidad entre los datos de las variables independientes se analizaron los principales criterios empleados para estudiar este fenómeno como lo son: la matriz de correlación y su determinante, los autovalores y los valores infladores de varianza. Es importante recordar que el fenómeno de la multicolinealidad se refiere a la existencia de relaciones lineales o cuasi lineales entre las variables independientes en un modelo lineal, lo que indica que parte sustancial de la información en una o más de estas variables es redundante.

Tabla 4.2 Variables seleccionadas para la construcción de los modelos de regresión.

Sección	Variable seleccionada	Código
Alimentación	-Gravedad API (API) ^{a, b}	X ₁
	-Índice de reformabilidad (N+2A) ^{a, b}	X ₂
	-Punto inicial de ebullición (IBP) ^b	X ₃
Reacción	-Temperatura promedio de entrada (WAIT) ^{a, b}	X ₄
	-Delta de temperatura en primer reactor (DT ₁) ^{a, b}	X ₅
	-Delta de temperatura en segundo reactor (DT ₂) ^{a, b}	X ₆
	-Delta de temperatura en tercer reactor (DT ₃) ^{a, b}	X ₇
	-Velocidad espacial (LHSV) ^{a, b}	X ₈
	-Relación hidrógeno/hidrocarburo (H ₂ /HC) ^{a, b}	X ₉
Separación	-Temperatura del separador D-2004 (Tsep) ^{a, b}	X ₁₀
Recontacto	-Presión del tambor D-2005 (P _{D-2005}) ^{a, b}	X ₁₁
	-Temperatura del tambor D-2005 (T _{D-2005}) ^{a, b}	X ₁₂
	-Nivel del tambor D-2005 (L _{D-2005}) ^{a, b}	X ₁₃
	-Temperatura del tambor D-2006 (T _{D-2006}) ^{a, b}	X ₁₄
	-Temperatura del tambor D-2007 (T _{D-2007}) ^{a, b}	X ₁₅
Estabilización (Desbutanizadora D-2011)	-Temperatura de entrada (Tent) ^b	X ₁₆
	-Temperatura de salida rehervidor (Toutreboil) ^{a, b}	X ₁₇
	-Temperatura de tope (Ttop) ^{a, b}	X ₁₈
	-Temperatura de fondo (Tbott) ^b	X ₁₉
	-Nivel de fondo (Lbott) ^{a, b}	X ₂₀

a. Variable regresora seleccionada para el RONC.

b. Variable regresora seleccionada para el REND.

4.2.1 Matriz de correlación

En el análisis de la matriz de correlación obtenida (tabla H.2) entre las variables dependientes (RONC y REND) y las variables seleccionadas de la tabla 4.2, se observaron altas correlaciones entre algunas de estas variables independientes, las cuales se muestran en la tabla 4.3. Este grado de relación se determinó tomando en cuenta el factor R o coeficiente de correlación, el cual está representado en la matriz y, la escala de orientación tomada para la interpretación de los coeficientes de correlación es la que indica que para aquellos valores de R mayor a 0,71 son consideradas las que poseen una alta correlación.

Tabla 4.3 Variables regresoras con problemas de multicolinealidad.

Variables	Coefficiente de correlación (R)
X_4 y X_5	0,764
X_4 y X_8	0,871
X_5 y X_6	0,769
X_5 y X_8	0,781
X_6 y X_7	0,841
X_6 y X_8	0,748
X_6 y X_{11}	-0,791
X_7 y X_{11}	-0,795
X_{14} y X_{15}	0,995
X_{15} y X_{19}	0,844
X_{17} y X_{19}	0,884

La alta correlación entre las variables de la tabla 4.3, indica posible dependencia lineal entre las variables regresoras involucradas. Por lo tanto, los datos a utilizar pueden presentar problemas de multicolinealidad. Igualmente se distingue la

existencia de valores negativos de coeficientes de correlación en algunas variables, señalando de esta manera el sentido de la relación, es decir, que al aumentar el valor de una variable el valor de la otra disminuye.

4.2.2 Autovalores y determinante de la matriz de correlación

En la tabla H.3 del anexo H, se observan cuatro (4) autovalores muy pequeños para el número de octano (RONC):

$$\begin{array}{ll} X_{15} = 0,0824 & X_{19} = 0,0401 \\ X_{17} = 0,0693 & X_{20} = 0,0260 \end{array}$$

Y para el rendimiento del reformado (REND) se observan cinco (5):

$$\begin{array}{ll} X_{16} = 0,0852 & X_{19} = 0,0310 \\ X_{17} = 0,0691 & X_{20} = 0,0195 \\ X_{18} = 0,0524 & \end{array}$$

Estos autovalores pequeños presentes en estas variables dependientes indican la presencia de multicolinealidad y de acuerdo a los valores del criterio de K tanto para el RONC como para el REND, reportados en la tabla 4.4, se tiene que ambas variables presentan en sus datos multicolinealidad con una severidad de moderada a fuerte pues se encuentran entre el rango de $100 \leq K \leq 1000$.

