



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO

Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

Área Académica de Química

Doctorado en Ciencias Ambientales

TÍTULO

OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE
COMBUSTIBLES COMO MEDIDA DE MITIGACIÓN ANTE EL
CAMBIO CLIMÁTICO: CASO DE LA REFORMACIÓN CATALÍTICA
DE LAS NAFTAS

TESIS

Que para obtener el grado de
DOCTORA EN CIENCIAS AMBIENTALES

Presenta

ALLIN YARELY JUÁREZ PLATA

Director de Tesis

DR. CÉSAR ABELARDO GONZÁLEZ RAMÍREZ

Mineral de la Reforma, Hidalgo

Noviembre 2025.



Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería
School of Engineering and Basic Sciences

Mineral de la Reforma, Hgo., a 24 de noviembre de 2025

Número de control: ICBI-D/2997/2025

Asunto: Autorización de impresión de tesis.

MTRA. OJUKY DEL ROCÍO ISLAS MALDONADO
DIRECTORA DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR DE LA UAEH

Por este conducto le comunico que el comité revisor asignado a la **I.Q. Allín Yarely Juárez Plata**, alumna del Doctorado en Ciencias Ambientales (Directo) con número de cuenta **132127**, autoriza la impresión del proyecto de tesis titulado **"Optimización del proceso de producción de combustibles como medida de mitigación ante el cambio climático: Caso de la reformación catalítica de las naftas"**, en virtud de que se han efectuado las revisiones y correcciones pertinentes.

A continuación, se registran las firmas de conformidad de los integrantes del comité revisor.

PRESIDENTE	Dr. Fernando Pérez Villaseñor	
SECRETARIO	Dr. José Roberto Villagómez Ibarra	
1er VOCAL	Dr. César Abelardo González Ramírez	
2do VOCAL	Dr. Ángel Castro Agüero	
3er VOCAL	Dr. Martín Hernández Juárez	
1er SUPLENTE	Dra. Elena María Otazo Sánchez	
2do SUPLENTE	Dra. Teresa de Jesús Vargas Vega	

Sin otro particular, reitero a Usted la seguridad de mi atenta consideración.

Atentamente
"Amor, Orden y Progreso"
Mtro. Gabriel Vergara Rodríguez
Director del ICBI

GVR/SEPC

Ciudad del Conocimiento, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México, C.P. 42184
Teléfono: 771 71 720 00 Ext. 40001
direccion_icbi@uaeh.edu.mx, vergara@uaeh.edu.mx

"Amor, Orden y Progreso"



2025



uaeh.edu.mx

Índice

1.	Capítulo I: Introducción.....	1
1.1.	Generalidades	1
1.2.	Planteamiento del problema	2
1.3.	Justificación	3
1.4.	Objetivo general	4
1.5.	Objetivos específicos	4
1.1	Descripción del contenido de la Tesis	4
2.	Capítulo II: Marco teórico y antecedentes	7
2.1.	Fundamentos del proceso	7
2.2.	Características de las naftas	9
2.3.	Número de octano.....	9
2.4.	Calidad de las gasolinas.....	11
2.5.	Reacciones	11
2.5.1.	Hidroformación	12
2.5.2.	Deshidrogenación.....	12
2.5.3.	Isomerización	13
2.5.4.	Deshidrociclación.....	13
2.6.	Clasificación de los procesos de Reformación Catalítica.....	14
2.6.1.	Proceso de reformación cíclica	14
2.6.2.	Proceso de regeneración continua	14
2.6.3.	Proceso de reformación semi-regenerativa	15
2.7.	Variables de control en el proceso de reformación catalítica de las naftas.	15
2.7.1.	Temperatura	15
2.7.2.	Espacio velocidad.....	16
2.7.3.	Presión del reactor	16
2.8.	Catalizadores utilizados en la reformación catalítica de las naftas	16
2.8.1.	Reformación catalizada por un metal.	16
2.8.2.	Deposición de coque en el catalizador.	18
2.9.	Modelación cinética.....	19
2.10.	Modelación térmica.....	20
2.11.	Optimización	21

2.12.	COMSOL Multiphysics®	23
3.	Capítulo III: Metodología	26
3.1	Geometría del reactor	26
3.2.	Mallado de la geometría.....	27
3.3.	Modelo cinético.....	27
3.4.	El catalizador.....	29
3.5.	Modelo hidrodinámico y modelo térmico	29
3.6.	Cálculo del número de octano	30
4.	Capítulo IV: Resultados	33
4.1.	Geometría del reactor	33
4.2.	Mallado.....	36
4.3.	Análisis de flujo	36
4.4.	Modelo térmico.....	37
4.5.	Modelo Cinético	39
4.6.	El catalizador	48
4.7.	Número de octano.....	50
4.8.	Comparación de temperaturas	50
5.	Capítulo V: Escenarios de mitigación de GEI	53
5.1.	Introducción.....	53
5.1.1.	El rol de la gasolina en México y el mundo	54
5.1.2.	Beneficios de la gasolina de alto octanaje.....	54
5.1.3.	Compromisos de México ante el cambio climático	55
5.2.	Desarrollo del Modelo de Estudio	56
5.2.1.	Escenario base	56
5.2.2.	Escenario de referencia BAU	57
5.2.3.	Escenario de referencia Probable	58
5.2.4.	Escenario de mitigación posible.....	59
5.2.5.	Escenario de mitigación Deseable.....	60
5.3.	Resultados del análisis de escenarios	60
5.3.1.	Demanda energética	61
5.3.2.	Emisiones de GEI y otros contaminantes.....	63
6.	Capítulo VI: Conclusiones.....	70

7.	Bibliografía	73
I.	Anexo I	82
	I.1 Reacciones químicas y modelo cinético	82
	I.1.1. Modelo cinético	82
	I.1.2. Solución del modelo matemático con el método RK4	103
II.	Anexo II	110
	II.1. Participación en congresos	110
	II.1.1. XLII Congreso AMIDIQ.....	110
	II.1.2. XII Simposio Internacional del Carbono.....	112
	II.1.3. VI Congreso Nacional y I Congreso Internacional ITSON.....	115
III	Anexo III	117
	III.1. Artículo publicado.....	117
	III.2. Artículo enviado.....	152

Índice de figuras

Figura 2.1. Escala de octanaje.....	7
Figura 2.2. Diagrama del Proceso de Reformación Catalítica de las Naftas. Fuente: Elaboración propia con datos de (Lapinski, Metro y col., 2014).	9
Figura 2.3. Reacción de isomerización del n-heptano a tolueno.....	12
Figura 2.4. Deshidrogenación de alquilciclohexanos a aromáticos	12
Figura 2.5. Deshidroisomerización de alquilciclopentanos a aromáticos	13
Figura 2.6. Deshidrociclación de parafinas a aromáticos.....	13
Figura 2.7. Transformación del n-heptano a isopentano.....	13
Figura 2.8. Deshidrociclación de parafinas a naftenos.....	13
Figura 2.9. Reformación Catalítica Continua. Fuente: Elaboración propia con datos de (Dutton, 2019).....	14
Figura 2.10. Proceso de Reformación Catalítica Semi regenerativa. Fuente: Elaboración propia con datos de (Dutton, 2019).	15
Figura 4.1. Elementos internos del reactor diseñado en COMSOL	33
Figura 4.2. Banco de tuberías para catalizador	34
Figura 4.3. Banco de tubos para alimentación de catalizador (scallops)	34
Figura 4.4. Perforaciones en scallops.....	34
Figura 4.5. Reactor 1	35
Figura 4.6. Sistema de reactores del proceso CCR	35
Figura 4.7. Mallado del Reactor 3D.....	36
Figura 4.8. Flujo de nafta en Reactor 1	36
Figura 4.9. Flujo de nafta en Reactor 2.	37
Figura 4.10. Flujo de nafta en Reactor 3.	37

Figura 4.11. Perfil de temperatura Reactor 1.	38
Figura 4.12. Perfil de temperatura del Reactor 2.	38
Figura 4.13. Perfil de temperatura Reactor 3.	39
Figura 4.14. Concentración de parafinas en Reactor 1.	40
Figura 4.15. Concentración de naftenos en Reactor 1.....	40
Figura 4.16. Concentración de aromáticos en Reactor 1.....	41
Figura 4.17. Concentración de parafinas en Reactor 2.	41
Figura 4.18. Concentración de naftenos en Reactor 2.....	42
Figura 4.19. Concentración de aromáticos en Reactor 2.....	42
Figura 4.20. Concentración de parafinas en Reactor 3.	43
Figura 4.21. Concentración de naftenos en Reactor 3.....	43
Figura 4.22. Concentración de aromáticos en Reactor 3.....	44
Figura 4.23. Concentración de octano en Reactor 1.	45
Figura 4.24. Concentración de butano en Reactor 1	45
Figura 4.25. Concentración de butilbenceno en Reactor 1.	46
Figura 4.26. Concentración de metilciclopentano en Reactor 1.....	46
Figura 4.27. Concentración de octano en Reactor 2	47
Figura 4.28. Concentración de butano en Reactor 2.	47
Figura 4.29. Concentración de butilbenceno en Reactor 2.	48
Figura 4.30. Concentración de metilciclopentano en Reactor 2.	48
Figura 4.31. Perfil de velocidad de flujo alrededor de una partícula de catalizador (m/s).....	49
Figura 4.32. Perfiles de concentración dentro de una partícula catalítica.	49
Figura 4.33. Número de octano de la mezcla.....	50
Figura 4.34. Perfiles de temperaturas en el Reactor 1	50
Figura 4.35. Perfiles de temperatura en Reactor 2.	51
Figura 4.36. Perfiles de temperatura Reactor 3.....	51
Figura 5.1. Demanda de vehículos a gasolina en México.	61
Figura 5.2. Demanda energética en escenarios inerciales BAU y Probable.	62
Figura 5.3. Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación Posible.	63
Figura 5.4 Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación Deseable	63
Figura 5.5. Emisiones de GEI en escenarios inerciales.....	64
Figura 5.6. Emisiones de otros contaminantes en escenarios inerciales.	65
Figura 5.7. Potencial de mitigación de GEI.	66
Figura 5.8. Potencial de mitigación de otros contaminantes.....	66
Figura I.1. . Consumo y producción de n- parafinas con avance en el catalizador.	103
Figura I.2. Consumo y producción de i- parafinas con avance en el catalizador.	104
Figura I.3. Consumo y producción de alquilciclohexanos con avance en el catalizador.	104
Figura I.4. Consumo y producción de alquilciclopentanos con avance en el catalizador.....	105
Figura I.5. Consumo y producción de benceno con avance en el catalizador.....	105
Figura I.6. Consumo y producción de tolueno con avance en el catalizador.	106

Figura I.7. Consumo y producción del aromático de 8 átomos de carbono con avance en el catalizador.	106
Figura I.8. Consumo y producción del aromático de 9 átomos de carbono con avance en el catalizador.	107
Figura I.9. Consumo y producción de metaxileno con avance en el catalizador.	107
Figura I.10. Consumo y producción de ortoxileno con avance en el catalizador.	108
Figura I.11. Consumo y producción de paraxileno con avance en el catalizador.	108
Figura I.12. Consumo y producción de etilbenceno con avance en el catalizador.	109

Índice de tablas

Tabla 1.1. Comparación de los parámetros de la gasolina en distintas naciones (DOF, 2016).	2
Tabla 2.1. Alimentación de la mezcla de hidrocarburos	8
Tabla 2.2. . Número de Octano de algunos hidrocarburos (Carey y Sundberg, 2007).	10
Tabla 3.1. Dimensiones del reactor (Saeedi y Iranshahi 2017).	26
Tabla 3.2. Dimensiones propuestas para componentes del reactor.	27
Tabla 3.3 . Concentraciones iniciales (Ancheytal, 2011).	28
Tabla 3.4. Valores iniciales (Iranshahi, 2014)	30
Tabla 3.5. Coeficientes para la estimación de RON (Albahri y col, 2002).	30
Tabla 5.1. Clasificación de la flota vehicular en México, año 2015.	56
Tabla 5.2. Parámetros utilizados para los cálculos.	57
Tabla 5.3. Factores de emisión de la gasolina	57
Tabla 5.4. Porcentajes de ventas de autos eléctricos e híbridos en México	58
Tabla 5.5. Ahorro de combustible total para el año 2050.	67
Tabla 5.6. Potencial de mitigación de GEI y otros contaminantes para el año 2050.	67
Tabla I.1. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrogenación	83
Tabla I.2. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de alquilociclohexanos a N-parafinas.	84
Tabla I.3. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de alquilociclohexanos a I-parafinas.	85
Tabla I.4. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de N-parafinas a alquilociclopentanos.	86
Tabla I.5. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de I-parafinas a alquilociclopentanos.	87
Tabla I.6. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de N-parafinas a aromáticos.	88
Tabla I.7. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de I-parafinas a aromáticos.	89
Tabla I.8. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de naftenos.	90
Tabla I.9. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de parafinas.	91
Tabla I.10. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de aromáticos.	92
Tabla I.11. Constantes de velocidad para las reacciones de transalquilación.	93
Tabla I.12. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de N-parafinas.	94
Tabla I.13. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de I-parafinas.	95

Tabla I.14. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de alquilciclohexanos.	96
Tabla I.15. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de alquilciclopentanos.	97
Tabla 1. Clasificación de la flota vehicular en México, año 2015.	121
Tabla 2. Parámetros utilizados para los cálculos.....	122
Tabla 3. Factores de emisión de la gasolina.....	122
Tabla 4. Ahorro de la demanda total energética por caso para el año 2050.....	146
Tabla 5. Mitigación de las emisiones acumuladas de CO ₂ y contaminantes de cada escenario para el año 2050.	146

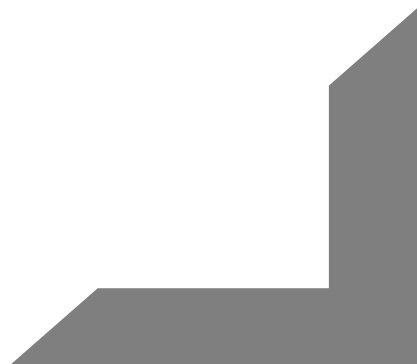
Nomenclatura

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidades</i>
β	Coeficiente de arrastre	Adimensional
ϵ	Porosidad	Adimensional
ρ_g	Gas densidad	kg/m ³
ρ_s	Solid densidad	kg/m ³
μ	Dynamic viscosity	Pa s
$\emptyset$	Fracción volumen de la fase	Adimensional
τ	Tensor de esfuerzos	Pa
C_{p_g}	Capacidad calorífica del gas	J/kg K
C_{p_s}	Capacidad calorífica del sólido	J/kg K
F	Fuerzas externas	N/m ³
k	Conductividad térmica	W/m K
p	Presión de la mezcla	Pa
T	Temperature	K
T_g	Gas temperature	K
T_s	Solid temperature	K
u	Velocidad de la fase	m/s
u_g	Velocidad del gas	m/s
u_s	Velocidad del sólido	m/s



CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN



Capítulo I: Introducción

1.1. Generalidades

El cambio climático ha sido promovido, entre otros factores, por los gases de efecto invernadero (GEI) que son, en su mayoría, un producto residual de los combustibles fósiles que se utilizan en el planeta para fines de calefacción, electricidad, transporte y otras necesidades energéticas (Flannery, 2011).

Los combustibles fósiles son la principal fuente de energía a nivel mundial y la demanda continuará en aumento, al menos durante las próximas dos décadas. De acuerdo con las tendencias en el uso de las diferentes fuentes de energía, el petróleo ocupa el primer lugar en demanda (BP, 2019), lo que representa la generación y acumulación en la atmósfera de gases de efecto invernadero (GEI) producto de las actividades de la industria del petróleo (explotación, producción, almacenamiento y distribución) y del uso final de los combustibles (Solís, 2015).

En 2017, la producción de petróleo en México fue de 1,948 miles de barriles diarios, de los cuales el 39.7% fue destinado al Sistema Nacional de Refinación (SENER, 2018). En el proceso de refinación más del 79% del petróleo se destina a cubrir las necesidades del consumo energético de los transportes, convirtiéndose en el sector que genera más emisiones de GEI (INECC, 2018).

Debido a que el sector transporte continuará haciendo uso de los combustibles fósiles por tiempo indefinido, es preciso desarrollar proyectos de investigación para la producción de combustibles de mayor calidad. Tal es el caso de la Reformación Catalítica de las Naftas, proceso mediante el cual se incrementa el número de octano de los combustibles, lo que permite aumentar el rendimiento de los motores, y, por lo tanto, se reduce el consumo de combustible de los vehículos (Wauquier, 2004), y se genera una menor cantidad de emisiones de GEI a la atmósfera. Así, la optimización del proceso de reformación catalítica de las naftas permitirá mejorar la calidad de los combustibles y representará una alternativa de mitigación ante el cambio climático.

1.2. Planteamiento del problema

Los avances en las tecnologías de motorización y control de las emisiones de GEI en los países desarrollados, ha permitido, en conjunto, que los vehículos nuevos y los que utilizan energías alternativas reemplacen a los vehículos anteriores, por lo que las emisiones de GEI del sector transporte tienden a declinar. Sin embargo, a pesar de la disminución en las emisiones, el sector transporte continúa siendo una fuente importante de contaminación del aire. El desarrollo tecnológico en los sistemas de combustión interna y en los sistemas de control de contaminantes es importante, pero el eficiente funcionamiento de éstos radica en la calidad de los combustibles (SEDEMA, 2017).

La calidad de un combustible puede definirse mediante el cumplimiento de los estándares establecidos en la normatividad vigente, lo que permite minimizar el impacto ambiental, debido a que se reduce la emisión y concentración de agentes contaminantes. En México la Norma Oficial Mexicana, NOM-016-CRE-2016, establece las especificaciones de calidad que deben cumplir los petrolíferos (CRE, 2018).

Tabla 1.1. Comparación de los parámetros de la gasolina en distintas naciones (DOF, 2016).

Propiedad	Unidad	México ^a	Unión Europea ^b	Estados Unidos ^c
Índice de octano	Adimensional	87 - 91	95	87 - 94
Aromáticos	% volumen	32 máximo	35 máximo	23 máximo
Olefinas	% volumen	11.9 máximo	18 máximo	9.74 máximo
Benceno	% volumen	1.0 máximo	1.0 máximo	0.67 máximo
Azufre total	mg/kg	80 máximo	10 máximo	23 máximo

^a. Diario Oficial de la Federación, 2016

^b. Parlamento Europeo, 2009

^c. Environmental Protection Agency (EPA), 2018

Las normatividades establecidas en materia de combustibles fósiles por la Unión Europea (EU, 2015) y por la EPA (EPA, 2019), exigen un número de octano más alto y una menor la cantidad de azufre en los combustibles, en comparación con la regulación mexicana. Estos datos indican que la calidad de las gasolinas producidas en México es inferior a la calidad de las gasolinas de países desarrollados. Una menor calidad en los combustibles implica mayor generación de GEI.

En la actualidad, la reformación catalítica de las naftas resulta costoso para la industria del petróleo debido a la demanda energética y de insumos, como el catalizador, necesarios para llevar a cabo el proceso, por lo que las gasolinas de alto número de octano se encarecen y disminuye la accesibilidad a su compra. Datos reportados por el Sistema de Información Energética de la Secretaría de Energía en México, demuestran que el consumo nacional de gasolina de bajo octanaje, conocida como Magna, fue de 2,559,737.435 m³ para el mes de febrero de 2020, mientras que el consumo de gasolina de alto octanaje, conocida como Premium, fue de 556,841.543 m³ (SIE, 2020), lo que indica que el alto consumo de combustibles de baja calidad está en función del costo, a pesar de los perjuicios que causa en el ambiente debido a una mayor generación de GEI.

1.3. Justificación

En México, la contribución principal de emisiones de GEI proviene del sector energético, representada por el 70% del total. De acuerdo con los datos reportados en el Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero y Compuestos de Efecto Invernadero en el sector energía, los transportes generan el 36% de la cantidad de GEI, correspondiente al porcentaje más alto de emisiones (INECC, 2018), principales causantes del calentamiento global.

El uso de combustibles fósiles utilizado en los medios de transporte continuará representando la principal fuente de energía, por lo que es preciso establecer las acciones pertinentes como medida de mitigación ante el cambio climático generado por los GEI provenientes de los vehículos automotrices.

Una de las alternativas ante el cambio climático y calentamiento global es el reemplazo de los vehículos de combustión de encendido por chispa por autos eléctricos o híbridos. Sin embargo, la obtención de la energía para su funcionamiento generalmente proviene de fuentes convencionales de generación eléctrica, como las centrales termoeléctricas, que de igual forma emiten GEI.

Existe otra medida de mitigación ante el cambio climático que consiste en mejorar la calidad de las gasolinas, mediante la optimización del proceso de reformación catalítica las naftas, que permite aumentar el índice de octano y con ello disminuir la cantidad de GEI emitidos a la atmósfera.

La optimización del proceso de reformación catalítica de las naftas consiste en aumentar la rentabilidad del proceso en la refinería, de modo que disminuyan los costos de operación, se

incremente el volumen de producción y se puedan ofrecer combustibles de mayor calidad a costos más asequibles para la población en general.

1.4. Objetivo general

Desarrollar un esquema de optimización operativa del proceso de reformación catalítica de las naftas mediante la simulación y operación en planta piloto, para mejorar la calidad de los combustibles producidos, como alternativa de mitigación ante el cambio climático.

1.5. Objetivos específicos

- i. Simular un reactor 3D en COMSOL Multiphysics® y Excel a partir de un modelo cinético seleccionado de la literatura, para conocer los perfiles de presión, temperatura y composición en cualquier punto del reactor, así como para monitorear el comportamiento del catalizador.
- ii. Determinar los parámetros óptimos de operación del reactor (temperatura) mediante el uso de COMSOL Multiphysics®

1.1 Descripción del contenido de la Tesis

En el presente trabajo se encuentra el desarrollo de los objetivos establecidos en el proyecto. En el Capítulo II se hace una recopilación de información sobre los principios teóricos de la reformación catalítica de las naftas, las reacciones que se llevan a cabo y la clasificación del proceso. De igual forma se presenta una revisión bibliográfica sobre los trabajos realizados recientemente sobre reformación catalítica de las naftas.

En el Capítulo III se muestra la metodología utilizada para el desarrollo de la investigación. Se presentan las herramientas a utilizar, así como los procedimientos para modelar los reactores del proceso de reformación catalítica de las naftas.

En el Capítulo IV se muestran y discuten los resultados obtenidos al simular los modelos cinético, térmico e hidrodinámico de los reactores, así como el número alcanzado por las concentraciones en la salida de cada reactor.

El Capítulo V presenta la importancia de utilizar combustible de número de octano alto para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, mediante el uso de un software para proyectar la

generación de emisiones hacia el año 2050 proponiendo escenarios de mitigación que consisten en incrementar el número de octano de la gasolina para incrementar la eficiencia energética y disminuir el consumo de combustible.

Finalmente, en el Capítulo VI se presentan las conclusiones de la investigación, así como las recomendaciones para dar continuidad al proyecto.



CAPÍTULO II

MARCO

TEÓRICO Y

ANTECEDENTES



Capítulo II: Marco teórico y antecedentes

2.1. Fundamentos del proceso

El valor antidetonante de una gasolina, también conocido como número de octano, depende de los hidrocarburos que la conforman. Los alcanos de cadena lineal, por ejemplo, tienen un número de octano bajo; el *n*-heptano por definición tiene número de octano cero. Los alcanos ramificados tienen números de octano más altos. Por ejemplo, el 2,2,4-Trimetilpentano (isooctano) tiene número de octano 100, por definición. En la Figura 2.1 se presenta la escala de octanaje y la posición de la gasolina en dicha escala. El número de octano de los cicloalcanos es un tanto más alto, mientras que los hidrocarburos aromáticos tienen un número de octano mucho mayor, generalmente por encima de 100 (Olah y Monlar, 2003).

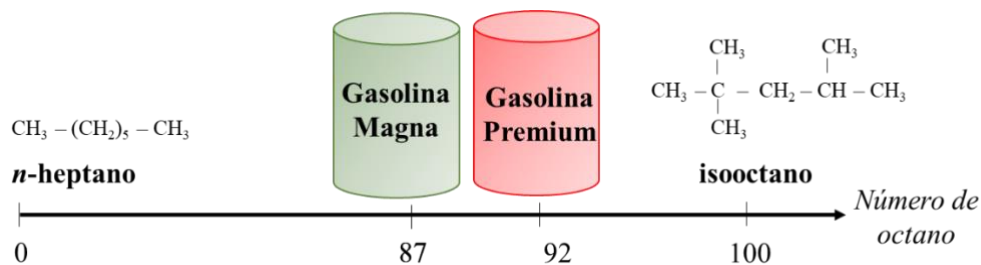


Figura 2.1. Escala de octanaje.

La nafta es una mezcla de hidrocarburos que se obtiene de la destilación del petróleo, utilizada principalmente en la producción de gasolinas y compuestos aromáticos de alto valor para la industria química. La composición típica de una nafta se presenta en la Tabla 2.1. Adicionalmente, las naftas también presentan compuestos orgánicos de azufre y nitrógeno, agua, sales y óxidos metálicos. Las naftas presentan un número de octano bajo, por lo que no es recomendable utilizar directamente en los motores automotrices, sino que debe transformarse para incrementar su número de octano. El proceso consistente en incrementar el número de octano de un combustible se conoce como reformación catalítica de las naftas, en donde ocurre una transformación de las parafinas lineales y naftenos (compuestos de bajo octano) en hidrocarburos aromáticos e isoparafinas (compuestos de alto número de octano). Durante el proceso de reformación se utilizan catalizadores metálicos, como el platino, renio o estaño, soportados en una base que generalmente es alúmina, Al_2O_3 (Aboites, Domínguez y col., 2004).

Tabla 2.1. Alimentación de la mezcla de hidrocarburos

Grupo de hidrocarburos	Ejemplo	% en la mezcla
<i>n</i> -parafinas	$\text{CH}_3 - (\text{CH}_2)_5 - \text{CH}_3$ <i>n</i> -heptano	40 – 70
olefinas	$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH}_2$ 1-buteno	0 – 2
Naftenos	 ciclohexano	20 – 50
Aromáticos	 benceno	5 – 20

Es importante señalar que previo al proceso de reformación catalítica de las naftas, se lleva a cabo la *hidrodesulfuración*, proceso fundamental para la remoción del azufre y otras impurezas en las naftas. El azufre causa envenenamiento en el catalizador del proceso de reformación catalítica, reduciendo su tiempo de vida, además de ser un potencial contaminante presente en la lluvia ácida (Liu, Liu y col., 2018).

En 2011 se realizó un estudio en donde se consideró un aspecto importante con respecto a la conversión de naftas. Para obtener naftas de alta calidad, es necesario un reacomodo de las moléculas de hidrocarburos para formar compuestos moleculares más complejos, mejorando los valores de octano, es decir, re-formar las estructuras de al menos algunos constituyentes de la gasolina. Durante este proceso, se generan cantidades importantes de hidrógeno, el cual puede ser utilizado como en hidrotratamiento e hidrocrackeo (Rodríguez y Ancheyta 2011).

El proceso operativo ocurre en un rango de temperatura de 400 °C a 500 °C, y presiones de entre 25 y 50 atmósferas, de tal manera que se logre la deshidrogenación y la isomerización de alcanos, formando compuestos ricos en aromáticos como benceno, xileno y tolueno, BXT (Primo, 1995). En la Figura 2.2 se muestra un diagrama general del proceso de reformación catalítica de las naftas (Lapinski, Metro y col., 2014).

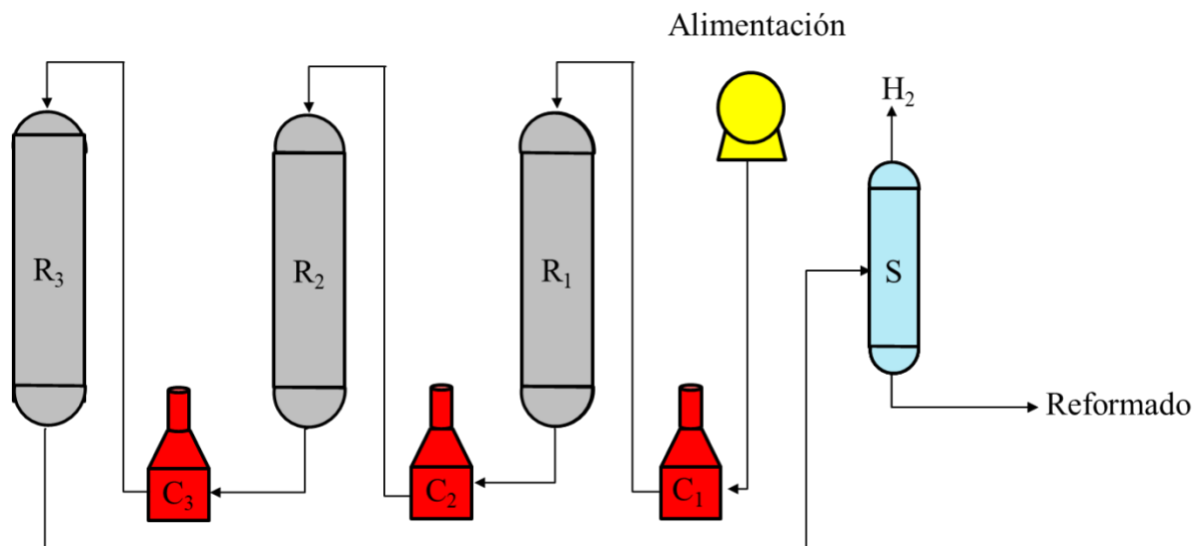


Figura 2.2. Diagrama del Proceso de Reformación Catalítica de las Naftas. Fuente: Elaboración propia con datos de (Lapinski, Metro y col., 2014).

2.2. Características de las naftas

Las naftas contienen parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos, agua y componentes metálicos. Las parafinas son hidrocarburos alifáticos saturados también conocidos como alcanos. Las parafinas pueden ser de cadena recta o estructuras ramificadas, denominadas iso-parafinas. El punto de ebullición siempre es mayor en las n-parafinas que en las i-parafinas con mismo número de carbonos. La densidad incrementa conforme aumenta el número de carbonos en la cadena. Las olefinas son hidrocarburos alifáticos insaturados de cadena recta o ramificada con uno o más dobles enlaces. Los naftenos son hidrocarburos cíclicos saturados. La mayoría de los naftenos contenidos en el petróleo contienen un anillo en su estructura de cinco o seis átomos de carbono. Los anillos pueden contener parafinas ligados a ellos. Los compuestos aromáticos son hidrocarburos que contienen uno o más anillos poliinsaturados. Cada anillo bencénico puede estar unido a una parafina, a un nafteno o a otro anillo aromático. Los puntos de ebullición y densidades de los compuestos aromáticos son más altos que los de las parafinas y naftenos con igual número de carbono. Los aromáticos presentan elevado número de octano (Carey y Sundberg, 2007).

2.3. Número de octano

El número de octano es la medición del grado de golpeteo de un motor observado para un hidrocarburo en particular o para una mezcla de hidrocarburos. Existe una escala en donde se especifican los números de octano para los hidrocarburos, siendo el n-heptano 0.0 y el 2,2,4-trimetilpentano 100.0, por definición. En la **Error! Reference source not found..1** se presentan

los números de octano, denominado comúnmente *RON*, por sus siglas en inglés (*Research Octane Number*), para algunos compuestos. Otra medición del número de octano es la denominada *MON*, por sus siglas en inglés (*Motor Octane Number*). *RON* y *MON* difieren en cuanto al procedimiento de evaluación utilizado. El *RON* representa el desempeño del motor a bajas velocidades, mientras que *MON* es representativo para conducción a alta velocidad (Antos y Aitani, 2004).

Los compuestos que presentan alto número de octano, registran velocidades relativamente bajas de ramificación de sus cadenas, reduciendo el riesgo de que se genere ignición prematura en el momento de la combustión de un motor, lo que causa un bajo rendimiento y daños en el motor (Carey y Sundberg, 2007).

Los hidrocarburos de cadenas ramificadas incrementan el número de octano en la mezcla debido a que forman radicales libres que se estabilizan con este tipo de estructuras, favoreciendo la reacción de combustión. Por ello, la ignición puede ser controlada y completada, evitando que se generen productos remanentes causantes de la autoignición no deseada (Alvarado, Delgado y col., 2015)

El número de octano para los aromáticos (excepto para el benceno) se encuentran por encima de 100, por lo que se convierten en los compuestos deseados en el reformado. Por lo general, las olefinas ligeras y los naftenos presentan números de octano mayores que las parafinas. El incremento en el número de octano puede obtenerse mediante la conversión de naftenos en aromáticos y parafinas de cadena recta en parafinas ramificadas o aromáticos, convirtiéndose en las reacciones *clave* en el proceso de reformación catalítica (Antos y Aitani, 2004)

Tabla 2.2. . Número de Octano de algunos hidrocarburos (Carey y Sundberg, 2007).

Compuesto	RON	Compuesto	RON
n-heptano	0.0	<i>n</i> -octano	-19.0
2-metilhexano	42.4	2-metilheptano	21.7
3-metilhexano	52.0	2,3-dimetilhexano	71.5
3-etilpentano	65.0	3,3-dimetilhexano	75.5
2,2-dimetilpentano	92.8	2,2,3-dimetilpentano	109.6
2,3-dimetilpentano	91.1	2,2,4-trimetilpentano	100.0
3,3-dimetilpentano	83.1	2,3,3-trimetilpentano	106.1
2,2,3-trimetilpentano	112.1	2,3,4-trimetilpentano	102.7

2.4. Calidad de las gasolinas

Las regulaciones que establecen los niveles máximos permisibles de azufre total, benceno, olefinas, aromáticos y número mínimo de octano que debe contener la gasolina, tanto Magna como Premium, determinan su calidad, tal como se presentó en la Tabla 1.1.

El número de octano es importante debido a que representa la capacidad de la gasolina de resistir al golpeteo durante la combustión de un motor, aunque el factor más importante que representa un alto número de octano es reducir daños al medio ambiente causados por los GEI. Uno de los contaminantes con mayor restricción en las gasolinas es el plomo. A principios del siglo XX, el tetraetilo de plomo se utilizó como antidetonante en las mezclas de gasolina para los motores de combustión interna. Sin embargo, en la década de 1990 México prohibió en su totalidad la utilización de tetraetilo de plomo en las gasolinas, debido a que las emisiones tóxicas de los vehículos liberadas a la atmósfera, que constituían la principal fuente de exposición humana a este compuesto, considerado altamente carcinogénico y tóxico (Mallma, Lamadrid-Figueroa y col., 2007). Para sustituir el uso del tetraetilo de plomo, se introdujo en el mercado el metil terbutil éter (MTBE), que, aunque no es carcinogénico, genera un impacto medioambiental. Por esta razón, han sido investigados nuevos aditivos, como es el caso del etanol que resulta ser 15% menos perjudicial al medio ambiente, según los resultados obtenidos en un análisis de ciclo de vida del MTBE y etanol (Yang, Shao y col., 2020).

2.5. Reacciones

La ciclación y la isomerización son las reacciones que ocurren cuando las parafinas y los naftenos se transforman en componentes de mayor número de octano. La nafta ligera está constituida, en promedio, por átomos de 5 carbonos, y al ser alimentada al proceso de reformación catalítica, sus moléculas tienden a fragmentarse en butano y otros compuestos más ligeros. Por otra parte, los hidrocarburos con puntos de ebullición superiores a 200 °C son craqueados con facilidad ocasionando deposición de coque en el catalizador.

En las reacciones de reformación catalítica de las naftas se generan productos indeseados, por lo que es importante seleccionar las condiciones de operación apropiadas para inhibir las reacciones

no deseadas y favorecer las reacciones que generen los productos más valiosos, como lo son los aromáticos e isoparafinas.

En el proceso de reformación, las olefinas se saturan para formar parafinas. Las parafinas se isomerizan y generan naftenos. Posteriormente, los naftenos se convierten en aromáticos (Gary y Handwerk, 2003).

2.5.1. Hidroformación

Es la transformación del hidrocarburo en presencia de hidrógeno. En este tipo de reformación ocurren la mayor parte de las reacciones de deshidrogenación, isomerización de cicloalcanos y deshidrociclación. El proceso consiste en la combinación de los átomos de carbonos, separados por cuatro carbonos en una cadena, para formar anillos de seis átomos de carbonos. Los hidrocarburos de siete átomos de carbono saturados se transforman a tolueno (Figura 2.3). Junto con estas reacciones también ocurre el hidrocracking y la isomerización de alcanos de cadena recta a isómeros ramificados (Olah y Monlar, 2003).

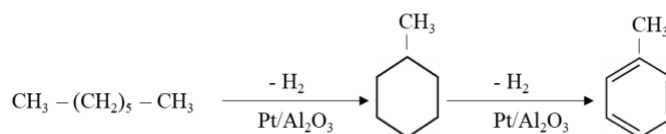


Figura 2.3. Reacción de isomerización del n-heptano a tolueno.

2.5.2. Deshidrogenación

Las reacciones de deshidrogenación originan un descenso en la temperatura del reactor debido a que son reacciones endotérmicas, por lo que es necesario acoplar intercambiadores de calor entre los reactores catalíticos para mantener las temperaturas apropiadas de conversión. Las reacciones principales durante la deshidrogenación (Gary y Handwerk, 2003) son la deshidrogenación de alquilciclohexanos a aromáticos (Figura 2.4), deshidroisomerización de alquilciclopentanos a aromáticos (Figura 2.5) y deshidrociclación de parafinas a aromáticos (Figura 2.6).

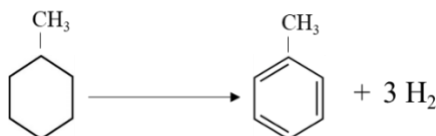


Figura 2.4. Deshidrogenación de alquilciclohexanos a aromáticos

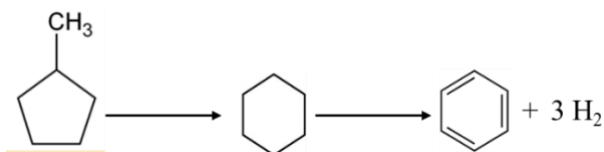


Figura 2.5. Deshidroisomerización de alquilciclopentanos a aromáticos

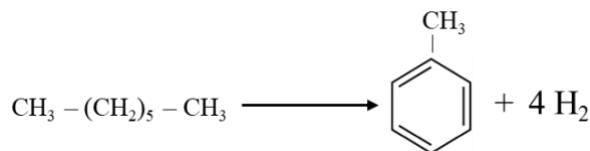


Figura 2.6. Deshidrociclación de parafinas a aromáticos.

2.5.3. Isomerización

La isomerización corresponde a las reacciones más importantes en el proceso de reformación catalítica, debido a que generan como productos hidrocarburos de mayor número de octano. El octanaje de una nafta (C_5 -80°C) puede incrementarse transformando las parafinas normales en sus isómeros. Por ejemplo, al transformar el *n*-pentano a isopentano (Figura 2.7), aumenta el RON de 61.7 a 92.3. El catalizador empleado en el proceso de isomerización se desactiva con mayor lentitud y generalmente no requiere regeneración antes de un año (Gary y Handwerk, 2003). Las condiciones de operación para estas reacciones son, generalmente, a una temperatura de entre 120 y 150 °C y presiones entre 17 y 27 atm.

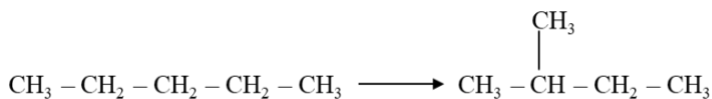


Figura 2.7. Transformación del *n*-heptano a isopentano.

2.5.4. Deshidrociclación

La deshidrociclación de parafinas a naftenos (Figura 2.8) se lleva a cabo de forma relativamente lenta. La velocidad de reacción puede ser comparada con la velocidad de hidrocrackeo. La reacción se ve favorecida a alta temperatura y baja presión. Las reacciones de hidrocrackeo son exotérmicas y la velocidad de reacción aumenta con el incremento de la temperatura, la presión y el número de carbonos de las parafinas (Padmavathi y Chaudhuri, 1997).

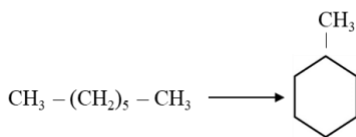


Figura 2.8. Deshidrociclación de parafinas a naftenos.

2.6. Clasificación de los procesos de Reformación Catalítica

Los procesos de Reformación Catalítica de las Naftas se clasifican en continuos, cíclicos y semi-regeneradores, en función de la frecuencia de regeneración del catalizador.

2.6.1. Proceso de reformación cíclica

El proceso de reformación cíclica utiliza reactores de lecho fijo, pero cada reactor de la serie de reactores puede ser removido del proceso para que el catalizador pueda ser regenerado y posteriormente reincorporarse al proceso evitando pérdidas en la producción. En los procesos de regeneración continua la presión de los reactores es de aproximadamente 14 atm, entregando reformados de con un número de octano cercano a 100 (Treese, Pujadó y col., 2015).

2.6.2. Proceso de regeneración continua

La compañía multinacional *Universal Oil Products* (UOP) y el Instituto Francés del Petróleo han comercializado procesos de regeneración continua (CCR) para la reformación catalítica de las naftas. En los procesos CCR se remueven de forma continua pequeñas cantidades de catalizador del último reactor para ser regeneradas y posteriormente se reincorporan al primer reactor. El proceso CCR *Platforming* ha sido utilizado a ultra bajas presiones (3 atm) obteniendo productos con número de octano superiores a 108. Más del 95% de los nuevos catalizadores para reformación catalítica de naftas se diseñan para procesos de regeneración continua (Treese, Pujadó y col., 2015). El proceso se muestra en la Figura 2.9.

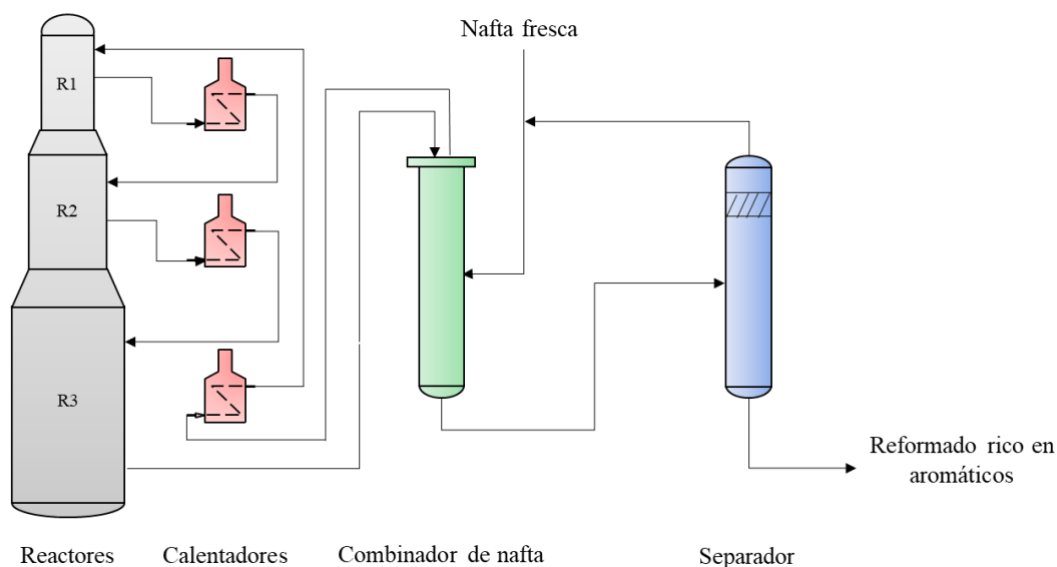


Figura 2.9. Reformación Catalítica Continua. Fuente: Elaboración propia con datos de (Dutton, 2019).

2.6.3. Proceso de reformación semi-regenerativa

En el proceso de reformación semiregenerativa, se realiza paro de operación de forma periódica para regenerar el catalizador (una vez al año, en promedio). Para prolongar el tiempo entre paros de operación, se utilizan altas presiones en los reactores (25 – 35 atm) lo que minimiza la actividad del catalizador por deposición de coque. Se han empleado catalizadores de renio y platino para trabajar a presiones más bajas (13- 20 atm) obteniendo números de octano entre 95 y 98. El catalizador Pt-Re ha demostrado ser fácilmente regenerable, convirtiéndose en uno de los catalizadores más utilizados en la actualidad. Los catalizadores monometálicos (Pt) son menos estables que los catalizadores bimetálicos. El propósito del renio es alargar la vida del catalizador al reducir la desactivación por deposición de coque (Antos y Aitani, 2004) El diagrama del proceso de la reformación semi-regenerativa se muestra en la Figura 2.10.

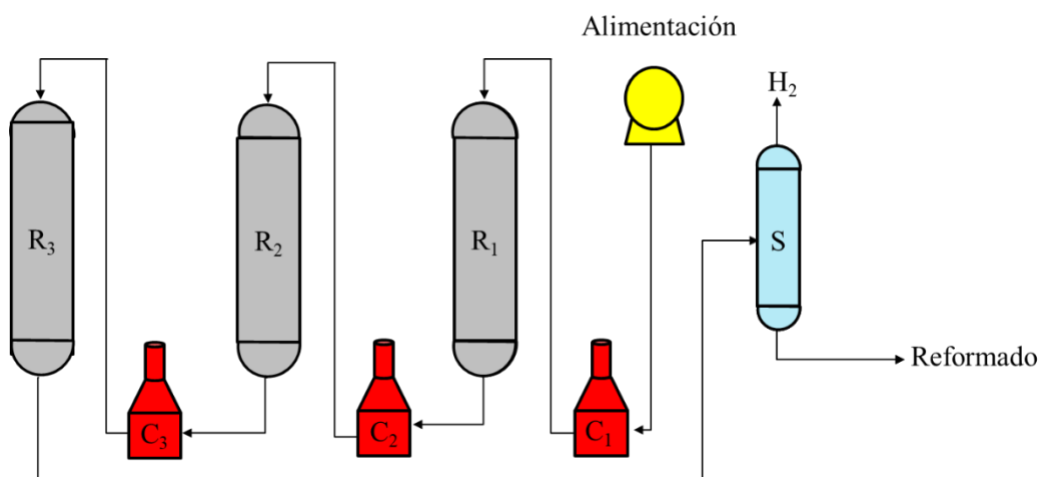


Figura 2.10. Proceso de Reformación Catalítica Semi regenerativa. Fuente: Elaboración propia con datos de (Dutton, 2019).

2.7. Variables de control en el proceso de reformación catalítica de las naftas.

En los procesos de reformación catalítica de las naftas existen variables de importancia que determinan el rendimiento del proceso. Las variables son presión y temperatura del reactor, espacio velocidad y la relación hidrógeno/hidrocarburo de alimentación.

2.7.1. Temperatura

La temperatura de reacción es fundamental en el proceso de reformación catalítica debido a que la calidad del producto depende directamente de ella. Los catalizadores que se utilizan en el proceso pueden funcionar en un amplio rango de temperaturas sin presentar efectos adversos en estabilidad y rendimiento.

Las temperaturas en el reactor pueden clasificarse para su definición en dos términos WABT (weighted average bed temperature) que es la temperatura promedio del lecho por peso y WAIT (weighted average inlet temperature) que se refiere a la temperatura promedio a la entrada por peso. La primera se refiere a la temperatura integrada a lo largo del catalizador, mientras que la segunda es un promedio de las temperaturas de entrada del conjunto de reactores.

2.7.2. Espacio velocidad

El término espacio velocidad se refiere a la medida de la cantidad de nafta procesada por cierta cantidad de catalizador empleado durante un periodo de tiempo determinado. Esta variable tiene un efecto importante sobre la calidad del producto. A mayor valor del espacio velocidad, menor será el tiempo de residencia en el reactor, reduciendo la calidad del producto. Si se incrementa la temperatura en el reactor, es posible generar un producto con un determinado índice de octano para compensar el efecto. Al emplear los términos de densidad de catalizador y volumen, la velocidad es representada como LHSV, mientras que, cuando es utilizado el peso, la variable espacio velocidad se indica como WHSV.

2.7.3. Presión del reactor

La variable básica para determinar la presión del reactor es la presión parcial del hidrógeno. Sin embargo, se hace uso de la presión total del reactor.

La presión promedio del catalizador es la indicada en la entrada del último reactor, debido a que, por lo general, el último reactor contiene el 50% del catalizador total.

Cuando se reduce la presión dentro del reactor, aumenta la producción de aromáticos y disminuye el hidrocrackeo. Sin embargo, se incrementa la velocidad de coquización acortando el ciclo del catalizado. Las presiones típicas durante el proceso oscilan entre 25 a 50 atm.

2.8. Catalizadores utilizados en la reformación catalítica de las naftas

En el proceso de reformación catalítica de las naftas, es importante favorecer la formación de productos con alto número de octano para obtener naftas de buena calidad y otros productos de valor para la industria química, por lo que se requieren catalizadores de alto desempeño.

2.8.1. Reformación catalizada por un metal.

En la reformación catalítica existe un término conocido como *platforming* (combinación de platino y reformación), que consiste en la utilización de un catalizador de platino soportado en una base

de alúmina que frecuentemente incorpora un cloruro o un fluoruro para incrementar la acidez de la catálisis. El uso del platino como catalizador es económicamente accesible debido a la baja cantidad de platino que se requiere (menos de 1%) y su efectividad catalítica (Olah y Monlar, 2003).

El *platforming* generalmente ocurre a temperaturas entre 450 y 525 °C y presiones entre 15 y 70 atm en presencia de hidrógeno. El uso del hidrógeno en la reacción de catálisis da como resultado la formación de productos que no contienen ni alcanos ni cicloalcanos. Además, la presencia de hidrógeno evita una acumulación rápida de material carbonoso en el catalizador y extendiendo su tiempo de vida (Olah y Monlar, 2003).

Los catalizadores bifuncionales son llamados así por su capacidad de poseer una función metálica y una función ácida, ambas necesarias para las reacciones químicas que ocurren en estos procesos. Los catalizadores de platino soportados sobre alúmina cumplen con esta doble función. En el metal ocurre la conversión de cicloalcanos a aromáticos, la hidrogenación de olefinas y la deshidrociclación de parafinas. La función ácida es aportada por la alúmina para favorecer las reacciones de isomerización de alcanos y cicloalcanos (Olah y Monlar, 2003).

Los primeros catalizadores utilizados en el proceso de reformación eran denominados monometálicos, por estar formados de un solo metal y un soporte. En la actualidad, los catalizadores más recurrentes son los catalizadores bimetálicos, por contener dos metales y una parte ácida que también sirve de soporte (Jafari, Rafiei y col., 2013). El desplazamiento de los catalizadores monometálicos por los bimetálicos se debe a que mejoran la selectividad y disminuyen la deposición de coque sobre el catalizador, por lo que aumenta su rendimiento y genera una reducción posterior en costos (Antos y Aitani, 2004). Se han realizado diversos estudios sobre pares de catalizadores utilizados en el proceso de reformación. Generalmente, el primer metal es el platino soportado en cloruro de alúmina. Para el segundo metal, se han desarrollado propuestas que incluyen estaño (Raffinage, 1969), Renio (Kluksdahl, 1968), Germanio (McCallister, 1971), Iridio (Sinfelt, 1976) e Indio (Antos, 1976).

Recientemente, se han realizado estudios para reemplazar al cloruro de alúmina por zeolitas (Y), debido a la corrosión que el cloruro puede generar en los equipos del proceso. Específicamente, se probó CeY, obteniendo una selectividad razonable y una mayor aromatización en el reformado, en comparación con el catalizador comercial de cloruro de alúmina (Zhang, Yang y col., 2019).

Actualmente, los catalizadores son multimetálicos como Pt-Re/ Al_2O_3 -Cl y algunos otros soportados en alúmina como Pt-Sn y Pt-Ge, entre otros. De manera general, el catalizador Pt-Re/ Al_2O_3 -Cl es utilizado en el proceso semi-regenerativo.

2.8.2. Deposición de coque en el catalizador.

El coque depositado en el catalizador se caracteriza por su composición y cantidad de H/HC, así como por su naturaleza química y por su localización en el catalizador

Las actividades más importantes del uso práctico de un catalizador heterogéneo son su actividad, selectividad y su tiempo de vida. La desactivación del catalizador mediante la sedimentación de residuos carbonosos que emanan de reacciones paralelas de hidrocarburos plantea un importante técnico y económico.

De hecho, para compensar el decremento de la actividad del catalizador causada por el coque, la temperatura tiene que ser incrementada gradualmente, lo que acelera la velocidad de las reacciones secundarias e incrementa los costos de operación. En la práctica, el proceso de reformación catalítica debe ser detenido para regenerar el catalizador. Al reducirse la velocidad de formación de coque se observa un apreciable mejoramiento técnico, especialmente en el momento en el que la producción requiere condiciones de operación más drásticas en las unidades de reformación catalítica.

Las dificultades para lograr el mejoramiento técnico pueden evaluarse considerando la proporción de la cantidad de coque depositado con respecto a la materia prima que se está tratando. De esta forma, sólo un átomo de carbono de 200,000 activado por el catalizador se transforma en un depósito de coque bajo las condiciones de operación que se estén llevando a cabo. De cualquier forma, las soluciones para la desactivación, si las hay, solo pueden derivarse de una comprensión del mecanismo de formación de coque y de sus efectos sobre la actividad y la selectividad de los catalizadores.

El problema de la deposición de coque en el catalizador se ha intentado comprender y resolver mediante varios estudios propuestos por los investigadores. Tal es el caso de un modelo propuesto para la exploración del proceso de deposición de coque dentro del catalizador, mediante la evaluación de la distribución espacial de la deposición de coque en un lecho empacado. Los resultados mostraron que existe resistencia interna débil de transferencia de masa y de calor en los

catalizadores del tipo “cáscara de huevo”, lo que implica una mayor deposición de coque, en comparación con los catalizadores de tipo “yema de huevo” y, por tanto, la desactivación del catalizador será mayor (Yang, 2021).

Los estudios sobre optimización del proceso de reformación catalítica de las naftas permiten encontrar los parámetros operativos apropiados no sólo para obtener mayor rendimiento de aromáticos, sino para determinar las condiciones de operación más adecuadas para disminuir la deposición de coque en el catalizador, así como para poder seleccionar entre diferentes opciones el tipo de catalizador que ofrezca mayor rendimiento en el proceso. Es por ello que se realizó un estudio en donde se propone el uso de diferentes catalizadores y se determinó que a una presión de entre 1.2 a 1.5 MPa y una temperatura de entre 478 °C a 481 °C, se obtiene un rendimiento mayor en 2 % en peso dependiendo del tipo de catalizador empleado (Ivanchina, 2021).

2.9. Modelación cinética

Para conocer la distribución de las concentraciones dentro de los reactores del proceso de reformación, se conforman grupos de hidrocarburos con características similares para simplificar la cantidad total de componentes que contiene la nafta, ya que son más de trescientos compuestos los que están presentes. Generalmente, los grupos se dividen en parafinas, iso-parafinas, naftenos y aromáticos, y el número de componentes por grupo, así como el número de reacciones químicas presentes depende del diseño de cada modelo cinético.

Diversos estudios han sido realizados para modelar con mayor precisión el proceso de reformación catalítica de las naftas. Se considera que el modelo más apropiado es aquél que contenga todos los grupos representativos del proceso pero que no represente alto grado de complejidad para su resolución, ya que un modelo cinético con mayor número de componentes implica un sistema de ecuaciones más extenso y complejo.

