

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



TRABAJO DE GRADO

**"PREDICCIÓN DEL ÍNDICE ANTIDETONANTE PARA LA FORMULACIÓN DE  
GASOLINAS DE 91 Y 95 OCTANOS EN LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"**

**Realizado por:**

---

Br. Maryanna del Valle Noriega Rodríguez  
C.I.:18.848.527

Trabajo de Grado presentado ante la Universidad de Oriente como requisito parcial  
para obtener el título de

**INGENIERO QUÍMICO**

Puerto La Cruz, abril de 2011

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



TRABAJO DE GRADO

**"PREDICCIÓN DEL ÍNDICE ANTIDETONANTE PARA LA FORMULACIÓN DE  
GASOLINAS DE 91 Y 95 OCTANOS EN LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"**

**Realizado por:**

---

Br. Maryanna del Valle Noriega Rodríguez  
C.I.: 18.848.527

**Revisado por:**

---

Ing. Químico Daniel Reyes  
**Asesor industrial**

---

Ing. Químico Luis Moreno  
**Asesor académico**

Puerto la Cruz, abril de 2011

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



TRABAJO DE GRADO

**"PREDICCIÓN DEL ÍNDICE ANTIDETONANTE PARA LA FORMULACIÓN DE  
GASOLINAS DE 91 Y 95 OCTANOS EN LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"**

**Realizado por:**

---

Br. Maryanna del Valle Noriega Rodríguez

C.I.: 18.848.527

**Revisado y aprobado por:**

---

Ing. Químico Luis Moreno

**Asesor Académico**

---

Ing. Químico Shirley Marfisi (Dra.)

**Jurado principal**

---

Ing. Químico Yaneis Obando (M.Sc)

**Jurado principal**

Puerto la Cruz, abril de 2011

## **RESOLUCIÓN**

***DE ACUERDO AL ARTÍCULO 41 DEL REGLAMENTO DE TRABAJO DE GRADO  
DE LA UNIVERISDAD DE ORIENTE:***

*" LOS TRABAJOS DE GRADO SON DE LA EXCLUSIVA PROPIEDAD DE LA  
UNIVERSIDAD DE ORIENTE Y SOLO PODRÁN SER UTILIZADOS A OTROS  
FINES CON EL CONSENTIMIENTO DEL CONSEJO DE NÚCLEO RESPECTIVO,  
QUIEN LO PARTICIPARÁ AL CONSEJO UNIVERSITARIO".*

## DEDICATORIA

*A Dios, al Divino Niño y a mi Virgencita Del Valle por guiarme en el cumplimiento de esta meta en mi vida.*

*A mis padres Mariela Rodríguez y Emerson Noriega, mi mayor fuente de amor y admiración. Espero que se sientan orgullosos de mí, porque sé que este sueño también es suyo... "de tres, tres". Los quiero infinitamente...*

*A mi mami y a mis hermanas Gigy y Chessy, por más de 20 años de cariño.*

*A mis más cercanos amigos, porque todas las horas de estudio y los "picnic's" dieron su fruto.*

## **AGRADECIMIENTOS**

*A Dios por permitirme llegar a este momento, y por llevarme a ser lo que soy ahora. Por la fortaleza que me brindo en los momentos de dificultad para seguir adelante y por ayudarme a no renunciar y siempre persistir.*

*A la Virgen del Valle, por escuchar siempre mis oraciones y por guiar mis pasos cuando más lo necesité.*

*A mi mamá, por ser mi amiga, haberme escuchado, y sobretodo haberme tenido paciencia en todo este largo camino que ha sido mi carrera. Gracias por brindarme a veces un enfoque distinto de las cosas, por enseñarme a analizar y ver siempre un poco más allá. Te agradezco enormemente el estar ahí para mí siempre, apoyarme en mis decisiones y el empujarme a dar lo mejor de mí.*

*A mi papá por sus consejos, sus incentivos, sus ánimos y por confiar siempre en que lograría mis objetivos. Por alimentar mi curiosidad y apoyar mis anhelos llevando de la mano siempre el interés por los estudios. Gracias por buscar la forma de brindarme lo mejor aunque quizás algunas veces fue en contra de mi voluntad.*

*A mi segunda mamá y a mis hermanas por el cariño, y los buenos deseos siempre presentes, y en especial a Chessy por los ánimos que me diste en medio de los agobios por la realización de este trabajo.*

*A Carlos, por escucharme y tratar de comprenderme durante todo este tiempo aunque no tuviera ni idea de que era lo que estaba haciendo. Gracias por apoyarme, por creer en mí y por ayudarme a ser una mejor persona.*

*A mis amigos y compañeros de estudios principalmente a Johnsfer, Jorge, Maru, Pedro, y muy, muy especialmente a mis Superaminas Jessy y Nahir. Gracias chicos por todo su apoyo y sus ánimos, por haberse cruzado en mi camino, formar parte de mi vida y permitirme conocerlos como las grandes personas que son. Pero sobre todo por los irrepetibles momentos compartidos y por haber convertido estos últimos 5 años en una experiencia inolvidable para mí.*

*Al personal del departamento de Programación y Economía, específicamente a los ingenieros Daniel Reyes, Marilis Martínez, Zinlict Alemán, Herber Villar y Omar Adnán por todo su colaboración en la realización de este trabajo. Y por tratarme no solo como una pasante sino como uno más de su departamento y equipo de trabajo. Gracias por su apoyo, pues sin él esto no hubiera sido posible.*

*A mi asesor industrial el ingeniero Daniel Reyes, por guiarme en todo este trayecto. Ser consecuente con mi trabajo y estar al pendiente de todos los detalles que involucraron la realización de este proyecto.*

*Al todo el personal que trabaja en el laboratorio de refinería Puerto La Cruz, en especial a los Sres. William Aular, Héctor Reyes, Oswaldo Flores y Asdrúbal Rivas, por su gran colaboración en la realización de los análisis de laboratorio. Y por último a "BOMBILLO", entre otros miembros del personal por su ayuda indispensable con los materiales de laboratorio.*

*Al personal de Ingeniería de Procesos, en especial a los ingenieros David Lugo y Luis González, por su colaboración y disposición en las visitas a planta.*

*Al Sr. Antonio Tenorio de INTEVEP por la colaboración en la realización de gran número de pruebas de laboratorio.*

*Al personal de MCyP por la colaboración prestada.*

*A todo el combo de pasantes con los que compartí durante el tiempo que duró mi pasantía en la refinería, principalmente Oswaldo, Robert, "EL GOCHO", Yanny y Vanessa quienes me acompañaron en los comienzos de ésta etapa tan importante. A mi asesor académico el Prof. Luis Moreno, por su ayuda y guía indispensable para la ejecución de este trabajo.*

*A todo el cuerpo de profesores del departamento de Ing. Química, por los conocimientos y enseñanzas que me transmitieron a lo largo de mi carrera, no solo enseñanzas útiles en el ejercicio de la profesión sino aquellas útiles en la vida.*

*A la Universidad de Oriente, mi alma máter por permitirme formar parte de su casa de estudios.*

*Y por último pero no menos importante a todo aquel involucrado de una forma u otra en el cumplimiento de esta meta y cuyo nombre no puedo recordar.*

## RESUMEN

Este trabajo consistió en la predicción del índice antidetonante, propiedad crítica para la formulación de las gasolinas de 91 y 95 en la refinería Puerto La Cruz. Con este fin se realizó en primer lugar la caracterización (gravedad API, destilación, RVP, octanaje y cromatografía) de los componentes básicos de las mezclas de gasolinas (reformado, alquilato, nafta liviana, nafta catalítica, CAO y gasolina natural) mediante distintos análisis de laboratorio, valores que fueron necesarios para la actualización de la base de datos del modelador de procesos empleado (PIMS). En segundo lugar, se prepararon muestras mezclando los componentes básicos por pares y se les hicieron pruebas de octanaje MON y RON para calcular los coeficientes de interacción entre cada uno de los componentes, imprescindibles para la predicción acertada del índice antidetonante como propiedad no lineal. Luego se validó el índice antidetonante predicho realizando simulaciones en el PIMS a distintas condiciones para obtener varias formulaciones de gasolinas que fueron reproducidas y analizadas en el laboratorio para conocer el octanaje real de cada una de ellas, el cual se comparó con el predicho por el simulador presentando desviaciones de 0,2% y 0,3% para las gasolinas de 91 y 95 octanos respectivamente. Por último, se estimó el beneficio económico de la empresa producto de todos los cambios realizados, para lo cual se ejecutaron dos corridas, una con la base de datos original y otra con la actualizada, y posteriormente se compararon los valores correspondientes a la función objetivo del simulador (que representa el margen de ganancia bruta de la misma) dando un aumento de 272,4 Bs/día, producto de la disminución en el volumen de productos de alto valor comercial (reformado) mezclado en las gasolinas que se venden al mercado local y en consecuencia el aumento del volumen del mismo que va a ventas en el mercado extranjero a un precio muy superior.

# CONTENIDO

	Página
Resolución	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Resumen	vii
Contenido	vii
Índice de figuras	
Índice de tablas	
<b>CAPITULO 1: INTRODUCCIÓN</b>	
1.1 Generalidades de la empresa	1
1.1.1 Refinería Puerto La Cruz (RPLC)	2
1.1.1.1 Ubicación geográfica	2
1.1.1.2 Descripción general de la refinería Puerto La Cruz	2
1.2 Planteamiento del problema	6
1.3 Objetivos	7
1.3.1 Objetivo general	7
1.3.2 Objetivos específicos	7
<b>CAPITULO 2: MARCO TEÓRICO</b>	
2.1 Antecedentes	8
2.2 Procesos de refinación del petróleo	10
2.2.1 Destilación	10
2.2.2 Craqueo	10
2.2.3 Alquilación	11
2.2.4 Reformación	11

2.2.5 Hidrotratamiento	12
2.3 Gasolina	13
2.3.1 Proceso de preparación de las gasolinas en RPLC	14
2.3.2 Propiedades de la gasolina	17
2.3.2.1 Volatilidad	17
2.3.2.2 Gravedad °API	19
2.3.2.3 Composición de hidrocarburos	20
2.3.2.4 Octanaje	20
2.3.3 Especificaciones de las gasolinas	22
2.4 Principios de mezclado	24
2.4.1 Mezclas lineales	25
2.4.2 Mezclas no lineales	26
2.5 Enfoque de la interacción de mezclas de gasolina	27
2.5.1 El modelo de interacción de la mezcla	28
2.5.2 Cambios en los componentes o sus características	29
2.5.3 Ventajas del enfoque de interacción en las mezclas de gasolina	29
2.6 Modelo pims de programación lineal	30
2.6.1 Funcionamiento del programa PIMS	30
2.6.2 Tablas del PIMS	31

## **CAPITULO 3: DESARROLLO DEL TRABAJO**

3.1 Caracterización de los componentes que intervienen en la preparación de gasolinas de 91 y 95 octanos	40
3.2 Cálculo de los coeficientes de interacción binaria de los componentes de las gasolinas	45
3.3 Validación del índice antidetonante predicho	46
3.3.1 Actualización de datos del PIMS	46
3.3.2 Simulación en el PIMS	50
3.4 Estimación del beneficio económico producto de los cambios realizados en la base de datos del pims	52
3.5 Muestra de cálculo	53

3.6 Equipos, materiales, sustancias y herramientas	57
--	----

## **CAPITULO 4: ANÁLISIS DE RESULTADOS, CONCLUSIONES Y**

### **RECOMENDACIONES**

4.1 Caracterización de los componentes que intervienen en la preparación de las gasolinas (91 y 95 octanos)	59
4.2 Cálculo de los coeficientes de interacción binaria de los componentes de las gasolinas	66
4.3 Verificación mediante análisis de laboratorio de la validez del índice antidetonante predicho	70
4.4 Estimación del beneficio económico de la empresa, producto de los cambios realizados en la base de datos del pims	76
4.5 Conclusiones	78
4.6 Recomendaciones	79
Bibliografía	80

## ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
Figura 1.1 Ubicación geográfica de refinería Puerto La Cruz	2
Figura 1.2 Insumos y productos de la refinería Puerto La Cruz	3
Figura 1.3 Etapas del proceso de desintegración catalítica	5
Figura 1.4 Diagrama simplificado de la planta de alquilación	5
Figura 2.1 Diagrama del sistema de preparación de gasolinas en RPLC	16
Figura 2.2 Formato estándar de una tabla PIMS	32
Figura 2.3 Modelo de la Tabla BUY del PIMS	33
Figura 2.4 Modelo de la tabla BLENDS del PIMS	35
Figura 2.5 Modelo de la tabla INTERACT del PIMS	36
Figura 2.6 Modelo de la tabla BLNSPEC del PIMS	36
Figura 2.7 Modelo de la Tabla BLNMIX del PIMS	37
Figura 2.8 Modelo de la tabla BLNNAPH del PIMS	38
Figura 2.9 Modelo de la tabla CASE del PIMS	39

## ÍNDICE DE TABLAS

	Página
Tabla 2.1 Componentes básicos de las gasolinas preparadas en RPLC	14
Tabla 2.2 Características representativas del método Motor y Research para la medición de octanaje	21
Tabla 2.3 Especificaciones de la gasolina de 91 octanos	22
Tabla 2.4 Especificaciones de la gasolina de 95 octanos	23
Tabla 2.5 Propiedades de la gasolina en RPLC	26
Tabla 2.6 Clasificación de las Tablas PIMS	32
Tabla 3.1 Temperaturas de destilación de los componentes de las gasolinas	41
Tabla 3.2 Porcentaje de volumen evaporado de los componentes de las gasolinas a 158 °F	41
Tabla 3.3 Presión de vapor Reid (RVP) de los componentes de la gasolina	42
Tabla 3.4 Índice de bloqueo de vapor (IBV) de los componentes de las gasolinas	42
Tabla 3.5 Gravedad °API de los componentes de las gasolinas	43
Tabla 3.6 Composición química (%v) de los componentes de las gasolinas	43
Tabla 3.7 Octanaje MON y RON de los componentes de las gasolinas	44
Tabla 3.8 Índice antidetonante de los componentes de las gasolinas	44
Tabla 3.9 Tabla BLENDS del PIMS modificada	46
Tabla 3.10 Tabla BLNMIX del PIMS modificada	47
Tabla 3.11 Tabla BLNNAPH del PIMS modificada	48
Tabla 3.12 Tabla INTERACT del PIMS modificada	48
Tabla 3.13 Tabla BLNSPEC del PIMS modificada	49
Tabla 3.14 Tabla CASE del PIMS modificada	50
Tabla 3.15 Formulación y octanaje predicho para la mezcla "C" de gasolina 91	51
Tabla 3.16 Formulación y octanaje predicho para la mezcla "F" de gasolina 95	51
Tabla 3.17 Formulación ajustada de la mezcla "C" de gasolina 91	51
Tabla 3.18 Formulación ajustada de la mezcla "F" de gasolina 95	52
Tabla 4.1 Composición química de los componentes de la gasolina en el	

año 2006 - 2007	59
Tabla 4.2 Composición química de los componentes de la gasolina en el año 2010	60
Tabla 4.3 Comparación de la gravedad °API de los componentes de la gasolina	60
Tabla 4.4 Comparación del rango de destilación de los componentes de la gasolina	61
Tabla 4.5 Comparación del porcentaje de volumen evaporado a 158°F de los componentes de la gasolina	62
Tabla 4.6 Comparación de la presión de vapor Reid de los componentes de la gasolina	63
Tabla 4.7 Comparación del índice de bloqueo de vapor de los componentes de la gasolina	63
Tabla 4.8 Comparación del octanaje MON y RON de los componentes de la gasolina	64
Tabla 4.9 Comparación del porcentaje de aromáticos en los componentes de la gasolina	65
Tabla 4.10 Comparación del porcentaje de olefinas en los componentes de la gasolina	66
Tabla 4.11 Coeficientes de interacción del reformado	67
Tabla 4.12 Coeficientes de interacción del alquilato	67
Tabla 4.13 Coeficientes de interacción de la gasolina natural	67
Tabla 4.14 Coeficientes de interacción de la nafta liviana	68
Tabla 4.15 Coeficientes de interacción de la nafta catalítica	68
Tabla 4.16 Coeficientes de interacción del CAO	68
Tabla 4.17 IAD calculado como propiedad lineal y con los coeficientes de interacción para la mezcla CAO - alquilato	69
Tabla 4.18 IAD calculado como propiedad lineal y con los coeficientes de interacción para la mezcla nafta catalítica - gasolina natural	70
Tabla 4.19 Formulación de gasolina 91 en condiciones de operación normal	71
Tabla 4.20 Formulación de gasolina 95 en condiciones de operación normal	71

Tabla 4.21 Formulación de gasolina 91 con limitación de alquilato importado y gasolina natural (mezcla A)	72
Tabla 4.22 Formulación de gasolina 95 con limitación de CAO (mezcla D)	72
Tabla 4.23 Formulación de gasolina 91 con restricción de nafta liviana y alquilato importado (mezcla B)	73
Tabla 4.24 Formulación de gasolina 95 con limitación de reformado (mezcla E)	73
Tabla 4.25 Octanaje MON y RON de las mezclas de gasolina de 91 y 95 octanos	74
Tabla 4.26 Índice antidetonante calculado y experimental de las mezclas de gasolina 91 y 95 octanos	75
Tabla 4.27 Desviaciones promedio entre el índice antidetonante predicho y el experimental para las gasolinas 91 y 95 octanos	75
Tabla 4.28 Formulación de gasolina de 91 octanos recomendada por el PIMS	77
Tabla 4.29 Formulación de gasolina de 95 octanos recomendada por el PIMS	77

# **CAPITULO I**

## **INTRODUCCIÓN**

### **1.1 GENERALIDADES DE LA EMPRESA**

Un día después de la promulgación de la Ley de Nacionalización es creada Petróleos de Venezuela, S.A. por decreto de Ejecutivo Nacional el 30 de agosto de 1975. Así, la actividad petrolera en el país quedó bajo la responsabilidad de esta empresa (PDVSA), como casa matriz, y sus 14 filiales, las cuales se reorganizaron en tres hacia el año 1986 (Lagoven, Maraven y Corpoven) y finalmente en 1997 se reestructuraron en cuatro empresas funcionales de negocios que integran actualmente la corporación: PDVSA Petróleo y Gas; PDVSA Exploración y Producción; PDVSA Manufactura y Mercadeo y PDVSA Servicios, responsables de ejecutar la actividad operativa.

PDVSA cumple con todas las actividades propias del negocio petrolero, constituyéndose en una operación verticalmente integrada, que abarca todos los procesos desde la explotación a la comercialización de los hidrocarburos gaseosos, no gaseosos y sus derivados. Entre las actividades que ejecuta se destaca la refinación, que es el proceso que se encarga de la transformación de los hidrocarburos en productos derivados.

En el territorio nacional, Petróleos de Venezuela cuenta con la refinería más grande del mundo: el Complejo Refinador Paraguaná (CRP) compuesto por las plantas de Amuay, Cardón y Bajo Grande con una capacidad de refinación de 956 miles de barriles por día (MBD), la refinería Puerto La Cruz (con extensión San Roque) con una capacidad de procesamiento de 210 MBD, y El Palito, que refina 140 mil barriles diarios (Intranet PDVSA).

### 1.1.1 Refinería Puerto La Cruz (RPLC)

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

#### 1.1.1.1 Ubicación geográfica

La refinería Puerto La Cruz está ubicada en la costa Nororiental del país al Este de la ciudad de Puerto La Cruz en el estado Anzoátegui, como se muestra en la figura 1.1. Tiene facilidades de acceso desde el mar Caribe y está conectada por oleoductos con los campos de producción de Oriente (PDVSA, 2006).