En cuanto a la determinante de la matriz, como se puede observar en la tabla 4.4, sus valores tanto para el RONC y REND obtenidos del programa MATLAB, indica la existencia de multicolinealidad en los datos, ya que su valor tiene cercana aproximación a cero, siendo uno (1) el máximo valor del determinante si las variables están incorrelacionadas.

Tabla 4.4 Determinante de la matriz de correlación y valor crítico de K para ambas variables dependientes.

	RONC	REND
Determinante de la matriz	2,448E-10	6,754E-13
K	247,835	334,056

4.2.3 Valores infladores de varianza (VIF)

En la tabla H.4 del anexo H, se observan los factores infladores de varianza, es decir, los elementos de la diagonal principal de la matriz $(X'X)^{-1}$ y en la cual se encuentran doce (12) V.I.F mayores que 5 para la variable RONC:

$$\begin{array}{ll}
 X_4 = 10,530 & X_{11} = 6,195 \\
 X_5 = 6,636 & X_{12} = 7,078 \\
 X_6 = 11,322 & X_{14} = 336,840 \\
 X_7 = 7,003 & X_{15} = 334,031 \\
 X_8 = 17,875 & X_{17} = 18,544 \\
 X_{10} = 5,377 & X_{19} = 19,031
 \end{array}$$

Y catorce (14) V.I.F mayores que 5 para la variable REND:

$$\begin{array}{ll}
 X_4 = 10,766 & X_{12} = 7,484 \\
 X_5 = 7,736 & X_{14} = 337,481 \\
 X_6 = 12,504 & X_{15} = 334,831 \\
 X_7 = 8,333 & X_{16} = 15,625
 \end{array}$$

$$X_8 = 21,840$$

$$X_{17} = 19,516$$

$$X_{10} = 5,978$$

$$X_{19} = 31,279$$

$$X_{11} = 7,881$$

$$X_{20} = 5,085$$

Esto indica presencia de multicolinealidad.

Luego de analizados todos estos criterios empleados para detectar si existe o no problemas de multicolinealidad en los datos a ser procesados, no cabe duda que en los presentes datos sí existe clara presencia de problemas de multicolinealidad con una severidad de moderada a fuerte, por lo tanto, es un problema que se tiene que tomar en cuenta para decidir que método es el más apropiado para analizar los datos y obtener los modelos de regresión, pues una de las principales dificultades en el uso de estimaciones mínimo cuadráticas es la presencia de este fenómeno que, aun cuando no afecta la capacidad predictiva del modelo, representa un problema grave si su propósito fundamental es evaluar la contribución individual de las variables explicativas. Esto es debido a que en presencia de multicolinealidad los coeficientes de los estimadores tienden a ser inestables, es decir, sus errores estándar presentan magnitudes indebidamente grandes. Esta falta de precisión afecta los contrastes parciales diseñados para evaluar la contribución individual de cada variable explicativa, corriéndose un alto riesgo de no encontrar significación en variables que realmente la tengan.

4.3 Análisis y selección de los componentes principales (C.P)

Lo antes expuesto muestra que cuando está presente el problema de multicolinealidad, el método de los mínimos cuadrados ordinarios (M.C.O) no es el adecuado para estimar parámetros. Es claro que una de las mayores dificultades en la regresión múltiple con el método M.C.O ocurre cuando la matriz de correlación presenta problemas de multicolinealidad, como es el caso en estudio.

Se solucionará este problema usando como método alternativo el método de regresión con Componentes Principales (C.P), en vez del método M.C.O, ya que el objetivo principal en el análisis de C.P es la de reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos que consiste de un gran número de variables interrelacionadas, al mismo tiempo que retiene cuanta variación esté presente en ellos. Esto es logrado transformando las variables originales en un nuevo conjunto de variables interrelacionadas, las C.P. En el anexo I se encuentran dichas componentes principales, las cuales fueron obtenidas mediante el programa *R*.

Tabla 4.5 Componentes principales seleccionadas para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND).