Los primeros modelos cinéticos desarrollados, si bien resultaron ser apropiados para representar la cinética de la reformación de las naftas, omitieron algunas reacciones como la deshidrociclación de parafinas a aromáticos e isomerización de aromáticos, así como la subdivisión detallada de los aromáticos, quienes constituyen los productos principales del reformado por incrementar el número de octano de la gasolina (Padmavathi y Chaundhuri, 1997).

Un modelo presentado en 2011 incluyó 24 componentes y 71 reacciones químicas, considerando compuestos entre 1 y 11 átomos de carbono. El modelo permitió comparar los perfiles de concentraciones de componentes con datos experimentales, siendo muy similares los resultados. De igual forma se realizó un modelo de desgaste de catalizador. La simulación se llevó a cabo en dos dimensiones (Rodríguez y Ancheyta, 2011).

Posteriormente se propusieron modelos en los que se han incrementado los grupos considerados como componentes de la nafta alimentada al proceso de reformación. Tal es el caso del trabajo desarrollado por Iranshahi y colaboradores, quienes conformaron la cinética por 32 pseudo componentes y 84 reacciones químicas, validando su modelo con datos experimentales (Iranshahi, 2014).

Un nuevo modelo matemático fue desarrollado en la reformación catalítica de las naftas de fracciones de gasolina de bajo octano en fracciones de alto octano. Se utilizaron ecuaciones cinéticas de reformación catalítica para gasolina comercial con catalizador de platino-renio en base de alúmina. Los resultados demostraron una buena aproximación entre los datos experimentales y los datos obtenidos en la simulación (Petrova, 2021)

Recientemente, se desarrolló un estudio, que demostró los cálculos de concentración en el equilibrio de un sistema complejo de reacciones del proceso de reformación catalítica de las naftas, el cual se propone para ser analizado mediante el método de minimización de energía libre de Gibbs, en donde se estudia el efecto de la temperatura, de la presión y de la relación hidrógeno/hidrocarburo en el proceso de reformación catalítica, desde un punto de vista de equilibrio termodinámico. Se determinó que, incrementando la temperatura, el rendimiento de los aromáticos incrementa y, por lo tanto, el número de octano aumenta también (Martínez y col., 2022).

2.10. Modelación térmica

La distribución de calor dentro de los tres reactores del proceso de reformación catalítica de regeneración continua puede ser modelada utilizando diferentes softwares disponibles para simular procesos industriales. Conocer los perfiles de temperatura es de gran importancia para la industria de la refinación, debido a que permite encontrar parámetros óptimos de operación.

Diversos estudios han sido desarrollados para dar a conocer el comportamiento e influencia de la temperatura en los procesos físicos y químicos de reactores e intercambiadores de calor, entre otros. Tal es el caso de Behjat y colaboradores (2008), quienes realizaron un estudio de un reactor de lecho fluidizado para conocer los fenómenos de transferencia de calor y la hidrodinámica del sistema. Los resultados mostraron la distribución de la temperatura en las fases sólida y gaseosa y se demostró que la temperatura del gas incrementa mientras se desplaza hacia la parte superior del reactor, debido a que la reacción de polimerización permite tener temperaturas más elevadas sobre el lecho de catalizador.

En otro estudio, se analizaron los perfiles de temperatura, concentración y velocidad de reacción para la producción de metano para un reactor de lecho fijo. Para ello, se resolvieron ecuaciones diferenciales estacionarias y dinámicas de transferencia de masa y calor mediante la técnica de elementos finitos. Se elaboró un modelo 3D en COMSOL (Taco, 2022).

Con la finalidad de aprovechar la energía térmica generada en los procesos industriales, se realizó un estudio en donde se utiliza la corriente de salida de un proceso exotérmico para el calentamiento de la nafta del proceso endotérmico de reformación catalítica, y de esta manera eliminar los hornos de calentamiento que requiere la reformación. Los resultados de la modelación demostraron que se producen 4 kmol/h de aromáticos más que en la reformación de la nafta convencional (Ebrahimian, 2020)

2.11. Optimización

Desde su aparición y hasta la fecha se han desarrollado tecnologías para el proceso de reformación catalítica de las naftas, así como para los equipos y los catalizadores utilizados, con la finalidad de obtener productos de mejor calidad, aumento en el rendimiento del reformado y ahorros energéticos. Algunas investigaciones recientes sobre los avances en el proceso de Reformación Catalítica de las Naftas se mencionan a continuación.

El desarrollo de métodos y modelos matemáticos para la optimización del proceso de reformación catalítica de las naftas ha sido presentado en algunas publicaciones. Tal es el caso del método de modelación matemática de monitoreo aplicado en una unidad de reformación catalítica. El método, basado en "*Catalyst's Control*", toma en cuenta los mecanismos físicos y químicos de la reacción de conversión de la mezcla de hidrocarburos, así como la desactivación del catalizador. Los

modelos creados se pueden usar para la optimización y predicción de los parámetros de operación (número de octano, temperatura de salida de los reactores y rendimiento) del proceso de reformación. Al revisar la comparación entre la operación actual y la óptima, se identificó que la cantidad total de coque en la catálisis es 87.73% en peso mayor que la que se puede observar durante la operación óptima. Se muestra que el trabajo en la actividad óptima permite aumentar la producción del producto con un nivel constante de costos de producción y obtener la información sobre la eficiencia del trabajo del catalizador Pt-Re (Ivanchina, 2014).

Un estudio similar se llevó a cabo con la modelación en Matlab del balance de materia y energía en estado no estacionario de un reactor catalítico adiabático, con la finalidad de conocer el comportamiento dinámico en el arranque y la perturbación generada, modificando la temperatura de alimentación. Se determinó que algunos compuestos, como las parafinas de bajo peso molecular, exhiben incremento en la concentración, mientras que otros desaparecen. Se descubrió que la temperatura requiere más tiempo para alcanzar el estado casi estacionario que la concentración de cualquier compuesto (Elizalde y Ancheyta, 2015). Dichos parámetros resultan relevantes para el presente proyecto al asignar los valores de la variable temperatura de entrada al simulador *Aspen Plus*.

En otro estudio, se propuso la aplicación del método de modelado matemático para la instalación de un sistema de reformación catalítica basado en el modelo denominado "Control de catalizador". Se estudió la calidad del producto de la unidad, con gasolina de hidrocrackeo utilizada como materia prima, analizando el impacto dicha materia prima en la producción. Se determinó que el reemplazo de materia prima de la unidad de reformación catalítica tiene un impacto positivo. El número de octano a la salida es de 97.6, mientras que la eficiencia de los recursos de la unidad aumenta en un 20% debido al aumento de la carga de materia prima (Chernyakova, 2015). Con base en los resultados obtenidos, se confirma la importancia de conocer la composición de la nafta de alimentación al proceso de reformación catalítica, debido a que de ello depende, en gran medida, la calidad del producto final.

La optimización del proceso de reformación catalítica de las naftas implica la variación de los rangos de operación de los parámetros a optimizar hasta determinar los valores que generen mejor rendimiento del reformado y mayor número de octano. En un estudio, se llevaron a cabo las reacciones de deshidrogenación, deshidrociclación e hidrocrackeo empleando catalizador Pt-Re

con soporte en alúmina. Se optimizaron las condiciones de reacción del proceso catalítico, temperatura, presión de hidrógeno y velocidad espacial líquida por hora (LHSV). Los resultados de la optimización indicaron que la conversión de componentes de nafta pesada (parafina y naftenos) aumenta al incrementar la temperatura y presión de reacción, mientras que disminuye con un aumento en el LHSV. La conversión alcanzada de nafta pesada fue del 91.4% a 375 C, 15 bar y LHSV = 1.5. La conversión de nafta pesada y la selectividad de la reacción de hidroisomerización aumentaron con una disminución en LHSV a un mínimo de (1.5) que dio la mejor tasa de isómeros (Elsayed, 2016).

Para conocer los efectos que produce la variación de los parámetros de operación en el producto reformado se llevó a cabo una investigación en donde se simuló el proceso de reformación catalítica de las naftas con el software gPROMS. El modelo se utilizó para controlar el comportamiento de la temperatura y las concentraciones de parafinas, naftenos y aromáticos con respecto a las alturas cambiantes de los reactores. Se realizó un análisis de sensibilidad de la calidad del producto (aromáticos) y el rendimiento del producto, el reformado, los gases más livianos y los rendimientos de hidrógeno variando las condiciones de funcionamiento de la reacción. Se determinó que la producción de aromáticos, el rendimiento de hidrógeno, los gases más livianos y el coque en el catalizador aumentan a medida que incrementa la temperatura de la reacción. Los compuestos aromáticos, el rendimiento de hidrógeno, el coque sobre catalizador y los gases más livianos disminuyen al aumentar la presión (Yusuf, 2019). Un año más tarde, se llevó a cabo un estudio por la misma Compañía, usando los softwares gPROMs y KRPC para validar los parámetros cinéticos y termodinámicos del modelo del proceso de reformación. Los resultados fueron comparados con datos reales y se demostró que al incrementar la relación de hidrogeno/hidrocarburo de 5.6 a 7.4, la producción de aromáticos decrece de 58.5 % a 55.5 %, y el rendimiento de reformado incrementa de 52,805 kh/h a 53,234 kg/h (Yusuf, 2020).

2.12. COMSOL Multiphysics®

Existen diversas herramientas para desarrollar modelaciones hidrodinámicas, térmicas y cinéticas del proceso de reformación catalítica de las naftas, así como para realizar la optimización del proceso. Los análisis pueden ejecutarse en dos o tres dimensiones de acuerdo con las necesidades de la simulación y del recurso computacional disponible. Entre los softwares disponibles para análisis de la dinámica de flujo computacional (CFD, por sus siglas en inglés), se encuentra

COMSOL Multiphysics®, que es una herramienta basada en el uso de métodos numéricos avanzados que sirve para modelado desde la geometría hasta el post procesamiento de diversos equipos y procesos aplicados a la física e ingeniería en general. Este software consta de diversos módulos, entre los que se encuentran el módulo de reacciones químicas y el módulo CFD, por sus siglas en inglés (dinámica de fluidos computacional), específico para análisis de flujo.

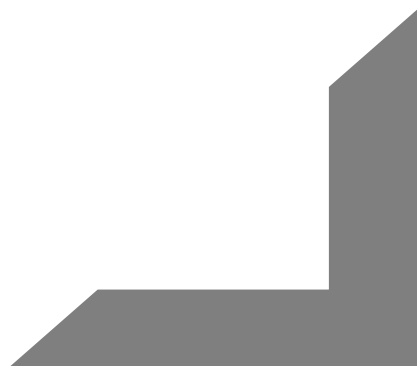
Se han desarrollado algunos estudios sobre reformación catalítica de las naftas mediante el simulador COMSOL Multiphysics, tal es el caso de un trabajo sobre modelación matemática para evaluar el perfil de temperatura y el aumento de la temperatura durante el proceso de regeneración del catalizador en un reactor de lecho fijo de flujo radial en donde se compararon los datos obtenidos en la simulación con datos industriales y se demostró la coincidencia entre ambos (Mehraban, 2019).

Otro estudio sobre modelación de un reactor para el proceso de reformación catalítica de las naftas mediante simulación computacional CFD en COMSOL para predecir el comportamiento del sistema de reactores de flujo axial. El modelo cinético que utilizaron fue el desarrollado por Smith y, de acuerdo con sus resultados, demostraron el incremento en la producción de aromáticos e hidrógeno y el consumo de naftenos y parafinas (Pishnamazi, Taghvaie Nakhjiri y col., 2020).



CAPÍTULO III

METODOLOGÍA



Capítulo III: Metodología

La etapa teórica del proyecto consiste en la simulación de un reactor 3D del proceso de reformación catalítica de las naftas tipo CCR, utilizando el software COMSOL Multiphysics® y Excel para comprobación de resultados, habiendo seleccionado previamente un modelo cinético apropiado para el proceso de reformación.

De acuerdo con el proceso de reformación catalítica de regeneración continua, fue propuesto en 2011 un modelo cinético conformado por un grupo de 24 componentes de la nafta de alimentación al proceso de reformación catalítica que incluye parafinas, naftenos y aromáticos, con un total de 71 reacciones químicas y 24 ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden (Ancheyta, 2011).

3.1 Geometría del reactor

El diseño consta de tres reactores apilados que se han simulado de manera independiente. Se diseñó previamente uno de los cuatro reactores del proceso de reformación catalítica de regeneración continua. La geometría interna del reactor fue desarrollada con base en los esquemas realizados por UOP (UOP, 2001). El sistema consiste en una tubería de entrada por donde se distribuye la mezcla de hidrocarburos a una serie de tubos perforados conocidos como *scallops*, dispuestos sobre la superficie interna del reactor. El flujo de hidrocarburos entra en contacto con el catalizador y, posteriormente fluye hacia el exterior del reactor por la tubería central. En la parte superior del reactor se localiza un banco de tubos sostenidos por una brida por donde fluye la carga de catalizador y es distribuida alrededor del tubo central.

Las dimensiones del reactor son mostradas en la Tabla 3.1. En la Tabla 3.2 se presenta la propuesta para las dimensiones de las tuberías de entrada y salida de mezcla de hidrocarburos y de catalizador. Cabe mencionar que dichas dimensiones son susceptibles a modificación según sea pertinente durante el desarrollo del proyecto.

Tabla 3.1. Dimensiones del reactor (Saeedi y Iranshahi 2017).

Reactor	Diámetro (m)	Longitud (m)
1	2.19	8.5
2	2.35	10.35
3	2.53	12.1

Tabla 3.2. Dimensiones propuestas para componentes del reactor.

<i>Parámetro</i>	<i>Reactor 1</i>	
	Diámetro (m)	Longitud (m)
Tubería salida de mezcla de HC	0.4	5
Tubería entrada de mezcla de HC	0.4	0.8
Tubería entrada de catalizador	0.2	3.5
Scallops	0.1	5.5

Cabe mencionar que se construyó el reactor en COMSOL Multiphysics con los elementos internos llevando a cabo simulación de flujo de fluidos utilizando aire como fluido, y para el análisis térmico y cinético se trabajó con un reactor simplificado debido a la demanda del recurso computacional.

3.2. Mallado de la geometría

Una vez concluida la geometría del reactor, se procede a generar una malla en el diseño, en donde el software divide el modelo en partes pequeñas de formas sencillas llamadas elementos, que están conectadas entre sí formando puntos denominados nodos. Este tipo de estudio es conocido como análisis de elementos finitos, en donde se considera al modelo como una red de elementos interconectados. Entre más fina sea la malla, las aproximaciones serán más cercanas a la realidad. La malla seleccionada fue de tipo normal, ya que es la que permitió realizar el equipo computacional.

3.3. Modelo cinético

Como primera propuesta, se eligió un modelo cinético de 32 componentes y 84 reacciones químicas y se aplicó el método Runge-Kutta utilizando Excel para resolver el modelo matemático. Sin embargo, no se encontraron resultados coherentes en las concentraciones de las especies químicas, por lo que se decidió cambiar el modelo cinético. En el Anexo I se incluyen las familias de especies químicas que se trabajaron, las ecuaciones ordinarias diferenciales de primer orden que se resolvieron y los gráficos de concentraciones obtenidos.

El modelo cinético es parte fundamental para una representación más aproximada del proceso real de reformado catalítico de nafta, por lo que se seleccionó un modelo compuesto por 24 componentes para la simulación del reactor. El modelo subdivide la mezcla de alimentación de nafta en parafinas, isoparafinas, naftenos y aromáticos, considerando grupos de átomos entre 6 y 11 átomos de carbono (Ancheyta, 2014). El modelo matemático fue desarrollado en COMSOL

Multiphysics® y comparado con un modelo desarrollado en Microsoft Excel®. La Tabla 3.3 muestra los componentes y la concentración a la entrada de cada reactor.

Tabla 3.3 . Concentraciones iniciales (Ancheytal, 2011)

Compuesto	Formula	Abreviación	mol/m ³
Benceno	C_6H_6	A6	0.8
Tolueno	C_7H_8	A7	3.22
Etilbenceno	C_8H_{10}	A8	4.71
Propilbenceno	C_9H_{12}	A9	4.21
Butilbenceno	$C_{10}H_{14}$	A10	2.7
Pentilbenceno	$C_{11}H_{16}$	A11	0.3
Metilciclopentano	C_6H_{12}	MCP	0.42
Ciclohexano	C_6H_{12}	N6	3.21
Cicloheptano	C_7H_{14}	N7	5.8
Ciclooctano	C_8H_{16}	N8	4.71
Ciclononano	C_9H_{18}	N9	3.56
Ciclodecano	$C_{10}H_{20}$	N10	0.6
Cicoundecano	$C_{11}H_{22}$	N11	0.4
Metano	CH_4	P1	0
Etano	C_2H_6	P2	0
Propano	C_3H_8	P3	0
Butano	C_4H_{10}	P4	0
Pentano	C_5H_{12}	P5	3.8
Hexano	C_6H_{14}	P6	4.4
Heptano	C_7H_{16}	P7	3.2
Octano	C_8H_{18}	P8	6.36
Nonano	C_9H_{20}	P9	5.09
Decano	$C_{10}H_{22}$	P10	2.97
Undecano	$C_{11}H_{24}$	P11	2.2

3.4. El catalizador

Se utilizó COMSOL Multiphysics para dibujar la geometría de una partícula de catalizador del proceso de reformación catalítica de las naftas de regeneración continua, en donde generalmente se emplean catalizadores bimetalicos de platino soportados en alúmina. Se realizó el análisis hidrodinámico para conocer los perfiles de velocidad de flujo de la nafta alrededor de la partícula. De igual forma se incluyó la cinética química para conocer los perfiles de concentración en la partícula del catalizador.

3.5. Modelo hidrodinámico y modelo térmico

El resolutor de modelos tridimensionales de COMSOL Multiphysics® se basa en las ecuaciones de Navier-Stokes y las ecuaciones de energía para resolver la hidrodinámica y el modelo térmico del sistema. En las ecuaciones de conservación de masa, se asume que la transferencia de masa es cero entre las fases gaseosa y sólida. Las ecuaciones 1 y 2 representan cada fase.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \phi_s) + \nabla \cdot (\rho_s \phi_s u_s) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \phi_g) + \nabla \cdot (\rho_g \phi_g u_g) = 0 \quad (2)$$

Donde,

$$\phi_s = 1 - \phi_g \quad (3)$$

La ecuación de continuidad para la mezcla,

$$\nabla \cdot [\phi_g u_g + u_s(1 - \phi_g)] = 0 \quad (4)$$

La ecuación de momento,

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \mu \nabla^2 u \quad (5)$$

Para el modelo térmico, la fase sólida se considera como estado estacionario sin convección de calor y con pérdida de calor por reacciones endotérmicas. Se presenta mediante la ecuación 6.

$$\rho_s C_p \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla T_s) \quad (6)$$

Para la fase gaseosa, se considera como un fluido newtoniano e incompresible. Hay transferencia de calor por convección y conducción. Está representado por la ecuación 7.

$$\rho_g C p_g \frac{\partial T_g}{\partial t} \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \quad (7)$$

En la simulación, el catalizador se consideró como un medio poroso a través del cual pasa la mezcla de hidrocarburos. Para el medio poroso se trabaja con la ecuación de Brinkman,

$$\frac{\rho}{\epsilon} \left((u \cdot \nabla) \frac{u}{\epsilon} \right) = \nabla \cdot \left[-\rho + \frac{\mu}{\epsilon} (\nabla u + (\nabla u)^T) \cdot \left(u k^{-1} + \beta |u| + \frac{Q}{\epsilon^2} \right) u + F \right] \quad (8)$$

La Tabla 3.4 presenta valores iniciales para los parámetros considerados en la simulación.

Tabla 3.4. Valores iniciales (Iranshahi, 2014)

Parámetro	Valor numérico	Unidad
Alimentación de nafta	233,637.01	kg/h
Temperatura de entrada	798.15	K
Presión de entrada	595	kPa
Distribución catalizador Reactor 1	20	wt %
Distribución catalizador Reactor 2	30	wt %
Distribución catalizador Reactor 3	50	wt %

3.6. Cálculo del número de octano

De acuerdo con Albahari y colaboradores, el número de octano para una mezcla de hidrocarburos puede ser calculado con la siguiente expresión.

$$RON = a + b(T) + c(T)^2 + d(T)^3 + e(T)^4 \quad (9)$$

Donde RON es el número de octano investigativo, $T = T_b/100$ correspondiente a la temperatura proporcionada por el método ASTM D86 a 50% de volumen, y a, b, c, d y e son coeficientes para la estimación del RON, proporcionados en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5. Coeficientes para la estimación de RON (Albahri y col, 2002).

Familia	a	b	c	d	e
n-Parafinas	92.809	-70.97	-53	20	10
i-Parafinas	98.757	-39.8825	132	-200	75
Naftenos	77.536	471.59	-418	100	0
Aromáticos	119	144.8	-12	0	0

Una vez calculado el RON para cada grupo de hidrocarburos (n-parafinas, i-parafinas, naftenos y aromáticos), se calcula el RON total mediante la siguiente expresión.

$$RON = x_{NP}(RON)_{NP} + x_{IP}(RON)_{IP} + x_N(RON)_N + x_A(RON)_A \quad (10)$$

En donde,

X_{NP} Fracción mol de n-parafinas

X_{IP} Fracción mol de i-parafinas

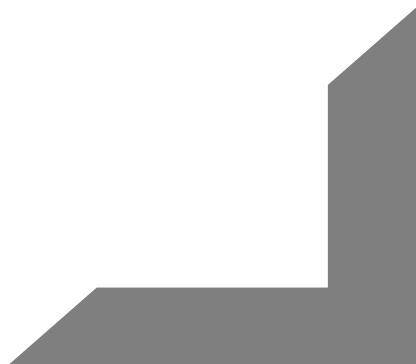
X_N Fracción mol naftenos

X_A Fracción mol de aromáticos



CAPÍTULO IV

RESULTADOS



Capítulo IV: Resultados

4.1. Geometría del reactor

En la Figura 12 se muestra la configuración interna del reactor. En la Figura 13 se presenta el banco de tubos por donde fluye la carga de catalizador entre un reactor y otro para ser distribuido por todo el cuerpo del reactor. Los tubos van sujetos por una brida y, por lo general, el banco se conforma de entre 12 y 14 tubos. En las Figuras 4.1 y 4.2 se muestran los scallops, que son semi-tuberías colocadas en todo el rededor de la pared interna del reactor y por medio de los cuales fluye la carga de hidrocarburos al atravesar por la pared perforada que caracteriza a cada scallop. Una vez que la carga atraviesa los scallops se pone en contacto con el catalizador que va fluyendo a lo largo del reactor y finalmente pasa a través de la pared perforada del tubo central para salir del reactor y entrar en un horno para acondicionar la temperatura de la nafta antes de ingresar al siguiente reactor. En la Figura 4.3 se presenta la carcasa del reactor 1.

En la Figura 4.4 se muestra el sistema de reactores del proceso CCR que se dibujó y se utilizó para la modelación cinética, térmica e hidrodinámica del proceso de reformación. El conjunto de reactores cuenta con tuberías de entrada y salida de flujo de hidrocarburos y un medio poroso en el interior considerado como el catalizador. La simplificación se realizó debido a la limitante del recurso computacional.

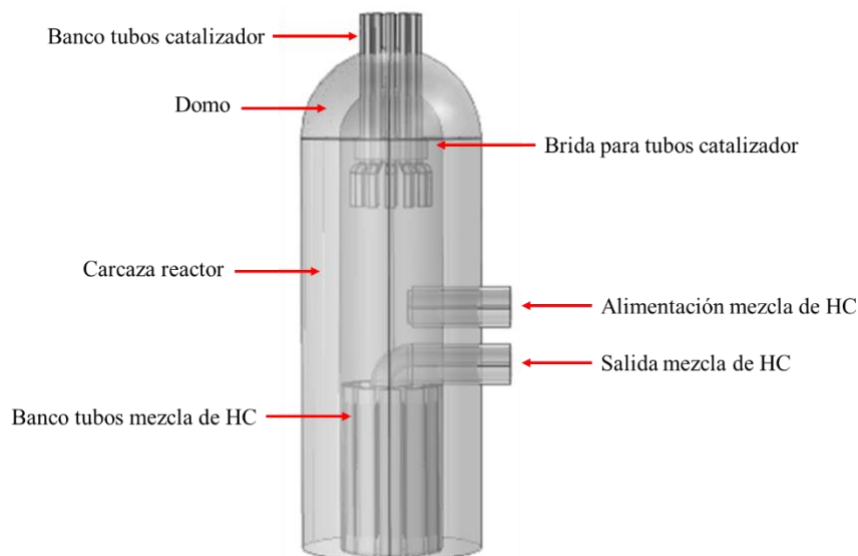


Figura 4.1. Elementos internos del reactor diseñado en COMSOL

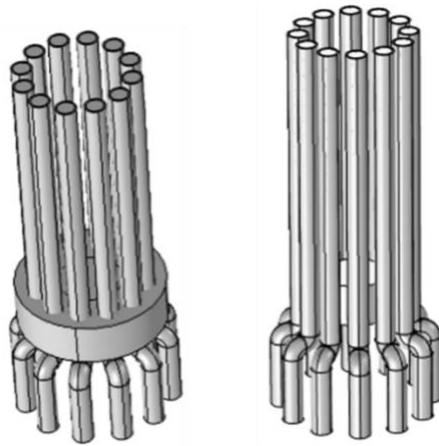


Figura 4.2. Banco de tuberías para catalizador

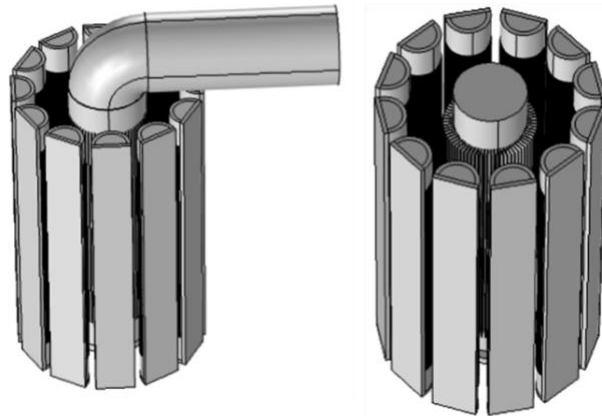


Figura 4.3. Banco de tubos para alimentación de catalizador (scallops)

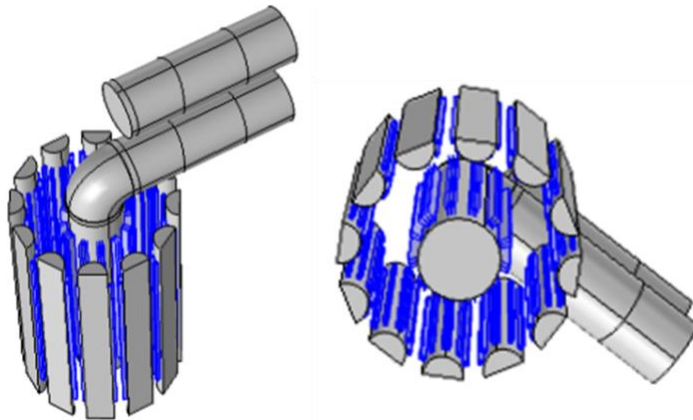


Figura 4.4. Perforaciones en scallops

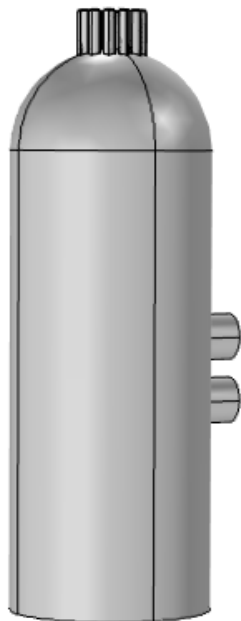


Figura 4.5. Reactor 1



Figura 4.6. Sistema de reactores del proceso CCR

4.2. Mallado

Se seleccionaron dos tipos de malla, una fina para las ranuras del tubo central y *scallops* y la otra gruesa para el resto de los componentes. El resultado se muestra en la Figura 4.7.

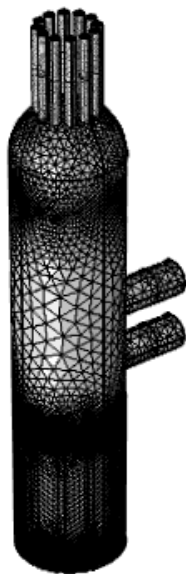


Figura 4.7. Mallado del Reactor 3D

4.3. Análisis de flujo

Se generó un estudio en COMSOL para determinar la mecánica de fluidos. En las Figuras 4.8, 4.9 y 4.10 se presenta el campo de velocidad de la nafta dentro de cada reactor. Se puede apreciar en los tres casos que la velocidad del flujo es mayor en la entrada y en la salida del reactor y disminuye en el centro y en la parte superior debido a que se encuentra con la carga de catalizador, lo que significa que la carga de hidrocarburo tendrá más tiempo de contacto con la lluvia catalítica.

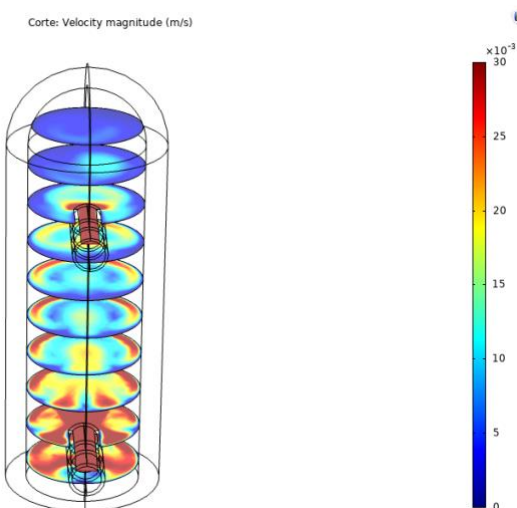


Figura 4.8. Flujo de nafta en Reactor 1

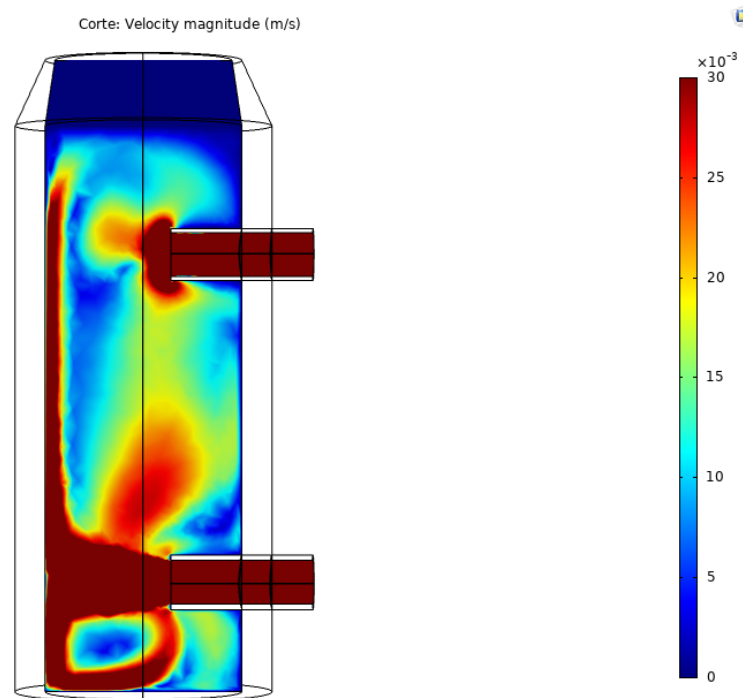


Figura 4.9. Flujo de nafta en Reactor 2.

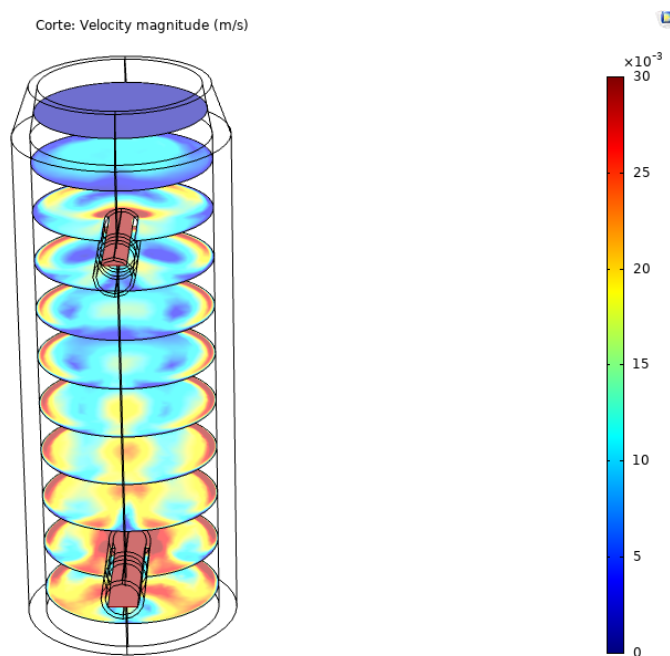


Figura 4.10. Flujo de nafta en Reactor 3.

4.4. Modelo térmico

En las Figuras 4.11, 4.12 y 4.13 se presentan los perfiles de temperatura de los reactores 1, 2 y 3, respectivamente. En los tres reactores la temperatura más alta se encuentra a la entrada, debido a que previo a que inicie el proceso de transformación, se ajusta la temperatura a 773 K

aproximadamente y dependiendo de los parámetros operativos establecidos en cada refinería. En los tres reactores la temperatura a la salida es menor, principalmente en el Reactor 1, en donde se llevan a cabo las principales reacciones endotérmicas del proceso. En el Reactor 3 se observa la temperatura más alta a la salida debido a que se ejecutan algunas reacciones exotérmicas como el hidrocracking.

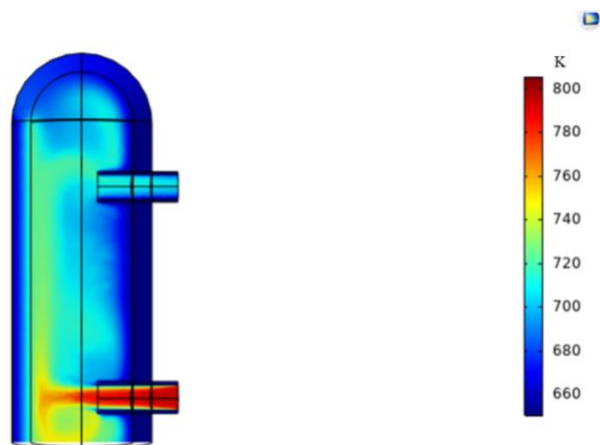


Figura 4.11. Perfil de temperatura Reactor 1.

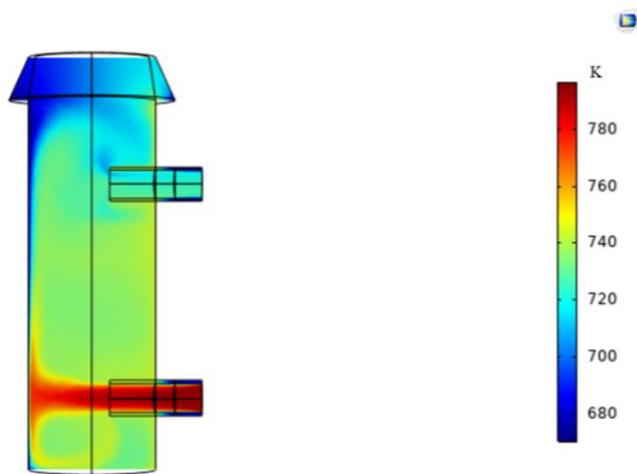


Figura 4.12. Perfil de temperatura del Reactor 2.

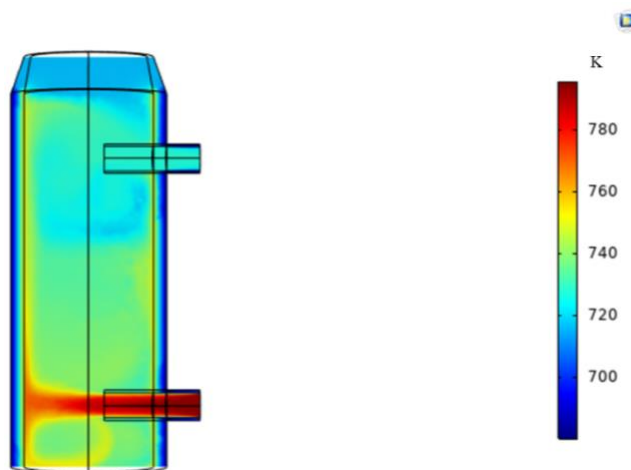


Figura 4.13. Perfil de temperatura Reactor 3.

4.5. Modelo Cinético

Para la modelación cinética se construyó en COMSOL Multiphysics® un sistema de tres reactores 3D. El modelo cinético que se desarrolló, así como su descripción se muestra en el Anexo 1. La simulación del modelo muestra las concentraciones de los diferentes grupos de hidrocarburos presentes en la nafta sobre el avance de la mezcla en el catalizador. Las Figuras 4.14, a la 33 presentan la concentración de parafinas, naftenos y aromáticos para cada reactor. Como se observa, la concentración de aromáticos aumenta, mientras que la concentración de naftenos y parafinas disminuye en cada reactor. En el primer y segundo reactor se llevan a cabo reacciones de deshidrogenación, y en el tercer reactor se producen las reacciones más difíciles, deshidrociclación de parafinas y alquilación de aromáticos, por lo que es necesario que en el tercer reactor circule el 50% del catalizador.

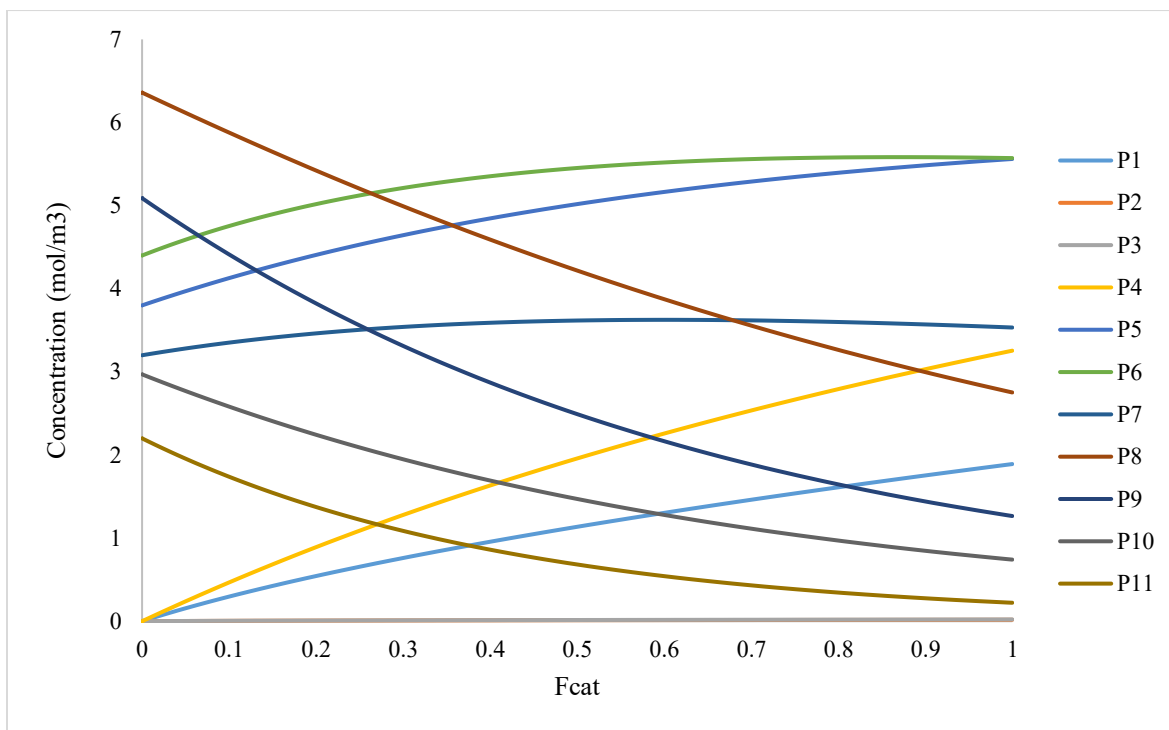


Figura 4.14. Concentración de parafinas en Reactor 1.

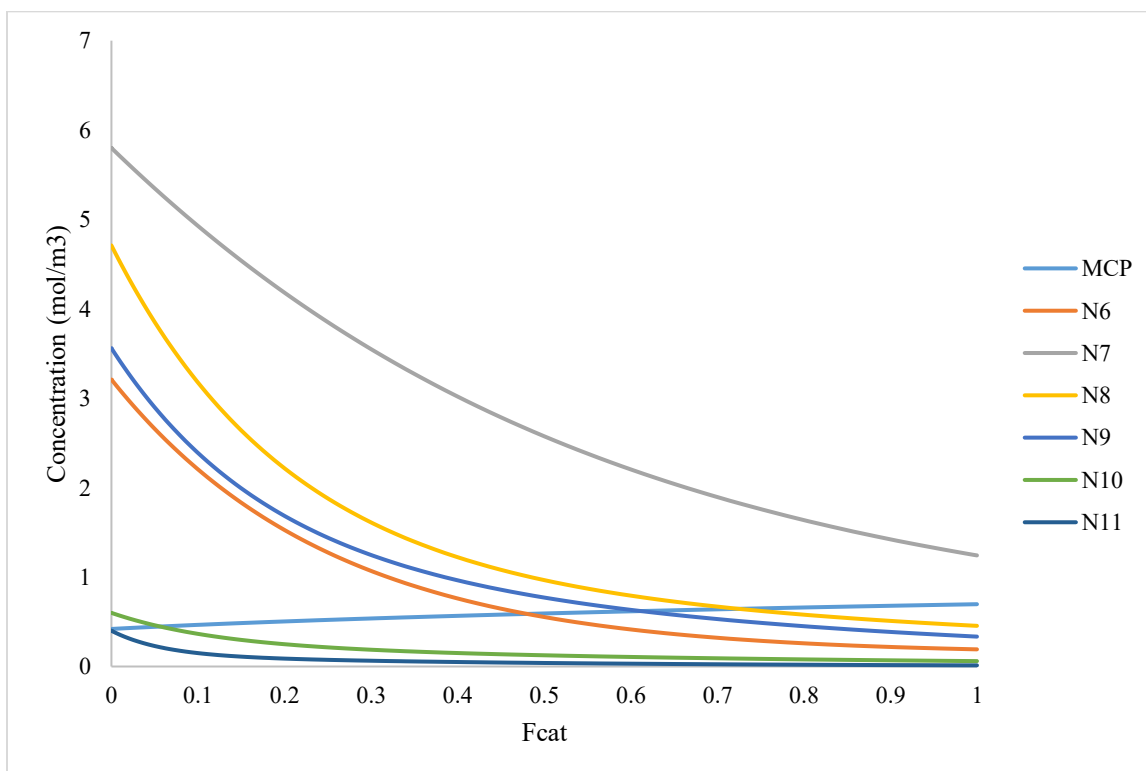


Figura 4.15. Concentración de naftenos en Reactor 1.

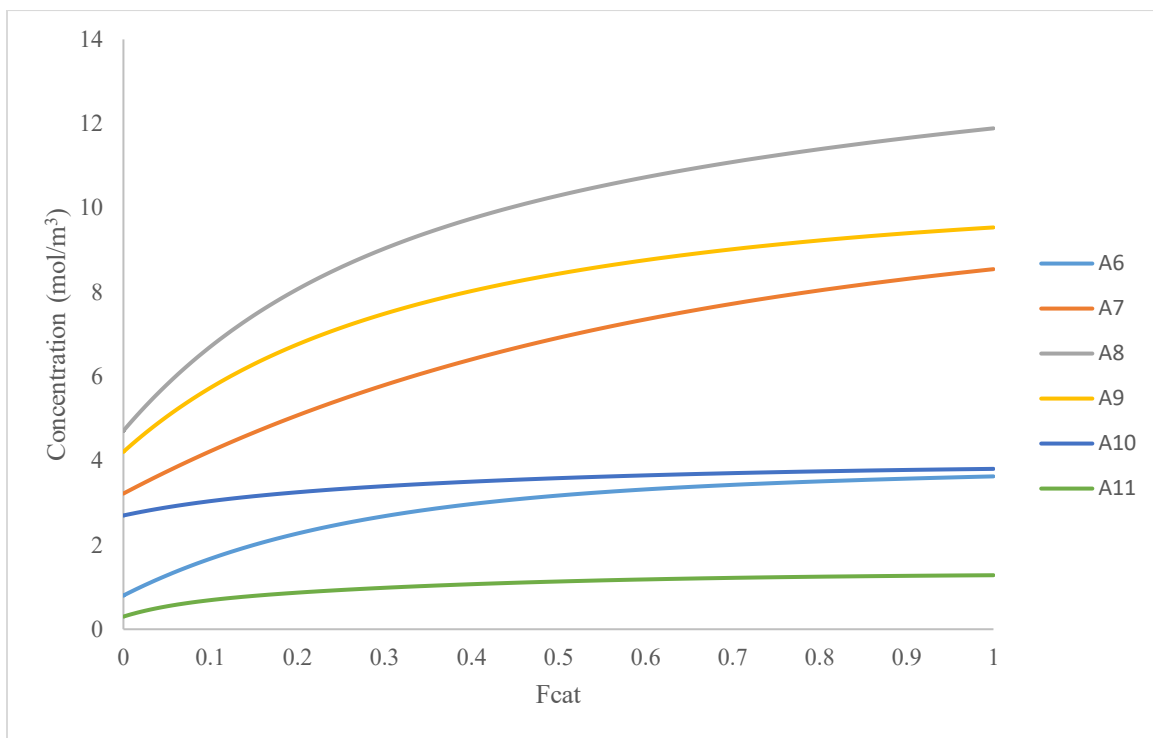


Figura 4.16. Concentración de aromáticos en Reactor 1

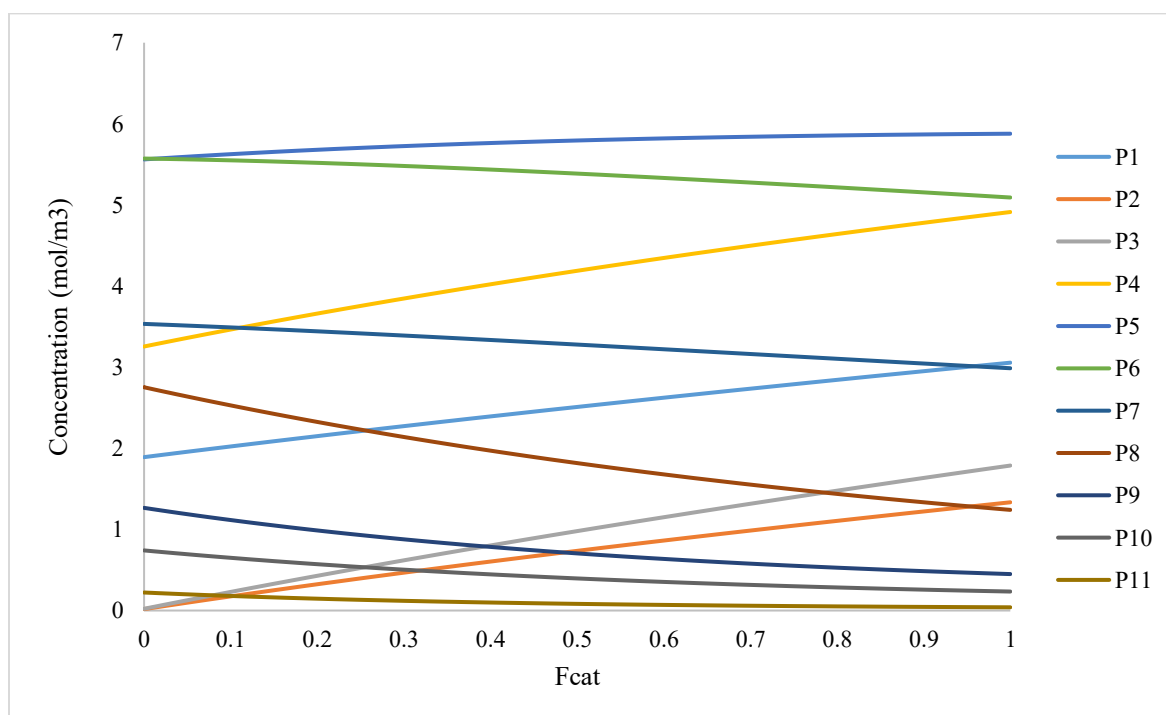


Figura 4.17. Concentración de parafinas en Reactor 2.

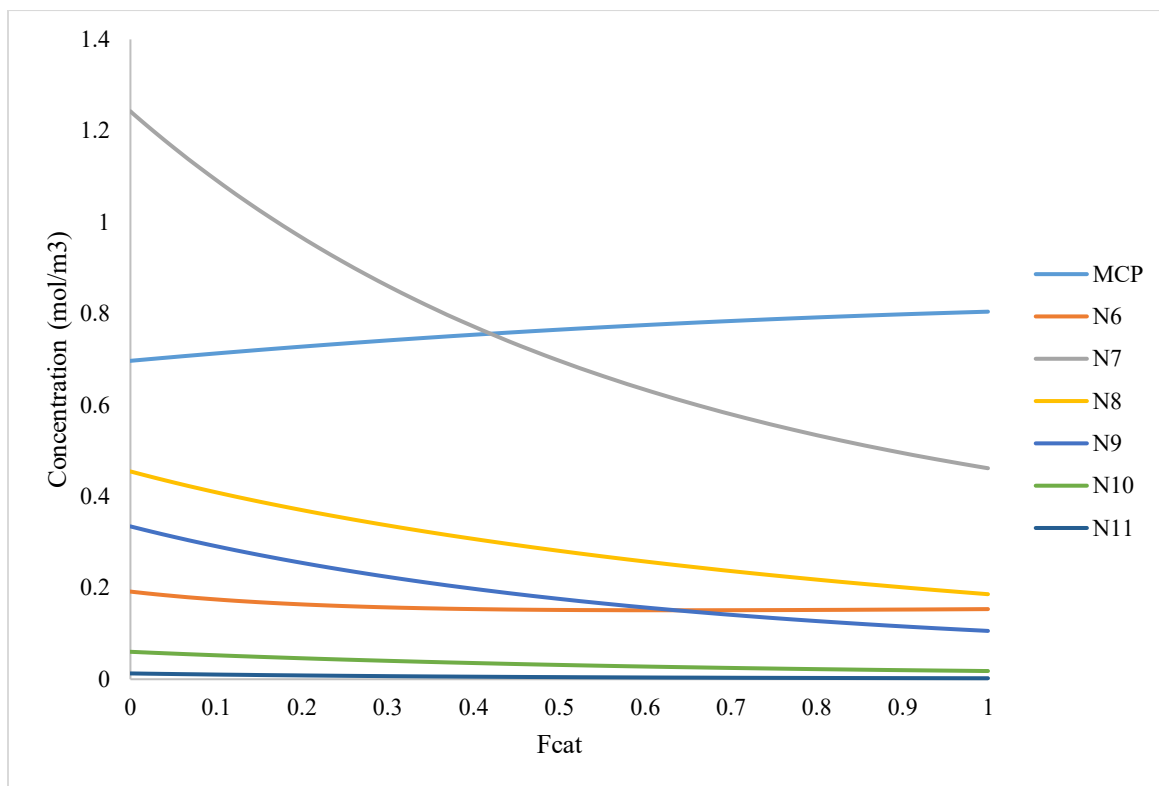


Figura 4.18. Concentración de naftenos en Reactor 2

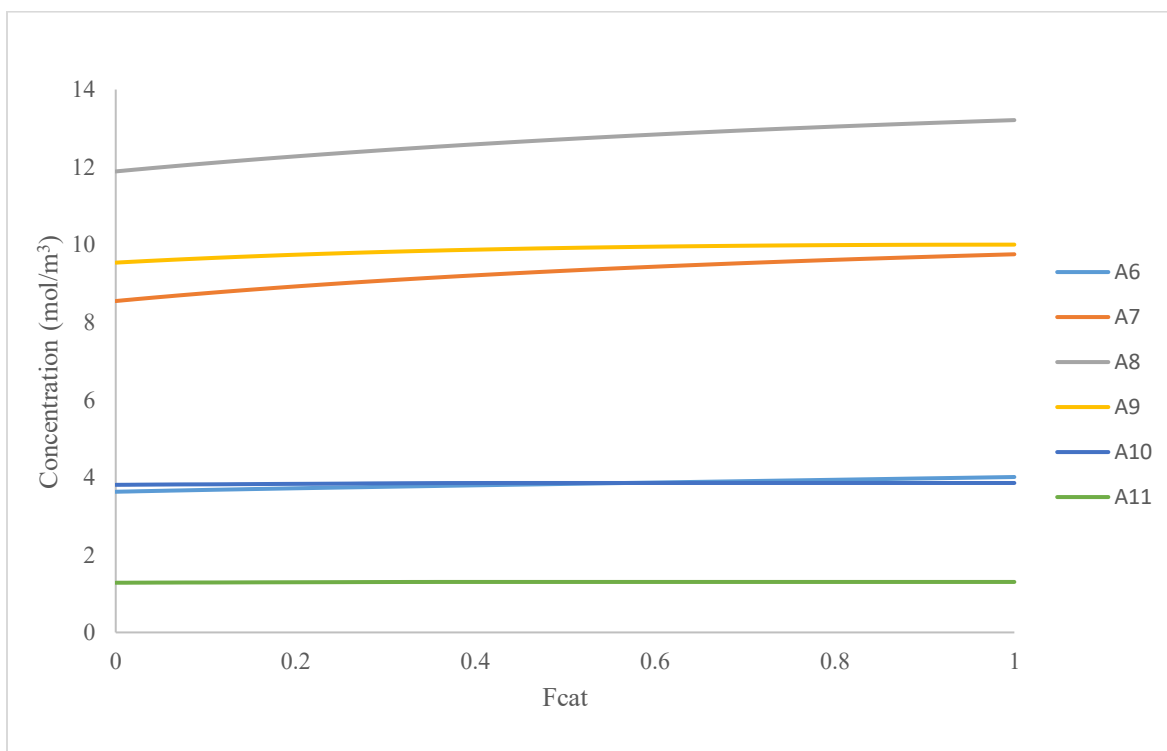


Figura 4.19. Concentración de aromáticos en Reactor 2.