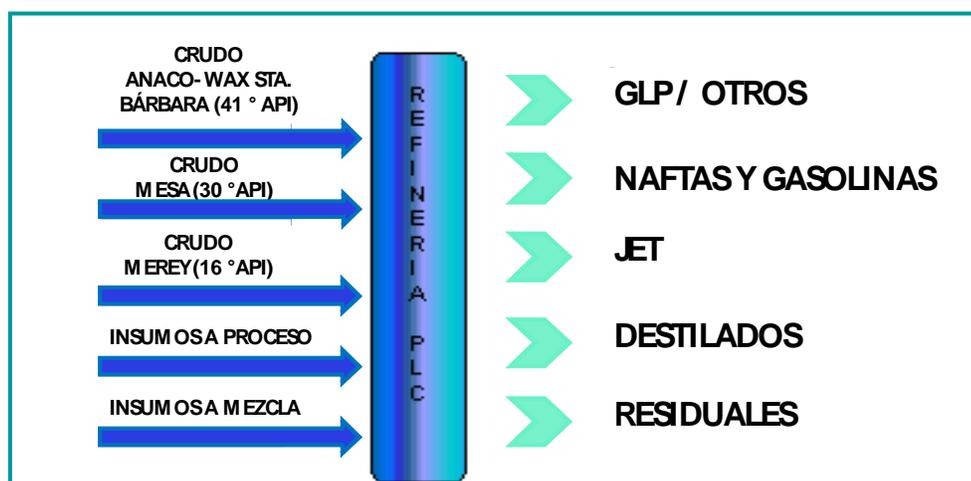


**Figura 1.1 Ubicación geográfica de refinería Puerto La Cruz**

#### 1.1.1.2 Descripción general de la refinería Puerto La Cruz

La refinería cuenta con una capacidad nominal para procesar 200 MBD de crudo en sus tres unidades de destilación, de los cuales 45% (90 MBD) corresponden a crudo pesado (PDVSA, 2006).

La dieta de la refinería es variada, así como los productos que se obtienen. Tal como se muestra en la figura 1.2.



**Figura 1.2 Insumos y productos de la refinería Puerto La Cruz**

Donde los insumos de procesos son isobutano, gasóleo de vacío, residuo desparafinado (SRQ) y los insumos a mezcla son gas natural, gasolina natural, naftas, alquilato y destilados.

Entre las unidades de proceso se tienen:

#### **a) Unidad de destilación atmosférica DA-1**

La DA-1 fue diseñada para procesar 44 MBD de petróleo, pero posteriormente, fue objeto de ciertas mejoras a fin de elevar su capacidad de procesamiento a 80 MBD. Las dietas típicas de esta planta son crudo Mesa (30°API), Santa Barbara (39 °API) y Merey (16 °API) hasta un 15 %v, sin embargo actualmente se procesa 100% crudo Mesa. Algunos de los productos de esta unidad son: gasolina, nafta, diesel, gasóleo, jet A-1 y residual (PDVSA, 2006).

#### **b) Unidad de destilación atmosférica DA-2**

Esta unidad está diseñada para procesar una carga de 90 MBD de crudo Merey con un rango de 15,5 a 16 °API; sin embargo, con el reemplazo del horno existente solo puede manejar hasta 72 MBD, obteniéndose como productos gasolina, diesel y

residual. En esta planta puede procesarse también crudo Mesa (30°API) y una mezcla de Mesa - Merey, denominada Leona de 22 a 24° API (PDVSA, 2006).

**c) Unidad de destilación atmosférica DA-3**

La unidad DA-3 está ubicada en la refinería El Chaure y fue diseñada para procesar 40 MBD de crudo mediano y pesado (22 y 30° API), sin embargo posteriormente se hicieron modificaciones para procesar crudo liviano y extra liviano. Actualmente, se procesa una mezcla de crudo Anaco Wax (42 °API) y Santa Bárbara (40 °API). Esta unidad produce gasolina, diesel y residual (PDVSA, 2006).

**d) Unidad Redestiladora 03**

La unidad 03 está conformada por las separadoras de Naftas 051 y 052, con una capacidad de diseño para procesar 31,5 MBD. Su función es fraccionar la mezcla de gasolinas proveniente de las unidades destiladoras DA-1, DA-2 y DA-3 (PDVSA, 2006).

**e) Unidad de reformación catalítica (CCR)**

Esta unidad está diseñada para procesar 35 MBD de nafta pesada hidrotratada. Su función es obtener un producto reformado de alto octanaje, para utilizarlo como componente en la mezcla de gasolina (PDVSA, 2006).

**f) Unidad de desintegración catalítica (FCC)**

Esta unidad procesa actualmente una mezcla formada por gasóleo atmosférico, proveniente de la unidad de destilación DA-1 y residual de crudo Anaco Wax y/o Santa Bárbara proveniente de la unidad de destilación atmosférica DA-3. Los productos principales de la reacción de craqueo catalítico son: gas seco, olefinas, gasolina catalítica y aceites catalíticos liviano, pesado y decantado (PDVSA, 2006). El proceso está dividido en tres etapas las cuales se muestran en la figura 1.3.

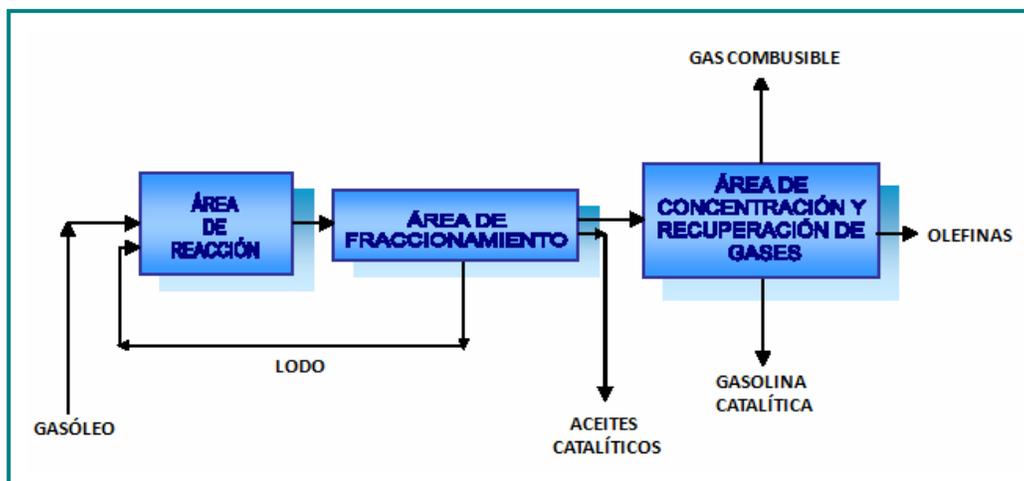


Figura 1.3 Etapas del proceso de desintegración catalítica (PDVSA, 2006)

#### g) Unidad de alquilación

El proceso de alquilación consiste en la combinación de las olefinas (compuestos de hidrocarburos con doble enlace provenientes de la unidad de desintegración catalítica) con isobutano, en presencia de un catalizador (ácido fluorhídrico), para producir compuestos parafínicos altamente ramificados en el rango de 7 a 8 octanos de carbono (PDVSA, 2006). Esta unidad consta de cinco etapas que se muestran en la figura 1.4.

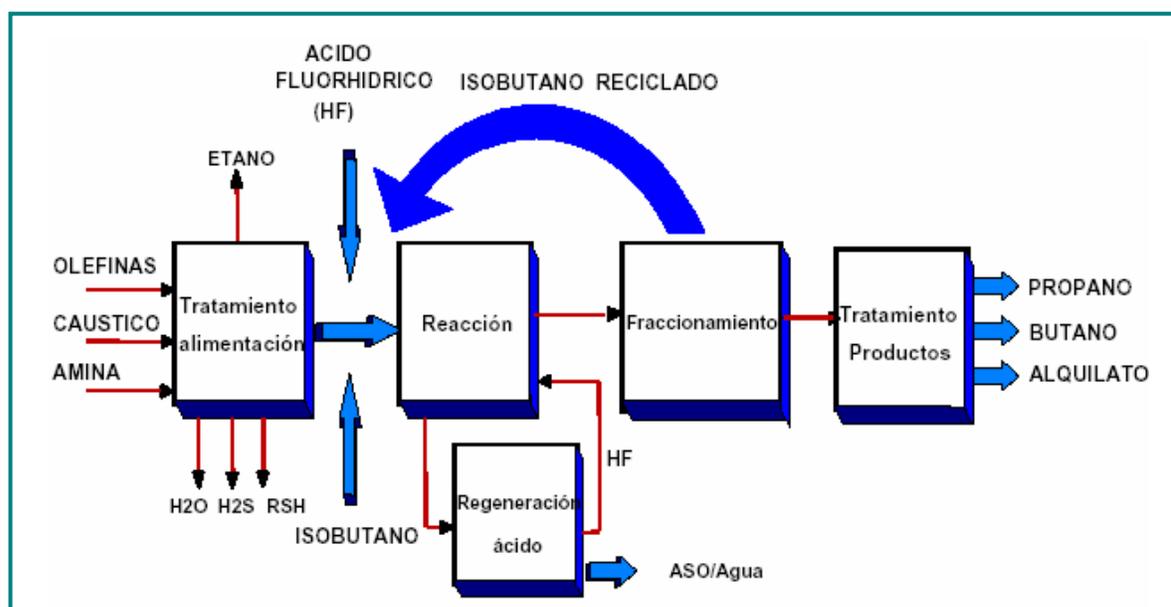


Figura 1.4 Diagrama simplificado de la planta de alquilación (PDVSA, 2006)

## 1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El objetivo principal de la refinería es transformar el petróleo en productos finales de mayor valor comercial, principalmente combustibles, entre ellos la gasolina. En refinería PLC, se comercializan dos tipos de gasolina, una de bajo y otra de alto octanaje (91 y 95 octanos), cuyas preparaciones se basan en la mezcla de componentes provenientes de los procesos de destilación, conversión y reformación, los cuales se distribuyen en proporciones que garanticen la calidad del producto así como el mayor rendimiento de los componentes que intervienen en la mezcla.

En garantía de cumplir a cabalidad con las especificaciones del producto se emplea el PIMS (sistema de modelaje de procesos industriales) que, como un sistema de programación lineal, requiere que las propiedades de los componentes que forman parte de las mezclas sean lineales; sin embargo, dependiendo del tipo de propiedad se tendrán unas que mezclen linealmente y otras que no (como el número de octanos), las cuales sólo podrán ser convertidas a lineales a través de factores que ajustan la propiedad en estudio.

Los factores de linealización para octanos que están siendo manejados en el modelo PIMS de refinería Puerto La Cruz están basados en coeficientes de interacción que no tienen actualmente un buen nivel de predicción, pues están calculados en función al octanaje MON (Número de Octanos de Motor) mínimo, a pesar de que en julio del 2008 entró en vigencia una nueva norma para la preparación de las gasolinas de 91 y 95 octanos para el mercado local (CONVENIN 764-R 2007), que entre sus cambios más importantes incluye fijar como especificación mínima el octanaje RON (Número de Octanos de Investigación). Cabe destacar, que los coeficientes de interacción no fueron recalculados debido a lineamientos internos de la organización y, en consecuencia, se han originado problemas en la estimación de las especificaciones de calidad y en la formulación de las gasolinas, dando como resultado predicciones muy lejanas a las calidades reportadas por el laboratorio.

El propósito principal de este trabajo fue lograr la acertada predicción del índice antidetonante de las gasolinas de motor (91 y 95 octanos) como propiedad

determinante en la formulación de las mismas, de modo que cumplan con las calidades exigidas por la norma nacional CONVENIN 764-R 2007 para la venta del combustible al mercado local; para esto, se caracterizaron los componentes que la conforman y se calcularon los coeficientes de interacción, necesarios para la actualización de la base de datos del modelo de programación lineal (PIMS) empleado, posteriormente se validaron los cambios mediante análisis de laboratorio y por último se estimó la diferencia en el margen de ganancia económico de la empresa producto de las mejoras realizadas.

La importancia de este trabajo radica en la necesidad que tiene la refinería de mejorar el sistema de producción de gasolinas, para evitar las pérdidas adicionales de tiempo con el remezclado y recertificación de mezclas y de dinero por la inadecuada distribución de componentes de alto valor comercial, lo cual se traduce en un impacto económico para la corporación.

### **1.3 OBJETIVOS**

#### **1.3.1 Objetivo general**

Predecir el índice antidetonante para la formulación de gasolinas de motor de 91 y 95 octanos en la refinería Puerto La Cruz.

#### **1.3.2 Objetivos específicos**

1. Caracterizar los componentes que intervienen en la preparación de las gasolinas (91 y 95 octanos) para la actualización del modelo de programación lineal empleado (PIMS).
2. Calcular los coeficientes de interacción binaria de los componentes de las gasolinas, utilizados por el PIMS para la determinación del índice antidetonante de las mezclas.
3. Verificar mediante análisis de laboratorio la validez del índice antidetonante predicho.
4. Estimar el beneficio económico de la empresa, producto de los cambios realizados en la base de datos del PIMS.

## **CAPITULO II**

### **MARCO TEÓRICO**

#### **2.1 ANTECEDENTES**

Reyes (2007) evaluó el comportamiento de mezclas de gasolinas con etanol utilizando un modelo de programación lineal. Para ello, estudió el comportamiento de cada componente de la gasolina con el etanol a fin de verificar su influencia en las propiedades de mezcla y obtener modelos matemáticos para representar dichas propiedades. Posteriormente, calculó los coeficientes de interacción binaria y comprobó mediante programación lineal que el octanaje de las mezclas de gasolinas obtenido a partir de dichos coeficientes era válido presentando desviaciones menores al 1% con respecto a los valores experimentales.

Bolívar (2000) evaluó correlaciones generalizadas para predecir el octanaje de una mezcla conociendo previamente el octanaje de los componentes puros y determinó los factores de linealización para octanos con el fin de establecer las distintas contribuciones de los componentes en el octanaje del producto final, logrando así una distribución adecuada de los componentes en la mezcla; para ello, hizo uso de las técnicas de programación lineal mediante distintas corridas del modelo PIMS verificando la confiabilidad de los factores estimados.

Tortolero (1997) calculó los bonos de mezcla mediante ponderaciones volumétricas para octanos en gasolinas y temperaturas de destilación en diesel, logrando mediante los bonos linealizar estas propiedades y estimar la contribución de cada componente en la mezcla del combustible final para mejorar el sistema de preparación de gasolinas. Para ello desarrolló una metodología para el cálculo de los bonos de mezcla empleados por el PIMS y mejoró el uso del Tetraetilo de Plomo

(TEL) disminuyendo en un 14% la cantidad requerida para el cumplimiento de las especificaciones y, en consecuencia, aminorando los costos.

Nieto (1996) elaboró un manual para el cálculo de bonos de mezcla de propiedades no lineales enfocado específicamente en la predicción del octanaje de las mezclas de gasolina y donde explica detalladamente el procedimiento iterativo a seguir para la obtención de los valores requeridos para el correcto funcionamiento del sistema de programación lineal utilizado.

El presente trabajo tiene como objetivo mejorar el proceso de determinación de las fórmulas para la preparación de las gasolinas (91 y 95 octanos), mediante la actualización de los índices de mezcla del octanaje requeridos por el modelo de procesos PIMS. Para ello, se usará una metodología similar a la expuesta por Reyes (2007), Bolívar (2000), Tortolero (1997) y Nieto (1996) en la que a partir de los coeficientes de interacción binaria se obtendrá la contribución de cada componente en la mezcla final, que será utilizada posteriormente por el sistema de programación lineal para el cálculo de las nuevas fórmulas que supondrán una reducción de costos, en función de ahorro de tiempo de remezclado y uso innecesario de productos valiosos. En contraste con el trabajo de Reyes (2007), se buscarán los coeficientes de interacción usando un rango más amplio y representativo de concentraciones de cada par de componentes, además se descartará la influencia del etanol en las mezclas de hidrocarburo, pues éste no es actualmente un componente utilizado para la preparación de las mezclas. Así mismo, en contraposición al trabajo de Bolívar (2000), no se calcularán los coeficientes mediante correlaciones generalizadas, sino mediante los datos obtenidos directamente a partir pruebas de laboratorio y aplicadas al modelo (Du Pont) que es usado por el simulador PIMS y que toma en cuenta los datos experimentales; además, de que en su trabajo se estudia la intervención del tetraetilo de plomo TEL como aditivo elevador de octanaje. A diferencia también de las dos últimas referencias (Tortolero y Nieto), en sus trabajos evalúan la influencia del TEL en las mezclas, por lo que realizan el cálculo experimental de los coeficientes de interacción haciendo uso de un proceso iterativo mediante un programa (Octanaje.exe) desarrollado en lenguaje de programación Pascal.

## **2.2 PROCESOS DE REFINACIÓN DEL PETRÓLEO**

### **2.2.1 Destilación**

La destilación es la operación más importante de una refinería e indispensable en la industria petrolera para la separación física de los componentes de petróleo por diferencia en los puntos de ebullición de sus componentes. Debido a esta diferencia entre las diferentes fracciones, las que tienen valores más altos condensan en primer lugar a medida que ascienden por la columna, mientras que los que poseen valores más bajos alcanzan el tope. Las fracciones volátiles y medianas del petróleo se separan mediante una destilación que se efectúa a presión atmosférica, las fracciones menos volátiles o pesadas se separan mediante destilación al vacío y las fracciones muy livianas, que no pueden condensarse a presión y temperatura atmosférica, se separan destilándolas a presión. Independientemente de las condiciones de presión a la que trabaje la columna, la misma posee varias salidas laterales para extraer la fracción condensada correspondiente y obtener el producto con una determinada calidad (PDVSA, 2003).

Suele ser la primera operación en la refinación del petróleo y es utilizada en otros procesos de refinación, tales como craqueo catalítico, alquilación, elaboración de gasolinas, lubricantes, entre otros (CEPET, 1992).

### **2.2.2 Craqueo**

El craqueo catalítico es un proceso en el que los productos excedentes (gasóleos combinados) obtenidos por medio de los procesos primario de destilación (atmosférica y de vacío), son convertidos en productos de mayor valor; tales como: gasolinas, olefinas y residuales (Corporven S.A., 1998).

Existen dos tipos de craqueo: el térmico y catalítico. El catalítico tiene la misma función que el craqueo térmico, es decir, la conversión de fracciones pesadas en productos más livianos y valiosos, pero utilizando un catalizador que acelere o inhibe la reacción química (CEPET, 1992). Las reacciones que ocurren en el craqueo catalítico pueden dividirse en dos tipos: reacciones primarias y secundarias. Las primarias son endotérmicas y predominan a niveles bajos o intermedios, en cambio,

las reacciones secundarias son en general exotérmicas siendo favorecidas a altos niveles de conversión (PDVSA, 2003).

### ➤ **Craqueo catalítico en lecho fluidizado (FCC)**

Todos los procesos de craqueo catalítico que se utilizan hoy en día se pueden clasificar en unidades lecho móvil o de lecho fluidizado.

El proceso de FCC consiste en la desintegración de las moléculas de gasóleo en presencia de un catalizador sólido en forma de partículas esféricas, el cual se comporta como un fluido cuando se airea con vapor. El catalizador fluidizado circula continuamente entre la zona de reacción y la zona de regeneración y actúa como vehículo para transferir el calor desde el regenerador al aceite de alimentación y al reactor (Corpoven S.A., 1998).

### **2.2.3 Alquilación**

La adición de un grupo alquilo a cualquier compuesto es una reacción de alquilación, pero en la terminología de refinación de petróleo el término de alquilación se emplea para la reacción de olefinas de bajo peso molecular con una isoparafina (generalmente isobutano) en presencia de un catalizador ácido (ácido fluorhídrico o sulfúrico), para dar isoparafinas de mayor peso molecular (PDVSA, 2003).

Debido a su naturaleza isoparafínica y elevado octanaje, el alquilato se utiliza como componente en la gasolina de aviación y en la formulación de mezclas de gasolinas de motor de 91 octanos (CEPET, 1992).