Componentes	RONC		REND	
	Desviación estándar	Varianza acumulada	Desviación estándar	Varianza acumulada
1	16,28569	0,70587	16.34477	0,58197
2	6,93724	0,83395	7,84537	0,71605
3	5,15393	0,90464	7,62062	0,84256
4	3,39057	0,93524	5,07683	0,89870
5	3,23700	0,96312	3,88254	0,93154
6	2,44383	0,97902	3,14675	0,95311
7	1,79019	0,98755	2,73866	0,96945
8	1,21168	0,99145	2,35541	0,98153
9	1,16700	0,99508	1,76665	0,98833
10	-	-	1,31043	0,99207

Como se muestra en la tabla 4.5, aplicando el criterio del porcentaje de la variabilidad explicada acumulada, se tiene que para el RONC es recomendable trabajar con los primeros 9 componentes y, en el caso del REND con los primeros 10,

dado que a partir de estos no se observa cambios significativos en la varianza acumulada. La importancia de la selección de estos componentes radica en que si todas los C.P son incluidos en la regresión, el método resultante es equivalente al obtenido por los mínimos cuadrados ordinarios, ya que las varianzas grandes producidas por la multicolinealidad no se reducen. Sin embargo, si algunos de los componentes principales son eliminados de la ecuación de regresión los estimadores obtenidos son sesgados, pero reducen cualquier varianza grande causada por la multicolinealidad. De este modo unas pocas variables explicarán un porcentaje suficientemente alto como para prescindir de las variables originales y trabajar a partir de ese momento con las nuevas.

4.4 Modelo de regresión obtenido por regresión cp para el número de octano y rendimiento del reformado

- Modelo de regresión para el número de octano (RONC):

$$\begin{aligned} \text{RONC} = & 0,00199 \mathbf{X}_1 + 0,01404 \mathbf{X}_2 + 0,05471 \mathbf{X}_4 + 0,05128 \mathbf{X}_5 + 0,09121 \mathbf{X}_6 \\ & - 0,00773 \mathbf{X}_7 - 0,00221 \mathbf{X}_8 - 0,00906 \mathbf{X}_9 - 0,01050 \mathbf{X}_{10} + 0,05428 \mathbf{X}_{11} \\ & + 0,09289 \mathbf{X}_{12} + 0,00860 \mathbf{X}_{13} + 0,06208 \mathbf{X}_{14} + 0,05957 \mathbf{X}_{15} - 0,02035 \mathbf{X}_{17} \quad + \\ & 0,00993 \mathbf{X}_{19} + 0,12978 \mathbf{X}_{20} \end{aligned}$$

(Ec. 4.1)

En este modelo de regresión se obtuvo un coeficiente de determinación “ R^2 ” de 0,4678, indicando que el 46,78% de la variabilidad del número de octano se explica mediante el modelo de regresión. El “ R^2 ajustado”, el cual conviene más usar para comparar modelos de diferentes números de variables independientes, es de 29,35%. El error estándar estimado muestra que la desviación estándar de los residuales es de 0,5391, ver tabla 4.6. Un factor importante que se puede observar en la tabla citada anteriormente es que la F calculada es mayor que la F tabulada ($2,875 > 1,562$), por lo

que se rechaza la hipótesis nula (H_0) pero como ésta no duplica el valor de la F tabulada, lo cual es lo recomendado para aceptar a un modelo con mayor confiabilidad, se tiene que el modelo en conjunto obtenido no es muy bueno para explicar la variable RONC.

El valor de " R^2 " no fue el deseado pues está muy por debajo del valor considerado como aceptable ($R^2 \geq 0.7$), lo que indica que el presente modelo no tiene una buena bondad de ajuste, es decir, que la tasa porcentual de los cambios producidos en el número de octano no pueden ser bien explicados por estas variables independientes; y adicional a esto con el alto valor de error estándar, el cual es una medida de dispersión en donde la estimación se hace más precisa conforme el grado de dispersión alrededor del plano de regresión se hace más pequeño, deja en evidencia que el modelo de regresión estimado no es el más adecuado para explicar el RONC requiriéndose un mayor y mejor análisis en la selección de las variables de proceso involucradas para su obtención, como por ejemplo incluir variables de la sección de regeneración y otras variables presentes en la sección de reacción que no fueron tomadas en cuenta en este estudio y que de cierta manera influyen significativamente en el buen desempeño de esta sección como lo es el envejecimiento del catalizador.

En la tabla 4.6, es posible observar para este modelo un promedio de porcentaje de error de 4,896%; lo que indica que a pesar de éste ser un modelo poco recomendado por las razones expuestas anteriormente igualmente puede aplicarse, bajo cierto grado de incertidumbre, para los fines de estimación pues el % de error arrojado no es muy alto, estando por debajo del 10% (valor deseado).

Tabla 4.6 Parámetros estadísticos obtenidos en ambos métodos para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND).