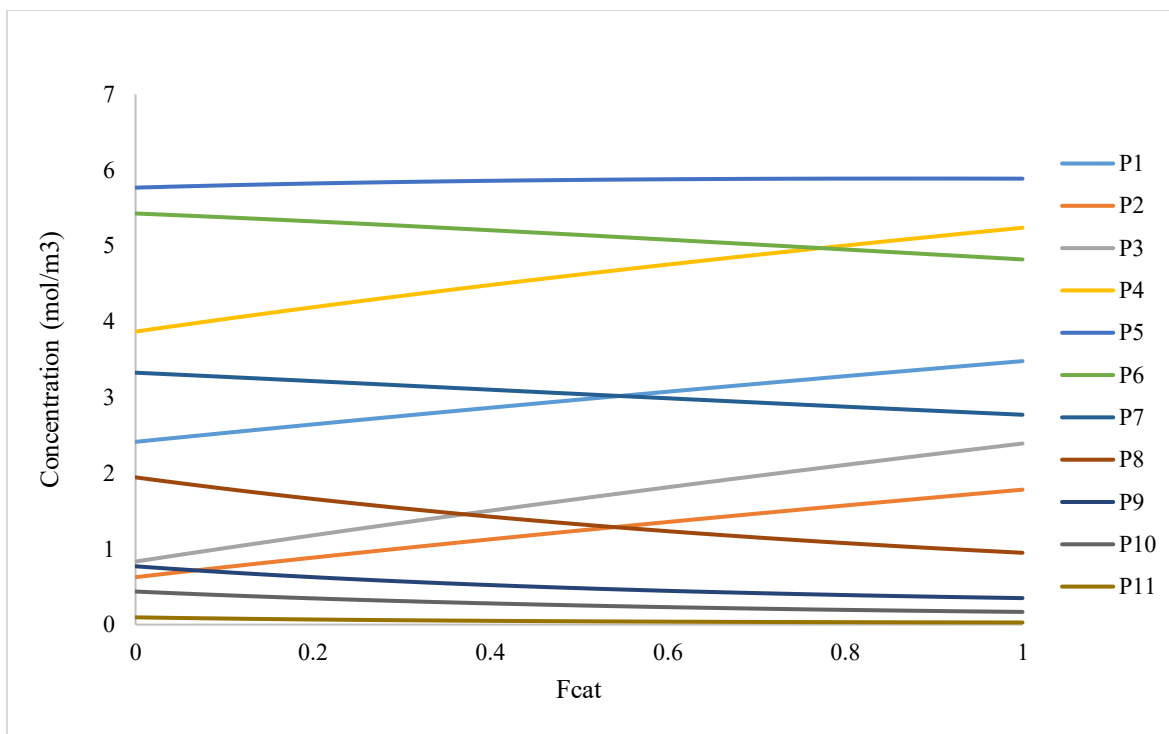


Figura 4.20. Concentración de parafinas en Reactor 3.

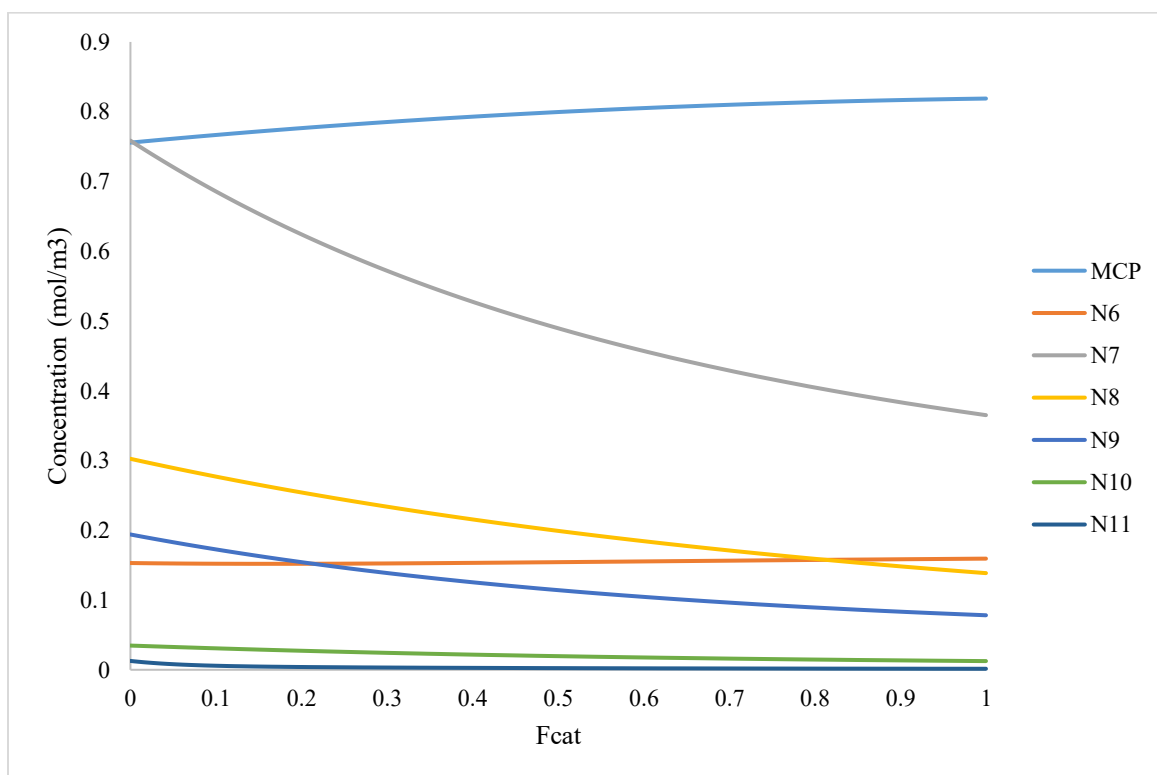


Figura 4.21. Concentración de naftenos en Reactor 3

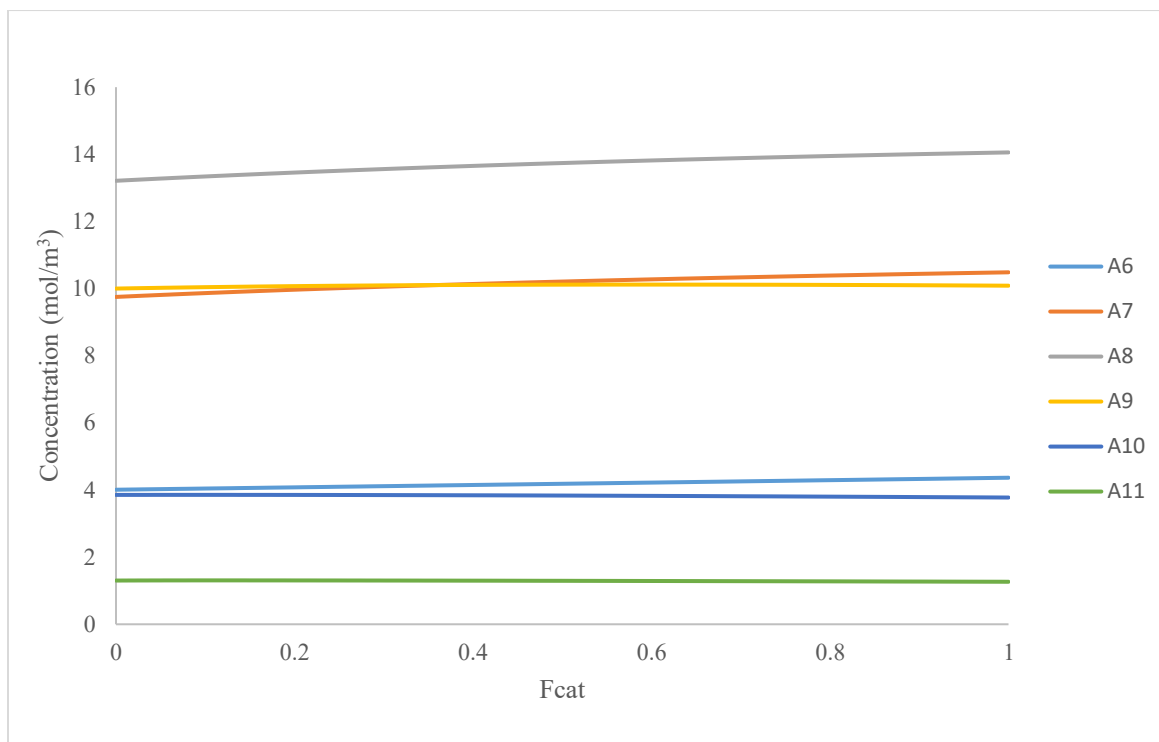


Figura 4.22. Concentración de aromáticos en Reactor 3

Las Figuras 4.23 a 4.30 muestran los perfiles de concentración de algunos de los compuestos de parafinas, naftenos y aromáticos distribuidos en toda la geometría del reactor. Se puede observar que las parafinas de ocho átomos de carbono reducen su concentración por las reacciones de hidrocracking, mientras que las de 4 átomos de carbono se forman en las mismas reacciones. Por otro lado, los naftenos como el metilciclopentano se consumen en los reactores al formar compuestos aromáticos. Y, finalmente, la concentración de aromáticos incrementa y se enriquece a la salida de cada reactor porque son los compuestos más deseables en el proceso de reformación al aumentar el número de octano de la mezcla.

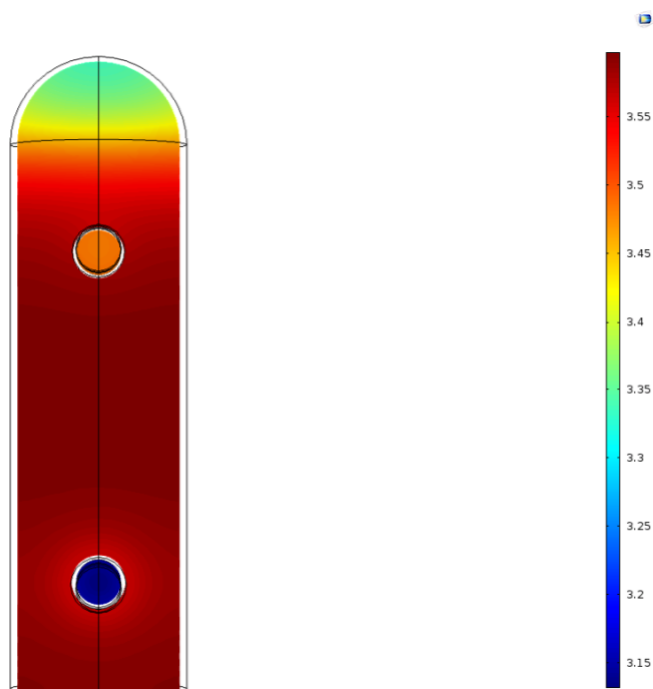


Figura 4.23. Concentración de octano en Reactor 1.

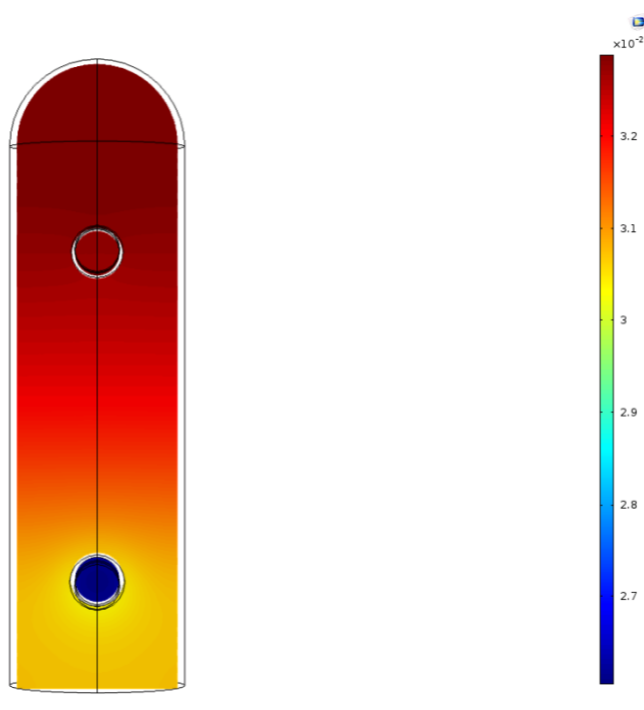


Figura 4.24. Concentración de butano en Reactor 1

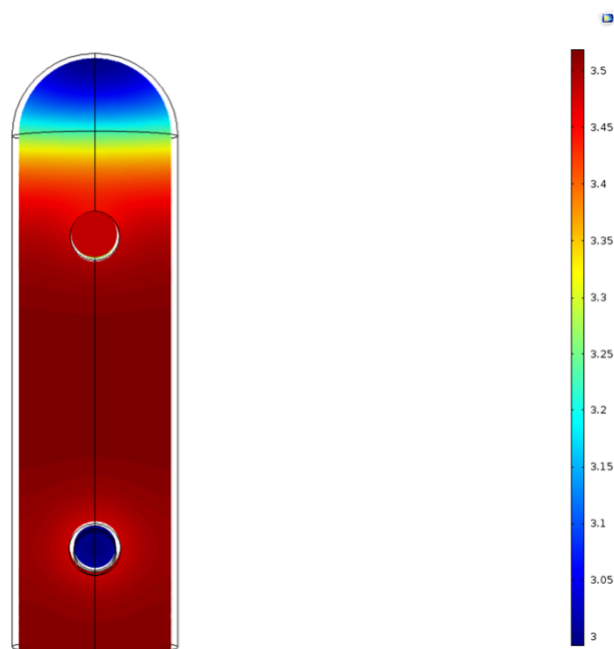


Figura 4.25. Concentración de butilbenceno en Reactor 1.

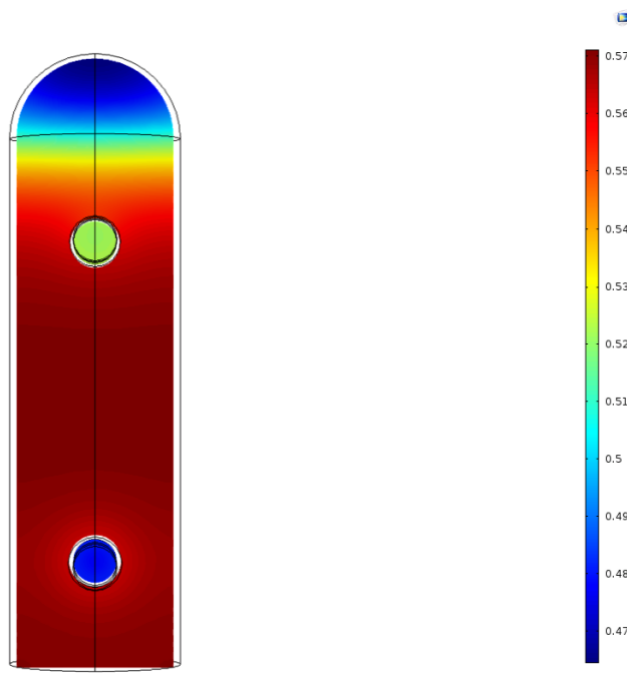


Figura 4.26. Concentración de metilciclopentano en Reactor 1

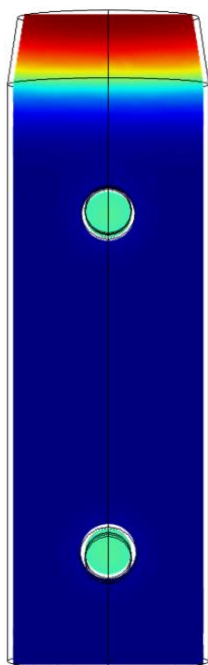


Figura 4.27. Concentración de octano en Reactor 2

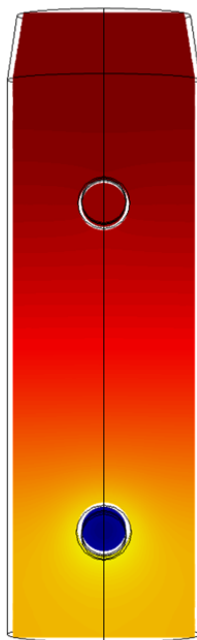


Figura 4.28. Concentración de butano en Reactor 2.

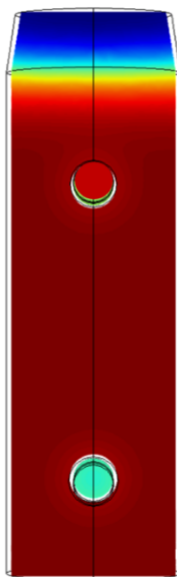


Figura 4.29. Concentración de butilbenceno en Reactor 2.

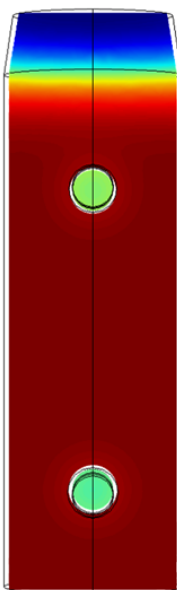


Figura 4.30. Concentración de metilciclopentano en Reactor 2.

4.6. El catalizador

En la Figura 4.31 se muestra el perfil de velocidad de una partícula catalítica de catalizador Pt-Re/ Al_2O_3 , que fue simulado en COMSOL Multiphysics. Se consideró una esfera porosa de 2 mm de diámetro. Se puede apreciar que la velocidad de flujo disminuye cuando se pone en contacto con la partícula e incrementa a medida que se aleja de ella. En la Figura 4.32 se presentan los perfiles de concentración dentro de dicha partícula catalítica.

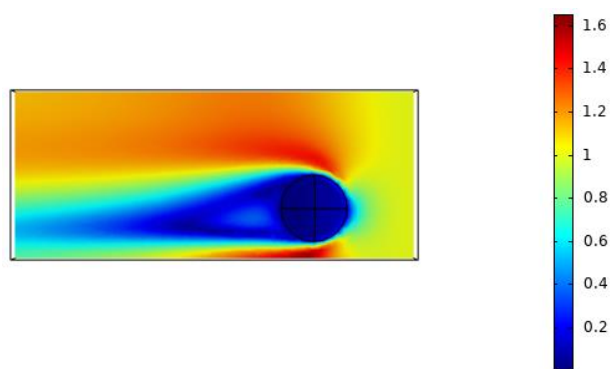


Figura 4.31. Perfil de velocidad de flujo alrededor de una partícula de catalizador (m/s)

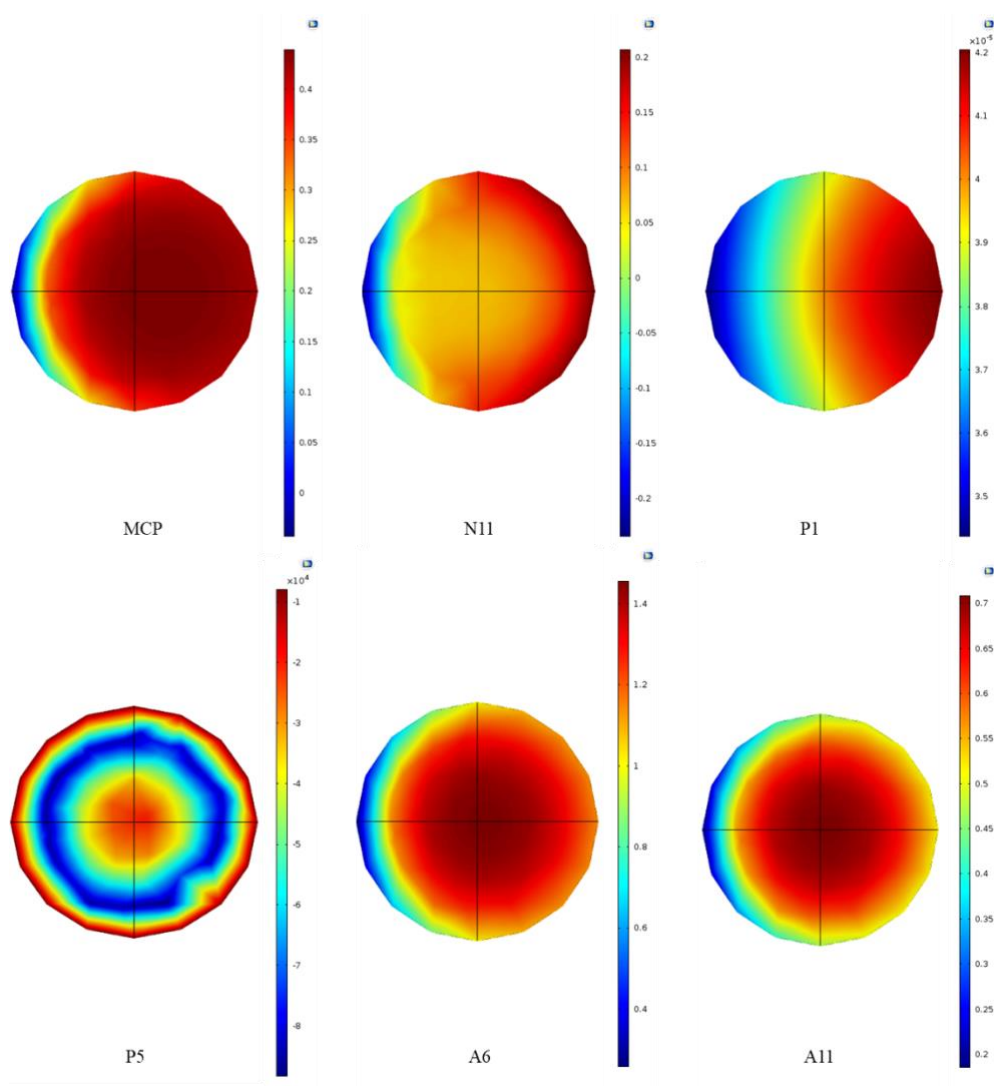


Figura 4.32. Perfiles de concentración dentro de una partícula catalítica.

4.7. Número de octano

De acuerdo con las ecuaciones 9 y 10 y con $T_b = 101,5\text{ °C}$ (ASTM D86), se calculó el RON para la mezcla a la salida de cada reactor, el cual se muestra en la figura muestra 43.

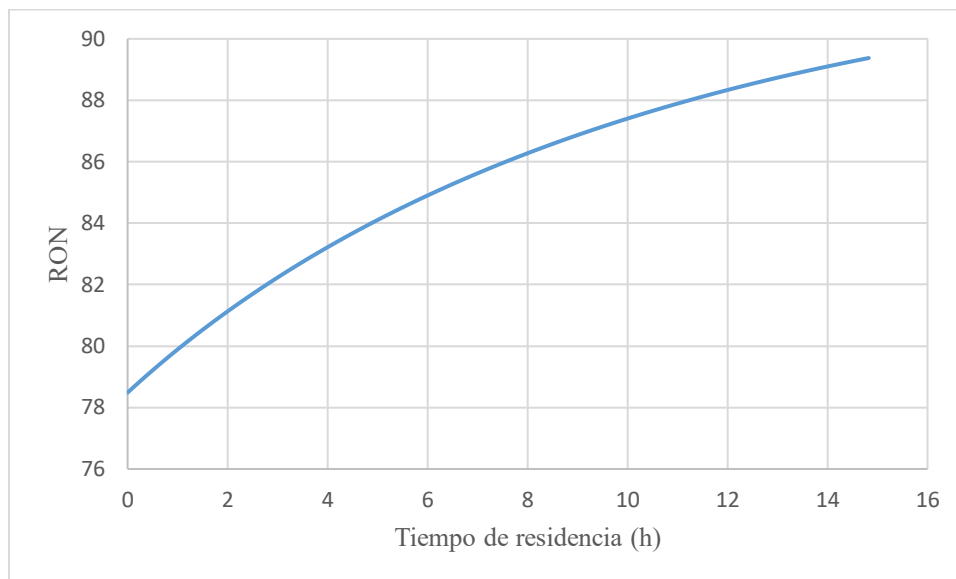


Figura 4.33. Número de octano de la mezcla

4.8. Comparación de temperaturas

Reactor 1.

En la Figura 4.33 se presentan los perfiles de temperatura presentes en el Reactor 2, estableciendo tres diferentes valores para la temperatura inicial.

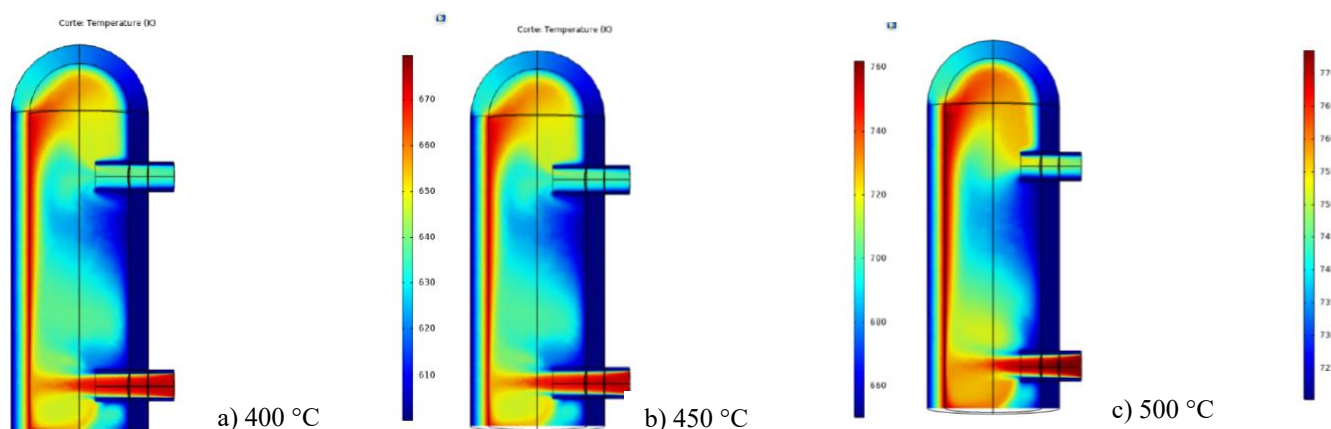


Figura 4.34. Perfiles de temperaturas en el Reactor 1

Reactor 2.

En Figura 4.34 se presentan los perfiles de temperatura presentes en el Reactor 2, estableciendo tres diferentes valores para la temperatura inicial.

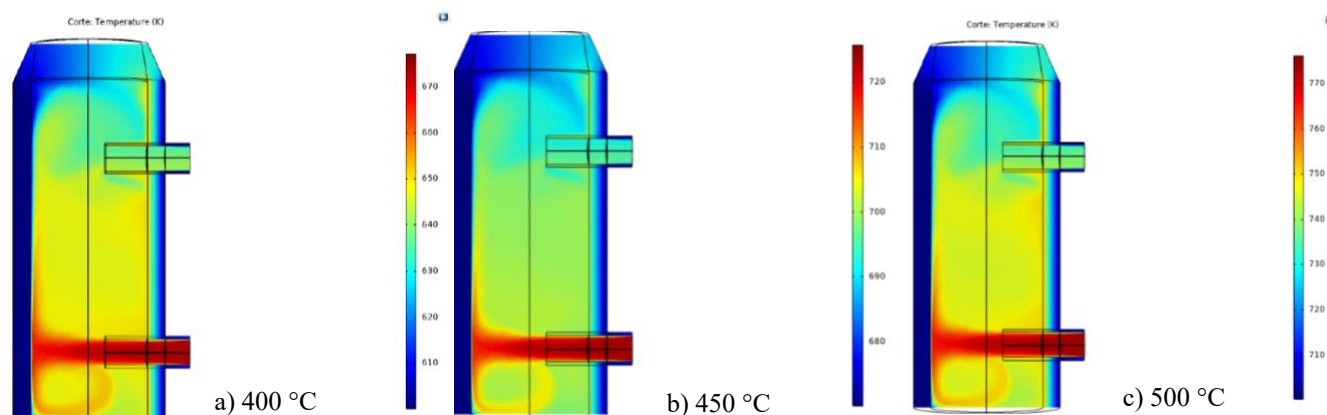


Figura 4.35. Perfiles de temperatura en Reactor 2.

Reactor 3.

En Figura 4.35 se presentan los perfiles de temperatura presentes en el Reactor 2, estableciendo tres diferentes valores para la temperatura inicial.

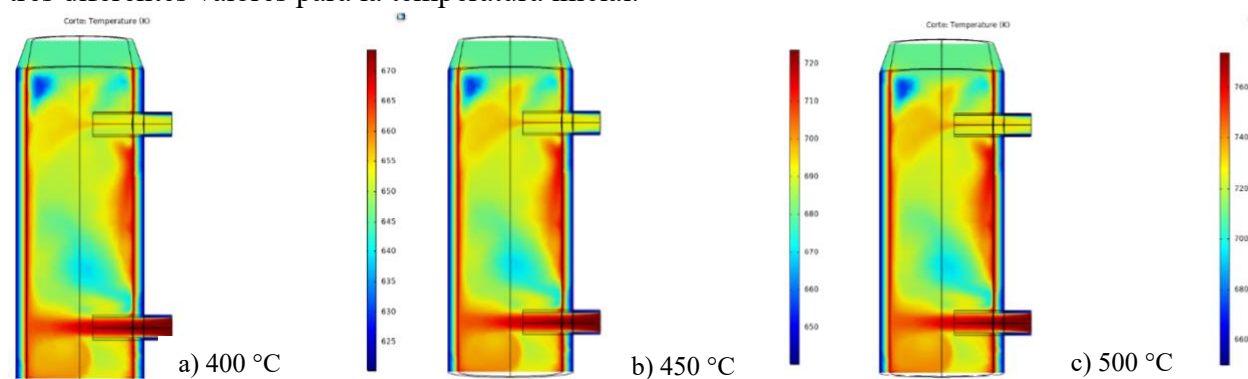
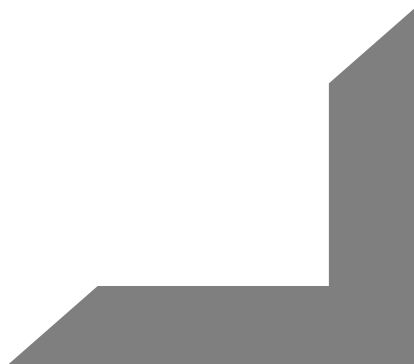


Figura 4.36. Perfiles de temperatura Reactor 3.



CAPÍTULO V

ESCENARIOS DE MITIGACIÓN DE GEI



Capítulo V: Escenarios de mitigación de GEI

Es importante demostrar que, al incrementar el número de octano de la nafta, aumenta la eficiencia del combustible y, por lo tanto, disminuye el consumo de gasolina y se reducen las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI), lo cual se presenta en éste capítulo.

5.1. Introducción

Los gases de efecto invernadero (GEI) son la causa principal del calentamiento global. Su aumento en la atmósfera proviene de las actividades humanas durante los últimos 150 años. A nivel mundial, la mayor fuente de emisiones de GEI proviene de la quema de combustibles fósiles para la producción de electricidad y para generar el combustible de los medios de transporte (EPA, 2021). La categoría energía es responsable del 76 % las emisiones de GEI en todo el mundo, de los cuales el 15 % corresponde al sector transporte (WRI, 2021) y cerca del 95 % de la energía utilizada para los vehículos tiene su origen en los combustibles fósiles (EPA, 2021).

En 2019 se registraron en el mundo más de 30 Gt de emisiones de CO₂ relacionadas con el sector energético (IEA, 2020), de las cuales 7.2 Gt de CO₂ corresponden al sector transporte, 24 % del total. Los autotransportes generaron el mayor número de emisiones del sector, al registrar 3.6 Gt de CO₂, que corresponde al 50 % de las emisiones totales (Teter, 2020).

El autotransporte ha crecido considerablemente en las últimas décadas a nivel mundial. De acuerdo con datos reportados en un estudio sobre incremento vehicular, se estima que su tasa anual de crecimiento llegará hasta 6 % para el año 2030 en países como Ecuador, Chile, República Dominicana y Egipto, mientras que para India y China el crecimiento será de 8 % y 11 % respectivamente. En México, se estima que la tasa de crecimiento anual para la flota vehicular será de 5 % para el año 2030 (Dargay, 2007), lo que implica un aumento en la demanda de combustible, especialmente de gasolina, y, por lo tanto, un incremento en las emisiones de GEI.

En la Sexta Comunicación Nacional ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático México informó la generación de 700 MT de CO₂ durante el año 2015, de las cuales, el 22.9 % fue emitido por el autotransporte. Es decir, más de 159 MT de CO₂ (INECC, 2018).

Estudios recientes indican que las emisiones globales provenientes del autotransporte serán de aproximadamente 2.5 GT de CO₂ para el año 2030 (IEA, 2020), mientras que en México se esperan

300 MT de CO₂ del transporte vial, de los cuales, aproximadamente el 30 % serán emitidos por vehículos a gasolina (Solís y Sheinbaum, 2016), debido al crecimiento vehicular de tecnología convencional.

5.1.1. *El rol de la gasolina en México y el mundo*

Mundialmente, los derivados del petróleo son la mayor fuente de energía para el transporte y la Perspectiva Energética Internacional, IEO por sus siglas en inglés, indica que su consumo reducirá gradualmente de un 96 % a un 88 % del año 2012 al 2040. Específicamente, el consumo mundial de gasolina de motor, será de 9 billones de *Petajoules* para el año 2040, por ser el tipo de combustible mayormente utilizado en el sector transporte (EIA, 2016). Coincidentemente, *British Petroleum* emitió una proyección del uso de combustibles para el autotransporte a nivel global, asumiendo que la gasolina continuará representando la principal fuente de energía con más del 90 % de participación, a pesar de la introducción de vehículos eléctricos, híbridos y a gas natural (BP, 2019).

A nivel nacional se espera que el sector transporte genere un consumo energético superior a los 4 mil *Petajoules* para el año 2040, de los cuales el 43 % será atribuido al uso de la gasolina (Solís y Sheinbaum, 2016).

En México, la gasolina es clasificada como *Magna*, o de bajo octanaje, y como *Premium*, o de alto octanaje. (CRE, 2017). En promedio, cerca del 81 % del consumo nacional de gasolina es del tipo *Magna* (SIE, 2019). Algunos investigadores sugieren que una de las principales diferencias entre ambos tipos de combustibles, es que la gasolina de bajo número de octano genera mayor cantidad de emisiones de GEI en comparación con la de alto octanaje. Un estudio realizado a gasolinas de 87 y 92 octanos indicó que las emisiones generadas por la gasolina de 92 octanos son menores en comparación con la de 87 octanos (Pérez, 2017).

5.1.2. *Beneficios de la gasolina de alto octanaje*

El rendimiento energético de los motores de gasolina puede ser medido utilizando el Número de Octano Investigativo (*RON*, por sus siglas en inglés) o mediante el Número de Octano del Motor (*MON*, por sus siglas en inglés) y ambos describen el poder antidetonante del combustible en diferentes condiciones. Se ha reportado que los motores que trabajan con un *RON* alto, a una relación de compresión más alta, presentan beneficios en la eficiencia del combustible, disminuyendo su consumo de gasolina en un mismo recorrido (Stradling, 2016).

Un estudio demostró, mediante la simulación de ciclos de conducción de un vehículo automotriz, que la demanda de gasolina puede disminuir de 4.5 a 6 % al sustituir la gasolina de 87 octanos por la gasolina de 92 octanos, atribuido a un aumento efectivo en la eficiencia del combustible del vehículo en carretera (Chow y Heywood, 2014).

Otro estudio dio a conocer los beneficios económicos y ambientales de usar gasolina de alto octanaje (98 octanos), mediante simulación de ciclos de manejo y análisis experimentales para estimar la reducción en el consumo de combustible. Se determinó que al utilizar un RON de 98 es posible disminuir el consumo de gasolina anual en un 4.4 % (Speth, 2014).

Leone y col. compararon los resultados de diferentes pruebas en vehículos utilizando gasolinas de 91 y 98 octanos y reportaron un aumento en la eficiencia del combustible del 4.4 %, con un ahorro del 1.1 % de las emisiones de CO₂ (Leone, 2015).

5.1.3. Compromisos de México ante el cambio climático

En 2012 se aprobó la Ley General de Cambio Climático en México, que establece estrategias de mitigación de gases de efecto invernadero por sector. Específicamente, para el sector autotransporte se proponen, entre otras medidas, la construcción de ciclovías, implementación de programas de movilidad sustentable en zonas urbanas para reducir el uso de automóviles particulares e impulsar la penetración tecnológica de vehículos eléctricos e híbridos, entre otras (Congreso de la Unión, 2012).

En el Acuerdo de París, firmado en 2016 y ratificado en Nueva York en 2017, México se comprometió a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en un 25 % para el año 2030 (SEMARNAT, 2019). Durante la 26ª Conferencia de las Partes de Naciones Unidas sobre Cambio Climático (COP26), Estados Unidos y la Unión Europea propusieron la reducción de las emisiones de metano en un 30 % para el año 2030, compromiso al cuál se unieron México y otros países (SRE, 2021).

Entre las estrategias de mitigación que ha propuesto el gobierno mexicano, aún no ha sido presentada una propuesta para reducir las emisiones de GEI provenientes del sector autotransporte aumentando la eficiencia energética mediante el mejoramiento del combustible. Por ello, el presente estudio tiene como objetivo calcular el potencial de mitigación de dos escenarios de emisiones GEI para el transporte vial en México aumentando el número de octano de la gasolina

con el incrementando la eficiencia energética del vehículo que sirva para justificar nuevas políticas energéticas en cuanto a la calidad de la gasolina Magna.

5.2. Desarrollo del Modelo de Estudio

El estudio fue realizado para el transporte vial con motor a gasolina en México. La flota vehicular se tomó de lo reportado en 2015 por el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC, 2018) y fue clasificada de acuerdo con el tipo de vehículo, su uso, y el tipo de gasolina que emplea, tal como se presenta en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1. Clasificación de la flota vehicular en México, año 2015.

<i>Tipo de vehículo</i>	<i>Uso</i>	<i>Tipo de gasolina</i>	<i>Número de vehículos</i>
Motocicleta	Particular	Magna	2,637,264
Automóvil	Particular	Magna	13,218,967
Automóvil	Particular	Premium	3,100,745
Automóvil	Taxi	Magna	555,291
Camioneta	Particular	Magna	4,703,448
Camioneta	Particular	Premium	1,103,278
Camioneta	Carga	Magna	3,951,453
Autobús	Transporte público	Magna	17
Camión menor a 3.8 Ton	Carga	Magna	983,793
Camión mayor a 3.8 Ton	Carga	Magna	113,368

Datos reportados por Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC, 2018).

Se asume que el consumo de gasolina Premium para motocicletas, taxis, camiones y autobuses es despreciable, por lo que, de acuerdo con el Balance Energético de la Secretaría de Energía, la gasolina Premium consumida fue distribuida entre automóviles y camionetas de uso particular tal como se muestra en el Cuadro I (SENER, 2015).

Se utilizó el simulador *LEAP*[®], por sus siglas en inglés, *Low Emissions Analysis Platform* (SEI, 2018), para calcular la demanda de gasolina y sus emisiones de GEI en el escenario inercial y los correspondientes a dos medidas de mitigación que se describen a continuación.

5.2.1. Escenario base

Para el caso de estudio, se seleccionó el año 2015 como año base para calcular las proyecciones hasta el año 2050. En la Tabla 5.2 se presentan los datos utilizados para la simulación en *LEAP*[®],

correspondientes a parque vehicular (INECC, 2018), recorrido promedio anual (IMT, 2018), eficiencia energética (IMT, 2015) y tasa de crecimiento anual promedio para cada tipo de vehículo (Solís y Sheinbaum, 2016).

Tabla 5.2. Parámetros utilizados para los cálculos

<i>Tipo de vehículo</i>	<i>Recorrido anual promedio¹ (km/vehículo)</i>	<i>Eficiencia energética² (MJ/km)</i>	<i>Tasa de crecimiento³ (%)</i>
Motocicleta	28,835	1.7956	4.00
Auto particular	12,487	2.4504	4.20
Taxi	76,650	2.4504	3.40
Camioneta pasajeros	14,600	3.1588	4.00
Camioneta carga	21,900	3.1588	2.03
Autobús	78,475	4.2590	1.00
Camión carga ligera	29,200	3.5586	4.40
Camión carga pesada	22,922	3.6000	2.90

¹ IMT, 2018

² IMT, 2015

³ Solís y Sheinbaum, 2016

De acuerdo con la Sexta Comunicación Nacional y Segundo Informe Bienal de Actualización ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (INECC, 2018), los factores de emisión de los compuestos considerados para la gasolina mexicana se presentan en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3. Factores de emisión de la gasolina

<i>Compuesto</i>	<i>Valor</i>
CO ₂	73.79116 Mt/TJ
CO	8000 kg/TJ
CH ₄	3.8 kg/TJ
N ₂ O	5.7 kg/TJ
NO _x	600 kg/TJ
SO ₂	13.84 kg/TJ
COVDM	1500 kg/TJ
Carbono negro	0.15 kg/TJ
PM 2.5	7.38 kg/TJ

INECC, 2018

5.2.2. Escenario de referencia BAU

En el escenario de referencia se calcula el crecimiento vehicular y la demanda energética sin considerar ningún cambio en las tasas de crecimiento, así como las correspondientes emisiones de

GEI para el año 2050, sin propuestas de mitigación. A este tipo de escenario se nombra habitualmente BAU, por sus siglas en inglés “Business as Usual”.

La flota vehicular por tipo de vehículo, i , a partir del año 2016 y hasta el año 2050 se calcula mediante la ecuación 11.

$$FV_{BAU,i} = NV_i * TCA_i \quad (11)$$

En donde $FV_{BAU,i}$ representa el número de vehículos i para un año en específico; NV_i es el número de vehículos i del año base y TCA_i es la tasa de crecimiento anual para cada vehículo i .

La ecuación 12 representa el cálculo de la demanda de combustible por año para el autotransporte a gasolina en México.

$$DC_{BAU,i} = FV_{BAU,i} * EEV_i * RPA_i \quad (12)$$

Donde $DC_{BAU,i}$ es la demanda de combustible para el tipo de vehículo i en MJ, $FV_{BAU,i}$ es la flota vehicular anual i del escenario BAU, EEV_i es la eficiencia energética de i en MJ/km y RPA_i es el recorrido promedio anual de i en km/vehículo.

5.2.3. Escenario de referencia Probable

Además del escenario de referencia BAU, se consideró un segundo escenario de referencia que considera la penetración tecnológica en México de vehículos eléctricos e híbridos, considerado en el uso de motocicletas, automóviles y camionetas de pasajeros. Se tomaron como referencia los porcentajes de ventas registrados a partir del año 2015 para el cálculo de la tasa de crecimiento de autos eléctricos e híbridos, los cuales se presentan en la Tabla 5.4 (AMIA, 2021).

Tabla 5.4. Porcentajes de ventas de autos eléctricos e híbridos en México

Año	% de ventas
2016	0.03
2017	0.04
2018	0.06
2019	0.09
2020	0.08
2021	0.13
AMIA, 2021	

La flota vehicular por tipo de vehículo, i , a partir del año 2016 y hasta el año 2050 considerando la introducción de autos eléctrico e híbridos se calcula mediante la ecuación 13.

$$FV_{PRO,i} = NV_i * TCA_i * (100 - PEH) \quad (13)$$

En donde $FV_{PRO,i}$ representa el número de vehículos i , y $-PEH$ representa el porcentaje de ventas anual de vehículos eléctricos e híbridos.

La ecuación 14 representa el cálculo de la demanda de combustible por año para el autotransporte a gasolina en México.

$$DC_{PRO,i} = FV_{PRO,i} * EEV_i * RPA_i \quad (14)$$

Donde $DC_{PRO,i}$ es la demanda de combustible para el tipo de vehículo i en MJ.

5.2.4. Escenario de mitigación posible

Para reducir la cantidad de emisiones de GEI provenientes de la gasolina en el autotransporte, se propone aumentar la eficiencia energética de los vehículos mediante el mejoramiento en la calidad de la gasolina, es decir incrementar el número de octano del combustible. En este escenario se establece la eliminación de la producción de gasolina Magna (87 octanos) y que toda la oferta de gasolina sea únicamente de calidad Premium (92 octanos).

Para el cálculo de la demanda energética y las emisiones de GEI, se asumieron los siguientes criterios:

- La proyección se realiza del año 2015 al 2050, iniciando la sustitución de combustible Magna por Premium a partir del año 2020.
- El aumento de 5 octanos en la gasolina es proporcional a un decremento en la demanda de combustible del 5 % anual para los vehículos a gasolina en México.

Las ecuaciones 15 y 16 representan el cálculo de la demanda de combustible por año para cada i a partir del escenario BAU y del escenario probable, respectivamente, para el escenario de mitigación posible.

$$DC_{POS,BAU,i} = FV_{BAU,i} * EEV_i * RPA_i * (100 - 5 \%) \quad (15)$$

$$DC_{POS,PRO,i} = FV_{PRO,i} * EEV_i * RPA_i * (100 - 5 \%) \quad (16)$$

Donde $DC_{Pos,BAU,i}$ es la demanda de combustible para el tipo de vehículo i a partir del escenario BAU, mientras que $DC_{Pos,PRO,i}$ es la demanda de combustible para cada i a partir del escenario Probable, en MJ.

5.2.5. Escenario de mitigación Deseable

Este escenario de mitigación consiste en aumentar el número de octano de toda la gasolina ofertada en México a 98 octanos, tal y como se utiliza en algunos países de la Unión Europea. Al igual que en el primer escenario, se asume la disminución en la demanda energética a medida que el número de octano aumenta.

Para el cálculo de la demanda energética y las emisiones de GEI, se asumieron los siguientes criterios:

- La proyección se realiza del año 2015 al 2050, iniciando la sustitución de combustible Magna y Premium por combustible de 98 octanos a partir del año 2020.
- Se considera una disminución de 8 % en la demanda energética al incrementar el octanaje a 98.

Las ecuaciones 17 y 18 representan el cálculo de la demanda de combustible por año para cada i a partir del escenario BAU y del escenario probable, respectivamente, para el escenario de mitigación Deseable.

$$DC_{Des,BAU,i} = FV_{BAU,i} * EEV_i * RPA_i * (100 - 8 \%) \quad (17)$$

$$DC_{Des,PRO,i} = FV_{PRO,i} * EEV_i * RPA_i * (100 - 8 \%) \quad (18)$$

Donde $DC_{Des,BAU,i}$ es la demanda de combustible del escenario de mitigación posible para el tipo de vehículo i a partir del escenario BAU, mientras que $DC_{Des,PRO,i}$ es la demanda de combustible para cada i a partir del escenario Probable, en MJ.

5.3. Resultados del análisis de escenarios

Como se mencionó previamente, en este trabajo se definen dos escenarios de referencia para ser comparados con las medidas de mitigación propuestas. En el primer escenario se considera que no se altera el estado actual, y se denomina escenario BAU. El segundo escenario contempla la introducción de autos híbridos y autos eléctricos, denominado escenario probable.

En la Figura 5.1 se muestra la proyección del parque vehicular en México que prácticamente se triplica en el año 2050. Se aprecia que los autos particulares que utilizan gasolina tipo Magna siguen representando la mayoría dentro del país.

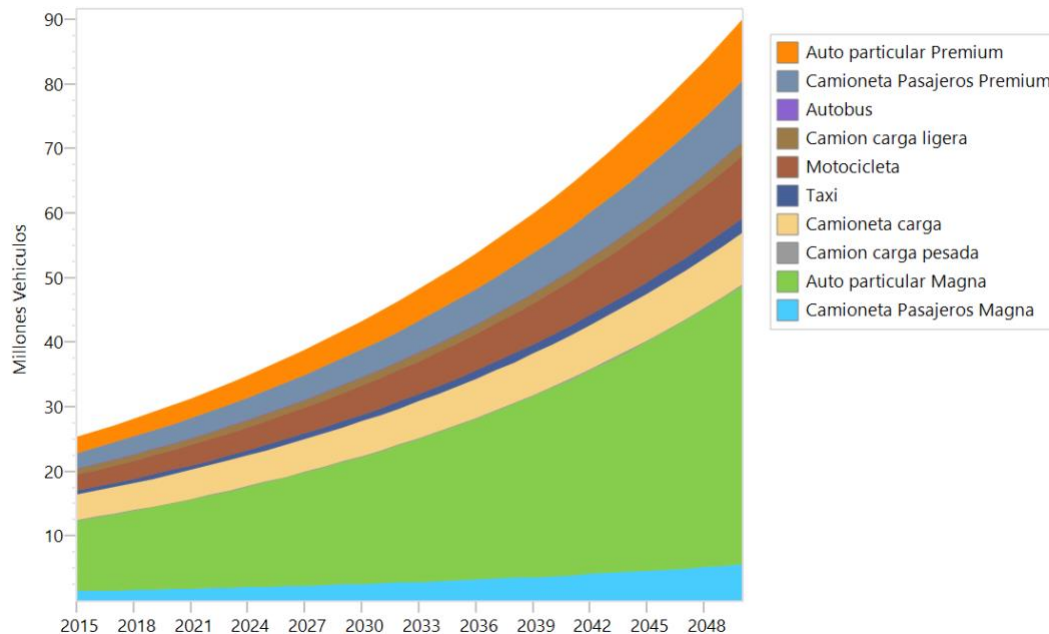


Figura 5.1. Demanda de vehículos a gasolina en México.

5.3.1. Demanda energética

De acuerdo con el escenario BAU, al no considerar la penetración de tecnologías de autos híbridos y eléctricos, la demanda energética del autotransporte a gasolina en México aumentará de 1,526 PJ en 2025 a 3,586 PJ en el año 2050, tal como se muestra en la Figura 5.2-a. En términos de volumen, el consumo de gasolina para el 2025 será de 46,045 hectómetros cúbicos y la demanda esperada para el año 2050 será de 108,200 hectómetros cúbicos. La gasolina Magna será la de mayor consumo, principalmente en autos particulares.

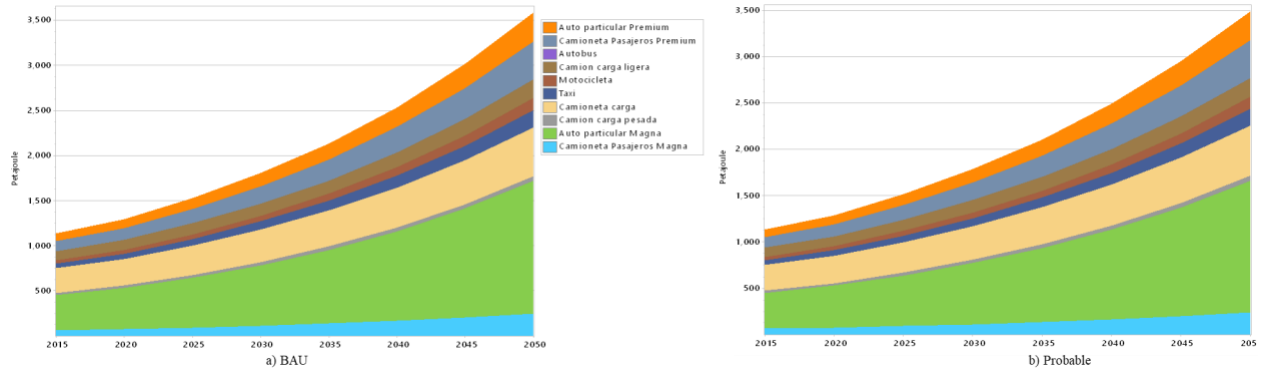


Figura 5.2. Demanda energética en escenarios inerciales BAU y Probable.

Para el escenario inercial Probable, la demanda energética crece ligeramente por debajo de la demanda proyectada en el escenario BAU, es decir, en 2025 la demanda de energía será de 1,516 PJ, mientras que para el 2050 la demanda será de 3,490 PJ. La causa se debe a la introducción de tecnologías de autos eléctricos e híbridos consideradas en el escenario Probable. En términos de volumen, para el 2050 se estarán consumiendo 105,000 hectómetros cúbicos de gasolina a partir del escenario Probable. La Figura 5.2-b muestra la demanda energética del escenario Probable.

En el escenario de mitigación Posible se generaron las demandas de combustible creadas a partir del escenario BAU y a partir del escenario Probable, tal como se muestra en los incisos a) y b) de la Figura 5.3, respectivamente. Las áreas blancas indican el potencial de mitigación posible para cada año y por tipo de vehículo. Para el año 2050 se tendrá un potencial de mitigación total de 234 PJ, lo que equivale a 7,070 hm^3 a partir del escenario BAU, mientras que, partiendo del escenario inercial Probable, el potencial de mitigación será de 134 PJ, que equivalen a 4,034 hm^3 totales de gasolina.

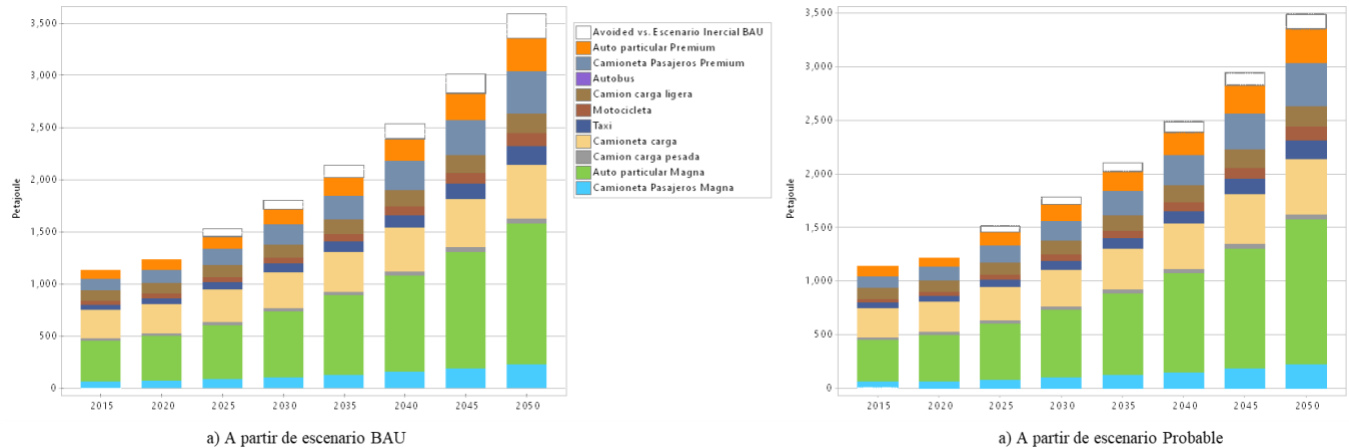


Figura 5.3. Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación Posible.

El potencial de mitigación de demanda energética en el escenario Deseable es de 10,550 hm³ totales de gasolina partiendo del escenario BAU, mientras que, a partir del escenario Probable, se pueden mitigar hasta 7,700 hm³ totales de gasolina para el año 2050. La Figura 5.4 muestra las gráficas con el potencial de mitigación para el escenario deseable.

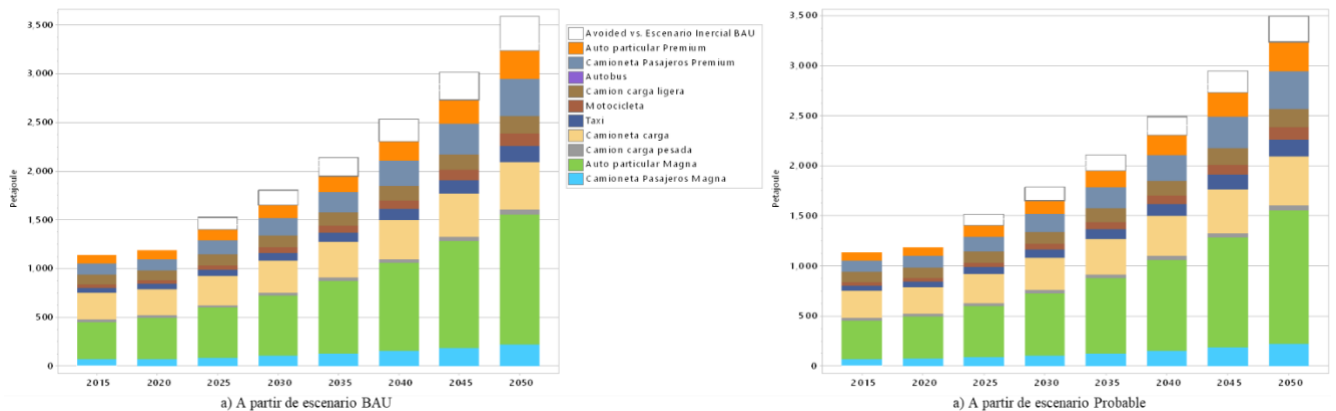


Figura 5.4 Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación Deseable

5.3.2. Emisiones de GEI y otros contaminantes

La demanda energética de combustible en los vehículos a gasolina está directamente relacionada con las emisiones de GEI y otros contaminantes a la atmósfera. Entre mayor sea el consumo de combustible, mayor será la cantidad de contaminantes emitidos. Las Figuras 5.5 presentan las emisiones de GEI proyectadas hacia el año 2050 en los escenarios inerciales. Si no se considera la introducción de autos eléctricos e híbridos, es decir, en el escenario BAU, el sector transporte a gasolina emitirá 265 millones de toneladas de CO₂ para el año 2050 (Figura 5.5-a), mientras que, en el escenario Probable, las emisiones de CO₂ serán de 257 millones de toneladas (Figura 5.5-B).