### **2.2.4 Reformación**

Los procesos de reformación fueron desarrollados para aumentar la demanda de fracciones de alto octanaje en la formulación de las gasolinas. Como el número de octanos está relacionado con la estructura química de los componentes de la gasolina, es posible mejorar los componentes de bajo octanaje, cambiando su estructura molecular en componentes de alto octanaje; por ejemplo, convirtiendo parafinas de cadena lineal en aromáticos.

La reformación puede ser térmica o catalítica, sin embargo esta última ha sustituido casi totalmente a la primera, puesto que su principal reacción es la conversión de naftenos en aromáticos, mediante una reacción de ciclización seguida de una deshidrogenación. En el reformado catalítico, el cambio en el punto de ebullición de las materias que se procesan en la unidad es relativamente pequeño, ya que las moléculas hidrocarbonadas no se craquean, sino que su estructura se reordena para formar aromáticos de mayor octanaje (CEPET, 1992).

#### ➤ **Reformación catalítica continua (CCR)**

Los procesos de reformado se clasifican dependiendo de la frecuencia de regeneración del catalizador. El equipo para los procesos continuos está diseñado para permitir el retiro y sustitución del catalizador durante el funcionamiento. Como resultados, el catalizador puede regenerarse continuamente y mantenerse en un alto nivel de actividad.

La alimentación tratada previamente se calienta antes de entrar al primer reactor. La reacción es la deshidrogenación de naftenos a aromáticos y, dado que esta reacción es endotérmica, la temperatura desciende significativamente. Para mantener la velocidad de reacción, los gases se recalientan antes de pasar por el catalizador del segundo reactor. En el proceso CCR la alimentación pasa a través de los reactores dispuestos en forma de columna, uno encima del otro. El catalizador del reactor inferior (el último) es purgado con nitrógeno y transferido a la torre de regeneración, donde el carbón es quemado y el catalizador es oxidado, luego purgado con nitrógeno y transferido de nuevo al tope del primer reactor en donde se reduce (PDVSA, 2006).

### **2.2.5 Hidrotratamiento**

El término hidrotratamiento identifica a un amplio grupo de procesos que utilizan el hidrogeno como reactante. El tratamiento con hidrógeno es un proceso que busca la estabilización catalítica de los productos de petróleo y/o la eliminación los elementos inadmisibles en las materias primas o en los productos, haciéndolos reaccionar con hidrógeno. La estabilización implica la conversión de los hidrocarburos insaturados

tales como olefinas, diolefinas inestables formadoras de goma, a materias saturadas tales como parafinas. Los elementos indeseables eliminados mediante el hidrotratamiento, incluyen al azufre y el nitrógeno, y el procesamiento se aplica a un amplio sector de materias primas que abarca desde la nafta al crudo reducido (PDVSA, 2006).

Entre los procesos de hidrotratamiento más utilizados por la industria petrolera están:

- ✓ Hidrotratamiento de nafta vírgenes: el pretratamiento de naftas a reformación es la aplicación más usual de este tipo de procesos y tiene como objeto reducir significativamente el contenido de contaminantes (CEPET, 1992).
- ✓ Hidrotratamiento de naftas de conversión: las naftas provenientes de los procesos de conversión, en particular residuos de vacío (coquificación, hidrocrqueo, viscorreducción) poseen altos contenidos de contaminantes (esencialmente de nitrógeno y azufre), son muy inestables ya que tienen una gran cantidad de olefinas y diolefinas (CEPET, 1992).

### **2.3 GASOLINA**

Las gasolinas de motor son esencialmente mezclas de hidrocarburos derivados del petróleo que, adicionalmente, pueden contener aditivos seleccionados cuidadosamente para impartirle características específicas. Las propiedades de la gasolina comercial están definidas mayormente por los procesos de refinación empleados en su producción y en menor parte por la naturaleza del petróleo del cual provienen sus componentes; por ser una mezcla de diversos productos, la gasolina no tiene un punto fijo de ebullición sino una curva de destilación que comienza a 30 °C y termina generalmente, a los 225 °C (ASTM, 1989).

En la actualidad, las gasolinas son formuladas para satisfacer los requisitos exigidos por los fabricantes de motores donde se les utiliza, así como también, los impuestos por las normas ambientales, de modo que no solo se busca un alto

rendimiento de la misma, sino también un bajo efecto contaminante (Corpoven S.A.,1998).

En RPLC se preparan dos tipos de gasolina, una de bajo y otra de alto octanaje, 91 y 95 respectivamente, las cuales están formuladas de manera diferente a fin de cumplir con las especificaciones requeridas al más bajo costo (Corpoven S.A, 1998). Los componentes presentes en las gasolinas se muestran en la tabla 2.1.

**Tabla 2.1 Componentes básicos de las gasolinas preparadas en RPLC (PDVSA, 2006)**

Componente	Características
Naftas vírgenes	Productos de la destilación del petróleo. Bajo octanaje MON y RON.
Naftas reformadas	Producto de la reformación de la nafta pesada. Alto octanaje, especialmente RON.
Naftas catalíticas	Producto de las reacciones de craqueo catalítico. Alto octanaje. Principal componente de la gasolina 91 octanos.
Gasolina natural	Bajo octanaje. Traída de la planta de fraccionamiento de Jose.
Alquilato	Principal derivado del proceso de alquilación. Alto octanaje. Uno de los componentes principales de la gasolina 91 octanos.
CAO (componentes de alto octanaje)	Mezcla foránea de distintos componentes con elevado número de octanos. Componente principal de la gasolina de 95 octanos.

### 2.3.1 Proceso de preparación de las gasolinas en RPLC

La gasolina como se ha mencionado anteriormente es una mezcla de muchos componentes y no el resultado de un corte directo del petróleo; así mismo, la

mayoría de los componentes constituyentes de la gasolina son producidos en RPLC. Para ello, se inicia con el ingreso de petróleo Mesa, Merey y Anaco Wax - Santa Bárbara a las unidades de destilación DA-1, DA-2 y DA-3 respectivamente; de dichas unidades, producto de la destilación y otras separaciones físicas, se generan cortes de gasolina estabilizada SR-1, SR-2 y SR-3 en cada caso, las cuales se van a mezclar para ir a las redestiladoras 051 y 052 que conforman la unidad 03 en donde se van a separar en nafta liviana (DPN) que es enviada a almacenamiento y nafta pesada (RTB) que continúa su recorrido en el complejo mejorador de naftas donde se produce el reformado que posteriormente se almacena. Por otro lado de la DA-1 se obtiene una corriente de gasóleo atmosférico (AGO) que se mezcla con una parte del residual de la DA-3 conocido como RECH para alimentar la unidad de craqueo catalítico fluidizado (FCC), donde se obtiene una corriente de nafta catalítica que va a almacenamiento y una corriente de olefinas que se mezcla con isobutano traído desde Jose para producir alquilato en la unidad de alquilación y de ahí ser enviado igualmente a almacenamiento.

Como se ha mencionado no todos los componentes de la gasolina son producidos en la refinería, pues se cuenta también con otro par de componentes como lo son la gasolina natural y CAO ambos compuestos foráneos que se traen a la planta y se usan en las mezclas con el objetivo de cumplir con los requerimientos necesarios en la formulación de las gasolinas de la manera más óptima. La gasolina natural llega del complejo criogénico de Jose, como un medio para desplazar por oleoductos el isobutano que se les compra. Una vez que la mezcla isobutano - gasolina natural está en la planta, éstos son separados y luego enviados a almacenamiento. En cambio el CAO que es una mezcla de diversos componentes que tienen un alto número de octanos y que funge con una gasolina base, llega de la refinería Amuay al tanque dispuesto para tal fin exclusivamente para ser utilizado en la formulación de gasolina 95 octanos, a modo de garantizar la especificación mínima de octanaje de la gasolina.

Una vez que los componentes básicos (incluyendo los foráneos) están preparados y listos en sus tanques de almacenamiento, se sigue con el sistema de mezclado en línea de las gasolinas.

Este sistema consta de un cabezal de 20 pulgadas de diámetro en el que se preparan ambos tipos de gasolina a distintos momentos. A él, se conectan las líneas de succión de los componentes ya mencionados, cada uno de los cuales tiene una bomba y un lazo de control independiente encargado de manejar los flujos de producto que serán bombeados al cabezal según sea la proporción requerida según su formulación. A medida que los componentes ingresan al cabezal, éstos se van mezclando por acción del flujo turbulento creado dentro de la tubería y la mezcla formada avanza por la misma hasta llegar al cabezal de descarga de gasolina 91 o 95 según sea el caso. Dependiendo de la gasolina preparada se le añadirán o no otros aditivos y por último será enviada a los tanques de almacenamiento donde se toma una muestra que es enviada al laboratorio para verificar el cumplimiento de las especificaciones mínimas de calidad y certificar los tanques permitiendo así su venta al mercado local.

El sistema de preparación de las gasolinas se presenta en la figura 2.1.

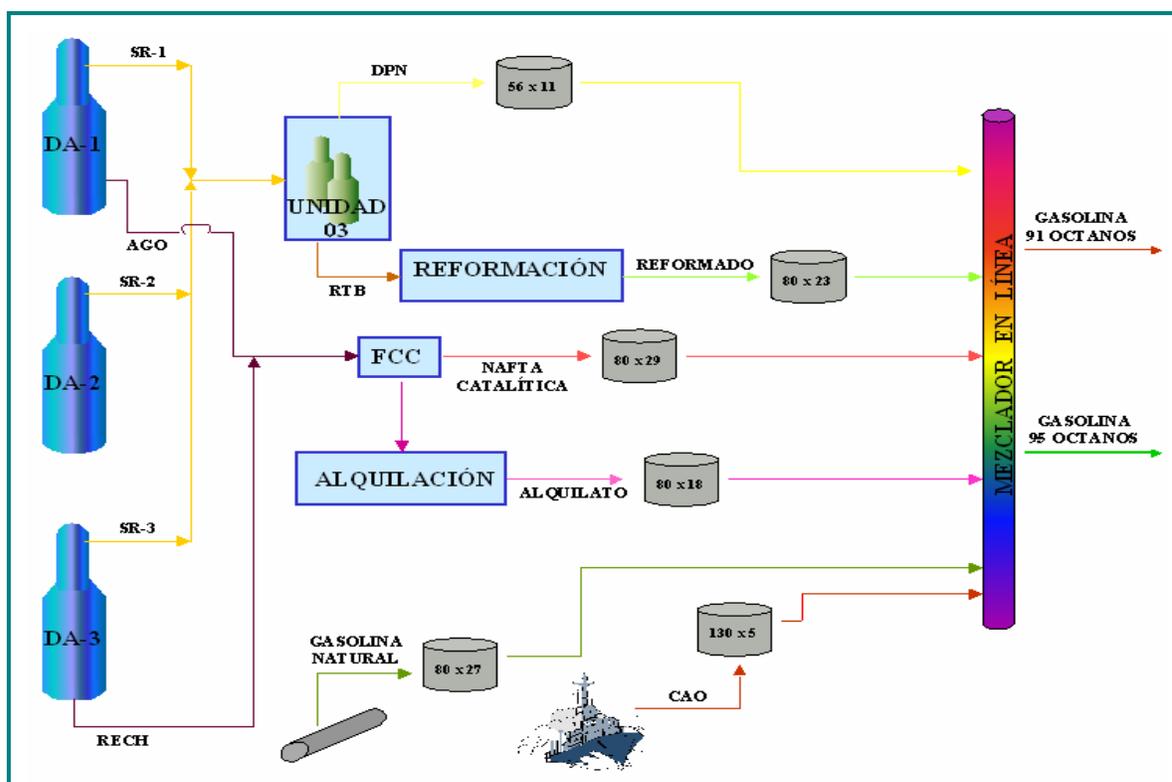


Figura 2.1 Diagrama del sistema de preparación de gasolinas en RPLC (PDVSA, 2007)

La formulación de las gasolinas es asentada en la guía o estrategia operacional, que es un documento generado por la superintendencia de programación y economía. Para su elaboración la superintendencia pide los lineamientos a la dependencia de comercio y suministro (precios pronósticos, cambios de temporadas, demandas y ofertas de productos, etc) con los cuales se hace una corrida preliminar del simulador PIMS que genera la formulación base de las gasolinas, en función a eso se elabora una "mezcla del mes" las cual es enviada al laboratorio para verificar la calidad de la misma, con la cual una vez comprobada se hace una reunión de planificación para ajustar detalles (cargas a unidades, rendimientos, etc.) y hacer una última corrida en el simulador obteniendo entonces la formulación definitiva de ambas gasolinas (PDVSA, 2006).

## **2.3.2 Propiedades de la gasolina**

### **2.3.2.1 Volatilidad**

La volatilidad es el factor determinante para indicar la tendencia de un hidrocarburo a producir vapores potencialmente explosivos. Es de importancia crítica tanto para las gasolinas de motor como las de aviación, ya que afecta el encendido, el calentamiento y la tendencia al bloqueo de vapor en condiciones de operación a temperaturas altas, altitudes elevadas o en ambas. La volatilidad de la gasolina debe ser cuidadosamente balanceada para garantizar un compromiso óptimo entre los diferentes aspectos y el funcionamiento de un motor (ASTM, 1998).

La volatilidad de la gasolina está relacionada con tres propiedades:

#### **➤ Destilación**

Puesto que la gasolina es una mezcla de muchos hidrocarburos, ella no tiene un punto de ebullición simple o es más bien, de rango amplio. En Laboratorio se usa éste método para determinar el rango o amplitud de ebullición de los productos del petróleo. La tendencia a vaporizar está caracterizada por la determinación de una serie de temperaturas en las cuales a varios porcentajes de las gasolinas se evaporan, y se utilizan principalmente las temperaturas en las cuales ocurre el 10, 50 y 90% de evaporación (Corpoven S.A., 1998).

➤ **Presión de vapor Reid (RVP)**

Es la presión que alcanza un producto determinado en un volumen de aire cuatro veces superior al volumen del líquido a 100 °F. La prueba RVP indica la tendencia lineal hacia la vaporización, mientras que la prueba de destilación proporciona una medida de la extensión que alcanzará la vaporización de un determinado conjunto de condiciones.

La RVP provee una aproximación de la presión de vapor absoluta de una muestra ligeramente vaporizada a 100 °F, sin embargo, no es equivalente a la presión de vapor real. La presión de vapor Reid difiere de la presión de vapor real en la ligera evaporación de la muestra y la presencia de vapor de agua y aire en el espacio confinado. En general, las presiones de vapor real son mayores que los RVP (Corpoven S.A., 1998).

➤ **Índice de bloqueo de vapor (IBV)**

Es una medida de la tendencia de una gasolina a generar excesivos vapores en una línea de combustible, causando desplazamientos del combustible líquido en sentido contrario al flujo y la subsiguiente interrupción de la operación normal del automóvil. Esta se define mediante la siguiente expresión (Corpoven S.A., 1998):

$$IBV = RVP + 0,13 \times (PE158) \quad \text{Ec. [2.1]}$$

donde:

RVP: presión de vapor Reid

PE158: porcentaje en volumen evaporado a 158 °F

En términos generales, aplican las siguientes relaciones entre volatilidad y rendimiento (Corpoven S.A., 1998):

✓ Altas presiones de vapor y temperaturas bajas para el 10% evaporado, conducen a un arranque fácil en climas fríos. Al contrario en climas cálidos, esto conduce a bloqueo de vapor y a formación de mucho vapor en los tanques de combustible y en los carburadores.

- ✓ Aunque la presión de vapor es un factor importante en la formación de la cantidad de vapor, ella sola no es un buen índice. Un índice mejor para medir el rendimiento de bloqueo por vapor reactivo en los modelos de carros corrientes, es la temperatura a la cual se logra una relación vapor/líquido igual a 20. Mientras menor sea la temperatura a la que se tiene un  $V/L=20$ , habrá una tendencia mayor al bloqueo por vapor.
- ✓ La temperatura a la cual se evapora el 50%, es una indicación muy importante de facilidad de calentamiento y de buena aceleración, en condiciones de arranque en clima frío. En cuanto menor sea esta temperatura, mayor será el rendimiento obtenido.
- ✓ La temperatura a la cual se evapora el 90% y el punto final de ebullición, indican la cantidad de componentes de punto de ebullición relativamente alto en la gasolina. Una temperatura alta del 90% evaporado está usualmente asociada con componentes de densidad y número de octanos mayores, lo que redundará en economía de combustible mejorada y en resistencia al golpeteo. Si las temperaturas del 90% evaporado y el punto final de ebullición son demasiado altas, ello puede causar distribución pobre de la mezcla en el múltiple de admisión y en las cámaras de combustión, también depósitos excesivos en la cámara de combustión.

### **2.3.2.2 Gravedad °API**

"Gravedad" es un término utilizado para denotar la densidad de las gasolinas; hay dos métodos comúnmente utilizados para expresarla: la gravedad específica o densidad relativa que es la relación entre la masa de un volumen dado de gasolina a una temperatura determinada (usualmente  $15,6\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) y la masa del mismo volumen de agua a la misma temperatura; y la gravedad API (instituto americano de petróleo) que indica la relación correspondiente de peso específico y fluidez de la gasolina respecto al agua (ASTM, 1998).

Para los efectos del control de calidad de los derivados de petróleo en una refinería, se utilizan las siguientes correlaciones (Corpoven S.A., 1998):

- ✓ A medida que aumenta la gravedad específica, el punto de ebullición se hace más alto y/o el producto se hace menos parafínico.

- ✓ En las gasolinas que tienen igual rango de ebullición, una gravedad API baja, con frecuencia está relacionada con un mayor número de octano. El número de octano indica las propiedades antidetonantes de la gasolina.
- ✓ En las fracciones de petróleo que van a ser sometidas a procesos de desintegración, una gravedad API alta es indicio de una más fácil y eficiente operación para producir grandes cantidades de gasolina.
- ✓ Mientras más alta sea la gravedad API de un aceite combustible, más bajo será su poder calorífico.

### **2.3.2.3 Composición de hidrocarburos**

Los principales tipos de hidrocarburos presentes en la gasolina, son las parafinas, olefinas y aromáticos. La determinación del porcentaje de cada uno de ellos en la gasolina es importante pues permite tener, además de una medida de la calidad del combustible, un control sobre aquellos compuestos cuya concentración está estrictamente regulada (ASTM, 1998).

### **2.3.2.4 Octanaje**

Es indicativo de la resistencia de la gasolina a la detonación y es un factor determinante de la calidad del producto. La gasolina con calidad antidetonante inferior al requerimiento del vehículo provoca pistoneo en el motor y esto lo afecta negativamente por la pérdida de potencia y posibles daños mecánicos. Este octanaje se determina bajo condiciones específicas mediante pruebas realizadas en un motor prototipo.

El resultado de la prueba se determina comparando el comportamiento del combustible que se analiza, con una mezcla de dos combustibles de referencia cuyo comportamiento se ha fijado de antemano. Al iso-octano puro se le ha asignado un octanaje de 100, porque no produce pistoneo en la mayoría de los motores y al heptano normal un octanaje igual a cero, porque produce pistoneo en casi todos los motores. Mezclando diferentes proporciones de estos hidrocarburos, se busca una mezcla que produzca el mismo comportamiento o intensidad de detonación que el combustible que se analiza. En este caso se dice que el octanaje de la muestra en

cuestión es igual al porcentaje de iso-octano de la mezcla de referencia (Corpoven S.A.,1998).

Hay dos motores prototipo usados en los laboratorios, correspondiente al método RON y al método MON. Típicamente el número de octanos medido por el método RON es mayor que el número medido por el método MON para la gasolina. La diferencia entre el número de octanos obtenido por un método u otro va a depender de las condiciones bajo la que opera el motor en cada uno, todas establecidas y ajustadas cuidadosamente por la ASTM, las más resaltantes se destacan en la tabla 2.2.