Método	Error estándar residual	R^2	R^2 ajustado	Fc	Ft	CME	%Error relativo promedio	Variable eliminada
RONC								
C.P	0,5391	0,4678	0,2935	2,875	1,562	0,5235	4,896	0
Por pasos	0,5011	0,4140	0,3378	5,164	1,715	0,5131	1,217	8
REND								
C.P	0,3012	0,8470	0,7860	15,570	1,534	0,2480	3,058	0
Por pasos	0,2863	0,8722	0,7976	22,870	1,601	0,2051	1,453	6

donde:

R^2 : Coeficiente de determinación.

Fc: Prueba de Fischer calculada.

Ft: Prueba de Fischer tabulada.

CME: Cuadrado medio del error.

- Modelo de regresión para el rendimiento del reformado (REND):

$$\begin{aligned}
 \text{REND} = & - 0,00727 X_1 + 0,04786 X_2 - 0,00433 X_3 + 0,04346 X_4 - 0,04916 X_5 \\
 & - 0,03232 X_6 + 0,05751 X_7 - 0,00091 X_8 - 0,00006 X_9 + 0,03379 X_{10} \quad + \\
 & 0,04068 X_{11} - 0,02318 X_{12} + 0,00012 X_{13} - 0,01516 X_{14} - 0,01411 X_{15} \quad - \\
 & 0,00680 X_{16} + 0,04243 X_{17} - 0,07039 X_{18} + 0,06393 X_{19} + 0,07969 X_{20}
 \end{aligned}$$

(Ec. 4.2)

En este modelo de regresión se obtuvo un coeficiente de determinación " R^2 " de 0,8470, indicando que el 84,70% de la variabilidad del rendimiento del reformado se

explica mediante el modelo de regresión. El “ R^2 ajustado”, el cual conviene más usar para comparar modelos de diferentes números de variables independientes, es de 78,60%. El error estándar estimado muestra que la desviación estándar de los residuales es de 0,3012, ver tabla 4.6. Un factor importante que se puede observar en la tabla citada anteriormente es que la F calculada es mucho mayor que la F tabulada ($15,570 > 1,534$), por lo que se rechaza la hipótesis nula (H_0) y como dicho valor duplica al tabulado se puede decir que el modelo en conjunto es bueno para explicar la variable REND. Para este caso, el valor del “ R^2 ” resultó muy aceptable, estando por encima del valor deseado, al igual que el error estándar estimado cuyo valor es menor al presentado por el modelo de regresión para el RONC. Por todo esto, se deduce que el modelo de regresión para el rendimiento del reformado es confiable y posee una buena bondad de ajuste.

También en la tabla 4.6, se observa para este modelo un promedio de porcentaje de error de 3,058%; indicando que dicho modelo es aplicable para los fines de estimación pues el % de error arrojado es bueno, estando por debajo del 10%.

4.5 Análisis de sensibilidad a los modelos matemáticos obtenidos para los parámetros de calidad en estudio

La razón principal para la aplicación del análisis de sensibilidad a los modelos de regresión anteriormente expuestos es porque al suprimir una variable regresora de estos modelos, se puede mejorar la precisión de los parámetros estimados en las variables retenidas aún si alguna de las variables suprimidas es importante. A continuación se presentan los modelos obtenidos luego de aplicado este análisis mediante el método estadístico “paso a paso” (Stepwise).

▪ Modelo de regresión sensibilizado para el número de octano (RONC):

$$\text{RONC} = 81,64249 + 0,49741 X_1 - 0,05070 X_4 + 0,04053 X_5 - 3,79330 X_8 - 0,20611 X_9 - 0,23847 X_{11} + 0,31556 X_{17} - 0,23608 X_{19} + 0,15580 X_{20}$$

(Ec. 4.3)

En este modelo de regresión la cantidad de variables suprimidas fue de ocho (8) y se obtuvo un coeficiente de determinación “ R^2 ” de 0,4140, indicando que el 41,40% de la variabilidad del número de octano se explica mediante el modelo de regresión. El “ R^2 ajustado”, el cual conviene más usar para comparar modelos de diferentes números de variables independientes, es de 233,78%. El error estándar estimado muestra que la desviación estándar de los residuales es de 0,5011, ver tabla 4.6. Un factor importante que se puede observar en la tabla citada anteriormente es que la F calculada es mayor que la F tabulada ($5,164 > 1,715$), por lo que se rechaza la hipótesis nula (H_0) y como dicho valor duplica el valor de la F tabulada se puede decir que el modelo en conjunto es bueno para explicar la variable RONC.