La generación de emisiones de GEI a partir del escenario BAU serán mayores debido a que no considera autos eléctricos, sin embargo, es necesario considerar que la introducción de dichos vehículos en México aumentará gradualmente. Cabe mencionar que, para ambos escenarios inerciales, las emisiones de CO₂, NO₂ y CH₄ provienen principalmente de los autos particulares que utilizan gasolina magna, debido a que representan la mayor parte del parque vehicular. El resto de los gases contaminantes corresponde a las emisiones de CO, COVDM, NO_x, SO₂, PM_{2.5} y carbono negro, tal como se muestra en la Figura 6.6, en donde puede apreciarse que predominan las emisiones de CO, con un total de hasta 28.7 millones de toneladas generadas para el año 2050, lo que resulta preocupante debido al impacto ambiental que conlleva, ya que es precursor de ozono.

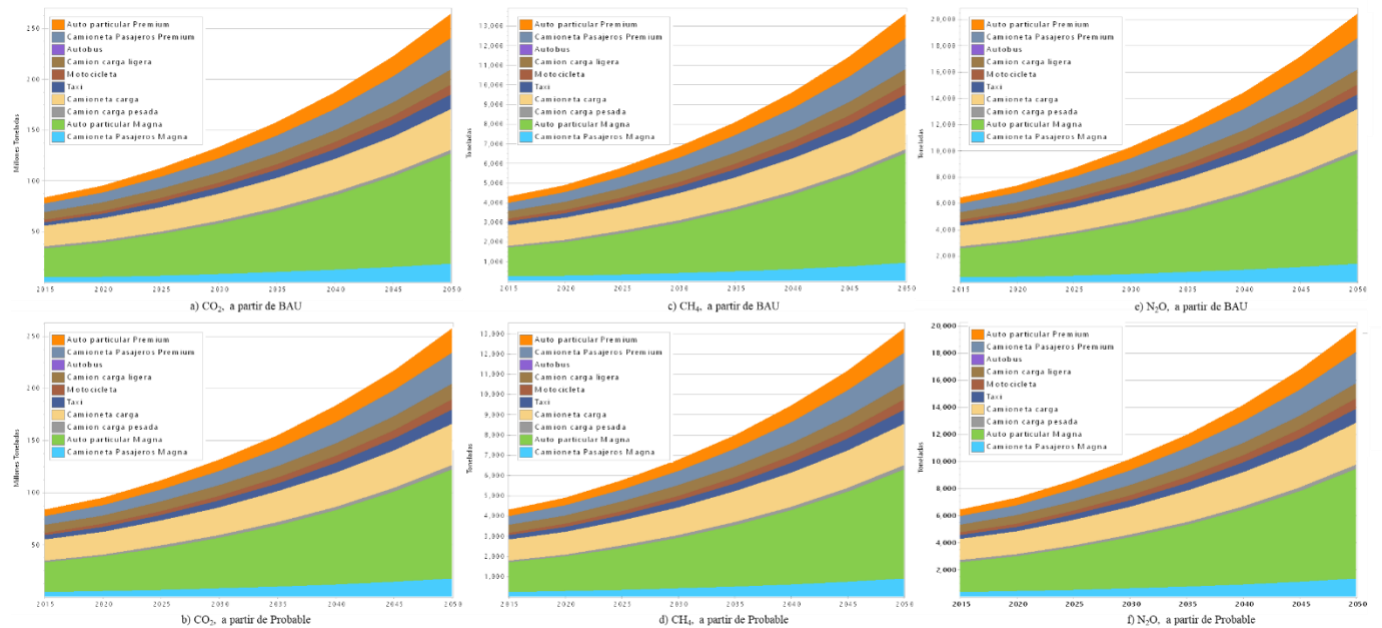


Figura 5.5. Emisiones de GEI en escenarios inerciales.

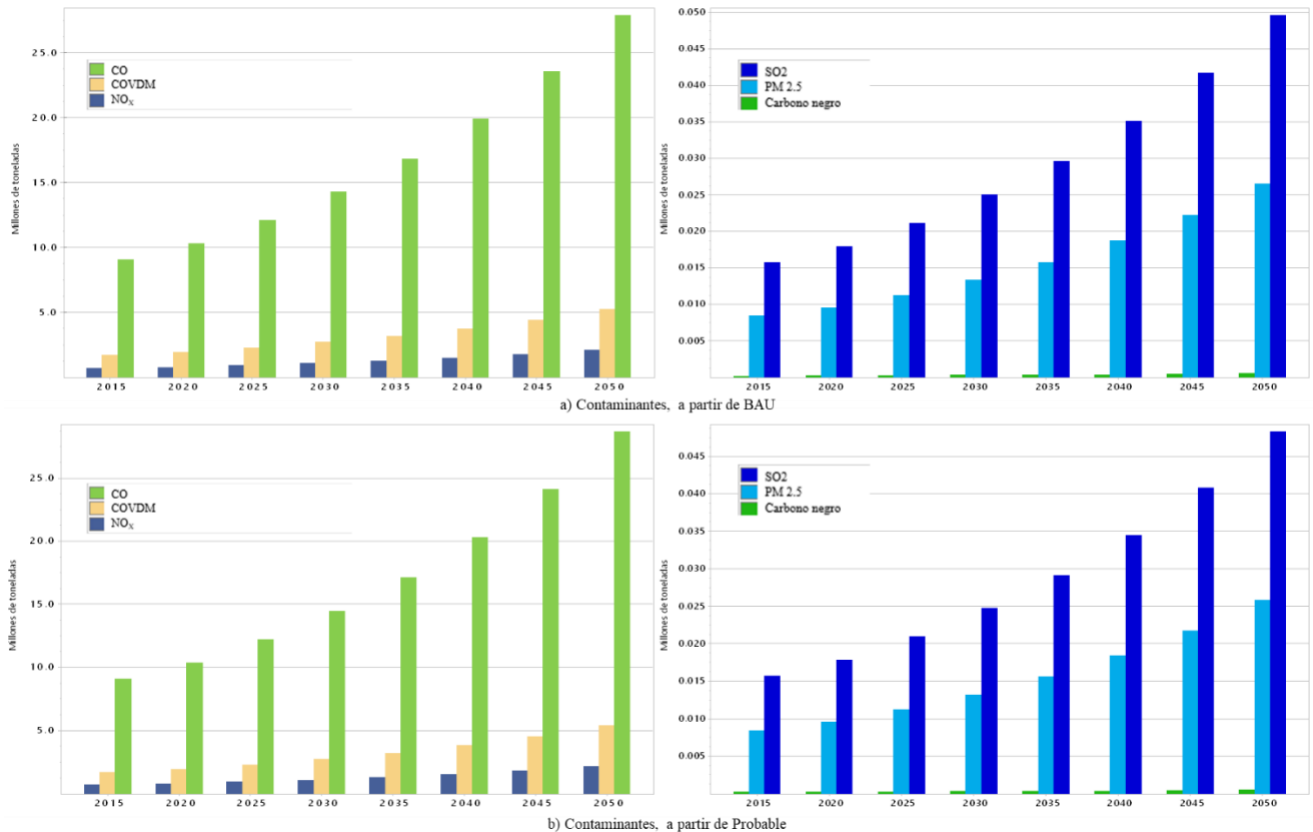


Figura 5.6. Emisiones de otros contaminantes en escenarios inerciales.

Para el escenario Posible, el potencial de mitigación de CO₂, CH₄ y N₂O se muestra dentro de los cuadros blancos de la Figura 5.7-a, c y e, y se calcula que para el año 2050 se puedan mitigar 11 millones de toneladas de CO₂. Por otra parte, en el escenario Deseable, el potencial de mitigación sería de 19 millones de toneladas de CO₂ para el año 2050 (Figura 5.7-b, d y f). Se puede observar que las emisiones de GEI son superiores en el escenario de mitigación Posible en comparación con el escenario de mitigación Deseable, debido a que la demanda de combustible es mayor cuando la flota vehicular utiliza gasolina de 92 octanos que cuando utiliza la de 98, y, por consecuencia, incrementan las emisiones de GEI y de otros contaminantes, tal como se aprecia en las Figura 5.8. El potencial de mitigación es mayor en el escenario Deseable, sin embargo, el potencial de mitigación de la demanda de combustible, y, por lo tanto, de emisiones calculadas en el escenario Posible, es significativo para contribuir como una medida de mitigación ante el cambio climático.



Figura 5.7. Potencial de mitigación de GEI.

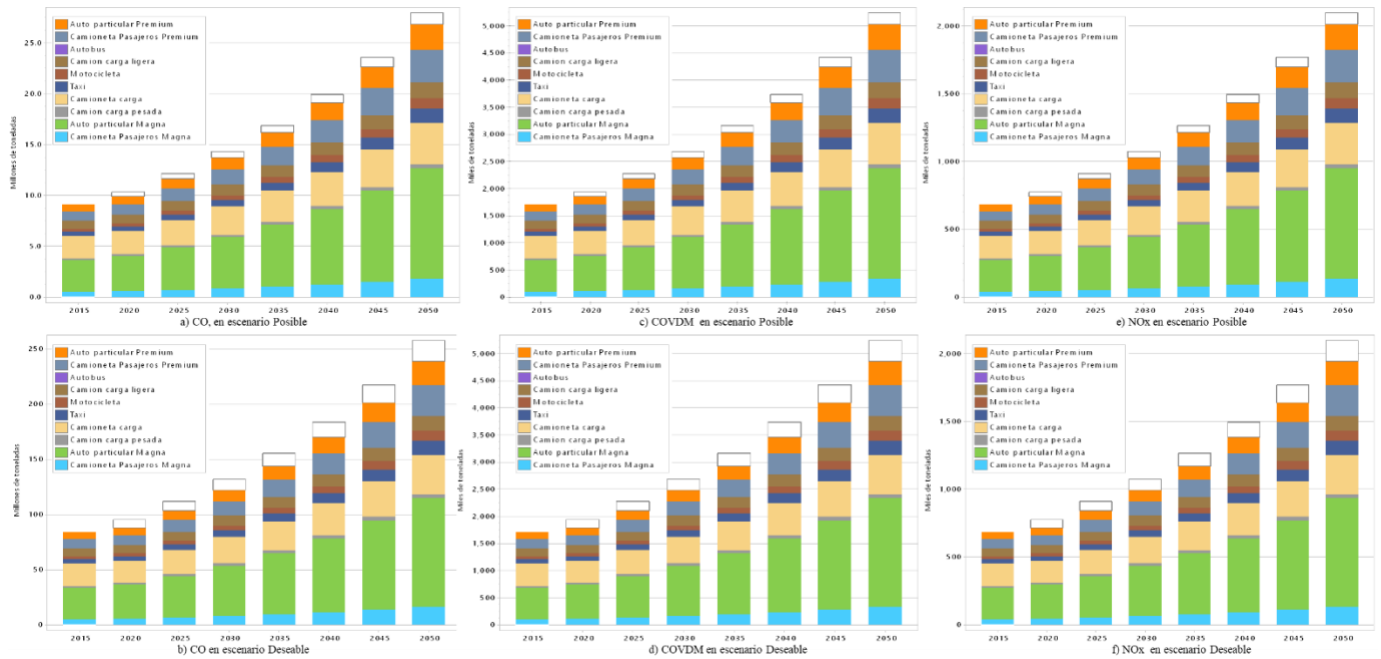


Figura 5.8. Potencial de mitigación de otros contaminantes

En la Tabla 5.5 se presenta un resumen del ahorro total de combustible que se puede alcanzar para el año 2050 si la flota vehicular en México utiliza exclusivamente gasolina de 92 o 98 octanos. Como puede observarse, el mayor ahorro de gasolina se registra en el escenario Deseable, es decir, el de 98 octanos partiendo del escenario BAU, no obstante, se considera pertinente seleccionar los

resultados generados a partir del escenario Probable, ya que es el que contempla la introducción de autos eléctricos e híbridos, lo cual ya es una realidad en México.

Tabla 5.5. Ahorro de combustible total para el año 2050.

Escenario inercial	Escenario de mitigación	*Ahorro de gasolina (hm ³)
BAU	Posible	7,075
	Deseable	10,570
Probable	Posible	4,182
	Deseable	7,677

Por otra parte, en la Tabla 5.6 se muestra el potencial de mitigación total de GEI y otros contaminantes estimados para el año 2050, y se puede apreciar una disminución considerable de emisiones si se implementa, a corto plazo el uso exclusivo de gasolina de 92 octanos, y, en un futuro probablemente lejano, el uso exclusivo de gasolina de 98 octanos, tal como se realiza en los países de Estados Unidos y la Unión Europea.

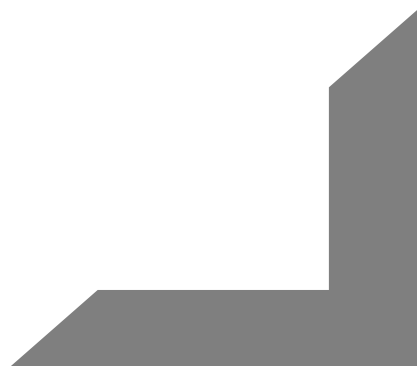
Tabla 5.6. Potencial de mitigación de GEI y otros contaminantes para el año 2050.

Escenario de referencia	Escenario de mitigación	Potencial de mitigación (miles de toneladas)								
		CO ₂	CH ₄	N ₂ O	CO	NO _x	COVDM	SO ₂	Carbono negro	PM _{2.5}
BAU	Posible	17,304	0.89	1.34	1,876	140.70	351.76	3.25	0.04	1.73
	Deseable	25,851	1.33	2.00	2,802	210.20	525.50	4.85	0.05	2.59
Probable	Posible	10,229	0.53	0.75	1,109	83.17	207.94	1.92	0.02	1.02
	Deseable	18,776	0.97	1.49	2,035	152.67	381.68	3.52	0.04	1.88



CAPÍTULO VI

CONCLUSIONES



Capítulo VI: Conclusiones

La creciente demanda en el parque vehicular indica que es necesario establecer medidas de mitigación de GEI provenientes de los combustibles fósiles. Se demostró que, al incrementar el número de octano de los combustibles, es posible reducir la demanda de gasolina debido a que aumenta su eficiencia energética y, como consecuencia, disminuyen las emisiones de gases de efecto invernadero a la atmósfera. Los escenarios de mitigación propuestos sirven para demostrar la medida en la que se pueden reducir las emisiones de GEI provenientes del autotransporte a gasolina en México, ya que es posible mitigar hasta 25 millones toneladas de GEI para el año 2050 si se implementara el escenario de mitigación deseable.

La introducción de autos eléctricos e híbridos en el país aumentará gradualmente durante los próximos años y, aunque en la actualidad no represente un porcentaje significativo en comparación con la flota vehicular, es necesario considerarlos. Por lo tanto, el escenario más apegado a la realidad es el escenario de mitigación Posible que parte del escenario Probable, es decir, la implementación del uso exclusivo de gasolina de 92 octanos para toda la flota vehicular mexicana considerando la penetración tecnológica de autos eléctricos e híbridos.

El uso de gasolina de 98 octanos sería el escenario ideal, pero menos probable en el mediano plazo debido al factor económico, porque no es factible que de manera inmediata se comience con la producción, distribución y consumo exclusivos de gasolina de 98 octanos. Sin embargo, puede considerarse como un objetivo a largo plazo, con la finalidad de aumentar la eficiencia energética del combustible, lo que se verá reflejado en la disminución del consumo de gasolina, y, por lo tanto, en la reducción de las emisiones de GEI y otros contaminantes.

Si bien el aumento de la eficiencia energética no es una solución definitiva ante el problema actual de cambio climático, es una medida de mitigación apropiada que puede implementarse durante la etapa de transición de vehículos a gasolina a vehículos eléctricos e híbridos.

Para que la propuesta del uso exclusivo de gasolina de 92 o 98 octanos sea factible, es necesario optimizar los parámetros operativos del proceso CCR. Es por ello por lo que se llevó a cabo la simulación del sistema de reactores del proceso, desde la construcción de la geometría a escala real, la modelación cinética, térmica y de flujo, hasta la simulación de una partícula catalítica.

Como primera etapa, fue posible integrar todos los elementos internos del reactor en una representación 3D, estudio que no ha sido realizado previamente. Sin embargo, por la limitación del recurso computacional, fue necesario simplificar el sistema de reactores y eliminar los elementos internos para llevar a cabo las modelaciones.

Posteriormente se realizaron pruebas con diferentes velocidades de flujo para conocer la hidrodinámica de la nafta dentro del reactor. Se observó que las velocidades de flujo son mayores en las áreas donde no encuentra resistencia a fluir, como la entrada y salida del reactor.

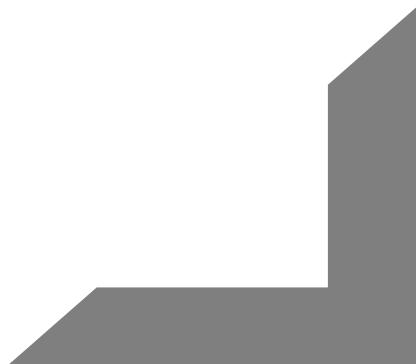
El análisis de la modelación térmica permitió identificar las zonas de calor en donde probablemente ocurren las reacciones exotérmicas, como el hidrocracking. De igual forma se localizaron las zonas en donde existe disminución en la temperatura debido a las reacciones endotérmicas.

Por otra parte, el modelo cinético mostró los perfiles de concentración en los tres reactores. Al obtener el gradiente de concentración en cada reactor por componente, es posible conocer la distribución de los productos deseados y los no deseados, que servirá para tomar decisiones en el momento de realizar la optimización de los parámetros operativos.

Hasta el momento, ningún trabajo sobre reformación catalítica de las naftas había sido presentado en una modelación 3 D del proceso, lo que representa un aporte significativo y de gran valor para la industria de la refinería, ya que será posible identificar de manera más apegada a la realidad lo que está ocurriendo en el proceso CCR para poder mejorar en las áreas de oportunidad.



BIBLIOGRAFÍA



Bibliografía

- Aboites, J., J. M. Domínguez and T. Beltrán (2004). La triada innovadora: investigación y desarrollo en catálisis. México, Siglo XXI.
- Agencia de Protección Ambiental, (2021). Global Greenhouse Gas Emissions Data. Consultado el 27/07/2021, de EPA Sitio web: <https://www.epa.gov/ghgemissions/global-greenhouse-gas-emissions-data>
- Agencia Internacional de Energía, (2016). International Energy Outlook 2016. Consultado el 17/09/2020, de U.S. Energy Information Administration Sitio web: [https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484\(2016\).pdf](https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484(2016).pdf)
- Agencia Internacional de Energía, (2020). Energy Technology Perspectives 2020. Consultado el 27/08/2021 de Agencia Internacional de Energía. Sitio web: <https://www.iea.org/reports/energy-technology-perspectives-2020>
- Agencia Internacional de Energía, (2020). Global CO₂ emissions in 2019. Consultado el 26/05/2021, de Agencia Internacional de Emisiones, Sitio web: <https://www.iea.org/articles/global-co2-emissions-in-2019>.
- Albahri, T.A., Riazi, M.R., Alqattan, A.A. Octane number and aniline point of petroleum fuels, 224th ACS National Meeting; Boston, MA; United States; August 2002; 47:2, p. 710-711
- Alvarado, J. G., J. G. Delgado and H. R. Medina (2015). "Rol de la Química Orgánica en los procesos de conversión de hidrocarburos." Educación Química 26(4): 288-298.
- Antos, G. and A. Aitani (2004). Catalytic Naphta Reforming. Illinois, Marcel Dekker.
- Antos, G. J. (1976). Dehydrocyclization with an acidic multimetallic catalytic composite. Estados Unidos, Honeywell UOP LLC. 4032587.
- Asociación Mexicana de la Industria Automotriz, A.C., 2021, Reporte de Ventas de Vehículos Eléctricos e Híbridos a octubre de 2021. <https://amia.com.mx/2021/08/23/reporte-de-venta-de-vehiculos-hibridos-y-electricos-mayo-2021/>

- British Petroleum, (2019), BP Energy Outlook. Consultado el 20/11/2020, de British Petroleum.
Sitio web: <https://www.bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/energy-outlook/bp-energy-outlook-2019.pdf>
- Cámara de Diputados del H. Congreso de La Unión (Junio 6, 2012), Ley General de Cambio Climático, Diario Oficial de la Federación, https://www.diputados.gob.mx/LeyesBiblio/pdf/LGCC_061120.pdf
- Carey, F. and R. Sundberg (2007). *Advanced Organic Chemistry*. New York, Springer.
- Chernyakova, E. S., A. G. Koksharov, E. D. Ivanchina and I. V. Yakupova (2015). "Heavy Naphtha Fractions 85-155°C Recycling in the Catalytic Reforming Industrial Unit." *Procedia Chemistry* 15: 378-383.
- Chow, E. y Heywood, J., (2014), Benefits of a Higher Octane Standard Gasoline for the U.S. Light-Duty Vehicle Fleet, Society of Automotive Engineers, 1, 1-18. <https://doi.org/10.4271/2014-01-1961>
- Comisión Reguladora de Energía, (2017), Norma Oficial Mexicana NOM-016-CRE-2016, Especificaciones de calidad de los petrolíferos. Consultado el 01/09/2021 del Diario Oficial de la Federación Sitio web: http://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5450011&fecha=29/08/2016
- Comisión Reguladora de Ebergía, (2018). Especificaciones de calidad de los petrolíferos. NOM-016-CRE-2016. C. R. d. Energía. México, Diario Oficial de la Federación. NOM-016-CRE-2016.
- Dargay, J., Gately, D., & Sommer, M. (2007). Vehicle Ownership and Income Growth, Worldwide: 1960–2030. *The Energy Journal*, 28(4). <https://doi.org/10.5547/issn0195-6574-ej-vol28-no4-7>
- Ebrahimian, S. e Iranshahi, D. (2020). Modeling and optimization of thermally coupled of naphtha reforming and propane ammoxidation with diffent feed distributions. *Reac Kinet Mech Cat* 129, 315-335, <https://doi.org/10.1007/s11144-019-01682-x>

- Elizalde, I. and J. Ancheyta (2015). "Dynamic modeling and simulation of a naphtha catalytic reforming reactor." *Applied Mathematical Modelling* 39(2): 764-775.
- Elsayed, H. A., M. F. Menoufy, S. A. Shaban, H. S. Ahmed and B. H. Heakal (2016). "Optimization of the reaction parameters of heavy naphtha reforming process using Pt-Re/Al₂O₃ catalyst system." *Egyptian Journal of Petroleum* 26(4): 885-893.
- EPA (2019). *Fuels Regulatory streamlining - Discussion Draft Regulations*. E. P. Agency. EUA, Assessment and Standards Division Office of Transportation and Air Quality. EPA-420-D-19-001.
- Europeo, P. (2015). *Especificación de la gasolina, el diésel y el gasóleo*. C. d. l. U. Europea, Parlamento Europeo y del Consejo. 2009/30/CE.
- Flannery, T. (2011). *La amenaza del cambio climático*. España, Grupo Editorial España
- Gary, J. and G. Handwerk (2003). *Refino del Petróleo*, Reverté.
- Instituto Mexicano del Transporte, (2015), *Manual Estadístico del Sector Transporte 2015*, Consultado el 17/09/2020, de Secretaría de Comunicaciones y Transportes. Sitio web: www.imt.mx
- Instituto Mexicano del Transporte, (2018), *Desarrollo de metodología para la estimación de los vehículos-kilómetro recorridos anualmente, a nivel nacional*. Consultado el 17/09/2020, de Instituto Mexicano del Transporte, Sitio web: <https://imt.mx/archivos/Publicaciones/PublicacionTecnica/pt517.pdf>
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018) *Elementos para inventario de fuentes móviles, informe final*. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, Ciudad de México
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). *Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero*. Consultado el 27/08/ 2021, de Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Sitio web: <https://cambioclimatico.gob.mx/estadosymunicipios/Emisiones.html>

- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). Sexta Comunicación Nacional y Segundo Informe Bienal de Actualización ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático. Consultado el 17/09/2020, de Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Sitio web: <https://www.gob.mx/inecc/articulos/sexta-comunicacion-nacional-ante-la-cmnucc?idiom=es>
- IPCC (2019). Calentamiento global de 1.5 °C, Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático.
- Iranshahi, D., M. Karimi, S. Amiri, M. Jafari, R. Rafiei and M. R. Rahimpour (2014). "Modeling of naphtha reforming unit applying detailed description of kinetic in continuous catalytic regeneration process." *Chemical Engineering Research and Design* 92(9): 1704-1727.
- Ivanchina, E. D., E. S. Sharova, A. Anna, Syskina and I. V. Yakupova (2014). "Computer Modelling System Application for Catalytic Reforming Unit Work Optimisation." *Procedia Chemistry* 10: 192-196.
- Ivanchina, E., Chernyakova, E., Pchelintseva, I. y Poluboyartsev. (2021). Mathematical modeling and optimization of semi-regenerative catalytic reforming of naphtha. *Energies Nouvelles*, 76. <https://doi.org/10.2516/ogst/2021041>
- Jafari, M., R. Rafiei, S. Amiri, M. Karimi, D. Iranshahi, M. R. Rahimpour and H. Mahdiyar (2013). "Combining continuous catalytic regenerative naphtha reformer with thermally coupled concept for improving the process yield." *International Journal of Hydrogen Energy* 38(25): 10327-10344.
- Kluksdahl, H. (1968). Reforming a sulfur-free naphtha with a platinum-rhenium catalyst. Estados Unidos, Chevron Research and Technology Co.
- Lapinski, M. P., S. Metro, P. R. Pujadó and M. Moser (2014). *Catalytic Reforming in Petroleum Processing*. Suiza, Springer, Cham.
- Leone, T. G., Anderson, J. E., Davis, R. S., Iqbal, A., Reese, R. A., Shelby, M. H., & Studzinski, W. M. (2015). The Effect of Compression Ratio, Fuel Octane Rating, and Ethanol Content

- on Spark-Ignition Engine Efficiency. *Environmental Science & Technology*, 49(18), 10778–10789. <https://doi.org/10.1021/acs.est.5b01420>
- Liu, B., L. Liu, Y.-m. Chai, J.-c. Zhao and C.-g. Liu (2018). "Essential role of promoter Co on the MoS₂ catalyst in selective hydrodesulfurization of FCC gasoline." *Journal of Fuel Chemistry and Technology* 46(4): 441-450.
- Mallma, P., H. Lamadrid-Figueroa, G. Angeles, H. Riojas and M. M. Tellez Rojo Solis (2007). Impact of the elimination of lead in gasoline on the blood lead concentration of children of Mexico City.
- Martínez, J., Zúñiga, M., Ruiz-Martínez, R., (2022) A thermodynamic Analysis of Naphtha Catalytic Reforming Reactions to Produce High-Octane Gasoline, *Processes*, 10 (2), 313.
- McCallister, K. R. (1971). Francia. 2078056.
- Mehraban, M. y Hashemi, B., (2019). A mathematical model for decoking process of the catalyst naphtha reforming radial flow reactor, *Fuel Processing Technology*, 188. 172-178. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2019.01.016>
- Olah, G. and Á. Monlar (2003). *Hydrocarbon Chemistry*. New Jersey, Wiley.
- Padmavathi, G. and K. Chaudhuri (1997). "Modeling and simulation of commercial catalytic naphtha reformers." *Canadian Journal of Chemical Engineering* 75: 930-.
- Pérez, D. A., (2017), Estudio De Emisiones Contaminantes Utilizando Combustibles Locales, *Innova Research Journal*, 2, 23-34, <https://doi.org/10.33890/innova.v2.n11.2017.302>.
- Petrova, A., Gushchin, P., Ivanov, E., Lyubimenko, A., Kolesnikov, I. (2021) Modelling Industrial Catalytic Reforming of Lowoctane Gasoline, *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 57, 143-159 <https://doi.org/10.1007/s10553-021-01234-x>
- Primo, E. (1995). *Química orgánica básica y aplicada: de la molécula a la industria*. vol 2, Reverté.
- Raffinage, F. (1969). Francia. 2031984.

- Rodríguez, M. A. and J. Ancheyta (2011). "Detailed description of kinetic and reactor modeling for naphtha catalytic reforming." *Fuel* 90(12): 3492-3508.
- Secretaría de Relaciones Exteriores, (2021), Comunicado: México se adhirió al Compromiso Global de Metano en la COP26, Sitio web: <https://www.gob.mx/sre/prensa/mexico-se-adhirio-al-compromiso-global-de-metano-en-la-cop26?state=published>
- Secretaría del Medio Ambiente y Recursos Naturales, (2019), Comunicado: México reitera su compromiso con el cumplimiento del Acuerdo de París, Sitio web: <https://www.gob.mx/semarnat/prensa/mexico-reitera-su-compromiso-con-el-cumplimiento-del-acuerdo-de-paris>
- SEDEMA (2017). Calidad de las gasolinas y diésel comercializados en la ZMVM. México, Secretaría del Medio Ambiente.
- SENER (2018). Prospectiva de Energías Renovables 2018 - 2032. México, sener.
- SIE (2020). Volumen de ventas internas de Petrolíferos por entidad federativa. México, Secretaría de Energía.
- Sinfelt, J. H. (1976). Estados Unidos.
- Sistema de Información Energética, (2020), Balance Nacional de Energía 2019. Consultado el 01/09/2021 de la Secretaría de Energía. Sitio web: <https://sie.energia.gob.mx/movil.do?action=applyOptions>
- Solís, J., Sheinbaum, C., (2016). Consumo de energía y emisiones de CO2 del autotransporte en México y escenarios de mitigación. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 32, 7-23.
- Solís, K. (2015). Energía y gases de efecto invernadero GEI. C. d. Diputados. México, Centro de Estudios Sociales y de Opinión Pública.
- Speth, R. L., Chow, E. W., Malina, R., Barrett, S. R. H., Heywood, J. B., & Green, W. H. (2014). Economic and Environmental Benefits of Higher-Octane Gasoline. *Environmental Science & Technology*, 48(12), 6561–6568. <https://doi.org/10.1021/es405557p>

- Stockholm Environment Institute, (2018), LEAP. Consultado el 8 de agosto de 2021. Sitio web: <https://www.sei.org/projects-and-tools/tools/leap-long-range-energy-alternatives-planning-system/>
- Stradling, R., Williams, J., Hamje, H., & Rikeard, D. (2016). Effect of Octane on Performance, Energy Consumption and Emissions of Two Euro 4 Passenger Cars. *Transportation Research Procedia*, 14, 3159–3168. <https://doi.org/10.1016/j.trpro.2016.05.256>
- Taco, S., Ron, C., Murillo, H., Murillo, H., Chico, A. y Arauz, P. (2022). Thermochemical Analysis of a Packed-Bed Reactor Using Finite Elements with FlexPDE and COMSOL Multiphysics, *Processes*
- Teter, J., (2020). Tracking Transport 2020. Consultado el 26/08/2021, de Agencia Internacional de Energía, Sitio web: <https://www.iea.org/reports/tracking-transport-2020>
- Treese, S., P. R. Pujadó and D. Jones (2015). *Handbook of Petroleum Processing*. Illinois, Springer.
- World Resources Institute, (2017), Climate Analysis Indicators Tool: Historical Emissions Data. Revisado el 12/02/2021. Sitio web: <http://cait.wri.org/>
- World Resources Institute, (2021), Emisiones de gases de efecto invernadero por país y por sector. Consultado el 27/12/2021. Sitio web: <https://wrimexico.org/blog/cuatro-gr%C3%A1ficos-que-explican-las-emisiones-de-gases-de-efecto-invernadero-por-pa%C3%ADs-y-por>
- Yang, Q., S. Shao, Y. Zhang, H. Hou, C. Qin, D. Sun and Y. Liu (2020). "Comparative study on life cycle assessment of gasoline with methyl tertiary-butyl ether and ethanol as additives." *Science of The Total Environment*: 130-138.
- Yang, X., Wang, -s., Zhang, K., He, Y., (2021). Investigation of coke deposition inside catalyst with heterogeneous active component distribution, *Fuel*, 287, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119547>

- Yusuf, A. Z., Y. M. John, B. O. Aderemi, R. Patel and I. M. Mujtaba (2019). "Modelling, simulation and sensitivity analysis of naphtha catalytic reforming reactions." *Computers & Chemical Engineering* 130: 106531.
- Yusuf, A., John, Y., Aderemi, B., Patel R., Mujtaba, I. (2020), Effect of hydrogen partial pressure on catalytic reforming process of naphtha, *Computers & Chemical Engineering* 143, 107090
- Zhang, P., Y. Yang, Z. Li, B. Liu and C. Hu (2019). "Preparation, characterization and naphtha aromatization performance of the catalytic reforming catalyst Pt/MY (M = Mg, Ba or Ce)." *Catalysis Today*.



ANEXOS



Anexo I

I.1 Reacciones químicas y modelo cinético

Se realizó la modelación matemática del modelo cinético de 32 componentes y 84 reacciones químicas (Iranshahi, 2014). El modelo no generó los resultados esperados. Sin embargo, se muestran la modelación.

I.1.1. Modelo cinético

Las Tablas 8.3 a la 8.15 muestran los 32 pseudo componentes de la mezcla de hidrocarburos presentes la nafta, propuestos por Iranshahi y col en 2014. Los componentes se agruparon por tipo de reacción del proceso de reformación catalítica y se adicionó su reacción química correspondiente. Los valores de las constantes para los cálculos de la constante específica de velocidad de reacción, así como de la constante de equilibrio, fueron tomados del mismo modelo (Iranshahi, Karimi et al. 2014).

Posteriormente, se planteó el sistema de ecuaciones para el modelo cinético del proceso de reformación catalítica. El sistema consta de 33 ecuaciones diferenciales de primer orden para calcular la velocidad de reacción, r_i , de cada componente en unidades de $\text{kmol} \cdot \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$. Debajo de cada término de la expresión se colocó un recuadro que indica la reacción en donde interviene su localización dentro de la red de reacciones del proceso elaborada por Iranshahi y col. Se presentan las ecuaciones diferenciales (1-33) agrupadas por tipo de componente.

Tabla I.1. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrogenación

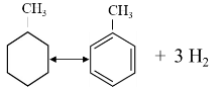
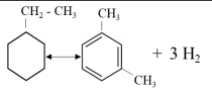
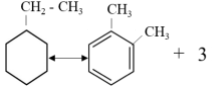
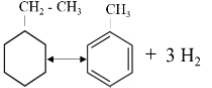
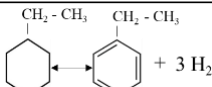
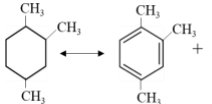
Compuesto	Reacción $ACH_n \leftrightarrow A_n + 3H_2$	Ecuación	k_i	Velocidad de reacción $r_{1n} = k_i \left(P_{ACH_n} - \frac{P_{A_n} P_{H_2}^3}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($kmol kg_{cat}^{-1} h^{-1} kPa^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (kPa) ³	K_i
C ₇	 + 3 H ₂	$ACH_7 \leftrightarrow A_7 + 3H_2$	k_1	0	135747377.3	8.45977E+12	K_1
C ₈	$C_8H_{16} \leftrightarrow C_8H_{10} + 3H_2$	$ACH_8 \leftrightarrow A_8 + 3H_2$	k_2	0	954125905.2	8.37376E+12	K_2
MX	 + 3 H ₂	$ACH_8 \leftrightarrow A_8 + 3H_2$	k_3	0	57443142.87	8.68666E+13	K_3
OX	 + 3 H ₂	$ACH_8 \leftrightarrow A_8 + 3H_2$	k_4	0	202511290.2	6.32477E+13	K_4
PX	 + 3 H ₂	$ACH_8 \leftrightarrow A_8 + 3H_2$	k_5	0	124063761.5	6.12533E+13	K_5
EB	 + 3 H ₂	$ACH_8 \leftrightarrow A_8 + 3H_2$	k_6	0	130424646.5	1.42909E+13	K_6
C ₉	 + 3 H ₂	$ACH_9 \leftrightarrow A_9 + 3H_2$	k_7	0	692837607.3	1.81094E+15	K_7

Tabla I.2. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de alquilciclohexanos a N-parafinas.

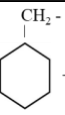
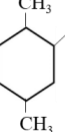
Compuesto	Reacción $ACH_n + H_2 \leftrightarrow NP_n$	k_i	Velocidad de reacción $r_{2n} = k_i \left(P_{ACH_n} P_{H_2} - \frac{P_{NP_n}}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(\text{kmol kg}_{cat}^{-1} \text{h}^{-1} \text{kPa}^{-2})$	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ $(\text{kPa})^{-1}$
C ₆	 + H ₂ $\longleftrightarrow$ CH ₃ -(CH ₂) ₄ -CH ₃	k_8	0	36837019358	0.06373319
C ₇	 + H ₂ $\longleftrightarrow$ CH ₃ -(CH ₂) ₅ -CH ₃	k_9	0	4.17347E+12	0.015756756
C ₈	 + H ₂ $\longleftrightarrow$ CH ₃ -(CH ₂) ₆ -CH ₃	k_{10}	0	1.14883E+12	0.027623492
C ₉	 + H ₂ $\longleftrightarrow$ CH ₃ -(CH ₂) ₇ -CH ₃	k_{11}	0	8.0748E+12	0.017859409

Tabla I.3. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de alquilociclohexanos a I-parafinas.

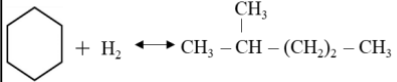
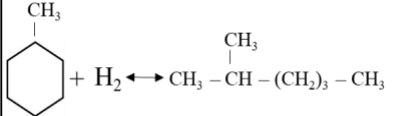
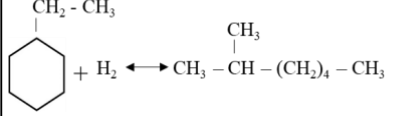
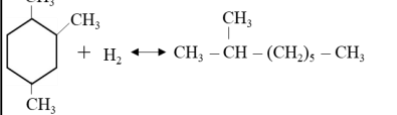
Compuesto	Reacción $ACH_n + H_2 \leftrightarrow IP_n$	k_i	Velocidad de reacción $r_{3n} = k_i \left(P_{ACH_n} P_{H_2} - \frac{P_{IP_n}}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-2})$	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ $(kPa)^{-1}$	K_i
C ₆		k_{12}	0	2.69482E+11	0.001164071	K_{12}
C ₇		k_{13}	0	1.46424E+11	0.000369731	K_{13}
C ₈		k_{14}	0	3.77631E+12	0.002599326	K_{14}
C ₉		k_{15}	0	8.0748E+12	0.005336121	K_{15}

Tabla I.4. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de N-parafinas a alquilciclopentanos.

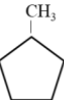
Compuesto	Reacción $NP_n \leftrightarrow ACP_n + H_2$	k_i	Velocidad de reacción $r_i = k_i \left(P_{NP_n} - \frac{P_{ACP_n} P_{H_2}}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (kPa)	K_i
C ₅	$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ H_2$	k_{16}	0	2.17312E+13	67.20448428	K_{16}
C ₆	$CH_3 - (CH_2)_4 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ H_2$	k_{17}	0	7.14321E+13	360.6332386	K_{17}
C ₇	$CH_3 - (CH_2)_5 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ H_2$	k_{18}	0	3.16951E+14	313.5194759	K_{18}
C ₈	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ H_2$	k_{19}	0	3.80442E+13	1045.293998	K_{19}
C ₉	$CH_3 - (CH_2)_7 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ H_2$	k_{20}	0	1.98095E+14	731.5577646	K_{20}

Tabla I.5. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de I-parafinas a alquilciclopentanos.

Compuesto	Reacción $IP_n \leftrightarrow ACP_n + H_2$	k_i	Velocidad de reacción $r_{5n} = k_i \left(P_{IP_n} - \frac{P_{ACP_n} P_{H_2}}{K_{5n}} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (kPa)	K_i
C ₅	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3 - CH - CH_2 - CH_3 \end{array} \leftrightarrow \text{Cyclopentane} + H_2$	k_{21}	0	8.66029E+12	145.050773	K_{21}
C ₆	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3 - CH - (CH_2)_2 - CH_3 \end{array} \leftrightarrow \text{Cyclopentane} + H_2$	k_{22}	0	2.45018E+13	299.4453578	K_{22}
C ₇	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3 - CH - (CH_2)_3 - CH_3 \end{array} \leftrightarrow \text{Cyclopentane} + H_2$	k_{23}	0	1.96124E+14	284.934698	K_{23}
C ₈	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3 - CH - (CH_2)_4 - CH_3 \end{array} \leftrightarrow \text{Cyclopentane} + H_2$	k_{24}	0	6.77729E+14	132.6373177	K_{24}
C ₉	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3 - CH - (CH_2)_5 - CH_3 \end{array} \leftrightarrow \text{Cyclopentane} + H_2$	k_{25}	0	1.98095E+14	76.02461034	K_{25}

Tabla I.6. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de N-parafinas a aromáticos.

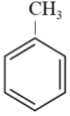
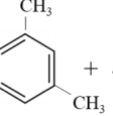
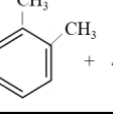
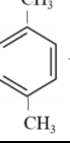
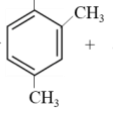
Compuesto	Reacción $NP_n \leftrightarrow A_n + 4H_2$	k_i	Velocidad de reacción $r_{6n} = k_i \left(P_{NP_n} - \frac{P_{A_n} P_{H_2}^4}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (kPa) ⁴	K_i
C ₆	$CH_3 - (CH_2)_4 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{26}	0	20729820.79	2.00007E+11	K_{26}
C ₇	$CH_3 - (CH_2)_5 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{27}	0	27982331.18	1.90991E+11	K_{27}
C ₈						
MX	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{28}	0	32187342.39	1.73544E+11	K_{28}
OX	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{29}	0	57487830.48	1.7478E+11	K_{29}
PX	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{30}	0	23844969.71	1.74536E+11	K_{30}
EB	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{31}	0	22682036.82	1.80315E+11	K_{31}
C ₉	$CH_3 - (CH_2)_7 - CH_3 \leftrightarrow$  $+ 4H_2$	k_{32}	0	157838645.7	1.6549E+11	K_{32}

Tabla I.7. Constantes de velocidad para las reacciones de deshidrociclación de I-parafinas a aromáticos.

Compuesto	Reacción $IP_n \leftrightarrow A_n + 4H_2$	k_i	Velocidad de reacción $r_{7n} = k_i \left(P_{IP_n} - \frac{P_{An} P_{H_2}^4}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1})$	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ $(kPa)^4$	K_i
C ₆	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_2 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + 4\text{H}_2$	k_{33}	0	13484936.96	2.05036E+11	K_{33}
C ₇	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_3 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_7\text{H}_8 + 4\text{H}_2$	k_{34}	0	21361137.83	1.96638E+11	K_{34}
MX	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_4 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_8\text{H}_{10} + 4\text{H}_2$	k_{35}	0	11376766.87	1.84333E+11	K_{35}
OX	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_4 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_8\text{H}_{10} + 4\text{H}_2$	k_{36}	0	18945629.69	1.84195E+11	K_{36}
PX	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_4 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_8\text{H}_{10} + 4\text{H}_2$	k_{37}	0	9039223.563	1.83542E+11	K_{37}
EB	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_4 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_8\text{H}_{10} + 4\text{H}_2$	k_{38}	0	8097645.024	1.768E+11	K_{38}
C ₉	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - (\text{CH}_2)_5 - \text{CH}_3 \end{array} \leftrightarrow \text{C}_9\text{H}_{12} + 4\text{H}_2$	k_{39}	0	45676013.05	1.84333E+11	K_{39}

Tabla I.8. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de naftenos.

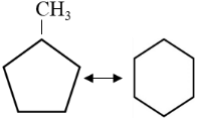
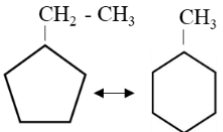
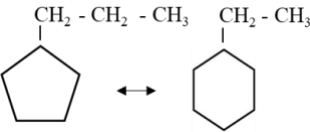
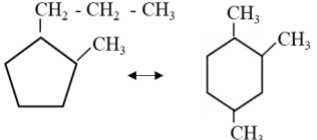
Compuesto	Reacción $ACP_n \leftrightarrow ACH_n$	k_i	Velocidad de reacción $r_{8n} = k_i \left(P_{ACP_n} - \frac{P_{ACH_n}}{K_{8n}} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1})$	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (-)	K_i
C ₆		k_{40}	0	3545072.818	0.067409971	K_{40}
C ₇		k_{41}	0	53399608894	0.078286864	K_{41}
C ₈		k_{42}	0	1.52597E+11	0.076910303	K_{42}
C ₉		k_{43}	0	2.16546E+11	0.072237157	K_{43}

Tabla I.9. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de parafinas.

Compuesto	Reacción $NP_n \leftrightarrow IP_n$	k_i	Velocidad de reacción $r_{9n} = k_i \left(P_{NP_n} - \frac{P_{IP_n}}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_{9n} = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_{9n} = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (-)	K_i
C ₄	$CH_3 - (CH_2)_2 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - CH_3$	k_{44}	0	75576276083	8.573912646	K_{44}
C ₅	$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - CH_2 - CH_3$	k_{45}	0	62498491816	8.833095044	K_{45}
C ₆	$CH_3 - (CH_2)_4 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - (CH_2)_2 - CH_3$	k_{46}	0	51683698665	8.464911207	K_{46}
C ₇	$CH_3 - (CH_2)_5 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - (CH_2)_3 - CH_3$	k_{47}	0	29818900145	8.966099918	K_{47}
C ₈	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - (CH_2)_4 - CH_3$	k_{48}	0	1.19718E+11	8.014979851	K_{48}
C ₉	$CH_3 - (CH_2)_7 - CH_3 \leftrightarrow CH_3 - \overset{\overset{CH_3}{ }}{CH} - (CH_2)_5 - CH_3$	k_{49}	0	41477139727	7.272637925	K_{49}

Tabla I.10. Constantes de velocidad para las reacciones de isomerización de aromáticos.

	Reacción $R \leftrightarrow P$	k_i	Velocidad de reacción $r_{10n} = k_i \left(P_R - \frac{P_P}{K_{10n}} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($\text{Kmolkg}_{cat}^{-1}\text{h}^{-1}\text{kPa}^{-1}$)	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ (-)	K_i
n=1		k_{50}	0	135747377.3	8.45977E+12	K_{50}
n=2		k_{51}	0	954125905.2	8.37376E+12	K_{51}
n=3		k_{52}	0	57443142.87	8.68666E+13	K_{52}
n=4		k_{53}	0	202511290.2	6.32477E+13	K_{53}
n=5		k_{54}	0	124063761.5	6.12533E+13	K_{54}
n=6		k_{55}	0	130424646.5	1.42909E+13	K_{55}

Tabla I.11. Constantes de velocidad para las reacciones de transalquilación.

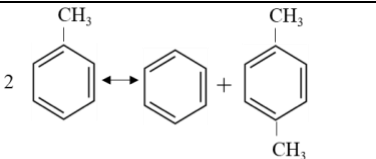
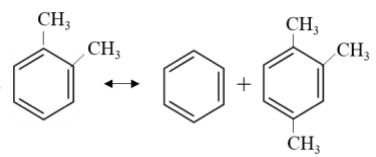
	Reacción $2R \leftrightarrow P + C$	k_i	Velocidad de reacción $r_{11n} = k_i \left(P_R^2 - \frac{P_P P_C}{K_i} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-2})$	Constante de equilibrio $K_i = \exp \left(A - \frac{B}{T} \right)$ $(-)$	K_i
n=7		k_{56}	0	17093211.95	1252459.385	K_{56}
n=8		k_{57}	0	5148376.502	1136457.457	K_{57}

Tabla I.12. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de N-parafinas.

Compuesto	Reacción	k_i	Velocidad de reacción $r_{12n} = k_i \left(\frac{P_{NPn}}{P_T} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)
C ₂	$P_2 + H_2 \rightarrow 2P_1$	k_{58}	0	2.62895E+16
C ₃	$P_3 + H_2 \rightarrow P_1 + P_2$	k_{59}	0	2.14685E+17
C ₄	$NP_4 + H_2 \rightarrow \frac{2}{3}(P_3 + P_2 + P_1)$	k_{60}	0	2.62216E+17
C ₅	$NP_5 + H_2 \rightarrow \frac{1}{2}(NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{61}	0	1.11786E+18
C ₆	$NP_6 + H_2 \rightarrow \frac{6}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{62}	0	1.80654E+18
C ₇	$NP_7 + \frac{4}{3}H_2 \rightarrow \frac{7}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{63}	0	2.69504E+18
C ₈	$NP_8 + \frac{5}{3}H_2 \rightarrow \frac{8}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{64}	0	3.83435E+17
C ₉	$NP_9 + 2H_2 \rightarrow \frac{9}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{65}	0	1.06059E+19

Tabla I.13. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de I-parafinas.

Compuesto	Reacción	k_i	Velocidad de reacción $r_{13n} = k_i \left(\frac{P_{IPn}}{P_T} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ $(Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1})$
C ₄	$IP_4 + \frac{3}{2} H_2 \rightarrow \frac{1}{2} (3P_1 + P_2 + P_3)$	k_{66}	0	4.80266E+15
C ₅	$IP_5 + H_2 \rightarrow \frac{1}{2} (IP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{67}	0	1.08482E+18
C ₆	$IP_6 + H_2 \rightarrow \frac{6}{15} (IP_5 + IP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{68}	0	3.83435E+17
C ₇	$IP_7 + \frac{4}{3} H_2 \rightarrow \frac{7}{15} (IP_5 + IP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{69}	0	1.02165E+18
C ₈	$IP_8 + \frac{5}{3} H_2 \rightarrow \frac{8}{15} (IP_5 + IP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{70}	0	1.08482E+18
C ₉	$IP_9 + 2 H_2 \rightarrow \frac{9}{15} (IP_5 + IP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{71}	0	4.22667E+18

Tabla I.14. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de alquilciclohexanos.

Compuesto	Reacción	k_i	Velocidad de reacción $r_{14n} = k_i \left(\frac{P_{ACHn}}{P_T} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)
C ₆	$ACH_6 + 2H_2 \rightarrow \frac{6}{15}(P_5 + P_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{72}	0	1.93753E+18
C ₇	$ACH_7 + \frac{7}{3}H_2 \rightarrow \frac{7}{15}(P_5 + P_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{73}	0	2.48142E+19
C ₈	$ACH_8 + \frac{8}{3}H_2 \rightarrow \frac{8}{15}(P_5 + P_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{74}	0	1.11497E+19
C ₉	$ACH_9 + 3H_2 \rightarrow \frac{9}{15}(P_5 + P_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{75}	0	1.43165E+19

Tabla I.15. Constantes de velocidad para las reacciones de cracking de alquilciclopentanos.