**Tabla 2.2 Características representativas del método Motor y Research para la medición de octanaje (Corpoven S.A., 1998)**

Motor	Research
900 RPM.	600 RPM.
Avance automático de encendido.	Punto de encendido fijo.
Tubo múltiple de entrada a temperatura de 148,9 °C (300 °F).	Tubo múltiple de entrada a temperatura normal (ambiente).
Admisión de aire a temperatura normal (ambiente).	Admisión de aire a temperatura de 51,7 °C (125 °F).

Una especificación puede incluir límites medidos por cualquiera de los dos métodos, por los dos o por una combinación de los dos. Comúnmente, está especificado un promedio aritmético de los dos como se muestra en la siguiente expresión, llamado índice antidetonante (IAD) (ATSM,1998).

$$\text{IAD} = [(\text{MON} + \text{RON})/2] \quad \text{Ec. [2.2]}$$

Mientras más alto es el número de octanos, menor será la tendencia al “pistoneo”. El octanaje de un componente de la mezcla de gasolina depende de su composición química: las isoparafinas y aromáticos tienen números de octanos altos,

los de olefinas y naftenos tienen números medianos, y las parafinas normales los tienen bajos con la excepción del butano (Corpoven S.A., 1998).

### 2.3.3 Especificaciones de las gasolinas

La calidad de la gasolina está definida por ciertas propiedades físicas, ligadas generalmente a su composición química y al uso de ciertos aditivos para mejorar algunas de sus propiedades.

En Venezuela, la gasolina se clasifica en gasolina regular con un índice antidetonante de 87 octanos y gasolina óptima con un IAD de 91 octanos, ambas gasolinas son producidas sin plomo.

En las tablas 2.3 y 2.4 se muestran las especificaciones de calidad para las gasolinas de 91 y 95 octanos según la norma COVENIN 764 R: 2007.

**Tabla 2.3 Especificaciones de la gasolina de 91 octanos (Comisión Venezolana de Normas Industriales, 2007)**

Análisis	Unidades	Mínimo	Máximo	Método
Destilación D-86				COVENIN 850
Punto inicial de ebullición	°C	30		
10% de destilado	°C		70	
50% de destilado	°C	77	121	
90% de destilado	°C		195	
Punto final de ebullición	°C		225	
% residuo	% v/v		2	
Evaporado a 70 °C	% v/v	Reportar		
RVP	Psig		9,5	COVENIN 875
Indice de Bloqueo de Vapor	N/A		14,5	CALCULADO
Gravedad API	API	Reportar		COVENIN 1143
Color	N/A	Rosado / Rojo		VISUAL
Estabilidad a la oxidación	min	240		COVENIN 873
Goma existente	mg/100 ml		5	COVENIN 874

**Tabla 2.3 Especificaciones de la gasolina de 91 octanos (Comisión Venezolana de Normas Industriales, 2007) (Continuación)**

Análisis	Unidades	Mínimo	Máximo	Método
Marcador	N/A	Positivo		COVENIN 764
Tira de cobre	N/A		1	COVENIN 872
Azufre	% p/p		0,10	COVENIN1826
Contenido de plomo	g/L		0.013	COVENIN 764
Total aromáticos	% v/v		35	ASTM D-5134
Total olefinas + aromáticos	% v/v		45	ASTM D-5134
Contenido de benceno	% v/v		1,2	ASTM D-3606
Contenido de oxígeno	% v/v		3,7	ASTM D- 4815
IAD	N/A	87		CALCULADO
RON	N/A	91		ASTM D-2699

**Tabla 2.4 Especificaciones de la gasolina de 95 octanos (Comisión Venezolana de Normas Industriales, 2007)**

Análisis	Unidades	Mínimo	Máximo	Método
Destilación D-86				COVENIN 850
Punto inicial de ebullición	°C	30		
10% de destilado	°C		70	
50% de destilado	°C	77	121	
90% de destilado	°C		195	
Punto final de ebullición	°C		225	
% residuo	% v/v		2	
Evaporado a 70 °C	% v/v	Reportar		
RVP	Psig		9,5	COVENIN 875
Índice de Bloqueo de Vapor	N/A		14,5	CALCULADO
Gravedad API	API	Reportar		COVENIN 1143
Color	N/A	Amarillo pálido		VISUAL

**Tabla 2.4 Especificaciones de la gasolina de 95 octanos (Comisión Venezolana de Normas Industriales, 2007) (Continuación)**

Análisis	Unidades	Mínimo	Máximo	Método
Estabilidad a la oxidación	min	240		COVENIN 873
Goma existente	mg/100 ml		5	COVENIN 874
Marcador	N/A	Negativo		COVENIN 764
Tira de cobre	N/A		1	COVENIN 872
Azufre	% p/p		0,06	COVENIN1826
Contenido de plomo	g/L		0.013	COVENIN 764
Total aromáticos	% v/v		35	ASTM D-5134
Total olefinas + aromáticos	% v/v		45	ASTM D-5134
Contenido de benceno	% v/v		1,2	ASTM D-3606
Contenido de oxígeno	% v/v		3,7	ASTM D- 4815
IAD	N/A	91		CALCULADO
RON	N/A	95		ASTM D-2699

## 2.4 PRINCIPIOS DE MEZCLADO

El objetivo del mezclado en refinación es distribuir los componentes básicos disponibles de modo que se satisfaga la demanda de productos terminados con sus especificaciones, al menor costo posible y produzca así un paquete de productos que maximicen el beneficio global.

El proceso de mezclado es relativamente simple, sin embargo la determinación de las proporciones de la mezcla es más difícil, pues para lograr distribuir adecuadamente los productos, uno de los factores determinantes es la calidad de las mezclas. Y ésta se garantiza basándose en sus especificaciones, y se determina a través del análisis de laboratorio.

Todas las especificaciones de un producto son importantes, sin embargo, no todas pueden ajustarse simultáneamente a través del mezclado, ya que algunas se

convierten en especificaciones críticas. Entre las cuales, para el caso de las gasolinas se tienen el octanaje, volatilidad, destilación, contenido de azufre (Corpoven S.A.,1998).

Debido a que las operaciones de mezcla ofrecen un gran número de opciones, generalmente se modelan mediante modelos de Programación Lineal (P.L.), como ayuda en la toma de decisiones. Las operaciones de mezclas pueden ser modeladas por dos métodos (Corpoven S.A., 1998):

✓ Método 1: es el más simple, consiste en desarrollar un número de mezclas que cumplan las especificaciones de los productos y el modelo de programación lineal selecciona alguna de estas combinaciones. Este método presenta la desventaja que debe suministrarse un elevado número de mezclas para mantener la flexibilidad en el rango de calidad requerida en el producto.

✓ Método 2: se incorporan al modelo las características de los crudos a procesar, la calidad de los componentes básicos y las especificaciones de los productos. El modelo selecciona la composición óptima dentro de las especificaciones, logrando de esta forma cumplir con el rango de calidad exigido. Este método es más flexible que el anterior, debido a que permite realizar diferentes combinaciones de productos, evaluar nuevos productos, analizar cambios en las alimentaciones de las unidades de proceso y en las propiedades de los compuestos puros, pero requiere de mayor esfuerzo para mantener la actualización de los datos requeridos.

Dependiendo del tipo de propiedad que se estudie, se pueden dar varios tipos de mezclas, ellas son:

#### **2.4.1 Mezclas lineales**

Una propiedad es aditiva, es decir, mezcla linealmente, cuando la calidad del conjunto resultante puede ser expresada como el promedio de la calidad de los componentes. En otras palabras, se debe cumplir una de las siguientes ecuaciones (Corpoven S.A.,1998):

- ✓ Si es lineal respecto al volumen:

$$P_m = \sum V_i P_i \quad \text{Ec. [2.3]}$$

donde:

$P_m$  = propiedad de la mezcla total

$P_i$  = propiedad del componente puro  $i$

$V_i$  = fracción en volumen del componente  $i$

#### 2.4.2 Mezclas no lineales

Numerosas propiedades se caracterizan porque al tratar de estimarlas usando mezclas lineales, se generan diferencias significativas entre la propiedad estimada y la real. Tal es el caso de las soluciones reales con componentes de estructura química diferentes.

Uno de los métodos más utilizados para estimar estas propiedades es emplear en lugar del valor de la propiedad real, propiedades auxiliares denominadas índices de mezclado o coeficientes de interacción (Corpoven S.A., 1998).

A continuación se presenta la tabla 2.5 donde se indica la forma en que mezclan con algunas propiedades de la gasolina producida en RPLC.

**Tabla 2.5 Propiedades de la gasolina en RPLC (Corpoven S.A, 1998)**

Propiedad	Método	Tipo de Mezcla
Contenido de aromáticos	-	Linealmente en volumen.
Contenido de azufre	-	Linealmente en volumen.
Presión de vapor		Mezcla linealmente en fracciones molares, sin embargo, es una buena aproximación la mezcla lineal en volumen.
Gravedad API	-	Convertir a gravedad específica, o densidad, y mezclar linealmente en volumen.
Gravedad específica	-	Linealmente en volumen.

**Tabla 2.5 Propiedades de la gasolina en RPLC (Corpoven S.A, 1998)**  
**(Continuación)**

Propiedad	Método	Tipo de Mezcla
Densidad	-	Linealmente en volumen.
Destilación ASTM D-86	-	En rangos de ebullición amplios (90% - 10% > 150 °F) es posible predecirla aceptablemente mediante un promedio volumétrico.

## 2.5 ENFOQUE DE LA INTERACCIÓN DE MEZCLAS DE GASOLINA

Un nuevo enfoque para las mezclas de gasolina se describe por ecuaciones desarrolladas que incluyen términos para la interacción entre pares de componentes. Esto demuestra que esta forma de ecuación describe el comportamiento de la mezcla con precisión a lo largo de todo el rango de composiciones, no solo para pares de componentes sino también para cualquier mezcla multicomponente. Este enfoque permite una completa descripción del comportamiento de la mezcla basada en el número de octanos de los componentes y las mezclas de todos los pares de componentes. La habilidad de describir el comportamiento del número de octanos de la mezcla para cualquier composición permite la adecuada formulación de la misma bajo cualquier condición incluyendo la falta de ciertos componentes debido a la parada de unidades de proceso.

Las refinerías necesitan valores precisos de las mezclas de octanos, con el objeto de:

- ✓ Preparar mezclas de gasolinas
- ✓ Evaluar componentes potenciales
- ✓ Asignar componentes entre grados de gasolina de una manera adecuada

La asignación acertada de componentes entre calidades puede cambiar apreciablemente debido a cambio en las especificaciones, cantidades o fracción

porcentual de los componentes, por lo tanto, es importante tener una data precisa de la mezcla de octanos y que aplique a todas las posibles combinaciones. En cumplimiento de esta necesidad, la clave está en el diseño del estudio del mezclado; las mezclas que son probadas deben cubrir el completo rango de composiciones (Morris, 1980).

### 2.5.1 El modelo de interacción de la mezcla

Con el enfoque de interacción de la mezcla de Du Pont, el comportamiento de las mezclas de gasolinas no lineales en octanos se describe de manera simplificada mediante la siguiente ecuación (Morris, 1980):

$$P_m = \sum (X_i a_i) + \sum (b_{ij} X_i X_j) ; \quad 1 \leq i < j \quad \text{Ec. [2.4]}$$

donde:

$P_m$  = propiedad promedio de la mezcla total

$a_i$  = propiedad del componente i

$X_i$  = fracción volumétrica del componente i

$X_j$  = fracción volumétrica del componente j

$b_{ij}$  = coeficiente de interacción del componente i y j

i, j = número de componentes que integran la mezcla

Para una mezcla binaria la ecuación [2.4] quedaría de la siguiente forma:

$$P_m = a_i X_i + a_j X_j + b_{i,j} X_i X_j \quad \text{Ec. [2.5]}$$

donde:

$P_m$  = propiedad promedio de la mezcla total

$a_i$  = número de octanos del componente i

$a_j$  = número de octanos del componente j

$X_i$  = fracción volumétrica del componente i

$X_j$  = fracción volumétrica del componente j

$b_{i,j}$  = coeficiente de interacción para los componentes  $i$  y  $j$

$i,j$  = identificación de componentes que integran la mezcla

Con más de dos componentes, se necesitan términos de interacción para cada uno de ellos.

### **2.5.2 Cambios en los componentes o sus características**

Mientras las características de los componentes cambien, la exactitud de cualquier estudio de octanos de mezcla se verá comprometida en cierta medida. Una pequeña variación en el octanaje de algún componente es manejable cambiando el coeficiente del número de octanos ( $a_i$ ). Si se anticipan grandes cambios en el nivel de octanos o en la composición, la mejor exactitud puede ser obtenida incluyendo diferentes muestras en el estudio. Por ejemplo, un reformado de 90 octanos y uno de 95 octanos pueden ser incluidos en el mismo estudio (Morris, 1980).

### **2.5.3 Ventajas del enfoque de interacción en las mezclas de gasolina**

- ✓ Proporciona una descripción completa del comportamiento de la mezcla en todo el rango de composiciones.
- ✓ La exactitud del modelo de interacción presenta un error del resultado experimental bastante pequeño para el octanaje entre otras propiedades como RVP, destilación ASTM y radio V/L.
- ✓ El modelo puede ser expandido fácilmente para incluir nuevos componentes de la gasolina.
- ✓ La generalización del comportamiento de los octanos de la mezcla es facilitada por la separación de la no-linealidad total en muchas partes más pequeñas (las interacciones entre los pares de los principales tipos de componentes).
- ✓ Las ecuaciones pueden ser hechas de modo que el octanaje calculado para una mezcla con componentes livianos y pesados sea idéntico al octanaje calculado para la misma mezcla conteniendo el equivalente en componentes de amplio rango de ebullición (Morris, 1980).

## 2.6 MODELO PIMS DE PROGRAMACIÓN LINEAL

El programa de optimización utilizado por PDVSA y sus filiales se conoce con el nombre de PIMS (process industry modeling system). Dicho programa es un sistema computarizado que emplea la técnica de programación lineal para representar los procesos e implicaciones económicas de una refinería o cualquier otra industria en consideración. Dentro de la amplia gama de aplicaciones del PIMS cuentan las siguientes:

- ✓ Evaluación de cambios en la alimentación en las unidades de proceso
- ✓ Dimensionamiento de plantas
- ✓ Optimización de mezclas de productos
- ✓ Programación de operaciones
- ✓ Elaboración de nuevos productos
- ✓ Optimización del margen de refinación

Los modelos de P.L. (programación lineal) construidos por PIMS, son modelos diseñados para evaluar situaciones dentro de un período de tiempo definido (un día, una semana, mes o año) referidas a una industria en particular (Corpoven S.A., 1993).

### 2.6.1 Funcionamiento del programa PIMS

La información al PIMS se suministra mediante tablas que describen las economías y los procesos bajo consideración. Estas tablas son creadas y soportadas por el usuario a través del manejador de datos de PIMS, el cual se maneja mediante excel, tal que las tablas son hojas de cálculos. Una agrupación de estas tablas constituye un modelo.

PIMS permite al usuario crear e independientemente mantener un número de modelos en el mismo computador, éstos pueden variar o ser opciones alternas para la misma situación, o podrían ser representativos de la totalidad de las diferentes plantas o procesos (Corpoven S.A., 1993).

El Sistema PIMS comprende un número de módulos que son selectivamente ejecutados por el usuario, descritos a continuación (Corpoven S.A., 1993):

- **Manejador de modelos:** es usado para revisar que modelos están presentes en el computador, que tablas corresponden a cada modelo, para crear nuevos modelos y copiar todas las tablas de un modelo a otro. También puede usarse para chequear, almacenarlos y hasta dirigir la impresión de los reportes generados por PIMS.
- **Manejador de datos:** es usado para crear, modificar y borrar tablas en un modelo; también puede copiar tablas seleccionadas de un modelo a otro. Permite recuperar hojas de trabajo, creadas por el generador de reportes de solución donde se presenta la solución optimizada y el reporte sumario del modelo.
- **Generador de reportes de validación:** es usado para chequear la integridad de los datos de un modelo y sumarizar la información. La revisión incluye la revisión de la sintaxis de los datos de las tablas, consistencia de nomenclatura, las limitaciones mínimas y máximas, la disponibilidad de crudos e insumos de procesos y la revisión de balances.
- **Generador de matriz:** es la pieza fundamental del sistema PIMS. Este suministra la data al modelo y automáticamente crea un modelo de programación lineal que representa el proceso económico, el proceso tecnológico y el balance de materia del proceso.
- **Optimizador de programación lineal:** el empleado en PIMS es llamado PIMSLP el cual emplea técnicas de optimización de matriz. Las iteraciones del proceso de optimización son mostradas en la pantalla y se pueden imprimir; también tiene facilidades para guardar la solución en un archivo y alimentar esta solución para un estimado caso futuro.

### **2.6.2 Tablas del PIMS**

La fuente de entrada de datos al PIMS es un conjunto de tablas excel que describen la economía y tecnología de los procesos que conforman un determinado complejo industrial. Dichas tablas contienen un grupo de filas y columnas con entradas numéricas o texto, las cuales son creadas por el usuario de acuerdo a ciertos requerimientos PIMS (Corpoven S.A., 1993).

En la figura 2.2 se ejemplifican las características principales de las tablas del modelador de procesos PIMS.

	A	B	C	D	...
1	*				
2	*	FILAS	DE	COMENTARIOS	
3	*				
4		FILA DE NOMBRES DE COLUMNAS			
5					
6	COLUMNA				
7	DE		CUERPO	DE LAS	
8	NOMBRES				
9	DE		TABLAS	PIMS	
10	FILAS				
11					
...					

**Figura 2.2 Formato estándar de una tabla PIMS (Corpoven S.A., 1993)**

La data introducida en el PIMS se encuentra en forma de tablas, agrupadas en renglones de acuerdo a la función que cumplen, teniéndose un total de seis renglones a saber: Insumos/Productos, Destilación de Crudos, Unidades de Procesos/Mezclas, Mezclas de Componentes, Misceláneos y Técnicas de Revisión. En la tabla 2.6 se presentan los nombres de las tablas del PIMS para cada renglón.

**Tabla 2.6 Clasificación de las Tablas PIMS (Corpoven S.A., 1993)**

RENGLON I	RENGLON II	RENGLÓN III	RENGLÓN IV	RENGLON V	RENGLON VI
BUY	ASSAYS	SUBMODS	BLEND	BOUNDS	PDIST
SELL	CRDDISTL	CAPS	BLNMIX	CASE	PGUESS
UTILBUY	CRDCUTS	SALK	BLNNAHP	GROUPS	
ALT TAGS		SAVP, SMCO	BLNREST	INDEX	
		SCCPM, SGL1	BLNSPEC	PCALC	
		SCRU, SMHC	INTERACT	PCALCB	
		SDA6, SNC3	WSPECS	RATIO	
		SDA8, SNC4		REPORT	
		SDHT, SREF		ROWS	
		SFCC, SSUM		SCALE	
		SFGS, ST01		UNITS	
		SNHT, SMD3			

A continuación se describe la función de cada renglón de tablas y la de algunas tablas de interés (Corpoven S.A., 1993):

### a) Renglón I (Insumos/Productos)

Este renglón es utilizado para indicar cuales componentes y servicios pueden ser comprados y vendidos por el modelo, el precio de venta y costos de dichos componentes, cualquier limitación en las cantidades a comprar o vender y a su vez indicar si los componentes son comprados o vendidos en base gravimétrica o volumétrica.

➤ Tabla BUY: esta tabla lista todos los insumos que deben ser comprados por la industria, cada uno de los cuales se identifica con un tag de tres letras elegido por el usuario y definido por él mismo en la columna TEXT. Las columnas MIN, MAX y FIX contienen las limitaciones en cuanto a la cantidad de producto a comprar expresada en miles de unidades de peso o volumen; cualquier entrada en la columna FIX equivale a decir que la limitación mínima es igual a la máxima e igual a ese valor. La columna COST indica el costo de cada de los insumos y por último la columna GROUP se utiliza opcionalmente para agrupar los insumos de acuerdo a sus características. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura 2.3.