De manera similar al análisis realizado para el modelo obtenido por la regresión C.P, el valor de “ R^2 ” está por debajo de lo deseado y el error estándar aun sigue estando alto, por lo que este modelo de regresión estimado no tiene buena bondad de ajuste. Sin embargo, comparando estos dos modelos, se tiene que el mejor modelo que describe el comportamiento del RONC fue el obtenido a través del análisis de sensibilidad; pues a pesar de disminuir el valor de “ R^2 ” con respecto al obtenido en el análisis C.P, para este modelo se tiene menor valor tanto para el error estándar de desviación como para el cuadrado medio de los errores, ver tabla 4.6

En esta tabla también se puede observar para este modelo un promedio de porcentaje de error de 1,217%; lo que indica que a pesar de éste ser un modelo que no tiene una bondad de ajuste puede aplicarse para los fines de estimación pues el % de

error arrojado no es muy alto, estando por debajo del 10%. Una acotación importante es que al realizar la comparación entre ambos modelos, la diferencia de los valores de porcentaje de error es notable (3,679%), siendo la obtenida mediante el método por pasos la más óptima para utilizar.

▪ Modelo de regresión sensibilizado para el rendimiento del reformado (REND):

$$\begin{aligned} \mathbf{REND} = & 40,43157 + 0,06115 \mathbf{X}_2 - 0,01632 \mathbf{X}_3 + 0,02452 \mathbf{X}_4 - 0,05693 \mathbf{X}_5 & - \\ & 0,03152 \mathbf{X}_6 + 0,02532 \mathbf{X}_7 + 0,14390 \mathbf{X}_{11} - 0,10047 \mathbf{X}_{12} - 1,43335 \mathbf{X}_{13} & - \\ & 1,15353 \mathbf{X}_{14} + 1,31635 \mathbf{X}_{15} - 0,11205 \mathbf{X}_{16} - 0,17751 \mathbf{X}_{17} + 0,31391 \mathbf{X}_{19} \end{aligned}$$

(Ec. 4.4)

En este modelo de regresión la cantidad de variables suprimidas fue de seis (6) y se obtuvo un coeficiente de determinación “ R^2 ” de 0,8722, indicando que el 87,22% de la variabilidad del número de octano se explica mediante el modelo de regresión. El “ R^2 ajustado”, el cual conviene más usar para comparar modelos de diferentes números de variables independientes, es de 79,76%. El error estándar estimado muestra que la desviación estándar de los residuales es de 0,2863, ver tabla 4.6. Un factor importante que se puede observar en la tabla citada anteriormente es que la $F_{calculada}$ es mucho mayor que la $F_{tabulada}$ ($22,870 > 1,601$), por lo que se rechaza la hipótesis nula (H_0) y como dicho valor duplica al tabulado se puede decir que el modelo en conjunto es bueno para explicar la variable REND. Similarmente para el modelo obtenido por regresión C.P, los valores del “ R^2 ” y del error estándar resultaron buenos ubicándose dentro de los valores deseados; por lo tanto este modelo de regresión para el rendimiento del reformado es confiable y posee una buena bondad de ajuste.

De igual manera se realiza el análisis de comparación para el REND, donde el coeficiente de determinación obtenido por el método por pasos disminuye en poco

grado en comparación con el obtenido por el análisis C.P; por otra parte los valores para el error estándar de desviación y para el cuadrado medio de los errores es menor aplicando el método por pasos, como se puede observar en la tabla citada anteriormente; por lo tanto el modelo obtenido por el análisis de sensibilidad es el mejor modelo que describe su comportamiento.

En la tabla 4.6, se observa para este modelo un promedio de porcentaje de error de 1,453%; indicando que dicho modelo es aplicable para los fines de estimación pues el % de error arrojado es bastante bueno, estando muy por debajo del 10%. Al establecer una comparación entre los valores de porcentaje de error para ambos modelos se puede notar la diferencia significativa entre ellos (1,605%), donde la obtenida por éste modelo sensibilizado fue la de menor valor lo que ratifica lo anteriormente expuesto que al aplicar el método por pasos a los datos en estudio se consigue un mejor modelo de estimación con resultados más confiables.

Luego de lo descrito se puede deducir que aplicando un análisis de sensibilidad se consigue mejorar los modelos de regresión, lográndose una mejor bondad de ajuste de los datos lo que conlleva a un modelo de regresión estable y confiable. Vale mencionar que al disminuir la cantidad de variables regresoras que formaran parte en la construcción de los modelo de regresión, se obtiene una herramienta de menor complejidad de uso para el personal operativo de la planta y también se traduce en ganancia en precisión en el modelo aunque esto a costa de pérdida en determinación ya que la explicación de la variabilidad total de estos modelos difirió en un 5,38% para el RONC y 2,52% para el REND, del modelo por regresión C.P. Es importante destacar que los resultados obtenidos en los análisis anteriores permiten establecer resultados generalizables hasta el límite definido por las características de la muestra y a medida que las exigencias y condiciones sean semejantes.