Compuesto	Reacción	k_i	Velocidad de reacción $r_{15n} = k_i \left(\frac{P_{ACPn}}{P_T} \right)$	Constante específica de velocidad $k_i = \exp \left(a - \frac{E}{RT} \right)$ ($Kmolkg_{cat}^{-1}h^{-1}kPa^{-1}$)
C ₅	$ACP_5 + 2H_2 \rightarrow \frac{1}{2}(NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{76}	0	2.84056E+17
C ₆	$ACP_6 + 2H_2 \rightarrow \frac{6}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{77}	0	1.06334E+18
C ₇	$ACP_7 + \frac{7}{3}H_2 \rightarrow \frac{7}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{78}	0	9.59666E+18
C ₈	$ACP_8 + \frac{8}{3}H_2 \rightarrow \frac{8}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{79}	0	8.68341E+18
C ₉	$ACP_9 + 3H_2 \rightarrow \frac{9}{15}(NP_5 + NP_4 + P_3 + P_2 + P_1)$	k_{80}	0	1.43165E+19

Sistema de ecuaciones*N- parafinas*

$$\begin{aligned} \frac{dP_1}{dt} = & k_{58} \left(\frac{P_{NP2}}{P_T} \right) + k_{59} \left(\frac{P_{NP3}}{P_T} \right) + k_{60} \left(\frac{P_{NP4}}{P_T} \right) + k_{61} \left(\frac{P_{NP5}}{P_T} \right) + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) \\ & + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) + k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right) + k_{78} \left(\frac{P_{ACP7}}{P_T} \right) + k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right) + k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dP_2}{dt} = & - \left[k_{58} \left(\frac{P_{NP2}}{P_T} \right) \right] + k_{59} \left(\frac{P_{NP3}}{P_T} \right) + k_{60} \left(\frac{P_{NP4}}{P_T} \right) + k_{61} \left(\frac{P_{NP5}}{P_T} \right) + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) \\ & + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) + k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right) + k_{78} \left(\frac{P_{ACP7}}{P_T} \right) + k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right) + k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dP_3}{dt} = & - \left[k_{59} \left(\frac{P_{NP3}}{P_T} \right) \right] + k_{60} \left(\frac{P_{NP4}}{P_T} \right) + k_{61} \left(\frac{P_{NP5}}{P_T} \right) + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) \\ & + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) + k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right) + k_{78} \left(\frac{P_{ACP7}}{P_T} \right) + k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right) + k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dNP_4}{dt} = & - \left[k_{44} \left(P_{NP4} - \frac{P_{IP4}}{K_{44}} \right) + k_{60} \left(\frac{P_{NP4}}{P_T} \right) \right] + k_{61} \left(\frac{P_{NP5}}{P_T} \right) + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) \\ & + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) + k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right) + k_{78} \left(\frac{P_{ACP7}}{P_T} \right) + k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right) + k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dNP_5}{dt} = & - \left[k_{16} \left(P_{NP5} - \frac{P_{ACP5}P_{H2}}{K_{16}} \right) + k_{45} \left(P_{NP5} - \frac{P_{IP5}}{K_{45}} \right) + k_{61} \left(\frac{P_{NP5}}{P_T} \right) \right] + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) \\ & + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) + k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right) + k_{78} \left(\frac{P_{ACP7}}{P_T} \right) + k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right) + k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dNP_6}{dt} = & - \left[k_{17} \left(P_{NP6} - \frac{P_{ACP6}P_{H2}}{K_{17}} \right) + k_{26} \left(P_{NP6} - \frac{P_{A6}P_{H2}^4}{K_{26}} \right) + k_{46} \left(P_{NP6} - \frac{P_{IP6}}{K_{46}} \right) + k_{62} \left(\frac{P_{NP6}}{P_T} \right) \right] + k_8 \left(P_{ACH6}P_{H2} - \frac{P_{NP6}}{K_8} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{dNP_7}{dt} = - \left[k_{18} \left(P_{NP7} - \frac{P_{ACP7}P_{H2}}{K_{18}} \right) + k_{27} \left(P_{NP7} - \frac{P_{A7}P_{H2}^4}{K_{27}} \right) + k_{47} \left(P_{NP7} - \frac{P_{IP7}}{K_{47}} \right) + k_{63} \left(\frac{P_{NP7}}{P_T} \right) \right] + k_9 \left(P_{ACH7}P_{H2} - \frac{P_{NP7}}{K_9} \right)$$

$$\frac{dNP_8}{dt} = - \left[k_{19} \left(P_{NP8} - \frac{P_{ACP8}P_{H2}}{K_{19}} \right) + k_{48} \left(P_{NP8} - \frac{P_{IP8}}{K_{48}} \right) + k_{64} \left(\frac{P_{NP8}}{P_T} \right) \right] + k_{10} \left(P_{ACH8}P_{H2} - \frac{P_{NP8}}{K_{10}} \right)$$

$$\frac{dNP_9}{dt} = - \left[k_{20} \left(P_{NP9} - \frac{P_{ACP9}P_{H2}}{K_{20}} \right) + k_{32} \left(P_{NP9} - \frac{P_{A9}P_{H2}^4}{K_{32}} \right) + k_{49} \left(P_{NP9} - \frac{P_{IP9}}{K_{49}} \right) + k_{65} \left(\frac{P_{NP9}}{P_T} \right) \right] + k_{11} \left(P_{ACH9}P_{H2} - \frac{P_{NP9}}{K_{11}} \right)$$

I-parafinas

$$\frac{dIP_4}{dt} = k_{44} \left(P_{NP4} - \frac{P_{IP4}}{K_{44}} \right) - k_{66} \left(\frac{P_{IP4}}{P_T} \right) + k_{67} \left(\frac{P_{IP5}}{P_T} \right) + k_{68} \left(\frac{P_{IP6}}{P_T} \right) + k_{69} \left(\frac{P_{IP7}}{P_T} \right) + k_{70} \left(\frac{P_{IP8}}{P_T} \right) + k_{71} \left(\frac{P_{IP9}}{P_T} \right)$$

$$\frac{dIP_5}{dt} = - \left[k_{21} \left(P_{IP5} - \frac{P_{ACP5}P_{H2}}{K_{21}} \right) + k_{67} \left(\frac{P_{IP5}}{P_T} \right) \right] + k_{45} \left(P_{NP5} - \frac{P_{IP5}}{K_{45}} \right) + k_{68} \left(\frac{P_{IP6}}{P_T} \right) + k_{69} \left(\frac{P_{IP7}}{P_T} \right) + k_{70} \left(\frac{P_{IP8}}{P_T} \right) + k_{71} \left(\frac{P_{IP9}}{P_T} \right)$$

$$\frac{dIP_6}{dt} = - \left[k_{22} \left(P_{IP6} - \frac{P_{ACP6}P_{H2}}{K_{22}} \right) + k_{33} \left(P_{IP6} - \frac{P_{A6}P_{H2}^4}{K_{33}} \right) + k_{68} \left(\frac{P_{IP6}}{P_T} \right) \right] + k_{12} \left(P_{ACH6}P_{H2} - \frac{P_{IP6}}{K_{12}} \right) + k_{46} \left(P_{NP6} - \frac{P_{IP6}}{K_{46}} \right)$$

$$\frac{dIP_7}{dt} = - \left[k_{23} \left(P_{IP7} - \frac{P_{ACP7}P_{H2}}{K_{23}} \right) + k_{34} \left(P_{IP7} - \frac{P_{A7}P_{H2}^4}{K_{34}} \right) + k_{69} \left(\frac{P_{IP7}}{P_T} \right) \right] + k_{13} \left(P_{ACH7}P_{H2} - \frac{P_{IP7}}{K_{13}} \right) + k_{47} \left(P_{NP7} - \frac{P_{IP7}}{K_{47}} \right)$$

$$\frac{dIP_8}{dt} = - \left[k_{24} \left(P_{IP8} - \frac{P_{ACP8}P_{H2}}{K_{24}} \right) + k_{70} \left(\frac{P_{IP8}}{P_T} \right) \right] + k_{14} \left(P_{ACH8}P_{H2} - \frac{P_{IP8}}{K_{14}} \right) + k_{48} \left(P_{NP8} - \frac{P_{IP8}}{K_{48}} \right)$$

$$\frac{dIP_9}{dt} = - \left[k_{25} \left(P_{IP9} - \frac{P_{ACP9}P_{H2}}{K_{25}} \right) + k_{39} \left(P_{IP9} - \frac{P_{A9}P_{H2}^4}{K_{39}} \right) + k_{71} \left(\frac{P_{IP9}}{P_T} \right) \right] + k_{15} \left(P_{ACH9}P_{H2} - \frac{P_{IP9}}{K_{15}} \right) + k_{49} \left(P_{NP9} - \frac{P_{IP9}}{K_{49}} \right)$$

Alquilciclohexanos

$$\frac{dACH_6}{dt} = - \left[k_8 \left(P_{ACH6} P_{H2} - \frac{P_{NP6}}{K_8} \right) + k_{12} \left(P_{ACH6} P_{H2} - \frac{P_{IP6}}{K_{12}} \right) + k_{72} \left(\frac{P_{ACH6}}{P_T} \right) \right] + k_{40} \left(P_{ACP6} - \frac{P_{ACH6}}{K_{40}} \right)$$

$$\frac{dACH_7}{dt} = - \left[k_1 \left(P_{ACH7} - \frac{P_{A7} P_{H2}^3}{K_1} \right) + k_9 \left(P_{ACH7} P_{H2} - \frac{P_{NP7}}{K_9} \right) + k_{13} \left(P_{ACH7} P_{H2} - \frac{P_{IP7}}{K_{13}} \right) + k_{73} \left(\frac{P_{ACH7}}{P_T} \right) \right] + k_{41} \left(P_{ACP7} - \frac{P_{ACH7}}{K_{41}} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{dACH_8}{dt} = & - \left[k_2 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{A8} P_{H2}^3}{K_2} \right) + k_3 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AMX} P_{H2}^3}{K_3} \right) + k_4 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AOX} P_{H2}^3}{K_4} \right) + k_5 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{APX} P_{H2}^3}{K_5} \right) + k_6 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AEB} P_{H2}^3}{K_6} \right) \right. \\ & \left. + k_{10} \left(P_{ACH8} P_{H2} - \frac{P_{NP8}}{K_{10}} \right) + K_{14} \left(P_{ACH8} P_{H2} - \frac{P_{IP8}}{K_{14}} \right) + k_{74} \left(\frac{P_{ACH8}}{P_T} \right) \right] + k_{42} \left(P_{ACP8} - \frac{P_{ACH8}}{K_{42}} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{dACH_9}{dt} = - \left[k_7 \left(P_{ACH9} - \frac{P_{A9} P_{H2}^3}{K_7} \right) + k_{11} \left(P_{ACH9} P_{H2} - \frac{P_{NP9}}{K_{11}} \right) + k_{15} \left(P_{ACH9} P_{H2} - \frac{P_{IP9}}{K_{15}} \right) + k_{75} \left(\frac{P_{ACH9}}{P_T} \right) \right] + k_{43} \left(P_{ACP9} - \frac{P_{ACH9}}{K_{43}} \right)$$

Alquilciclopentanos

$$\frac{dCP_5}{dt} = k_{16} \left(P_{NP5} - \frac{P_{ACP5} P_{H2}}{K_{16}} \right) + k_{21} \left(P_{IP5} - \frac{P_{ACP5} P_{H2}}{K_{21}} \right) - k_{76} \left(\frac{P_{ACP5}}{P_T} \right)$$

$$\frac{dACP_6}{dt} = k_{17} \left(P_{NP6} - \frac{P_{ACP6} P_{H2}}{K_{17}} \right) + k_{22} \left(P_{IP6} - \frac{P_{ACP6} P_{H2}}{K_{22}} \right) - k_{40} \left(P_{ACP6} - \frac{P_{ACH6}}{K_{40}} \right) - k_{77} \left(\frac{P_{ACP6}}{P_T} \right)$$

$$\frac{dACP_8}{dt} = k_{19} \left(P_{NP8} - \frac{P_{ACP8} P_{H2}}{K_{19}} \right) + k_{24} \left(P_{IP8} - \frac{P_{ACP8} P_{H2}}{K_{24}} \right) - k_{42} \left(P_{ACP8} - \frac{P_{ACH8}}{K_{42}} \right) - k_{79} \left(\frac{P_{ACP8}}{P_T} \right)$$

$$\frac{dACP_9}{dt} = k_{20} \left(P_{NP9} - \frac{P_{ACP9} P_{H2}}{K_{20}} \right) + k_{25} \left(P_{IP9} - \frac{P_{ACP9} P_{H2}}{K_{25}} \right) - k_{43} \left(P_{ACP9} - \frac{P_{ACH9}}{K_{43}} \right) - k_{80} \left(\frac{P_{ACP9}}{P_T} \right)$$

Aromáticos

$$\frac{dA_6}{dt} = k_{26} \left(P_{NP6} - \frac{P_{A6}P_{H2}^4}{K_{26}} \right) + k_{33} \left(P_{IP6} - \frac{P_{A6}P_{H2}^4}{K_{33}} \right) + k_{56} \left(P_{A7}^2 - \frac{P_{A6}P_{APX}}{K_{56}} \right) + k_{57} \left(P_{AOX}^2 - \frac{P_{A6}P_{A9}}{K_{57}} \right)$$

$$\frac{dA_7}{dt} = k_1 \left(P_{ACH7} - \frac{P_{A7}P_{H2}^3}{K_1} \right) + k_{27} \left(P_{NP7} - \frac{P_{A7}P_{H2}^4}{K_{27}} \right) + k_{34} \left(P_{IP7} - \frac{P_{A7}P_{H2}^4}{K_{34}} \right) - k_{56} \left(P_{A7}^2 - \frac{P_{A6}P_{APX}}{K_{56}} \right)$$

$$\frac{dA_8}{dt} = k_2 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{A8}P_{H2}^3}{K_2} \right)$$

$$\frac{dA_9}{dt} = k_7 \left(P_{ACH9} - \frac{P_{A9}P_{H2}^3}{K_7} \right) + k_{32} \left(P_{NP9} - \frac{P_{A9}P_{H2}^4}{K_{32}} \right) + k_{39} \left(P_{IP9} - \frac{P_{A9}P_{H2}^4}{K_{39}} \right) + k_{57} \left(P_{AOX}^2 - \frac{P_{A6}P_{A9}}{K_{57}} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{dMX}{dt} = & k_3 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AMX}P_{H2}^3}{K_3} \right) + k_{28} \left(P_{NP8} - \frac{P_{AMX}P_{H2}^4}{K_{28}} \right) + k_{35} \left(P_{IP8} - \frac{P_{AMX}P_{H2}^4}{K_{35}} \right) + k_{51} \left(P_{AOX} - \frac{P_{AMX}}{K_{51}} \right) - k_{52} \left(P_{AMX} - \frac{P_{AEB}}{K_{52}} \right) \\ & - k_{55} \left(P_{AMX} - \frac{P_{APX}}{K_{55}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dOX}{dt} = & k_4 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AOX}P_{H2}^3}{K_4} \right) + k_{29} \left(P_{NP8} - \frac{P_{AOX}P_{H2}^4}{K_{29}} \right) + k_{36} \left(P_{IP8} - \frac{P_{AOX}P_{H2}^4}{K_{36}} \right) - k_{50} \left(P_{AOX} - \frac{P_{APX}}{K_{50}} \right) - k_{51} \left(P_{AOX} - \frac{P_{AMX}}{K_{51}} \right) \\ & - k_{53} \left(P_{AOX} - \frac{P_{AEB}}{K_{53}} \right) - k_{57} \left(P_{AOX}^2 - \frac{P_{AEB}P_{A9}}{K_{57}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dPX}{dt} = & k_5 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{APX}P_{H2}^3}{K_5} \right) + k_{30} \left(P_{NP8} - \frac{P_{APX}P_{H2}^4}{K_{30}} \right) + k_{37} \left(P_{IP8} - \frac{P_{APX}P_{H2}^4}{K_{37}} \right) + k_{50} \left(P_{AOX} - \frac{P_{APX}}{K_{50}} \right) + k_{54} \left(P_{AEB} - \frac{P_{APX}}{K_{54}} \right) \\ & + k_{55} \left(P_{AMX} - \frac{P_{APX}}{K_{55}} \right) + k_{56} \left(P_{A7}^2 - \frac{P_{A6}P_{APX}}{K_{56}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dEB}{dt} = & k_6 \left(P_{ACH8} - \frac{P_{AEB} P_{H2}^3}{K_6} \right) + k_{31} \left(P_{NP8} - \frac{P_{AEB} P_{H2}^4}{K_{31}} \right) + k_{38} \left(P_{IP8} - \frac{P_{AEB} P_{H2}^4}{K_{38}} \right) + k_{52} \left(P_{AMX} - \frac{P_{PEB}}{K_{52}} \right) + k_{53} \left(P_{AOX} - \frac{P_{AEB}}{K_{53}} \right) \\ & - k_{54} \left(P_{AEB} - \frac{P_{APX}}{K_{54}} \right)\end{aligned}$$

I.1.2. Solución del modelo matemático con el método RK4

Se utilizó el método Runge – Kutta orden cuatro para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales. Las Figuras 8.1 a la 8.12 muestran el comportamiento del consumo y producción de los componentes con respecto a la carga de catalizador en el reactor. Puede observarse un incremento en la producción de parafinas debido a las reacciones de cracking, así como un incremento de los aromáticos, deseables en el reformado.

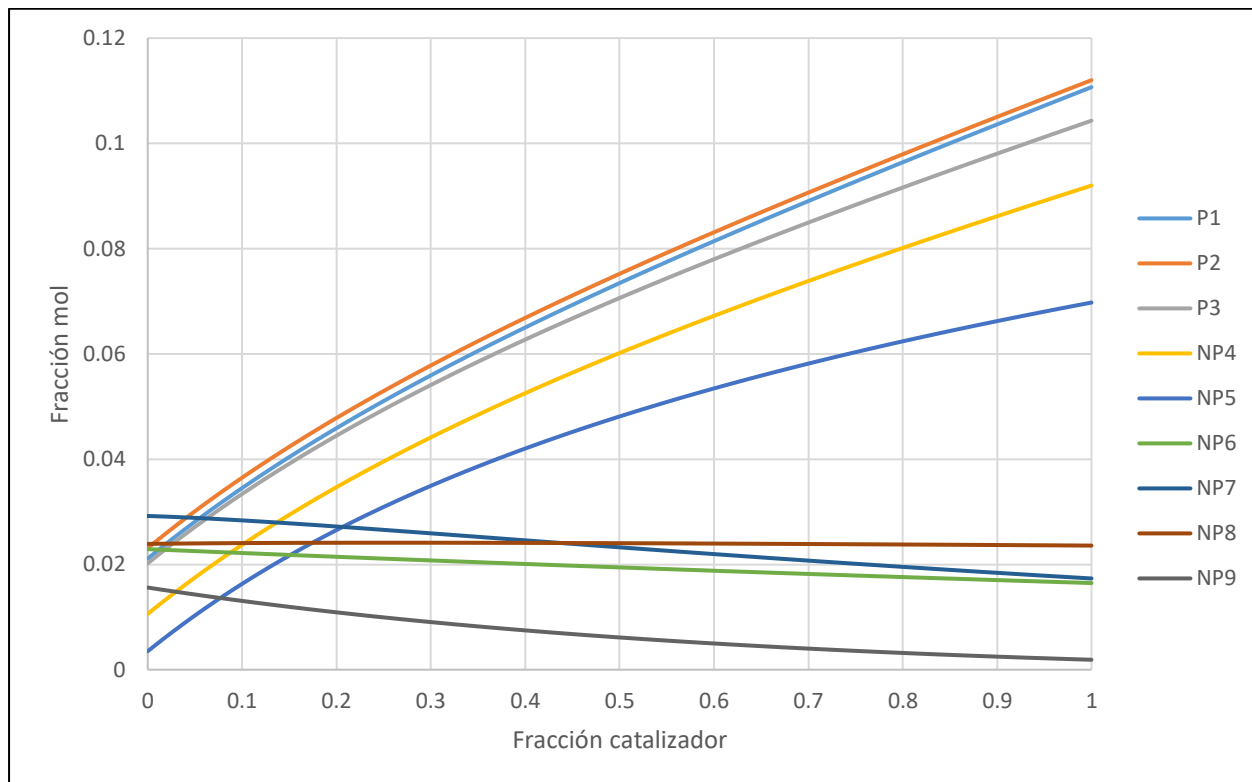


Figura I.1. . Consumo y producción de n- parafinas con avance en el catalizador.

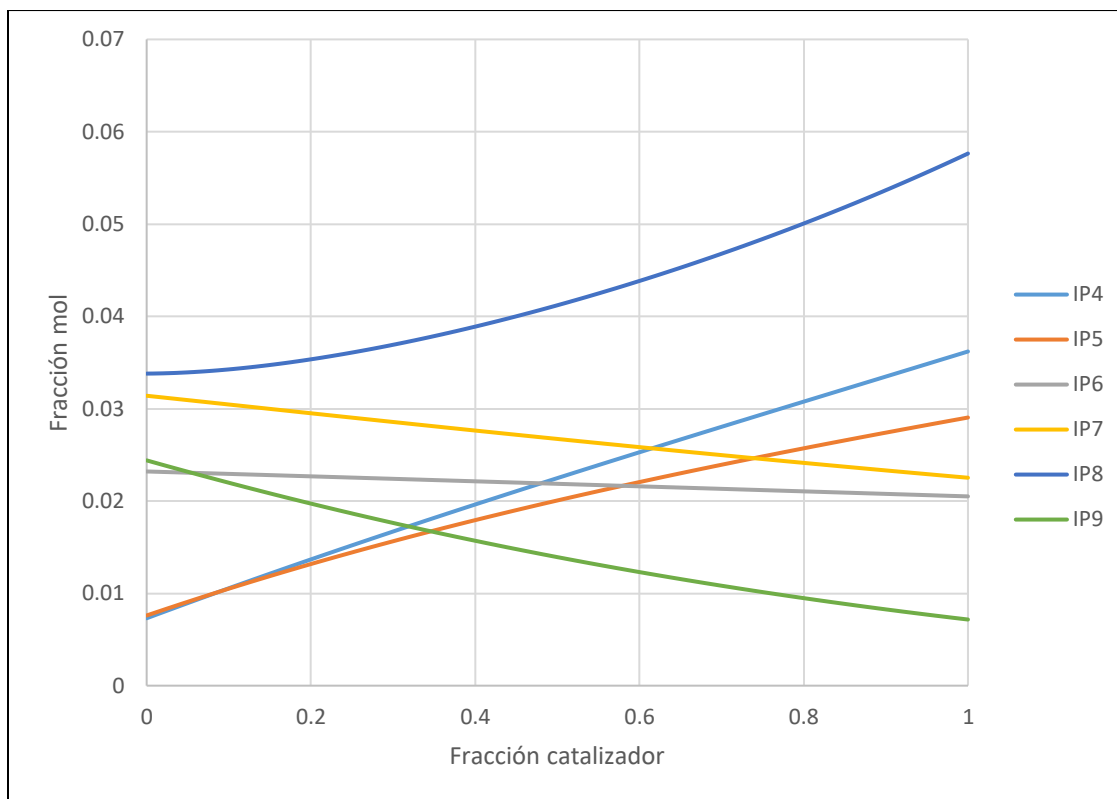


Figura I.2. Consumo y producción de i- parafinas con avance en el catalizador.

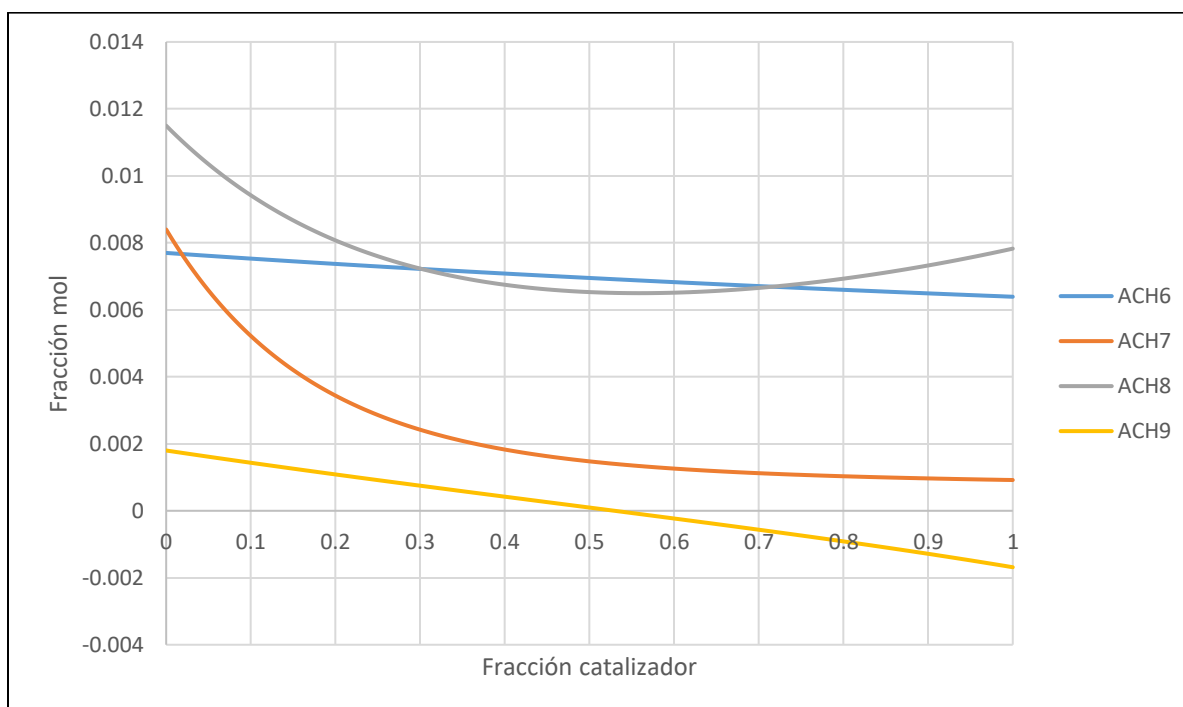


Figura I.3. Consumo y producción de alquilciclohexanos con avance en el catalizador.

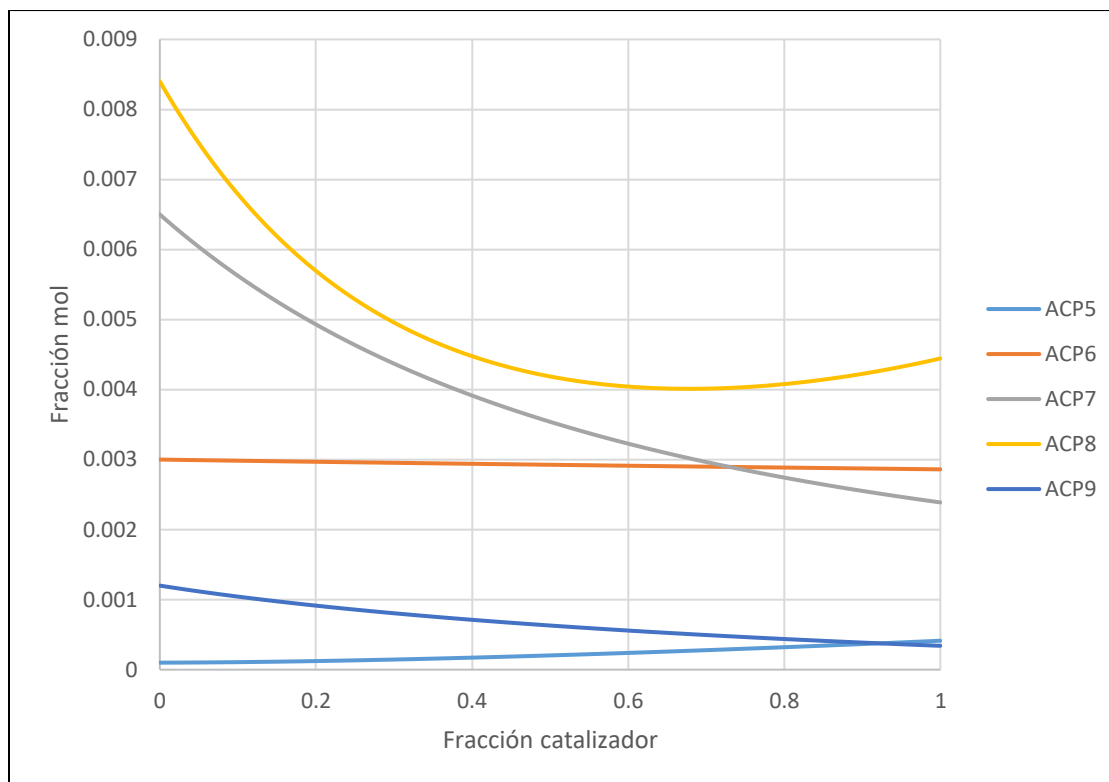


Figura I.4. Consumo y producción de alquilciclopentanos con avance en el catalizador

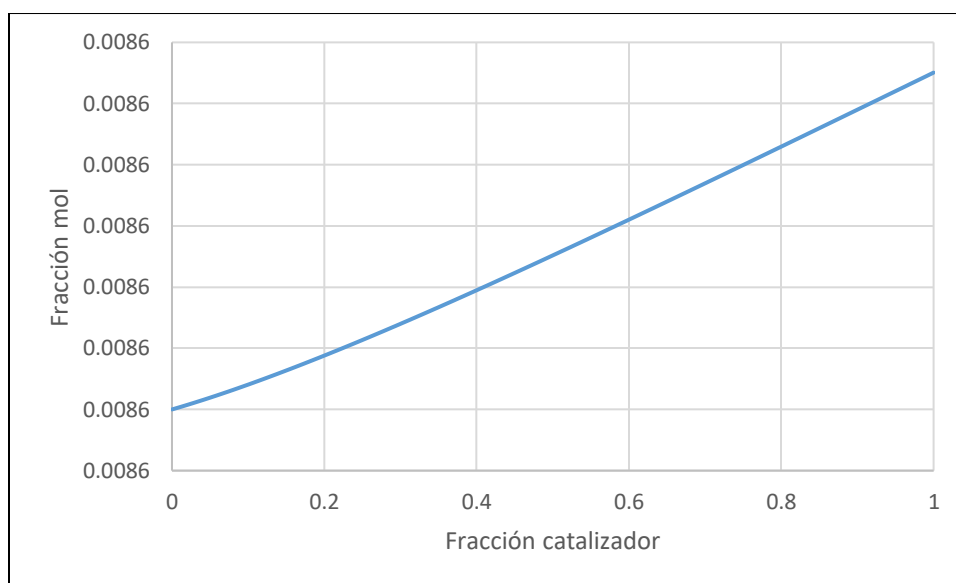


Figura I.5. Consumo y producción de benceno con avance en el catalizador

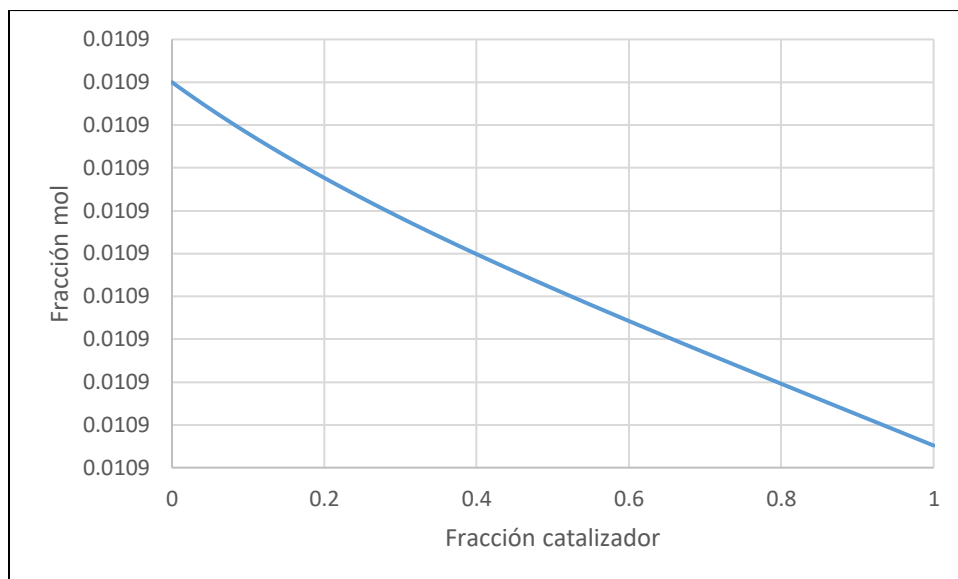


Figura I.6. Consumo y producción de tolueno con avance en el catalizador.

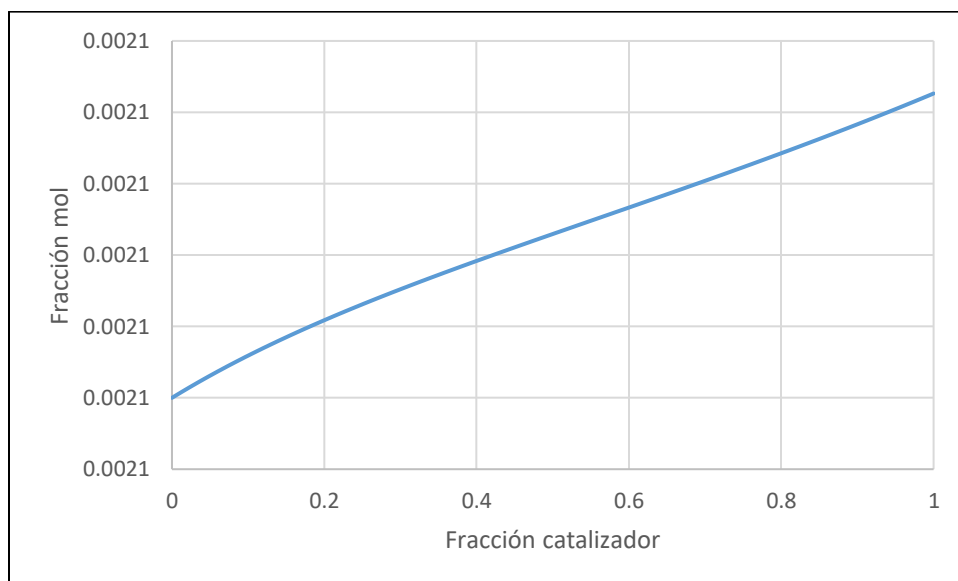


Figura I.7. Consumo y producción del aromático de 8 átomos de carbono con avance en el catalizador.

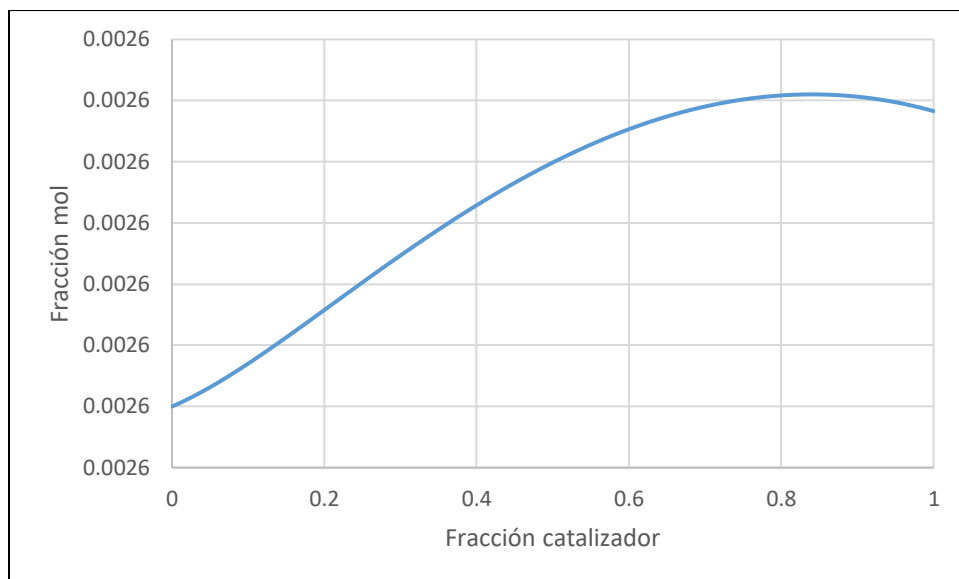


Figura I.8. Consumo y producción del aromático de 9 átomos de carbono con avance en el catalizador.

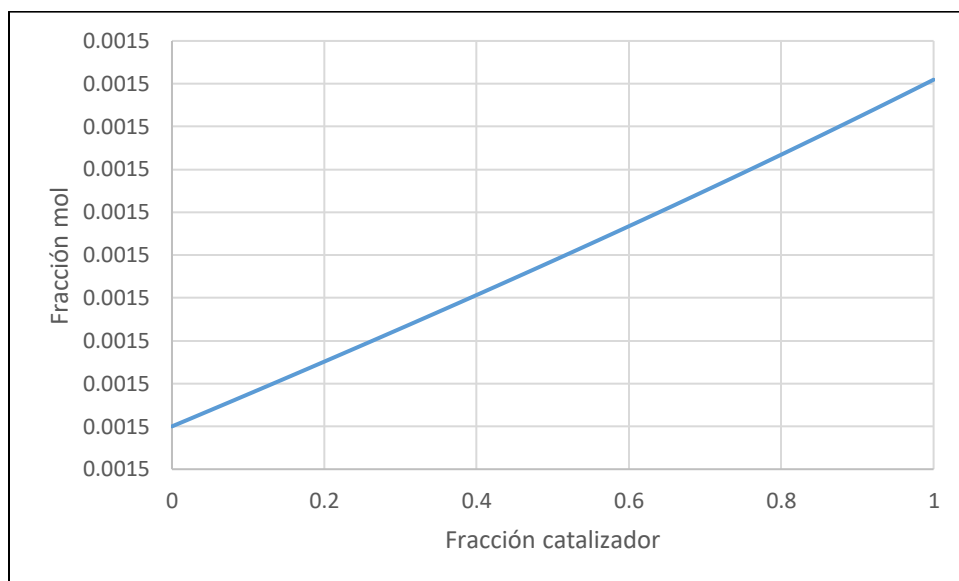


Figura I.9. Consumo y producción de metaxileno con avance en el catalizador.

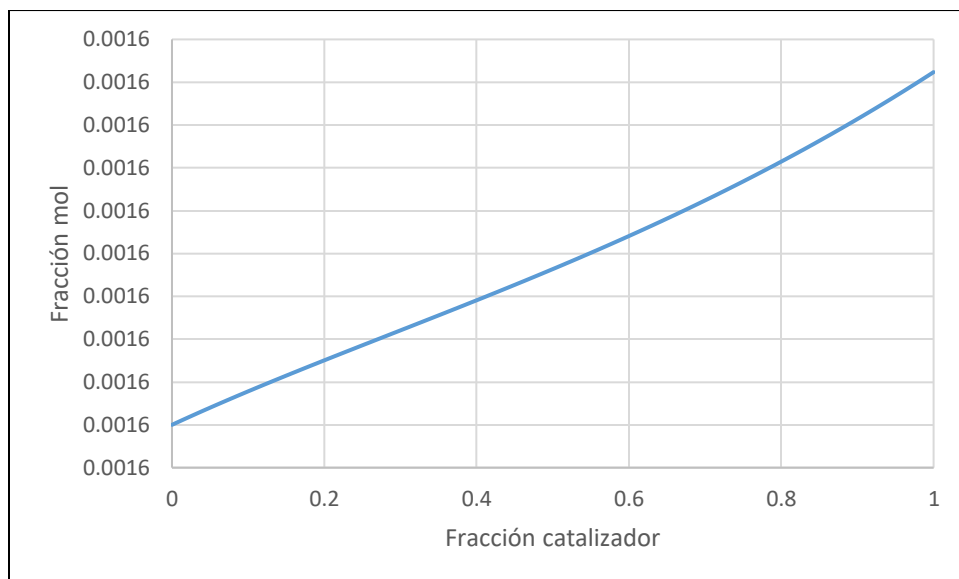


Figura I.10. Consumo y producción de ortoxileno con avance en el catalizador.

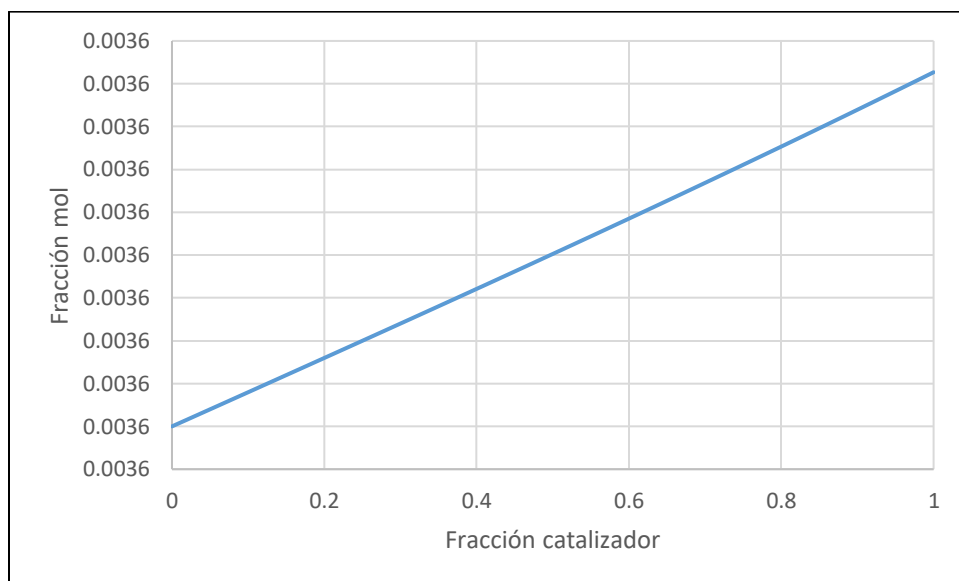


Figura I.11. Consumo y producción de paraxileno con avance en el catalizador.

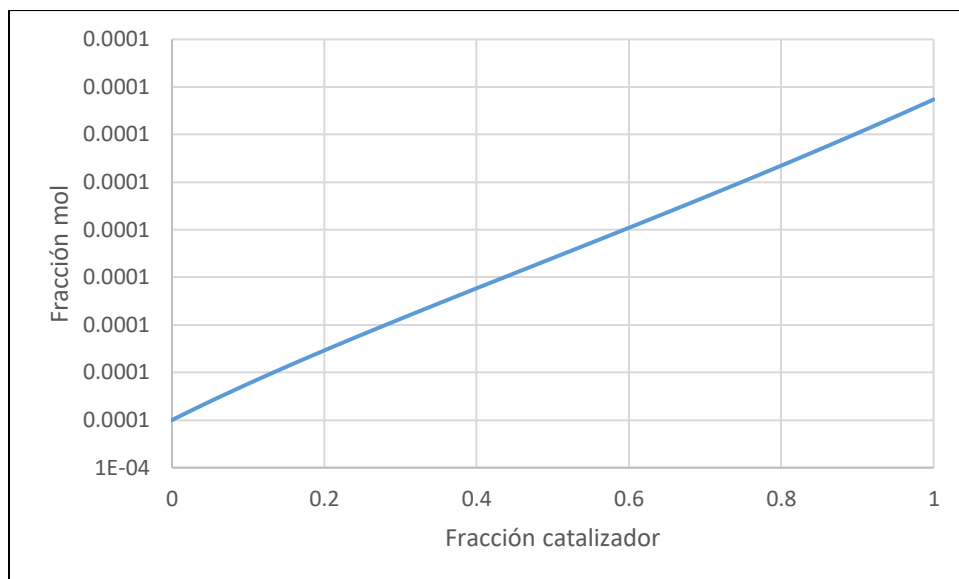


Figura I.12. Consumo y producción de etilbenceno con avance en el catalizador.

Anexo II

II.1. Participación en congresos

II.1.1. XLII Congreso AMIDIQ



La Academia Mexicana de Investigación y Docencia
en Ingeniería Química (AMIDIQ)

otorga el presente

RECONOCIMIENTO

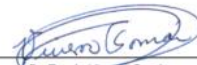
a:

Allin Yarely Juárez, César Abelardo González, Elena María Otazo, José Roberto Villagómez, Martín
Hernández

Por la presentación del trabajo en modalidad cartel:

MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA CINÉTICA QUÍMICA DEL PROCESO DE
REFORMACIÓN CATALÍTICA DE LAS NAFTAS


Dra. María del Rosario Enriquez Rosado
PRESIDENTA DEL AMIDIQ Y DEL COMITÉ ORGANIZADOR


Dr. Tomás Viveros García
PRESIDENTE DEL COMITÉ TÉCNICO

ID: 103

Evento virtual del 08 al 11 de septiembre de 2021



II.1.2. XII Simposio Internacional del Carbono





ESCENARIOS DE MITIGACIÓN DE GEI PROVENIENTES DEL AUTOTRANSPORTE A GASOLINA EN MÉXICO

Juárez-Plata Allin Y.¹, Otazo-Sánchez Elena M.¹, González-Ramírez César A.¹, Villagómez-Ibarra José R.¹ y Hernández-Juárez Martín¹

¹Área Académica de Química, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carr. Pachuca-Tulancingo, km. 4.5, Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hgo., C.P. 42184, MÉXICO.

Autor para correspondencia: allinjuarezplata@gmail.com



Resumen

En México, el sector transporte es responsable del 24.5% de las emisiones de dióxido de carbono (CO₂) relacionadas con la transformación y el uso de la energía, de las cuales, cerca del 93% se atribuyen al subsector vial. La tendencia del uso de combustibles fósiles para vehículos terrestres indica un incremento durante las próximas tres décadas, por lo que se espera mayor generación de gases de efecto invernadero (GEI). En este estudio, se presenta una proyección de la demanda de gasolina hacia el año 2050, y se proponen dos escenarios de mitigación basados en la mejora de la eficiencia energética al aumentar el número de octano. Los resultados muestran que, si toda la gasolina consumida en México es de 92 octanos, se mitigarían más de 7.5 Mt de CO₂ al año.

Palabras clave: demanda de combustible; eficiencia energética; octanaje

Introducción



A nivel nacional, aún no ha sido presentada una propuesta para reducir las emisiones de GEI provenientes del sector autotransporte mediante el mejoramiento del combustible, es por ello que el presente estudio tiene como objetivo el desarrollo de dos escenarios de mitigación de GEI para el transporte vial en México aumentando el número de octano de la gasolina, y, por consecuencia, incrementando la eficiencia energética del vehículo.

Materiales y métodos

Se utilizó el simulador LEAP[®] para el estudio, realizado para el transporte vial con motor a gasolina en México. Se seleccionó el año 2015 como año de referencia, con proyección hacia el año 2050.

Primer escenario de mitigación

Se propone que se elimine el consumo de gasolina Magna (87 octanos) y que se utilice únicamente gasolina Premium (92 octanos)

Segundo escenario de mitigación

Consiste en aumentar el número de octano de la gasolina a 98.

Ambos escenarios se desarrollaron bajo los siguientes criterios:

- El escenario de mitigación inicia en el año 2020.
- El aumento de 5 octanos es proporcional a un incremento del 5% en la eficiencia energética del transporte vial.

Resultados

Primer escenario de mitigación

Si se consume exclusivamente gasolina Premium, disminuye la cantidad de gasolina consumida al año. En la Figura 1, las barras punteadas muestran las emisiones evitadas al incrementar el número de octano a la gasolina Magna. Por ejemplo, para el año 2035 el potencial de mitigación sería de 7 millones de toneladas de GEI a la atmósfera.

Segundo escenario de mitigación

Al considerar un consumo de gasolina de 98 octanos por todo el autotransporte, demanda de gasolina disminuye y el potencial de mitigación sería de 15 millones de toneladas a la atmósfera para el 2035, tal como se muestra en la Figura 2.

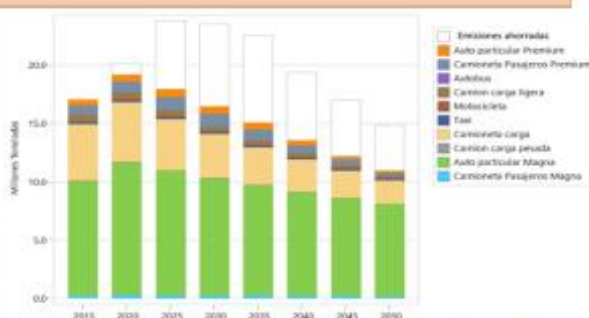


Figura 1. Ahorro de emisiones de GEI en el primer escenario de mitigación

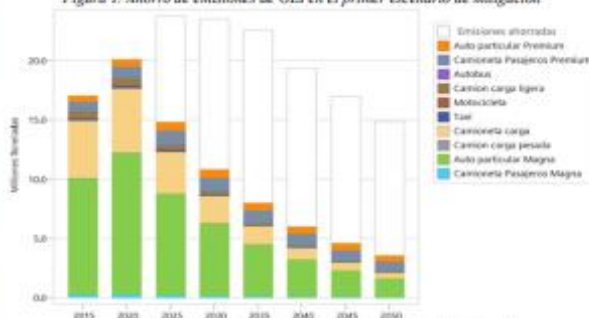


Figura 2. Ahorro de emisiones en el segundo escenario de mitigación

Conclusiones

La creciente demanda en el parque vehicular indica que es necesario establecer medidas de mitigación de GEI provenientes de los combustibles fósiles. Los escenarios de mitigación propuestos son una alternativa para reducir las emisiones de GEI provenientes del autotransporte en México, ya que es posible eliminar de 7 a 15 Mt de CO₂ al año. Si bien no es una solución definitiva, es una medida que puede establecerse durante la etapa de transición de vehículos a gasolina a vehículos eléctricos e híbridos.

Referencias

1. Agencia de Protección Ambiental. (2021). Global Greenhouse Gas Emissions Data. Consultado el 27/07/2021, de EPA Sitio web: <https://www.epa.gov/global-greenhouse-gas-emissions-data>
2. Teter, J., (2020). Tracking Transport 2020. Consultado el 26/08/2021, de Agencia Internacional de Energía. Sitio web: <https://www.iea.org/reports/tracking-transport-2020>
3. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero. Consultado el 27/08/2021, de Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Sitio web: <https://carbono.inai.gob.mx/exadovm/indicadores-emisiones.html>
4. Solís, J., Sheinbaum, C., (2016). Consumo de energía y emisiones de CO₂ del autotransporte en México y escenarios de mitigación. Revista Internacional de Contaminación Ambiental, 32, 7-23
5. Stradling, R., Williams, J., Hamje, H., & Rickard, D. (2016). Effect of Octane on Performance, Energy Consumption and Emissions of Two Euro 4 Passenger Cars. Transportation Research Procedia, 14, 3159-3168. <https://doi.org/10.1016/j.trpro.2016.05.356>



II.1.3. VI Congreso Nacional y I Congreso Internacional ITSON



El Departamento de Ciencias del Agua y Medio Ambiente del Instituto Tecnológico de Sonora, a través de sus Programas Educativos de Ingeniero en Ciencias Ambientales e Ingeniero Químico, en conjunto con los Cuerpos Académicos de Ciencias del Agua, Biotecnología para el Tratamiento y Aprovechamiento de Residuos y Tratamiento de Aguas y Tecnologías Alternas



OTORGA LA PRESENTE
CONSTANCIA
A:

Allin Yarely Juárez Plata, Elena María Otazo Sánchez, César Abelardo González Ramírez, José Roberto Villagómez Ibarra, y Martín Hernández Juárez

Por su valiosa participación con el tema:

“Selección de escenarios de mitigación de GEI provenientes del autotransporte a gasolina en México”

en el VI Congreso Nacional y I Congreso Internacional de Tecnología y Ciencias Ambientales

Llevado a cabo en modalidad híbrida (remoto-presencial) del 17 al 21 de octubre del 2022, en Cd. Obregón, Sonora

FOLIO CNITCA-P22-031


Mtro. David Heberto Encinas Yepis
Coordinador General del Congreso


Dr. Enrico Arturo Yépez González
Responsable del Comité Científico



SELECCIÓN DE ESCENARIOS DE MITIGACIÓN DE GEI PROVENIENTES DEL AUTOTRANSPORTE A GASOLINA EN MÉXICO

Allin Yancy Juárez Plata^{1*}, Elena María Otazo Sánchez², César Abelardo González Ramírez²,
José Roberto Villagómez Ibarra² y Martín Hernández Juárez²

¹Área Académica de Química, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo,
Carr. Pachuca-Tulancingo, km. 4.5, Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hgo., C.P. 42184, MÉXICO.

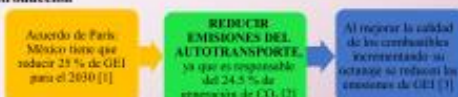
Autor para correspondencia: allinjuarezplata@gmail.com



Resumen

En el Acuerdo de París celebrado en 2015 y ratificado en Nueva York en 2016, México se comprometió a reducir sus emisiones de GEI en un 25 % para el año 2030. Diversas estrategias han sido propuestas para el cumplimiento de dicho compromiso. Considerando que el sector transporte es responsable del 24 % de la generación de CO₂, se propone mejorar de la calidad de los combustibles incrementando el número de octanos de la gasolina. Este trabajo tiene como objetivo demostrar que al aumentar la eficiencia energética de los combustibles se pueden reducir las emisiones de GEI, para lo cual se proponen dos escenarios de mitigación y se selecciona el que tiene mayor posibilidad de llevarse a cabo en México, cuyo potencial de mitigación es de 35,900 Mt de CO₂ y 14,600 km³ de gasolina para el año 2050.

Introducción



La tendencia del uso de combustibles fósiles para vehículos terrestres indica un incremento durante las próximas tres décadas, por lo que se espera mayor generación de gases de efecto invernadero [4]. Diversas investigaciones han demostrado que es posible mejorar la eficiencia energética de los combustibles hasta en un 5 % al incrementar el índice de octano [5]. En este estudio se presenta una proyección de la demanda de gasolina hacia el año 2050, proponiendo escenarios de mitigación de GEI basados en el aumento del octanaje, para seleccionar el escenario más posible para México.

Metodología

Se utilizó LEAP[®] para crear escenarios de mitigación. Se tomó el año 2015 para desarrollar el escenario base, con datos sobre el autotransporte a gasolina en México. Se estableció el escenario comercial y el de referencia, el primero no considera la introducción de autos eléctricos e híbridos y el segundo asume un 5 % de penetración de dicha tecnología cada 5 años. Se crearon dos escenarios de mitigación. En el primero se establece que todos los autos consumen gasolina de 92 octanos exclusivamente y en el segundo escenario de 98 octanos, asumiendo un incremento de la eficiencia energética del combustible del 5 % anual a partir del año 2020 y hasta el 2050.

Resultados

La Figura 1 representa el potencial de mitigación de la demanda energética para cada escenario de mitigación considerando y descartando la introducción de tecnologías en autos eléctricos e híbridos. Se puede observar que los incisos a y c indican un mayor ahorro de energía porque se asume que todos los autos utilizan gasolina de 92 y 98 octanos, respectivamente. Los incisos b y d muestran un ahorro menor en combustible porque parte de la flota vehicular corresponde a autos eléctricos e híbridos y no participan del potencial de mitigación derivado de utilizar gasolina de 92 y 98 octanos. Sin embargo, el potencial de mitigación considerando el uso exclusivo de gasolina de 92 octanos y con penetración de autos eléctricos e híbridos puede ser de 14,600 km³ totales para el año 2050. Por otra parte, el potencial de mitigación para las emisiones de CO₂ es mayor para los casos en donde no se considera la introducción de autos eléctricos e híbridos, tal como se muestra en los incisos a y c de la Figura 2, mientras que en los incisos b y d se aprecia un potencial de mitigación más realista, puesto que incluye autos eléctricos e híbridos, por lo que el potencial de mitigación de CO₂ es de 35,900 Mt totales para el año 2050.

Conclusiones

El escenario de mitigación más realista para México es el que propone el uso exclusivo de gasolina de 92 octanos considerando la introducción de autos eléctricos e híbridos, que, aunque en baja cantidad, ya se encuentran en circulación en el país. El uso exclusivo de gasolina de 98 octanos se puede denominar "escenario ideal", ya que representa el mayor potencial de mitigación de GEI, sin embargo, aún se encuentra distante de las posibilidades para la nación.

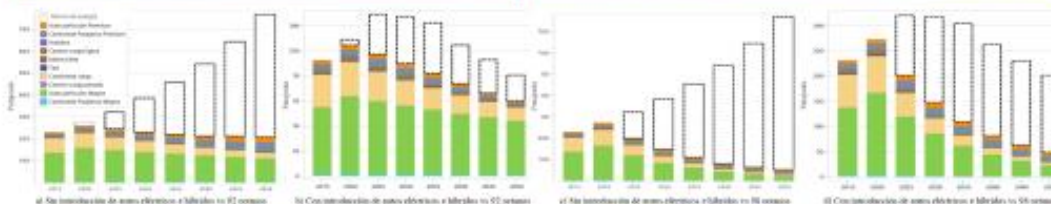


Figura 1. Potencial de mitigación de la demanda energética

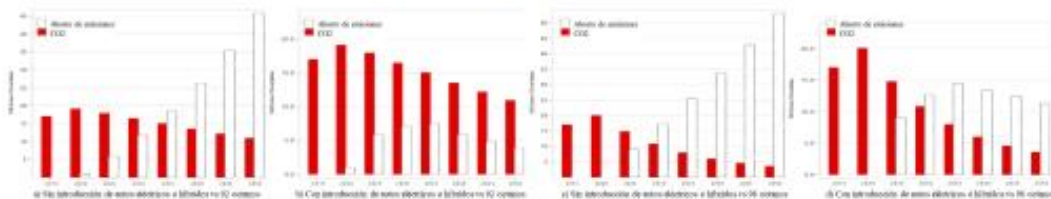


Figura 2. Potencial de mitigación de CO₂

Referencias

1. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). Sexta Comunicación Nacional y Segundo Informe Bienal de Actualización ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático. Consultado el 17/09/2020, de Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Sitio web: <https://www.gob.mx/inec/documentos/sexta-comunicacion-nacional-que-le-crece-7400974>
2. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). Elementos para inventario de fuentes móviles, informe final. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, Ciudad de México
3. Stradling, R., Williams, J., Harje, H., & Rickard, D. (2016). Effect of Octane on Performance, Energy Consumption and Emissions of Two Euro 4 Passenger Cars. Transportation Research Procedia, 14, 3199–3198. <https://doi.org/10.1016/j.trpro.2016.05.256>
4. British Petroleum, (2019). BP Energy Outlook. Consultado el 20/11/2020, de British Petroleum. Solicitado el 21 de febrero de 2022 de <https://www.bp.com/content/dam/bp/business-division/global-energies/pdf/energy-outlook/energy-outlook-bp-energy-outlook-2019.pdf>
5. Chow, E. y Heywood, J., (2014). Benefits of a Higher Octane Standard Gasoline for the U.S. Light-Duty Vehicle Fleet, Society of Automotive Engineers, 1, 1–18.

Anexo III

III.1. Artículo publicado

ESCENARIOS DE MITIGACIÓN DE GEI PROVENIENTES DEL AUTOTRANSPORTE A GASOLINA EN MÉXICO GHG MITIGATION SCENARIOS FROM GASOLINE TRANSPORTATION IN MEXICO

Juárez-Plata Allin Y.¹; Otazo-Sánchez Elena M.¹; González-Ramírez César A.^{1*}; Villagómez-Ibarra José R.¹ y Hernández-Juárez Martín¹

¹Área Académica de Química, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carr. Pachuca-Tulancingo, km. 4.5, Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hgo., C.P. 42184, MÉXICO.