* TABLE	BUY	PRECIOS SEPTIEMBRE 2010				
* MODO DESALACION EN DA-2						
* TEXT		MIN	MAX	FIX	COST	GROUP
* CRUDOS LIMANOS						
AWX	ANACOWAX	0,0	5000,000		80,89	1
SBB	SANTA BARBARA	0,0	5000,000		80,60	1
MES	MESA T54	0,0	5000,000		78,20	1
* CRUDOS MEDIANOS						
*LEO	LEONA 24 T-51	0,0	5000,000		71,29	2
* CRUDOS PESADOS						
MEY	MEREY	0,0	5000,000		69,15	3

**Figura 2.3 Modelo de la Tabla BUY del PIMS**

➤ Tabla SELL: tiene el mismo formato que la tabla BUY, con la diferencia que los tags identificados en Sell representan a los productos finales destinados al mercado

interno y de exportación, según la cantidad mínima, máxima o fija a producir por el modelo.

Es importante destacar que cuando se coloca un cero en la columna MIN y un 5000 en la columna MAX, para un determinado insumo o producto, se le da libertad al modelo de comprar o producir la cantidad necesaria para optimizar económicamente el proceso; entonces se dice que dicho material está “abierto”.

#### **b) Renglón II (Destilación de Crudos)**

Este renglón solamente aplica a refinerías de petróleo. Las tablas que lo conforman son utilizadas por PIMS para simular automáticamente los rendimientos de las unidades de destilación atmosférica y/o vacío a partir de los ensayos de cada uno de los crudos a procesar.

#### **c) Renglón III (Procesos/Mezclas)**

Este renglón le brinda al usuario la oportunidad de construir las diferentes unidades de procesos que conforman una determinada industria. Así mismo, le permite simular las mezclas de productos intermedios que puedan tener lugar en un determinado tanque de almacenamiento. Estos submodelos normalmente incluyen balance de materiales, capacidades y consumo de servicios, pero también podría incluir balances por componentes así como una gran variedad de alimentaciones y condiciones de operación.

#### **d) Renglón IV (Mezcla de Componentes)**

Para la mezcla de componentes, PIMS ofrece dos métodos. En el primero el usuario establece la formulación de los productos y en el otro PIMS se encarga de determinar las formulaciones óptimas que mejor satisfagan las especificaciones a cumplir.

➤ Tabla BLENDS: en esta tabla se listan todos los productos a ser obtenidos a partir de la mezcla de componentes, indicando a su vez si la formulación va a ser dada por el usuario o determinada por PIMS. Los nombres de las filas son los tres caracteres (tag) que defina el usuario en la columna TEXT para identificar los productos a ser

formulados. Las entradas en las columnas SPEC o FORM deben ser valores iguales a 1, donde una entrada en la columna SPEC indica que el producto es formulado por PIMS, y una entrada en la columna FORM indica que el producto es creado a partir de una formulación dada por el usuario. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura 2.4.

* TABLE	BLENDS	LISTA DE PRODUCTOS OBTENIDOS POR MEZCLA	
* TEXT		SPEC	FORM
LPV	LPG	1	
LPH	LPG A VENTAS CERO	1	
* GASOLINAS Y NAFTAS			
PMV	GSP 91 RON M.L. S/ETANOL	1	
PME	GSP 91 RON M.L. C/ETANOL	1	
UPV	GSP 95 RON M.L.	1	
UPC	GSP 95 RON M.L. C/CAO		1
UPL	GSP 95 RON C/ETANOL	1	
URB	GSP 87 IAD/ 82 MON	1	
URD	GSP 87 IAD/ 92 RON REFIDOMSA	1	
UZ6	GSP 86 RON/REFIDOMSA	1	

**Figura 2.4 Modelo de la tabla BLENDS del PIMS**

➤ Tabla INTERACT: en esta tabla se especifican los coeficientes de interacción binaria para el cálculo del octanaje como propiedad de mezcla no lineal. La tabla se presenta como una matriz en la que se combina cada par de componentes pertenecientes a la mezcla de gasolina. De ese modo, los nombres de las columnas serán el de cada componentes mientras que los de las filas (ROWNAMES) vendrán dados por el código de la propiedad mas el del componente. La columna TEXT se utilizará para identificar el tag de los componentes.

Así mismo, la intersección de filas y columnas brindara el coeficiente de interacción binaria para la mezcla de ambos componentes. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura 2.5.

* TABLE	INTERACT						
* ROWNAMES	TEXT	FCG	FCK	RE2	ETB	VGJ	ALP
MONC6C	DPN	0,39	0,49	0,36	52	-0,06	0,15
MONFCG	FCCP		-0,4	-0,19	-1,44	0,1	-0,2
MONFCK	FCCF			-1,35	6,12	0,31	-0,82

**Figura 2.5 Modelo de la tabla INTERACT del PIMS**

➤ Tabla BLNSPECS: esta tabla contiene las especificaciones a ser cumplidas por los productos obtenidos a partir de la mezcla de componentes. Los nombres de las filas de la forma Nsss ó Xsss, donde sss son los códigos que definen la propiedad y “N” y “X” indican si la especificación a cumplir es mínima o máxima respectivamente. Los nombres de las columnas deben corresponder solo con el código de los productos cuya formulación sea determinada por especificación mediante el simulador, obviando aquellos cuya formulación es dada directamente por el usuario. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura 2.6.

* TABLE	BLNSPEC	ESPECIFICACIONES PROPIES PRODUCTOS FINALES					
*	TEXT	LPV	LPH	PMV	PME	UPV	UPC
*NAPI	MIN. GRAVEDAD API						
*XSPG	MAX. GRAVEDAD ESPECIFICA						
*XAPI	MAX. GRAVEDAD API	14019	14019				
*NSPG	MIN. GRAVEDAD ESPECIFICA	0,01	0,01				
*							
*							
XSUL	MAX. AZUFRE %P			0,10	0,15	0,06	0,06
*							
NMON	MIN. MON			82,4	82,5	87,5	87,5
NDON	MIN. IAD			87,2	87,5	91,4	91,4
NRON	MIN. RON			1,0	1,0		

**Figura 2.6 Modelo de la tabla BLNSPEC del PIMS**

➤ Tabla BLNMIX: esta tabla es usada tanto para indicar los componentes que pueden formar partes de los productos a ser formulados por especificación así como

para proveer la formulación que establezca el usuario para la obtención de un producto determinado. Los nombres de las filas son los tags que identifican a cada uno de los componentes de mezcla y los nombres de las columnas son los productos finales ya identificados en la tabla BLENDS. Las entradas en las intersecciones de las filas y columnas deberán ser valores iguales a 1 para aquellos productos a ser formulados por especificación. En el caso de productos a ser creados a partir de una fórmula dada, el usuario deberá suministrar la fracción volumétrica o en peso de cada uno de los componentes que van a formar parte del producto. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura a 2.7.

* TABLE	BLNMIX												
*	TEXT	LPV	LPH	PMV	IPME	PME	UPV	UPC	UPL	URB	URD	UPB	UZ6
NC3	PROPANO	1	1										
NC4	BUTANO	1	1							1	1	1	1
C4+	BUTANO +	1	1										
* NAFTAS DESTILACION													
MS8	NAFTA LIVIANA DA8			1	1								
MN8	NAFTA PESADA DA8									1	1	1	1
*NT8	MS8+MN8 DA8												
C6C	NAFTA TOPE 051/052			1	1	1				1	1	1	1
RRG	NAFTA FONDO 051/052									1	1	1	1
LS3	NAFTA LIVIANA DA3									1	1	1	1
* NAFTAS REFORMADOR													
RE1	REFORMADO IMPORTADO			1	1		1		1	1	1	1	1
RE2	REFORMADO			1	1	1	1	0,32	1	1	1	1	1

**Figura 2.7 Modelo de la Tabla BLNMIX del PIMS**

➤ Tabla BLNNAPH: en esta tabla se identifican las propiedades de los componentes de mezcla de la gasolina. Los nombres de las filas son los tres códigos que refieren a los componentes de mezcla y los nombres de las columnas son los códigos que definen cada propiedad. La columna TEXT también puede ser incluida para identificar a cada uno de los componentes.

Los valores de las propiedades pueden ser suministrados en peso o en volumen, dependiendo de cómo se mezclan linealmente. Es importante destacar que para las propiedades no lineales debe suministrarse el índice de mezcla

correspondiente en lugar del valor real de la propiedad y aquellas propiedades suministradas en peso deben ser remitidas a la tabla WSPECS.

Debido a que en el simulador realiza el cálculo de las propiedades con la premisa de que éstas son lineales en volumen, es necesario suministrarle al mismo la gravedad API o específica de cada uno de los componentes de modo que pueda hacer la conversiones necesarias a los valores de las propiedades que son introducidas en unidades de masa.

Un ejemplo de la tabla antes mencionada se muestra en la figura 2.8.

* TABLE	BLNNAPH	PROPIEDADES COMPONENTES A GASOLINAS/NAFTAS						
* TEXT	SPG	!API	SUL	MON	RON	DON	IRVP	
* GLP/IC4								
C5+	C5+ DEL GLP DA1/DA2/DA3/REFORMADOR	0,631	92,7		77,3	77,9	77,600	15,6
NC3	PROPANO A GLP	0,508	147,0					185,0
IC4	ISOBUTANO A ALK	0,563	119,8		97,6	99,0	98,300	72,6
LS2								
*LS3	NAFTA LIVIANA EX-DA3							
LS3	NAFTA LIVIANA EX-DA3							
TD6		0,360						
* GL3	GLP ST01	0,584		0,001	89,6	93,8	91,700	
GL1	GLP SDA6	0,584		0,001	89,6	93,8	91,700	
GLR		0,530						

**Figura 2.8 Modelo de la tabla BLNNAPH del PIMS**

### e) Renglón V (Misceláneos)

Las tablas agrupadas en este renglón surgen como consecuencia de cierta información suministrada en los renglones anteriores. Dicha información podría ser unidades en las que se expresan las corrientes u opciones específicas de los modelos.

➤ Tabla CASE: en ella se encuentra de manera resumida los detalles más característicos de los distintos modelos “base” que ejecuta el simulador, y que pueden ser modificados de manera más rápida directamente desde esta tabla. Un ejemplo de esta tabla se muestra en la figura 2.9.

CASE 2	CASO GUIA OPERACIONAL		
* TABLE	CAPS		
CAT1	DESTILADOR	55,0	79,5
CAT2	DESTILADOR	45,0	70,0
CAT3	DESTILADOR	0,0	0,0
CNSP	NAFTA SPLIT	0,0	35,0000
* TABLE	BOUNDS		

### **Figura 2.9 Modelo de la tabla CASE del PIMS**

#### **f) Renglón VI (Técnicas de recursión)**

Las tablas de este renglón controlan los procesos de recursión considerados por PIMS para solucionar modelos que involucren problemas no lineales, tales como: recursión distributiva de propiedades y recursión distributiva de la susceptibilidad del octanaje por incorporación de un aditivo.

## **CAPITULO III**

### **DESARROLLO DEL TRABAJO**

Para el desarrollo de este trabajo se hizo necesaria la realización de los siguientes objetivos.

#### **3.1 CARACTERIZACIÓN DE LOS COMPONENTES QUE INTERVIENEN EN LA PREPARACIÓN DE GASOLINAS DE 91 Y 95 OCTANOS**

Con el objetivo de conocer las calidades del aguillato, nafta liviana, nafta catalítica, reformado, CAO (componentes de alto octanaje) y gasolina natural que forman parte de la mezcla de gasolinas (91 y 95 octanos) y actualizar la base de datos del simulador, se realizaron los siguientes análisis en el laboratorio de refinería Puerto La Cruz:

##### **a) Destilación**

El ensayo de destilación se realizó según la norma COVENIN 850; para ello, se tomaron 100 ml de muestra en un cilindro graduado, se trasvasaron a un balón destilación en cuyo cuello se colocó un termómetro y se conectó a un condensador que desemboca en un cilindro graduado dispuesto para recibir el destilado, finalmente se inició el calentamiento de la muestra tomando la temperatura en que se forma la primera gota de destilado conocida como punto inicial de ebullición (PIE) y las siguientes temperaturas a que se obtienen distintos porcentajes de destilado (10, 50 y 90 %v) hasta que salga el último vapor del condensador, temperatura que marca el punto final de ebullición (PFE). Los resultados obtenidos para cada componente se muestran en la tabla 3.1.

**Tabla 3.1 Temperaturas (°F) de destilación de los componentes de las gasolinas**

Componente	PIE	10%v	50%v	90%v	PFE
Nafta catalítica	93,9	136,6	234,5	282,5	448,7
Alquilato	91,8	148,5	212,9	277,2	400,3
Nafta Liviana	98,4	126,1	162,7	212,2	263,8
Reformado	120,9	209,8	269,8	336,2	419,7
CAO	88,34	113,18	173,12	270,32	412,34
Gasolina Natural	95,32	109,4	124,88	182,66	224,96

Así como se obtuvieron las temperaturas a un volumen determinado de evaporado, también se obtuvo la cantidad de evaporado a la temperatura de 158 °F para cada componente, datos que fueron utilizados posteriormente. Los valores hallados se presentan en la tabla 3.2.

**Tabla 3.2 Porcentaje de volumen evaporado de los componentes de las gasolinas a 158 °F**

Componente	Porcentaje evap. (%v)
Nafta catalítica	22,2
Alquilato	11,6
Nafta Liviana	44,8
Reformado	2,8
CAO	39,5
Gasolina Natural	88

#### **b) Presión de vapor Reid (RVP)**

La presión de vapor Reid para cada componente se obtuvo según la norma ASTM D-323. La muestra se colocó en un equipo que fue posteriormente introducido en un

baño térmico a 37,8 °C; unos minutos después se sacó el equipo del baño, se agitó vigorosamente y se volvió a introducir, esto se repitió una vez más y se leyó la presión en el indicador cada dos minutos. Cuando la lectura se hizo constante, se registró ese valor como la presión de vapor; para el caso de los componentes de interés se hallaron los valores de RVP mostrados en la tabla 3.3.

**Tabla 3.3 Presión de vapor Reid (RVP) de los componentes de la gasolina**

Componente	RVP (psi)
Nafta catalítica	6,8
Alquilato	7,8
Nafta Liviana	9,6
Reformado	3,5
CAO	9,5
Gasolina Natural	11,6

**c) Índice de bloqueo de vapor (IBV)**

Esta propiedad se calculó a partir de la ecuación [2.1] como se detalla en la muestra de cálculo donde conociendo el evaporado a 158 °F y la RVP de cada componente se obtuvo el valor respectivo de IBV. Los resultados se muestran a la tabla 3.4.

**Tabla 3.4 Índice de bloqueo de vapor (IBV) de los componentes de las gasolinas**

Componente	IBV
Nafta catalítica	9,69
Alquilato	9,3
Nafta Liviana	15,42
Reformado	3,86

**Tabla 3.4 Índice de bloqueo de vapor (IBV) de los componentes de las gasolinas (Continuación)**

Componente	IBV
CAO	14,64
Gasolina Natural	23,04

#### d) Gravedad °API

Para el cálculo de esta propiedad se utilizó la norma COVENIN 1143, que dictó el uso de un hidrómetro para medir la gravedad del líquido en función de la cantidad de éste que es desplazada por el equipo cuando se sumerge en él. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 3.5.

**Tabla 3.5 Gravedad °API de los componentes de las gasolinas**

Componente	Gravedad °API
Nafta catalítica	54,7
Alquilato	71,5
Nafta Liviana	71,3
Reformado	40,3
CAO	64,3
Gasolina Natural	79,8

#### e) Cromatografía

La determinación de la composición química de los componentes en cuanto a parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos, se realizó mediante la norma ASTM D-5134, que contempló el uso de un cromatógrafo de gases. La distribución encontrada de los tipos de hidrocarburos en cada componente se señala en la tabla 3.6. Cabe destacar, que los porcentajes presentados no suman 100% para todos los casos, pues el análisis cromatográfico empleado solo permite identificar parafinas, naftenos, aromáticos y olefinas, y por ende el porcentaje volumétrico de cualquier otro compuesto no se ve reflejado en los resultados.

**Tabla 3.6 Composición química (%v) de los componentes de las gasolinas**

Componente	%v Parafinas	%v Naftenos	%v Aromáticos	%v Olefinas
------------	--------------	-------------	---------------	-------------

Nafta catalítica	30,11	9,76	35,94	22,62
Alquilato	95,41	0,84	0,073	0,76
Nafta Liviana	72,83	20,35	6,82	0
Reformado	24,14	5,73	68,47	1,4
CAO	63,18	0	13,38	16,25
Gasolina Natural	84,35	12,45	3,2	0

#### f) Octanaje

Para el octanaje se usaron dos métodos: MON y RON, mediante las normas ASTM D-2700 y ASTM D-2699 respectivamente, en las que con motores de combustión prototipos condicionados según las normas mencionadas, se obtuvieron los valores de octanaje MON y RON para cada componente a partir de una mezcla de referencia. Los valores obtenidos mediante la prueba se indican en la tabla 3.7.

**Tabla 3.7 Octanaje MON y RON de los componentes de las gasolinas**

Componente	MON	RON
Nafta catalítica	81,3	92,1
Alquilato	90,5	93,3
Nafta Liviana	70	70
Reformado	90,6	100
CAO	85,8	94,1
Gasolina Natural	70,7	73,5

#### h) Índice antidetonante

Para calcular el índice antidetonante se utilizaron los valores de MON y RON de cada componente obtenidos mediante los análisis de laboratorio y se hizo uso de la ecuación [2.2] como se indica en la muestra de cálculo. El valor de IAD para cada componente se presenta en la tabla 3.8.

**Tabla 3.8 Índice antidetonante de los componentes de las gasolinas**

Componente	IAD
Nafta catalítica	86,7
Alquilato	91,9
Nafta Liviana	70
Reformado	95,3
CAO	89,95
Gasolina Natural	72,1

### 3.2 CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE INTERACCIÓN BINARIA DE LOS COMPONENTES DE LAS GASOLINAS

Para la acertada predicción del octanaje de las mezclas de gasolina se consideraron factores de linealización que permitieron corregir la no- linealidad de la propiedad de modo que ésta pudiera ser calculada por el simulador PIMS; estos factores son los llamados coeficientes de interacción binaria y su determinación se hizo en dos fases.

La primera contempló la preparación de las mezclas binarias. En ella se mezclaron los 6 componentes básicos de la gasolina entre sí por pares a varias composiciones (20, 40, 50, 60 y 80 %v) cada uno, con el fin de abarcar el efecto en el octanaje del mezclado de un componente con otro en un amplio rango de concentraciones. Con las mezclas listas, se hicieron pruebas de octanaje MON y RON (según las normas ASTM D-2700 y ASTM D-2699 respectivamente) y sus resultados se almacenaron en las tablas de datos mostrada en el anexo A.

En la segunda fase, se realizó el cálculo de los coeficientes; para ello, se extrajeron los datos de octanaje MON y RON de las tablas de datos (Anexo A) y mediante la ecuación [2.2] se calculó el índice antidetonante (IAD) para cada mezcla binaria (presentados en el anexo B), propiedad con la cual se evaluó la ecuación [2.5] para estimar el coeficiente de interacción ( $b_{ij}$ ) de cada una (mostrados en el anexo C). Finalmente se obtuvieron varios coeficientes para el mismo par de componentes, pero a distintas concentraciones (20, 40, 50, 60 y 80 %v) por lo que se

calculó un promedio de todos ellos, el cual fue considerado como el coeficiente de interacción binaria entre el componente  $i$  y  $j$  en todo el rango de composiciones.

En la muestra de cálculo mostrada más adelante, se indica el procedimiento para la determinación de los coeficientes de interacción binaria, mientras que los coeficientes finales obtenidos se presentan en las tablas de las 4.11 a la 4.16 en el capítulo IV.