4.6. Conclusiones

1. Los métodos de selección de variables resultaron de mucha importancia porque evitaron el problema de sobredimensionar los modelos de regresión, los cuales ocasionan estimados numéricamente inestables que se manifiestan en coeficientes estimados y/o desviaciones estándar demasiado grandes.
2. De un total de 30 variables independientes, 17 fueron seleccionadas para conformar el modelo de regresión para el número de octano (RONC) y 20 fueron seleccionadas para el rendimiento del reformado (REND), de acuerdo al coeficiente de correlación y lo observado en sus respectivas gráficas.
3. Ninguna de las variables independientes seleccionadas presentó un coeficiente de correlación mayor a 0,7, indicando que éstas no poseen una relación lineal fuerte con las variables RONC y REND, pero de igual modo fueron tomadas en cuenta para diseñar los modelos porque sí existe una relación funcional de ellas con las variables dependientes en estudio.
4. El método de la regresión con componentes principales (C.P) fue el más adecuado para estimar los coeficientes estadísticos de los parámetros debido al problema de multicolinealidad presente entre las variables independientes seleccionadas, el cual se clasificó con una severidad de moderada a fuerte.
5. Aplicando el criterio del porcentaje de la variabilidad explicada acumulada, se seleccionaron para la variable RONC los primeros 9 componentes y, en el caso del REND los primeros 10 componentes, dado que a partir de estos no hubo cambio significativo en la varianza acumulada.

- 6.** Los modelos estimados mediante el análisis CP para el RONC y REND presentaron un coeficiente de determinación “ R^2 ” de 0,4077 y 0,8207 respectivamente, indicando que el 40,77% y 82,07% de la variabilidad total es explicada por dichos modelos.
- 7.** Gracias a la aplicación del análisis de sensibilidad, suprimiendo variables regresoras, se consigue mejorar los modelos de regresión, lográndose una mejor bondad de ajuste de los datos de las variables independientes lo que conlleva a un modelo más estable, preciso y confiable.
- 8.** Los modelos estimados mediante el método por pasos (Stepwise) para el RONC y REND presentaron coeficientes de determinación “ R^2 ” de 0,3704 y 0,8122 respectivamente, indicando que el 37,04% y 81,22% de la variabilidad total es explicada por dichos modelos.
- 9.** En el modelo de regresión sensibilizado para la variable RONC, la cantidad de variables suprimidas fue de ocho (8), y en el caso del REND fue de seis (6), lográndose obtener una herramienta sencilla con facilidad de uso para el personal operativo de la planta así como también una ganancia en precisión en los modelos.
- 10.** Tomando en cuenta el “ R^2 ” más cercano a uno (1), el menor valor del cuadrado medio de los errores y del error estándar de estimación; se tiene que para las variables RONC y REND el mejor modelo que describe su comportamiento fue el obtenido a través del análisis de sensibilidad.
- 11.** Los porcentajes de error relativo más bajos fueron arrojados por los modelos sensibilizados para el número de octano y rendimiento del reformado con 1,217% y 1,453% respectivamente.