*Autor para correspondencia: cramirez@uah.edu.mx

RESUMEN

En México, el sector transporte es responsable del 24.5% de las emisiones de dióxido de carbono (CO₂) relacionadas con la transformación y el uso de la energía, de las cuales, cerca del 93% provienen al subsector vial. La tendencia del uso de combustibles fósiles para vehículos terrestres en México indica un incremento durante las próximas tres décadas, por lo que se espera mayor generación de gases de efecto invernadero (GEI). En este estudio, se presenta una proyección de la demanda de gasolina hacia el año 2050, y se proponen dos escenarios de mitigación basados en la mejora de la eficiencia energética al aumentar el número de octano. Los resultados muestran que, si toda la gasolina consumida aumentara a 92 octanos, se mitigarían 35,900 Mt de CO₂ al año 2050.

Palabras clave: demanda de gasolina; eficiencia energética; número de octano, mitigación de GEI

ABSTRACT

In Mexico, the transportation sector is responsible for 24.5% of carbon dioxide (CO₂) emissions related to the transformation and use of energy, of which about 93% are provided from the road subsector. The fossil fuels trend use of road vehicles indicates an increase during the next three decades in Mexico, therefore, an increase in GHG generation is expected. In this study, a projection of gasoline demand is presented towards the year 2050, and mitigation scenarios are proposed based on the improvement of energy efficiency by increasing the octane number. Results show that, if all the gasoline consumed in Mexico is 92 octanes, 35,900 Mt of CO₂ would be mitigated in 2050.

Keywords: fuel demand; energy efficiency; octane number, GHG mitigation

INTRODUCCIÓN

Los gases de efecto invernadero (GEI) son la causa principal del calentamiento global. Su aumento en la atmósfera proviene de las actividades humanas durante los últimos 150 años. A nivel mundial, la mayor fuente de emisiones de GEI proviene de la quema de combustibles fósiles para la producción de electricidad y para generar el combustible de los medios de transporte (EPA, 2021). La categoría energía es responsable del 76 % las emisiones de GEI en todo el mundo, de los cuales el 15 % corresponde al sector transporte (WRI, 2021) y cerca del 95 % de la energía utilizada para los vehículos tiene su origen en los combustibles fósiles (EPA, 2021).

En 2019 se registraron en el mundo más de 30 Gt de emisiones de CO₂ relacionadas con el sector energético (IEA, 2020), de las cuales 7.2 Gt de CO₂ corresponden al sector transporte, 24 % del total. Los autotransportes generaron el mayor número de emisiones del sector, al registrar 3.6 Gt de CO₂, que corresponde al 50 % de las emisiones totales (Teter, 2020).

El autotransporte ha crecido considerablemente en las últimas décadas a nivel mundial. De acuerdo con datos reportados en un estudio sobre incremento vehicular, se estima que su tasa anual de crecimiento llegará hasta 6 % para el año 2030 en países como Ecuador, Chile, República Dominicana y Egipto, mientras que para India y China el crecimiento será de 8 % y 11 % respectivamente. En México, se estima que la tasa de crecimiento anual para la flota vehicular será de 5 % para el año 2030 (Dargay y col., 2007), lo que implica un aumento en la demanda de combustible, especialmente de gasolina, y, por lo tanto, un incremento en las emisiones de GEI.

En la Sexta Comunicación Nacional ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático México informó la generación de 700 MT de CO₂ durante el año 2015, de las cuales, el 22.9 % fue emitido por el autotransporte. Es decir, más de 159 MT de CO₂ (INECC, 2018).

Estudios recientes indican que las emisiones globales provenientes del autotransporte serán de aproximadamente 2.5 GT de CO₂ para el año 2030 (IEA, 2020), mientras que en México se esperan

300 MT de CO₂ del transporte vial, de los cuales, aproximadamente el 30 % serán emitidos por vehículos a gasolina (Solís y Sheinbaum, 2016), debido al crecimiento vehicular de tecnología convencional.

El rol de la gasolina en México y en el mundo.

Mundialmente, los derivados del petróleo son la mayor fuente de energía para el transporte y la Perspectiva Energética Internacional, IEO por sus siglas en inglés, indica que su consumo reducirá gradualmente de un 96 % a un 88 % del año 2012 al 2040. Específicamente, el consumo mundial de gasolina de motor, será de 9 billones de *Petajoules* para el año 2040, por ser el tipo de combustible mayormente utilizado en el sector transporte (EIA, 2016). Coincidentemente, *British Petroleum* emitió una proyección del uso de combustibles para el autotransporte a nivel global, asumiendo que la gasolina continuará representando la principal fuente de energía con más del 90 % de participación, a pesar de la introducción de vehículos eléctricos, híbridos y a gas natural (BP, 2019).

A nivel nacional se espera que el sector transporte genere un consumo energético superior a los 4 mil *Petajoules* para el año 2040, de los cuales el 43 % será atribuido al uso de la gasolina (Solís y Sheinbaum, 2016).

En México, la gasolina es clasificada como *Magna*, o de bajo octanaje, y como *Premium*, o de alto octanaje. (CRE, 2017). En promedio, cerca del 81 % del consumo nacional de gasolina es del tipo *Magna* (SIE, 2019). Algunos investigadores sugieren que una de las principales diferencias entre ambos tipos de combustibles, es que la gasolina de bajo número de octano genera mayor cantidad de emisiones de GEI en comparación con la de alto octanaje. Un estudio realizado a gasolinas de 87 y 92 octanos, indicó que las emisiones generadas por la gasolina de 92 octanos son menores en comparación con la de 87 octanos (Pérez, 2017).

Beneficios de la gasolina de alto octanaje

El rendimiento energético de los motores de gasolina puede ser medido utilizando el Número de Octano Investigativo (*RON*, por sus siglas en inglés) o mediante el Número de Octano del Motor

(MON, por sus siglas en inglés) y ambos describen el poder antidetonante del combustible en diferentes condiciones. Se ha reportado que los motores que trabajan con un RON alto, a una relación de compresión más alta, presentan beneficios en la eficiencia del combustible, disminuyendo su consumo de gasolina en un mismo recorrido (Stradling y col., 2016).

Un estudio aplicado a diferentes vehículos a gasolina de los Estados Unidos demostró que la eficiencia energética puede incrementar más de 5 % al sustituir la gasolina de 87 octanos por la gasolina de 92 octanos, reduciendo simultáneamente la cantidad de emisiones de GEI a la atmósfera (Chow y Heywood, 2014).

Otro estudio dio a conocer que en Estados Unidos los vehículos podrían reducir el consumo anual de gasolina entre un 3 % y un 4.4 % al reemplazar la gasolina de 87 y 92 octanos por la gasolina de 98 octanos. Además, se demostró que las emisiones netas de CO₂ se reducen de 2.5 % a 4.7 % del total proveniente de los vehículos ligeros, lo que representa no sólo un beneficio económico, sino ambiental (Speth y col., 2014).

Leone y col. compararon los resultados de diferentes pruebas en vehículos utilizando gasolinas de 91 y 98 octanos y reportaron un aumento en la eficiencia del combustible del 4.4 %, con un ahorro del 1.1 % de las emisiones de CO₂ (Leone y col, 2015).

Compromisos de México ante el cambio climático

En 2012 se aprobó la Ley General de Cambio Climático en México, que establece estrategias de mitigación de gases de efecto invernadero por sector. Específicamente, para el sector autotransporte se proponen, entre otras medidas, la construcción de ciclovías, implementación de programas de movilidad sustentable en zonas urbanas para reducir el uso de automóviles particulares e impulsar la penetración tecnológica de vehículos eléctricos e híbridos, entre otras (Congreso de la Unión, 2012).

En el Acuerdo de París, firmado en 2016 y ratificado en Nueva York en 2017, México se comprometió a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en un 25 % para el año 2030 (SEMARNAT, 2019). Durante la 26ª Conferencia de las Partes de Naciones Unidas sobre Cambio Climático (COP26), Estados Unidos y la Unión Europea propusieron la reducción de las emisiones de metano en un 30 % para el año 2030, compromiso al cuál se unieron México y otros países (SRE, 2021).

Entre las estrategias de mitigación que ha propuesto el gobierno mexicano, aún no ha sido presentada una propuesta para reducir las emisiones de GEI provenientes del sector autotransporte aumentando la eficiencia energética mediante el mejoramiento del combustible. Por ello, el presente estudio tiene como objetivo calcular el potencial de mitigación de dos escenarios de emisiones GEI para el transporte vial en México aumentando el número de octano de la gasolina con el incrementando la eficiencia energética del vehículo que sirva para justificar nuevas políticas energéticas en cuanto a la calidad de la gasolina Magna.

MATERIALES Y MÉTODOS

El estudio fue realizado para el transporte vial con motor a gasolina en México. La flota vehicular se tomó de lo reportado en 2015 por el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC, 2018) y fue clasificada de acuerdo con el tipo de vehículo, su uso, y el tipo de gasolina que emplea, tal como se presenta en la Tabla 1.

Tabla 16. Clasificación de la flota vehicular en México, año 2015.

<i>Tipo de vehículo</i>	<i>Uso</i>	<i>Tipo de gasolina</i>	<i>Número de vehículos</i>
Motocicleta	Particular	Magna	2,637,264
Automóvil	Particular	Magna	13,218,967
Automóvil	Particular	Premium	3,100,745
Automóvil	Taxi	Magna	555,291
Camioneta	Particular	Magna	4,703,448
Camioneta	Particular	Premium	1,103,278
Camioneta	Carga	Magna	3,951,453
Autobús	Transporte público	Magna	17
Camión menor a 3.8 Ton	Carga	Magna	983,793
Camión mayor a 3.8 Ton	Carga	Magna	113,368

Datos reportados por Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC, 2018).

Se asume que el consumo de gasolina Premium para motocicletas, taxis, camiones y autobuses es despreciable, por lo que, de acuerdo con el Balance Energético de la Secretaría de Energía, la gasolina Premium consumida fue distribuida entre automóviles y camionetas de uso particular tal como se muestra en el Cuadro I (SENER, 2015).

Se utilizó el simulador *LEAP*[®], por sus siglas en inglés, *Low Emissions Analysis Platform* (SEI, 2018), para calcular la demanda de gasolina y sus emisiones de GEI en el escenario inercial y los correspondientes a dos medidas de mitigación que se describen a continuación.

Escenario base

Para el caso de estudio, se seleccionó el año 2015 como año base para calcular las proyecciones hasta el año 2050. En la Tabla 2 se presentan los datos utilizados para la simulación en *LEAP*[®], correspondientes a parque vehicular (INECC, 2018), recorrido promedio anual (IMT, 2018), eficiencia energética (IMT, 2015) y tasa de crecimiento anual promedio para cada tipo de vehículo (Solís y Sheinbaum, 2016).

Tabla 17. Parámetros utilizados para los cálculos

<i>Tipo de vehículo</i>	<i>Recorrido anual promedio¹ (km/vehículo)</i>	<i>Eficiencia energética² (MJ/km)</i>	<i>Tasa de crecimiento³ (%)</i>
Motocicleta	28,835	1.7956	4.00
Auto particular	12,487	2.4504	4.20
Taxi	76,650	2.4504	3.40
Camioneta pasajeros	14,600	3.1588	4.00
Camioneta carga	21,900	3.1588	2.03
Autobús	78,475	4.2590	1.00
Camión carga ligera	29,200	3.5586	4.40
Camión carga pesada	22,922	3.6000	2.90

¹ IMT, 2018

² IMT, 2015

³ Solís y Sheinbaum, 2016

De acuerdo con la Sexta Comunicación Nacional y Segundo Informe Bienal de Actualización ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (INECC, 2018), los factores de emisión de los compuestos considerados para la gasolina mexicana se presentan en la Tabla 3.

Tabla 18. Factores de emisión de la gasolina

<i>Compuesto</i>	<i>Valor</i>
CO ₂	73.79116 Mt/TJ
CO	8000 kg/TJ

CH ₄	3.8 kg/TJ
N ₂ O	5.7 kg/TJ
NO _x	600 kg/TJ
SO ₂	13.84 kg/TJ
COVDM	1500 kg/TJ
Carbono negro	0.15 kg/TJ
PM 2.5	7.38 kg/TJ

INECC, 2018

Escenario de referencia BAU

En el escenario de referencia se calcula el crecimiento vehicular y la demanda energética sin considerar ningún cambio en las tasas de crecimiento, así como las correspondientes emisiones de GEI para el año 2050, sin propuestas de mitigación. A este tipo de escenario se nombra habitualmente BAU del inglés “Business as Usual”.

Escenario de referencia *probable*

Se diseña como un escenario de referencia más *probable* ante la tendencia mundial del uso de nuevas tecnologías automotrices y contempla la penetración tecnológica en México de un 5 % quinquenal de vehículos eléctricos y un 5 % quinquenal de vehículos híbridos, considerado en el uso de motocicletas, automóviles y camionetas de pasajeros.

Escenario de mitigación *posible* (100% RON 92)

Para reducir la cantidad de emisiones de GEI provenientes de la gasolina en el autotransporte, se propone aumentar la eficiencia energética de los vehículos mediante el mejoramiento del número de octano del combustible. En este escenario se propone la eliminación de la producción de gasolina Magna (87 octanos) y que toda la oferta de gasolina sea únicamente de calidad Premium (92 octanos).

Para el cálculo de la demanda energética y las emisiones de GEI, se asumieron los siguientes criterios:

- La proyección se realiza del año 2015 al 2050, iniciando la sustitución de combustible Magna por Premium a partir del año 2020.
- El aumento de 5 octanos es proporcional a un incremento del 5 % en la eficiencia energética del transporte vial a gasolina.
- No considera la introducción progresiva de autos eléctricos e híbridos.

Escenario de mitigación *deseable* (100% RON 98)

Este escenario de mitigación consiste en aumentar el número de octano de toda la gasolina ofertada en México a 98 octanos, tal y como se utiliza en algunos países de la Unión Europea. Al igual que en el primer escenario, se asume un incremento en la eficiencia energética a medida que el número de octano aumenta.

Para el cálculo de la demanda energética y las emisiones de GEI, se asumieron los siguientes criterios:

- La proyección se realiza del año 2015 al 2050, iniciando la sustitución de combustible Magna y Premium por combustible de 98 octanos a partir del año 2020.
- Se considera un incremento de 5 % y 10 % en la eficiencia energética al aumentar 11 octanos a la gasolina Magna y 6 octanos a la gasolina Premium, respectivamente. 6 OCTANOS
- No se considera la introducción progresiva de autos eléctricos e híbridos.

RESULTADOS

En este trabajo se definen dos escenarios de referencia para ser comparados con las medidas de mitigación propuestas. En el primer escenario se considera que no se altera el estado actual, y se denomina escenario BAU. El segundo escenario contempla la introducción de autos híbridos y autos eléctricos, denominado escenario probable.

Escenarios de referencia

En la Figura 1 se muestra la proyección del parque vehicular en México que prácticamente se triplica en el año 2050. Se aprecia que los autos particulares que utilizan gasolina tipo Magna siguen representando la mayor demanda en el país.

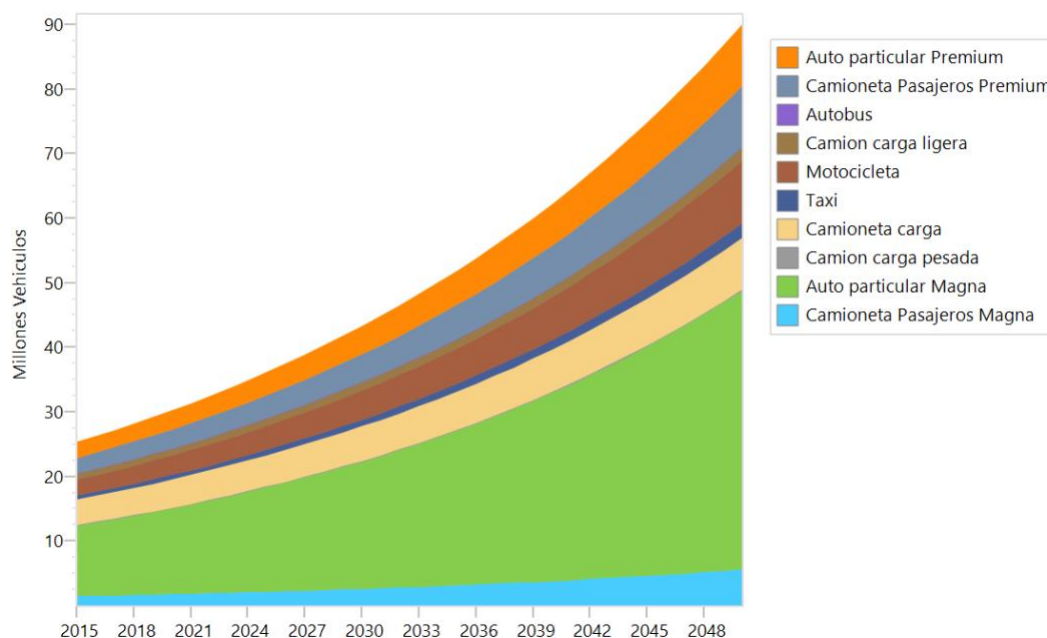


Figura 13. Demanda de vehículos a gasolina en México.

a) Escenario BAU

Se define el escenario de referencia “Business as Usual”, en donde se considera que no hay ningún cambio. La correspondiente demanda energética calculada se muestra en la Figura 2.

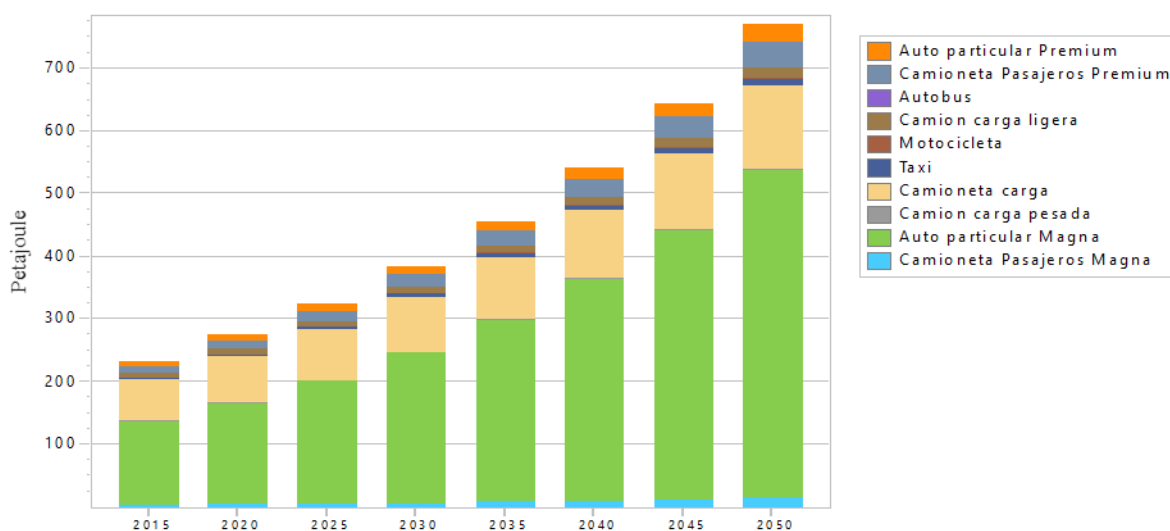


Figura 14. Demanda energética en el escenario BAU

De acuerdo con el escenario BAU, al no considerar la penetración de tecnologías de autos híbridos y eléctricos, la demanda energética del autotransporte a gasolina en México aumentará de 220 PJ en 2015 a 790 PJ en el año 2050, tal como se muestra en la Figura 2. En términos de volumen, el consumo de gasolina para el 2015 fue de 6,600 hectómetros cúbicos y la demanda esperada para el

año 2050 será de 23,800 hectómetros cúbicos. La gasolina Magna será la de mayor consumo, principalmente en autos particulares.

Consecuentemente, las emisiones de GEI y contaminantes también aumentarán. En la Figura 3 se muestran los resultados en millones de toneladas de CO₂ que estará generando cada tipo de vehículo hasta el año 2050.

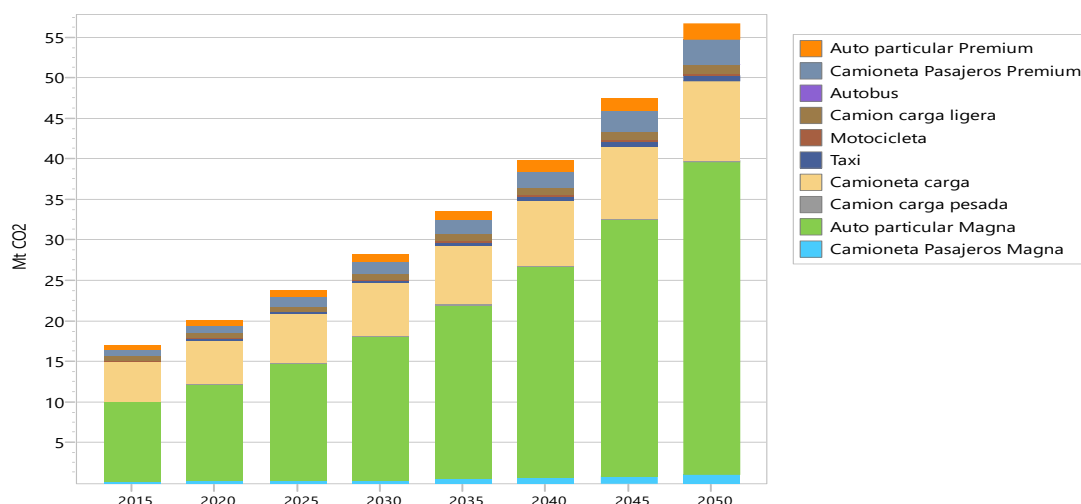


Figura 15. Emisiones de CO₂ en el escenario BAU.

Las emisiones de CO₂ se triplicarían al año 2050 en comparación con el año base 2015 y en correspondencia con la gráfica de la Figura 2, provienen principalmente de la gasolina Magna.

Las figuras 4 y 5 muestran las emisiones de GEI y contaminantes, respectivamente, que se generarán de acuerdo con el escenario BAU.

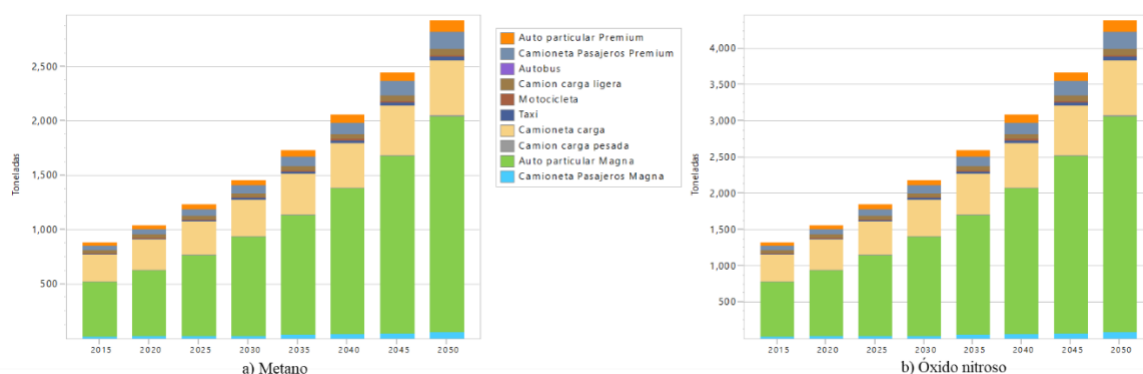


Figura 16. Emisiones de GEI en el escenario BAU.

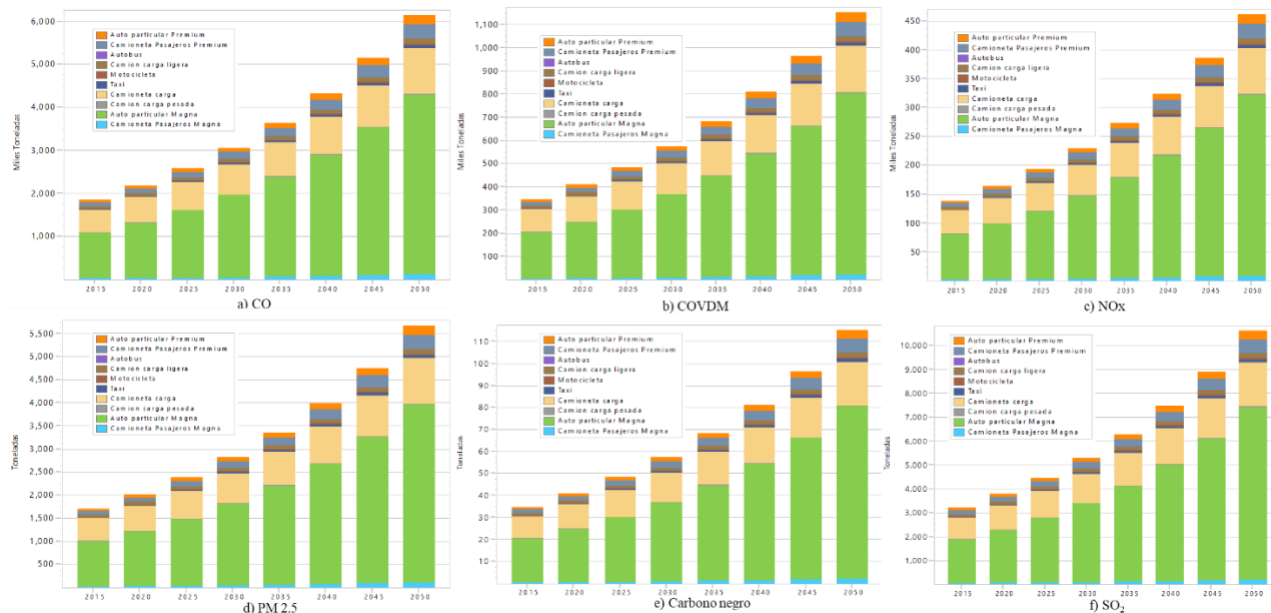


Figura 17. Contaminantes en el escenario BAU

b) Escenario probable

El escenario inercial más probable contempla de manera conservadora la penetración de 5% de autos eléctricos e híbridos cada cinco años y se calculan las emisiones de GEI y contaminantes ante la reducción en la demanda de combustible, como se presenta en las Figuras 6 a 8.

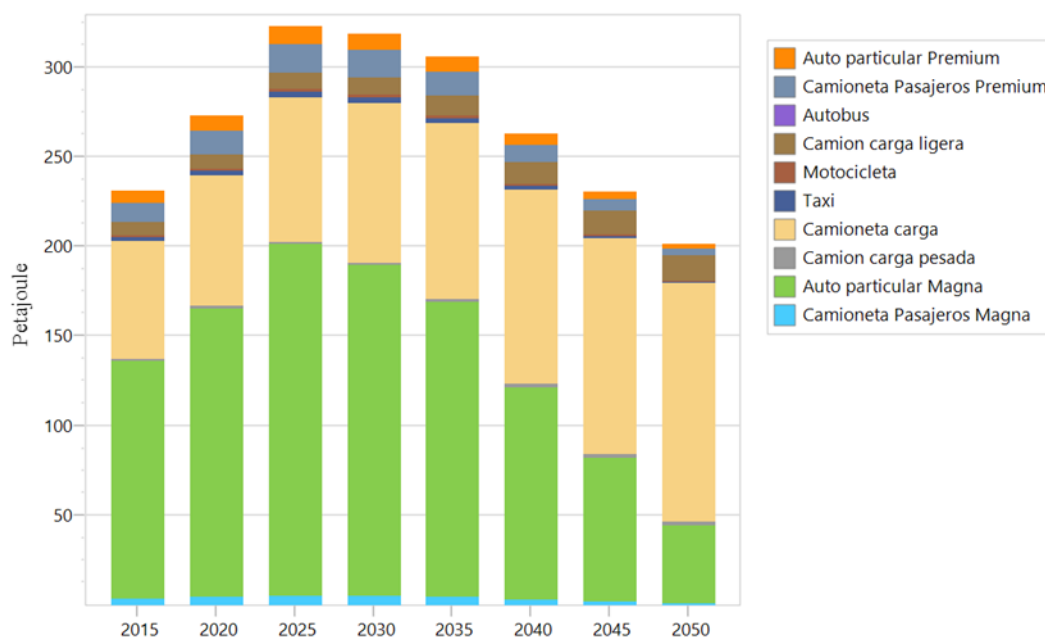


Figura 18. Demanda energética en el escenario probable.

La demanda energética crece gradualmente hasta el año 2025, y debido a la introducción de tecnologías de autos eléctricos e híbridos, se observa una disminución de 140 PJ en el consumo de combustible desde el año 2025 al año 2050, lo que equivale 4,200 hectómetros cúbicos de gasolina.

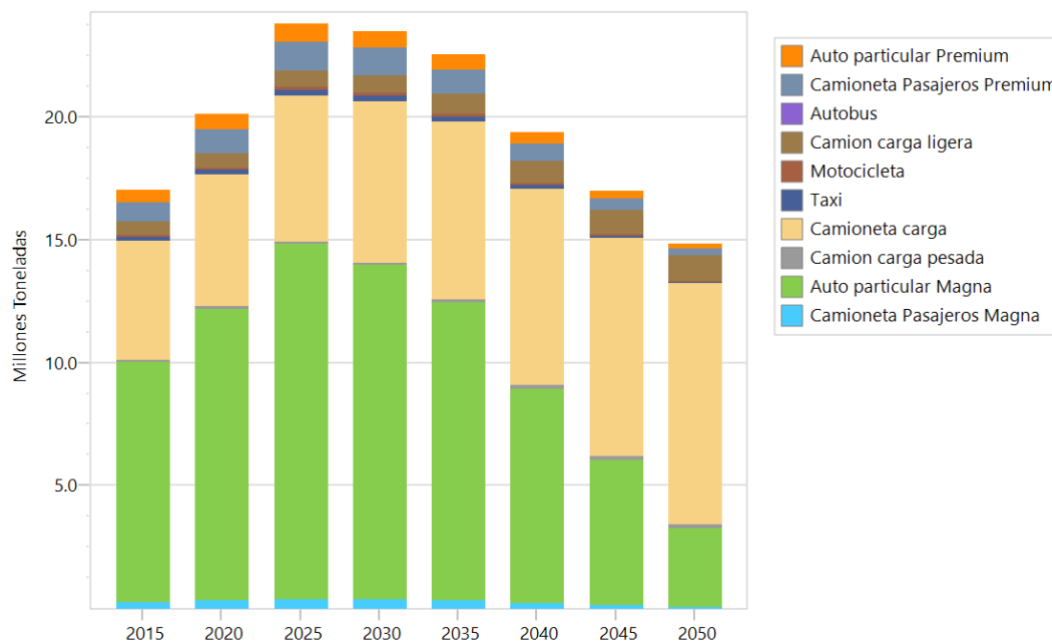


Figura 19. Emisiones de CO₂ en el escenario probable.

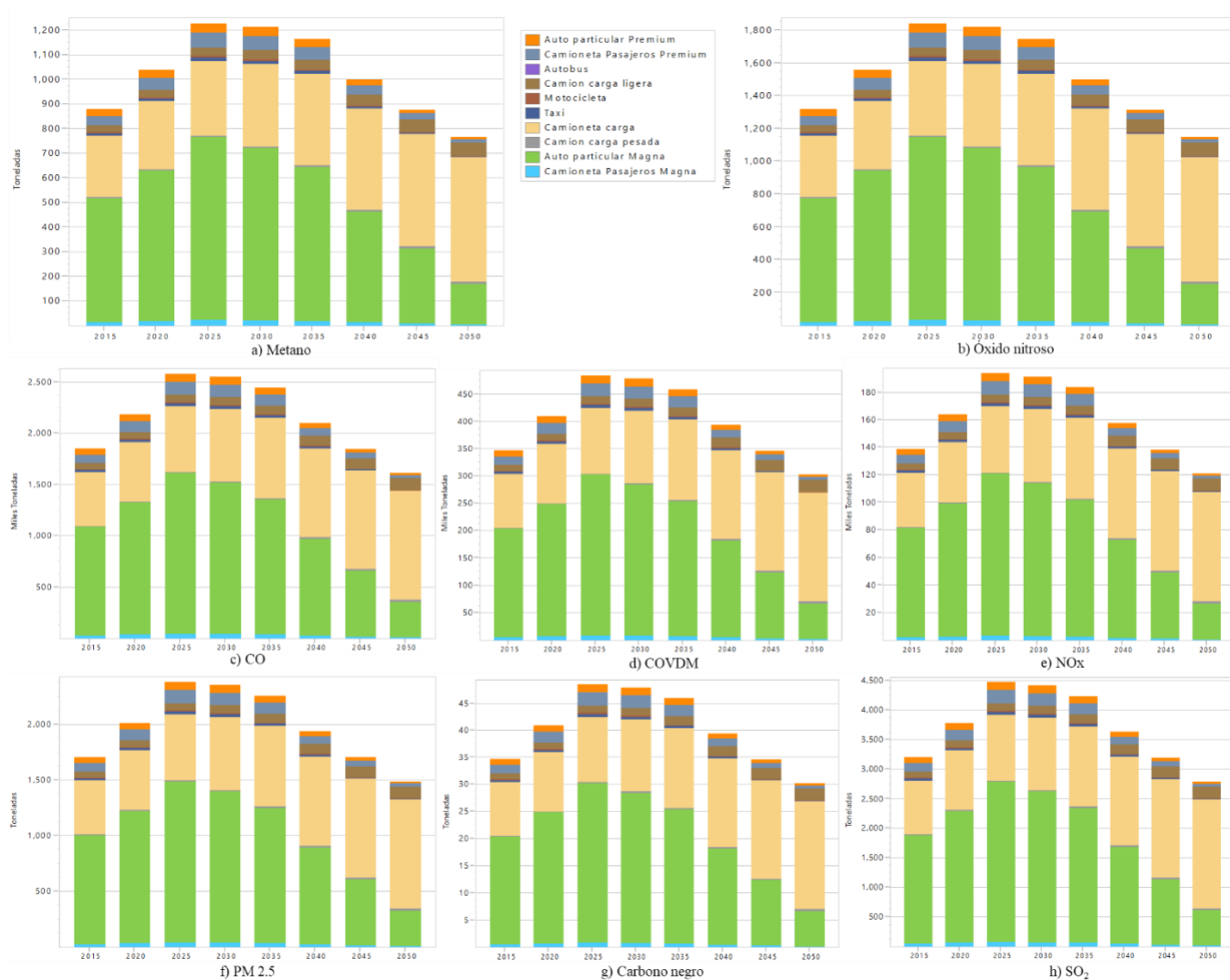


Figura 20. Emisiones de otros GEI y contaminantes en escenario probable.

c) Comparación de escenarios de referencia

En las Figuras 9 a 11 se presenta la comparación de los dos escenarios de referencia. Las barras blancas muestran el ahorro de emisiones de CO₂, GEI y contaminantes que se tendrá con la introducción de autos eléctricos e híbridos, lo que se asemeja más a la realidad, puesto que cada día se adquieren más vehículos con éstas características.

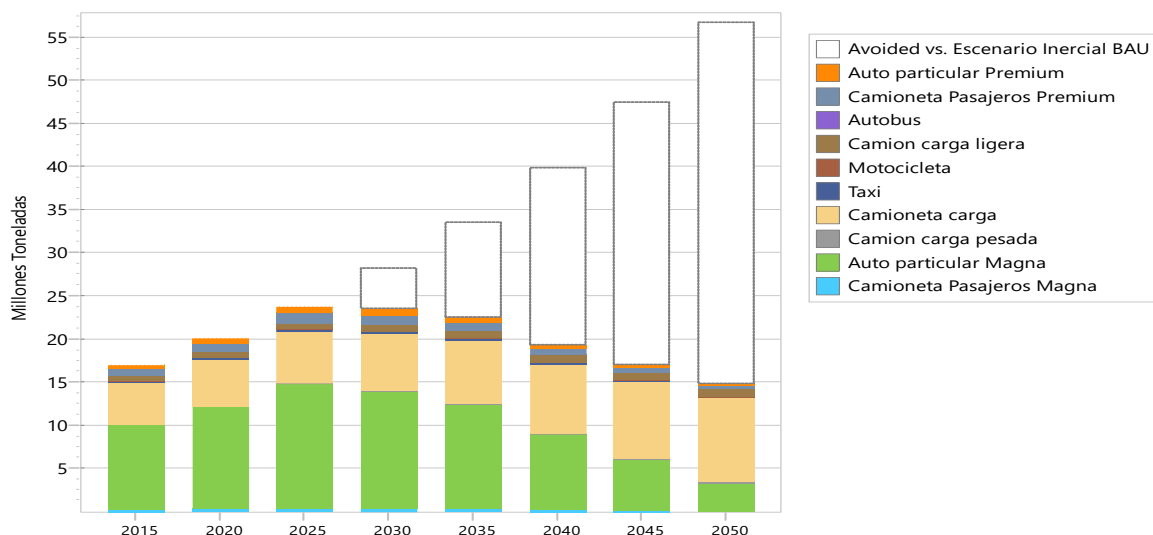


Figura 21. Comparación de emisiones de CO₂ en escenario probable vs escenario BAU.

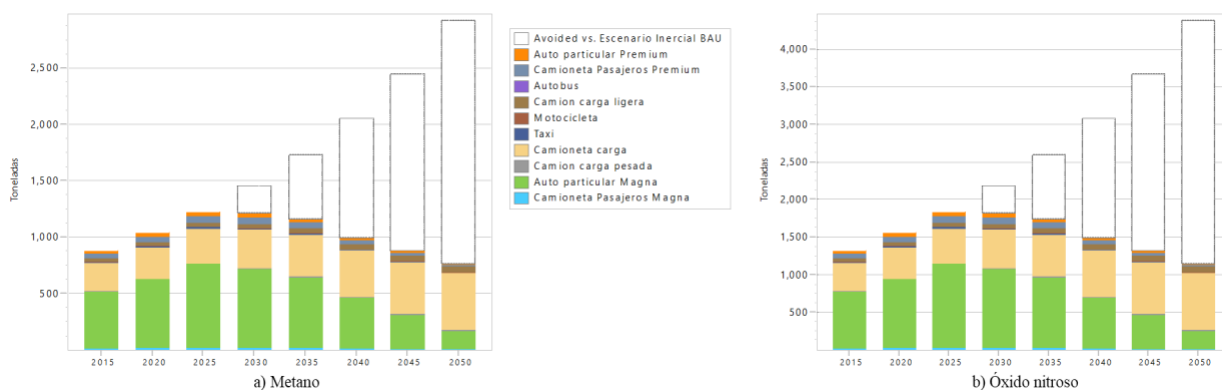


Figura 22. Comparación de emisiones de GEI en el escenario probable vs escenario BAU.

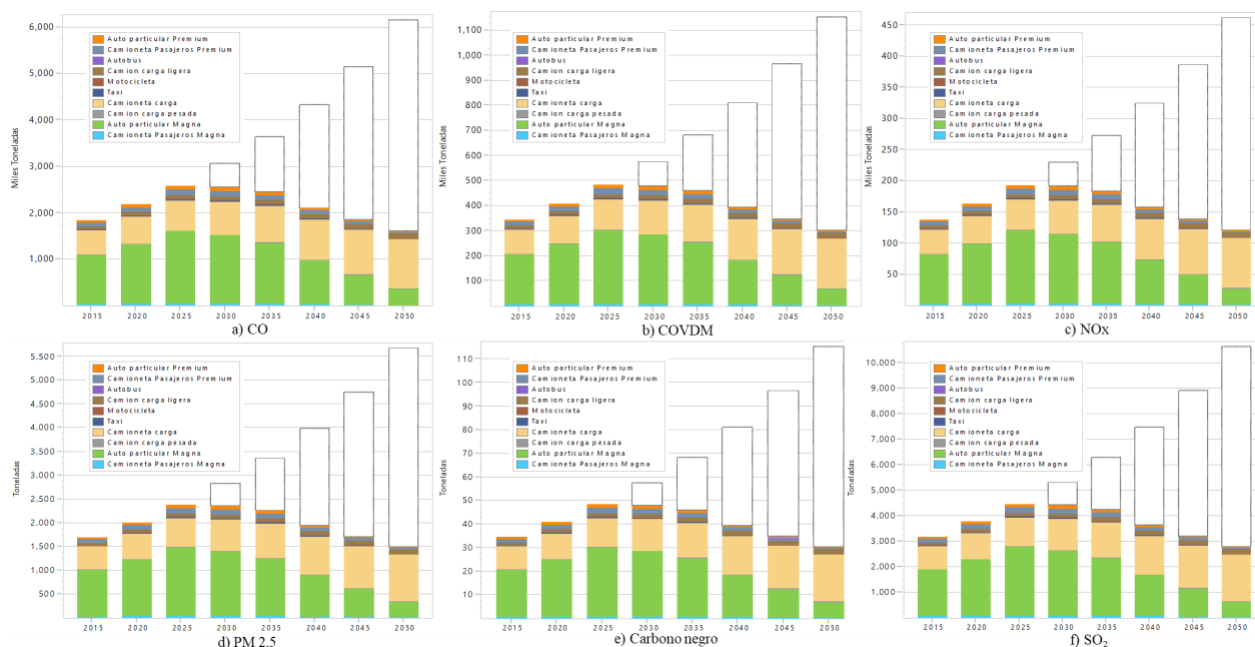


Figura 23. Comparación de emisiones de contaminantes en el escenario probable vs escenario BAU.

Escenarios de mitigación a partir del escenario BAU

a) Escenario de mitigación posible

Si se consume exclusivamente gasolina Premium, disminuye la cantidad de gasolina consumida por año. En la Figura 12, los recuadros blancos indican la disminución en la demanda que tendría cada tipo de vehículo con respecto al escenario inercial BAU, si únicamente se utiliza gasolina de 92 octanos. El potencial de ahorro energético total calculado se observa en color blanco para cada año.

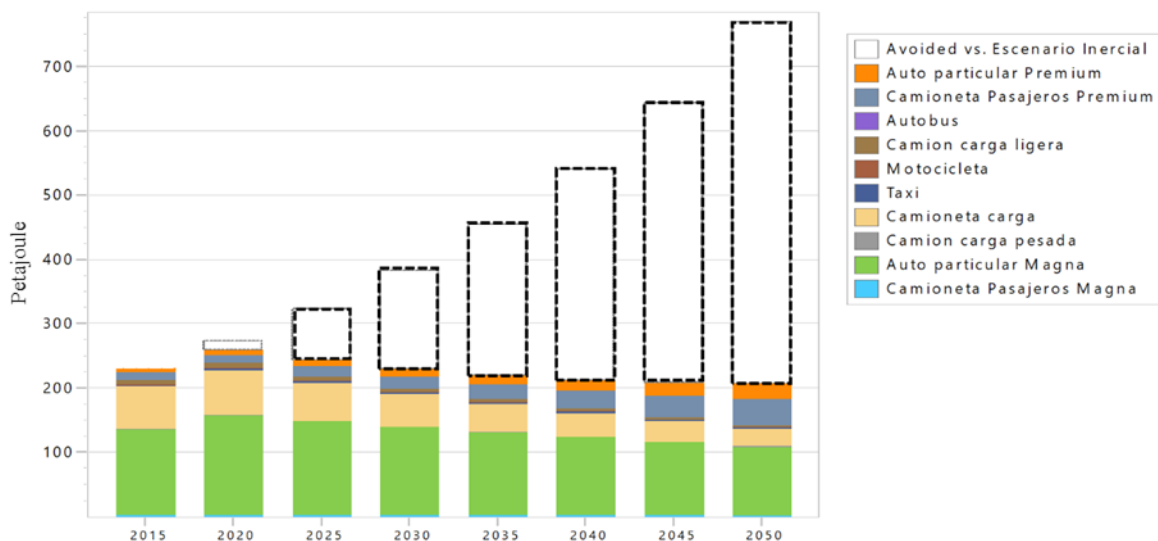


Figura 24. Potencial de mitigación de energía en el escenario de mitigación posible vs BAU.

La disminución de la demanda energética equivale a un ahorro acumulado de 600 PJ en todo el período estudiado, es decir 18,100 hectómetros cúbicos de gasolina, esto debido al mejoramiento en la calidad de la gasolina, así como por la penetración de nuevas tecnologías de autotransporte como es la sustitución de autos convencionales de gasolina por autos híbridos y totalmente eléctricos.

Si se reduce el consumo de gasolina, las emisiones de GEI disminuyen. Las Figuras 13 a 15 muestran el potencial de mitigación de emisiones totales hacia el año 2050, representadas en las barras de color blanco, que corresponde a 50 Millones de toneladas de CO₂.

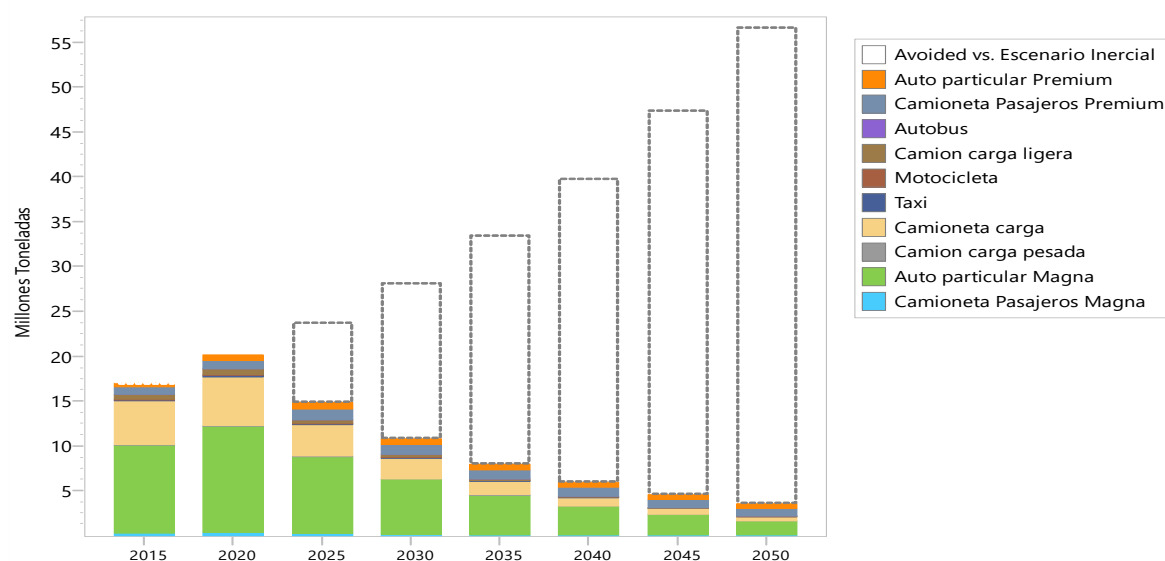


Figura 25. Ahorro de emisiones de CO₂ en el escenario de mitigación posible vs BAU.

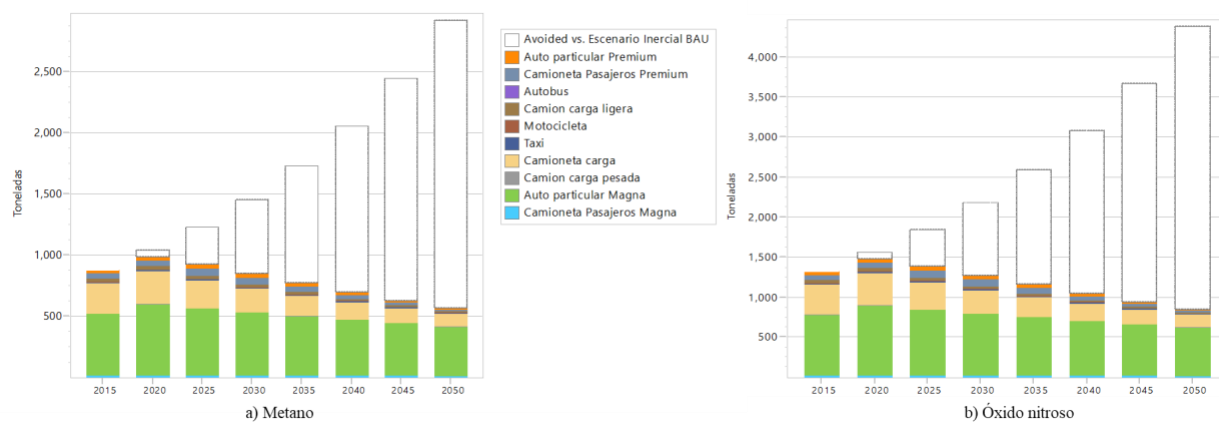


Figura 26. Ahorro en las emisiones de GEI en el escenario de mitigación posible vs BAU.

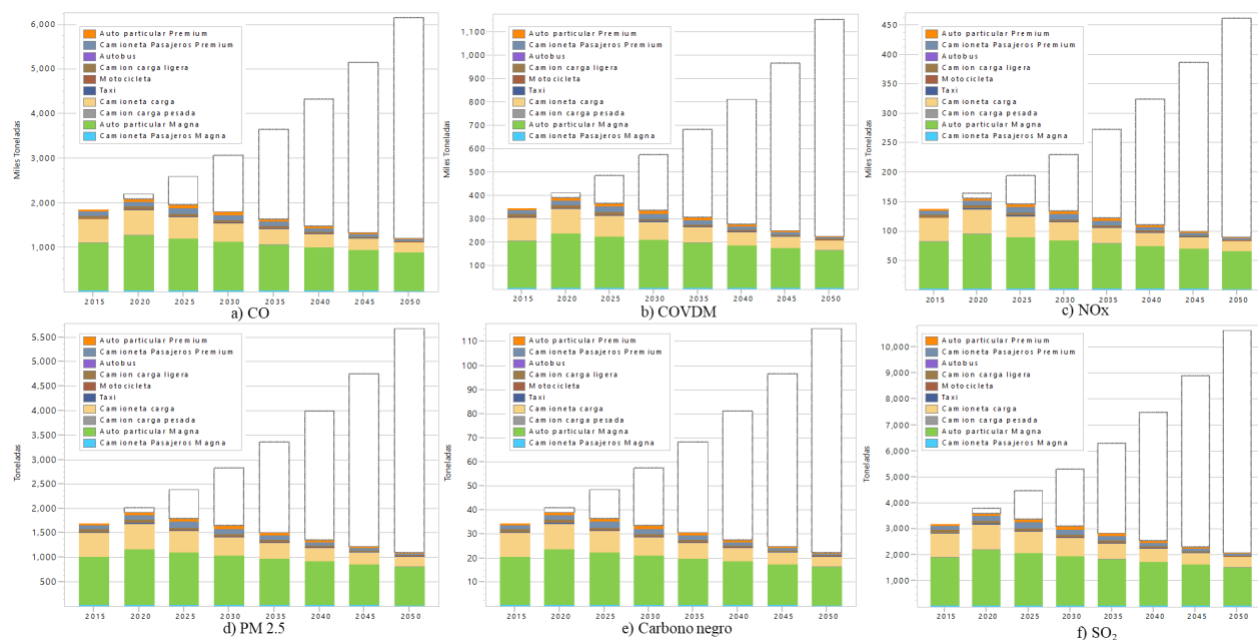


Figura 27. Ahorro en las emisiones de contaminantes en el escenario de mitigación posible vs BAU.

Se observa que la mayor disminución de emisiones de GEI y contaminantes corresponde a los vehículos que utilizan la gasolina Magna, la más consumida en el país.

En las figuras 16 a 18, las barras blancas representan la proyección del potencial de mitigación para los GEI y contaminantes de acuerdo con el escenario de mitigación posible. En los cuadros blancos de aprecia que la mitigación total de CO₂ 50 será de millones de toneladas para el año 2050.

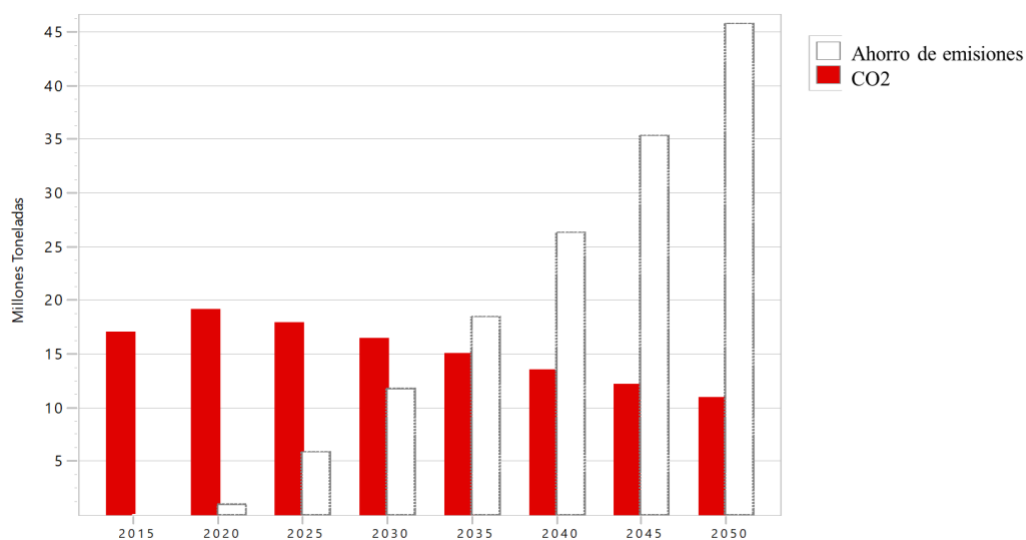


Figura 28. Potencial de mitigación de CO₂ en el escenario de mitigación posible vs escenario BAU.

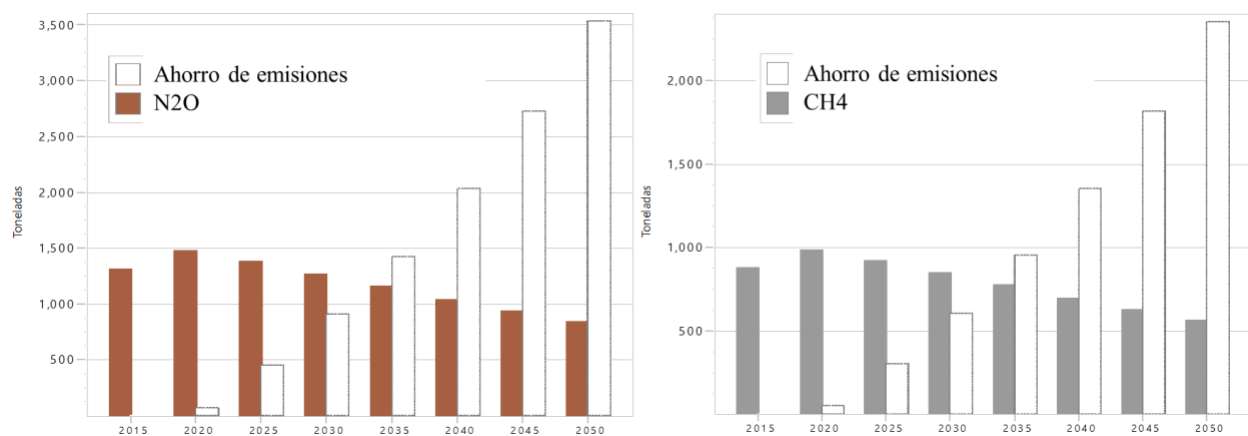


Figura 29. Potencial de mitigación de GEI en el escenario de mitigación posible vs escenario BAU.