### **3.3 VALIDACIÓN DEL ÍNDICE ANTIDETONANTE PREDICHO**

La ejecución de este objetivo, se realizó en varios pasos:

#### **3.3.1 Actualización de datos del PIMS**

Para comprobar que el simulador realizó la predicción del octanaje de manera correcta, primero se actualizaron los datos del simulador, utilizando la caracterización fisicoquímica realizada previamente a cada uno de los componentes y las especificaciones de calidad que exige la norma COVENIN 764, entre otras informaciones. Durante la actualización del modelo de programación lineal se crearon nuevas tablas en excel a partir de las existentes, modificando los parámetros que variaron desde la última revisión realizada al modelo (año 2007). Las tablas de datos que se actualizaron fueron las siguientes:

##### **a) Tabla BLENDS**

Se actualizó la tabla BLENDS, cambiando el modo de preparación de gasolina 95, de “FORM” a “SPEC” de manera que la formulación de la misma, fuese brindada por el modelo de programación lineal en base a las calidades de los componentes y su mejor distribución, así como las especificaciones del producto. El cambio realizado se presenta en la tabla 3.9.

**Tabla 3.9 Tabla BLENDS del PIMS modificada**

*TABLA	BLEND LISTA DE PRODUCTOS OBTENIDOS POR MEZCLA		
*	TEXT	SPEC	FORM
*	GASOLINAS Y NAFTAS	1	
PMV	GSP 91 RON M.L. S/ETANOL	1	
PME	GSP 91 RON M.L. C/ETANOL	1	
UPV	GSP 95 RON M.L.	1	
UPC	GSP 95 RON M.L. C/CAO	1	
UPL	GSP 87 IAD/82 MON	1	

### b) Tabla BLNMIX

En esta tabla se actualizaron los componentes que forman parte de las gasolinas, incluyendo reformado, alquilato propio, alquilato foráneo, nafta catalítica propia, nafta catalítica foránea, nafta liviana, gasolina natural para la gasolina de 91 octanos y reformado y CAO para la de 95. Cabe destacar que a la gasolina 95, se le modificaron los porcentajes volumétricos requeridos de reformado y CAO (32 y 68 respectivamente) por valores iguales a uno (1), con el fin de que fuese el PIMS quien determine la composición más adecuada de la gasolina. Los cambios realizados se presentan en la tabla 3.10.

**Tabla 3.10 Tabla BLNMIX del PIMS modificada**

*TABLA	BLNMIX		
*MODO DESALACIÓN EN DA-2	TEXT	PMV	UPC
*			
C6C	NAFTA TOPE 051/052	1	
FCG	NAFTA CATALÍTICA PROPIA	1	
ALP	ALQUILATO PLC	1	
ALM	ALQUILATO FORÁNEO	1	
RE2	REFORMADO	1	1
VGJ	GASOLINA NATURAL JOSE	1	
FCK	NAFTA CATALÍTICA FORÁNEA	1	
CAO	CAO		1

### c) Tabla BLNNAPH

Esta tabla fue actualizada según la caracterización obtenida en el laboratorio, modificando las propiedades de cada componente incluyendo los compuestos foráneos (alquilato y nafta catalítica) ya que éstos son adquiridos bajo los requerimientos exigidos por RPLC, quedando como se muestra en la tabla 3.11.

**Tabla 3.11 Tabla BLNNAPH del PIMS modificada**

* TABLA	BLNNAPH	PROPIEDADES GASOLINAS/NAFTAS				COMPONENTES					A
*	TEXT	API	MON	RON	DON	160	RVP	VL	ARO	OLF	
RE2	REFORMADO	40,3	90,6	100	95,3	2,8	3,5	3,9	68,4	1,4	
FCG	NAFTA. CAT. PROP.	54,7	81,3	92,1	86,7	22,2	6,8	9,7	35,9	22,6	
ALP	ALQUILATO PLC	71,7	90,5	93,3	91,9	11,6	7,8	9,3	0,07	0,76	
C6C	TOPE 051/052	71,3	70,0	70	70	44,8	9,6	15,4	6,82	0,00	
VGJ	GASOLINA NAT JOSE	79,8	70,7	73,5	72,1	88	11,6	23	3,2	0,00	
FCK	NAFTA. CAT. FORAN.	54,7	81,3	92,1	86,7	22,2	6,8	9,7	35,9	22,6	
ALM	ALQUILATO FORAN.	71,5	90,5	93,3	91,9	11,6	7,8	9,3	0,07	0,76	
CAO	CAO	64,3	85,8	94,1	89,95	39,8	9,5	14,7	13,3	16,2	
*											

**d) Tabla INTERACT**

En la nueva tabla INTERACT, se colocaron los coeficientes finales de interacción binaria calculados para el índice antidetonante, eliminando componentes que anteriormente formaban parte de las mezclas pero ya no lo hacen (como el etanol), añadiendo a su vez los nuevos (como el CAO) y asumiendo los mismos valores tanto para los componentes foráneos como para los locales (alquilato y nafta catalítica), debido a que ambos son componentes del mismo tipo con especificaciones de calidad muy similares. La tabla resultante se muestra en la tabla 3.12.

**Tabla 3.12 Tabla INTERACT del PIMS modificada**

*TABLA INTERACT		COEFICIENTES DE INTERACCIÓN						
ROWNAME	TEXT	FCG	RE2	CAO	VGJ	ALP	FCK	ALM
S								
DONC6C	DPN	6,38	3,87	6,96	0,33	-0,99	6,38	-0,99
DONFCG	NAFTA CAT. PROPIA		-2,62	-3,47	4	-1,12	0	-1,12
DONRE2	REFORMADO			-5,22	-0,06	-5,59	-2,62	-5,59
DONCAO	CAO				1,12	-3,28	-3,47	-3,28
DONVGJ	GASOLINA NAT. JOSE					-1,68	4	-1,68
DONALP	ALQ. PROPIO						-1,12	0
DONFCK	NAFTA CAT. FORAN.							-1,12
*								

#### e) Tabla BLNSPEC

Para esta tabla la actualización se hizo cambiando las especificaciones de las gasolinas por las exigidas según la norma COVENIN 764 R 2007. Los arreglos resultantes se muestran en la tabla 3.13.

**Tabla 3.13 Tabla BLNSPEC del PIMS modificada**

*TABLA	BLNSPEC	ESPECIFICACIONES PRODUCTOS FINALES	
*	TEXT	PMV	UPC
XSUL	MAX. AZUFRE %P	0,10	0,06
NMON	MIN. MON	1,0	1,0
NDON	MIN. IAD	87	90,6
NRON	MIN. RON	91	95,0
XRVP	MAX. PRESION DE VAPOR PSIA	9,5	9,5
XVLI	MAX. INDICE BLOQUEO DE VAPOR	14,5	14,5
XARO	MAX. AROMATICOS %VOL	35,0	35,0
XOAR	MAX. OLE + ARO %VOL	45,0	45,0
XBEN	MAX. BENCENO %VOL	1,2	1,2
XOXI	MAX. O2 %P	3,7	3,7
*			

#### f) Tabla CASE

Para terminar las modificaciones al modelo, se actualizaron las demandas de gasolina del mercado, así como los límites de compra y venta de insumos y productos respectivamente. La tabla CASE resultante se muestra en la tabla 3.14.

**Tabla 3.14 Tabla CASE del PIMS modificada**

CASO 3 CASO GUIA OPERACIONAL: HDT CALIDAD INVIERNO			
*	DA2 DESTILANDO		
TABLE	BUY		
	TEXT	MIN	MAX
FCK	NAFTA CATALITICA FORAN	0,0	12,0
ALM	ALQUILATO FORAN	0,0	7,6
CAO	COMPONENTES DE ALTO OCTANAJE	0,0	5000,0
VGJ	GASOLINA NATURAL JOSE	0,0	2,7
*			
TABLE	SELL		
	TEXT	MIN	MAX
PMV	GSP 91 OCTANOS MERCADO LOCAL	34,9	34,9
UPC	GSP 95 OCTANOS MERCADO LOCAL	27,0	27,0
RE2	REFORMADO 102	0,0	0,0
C6C	NAFTA LIVIANA A VENTAS	0,0	0,0

### 3.3.2 Simulación en el PIMS

Luego de que el modelo de programación lineal fue actualizado, se simularon las condiciones normales de operación de la planta (caso base) y se hicieron los ajustes los ajustes necesarios para que el resultado fuese favorable. Esto se logró modificando la demanda de algunos insumos para cumplir de manera más satisfactoria la producción de gasolinas y por ende generar más ingresos a la corporación. Teniendo el caso base establecido, se procedió a hacer cambios en las condiciones del sistema, estableciendo diferentes restricciones de planta en varios modelos de simulación ("prueba 3", "prueba 4" y "prueba 6") , con el objetivo de obligar al PIMS a generar tres formulaciones distintas para la gasolina de 91 y 95 octanos (identificadas con letras de la A hasta la F) que cumplan muy cercanamente con las especificaciones mínimas requeridas para cada caso.

Por ejemplo, simulando una limitación de reformado y de alquilato foráneo en la gasolina de 91 octanos de 1,7 MBD y 6,1 MBD respectivamente, y de CAO en la gasolina de 95 octanos de 15 MBD, se obtuvo la formulación mostrada en las tablas 3.7 y 3.8. Los resultados de las demás condiciones simuladas se presentan en el capítulo IV, así como las simulaciones realizadas se hallan en el Anexo D.

**Tabla 3.15 Formulación y octanaje predicho para la mezcla "C" de gasolina 91**

Componente	% Volumen	Octanaje RON = 91 IAD = 87,03
Gasolina natural	7,73	
Nafta catalítica foránea	34,35	
Alquilato foráneo	17,46	
Nafta liviana	1,65	
Nafta catalítica propia	22,19	
Reformado	4,87	
Alquilato propio	11,74	

**Tabla 3.16 Formulación y octanaje predicho para la mezcla "F" de gasolina 95**

Componente	Formulación (%v)	Octanaje
CAO	55,66	RON: 97,06
Reformado	44,34	IAD: 91,23

Debido a que los componentes foráneos y los locales poseen las mismas especificaciones de calidad e incluso los mismos coeficientes de interacción, las mezclas fueron preparadas solo con componentes locales y ya que operacionalmente el sistema de mezclado no es tan preciso, los porcentajes volumétricos se ajustaron a números enteros, reproduciendo así la situación real en la planta, quedando de esta forma los resultados mostrados en las tablas 3.17 y 3.18.

**Tabla 3.17 Formulación ajustada de la mezcla "C" de gasolina 91**

Componente	Formulación (%v)
Gasolina natural	8
Nafta catalítica	56
Alquilato	29
Nafta liviana	2
Reformado	5

**Tabla 3.18 Formulación ajustada de la mezcla “F” de gasolina 95**

Componente	Formulación (%v)
CAO	56
Reformado	44

Con las 6 formulaciones calculadas (tres para cada grado de gasolina), se prepararon muestras en el laboratorio identificadas con las letras A, B, C para las de gasolina 91, D, E, F para las de gasolina 95 a las que se le realizaron pruebas de octanaje MON y RON; con dichos valores se obtuvo el índice antidetonante (IAD) de cada una usando la ecuación [2.2], y por último se validaron los índices antidetonantes predichos por el simulador determinando los porcentajes de desviación entre los valores calculados por el simulador y los obtenidos experimentalmente mediante las pruebas de laboratorio, como se indica en la muestra de cálculo.

### **3.4 ESTIMACIÓN DEL BENEFICIO ECONÓMICO PRODUCTO DE LOS CAMBIOS REALIZADOS EN LA BASE DE DATOS DEL PIMS**

Dependiendo de que tan bien se distribuyan los compuestos producidos en la planta, la ganancia de la empresa puede ser mayor o menor; para poder estimar el cambio que genera en la misma los cambios realizados al simulador de procesos, se compararon corridas en el simulador con la base de datos original y actualizado, ambas con condiciones de operación normal, buscando en cada una la solución más

favorable económicamente para la empresa. De esta manera se simuló en el PIMS el caso base para la estrategia operacional del mes febrero de 2011 (modelo "Febrero Defin 2011") con las tablas de datos originales del mismo y se extrajo el valor calculado para la función objetivo que representa el margen de ganancia (\$/día) de la empresa, el cual se comparó posteriormente con el calculado por el simulador ahora con las tablas actualizadas en el PIMS (modelo "prueba 222"). Esta comparación se expresó matemáticamente mediante el cálculo de la diferencia entre ambos valores.

### 3.5 MUESTRA DE CÁLCULO

#### ➤ Cálculo del índice de bloqueo de vapor (IBV)

A partir del porcentaje de evaporado a 158 °F (tabla 3.2) obtenido de la destilación y de la RVP (tabla 3.3) de cada componente se calculó el índice de bloqueo de vapor, mediante la ecuación [2.1].

$$IBV = RVP + 0,13 \times PE_{158}$$

De este modo, para la nafta catalítica con un evaporado de 22,2 %v y una RVP de 6,8 psi, se sustituyeron los valores correspondientes en la ecuación anterior, obteniéndose un resultado igual a:

$$IBV = 6,8 + 0,13 \times 22,2$$

$$IBV = 9,69 \text{ psi}$$

El valor del índice de bloqueo de vapor para cada componente se presenta en la tabla 3.4.

#### ➤ Cálculo del índice antidetonante (IAD)

Conociendo el octanaje MON y RON de los componentes básicos (presentados en la tabla 3.7) y las mezclas binarias (Anexo A), se calculó el índice antidetonante para cada caso utilizando la ecuación [2.2].

$$IAD = \frac{MON + RON}{2}$$

Tomando como ejemplo la nafta catalítica que presenta un octanaje MON igual a 81,3 y un octanaje RON igual a 92,1 se sustituyeron en la ecuación antes mencionada de la siguiente forma:

$$IAD = \frac{81,3 + 92,1}{2}$$

$$IAD = 86,7 \text{ octanos}$$

El índice antidetonante de cada componente puro se presenta en la tabla 3.8 y de las mezclas binarias preparadas en el Anexo B.

#### ➤ **Cálculo de los coeficientes de interacción**

Para este cálculo se dispuso del índice antidetonante calculado tanto para los componentes básicos (Anexo B) como para los componentes puros (tabla 3.8), así como de la ecuación [2.5].

$$Pm = a_i X_i + a_j X_j + b_{ij} X_i X_j$$

Al conocer los parámetros ya mencionados, la única incógnita fue el coeficiente de interacción ( $b_{ij}$ ), por lo que se despejó de la ecuación anterior, quedando de la siguiente forma:

$$b_{ij} = \frac{Pm - a_i X_i - a_j X_j}{X_i X_j}$$

Ejemplificando el caso de la mezcla de nafta catalítica y CAO al 80 y 20 %v respectivamente, se tienen como datos:

$$\text{IAD nafta catalítica} = 86,7$$

$$\text{IAD CAO} = 89,95$$

$$\text{IAD mezcla} = 86,85$$

Sustituyendo éstos en la expresión ya presentada, se obtuvo el siguiente resultado:

$$b_{ij} = \frac{86,85 - (86,7 \times 0,8) - (89,95 \times 0,2)}{(0,8 \times 0,2)}$$

$$b_{ij} = -3,125$$

Los coeficientes calculados para cada mezcla binaria se presentan en el Anexo C.

Una vez que se hallaron los coeficientes para cada par de componentes mezclados a distintas concentraciones, se calculó un promedio aritmético. Siguiendo el mismo ejemplo de la mezcla nafta catalítica y CAO, se extrajeron del anexo C los coeficientes calculados para dicha mezcla.

**Tabla C.15 Coeficientes de interacción de las mezclas nafta catalítica - CAO**

Nafta catalítica (%v)	$b_{ij}$
80	-3,125
60	-2,917
50	-3,3
40	-3,333
20	-4,688

A partir de ellos, se determinó el coeficiente promedio que en este caso fue igual a:

$$b_{ij} = \frac{-3,125 + (-2,917) + (-3,3) + (-3,333) + (-4,688)}{5}$$

$$b_{ij} = -3,473$$

➤ **Cálculo del índice antidetonante como promedio aritmético (lineal en volumen)**

Este cálculo se hizo para conocer el valor del índice antidetonante de la mezcla sin tomar en cuenta el aporte que dan las interacciones moleculares en la misma. Para ello se hizo uso de la ecuación [2.3], las fracciones volumétricas de los componentes que forman parte de mezcla y el índice antidetonante de cada uno.

$$P_m = \sum V_i \times P_i$$

Por ejemplo para la mezcla CAO - alquilato (20 y 80% respectivamente), se calculó el índice antidetonante de la mezcla sustituyendo el IAD del CAO (89,95) y del alquilato (91,9) de la siguiente forma:

$$IAD_m = (0,2 \times 89,95) + (0,8 \times 91,9)$$

$$b_{ij} = \frac{-3,125 + (-2,917) + (-3,3) + (-3,33) + (-4,688)}{5}$$

Los resultados de estos cálculos se presentan en las tablas 4.17 y 4.18.

➤ **Cálculo de desviaciones porcentuales**

Para el cálculo de las desviaciones presentadas por el índice antidetonante predicho respecto al experimental, así como las presentadas por los componentes básicos en sus propiedades y por la función objetivo del modelo de programación lineal actualizado en relación al original, se utilizaron la ecuaciones [3.1] y [3.2].

$$\Delta Var = Var_{ref} - Var_{comp}$$

**Ec. [3.1]**

$$\%Desv = \frac{|\Delta Var|}{Var\ ref} \times 100 \quad \text{Ec. [3.2]}$$

donde:

$\Delta Var$ : diferencia entre las variables

Var ref: variable de referencia

Var comp: variable a comparar

%Desv : porcentaje de desviación

De esta manera, para calcular por ejemplo la desviación entre el IAD calculado por el PIMS y el obtenido mediante análisis de laboratorio para la mezcla C de 91 octanos se dispuso de los siguientes datos:

IAD laboratorio = 87,2

IAD PIMS = 87

Sustituyendo ambos valores en la ecuación [3.1] y su resultado en la ecuación [3.2] se alcanzó el siguiente resultado:

$$\Delta Var = 87,2 - 87$$

$$\Delta Var = 0,2$$

$$\%Desv = \frac{|0,2|}{87,2} \times 100$$

$$\%Desv = 0,2 \%$$

### 3.6 EQUIPOS, MATERIALES, SUSTANCIAS Y HERRAMIENTAS

#### ➤ Equipos

- ✓ Máquinas de detonación, marca Waukesha, modelo Motor y Research
- ✓ Cromatógrafo, marca HP, modelo 6890 series
- ✓ Destilador atmosférico, marca Herzog, modelo: HDA-627

- ✓ Baño térmico para la determinación de RVP, marca Stanhope- Seta, modelo 22210-3T
- ✓ Computador portátil, marca HP

➤ **Materiales**

- ✓ Cilindro graduado de 1000 ml
- ✓ Embudo de vidrio
- ✓ Buretas de 1000 ml
- ✓ Botellas de vidrio de 1 l

➤ **Sustancias**

- ✓ Heptano
- ✓ Iso-octano
- ✓ Nafta liviana
- ✓ Nafta catalítica
- ✓ Gasolina natural
- ✓ Reformado
- ✓ Alquilato
- ✓ CAO

➤ **Herramientas**

- ✓ Simulador PIMS (Process Industry Modeling System), Aspen PIMS 15.0
- ✓ Acrobat Reader 5.0
- ✓ Microsoft Office 1997 (Word, Power Point, Excel)
- ✓ Microsoft Paint 5.1
- ✓ Internet Explorer 6.0

## CAPITULO IV

### ANÁLISIS DE RESULTADOS, CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

#### 4.1 CARACTERIZACIÓN DE LOS COMPONENTES QUE INTERVIENEN EN LA PREPARACIÓN DE LAS GASOLINAS (91 Y 95 OCTANOS)

Mediante diferentes análisis de laboratorio se caracterizaron los componentes de la gasolina (nafta liviana, nafta catalítica, reformado, alquilato, CAO y gasolina natural). El análisis cromatográfico reveló que la composición química de los componentes cambió apreciablemente desde la última actualización realizada (año 2006 - 2007) como puede apreciarse comparando las tablas 4.1 y 4.2.