4.7. Recomendaciones

- Complementar el modelo propuesto con las corrientes provenientes de la sección de regeneración del catalizador (CCR), las cuales fueron excluidas en este análisis, con el fin de lograr modelos más representativos de los parámetros en estudio de la unidad de Reformación.
- Antes de hacer estimaciones de parámetros mediante el método M.C.O se recomienda analizar la matriz de datos para determinar la posibilidad de la existencia de multicolinealidad.
- Cuando existan problemas de multicolinealidad moderados o fuertes, se recomienda hacer las estimaciones por métodos diferentes a los M.C.O, por ejemplo: C.P, Regresión Rigde, etc.
- Para próximos estudios, se recomienda analizar y realizar correlaciones por separado para cada una de las secciones que conforman la unidad de Reformación para observar que tanto varían y cómo se pueden mejorar los modelos anteriormente propuestos.
- En cuanto al tipo de regresión aplicada a los datos, se debería considerar utilizar otro tipo de regresión (cúbica, logarítmica, exponencial) para analizar si mediante alguno de ellos se puede obtener un mejor ajuste de los datos al comportamiento mostrado por las variables dependiente en estudio.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] PDVSA, **“Historia”** [en línea]. Disponible: http://www.pdvsa.com/pdvsa_historia.html, (2005)
- [2] PDVSA, **“Libro de datos Refinería Puerto La Cruz/San Roque”**. Manufactura y Mercadeo, Puerto La Cruz (1999)
- [3] PDVSA, **“Memoria descriptiva del Proyecto VALCOR”**. Manufactura y Mercadeo, Puerto La Cruz (2004)
- [4] Malavé F., **“Desarrollo de correlaciones que permitan estimar rendimientos de productos en la unidad de coquificación retardada así como propiedades fisicoquímicas de corrientes de procesos, del complejo de mejoramiento de crudo extrapesado de Petrozuata”**. Trabajo de grado, departamento de ingeniería química. Universidad de Oriente, núcleo Anzoátegui, Venezuela (2003)
- [5] Martínez K., **“Formulación de correlaciones empíricas que describas el comportamiento del catalizador en la unidad de deshidrogenación de Súper Octanos, C.A”**. Trabajo de grado, departamento de ingeniería química. Universidad de Oriente, núcleo Anzoátegui, Venezuela (2003)
- [6] Gil, D. y Rodríguez, O., **“Estudio de estabilidad de la Orimulsión contaminada con emulsión envejecida y su reacondicionamiento”**. Trabajo de grado, departamento de ingeniería química. Universidad de Oriente, núcleo Anzoátegui, Venezuela (2002)

[7] **El Petróleo**, “Composición del petróleo” [en línea]. Disponible: <http://es.wikipedia.org/wiki/Petróleo.html>, (2003)

[8] Universal Oil Products (UOP), “**Manual NHT/CCR PLATFORMING™ CYCLEMAX™ Process Technology**”. Estados Unidos (2003).

[9] PDVSA, “**Manual de Módulos de capacitación. Regeneración Continua del Catalizador (CCR)**”. Centro Internacional de Educación y Desarrollo (CIED), Puerto La Cruz (2000)

[10] PDVSA, “**Manual de Operación Unidad de Reformación CCR, unidad 20. UOP**”. Gerencia de operaciones, Venezuela (2002)

[11] Perry, R., “**Manual del Ingeniero Químico**”, sexta edición, tomo I. Editorial McGraw-Hill, México (1993).

[12] Instituto Francés del Petróleo (IFP), “**Manual process engineering applied to petroleum refining**”. Módulo 7, Francia (2005).

[13] **Reacción química**. “Rendimiento de una reacción” [en línea]. Disponible: <http://es.wikipedia.org/wiki/Reacción.html>, (2003).

[14] Trambouze, P. y Euzen, J., “**Chemical reactors from design to operations**”, segunda edición. Editorial Technip, Francia (2004)

[15] PDVSA. “**Manual de diseño de proceso. Separación física. Tambores separadores. Principios Básicos**”. Revisión 0. (1995).

[16] PDVSA. **“Manual de diseño de proceso. Torre de fraccionamiento. Principios básicos”**. Revisión 0. (1996).

[17] PDVSA, **“Manual Técnico de Reformación Catalítica”**. Formación Industrial. Centro Internacional de Educación y Desarrollo CIED. Puerto la Cruz (2002).

[18] Stevenson, W., **“Estadística para Administración y Economía”**. Editorial Harla S.A, México (1981).

[19] Gibergans, J., **“Regresión lineal múltiple”**, Editorial UOC, España (2003)

[20] Pértega, S. y Pita, S., **“Técnicas de regresión: Regresión lineal múltiple”**. Editorial CAD ATEN PRIMARIA, España (2000).

[21] Montgomery, D., **“Diseño y Análisis de Experimentos”**. Editorial Iberoamericana S.A, México (1991).

[22] Shao, S., **“Estadística para Economistas y Administradores de Empresas”**. Herrero Hermanos Sucs. (1967).

[23] De la Cruz, O., **“El problema de la multicolinealidad; algunas soluciones”**. Trabajo de ascenso, departamento de matemática. Universidad de Oriente, núcleo Sucre, Venezuela (1986).

[24] Hair, J.; Anderson, R.; Tatham, R.; Black, W.C.; **“Análisis multivariante”**. 5^a edición. Editorial Prentice Hall. Madrid (1999).

[24] SPSS, **“Introducción al programa estadístico SPSS”** [en línea]. Disponible: <http://www.spss.com/es/statistics/> (2009).

METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO

TÍTULO	“DESARROLLO DE MODELOS DE REGRESIÓN QUE REPRESENTEN EL COMPORTAMIENTO DEL NÚMERO DE OCTANO Y RENDIMIENTO DEL REFORMADO DE LA UNIDAD DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA (U-20) DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ-PDVSA”
SUBTÍTULO	

AUTOR (ES):

APELLIDOS Y NOMBRES	CÓDIGO CVLAC / E MAIL
RUBISELA M CASTILLO M	CVLAC: 16.854.059 EMAIL: <u>la_rocalinda@hotmail.com</u>

PALÁBRAS O FRASES CLAVES:

Modelos de Regresión

Rendimiento del Reformado

Reformación Catalítica

Multicolinealidad

Método de las componentes principales

METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

ÁREA	SUB ÁREA
Escuela de ingeniería y ciencias	Química

RESUMEN (ABSTRACT):

En el presente trabajo se desarrollaron modelos de regresión para el número de octano (RONC) y rendimiento del reformado (REND) de la unidad de reformación catalítica de nafta de la refinería Puerto La Cruz, con el propósito de obtener una ecuación que describa satisfactoriamente el comportamiento de estos parámetros a través de la unidad ante variaciones tanto en la alimentación como en las variables de proceso. Para ello se graficaron cada una de las variables presentes en las secciones de alimentación, reacción, separación, recontacto y estabilización (variables independientes) con las variables RONC y REND (variables dependientes). Una vez seleccionadas las variables que formarían parte del modelo de regresión, resultando 17 y 20 para el RONC y REND respectivamente, se procedió a realizar una matriz de correlación para verificar si las variables independientes presentaban o no problemas de multicolinealidad, teniéndose que entre los datos de las variables si existía multicolinealidad. Para solucionar la existencia de este problema, se aplicó el análisis de los componentes principales, mediante el cual fue posible reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos interrelacionados, al mismo tiempo que retiene cuanta variación esté presente en ellos. Luego se seleccionaron las componentes principales, bajo el criterio del porcentaje de la variabilidad explicada acumulada, teniéndose 9 para el RONC y 10 para el REND, las cuales fueron sometidas a un análisis de mínimos cuadrados parciales obteniéndose de esta manera los coeficientes de estimación. Finalmente, se realizó un análisis de sensibilidad a ambos modelos, aplicando el método por pasos, para reducir el número de variables y así facilitar su uso como herramientas.

METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:**CONTRIBUIDORES:**

APELLIDOS Y NOMBRES	ROL / CÓDIGO CVLAC / E-MAIL				
RONALD ARIAS	ROL	CA	AS	TU X	JU
	CVLAC:	13.498.859			
	e-mail:	<u>Ronaldariasc@hotmail.com</u>			
JOSÉ CERMEÑO	ROL	CA	AS	TU	JU X
	CVLAC:	4.981.130			
	e-mail:	<u>joselez@hotmail.com</u>			
FIDELINA MONCADA	ROL	CA	AS	TU	JU X
	CVLAC:	13.366.691			
	e-mail:	<u>fidelina@cantv.net</u>			
DIEGO ASTUDILLO	ROL	CA	AS X	TU	JU
	CVLAC:	8.538.136			
	e-mail:	<u>Diegoastudillo@gmail.com</u>			

FECHA DE DISCUSIÓN Y APROBACIÓN:

2010	03	16
AÑO	MES	DÍA

LENGUAJE. SPA

METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

ARCHIVO (S):

NOMBRE DE ARCHIVO	TIPO MIME
Tesis.ModelosdeRegresión_NúmeroOctano_Reformación Catalítica.doc	Aplicación/ msword

CARACTERES EN LOS NOMBRES DE LOS ARCHIVOS: A B C D E F G H I J K L M N O P Q
R S T U V W X Y Z . a b c d e f g h i j k l m n o p q r s t u v w x y z . 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 .

ALCANCE

ESPACIAL: _____ (OPCIONAL)

TEMPORAL: _____ (OPCIONAL)

TÍTULO O GRADO ASOCIADO CON EL TRABAJO:

Ingeniero Químico

NIVEL ASOCIADO CON EL TRABAJO:

Pregrado

ÁREA DE ESTUDIO:

Departamento Ingeniería

INSTITUCIÓN:

Universidad de Oriente Núcleo de Anzoátegui

METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

DERECHOS

De acuerdo al artículo 44 del Reglamento de Trabajo de Grado:

“Los Trabajos de Grado son exclusiva propiedad de la Universidad y solo podrán ser utilizados a otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quien lo participará al Consejo Universitario”

AUTOR

RUBISELA CASTILLO

TUTOR

RONALD ARÍAS

JURADO

JOSÉ CERMEÑO

JURADO

FIDELINA MONCADA

POR LA SUBCOMISION DE TESIS

ING. YRAIMA SALAS