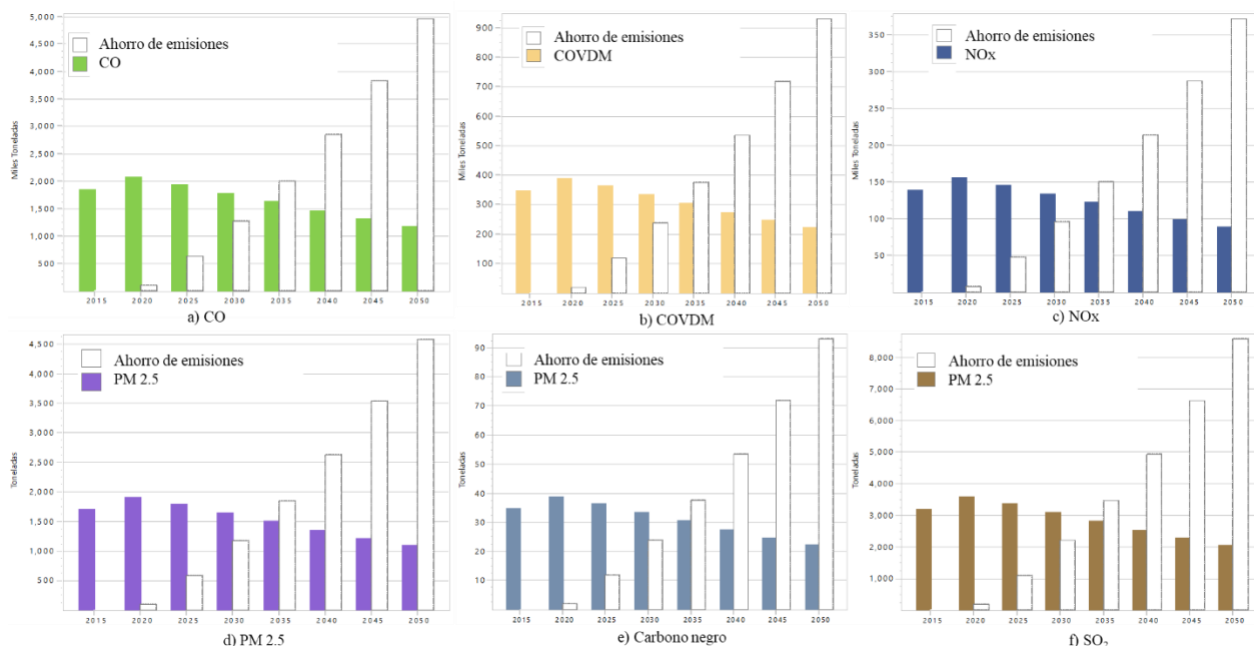


Figura 30. Potencial de mitigación de contaminantes en el escenario de mitigación posible vs escenario BAU.

b) Escenario de mitigación deseable.

Al considerar la oferta de gasolina de 98 octanos para el mercado del autotransporte, México estaría a la altura de países desarrollados. Esta política reduciría la demanda de combustible y, con la mitigación de las emisiones de GEI y contaminantes a la atmósfera. Este escenario sería menos probable que el anterior o más alejado en el tiempo, pero se calculan los posibles efectos beneficiosos para su consideración.

En la figura 19, las barras de color blanco muestran la disminución de la demanda de energía en comparación con el escenario inercial BAU. Se observa que la demanda energética puede disminuir

un total de 700 PJ hacia el año 2050, lo que representa 21,100 hectómetros cúbicos de gasolina. De acuerdo con la Figura 20, el potencial de mitigación es de 50 millones de toneladas de CO₂ para el año 2050.

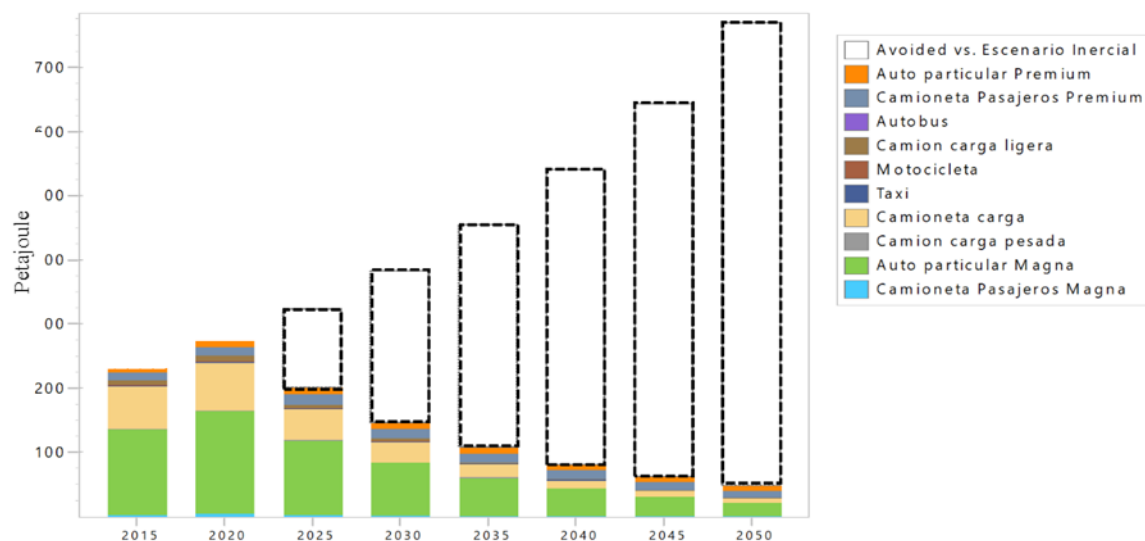


Figura 31. Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación deseable vs inercial BAU.

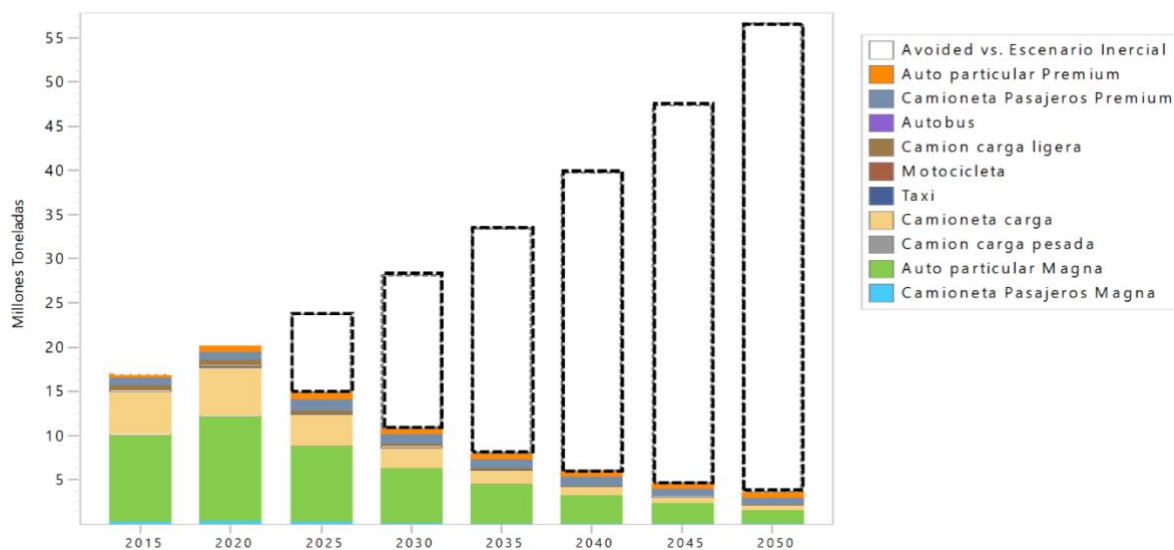


Figura 32. Potencial de mitigación de emisiones de CO₂ en el escenario de mitigación deseable vs inercial BAU.

En las figuras 21 y 22 se presenta la mitigación de emisiones de GEI y de contaminantes, respectivamente, representado por las barras de color blanco. Se calcula que es posible mitigar más de 6,500 toneladas de GEI totales en el año 2050.

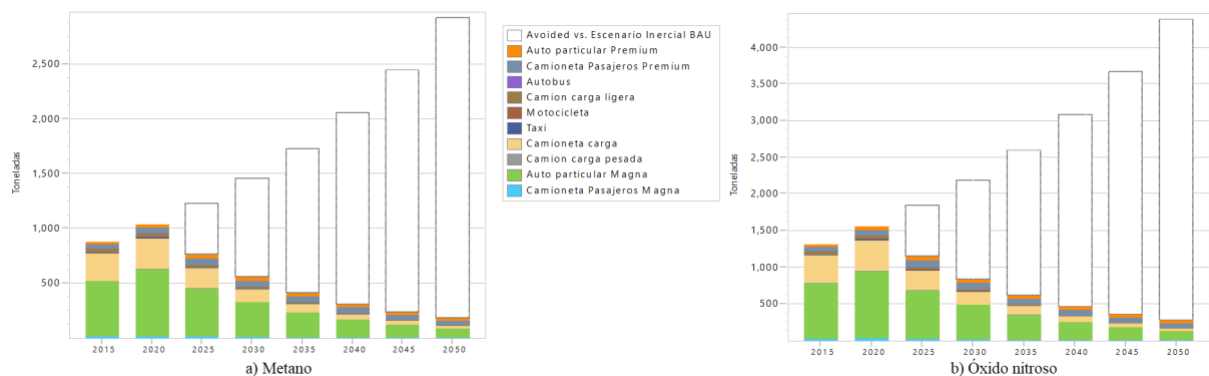


Figura 33. Ahorro de emisiones de GEI en el escenario de mitigación deseable vs escenario BAU.

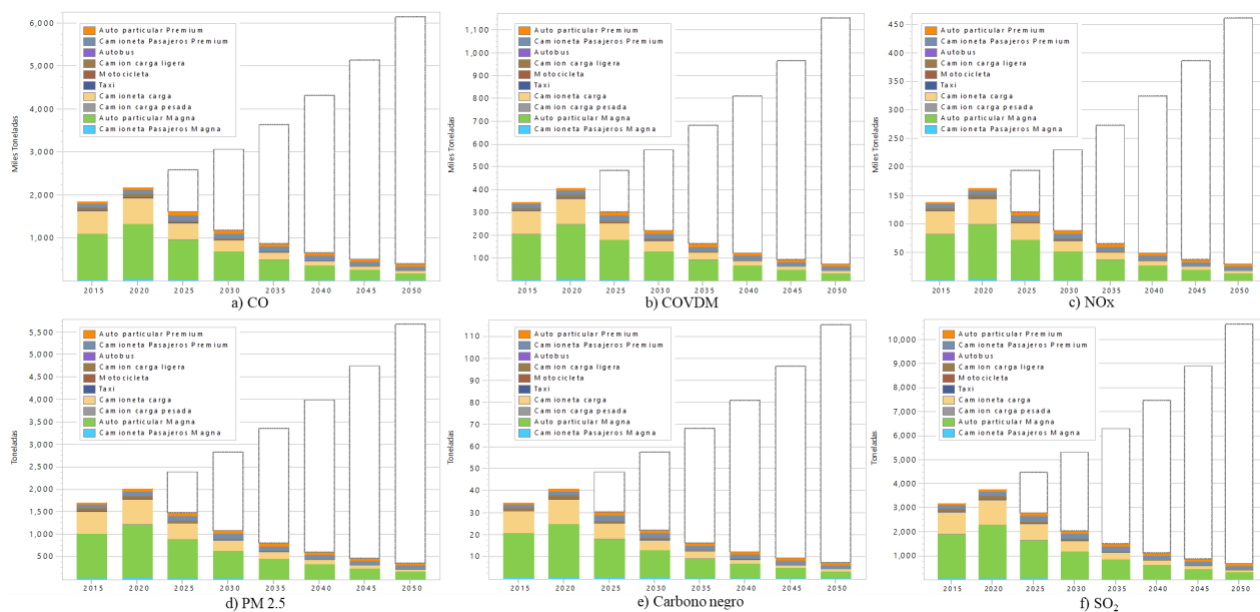


Figura 34. Ahorro de emisiones de contaminantes en el escenario de mitigación deseable vs escenario BAU.

En las figuras 23 a 25, las barras blancas representan la proyección del potencial de mitigación para los GEI y contaminantes de acuerdo con el escenario de mitigación *deseable*. En los cuadros blancos se aprecia que la mitigación total de CO₂ será de 55 millones de toneladas para el año 2050.

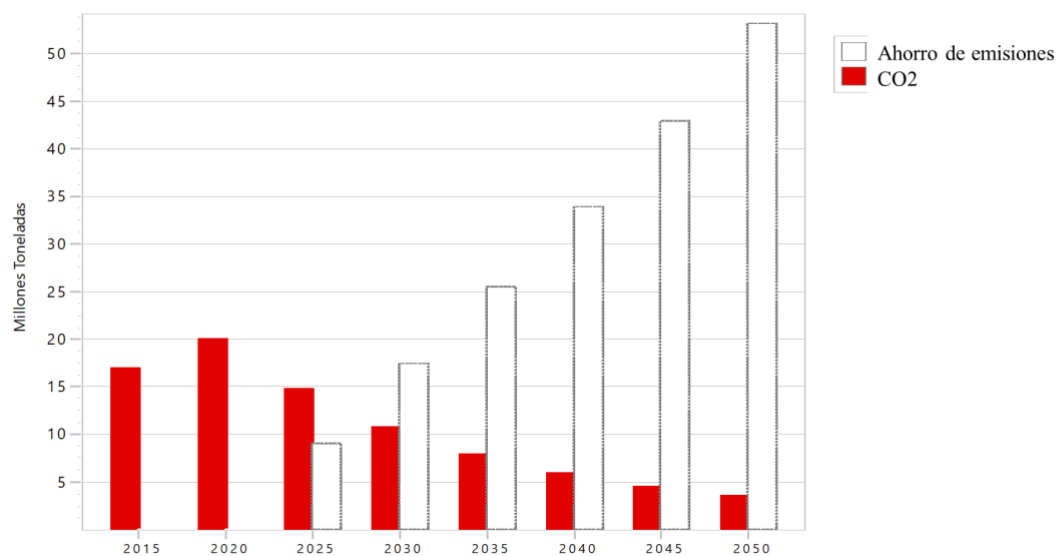


Figura 35. Potencial de mitigación de emisiones de CO₂ en el escenario de mitigación deseable vs escenario BAU.

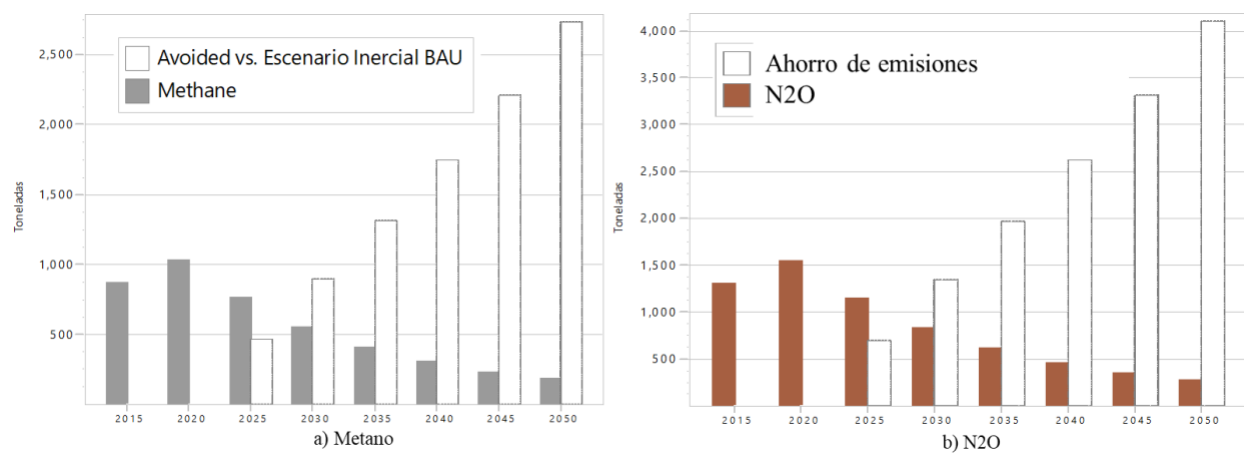


Figura 36. Potencial de mitigación de emisiones de GEI en el escenario de mitigación deseable vs escenario BAU.

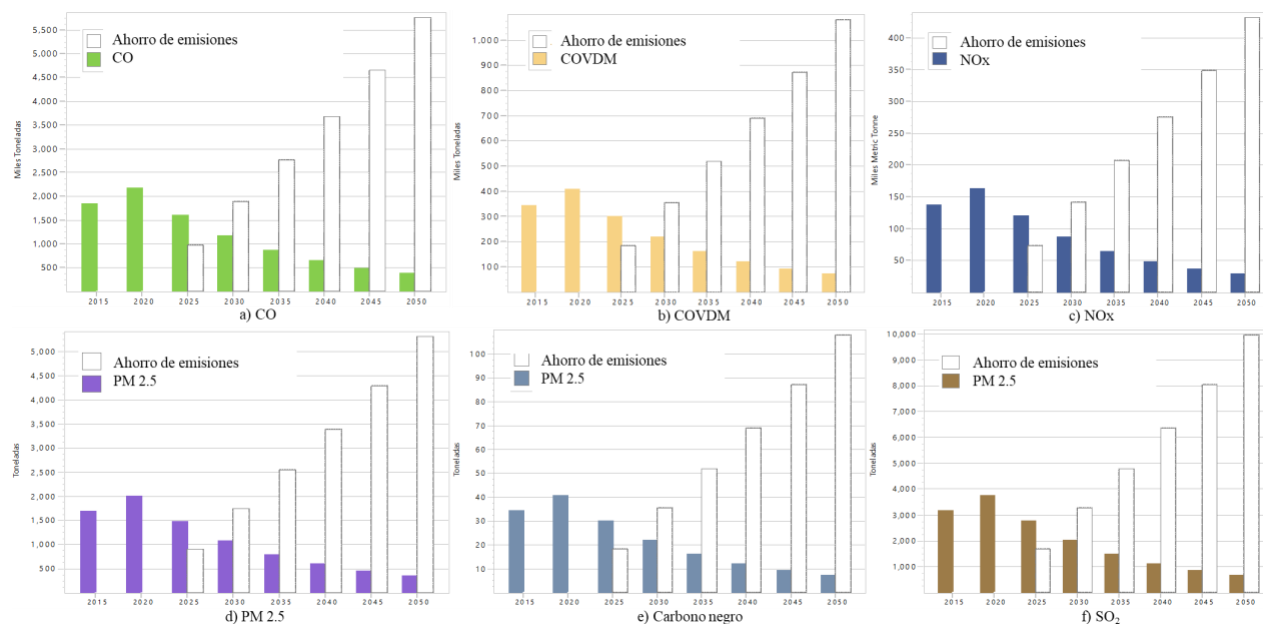


Figura 37. Potencial de mitigación de emisiones de GEI en el escenario de mitigación deseable vs escenario BAU.

Escenarios de mitigación a partir de escenario probable.

a) Escenario de mitigación posible.

Al comparar el escenario de referencia probable con cada uno de los escenarios de mitigación, se obtienen resultados más factibles, debido a que se consideraría la ineludible penetración tecnológica de autos eléctricos e híbridos. En estos casos se calcularía el efecto aislado del mejoramiento en el octanaje de la gasolina, resultando valores de su potencial de mitigación.

En la Figura 26 se observa un ahorro total en la demanda energética de 14,600 hectómetros cúbicos y en las Figuras 27 y 28 se aprecia la mitigación de CO₂ y contaminantes a la atmósfera. Las Figuras 26 a 28 son el resultado de la comparación del escenario de mitigación posible vs escenario inercial probable.

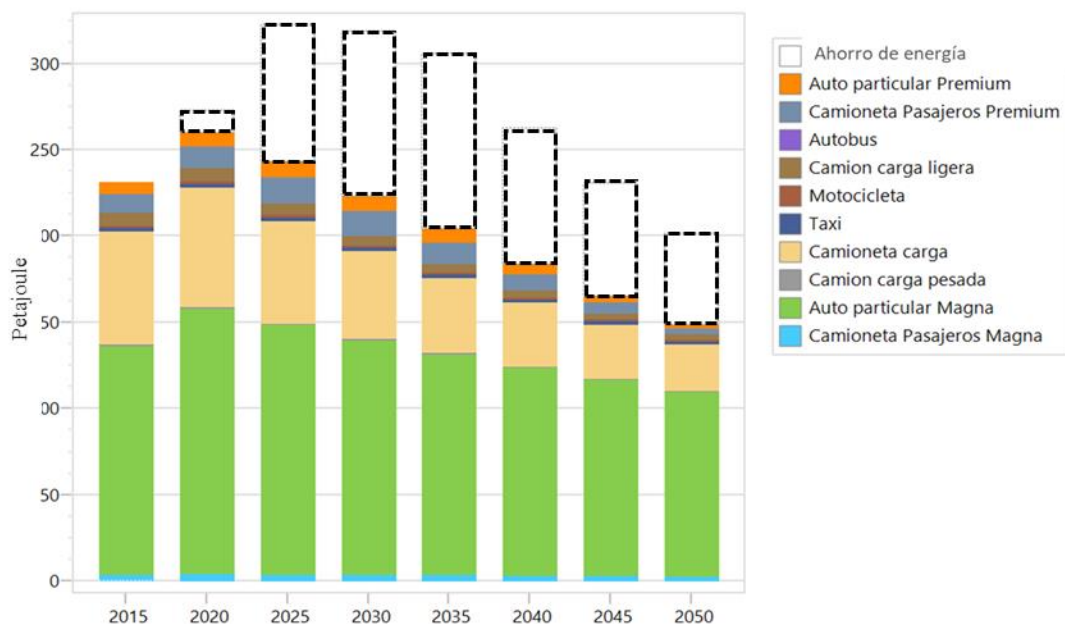


Figura 38. Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación posible a partir de escenario probable.

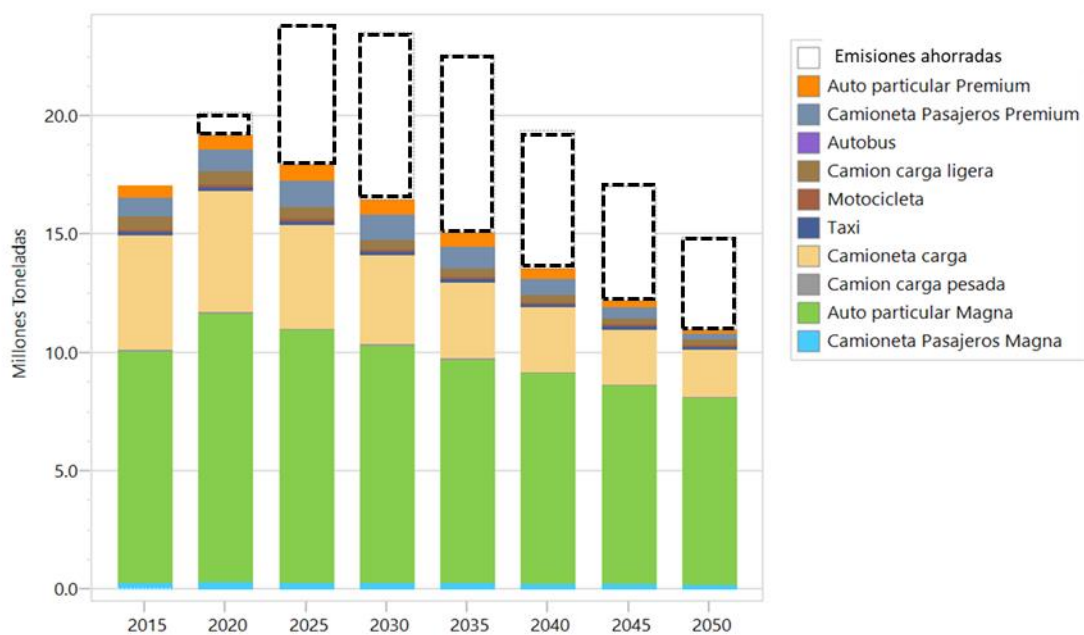


Figura 39. Potencial de mitigación de emisiones de CO₂ en el escenario de mitigación posible vs escenario probable.

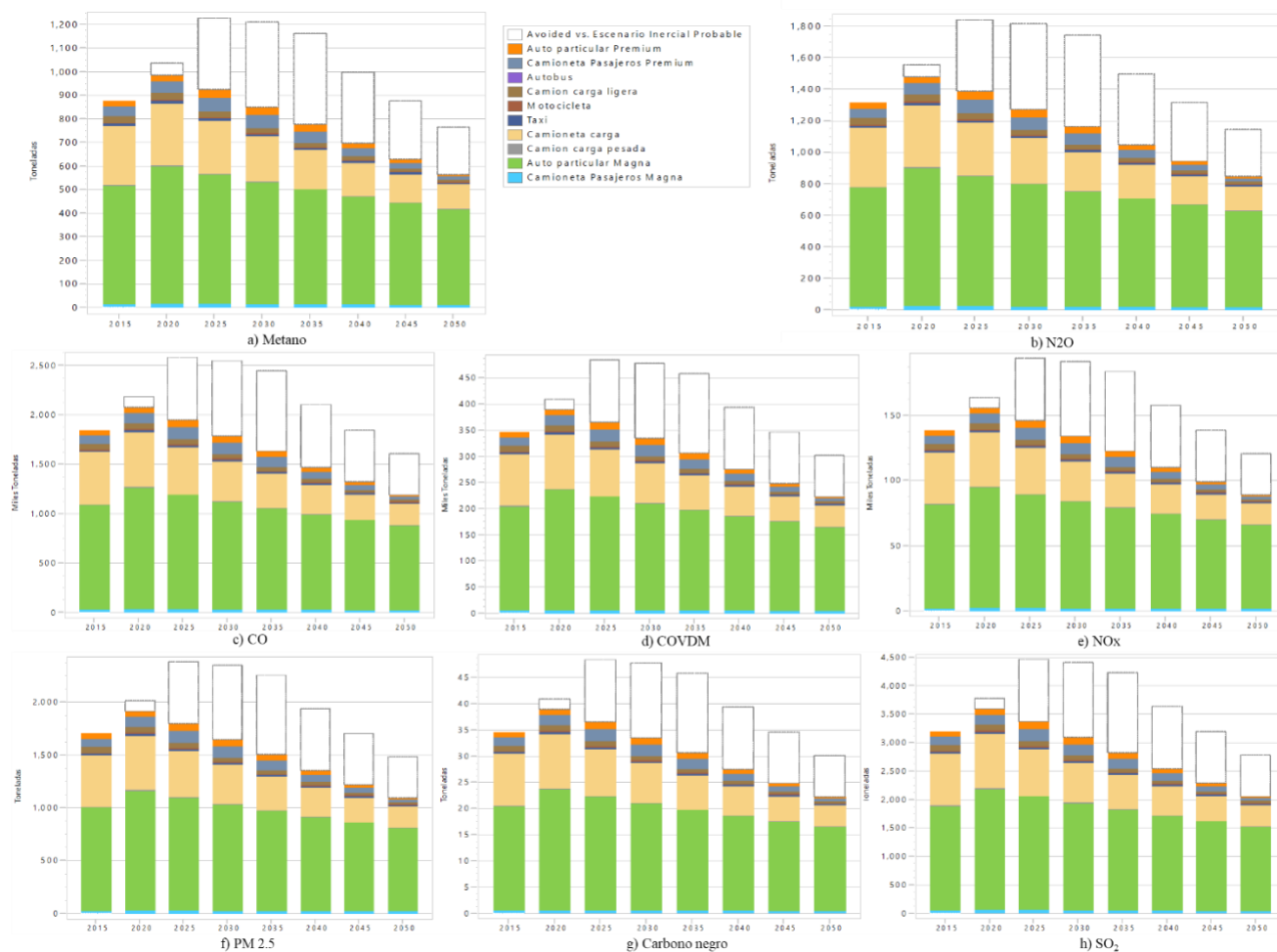


Figura 40. Potencial de mitigación de emisiones de otros GEI y contaminantes en el escenario de mitigación posible vs escenario probable.

En contraste con el escenario BAU, este escenario presenta menor ahorro en la demanda y la mitigación de emisiones, ya que la introducción de autos eléctricos e híbridos reducen el consumo de combustible en todo el período estudiado.

Las figuras 29 a 31 muestran con recuadros blancos la proyección de la mitigación de GEI y de contaminantes. Se observa que para el año 2035 se puede mitigar hasta 10 Mt de emisiones contaminantes a la atmósfera.

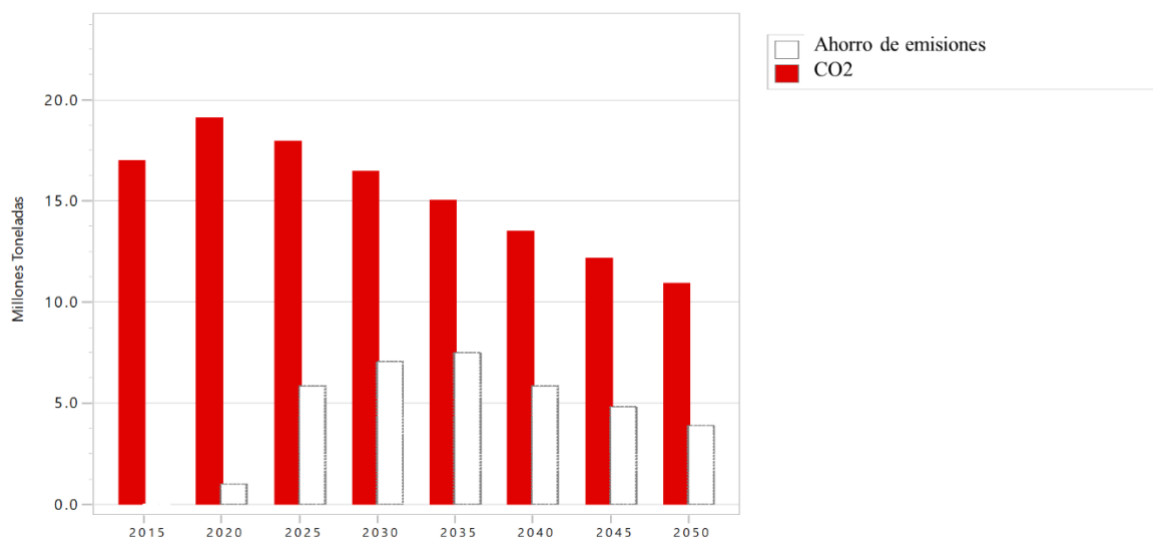


Figura 41. Potencial de mitigación de CO₂ del escenario posible vs escenario probable.

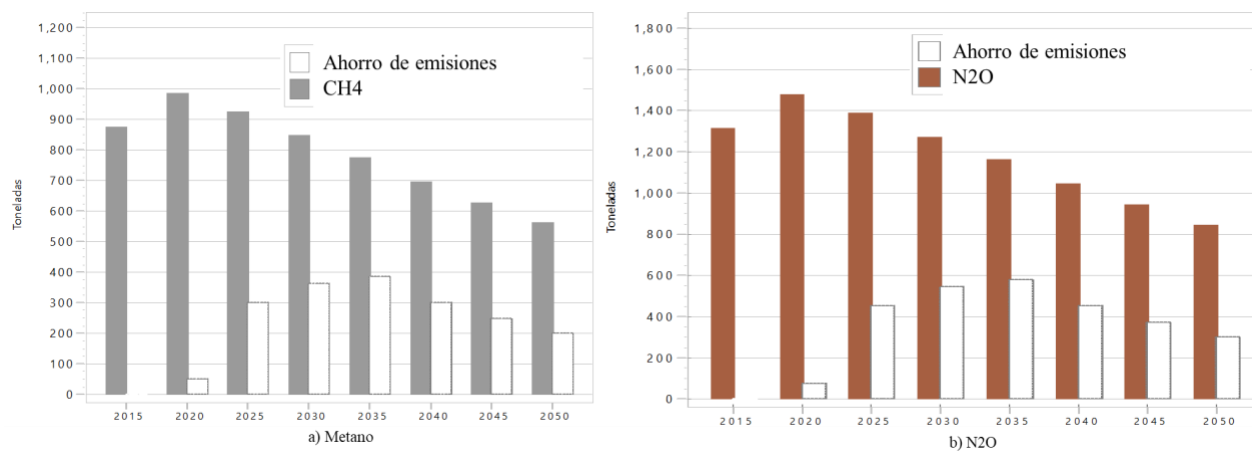


Figura 42. Potencial de mitigación de GEI del escenario inercial posible vs escenario probable.

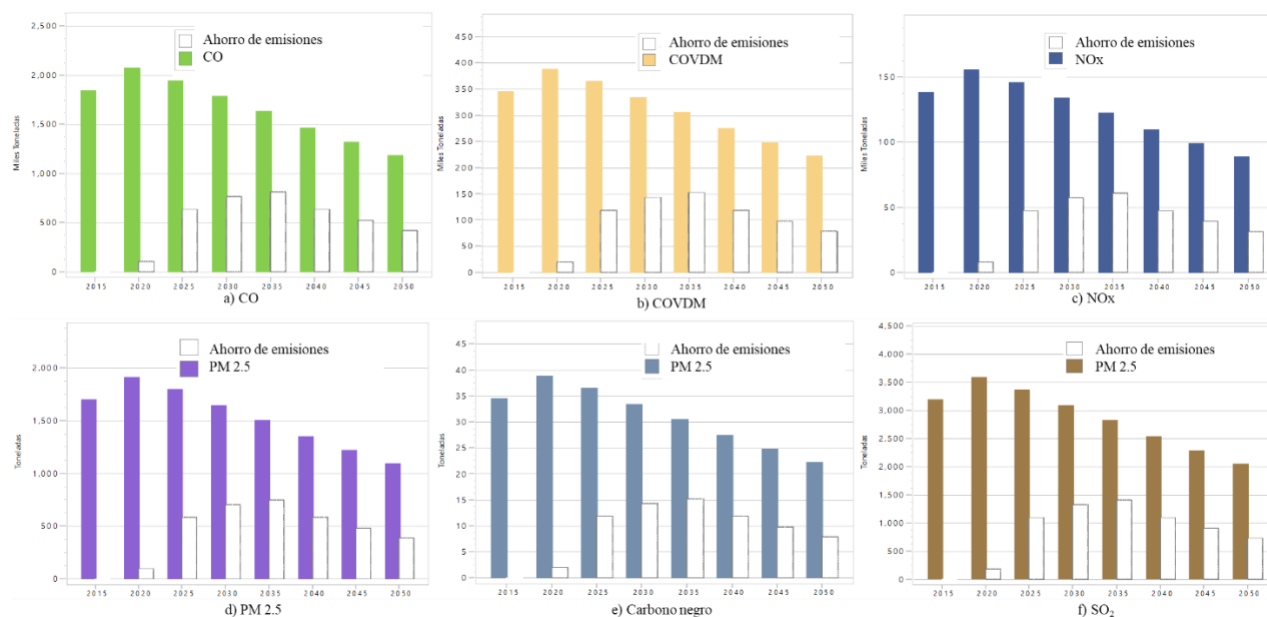


Figura 43. Potencial de mitigación de GEI del escenario inercial posible vs escenario probable.

b) Escenario de mitigación deseable.

En la Figura 32 se observa el potencial de mitigación de la demanda energética en y en las Figuras 33 y 34 se aprecia la mitigación de CO₂. Las gráficas son el resultado de la comparación del escenario de mitigación deseable vs el escenario de referencia probable.

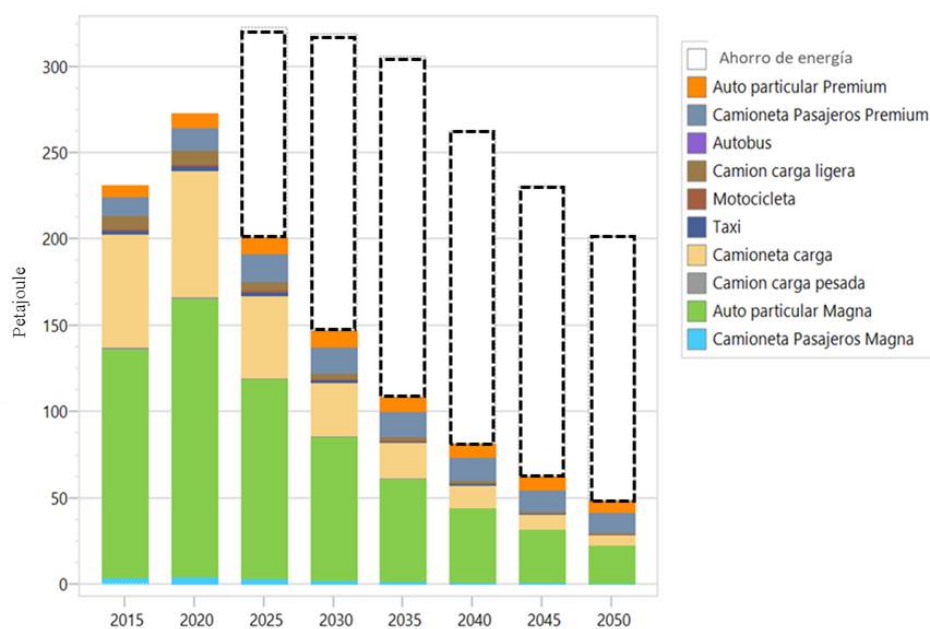


Figura 44. Potencial de mitigación de la demanda energética en el escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

De acuerdo con la Figura 32, se observa que la mitigación de combustible en el escenario de mitigación deseable es de 29,900 hectómetros cúbicos totales para el año 2050.

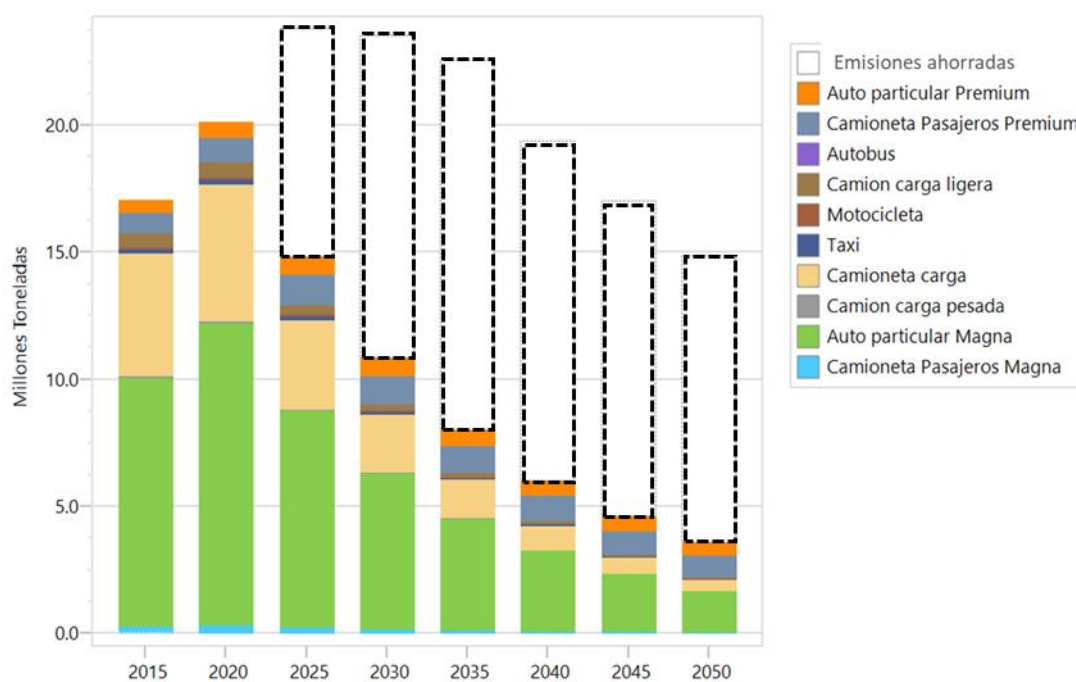


Figura 45. Potencial de mitigación de emisiones de CO₂ en escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

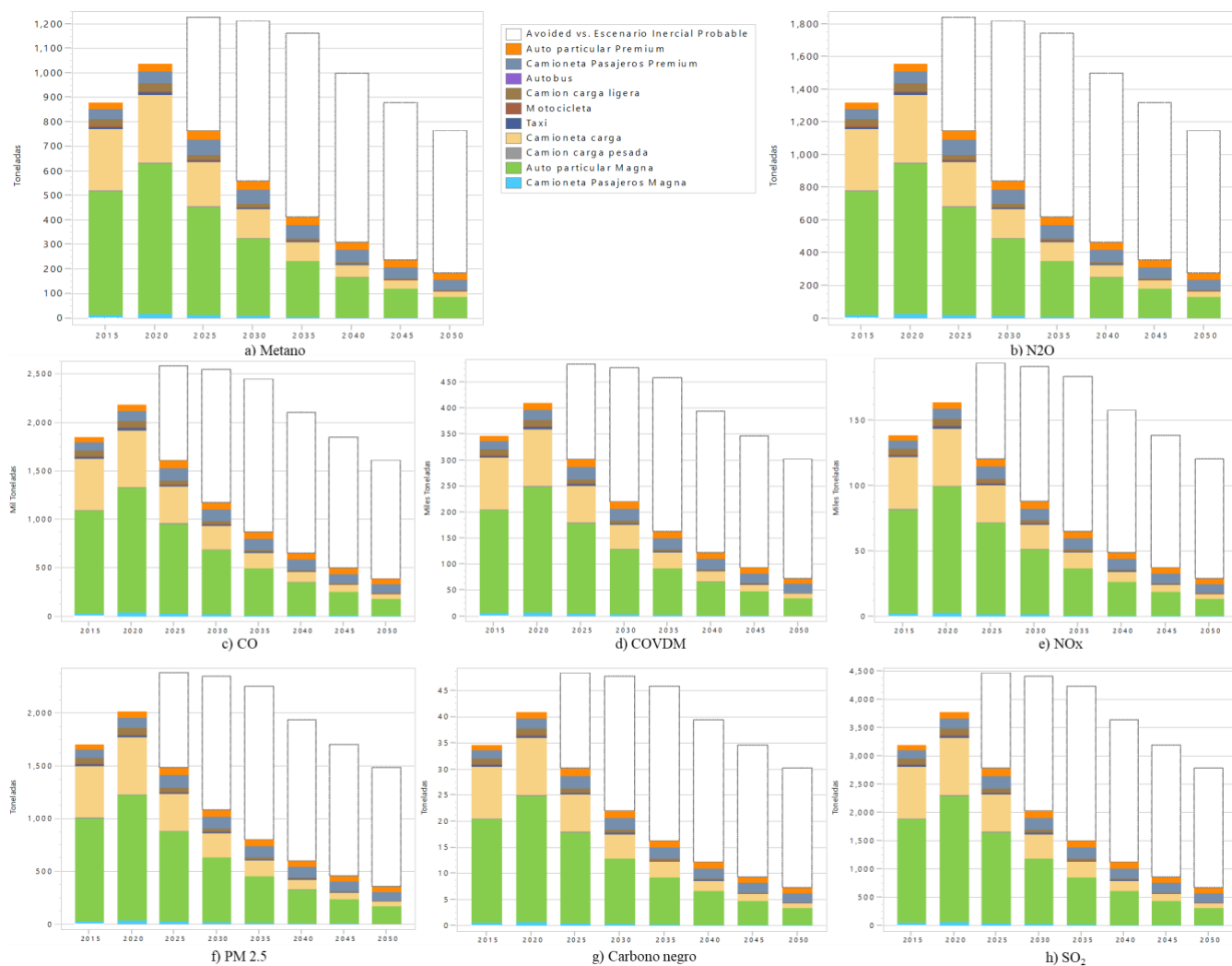


Figura 46. Potencial de mitigación de emisiones de otros GEI y contaminantes en el escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

Las figuras 35 a 37 muestran el ahorro de emisiones de GEI y de contaminantes a la atmósfera, y se observa que es posible mitigar 13 Mt de CO₂ en el año 2050.

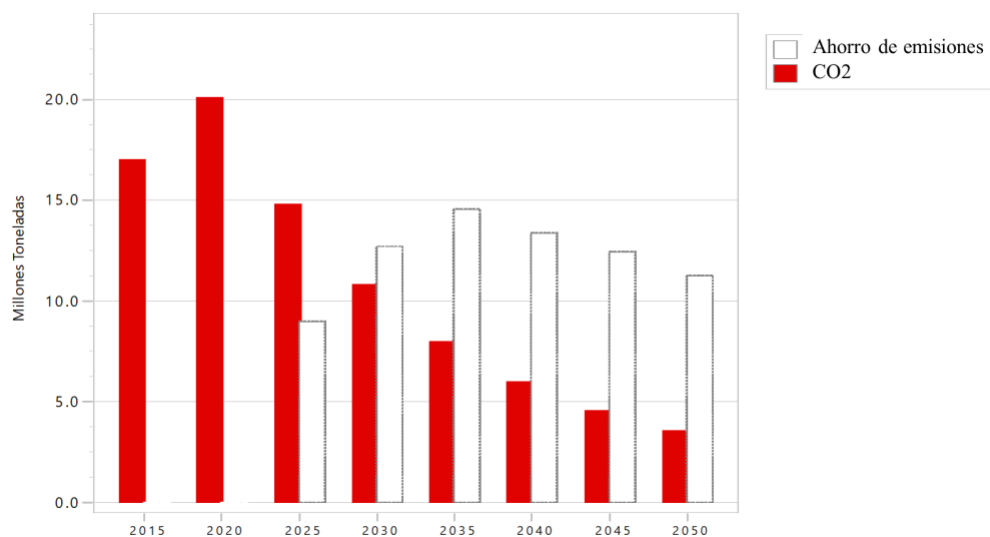


Figura 47. Potencial de mitigación de CO2 en escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

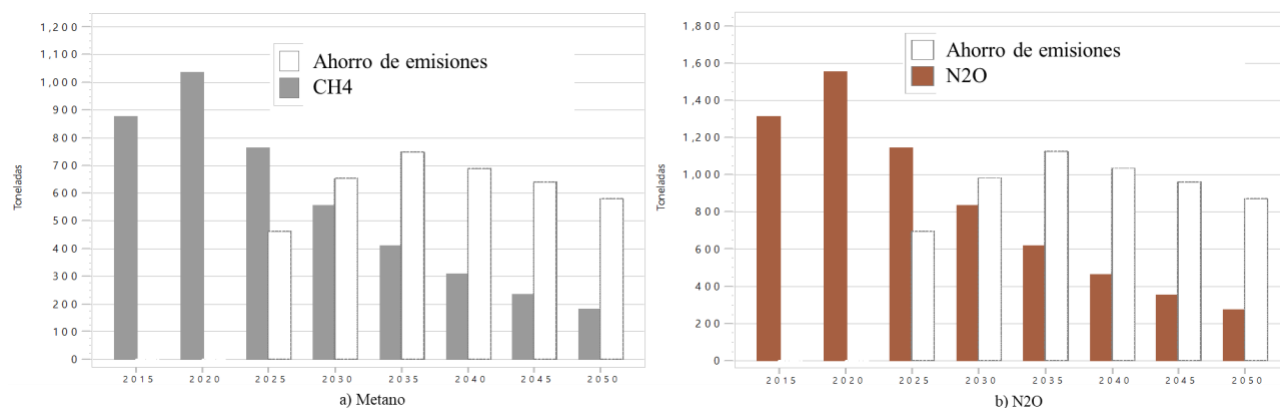


Figura 48. Potencial de mitigación de GEI en escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

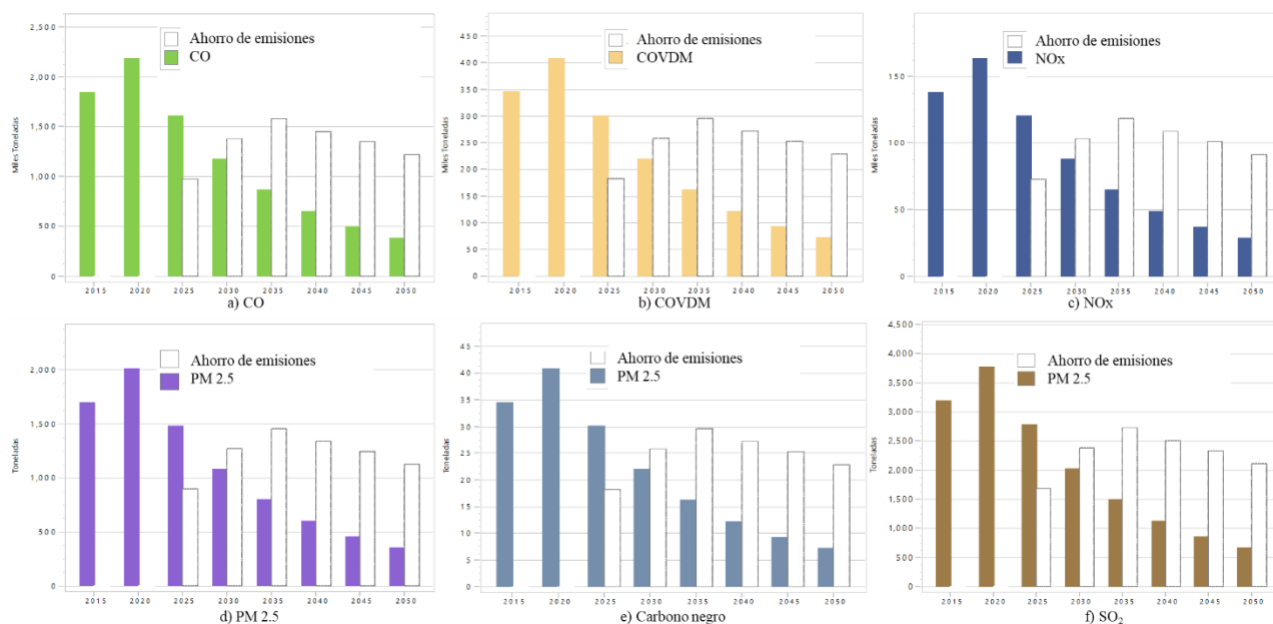


Figura 49. Potencial de mitigación de GEI en escenario de mitigación deseable vs escenario probable.

A diferencia de los escenarios de mitigación que parten del escenario BAU, los que se generan a partir de escenario probable, representan un ahorro menor en la demanda de energía y menor mitigación de GEI, derivado de la introducción de autos eléctricos e híbridos.

En las Tablas 4 y 5 se presentan un resumen del ahorro en la demanda energética y en las emisiones de GEI y contaminantes para ambos escenarios de referencia.

Tabla 19. Ahorro de la demanda total energética por caso para el año 2050.

Escenario de referencia	Escenario de mitigación	*Ahorro de gasolina (hm ³)
BAU	Posible	59,000
	Deseable	74,300
Probable	Posible	14,600
	Deseable	29,900

*Ahorro de la demanda de gasolina acumulado al año 2050.

Tabla 20. Mitigación de las emisiones acumuladas de CO₂ y contaminantes de cada escenario para el año 2050.

Escenario de referencia	Escenario de mitigación	Potencial de mitigación (Mt)							
		CO ₂	CH ₄	N ₂ O	CO	NO _x	COVDM	SO ₂	CN
BAU	Posible	144,300	7.4	11.1	15,647.9	1,173.5	2934.1	30.6	0.3
	Deseable	181,100	9.3	14	19,705.2	1477.8	3,694.7	34.2	0.4

Probable	Posible	35,900	1.8	2.9	3,888.8	291.6	729.2	6.7	72.9 ton
	Deseable	73,400	3.77	5.7	7,946.1	596	1,490	13.7	149 ton

La implementación de los escenarios de mitigación puede contribuir en el cumplimiento del Acuerdo de París, firmado en 2016 y ratificado en Nueva York en 2017, en donde México se comprometió a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en un 25 % para el año 2030 (SEMARNAT, 2019).

CONCLUSIONES

La creciente demanda en el parque vehicular indica que es necesario establecer medidas de mitigación de GEI provenientes de los combustibles fósiles. Los escenarios de mitigación propuestos son una alternativa para reducir las emisiones de GEI provenientes del autotransporte en México, ya que es posible mitigar hasta 50 MT de GEI para el año 2050 si se implementara el escenario de mitigación deseable

La introducción de autos eléctricos e híbridos en el país aumentará gradualmente durante los próximos años. Por lo tanto, el escenario más apegado a la realidad es el BAU en combinación con el escenario de mitigación posible, que pretende la sustitución de toda la gasolina Magna por Premium, es decir, usar exclusivamente gasolina de 92 octanos y considerar la penetración de autos eléctricos e híbridos.

El uso de gasolina de 98 octanos sería el escenario ideal, aunque menos probable en el mediano plazo ya que la inversión en tecnología sería mucho mayor debido a que representa la mayor reducción en el consumo de gasolina decir cantidad y, por lo tanto, de emisiones de GEI. Se sabe que para el país sería el escenario menos factible, sin embargo, es importante dar a conocer el potencial de mitigación que se puede alcanzar al mejorar la calidad de los combustibles.

Si bien el aumento de la eficiencia energética no es una solución definitiva ante el problema actual de cambio climático, es una medida de mitigación apropiada que puede implementarse durante la etapa de transición de vehículos a gasolina a vehículos eléctricos e híbridos.

REFERENCIAS

Agencia de Protección Ambiental, (2021). Global Greenhouse Gas Emissions Data. Consultado el 27/07/2021, de EPA Sitio web: <https://www.epa.gov/ghgemissions/global-greenhouse-gas-emissions-data>

Agencia Internacional de Energía, (2016). International Energy Outlook 2016. Consultado el 17/09/2020, de U.S. Energy Information Administration Sitio web: [https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484\(2016\).pdf](https://www.eia.gov/outlooks/ieo/pdf/0484(2016).pdf)

Agencia Internacional de Energía, (2020). Energy Technology Perspectives 2020. Consultado el 27/08/2021 de Agencia Internacional de Energía. Sitio web: <https://www.iea.org/reports/energy-technology-perspectives-2020>

Agencia Internacional de Energía, (2020). Global CO₂ emissions in 2019. Consultado el 26/05/2021, de Agencia Internacional de Emisiones, Sitio web: <https://www.iea.org/articles/global-co2-emissions-in-2019>.