**Tabla 4.1 Composición química de los componentes de la gasolina en el año  
2006 - 2007**

Componente	%v Parafinas	%v Naftenos	%v Aromáticos	%v Olefinas
Reformado	22,5	0,6	76,8	0,7
Alquilato	99,92	0	0	0
Gasolina natural	68,94	22,68	8,22	0
Nafta liviana	76,31	17,91	5,78	0
Nafta catalítica	22,73	6,68	23,05	38,75
CAO	-	-	21	9

**Tabla 4.2 Composición química de los componentes de la gasolina en el año 2010**

Componente	%v Parafinas	%v Naftenos	%v Aromáticos	%v Olefinas
Reformado	24,14	5,73	68,47	1,4
Alquilato	95,41	0,84	0,073	0,76
Gasolina natural	84,35	12,45	3,2	0
Nafta liviana	72,83	20,35	6,82	0
Nafta catalítica	30,11	9,76	35,94	22,62
CAO	-	-	13,38	16,25

Esto es debido a que desde entonces se han realizado modificaciones a los procesos de planta, incluyendo cambios en la carga a las unidades de proceso y en las condiciones de operación; a excepción de la gasolina natural y el CAO que son productos foráneos cuya composición ha variado por razones ajenas a la corporación.

Dichos cambios en la proporción de hidrocarburos de los componentes originaron a su vez variaciones en las propiedades físicas de los mismos, muchas de las cuales son tomadas en cuenta para la formulación de las gasolinas según las especificaciones de calidad. Las características determinadas durante la realización de este trabajo mediante análisis de laboratorio (gravedad °API, curva de destilación, porcentaje de evaporado, RVP, IBV, octanaje y porcentaje de aromáticos y olefinas) se compararon con las que tenía el simulador en su base de datos original (año 2007) en las tablas desde la 4.3 a 4.10.

**Tabla 4.3 Comparación de la gravedad °API de los componentes de la gasolina**

Componente	Gravedad °API		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	39,7	40,3	1,5
Alquilato	72,3	71,5	1,1
Gasolina natural	83,4	79,5	4,7

**Tabla 4.3 Comparación de la gravedad °API de los componentes de la gasolina  
(Continuación)**

Componente	Gravedad °API		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Nafta liviana	74	71,3	3,6
Nafta catalítica	56	54,7	2,3
CAO	57,5	64,3	11,8

Para el caso de la gravedad °API, se observa que no hubo mucha variación en la mayoría de los compuestos a excepción del CAO que presentó un aumento del 11,8 %. Un incremento en la gravedad API, indica una disminución de la gravedad específica (al ser inversamente proporcionales) que en la mayoría de los casos se refleja en un incremento de la cantidad de compuestos parafínicos presentes.

**Tabla 4.4 Comparación del rango de destilación de los componentes de la gasolina**

Componente	Año 2007		Año 2010		% Desv	
	PIE (°F)	PFE (°F)	PIE (°F)	PFE (°F)	PIE	PFE
Reformado	118,22	405,14	120,9	419,7	2,3	3,6
Alquilato	88,9	385,1	91,8	400,3	3,3	3,9
Gasolina natural	91,4	258,2	95,32	224,96	4,3	12,87
Nafta liviana	98,6	221,36	98,4	263,8	0,2	19,17
Nafta catalítica	99,68	422,96	93,9	448,7	5,8	6,1
CAO	89,6	420,3	88,34	412,34	1,4	1,9

PIE: punto inicial de ebullición

PFE: punto final de ebullición

En la tabla 4.4, se observa que las curvas de destilación de los compuestos presentan algunas diferencias notables; en la nafta catalítica y la nafta liviana se tiene un rango más amplio que antes, es decir incluyen en su composición

compuestos de punto de ebullición más variados; la gasolina natural por el contrario, disminuye el rango de la curva de destilación lo que indica una menor diversidad de compuestos en cuanto a volatilidad se refiere.

**Tabla 4.5 Comparación del porcentaje de volumen evaporado a 158°F de los componentes de la gasolina**

Componente	Evaporado (%v)		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	1,7	2,8	6,47
Alquilato	11,4	11,6	1,75
Gasolina natural	83,6	88	5
Nafta liviana	60	44,8	25,33
Nafta catalítica	24,9	22,2	10,84
CAO	28,5	39,5	38,6

El porcentaje de evaporado está determinado según en el rango de ebullición del compuesto y por ende está al igual que este, estrechamente relacionado con la composición química del mismo. Casi todos los componentes sufrieron variaciones significativas en esta propiedad, comenzando con el CAO, que tuvo un aumento considerable en la cantidad de compuestos con puntos de ebullición alrededor de los 158 °F, lo que corresponde con lo mostrado en la tabla 4.5 donde se evidenció el aumento de productos de menor punto de ebullición. Seguidamente la nafta liviana también presentó un decremento significativo en la cantidad de evaporado, lo que junto a lo mostrado en la tabla 4.2 indica que el DPN a diferencia de antes no está conformado en su mayor parte por compuestos con puntos de ebullición bajos. De la misma manera la nafta catalítica, también presentó una alta disminución en la cantidad de evaporado, lo que indica que contiene ahora mayor cantidad de productos con alto punto de ebullición.

**Tabla 4.6 Comparación de la presión de vapor Reid de los componentes de la gasolina**

Componente	RVP (psi)		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	3,1	3,5	12,9
Alquilato	8,3	7,8	6,02
Gasolina natural	14	11,6	17,14
Nafta liviana	9,9	9,6	3,03
Nafta catalítica	8,2	6,8	17,07
CAO	10,8	9,5	12,04

La presión de vapor Reid es una especificaciones de calidad muy importante de la gasolina ya que brinda un indicio de la capacidad de la gasolina para vaporizar dentro del motor a temperatura ambiente. Según lo observado en la Tabla 4.4, la RVP varió de una caracterización a otra en cantidades más o menos importantes; mientras que el reformado aumentó su RVP indicando un aumento en la cantidad de compuestos de bajo punto de ebullición presentes en su composición, el resto de los componentes presenta una disminución de la presión de vapor, lo que indica precisamente lo contrario, es decir una disminución en la cantidad de compuestos volátiles en su composición, de todos los compuestos básicos analizados la nafta catalítica y la gasolina natural, presentaron las variaciones más significativas.

**Tabla 4.7 Comparación del índice de bloqueo de vapor de los componentes de la gasolina**

Componentes	IBV		% Desv.
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	3,3	3,86	16,9
Alquilato	9,8	9,30	5,1
Gasolina natural	24,9	23,04	7,47

**Tabla 4.7 Comparación del índice de bloqueo de vapor de los componentes de la gasolina (Continuación)**

Componentes	IBV		% Desv.
	Año 2007	Año 2010	
Nafta liviana	17,7	15,42	12.88
Nafta catalítica	11,4	9,69	15
CAO	14,5	14,6	0,68

El índice de bloqueo de vapor es una propiedad que depende, tanto de la RVP del compuesto como de la cantidad de evaporado a 158 °F, sin embargo de esta última en menor grado pues su aporte está limitado a un 13% de su valor. Es por ello que en la Tabla 4.5 se observa que el alquilato, la gasolina natural y las naftas (liviana y catalítica) tuvieron una disminución en su IBV correspondiente con la disminución de su RVP, por el contrario el reformado aumento el valor correspondiente a su índice de bloqueo de vapor tal como lo hizo su presión de vapor, mientras que el CAO mantuvo su IBV más o menos constante debido a que la pequeña disminución de su RVP se vio compensada con el elevado aumento en su cantidad de evaporado a 158 °F.

**Tabla 4.8 Comparación del octanaje MON y RON de los componentes de la gasolina**

Componente	MON		RON		% Desviación	
	Año 2007	Año 2010	Año 2007	Año 2010	MON	RON
Reformado	89,2	90,6	100,2	100	1,6	0,2
Alquilato	89,8	90,5	91,9	93,3	0,77	1,5
Gasolina natural	73,2	70,7	74,8	73,5	3,53	1,73
Nafta liviana	68,4	70	69,5	70	2,33	0,71
Nafta catalítica	80,8	81,3	92,5	92,1	0,61	0,43
CAO	86	85,8	96,9	94,1	0,23	2,89

El octanaje es sin duda la propiedad más importante que debe cuidarse y controlarse en los componentes básicos, pues de todas las propiedades en función a las que se determina la formulación de las gasolinas es la más crítica. Ambos octanajes (MON y RON) dependen directamente de la composición química, pues hay ciertos tipos de hidrocarburos como los aromáticos y las isoparafinas como mayor capacidad antidetonante y por ende mayor número de octanos. En la tabla 4.6 se observa que no hubo cambios de gran magnitud de los componentes, sin embargo, estas pequeñas diferencias entre el octanaje real y el cargado en la base de datos del simulador ocasionan complicaciones en la preparación de gasolinas, pues el PIMS a partir de ellas el PIMS calcula formulaciones de gasolinas con un octanaje real diferente al estimado.

**Tabla 4.9 Comparación del porcentaje de aromáticos en los componentes de la gasolina**

Componente	Aromáticos (%v)		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	76,80	68,47	10,8
Alquilato	0	0,07	-
Gasolina natural	8,22	3,2	61,07
Nafta liviana	5,78	6,82	17,99
Nafta catalítica	23,05	35,94	55,92
CAO	21	13,38	36,29

Las desviaciones presentadas en la tabla 4.9, reflejan que hubo grandes cambios en la composición para casi todos los componentes. El contenido de aromáticos es junto con otras una de las propiedades más importantes de la gasolina, pues aunque los aromáticos tienen un octanaje muy alto su concentración está limitada por regulaciones ambientales y por lo tanto debe controlarse. En la comparación realizada se observó que para la nafta liviana y catalítica, se tenían en consideración valores de aromáticos menores a los reales, situación que pudiera

ocasionar que el simulador proporcione mezclas con niveles de aromáticos por encima de los permitidos, mientras que con la gasolina natural, el CAO y la nafta catalítica que tenían establecidos mayores contenidos de aromáticos que el real se pudieran generar problemas, al limitar la cantidad de estos productos en la gasolina innecesariamente.

**Tabla 4.10 Comparación del porcentaje de olefinas en los componentes de la gasolina**

Componentes	Olefinas (%v)		% Desv
	Año 2007	Año 2010	
Reformado	0,7	1,4	1
Alquilato	0	0,76	-
Gasolina natural	0	0	-
Nafta liviana	0	0	-
Nafta catalítica	38,75	22,62	41,63
CAO	9	16,25	80,56

En la tabla anterior se observa que la concentración de olefinas que también es estrictamente controlada para prevenir la formación de depósitos sólidos tanto en los tanques de almacenamiento de gasolina como en los motores de combustión varió considerablemente para la nafta catalítica y el CAO. Lo que al igual que con el contenido de aromáticos induce a que el PIMS recomiende fórmulas de gasolinas cuyas calidades reales no sean similares a las calculadas por el simulador.

#### **4.2 CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE INTERACCIÓN BINARIA DE LOS COMPONENTES DE LAS GASOLINAS**

Midiendo el IAD de las mezclas a partir de pruebas de octanaje y utilizando la correlación Du Pont se pudieron hallar coeficientes de interacción que permitieron

corregir la no linealidad de dicha propiedad. En las tablas desde la 4.11 a la 4.16, se muestran los coeficientes estimados para cada combinación binaria de los componentes

**Tabla 4.11 Coeficientes de interacción del reformado**

Componente	$b_{ij}$
Alquilato	-5,59
Gasolina natural	-0,06
Nafta liviana	3,87
Nafta catalítica	-2,62
CAO	-5,22

**Tabla 4.12 Coeficientes de interacción del alquilato**

Componente	$b_{ij}$
Reformado	-5,59
Gasolina natural	-1,68
Nafta liviana	-0,99
Nafta catalítica	-1,12
CAO	-3,28

**Tabla 4.13 Coeficientes de interacción de la gasolina natural**

Componente	$b_{ij}$
Alquilato	-1,68
Reformado	-0,06
Nafta liviana	0,33
Nafta catalítica	4
CAO	1,12

**Tabla 4.14 Coeficientes de interacción de la nafta liviana**

Componente	$b_{ij}$
Alquilato	-0,99
Gasolina natural	0,33
Reformado	3,87
Nafta catalítica	6,38
CAO	6,96

**Tabla 4.15 Coeficientes de interacción de la nafta catalítica**

Componente	$b_{ij}$
Alquilato	-1,12
Gasolina natural	4
Nafta liviana	6,38
Reformado	-2,62
CAO	-3,47

**Tabla 4.16 Coeficientes de interacción del CAO**

Componente	$b_{ij}$
Alquilato	-3,28
Gasolina natural	1,12
Nafta liviana	6,96
Nafta Catalítica	-3,47
Reformado	-5,22

En las tablas anteriores se observa que la mezcla de un componente con cualquiera de los otros puede tener una interacción positiva o negativa sin algún patrón en especial que indique alguna relación entre los valores y el índice antidetonante de los componentes puros. Ahora bien, considerando que los coeficientes de interacción son valores que corrigen una propiedad haciéndola lineal un coeficiente de interacción positivo indica que el efecto del mezclado y por ende las

interacciones entre los dos compuestos generan un índice antidetonante por encima del obtenido mediante el promedio aritmético del IAD de los componentes (como si fuese una propiedad lineal en volumen); y por el contrario, un coeficiente de interacción negativo es indicativo de que la interacción entre ambos componentes genera un menor índice antidetonante, en comparación con el que se puede obtener del promedio aritmético del IAD de cada uno de los componentes.

Por ejemplo, sabiendo que el coeficiente de interacción de la mezcla CAO - alquilato es igual a  $-3,28$  cabe esperar que el índice antidetonante de una mezcla formada con estos componentes sea menor al promedio aritmético calculado a partir del IAD del alquilato (91,9) y del CAO (89,95) con la ecuación [2.3], tal como se observa en la tabla 4.17.

**Tabla 4.17 IAD calculado como propiedad lineal y con los coeficientes de interacción para la mezcla CAO - alquilato**

Fracción CAO	Fracción alquilato	IAD lineal	IAD corregido
0,2	0,8	91,51	90,55
0,4	0,6	91,12	90,2
0,5	0,5	90,93	90,05
0,6	0,4	90,73	90,2
0,8	0,2	90,34	90,2

De igual forma, sabiendo que el coeficiente de interacción de la mezcla nafta catalítica - gasolina natural es igual a 4, se espera que el índice antidetonante de una mezcla formada con estos componentes sea mayor al promedio aritmético calculado a partir de la ecuación [2.3] con del IAD de la gasolina natural (72,1), tal como se observa en la tabla 4.18.

**Tabla 4.18 IAD calculado como propiedad lineal y con los coeficientes de interacción para la mezcla nafta catalítica - gasolina natural**

Fracción nafta catalítica	Fracción gasolina natural	IAD lineal	IAD corregido
0,2	0,8	75,02	75,5
0,4	0,6	77,94	78,95
0,5	0,5	79,4	80,8
0,6	0,4	80,86	82,1
0,8	0,2	83,78	84,1

Es necesario destacar que debido a que los coeficientes estimados son valores promedios, no siempre va a cumplir con las mezclas en todo el rango de composiciones, pero se garantiza que tiene validez en un rango bastante amplio y aplicable a las mezclas preparadas en la industria. Y aunque la diferencia entre el IAD lineal y el corregido no sea en la mayoría de los casos muy significativa, puede marcar la diferencia en el cumplimiento o no de las especificaciones mínimas de calidad de las gasolinas, debido a que ésta es la propiedad más crítica de todas las que se toman en cuenta para la preparación de las mezclas.

#### **4.3 VERIFICACIÓN MEDIANTE ANÁLISIS DE LABORATORIO DE LA VALIDEZ DEL ÍNDICE ANTIDETONANTE PREDICHO**

Con el PIMS actualizado se realizó una simulación base con las condiciones normales de operación, bajo las cuales el modelador de procesos proporcionó una formulación que sería la más adecuada a utilizar durante el funcionamiento normal de la planta. Dicha formulación se presenta en las tablas 4.19 y 4.20 así como la simulación realizada en el Anexo D.

**Tabla 4.19 Formulación de gasolina 91 en condiciones de operación normal**

Componente	% Volumen
Gasolina natural	7,73
Nafta catalítica foráneo	34,35
Alquilato foráneo	21,59
Nafta liviana	2,56
Nafta catalítica propia	17,81
Reformado	6,13
Alquilato propio	9,82

**Tabla 4.20 Formulación de gasolina 95 en condiciones de operación normal**

Componente	% Volumen
CAO	70,8
Reformado	29,2

Para la validación se simularon condiciones basadas en limitaciones de almacenamiento, producción y/o compra de algunos componentes que suelen presentarse, con el objetivo de que el simulador recomendara una distribución distinta de los componentes en las mezclas de gasolina a la presentada anteriormente.

La primera simulación (modelo "prueba 3") estableció una cantidad máxima de CAO y alquilato foráneo disponible de 17,8 MBD y 6,1 MBD respectivamente y además una restricción total de gasolina natural, con lo cual se obtuvieron las formulaciones mostradas en las tablas 4.21 y 4.22 para las gasolinas de 91 y 95 octanos.

**Tabla 4.21 Formulación de gasolina 91 con limitación de alquilato importado y gasolina natural (mezcla A)**

Componente	% Volumen	Octanaje RON = 93,67 IAD = 88,76
Gasolina natural	0	
Nafta catalítica foráneo	34,35	
Alquilato foráneo	17,46	
Nafta liviana	0,41	
Nafta catalítica propia	20,94	
Reformado	15,08	
Alquilato propio	11,74	

**Tabla 4.22 Formulación de gasolina 95 con limitación de CAO (mezcla D)**

Componente	% Volumen	Octanaje
CAO	68,89	RON = 96,18
Reformado	31,11	IAD = 90,63

En las tablas anteriores se observa que al estar limitada cantidad de gasolina natural y alquilato foráneo el PIMS aumenta la cantidad requerida de reformado y nafta catalítica propia en la gasolina de 91 octanos, mientras que al restringir la cantidad de CAO aumenta también la cantidad de reformado en la gasolina de 95 octanos para mantener la producción de gasolinas en el volumen requerido por el mercado local.

En la segunda corrida (modelo "prueba 4") se estableció la inclusión de al menos 2 MBD de nafta liviana, se redujo la cantidad máxima de reformado en la gasolina de 95 octanos a 7 MBD y se mantuvo la cantidad de alquilato foráneo en 6,1 MBD, lo cual proporcionó las formulaciones presentadas en las tablas 4.23 y 4.24.

**Tabla 4.23 Formulación de gasolina 91 con restricción de nafta liviana y alquilato importado (mezcla B)**

Componente	% Volumen	Octanaje RON = 91 IAD = 87,03
Gasolina natural	3,55	
Nafta catalítica foráneo	34,35	
Alquilato foráneo	17,46	
Nafta liviana	5,73	
Nafta catalítica propia	21,72	
Reformado	5,44	
Alquilato propio	11,74	

**Tabla 4.24 Formulación de gasolina 95 con limitación de reformado (mezcla E)**

Componente	% Volumen	Octanaje
CAO	74,3	RON = 95,82
Reformado	25,7	IAD = 90,44

En este caso al incluir mayor cantidad de nafta liviana en la mezcla de gasolina 91 y disminuir el alquilato importado, se hace necesario tanto el aumento de algún compuesto de octanaje más elevado como lo es la nafta catalítica propia y el alquilato propio como la disminución de gasolina natural (compuesto de bajo octanaje). En cambio para la gasolina 95, al limitar ligeramente la cantidad de reformado disponible debe incluirse una mayor cantidad de CAO en la preparación de la mezcla a fin de cumplir las especificaciones de octanaje y la demanda del mercado.