Asociación Mexicana de la Industria Automotriz, A.C., 2021, Reporte de Ventas de Vehículos Eléctricos e Híbridos a octubre de 2021. <https://amia.com.mx/2021/08/23/reporte-de-venta-de-vehiculos-hibridos-y-electricos-mayo-2021/>

British Petroleum, (2019), BP Energy Outlook. Consultado el 20/11/2020, de British Petroleum. Sitio web: <https://www.bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/energy-outlook/bp-energy-outlook-2019.pdf>

Cámara de Diputados del H. Congreso de La Unión (Junio 6, 2012), Ley General de Cambio Climático, Diario Oficial de la Federación, https://www.diputados.gob.mx/LeyesBiblio/pdf/LGCC_061120.pdf

Chow, E. y Heywood, J., (2014), Benefits of a Higher Octane Standard Gasoline for the U.S. Light-Duty Vehicle Fleet, Society of Automotive Engineers, 1, 1-18.
<https://doi.org/10.4271/2014-01-1961>

Comisión Reguladora de Energía, (2017), Norma Oficial Mexicana NOM-016-CRE-2016, Especificaciones de calidad de los petrolíferos. Consultado el 01/09/2021 del Diario Oficial de la Federación Sitio web:
http://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5450011&fecha=29/08/2016

Dargay, J., Gately, D., & Sommer, M. (2007). Vehicle Ownership and Income Growth, Worldwide: 1960–2030. The Energy Journal, 28(4). <https://doi.org/10.5547/issn0195-6574-ej-vol28-no4-7>

Instituto Mexicano del Transporte, (2015), Manual Estadístico del Sector Transporte 2015, Consultado el 17/09/2020, de Secretaría de Comunicaciones y Transportes. Sitio web:
www.imt.mx

Instituto Mexicano del Transporte, (2018), Desarrollo de metodología para la estimación de los vehículos-kilómetro recorridos anualmente, a nivel nacional. Consultado el 17/09/2020, de Instituto Mexicano del Transporte, Sitio web:
<https://imt.mx/archivos/Publicaciones/PublicacionTecnica/pt517.pdf>

Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018) Elementos para inventario de fuentes móviles, informe final. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, Ciudad de México

Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero. Consultado el 27/08/ 2021, de Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Sitio web:
<https://cambioclimatico.gob.mx/estadosymunicipios/Emisiones.html>

Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, (2018). Sexta Comunicación Nacional y Segundo Informe Bienal de Actualización ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático. Consultado el 17/09/2020, de Instituto Nacional de Ecología y

Cambio Climático. Sitio web: <https://www.gob.mx/inecc/articulos/sexta-comunicacion-nacional-ante-la-cmnucc?idiom=es>

Leone, T. G., Anderson, J. E., Davis, R. S., Iqbal, A., Reese, R. A., Shelby, M. H., & Studzinski, W. M. (2015). The Effect of Compression Ratio, Fuel Octane Rating, and Ethanol Content on Spark-Ignition Engine Efficiency. *Environmental Science & Technology*, 49(18), 10778–10789. <https://doi.org/10.1021/acs.est.5b01420>

Pérez, D. A., (2017), Estudio De Emisiones Contaminantes Utilizando Combustibles Locales, *Innova Reseach Journal*, 2, 23-34, <https://doi.org/10.33890/innova.v2.n11.2017.302>.

Secretaría de Relaciones Exteriores, (2021), Comunicado: México se adhirió al Compromiso Global de Metano en la COP26, Sitio web: <https://www.gob.mx/sre/prensa/mexico-se-adhirio-al-compromiso-global-de-metano-en-la-cop26?state=published>

Secretaría del Medio Ambiente y Recursos Naturales, (2019), Comunicado: México reitera su compromiso con el cumplimiento del Acuerdo de París, Sitio web: <https://www.gob.mx/semarnat/prensa/mexico-reitera-su-compromiso-con-el-cumplimiento-del-acuerdo-de-paris>

Sistema de Información Energética, (2020), Balance Nacional de Energía 2019. Consultado el 01/09/2021 de la Secretaría de Energía. Sitio web: <https://sie.energia.gob.mx/movil.do?action=applyOptions>

Solís, J., Sheinbaum, C., (2016). Consumo de energía y emisiones de CO₂ del autotransporte en México y escenarios de mitigación. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 32, 7-23.

Speth, R. L., Chow, E. W., Malina, R., Barrett, S. R. H., Heywood, J. B., & Green, W. H. (2014). Economic and Environmental Benefits of Higher-Octane Gasoline. *Environmental Science & Technology*, 48(12), 6561–6568. <https://doi.org/10.1021/es405557p>

Stockholm Environment Institute, (2018), LEAP. Consultado el 8 de agosto de 2021. Sitio web: <https://www.sei.org/projects-and-tools/tools/leap-long-range-energy-alternatives-planning-system/>

Stradling, R., Williams, J., Hamje, H., & Rikeard, D. (2016). Effect of Octane on Performance, Energy Consumption and Emissions of Two Euro 4 Passenger Cars. Transportation Research Procedia, 14, 3159–3168. <https://doi.org/10.1016/j.trpro.2016.05.256>

Teter, J., (2020). Tracking Transport 2020. Consultado el 26/08/2021, de Agencia Internacional de Energía, Sitio web: <https://www.iea.org/reports/tracking-transport-2020>

World Resources Institute, (2017), Climate Analysis Indicators Tool: Historical Emissions Data. Revisado el 12/02/2021. Sitio web: <http://cait.wri.org/>

World Resources Institute, (2021), Emisiones de gases de efecto invernadero por país y por sector. Consultado el 27/12/2021. Sitio web: <https://wrimexico.org/blog/cuatro-gr%C3%A1ficos-que-explican-las-emisiones-de-gases-de-efecto-invernadero-por-pa%C3%ADs-y-por>

III.2. Artículo enviado

Revista Mexicana de Ingeniería Química

Modeling and Simulation of a 3D Reactor in a Continuous Catalytic Reforming Process

Modelación y Simulación de un Reactor 3D para el Proceso de Reformación Catalítica Continua

A.Y. Juárez-Plata, E.M. Otazo-Sánchez, C.A. González-Ramírez*, J.R. Villagómez-Ibarra, M. Hernández-Juárez.

Área Académica de Química, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carr. Pachuca-Tulancingo, km. 4.5, Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hgo., C.P. 42184, MÉXICO.

*cramirez@uaeh.edu.mx

Sent date: 24/November/2025

Abstract:

Naphtha catalytic reforming process is used for the manufacture of high octane gasoline and the production of aromatic hydrocarbons. An accurate and reliable modeling of the Continuous Catalytic Regenerative (CCR) process allows to predict the distribution of products and temperatures, as well as the optimization and control of operational parameters. In the present study, 3D modeling and analysis of a system of reactors of the CCR process in COMSOL Multiphysics® was carried out. A mathematical model of 24 pseudo-components and 71 chemical reactions system was used. The novelty of this work is the 3D reactor modeling, where a detailed study of the hydrodynamics, the thermal model and component distributions are presented. This information is considered as a valuable contribution towards real-time optimization of the CCR reforming process.

Keywords: catalyst, computational fluid dynamics, kinetic model, velocity profile, temperature profile.

Resumen:

El proceso de reformación catalítica de las naftas se utiliza para la fabricación de gasolina de alto octanaje y la producción de hidrocarburos aromáticos. El modelado preciso y confiable del proceso Regeneración Catalítica Continua CCR, por sus siglas en inglés, permite predecir la distribución de productos y de temperaturas, así como la optimización y control de parámetros operativos. En el presente estudio, se realizó el modelado y el análisis 3D de un sistema de reactores del proceso CCR en COMSOL Multiphysics®. Se utilizó un modelo matemático de 24 pseudocomponentes y un sistema 71 reacciones químicas. La novedad de este trabajo es la modelación en 3D del reactor, donde se presenta un estudio detallado de la hidrodinámica, el modelo térmico y la distribución de

componentes. Esta información se considera una valiosa contribución hacia la optimización en tiempo real del proceso de reformación CCR.

Palabras clave: catalizador, dinámica de fluidos computacional, modelo cinético, perfil de velocidad, perfil de temperatura.

1. Introduction

Catalytic reforming of gasoline is one of the most important processes in the refining industry which is oriented to obtain high octane gasoline and aromatic compounds, considered as valuable products to the chemical industry (Rahimpour et al., 2011). Catalytic reforming processes differ in the type and composition of the catalyst and its form of regeneration. Above 95 % of the catalytic reformation processes are designed with the Continuous Catalytic Regeneration (CCR) type due to its advantages of higher catalyst activity and lower operating pressure (Mahdavian et al., 2010).

1.1. Continuous Catalytic Regenerative Process

According to the type of catalyst regeneration, the reforming processes are generally classified into three types: semi-regenerative, cyclic and continuous regenerative process (Rahimpour et al., 2013). In the CCR process (see Figure 1) three or four stacked radial flow reactors are used to keep the catalyst cool, low reaction pressures and minimal recycled gas circulation. The load fed to the reactor is previously heated and circulates through the catalytic reformers. The catalyst flows vertically by gravity through the reactors, while the gasoline follows a radial flow through the catalyst bed. The catalyst is continuously removed from the last reactor to be regenerated, while fresh catalyst is fed to the first reactor (Gyngazova et al., 2011). During the process, a series of reactions occurs where low octane hydrocarbons, such as paraffins and naphthenes, are transformed into compounds with high octane numbers, as aromatics and isoparaffins, hydrogen and other light gases (Ancheyta and Villafuerte, 2000).

Figure 1

1.2. The Catalyst

In the naphtha catalytic reforming process, along with the production of a reformate with high octane number, it is also important to evaluate aromatics and hydrogen formation which are generated as products byproducts, so the process is required to be catalyzed. Bifunctional catalysts, named for their ability to perform a metallic function and an acid function in chemical reactions, are recommended for this type of process. Alumina-supported platinum catalysts fulfill this dual function. In the metallic function, the conversion of cycloalkanes to aromatics, the hydrogenation of olefins and the dehydrocycling of paraffins occurs. On the other hand, the acid function favors the isomerization reactions of alkanes and cycloalkanes (Olah and Monlar, 2003). The first catalysts used in the naphtha catalytic reforming process were called monometallic, being made of a single metal and a support. Currently, the most recurring catalysts in catalytic reforming are bimetal catalysts, as they contain two metals and an acid part (Jafari, et al., 2013). The displacement of monometallic catalysts is due to the bimetals that improve the selectivity of the catalyst, at the same time that it modifies the deposition of coke on it, therefore increasing the performance of the catalyst to a subsequent reduction in costs (Parera and Figoli, 1995). Various studies have been carried out on pairs of catalysts used in the reforming process. Typically, the first metal is platinum

supported by aluminum chloride. For the second metal, proposals have been developed that include Tin (Raffinage, 1969), Rhenium (Kluksdahl, 1968), Germanium (McCallister, 1971), Iridium (Sinfelt, 1976) and Indium (Antos, 1976).

1.3. Kinetics of the CCR Process

To accurately represent the process of catalytic reforming of gasoline, it is necessary to establish an appropriate kinetic model, which includes the largest number of reaction groups that occur during the reformation. The gasoline consists of a mixture of hundreds of components, so it is unfeasible to establish a model that considers all components and reactions, however, several kinetic models have been developed, which, although they proved appropriate to represent the kinetics of the reformation of the naphtha, some reactions were omitted such as the dehydrocycling of paraffins to aromatics and isomerization of aromatics, as well as the detailed subdivision of aromatics, which constitute the main products of the reforming (Padmavathi and Chaundhuri, 1997).

New kinetic models have been proposed and the number of components of the groups in which gasoline is characterized has been increased. The model considered for the present study consists of 24 pseudo components and 71 reactions (Ancheyta et al, 2011).

Various previous works related to packed bed reactors have been developed for the catalytic reforming process of gasoline, such is the case of Gyngazova et al (2011), who proposed a reactor model for the CCR process that reflects the influence of the feed naphtha composition, taking into account the kinetics of coke formation in the reforming composition and catalyst deactivation. The model can help to find optimal operation parameters and it allows to increase the quality and quantity of the product. In another study of the CCR process, a mathematical model was proposed that included 32 gasoline pseudo components and 84 chemical reactions and a catalyst deactivation model, which were compared and validated with experimental data, obtaining favorable results. In another study of the CCR process, a mathematical model was proposed including 32 gasoline pseudo components and 84 chemical reactions, as well as a catalyst deactivation model, which were compared and validated with experimental data, obtaining favorable results (Iranshahi et al., 2014). Another study was developed in a Petrochemical Nigerian Company to find out the behavior of the reactions under both steady and unsteady state conditions using gPROMs[®] and MATLAB[®] software to validate predictions with literature data. With the sensitivity analysis it was determined that increasing the reaction temperature, increases aromatic production and coke in the catalyst and vice versa (Yusuf et al., 2019). One year later, was carried out another study ant the same Company, using gPROMs and KRPC software to validate the thermodynamic and kinetics parameters of the catalytic reforming process model. The results were compared with real data, and it was found that increasing hydrogen hydrocarbon ratio of 5.6 to 7.4, aromatics production decreases from 58.5 % to 55.5 %, and reformate yield increases from 52,805 kg/h to 53,234 kg/h (Yusuf et al., 2020).

Another new mathematical model was developed of catalytic refining of low-octane gasoline fractions into high-octane fractions. It was used kinetic equations for commercial gasoline reforming with platinum-rhenium catalyst on alumina. The results demonstrated agreement between the calculated data and experimentally measured data of refinery industry (Petrova, D., et al., 2021).

A recently developed study showed that calculations of concentration at equilibrium of complex reaction systems are recommended to be analyzed by the Gibbs free energy minimization method, so it was proposed to analyze the effect of temperature, pressure and the hydrogen hydrocarbon ratio on the reactions of the catalytic reformation process, from the thermodynamic equilibrium

point of view, using Gibbs free energy method. It was determined that increasing the temperature, the aromatics yield increases, so the Research Octane Number increases too (Martínez et al., 2022). However, an investigation has not been developed that allows to know with precision the behavior of the system of reactors of the CCR process, that is why in the present study the modeling and simulation in COMSOL Multiphysics® of a 3D reactor was carried out, where the velocity and temperature profiles are studied, as well as the concentration distribution to obtain operational parameters that can be optimized

2. Methods and materials

The modeling and simulation of the 3D reactor was developed in COMSOL Multiphysics® software. The design of the 3D reactor for CCR process consists of a system of three or four reactors arranged in a stacked form, as illustrated in Figure 1. Each reactor is made up of a perforated cylinder through which the catalyst circulates by gravity. Upon crossing the last of the reactors, the catalyst is sent to the catalytic regeneration unit. The dimensions considered for the simulation correspond to the actual measurements of a system of reactors in the refining industry, and they are presented in Table 1.

Table 1.

2.1. Governing equations

The three-dimensional model solver in COMSOL Multiphysics® relies on the Navier-Stokes equations and energy equations to solve the hydrodynamics and the thermal model of the system. In the mass conservation equations, mass transfer is assumed to be zero between gas and solid phases. The equations 1 and 2 stand for each phase

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \phi_s) + \nabla \cdot (\rho_s \phi_s u_s) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \phi_g) + \nabla \cdot (\rho_g \phi_g u_g) = 0 \quad (2)$$

Where,

$$\phi_s = 1 - \phi_g \quad (3)$$

The continuity equation for the mixture,

$$\nabla \cdot [\phi_g u_g + u_s(1 - \phi_g)] = 0 \quad (4)$$

The momentum equation is,

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \mu \nabla^2 u \quad (5)$$

For the thermal model, the solid phase is considered as a steady state without heat convection and with heat loss due to endothermic reactions. It is presented by the equation 6.

$$\rho_s C p_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla T_s) \quad (6)$$

For the gas phase, it is considered as a Newtonian and incompressible fluid. There is heat transfer by convection and conduction. It is represented by equation 7.

$$\rho_g C p_g \frac{\partial T_g}{\partial t} \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \quad (7)$$

In the simulation, the catalyst was considered as a porous medium through which the hydrocarbon mixture passes through. For the porous medium, we work with the Brinkman equation,

$$\frac{\rho}{\epsilon} \left((u \cdot \nabla) \frac{u}{\epsilon} \right) = \nabla \cdot \left[-\rho + \frac{\mu}{\epsilon} (\nabla u + (\nabla u)^T) \cdot \left(uk^{-1} + \beta|u| + \frac{Q}{\epsilon^2} \right) u + F \right] \quad (8)$$

Table 2 presents initial values for parameters considered in the simulation.

Table 2

2.2. Kinetic Model

The kinetic model is a fundamental part for a more approximate representation of the actual naphtha catalytic reforming process, so a model consisting of 24 components was selected for the reactor simulation. The model subdivides the feed mixture of naphtha into paraffins, isoparaffins, naphthenes and aromatics, considering groups of atoms between 6 and 11 carbon atoms (Ancheyta et al 2014). The mathematical model was developed in COMSOL Multiphysics® and compared with a model developed in Microsoft Excel®. Table 3 shows the components and the concentration at the inlet of the reaction system.

Table 3

2.3. The catalyst

Most of the CCR processes use bimetallic catalysts, specially Pt catalysts on Al₂O₃. It is necessary to know the behavior of the catalyst into the reactor, so it was simulated a 2 mm catalytic particle of Pt-Re/Al₂O₃ catalyst. COMSOL Multiphysics® software was used to determine the flow of naphtha fluid around the sphere and to analyze concentrations profile.

2.4. Research Octane Number

The octane number for a mixture of hydrocarbons can be calculated with the expression 9 (Albahri et al., 2002).

$$RON = a + b(T) + c(T)^2 + d(T)^3 + e(T)^4 \quad (9)$$

Where RON is the Research Octane Number, $T = T_b/100$ corresponding to the temperature provided by the ASTM D86 method at 50% volume, and a, b, c, d and e are coefficients for the estimation of RON, provided in Table 4.

Table 4

Once the RON has been calculated for each group of hydrocarbons (n-paraffins, i-paraffins, naphthenes and aromatics), the total RON is calculated using equation 10.

$$RON = x_{NP}(RON)_{NP} + x_{IP}(RON)_{IP} + x_N(RON)_N + x_A(RON)_A \quad (10)$$

Where x represents the mole fraction for each group of components, which were obtained from the kinetic modeling.

3. Results

Firstly, a simplified 3D geometry of the reactors was used to simulate the chemical the hydrodynamic and thermal models, as well as chemical kinetics, as it is shown in Figure 2. Then, a catalytic particle of Pt-Re/Al₂O₃ was simulated to know the behavior of the components through the catalyst. Finally, RON was calculated for each reactor.

Figure 2

3.1. Hydrodynamic and thermal models

Figure 3 shows the velocity profile of naphtha in each reactor. Whereas the velocity patterns change in the vicinity near the walls of the reactor, because it diminishes the tortuosity of the catalytic bed that obstructs the passage of the fluid, while the speed is lower as the flow passes through the porous medium (catalyst).

Figure 3

The temperature profile indicates that the highest temperature is found at the entrance to each reactor, because the feed streams are heated to the appropriate temperature before being introduced into each reactor. Temperature patterns are shown in Figure 4 observing that the first and second reactors exhibit temperature drops to a greater extent due to the endothermic reactions of naphtha, such as dehydrogenation and cyclization of naphthenes, while in the third reactor most of the reactions are exothermic, so the temperature at the reactor outlet drops to a lesser extent.

Figure 4

3.2. Kinetic model

For the kinetic modelling, it was constructed in COMSOL Multiphysics® a 3D reactor system, as shown in Figure 2. The simulation of the kinetic model shows the concentrations of the different groups of hydrocarbons present in the naphtha through the catalyst distribution. Figure 5 presents the concentration of paraffins, naphthenes and aromatics in each reactor.

Figure 5

These results show internal concentration patterns, observing that the concentration of aromatic compounds increases, while the concentrations of naphthenes and paraffins decrease in each reactor. In the first and second reactors, dehydrogenation reactions are carried out, and in the third reactor the most difficult reactions occur, such as paraffin dehydrocyclization and aromatic alkylation, therefore, it is necessary that 50% of the catalyst circulate in the third reactor. Hydrogen

concentration increases in each reactor due to dehydrogenation and dehydrocyclation reactions, as is shown in Figure 6.

Figure 6

The produced hydrogen, which comes out together with the reformed naphtha produced in reactor number 3, will be directed to the separator and fed back to reactor number 1. Figures 7 to 9 show the concentration profiles of different chemical groups throughout the reactors for paraffins, naphthenes and aromatic compounds.

Figure 7

Figure 8

Figure 9

Paraffins with five carbon atoms or less increase their concentration due to cracking reactions, while paraffins with more than 5 carbon atoms are transformed into aromatic compounds through dehydrocyclation reactions, or form isomers as iso-paraffins. Naphthenes decrease their concentration because they form cyclic compounds that will later become aromatic compounds through dehydrogenation reactions. Aromatic compounds are formed in the three reactors, so their concentrations increase as can be observed at the reactor outlet. Aromatic compounds enhance the octane number of the reforming, therefore, their reactions are desirable in the process.

3.3. The catalyst

Figure 10 shows the velocity profile of a catalytic particle of Pt-Re/Al₂O₃ catalyst, which was simulated in COMSOL Multiphysics.

Figure 10

As can be seen, the fuel flowrate decreases upon contact with the catalyst particle, and it increases in the free areas. The concentration profiles for some compounds are presented in Figure 11.

Figure 11

The concentrations of A6, A11, MCP and other naphthenes increase during the process, so that most of its area can be seen in the catalyst particle with the highest concentrations, especially in the center of the sphere. On the other hand, paraffin concentrations tend to decrease because they are transformed into their isomers and other compounds, but, at the same time, they are produced during hydrocracking reactions, so the concentration profiles appear more uniform.

3.4. Research Octane Number

According to the equation 3 and with $T_b = 101.5\text{ }^{\circ}\text{C}$ (ASTM D86), RON was calculated for the mixture at the outlet of each reactor. Figure 12 shows the octane number recorded throughout the three reactors. It can be seen that, with greater passage through the catalyst, the transformation of paraffins and naphthenes into isoparaffins and aromatics occurs, and, therefore, the octane number

of the mixture increases. It is possible to achieve more than 90 octanes at the end of the process and to obtain a higher-octane number, the operating parameters of the process can be adjusted, and the desired octane number can be achieved.

Figure 12

4. Conclusions

3D modeling of a three-reactor system of the catalytic reforming process of naphtha continuous regeneration (CCR) was carried out to predict the flow analysis, temperature profile and chemical kinetics of the process, by using COMSOL® Multiphysics simulator. The results showed that, considering the catalyst as a porous medium, the passage of naphtha through the catalytic load that runs along the reactor increases its concentration of aromatics and minor paraffins (P1-P5) and decreases the concentration of paraffins. of more than 6 carbon atoms (A6-A11) and naphthenes, except for MCP, increase their production. Paraffins A6 to A11 undergo the isomerization process to form isoparaffins, while naphthenes form aromatic compounds. Enrichment with isoparaffins and aromatics allows the mixture to increase its octane number from 72 in the heating mixture to 91 in the reforming.

The information obtained in this work is of great value for the refining industry, due to the novelty of visualizing the process in a 3D simulation, which will allow the optimization of operating parameters in subsequent studies.

Nomenclature

<i>Symbol</i>	<i>Description</i>	<i>Units</i>
β	Drag coefficient	Dimensionless
ϵ	Porosity	Dimensionless
ρ_g	Gas density	kg/m ³
ρ_s	Solid density	kg/m ³
μ	Dynamic viscosity	Pa s
$\emptyset$	Phase volume fraction	Dimensionless
τ	Stress tensor	Pa
C_{p_g}	Gas heat capacity	J/kg K
C_{p_s}	Solid heat capacity	J/kg K
F	External forces	N/m ³
k	Thermal conductivity	W/m K
p	Mixture pressure	Pa
T	Temperature	K
T_g	Gas temperature	K
T_s	Solid temperature	K
u	Phase velocity	m/s
u_g	Gas velocity	m/s
u_s	Solid velocity	m/s

References

- Ancheyta, J., & Villafuerte, E. (2000). Kinetic modeling of naphtha catalytic reforming reactions. *Energy Fuels*, 14, 1032-1037.
- Antos, G. A., & Aitani, A. (1995). *Catalytic Naphtha Reforming* (Segunda ed.). New York: Marcel Dekker.
- Antos, G. J. (1976). Estados Unidos Patente n° 4032587.
- COMSOL. (2020). The COMSOL® Software Product Suite. Recuperado el 03 de marzo de 2020, de <https://www.comsol.com/products>
- Gyngazova, M., Kravtsov, A., Ivanchina, E., Korolenko, M., & Chekantsev, N. (2011). Reactor Modeling and Simulation of Moving-Bed Catalytic Reforming Process. *Chemical Engineering Journal*, 134-143.
- Gyngazova, M., Kravtsov, A., Ivanchina, E., Korolenko, M., & Chekantsev, N. (2011). Reactor modeling and simulation of moving-bed catalytic reforming process. *Chemical Engineering Journal*, 134-143.
- Iranshahi, D., Karimi, M., Amiri, S., & Jafari, M. (2014). Modeling of naphtha reforming unit applying detailed description of kinetic in continuous catalytic regeneration process. *Chemical Engineering Research and Design*.

- Jafari, M., Rafiei, R., Amiri, S., Karimi, M., Iranshahi, D., Rahimpour, M., & Mahdiyar, H. (2013). Combining continuous catalytic regenerative naphtha reformer with thermally coupled concept for improving the process yield. *Hydrogen Energy*, 38, 10327-10344.
- Kluksdahl, H. (1968). Estados Unidos Patente n° 3415737.
- Mahdavian, M., Fatemi, S., & Fazeli, A. (2010). Modeling and Simulation of Industrial Continuous Naphtha Catalytic Reformer Accompanied with Delumping the Naphtha Feed. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 8, 47-54.
- Martínez, J., Zúñiga, M., Ruiz-Martínez, R., (2022) A thermodynamic Analysis of Naphtha Catalytic Reforming Reactions to Produce High-Octane Gasoline, *Processes*, 10 (2), 313.
- Olah, G. A., & Monlar, A. (2003). *Hydrocarbon Chemistry*. New Jersey: Wiley-Interscience.
- Padmavathi, G., & Chaundhuri, K. (1997). Modeling and Simulation of commercial catalytic naphtha reformers. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 75, 930-937.
- Parera, J. M., & Figoli, N. (1995). *Catalytic Naphtha Reforming*. New York: Marcel Dekker.
- Petrova, A., Gushchin, P., Ivanov, E., Lyubimenko, A., Kolesnikov, I. (2021) Modelling Industrial Catalytic Reforming of Lowoctane Gasoline, *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 57, 143-159 <https://doi.org/10.1007/s10553-021-01234-x>
- Raffinage, C. F. (1969). Francia Patente n° 2031984.
- Rahimpour, M. R., Iranshahi, D., Pourazadi, E., Paymooni, K., & Bahmanpour, A. (2011). The aromatic enhancement in the axial-flow spherical packed-bed membrane naphtha reformers in the presence of catalyst deactivation. *AIChE Journal*, 3182-3198.
- Rahimpour, M., Jafari, M., & Iranshahi, D. (2013). Progress in catalytic naphtha reforming process: A review. *Applied Energy*, 109, 79-93.
- Sinfelt, J. H. (1976). Estados Unidos Patente n° 3953368.
- Yusuf, A., John, Y., Aderemi, B., Patel R., Mujtaba, I. (2019), Modelling, Simulation and sensitivity analysis of naphtha catalytic reforming reactions, *Computers & Chemical Engineering* 130, 106531.
- Yusuf, A., John, Y., Aderemi, B., Patel R., Mujtaba, I. (2020), Effect of hydrogen partial pressure on catalytic reforming process of naphtha, *Computers & Chemical Engineering* 143, 107090.

Figures and Tables

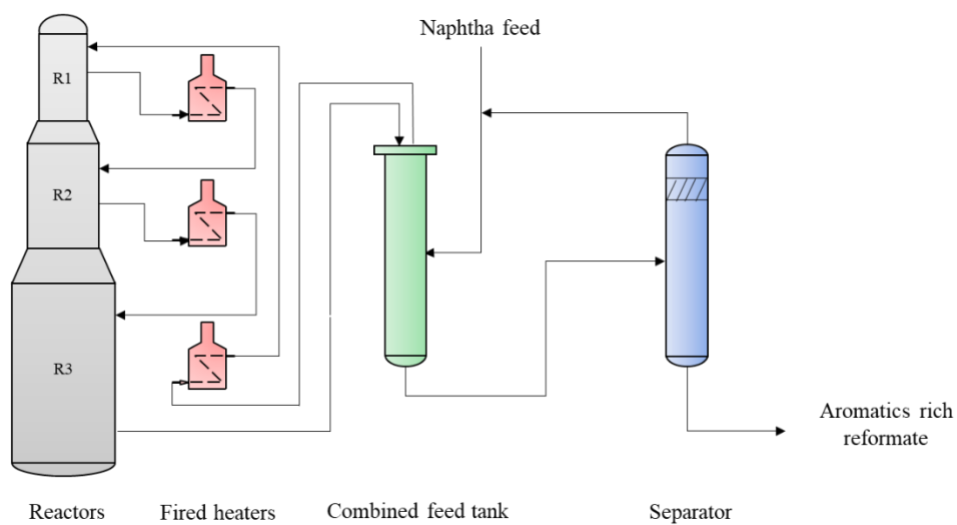


Fig. 1. Continuous Catalytic Regenerative Process

Table 1. Reactors dimensions (Iranshahi et al., 2014)

Reactor	Diameter (m)	Length (m)
1	2.19	8.5

2	2.35	10.35
3	2.53	12.1

Table 2. Initial values (Iranshahi et al., 2014)

Parameter	Numerical value	Units
Naphtha feed	233,637.01	kg/h

Inlet temperature	798.15	K
Inlet pressure	595	kPa
Catalyst distribution Reator 1	20	wt %
Catalyst distribution Reator 2	30	wt %
Catalyst distribution Reator 3	50	wt %

Table 3. Initial concentrations (Ancheyta et al., 2011)

Compound Name	Formula	Abbreviation	Flowrate (mol/m ³)
Benzene	C_6H_6	A6	0.8
Toluene	C_7H_8	A7	3.22
Ethylbenzene	C_8H_{10}	A8	4.71
Propylbenzene	C_9H_{12}	A9	4.21
Butylbenzene	$C_{10}H_{14}$	A10	2.7
Pentylbenzene	$C_{11}H_{16}$	A11	0.3
Methylcyclopentane	C_6H_{12}	MCP	0.42
Cyclohexane	C_6H_{12}	N6	3.21
Cycloheptane	C_7H_{14}	N7	5.8
Cyclooctane	C_8H_{16}	N8	4.71
Cyclononane	C_9H_{18}	N9	3.56
Cyclodecane	$C_{10}H_{20}$	N10	0.6
Cycloundecane	$C_{11}H_{22}$	N11	0.4
Methane	CH_4	P1	0
Ethane	C_2H_6	P2	0
Propane	C_3H_8	P3	0
Butane	C_4H_{10}	P4	0
Pentane	C_5H_{12}	P5	3.8
Hexane	C_6H_{14}	P6	4.4
Heptane	C_7H_{16}	P7	3.2
Octane	C_8H_{18}	P8	6.36
Nonane	C_9H_{20}	P9	5.09
Decane	$C_{10}H_{22}$	P10	2.97
Undecane	$C_{11}H_{24}$	P11	2.2

Table 4. RON coefficients (Albahri et al., 2002).

Chemical Group	a	b	c	d	e
n-Paraffins	92.809	-70.97	-53	20	10
i-Paraffins	98.757	-39.8825	132	-200	75
Naphtenes	77.536	471.59	-418	100	0
Aromatics	119	144.8	-12	0	0



Fig. 2. 3D reactor structure for kinetic modelling

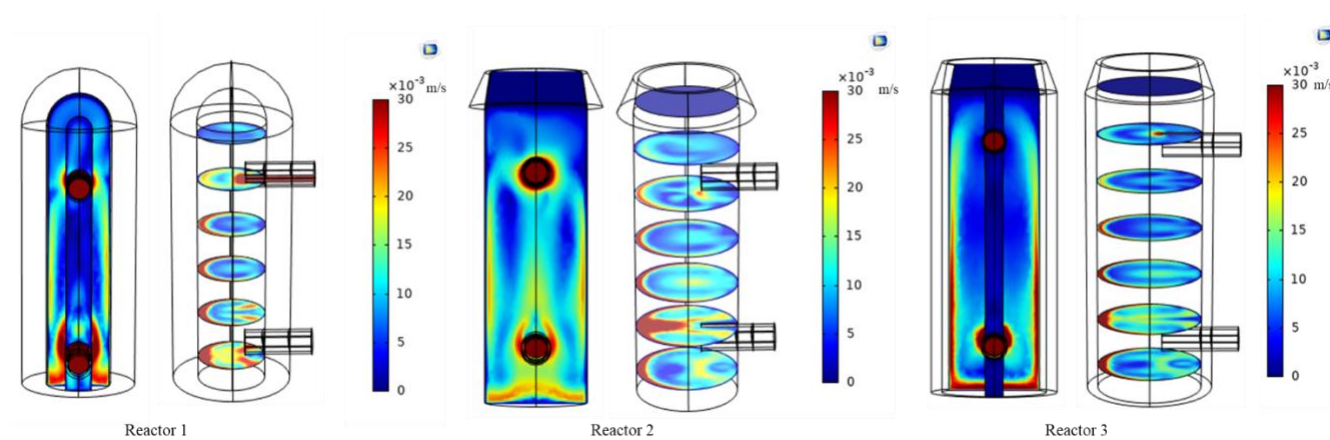


Fig. 3. 3D velocity profiles (m/s)

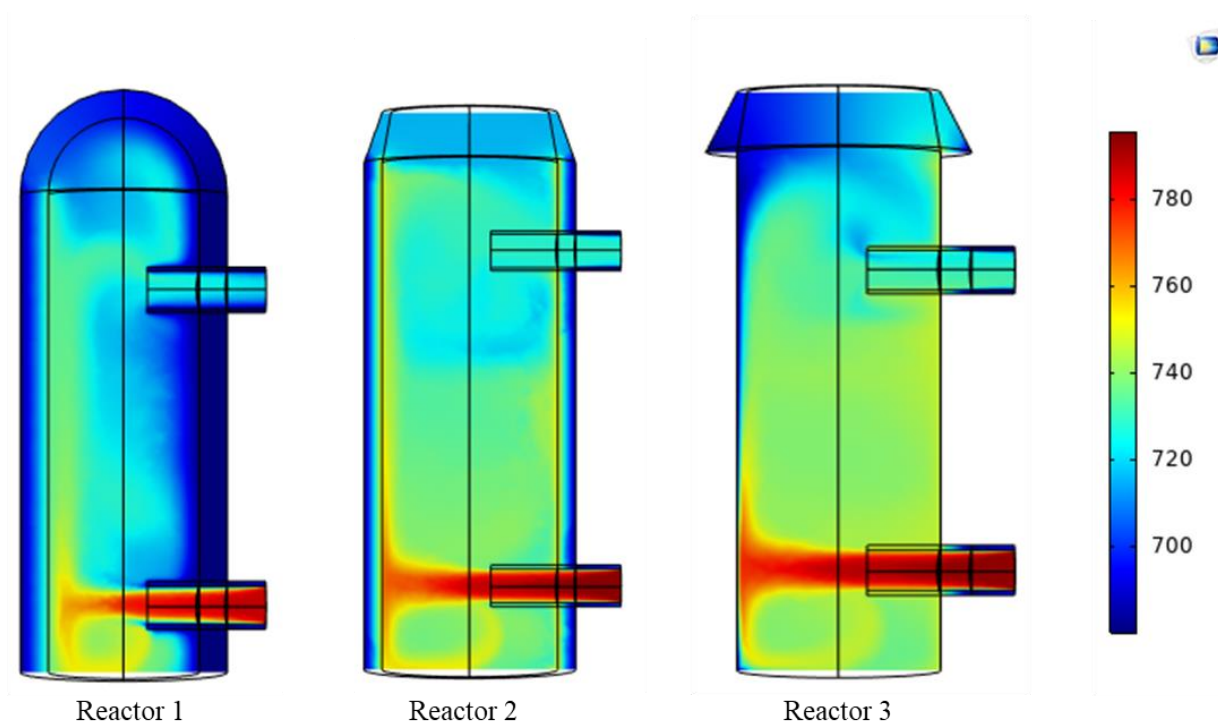


Fig. 4. 3D temperature profiles (°K)

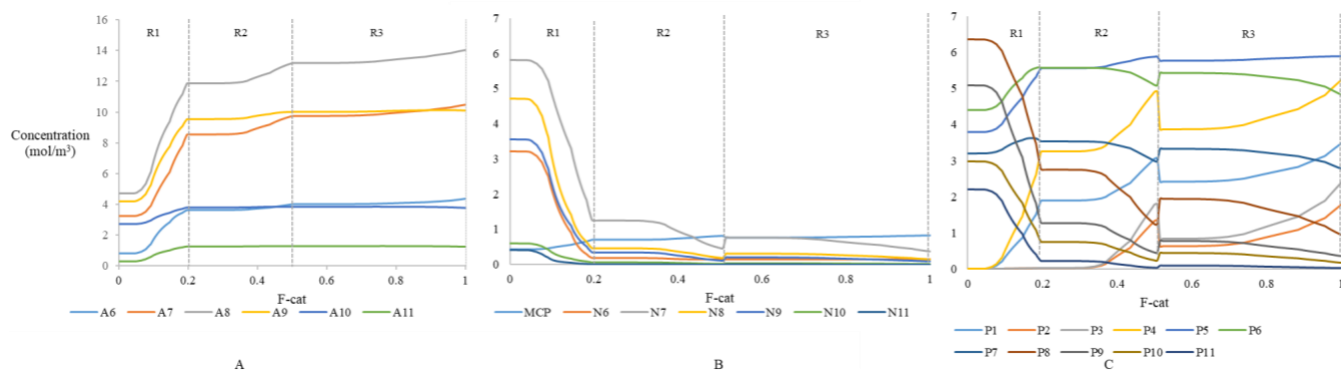


Fig. 5 Molar concentration profiles for: A) Paraffins, B) Naphthenes and C) Aromatics.

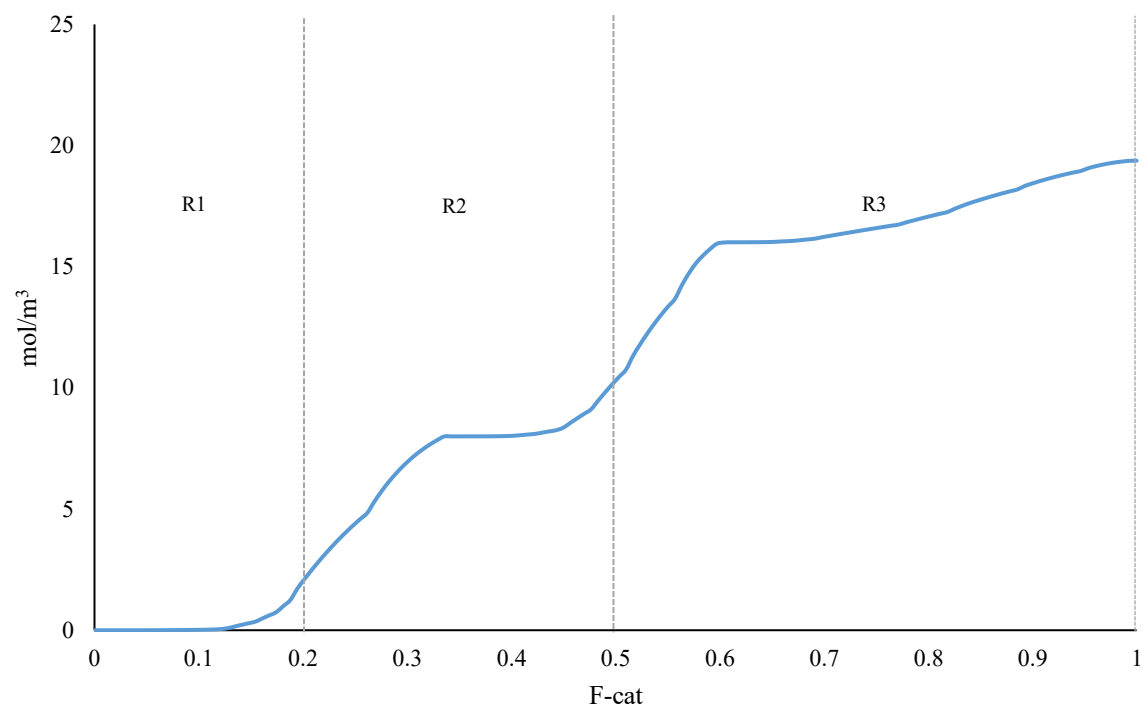


Figure 6. Hydrogen produced internal concentration profile within the reactors.

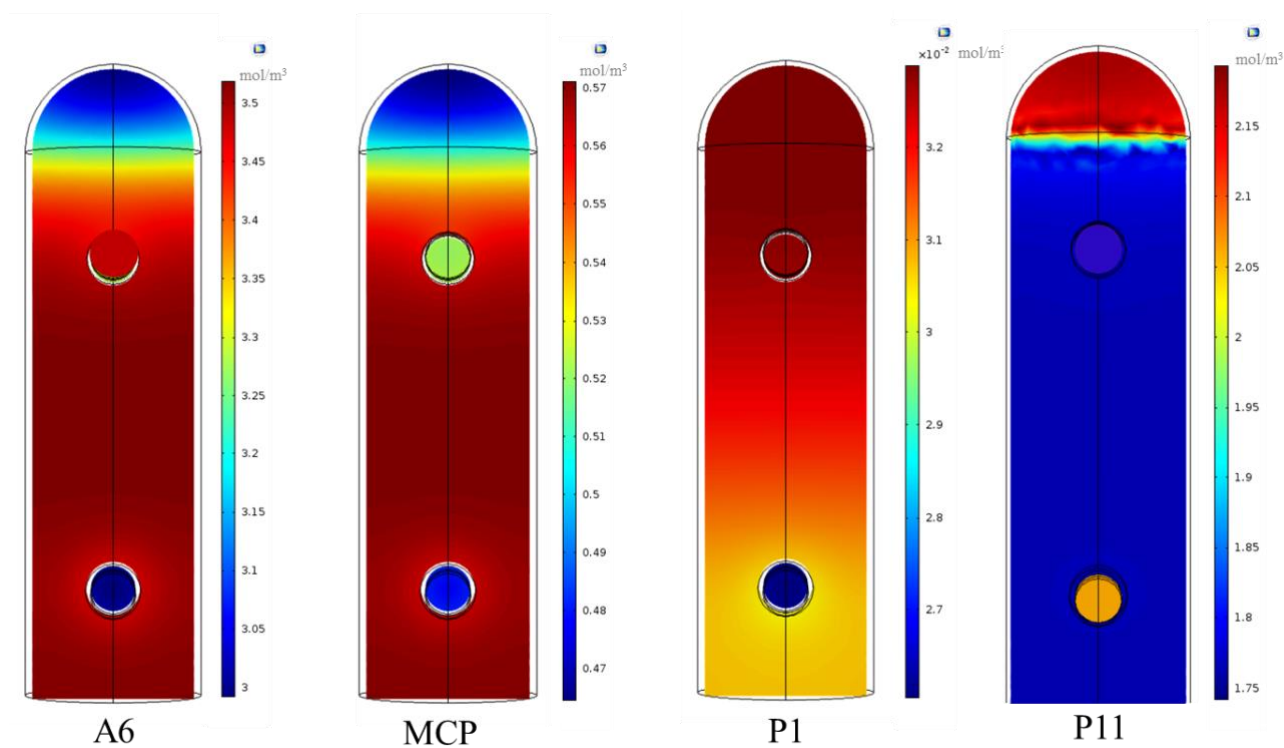


Figure 7. Internal concentration profiles in Reactor 1.

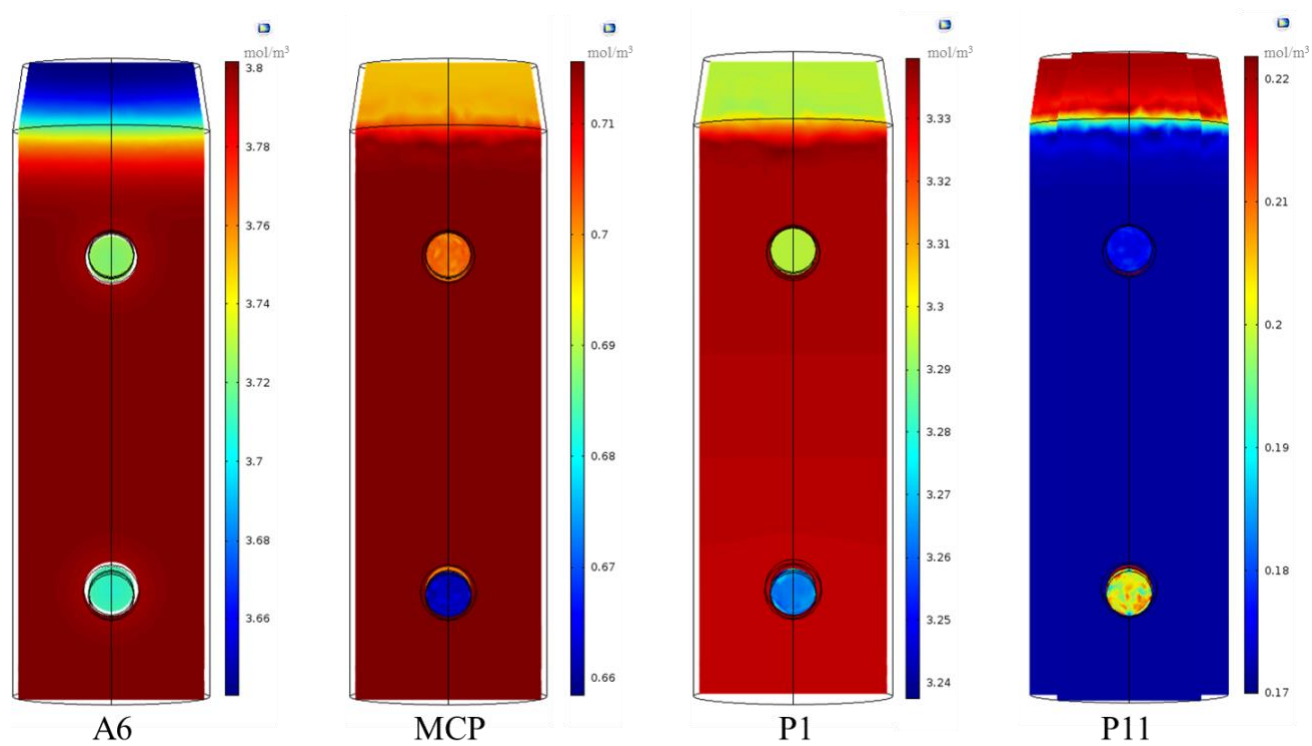


Figure 8. Internal concentration profiles in Reactor 2.

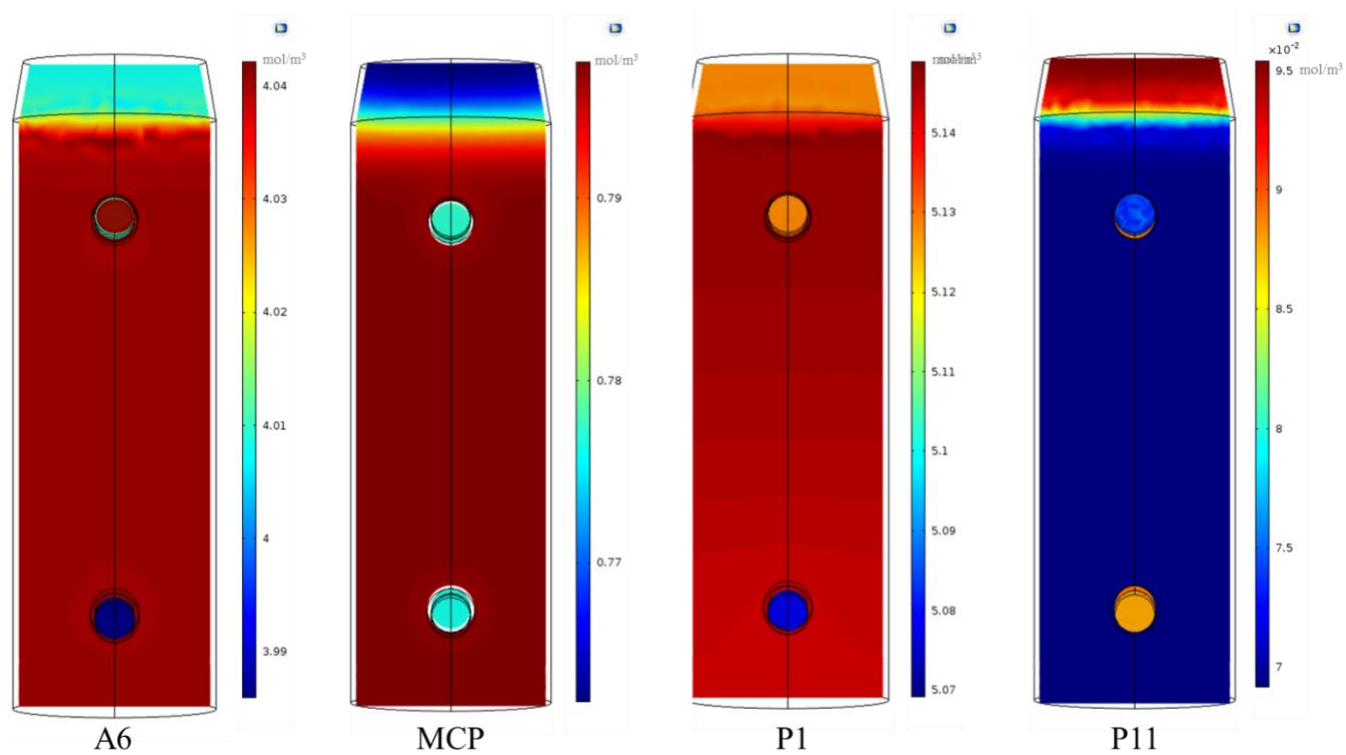


Figure 9. Internal concentration profiles in Reactor 3.

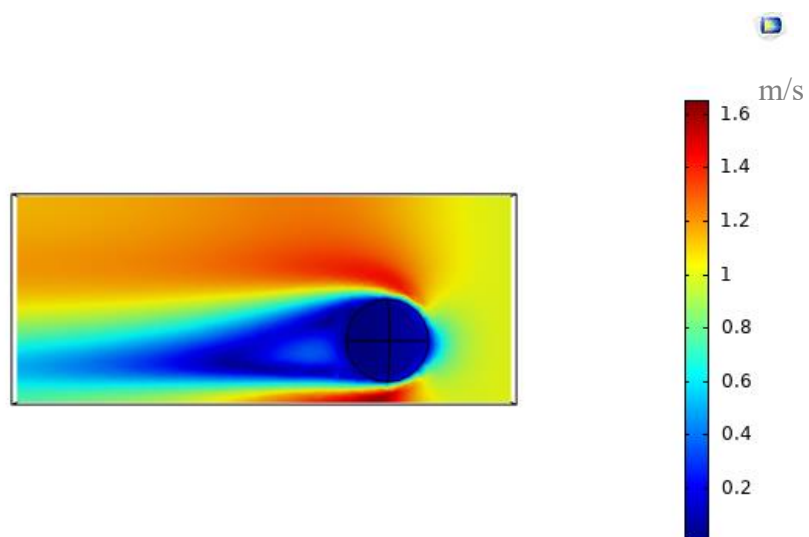


Fig. 10. Velocity profile of a catalytic particle.

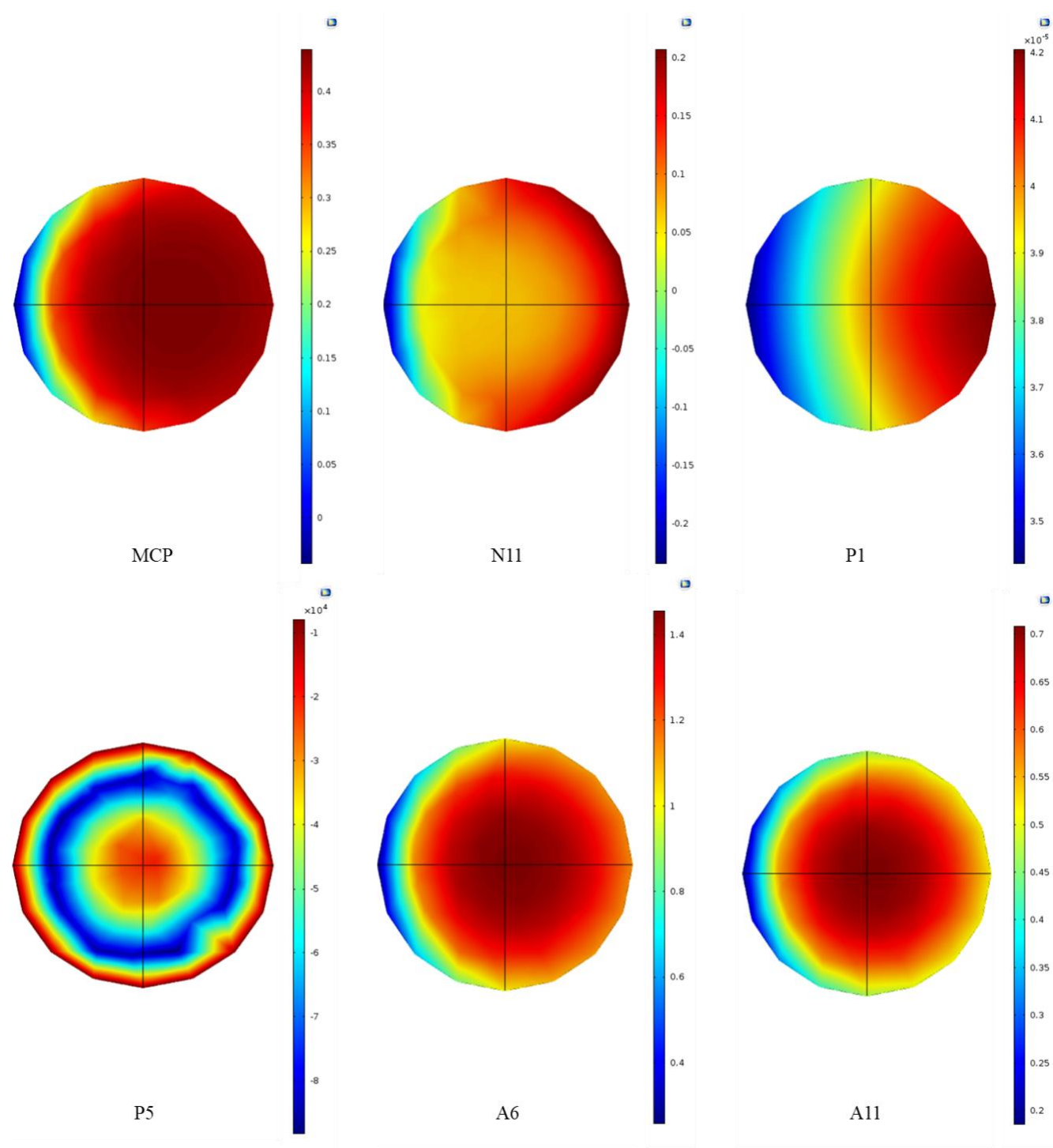


Fig. 11. Internal concentration profiles within a catalytic particle.

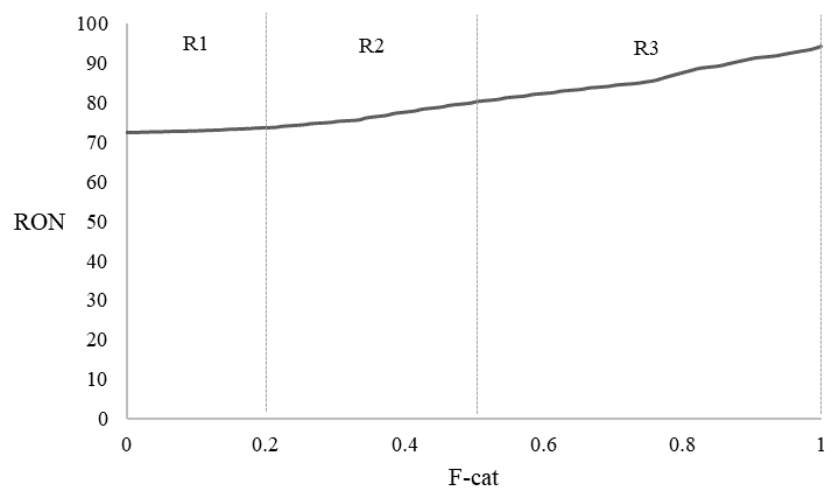


Fig. 12. Internal profile of the Research Octane Number