Por último en la tercera corrida (modelo "prueba 6") se estableció una cantidad limitada de alquilato foráneo y de reformado en la gasolina de 91 octanos a 6,1 y 1,7 MBD respectivamente, mientras que en la gasolina de 95 octanos se disminuyó la cantidad de CAO a un valor menor que en la primera corrida (15 MBD). Las formulaciones resultantes se mostraron en las tablas 3.17 y 3.18.

En esta oportunidad al limitar la cantidad de reformado y el alquilato foráneo en la gasolina de 91 octanos el modelador recomienda incluir en la mezcla mayor cantidad de alquilato y nafta catalítica propios (compuestos de alto octanaje) y disminuir en cierta medida la cantidad de nafta liviana al ser este un compuesto de muy bajo octanaje; de forma similar, al disponer de una apreciablemente menor cantidad de CAO para la gasolina 95 el PIMS recomienda elevar la cantidad de reformado que formará parte de la mezcla.

Con las 3 simulaciones realizadas se pudo observar que este trabaja variando las formulaciones recomendadas en función de las exigencias y limitaciones que se le impongan, buscando siempre la mejor distribución posible de los componentes. Si bien el esquema de funcionamiento del modelador queda comprobado con las simulaciones ya mencionadas aun no es posible determinar si los cálculos realizados por el simulador son correctos y por tanto, se realizaron pruebas de octanaje a mezclas de gasolinas de 91 y 95 octanos preparadas según las formulaciones proporcionadas por el PIMS para cada caso. El resultado de las pruebas de octanaje para cada muestra se presenta en la tabla 4.22.

**Tabla 4.25 Octanaje MON y RON de las mezclas de gasolina de 91 y 95 octanos**

Grado	Mezcla	MON	RON
91 octanos	A	83,7	93,3
	B	82,1	91,8
	C	82,4	92
95 octanos	D	86	95,8
	E	85,9	95,9
	F	86	96,1

Con los valores de la tabla anterior y aplicando el mismo procedimiento descrito en la muestra de cálculo, se obtuvo el índice antidetonante de cada mezcla (experimental, los cuales se muestran en la tabla 4.26 junto con los índices estimados por el simulador y la desviación entre ellos.

**Tabla 4.26 Índice antidetonante calculado y experimental de las mezclas de gasolina 91 y 95 octanos**

Grado	Mezcla	Índice antidetonante		%Desv
		Calculado	Experimental	
91 octanos	A	88,76	88,5	0,3
	B	87,05	86,95	0,1
	C	87	87,2	0,2
95 octanos	D	90,63	90,9	0,3
	E	90,44	90,9	0,5
	F	91,23	91,05	0,2

Con los valores experimentales y con el procedimiento indicado en la muestra de cálculo, se calcularon las desviaciones promedios presentadas por ambas gasolinas, obteniéndose los resultados presentados en la tabla 4.27.

**Tabla 4.27 Desviaciones promedio entre el índice antidetonante predicho y el experimental para las gasolinas 91 y 95 octanos**

Grados	% Desv
91 octanos	0,2
95 octanos	0,3

Las desviaciones obtenidas fueron menores al 1% y por lo tanto indican que el IAD estimado por el modelador PIMS se acerca mucho al valor real obtenido en el laboratorio con el mezclado de los componentes, de modo que se puede confirmar la validez del índice antidetonante predicho por el PIMS y en consecuencia también el correcto cálculo de los coeficientes de interacción binaria estimados en el presente trabajo.

#### **4.4 ESTIMACIÓN DEL BENEFICIO ECONÓMICO DE LA EMPRESA, PRODUCTO DE LOS CAMBIOS REALIZADOS EN LA BASE DE DATOS DEL PIMS**

Todo cambio realizado en el funcionamiento de una corporación genera un impacto económico que puede ser negativo o positivo, sin embargo los cambios realizados durante la ejecución de este trabajo solo pueden aportar beneficios debido a que con ellos se está actualizando la base de datos de simulador PIMS empleado para la formulación de las gasolinas, lo cual representa únicamente una mejora para la empresa. Aún así, el beneficio generado debe comprobarse en virtud de conocer la magnitud del mismo y para ello se simularon en el PIMS modelos con condiciones de operación normal de la planta utilizando la base de datos original y la actualizada, ambos con las mismas premisas (precios pronósticos, capacidades de plantas, demandas de mercado local, etc.). Dichas corridas (mostradas en el Anexo F) proporcionaron como parte de sus resultados no solo la formulación más adecuada de las gasolinas sino el balance económico de la empresa con el margen de ganancia bruta de la misma, que es de hecho la función objetivo del simulador como sistema de programación lineal.

Para el caso base ejecutado con el PIMS en su estado original se utilizó la simulación empleada por la refinería para establecer la estrategia operacional del mes de febrero en 2011 (modelo "Febrero Defín 2011"), la cual estimó una función objetivo igual a 43,13 Bs/día (10,96 \$/día). Mientras que para el caso base ejecutado con el simulador actualizado (modelo "prueba 222") se utilizó la misma simulación del mes de febrero de 2011 modificando ligeramente la capacidad de compra del alquilato importado de 5 MBD a 7,6 MBD obteniéndose una función objetivo igual a 315,53 Bs/día (73, 38 \$/día). Conociendo la ganancia de la empresa en ambos casos se calculó la diferencia entre ellos, hallándose que la variación es de 272,4 Bs/día (62,42 \$/día), lo que indica que la acertada predicción del índice antidetonante y la actualización del modelador de procesos PIMS, generó un beneficio económico del orden de más de 5 veces su valor original. Para entender la razón de esto, se muestran las tablas 4.28 y 4.29 donde se indican las formulaciones sugeridas por el simulador en ambos casos:

**Tabla 4.28 Formulación de gasolina de 91 octanos recomendada por el PIMS**

Componente	Formulación PIMS original (%v)	Formulación PIMS actualizado (%v)
Gasolina natural	7,73	7,73
Nafta catalítica foráneo	34,35	34,35
Alquilato foráneo	14,31	21,59
Nafta liviana	0	2,56
Nafta catalítica propia	21,79	17,81
Reformado	10,05	6,13
Alquilato propio	11,74	9,82

**Tabla 4.29 Formulación de gasolina de 95 octanos recomendada por el PIMS**

Componente	Formulación PIMS original (%v)	Formulación PIMS actualizado (%v)
CAO	68	70,8
Reformado	32	29,2

En estas tablas se observa que los cambios realizados en la base de datos del simulador le permiten a éste distribuir adecuadamente los componentes a mas bajo costo. En el caso de la gasolina 91, se muestra que al aumentar la cantidad de alquilato foráneo a disposición, se puede disminuir la cantidad de reformado en la mezcla, cuya venta al mercado exterior genera más ingresos que los costos por la compra del insumo foráneo. Por otro lado, la formulación de la gasolina de 95 octanos también varía a causa de que en esta oportunidad se permite que sea el simulador quien distribuya los componentes de la mejor manera para que cumpla con las especificaciones mínimas en lugar de introducirla como una restricción del sistema; siendo así, el modelador disminuye la cantidad de reformado utilizada al mínimo necesario, aumentando por ende la cantidad de CAO que es un compuesto con menor valor comercial que el reformado, lo que al igual que en la gasolina de 91

octanos, se traduce en un aumento en la cantidad de reformado que se vende al mercado exterior.

Cabe destacar que los compuestos foráneos (alquilato y CAO) tienen un menor costo que el reformado debido a que aunque son traídos de otras refinerías estas pertenecen a la misma red de PDVSA donde hay acuerdos e intercambios que minimizan los costos de compra, a diferencia del reformado que se vende al mercado exterior a un alto valor comercial.

En general, los cambios en la formulación de ambas mezclas indican que el beneficio económico generado (272,4 Bsf/día) es producto de la inclusión de productos de menor valor en las mezclas y la disminución de productos de alto octanaje cuya venta al mercado exterior genera mayores ingresos económicos que su inclusión en las mezclas de gasolinas.

#### 4.5 CONCLUSIONES

✓ Los valores de las propiedades físicas (gravedad API, curva de destilación, RVP, IBV, porcentaje de evaporado a 158 °F) de los componentes básicos de las gasolinas contenidos en la base de datos original del simulador, distan considerablemente de los valores reales obtenidos mediante las pruebas de laboratorio.

✓ Los coeficientes de interacción binaria del reformado con los demás componentes (alquilato, gasolina natural, nafta liviana, nafta catalítica y CAO) son –5,59; -0,06; 3,87; -2,62 y –5,22 respectivamente.

✓ Los coeficientes de interacción binaria del alquilato con los demás componentes (gasolina natural, nafta liviana, nafta catalítica y CAO) son –1,68; -0,99; -1,12 y -3,28 respectivamente.

✓ Los coeficientes de interacción binaria de la gasolina natural con los demás componentes (nafta liviana, nafta catalítica y CAO) son 0,33; 4 y 1,12 respectivamente.

✓ Los coeficientes de interacción binaria de la nafta liviana con nafta catalítica y CAO son 6,38 y 6,96 respectivamente

- ✓ El coeficiente de interacción binaria de la nafta catalítica con el CAO es igual a – 3,47.
- ✓ Mediante pruebas de octanaje en el laboratorio se logro verificar la validez del índice antidetonante predicho por el modelador de procesos PIMS, que proporcionó resultados con una desviación promedio de 0,2% para la gasolina de 91 octanos y 0,3% para la gasolina de 95 octanos con respecto a los valores experimentales.
- ✓ El incremento de la cantidad de alquilato importado en la gasolina de 91 octanos, permite disminuir la cantidad de reformado necesario y aumenta los beneficios económicos obtenidos por la venta de este producto al mercado extranjero.
- ✓ La actualización de la base de datos del simulador y en consecuencia la correcta predicción del índice antidetonante, permiten la mejor distribución de los componentes de la gasolina en las mezclas, lo que le genera a la corporación un aumento de 272,4 Bs/día, en el margen de ganancia neta de la misma.

#### **4.6 RECOMENDACIONES**

1. Actualizar continuamente las calidades de los componentes básicos en la base de datos del simulador, con el objetivo de disponer de los datos reales y obtener así resultados confiables del modelador de procesos
2. Recalcular los coeficientes de interacción, cada vez que se incluyan nuevos componentes en las mezclas de gasolinas, para estimar tempranamente el valor de las nuevas interacciones y así contar con predicciones acertadas de octanaje para la preparación de las gasolinas.

## BIBLIOGRAFÍA

- American Society for Testing and Materials. (1998). *Manual for Rating Motor, Diesel and aviation fuel.*
- American Society for Testing and Materials. (1989). *Manual on Significance of Test for Petroleum products.* (5<sup>ta</sup> Ed.)
- American Society for Testing and Materials. (1998). *ASTM D5134 Standard Test Method for Detailed Analysis of Petroleum Naphthas through n-Nonane by Capillary Gas Chromatography.*
- American Society for Testing and Materials. (2010). *ASTM D2700 Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel.*
- American Society for Testing and Materials. (2008). *ASTM D323 Standard Test Method for Pressure of Petroleum Products (Reid Method).*
- American Society for Testing and Materials. (2010). *ASTM D2699 Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel.*
- Bolívar, M. (2000). *Actualización del procedimiento de predicción de octanaje de gasolinas comerciales a partir de correlaciones generalizadas para el modelo de programación lineal (PIMS).* Trabajo de Grado, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Oriente, Núcleo Anzoátegui, Puerto La Cruz, Venezuela.
- CEPET. (1992). *Procesos de refinación.* Caracas, Venezuela.
- Corpoven S.A. (1987). *Economía de Refinación.* Tomo I, Refinería Puerto La Cruz.
- Corpoven S.A. (1998). *Economía de Refinación.* Tomo I, Refinería Puerto La Cruz.

- Corpoven S.A. (1998). *Economía de Refinación*. Tomo II, Refinería Puerto La Cruz.
- Corpoven S.A. (1993). *PIMS, Manual del Usuario*. Refinería El Palito.
- Comisión Venezolana de Normas Industriales. (1988). *COVENIN 1143 Crudo y sus derivados. Determinación de la densidad, densidad relativa (peso específico) y la gravedad API. Método del hidrómetro*.
- Comisión Venezolana de Normas Industriales. (1995). *COVENIN 850 Productos derivados del petróleo. Destilación*.
- Comisión Venezolana de Normas Industriales. (2007). *COVENIN 764 Productos derivados del petróleo. Gasolinas para motores de combustión interna*.
- Gary, J. y Handwerk, G. (2001). *Petroleum Refining. Technology and Economics* (4<sup>ta</sup> Ed.) New York: Marcel Dekker, Inc.
- Healy, W.C., Maassen C.W. y Peterson R.T. (1959). *A new approach to blending octanes*. Presentado en el 24<sup>to</sup> Encuentro Anual de la división de refinación API, New York.
- Meyers, R. (2004). *Handbook of Petroleum Refining Process* (3<sup>era</sup> Ed.) Mexico: McGraw-Hill.
- Morris, W. (1975). *The interaction approach to gasoline blending*. Publicación AM-75-30, presentado en NPRA 73<sup>ero</sup> Encuentro Anual. San Antonio, Texas.
- Nieto, C. (1996). *Manual para el cálculo de bonos de mezcla de propiedades*. Refinería Puerto La Cruz.
- PDVSA. (2007). *Diagrama de preparación de gasolinas en RPLC*. Gerencia de Movimiento de Crudos y Productos. Refinería Puerto La Cruz.
- PDVSA. (2006). *Filosofía de operación del mezclador de gasolina*. Gerencia de Movimiento de Crudos y Productos. Refinería Puerto La Cruz.
- PDVSA. (2003). *Introducción a los procesos de refinación*. Refinería El Palito
- PDVSA. (2006). *Libro de Refinería Puerto La Cruz*. Gerencia Técnica de Programación y Economía (2006).

Reyes, D. (2007). *Evaluación del comportamiento de mezclas de gasolina sin plomo con etanol utilizando un modelo de programación lineal*. Trabajo de Grado, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Oriente, Núcleo Anzoátegui, Puerto La Cruz, Venezuela.

Tortolero, M. (1997). *Bonos de mezcla para octanos en gasolinas y bonos para temperaturas de destilación en combustibles diesel empleados en el PIMS refinería Puerto La Cruz*. Trabajo de Grado, Coordinación de Ingeniería Química, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela.

## **METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO**

<b>TÍTULO</b>	Predicción del índice antidetonante para la formulación de gasolinas de 91 y 95 octanos en refinería Puerto La Cruz
<b>SUBTÍTULO</b>	

### **AUTOR (ES):**

<b>APELLIDOS Y NOMBRES</b>	<b>CÓDIGO CVLAC / E MAIL</b>
Noriega Rodríguez, Maryanna del Valle	CVLAC: 18.848.527 E MAIL: mava.vnr@gmail.com

### **PALABRAS O FRASES CLAVES:**

Predicción

Índice antidetonante

Gasolinas

Octanaje

Refinería Puerto La Cruz

Coefficientes de interacción

Du Pont

PIMS

## METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO

ÁREA	SUB ÁREA
Ingeniería y Ciencias Aplicadas	Ingeniería Química

### RESUMEN (ABSTRACT):

Este trabajo consistió en la predicción del índice antidetonante, propiedad crítica para la formulación de las gasolinas de 91 y 95 en la refinería Puerto La Cruz. Con este fin se realizó en primer lugar la caracterización (gravedad API, destilación, RVP, octanaje y cromatografía) de los componentes básicos de las mezclas de gasolinas (reformado, alquilato, nafta liviana, nafta catalítica, CAO y gasolina natural) mediante distintos análisis de laboratorio, valores que fueron necesarios para la actualización de la base de datos del modelador de procesos empleado (PIMS). En segundo lugar, se prepararon muestras mezclando los componentes básicos por pares y se les hicieron pruebas de octanaje MON y RON para calcular los coeficientes de interacción entre cada uno de los componentes, imprescindibles para la predicción acertada del índice antidetonante como propiedad no lineal. Luego se validó el índice antidetonante predicho realizando simulaciones en el PIMS a distintas condiciones para obtener varias formulaciones de gasolinas que fueron reproducidas y analizadas en el laboratorio para conocer el octanaje real de cada una de ellas, el cual se comparó con el predicho por el simulador presentando desviaciones de 0,2% y 0,3% para las gasolinas de 91 y 95 octanos respectivamente. Por último, se estimó el beneficio económico de la empresa producto de todos los cambios realizados, para lo cual se ejecutaron dos corridas, una con la base de datos original y otra con la actualizada, y posteriormente se compararon los valores correspondientes

a la función objetivo del simulador (que representa el margen de ganancia bruta de la misma) dando un aumento de 272,4 Bs/día, producto de la disminución en el volumen de productos de alto valor comercial (reformado) mezclado en las gasolinas que se venden al mercado local y en consecuencia el aumento del volumen del mismo que va a ventas en el mercado extranjero a un precio muy superior.

### **METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO**

#### **CONTRIBUIDORES:**

<b>APELLIDOS Y NOMBRES</b>	<b>ROL / CÓDIGO CVLAC / E MAIL</b>				
<b>Moreno, Luis</b>	<b>ROL</b>	<b>CA</b>	<b>AS X</b>	<b>TU</b>	<b>JU</b>
	<b>CVLAC</b>				
	<b>E MAIL</b>	<b>luismorenog@cantv.net</b>			
	<b>E MAIL</b>				
<b>Reyes, Daniel</b>	<b>ROL</b>	<b>CA</b>	<b>AS X</b>	<b>TU</b>	<b>JU</b>
	<b>CVLAC</b>				
	<b>E MAIL</b>	<b>reyesdjx@pdvsa.com</b>			
	<b>E MAIL</b>				
<b>Marfisi, Shirley</b>	<b>ROL</b>	<b>CA</b>	<b>AS</b>	<b>TU</b>	<b>JU X</b>
	<b>CVLAC</b>				
	<b>E MAIL</b>	<b>shirleymarfisi@gamil.com</b>			
	<b>E MAIL</b>				
<b>Obando, Yaneis</b>	<b>ROL</b>	<b>CA</b>	<b>AS</b>	<b>TU</b>	<b>JU X</b>
	<b>CVLAC</b>				
	<b>E MAIL</b>	<b>yaneis.obando@yahoo.com</b>			
	<b>E MAIL</b>				

**FECHA DE DISCUSIÓN Y APROBRACIÓN**

<b>2011</b>	<b>04</b>	<b>08</b>
<b>AÑO</b>	<b>MES</b>	<b>DÍA</b>

**LENGUAJE: SPA**

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

**ARCHIVO (S):**

<b>NOMBRE DE ARCHIVO</b>	<b>TIPO MIME</b>
Predicción del índice antidetonante	Application /msword

**CARACTERES EN LOS NOMBRES DE LOS ARCHIVOS:**

ABCDEFGHIJKLMNÑOPQRSTUVWXYZ. abcdefghijkl  
mnñopqrstvwxyz. 1234567890.

**ALCANCE**

**ESPACIAL:** \_\_\_\_\_ (OPCIONAL)

**TEMPORAL:** \_\_\_\_\_ (OPCIONAL)

**TÍTULO O GRADO ASOCIADO CON EL TRABAJO:**

Ingeniero Químico

**NIVEL ASOCIADO CON EL TRABAJO**

Pregrado

**ÁREA DE ESTUDIO**

Departamento de Ingeniería Química

**INSTITUCIÓN**

Universidad de Oriente: Núcleo Anzoátegui

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

**DERECHOS**

Los trabajos de grado son de exclusiva propiedad de la Universidad y solo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quien lo participara al Consejo Universitario.

---

**Maryanna Noriega Rodríguez**  
**AUTOR**

---

Ing. Luis Moreno  
**TUTOR**

---

Dra. Shirley Marfisi  
**JURADO**

---

Ing. Yaneis Obando, M.Sc  
**JURADO**

**POR LA SUBCOMISIÓN DE TESIS**

---

Ing. Yraima Salas