

GESTIÓN ÓPTIMA DE REDES DE HIDRÓGENO DE REFINERÍAS

Gómez, E. ^a, De Prada, C. ^a, Sarabia, D. ^a, Cristea, S. ^a, Méndez, C. A. ^b, Sola, J. M. ^c, Unzueta, E. ^c

^a Dpto. Ingeniería de Sistemas y Automática, Facultad de Ciencias, Univ. de Valladolid, c/ Real de Burgos s/n, 47011 Valladolid, España, prada@autom.uva.es

^b INTEC (Universidad Nacional del Litoral – CONICET), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina

^c Dpto. Control Avanzado, Petronor, Repsol YPF, 48550 Muskiz, Vizcaya, España

Resumen

El hidrógeno es un recurso escaso y caro en las refinerías de petróleo. El problema de la gestión óptima de la red de hidrógeno de una refinería se aborda en dos aproximaciones de distinta complejidad. La primera considera únicamente modelos estáticos y una redistribución del H₂ a nivel de la red. En la segunda, aún en desarrollo, se busca emplear modelos dinámicos reducidos de predicción de las velocidades de consumo de H₂ en función de la carga de hidrocarburo tratada con el fin de ajustar la producción de H₂ a la demanda lo mejor posible garantizando el cumplimiento de ciertas restricciones técnicas.

Palabras Clave: red de hidrógeno, optimización MINLP, modelo reducido, hidrosulfuración, modelo gris.

1 INTRODUCCIÓN

El hidrógeno H₂ es un recurso caro que se emplea en las refinerías de petróleo en diferentes operaciones, siendo las más importantes el hidrot ratamiento (con la finalidad de eliminar impurezas como azufre y nitrógeno así como hidrogenar aromáticos) y el hidro craqueo (ruptura de hidrocarburos de cadena larga en otros menores de mayor valor añadido).

A la red de hidrógeno de una refinería de petróleo – ver Figura 1– están conectadas distintas unidades. Varias unidades consumidoras de H₂ en azul – principalmente unidades hidrosulfuradoras de distintas fracciones de petróleo, gasóleos o naftas–, alguna unidad productora en rojo –hornos de producción de hidrógeno por reformado a partir de gas natural o gases ligeros–, y alguna unidad productora neta en morado –platformados, cuya finalidad es el aumento del índice de octano de la nafta– que producen más H₂ del que consumen pero cuya producción depende de la carga procesada y no es una variable de decisión verdaderamente manipulable al ser el H₂ un subproducto de la unidad.

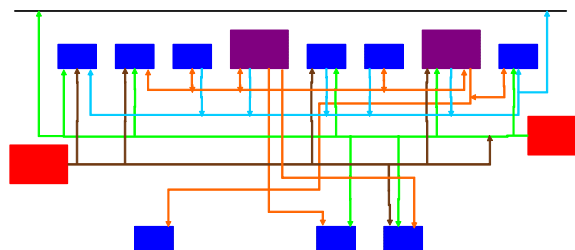


Figura 1: Red de hidrógeno de refinería

La red consta de varios colectores a distintos niveles de presión y con distintos niveles de pureza de H₂. Es habitual que exista un colector asociado a cada una de las unidades productoras, y conectados a su vez a otros colectores. Una unidad consumidora de H₂ puede tener aportes de H₂ fresco procedentes de uno o varios de estos colectores. A su vez, si la corriente de H₂ de salida de una unidad tiene un nivel de pureza de H₂ suficiente, puede ser enviada a un colector de baja pureza para su aprovechamiento como aporte en otras unidades consumidoras. El H₂ de colectores no consumido y el H₂ de salida de las unidades en corrientes de purga de menor pureza se recoge en el colector de fuel gas de la refinería para su aprovechamiento como combustible.

La mayor parte de las unidades consumidoras de hidrógeno son hidrosulfuradoras, cuyo principal objetivo es la eliminación del azufre contenido en las distintas fracciones de petróleo empleando H₂. Debido a una regulación medioambiental cada vez más estricta el contenido en ppm de azufre de los carburantes es cada vez menor, lo que determina una operación de las plantas hidrosulfuradoras a mayor severidad y un mayor consumo de H₂. Por otra parte, la disponibilidad de H₂ influye directamente en el beneficio económico de la refinería, puesto que si es el recurso limitante determinará por tanto la capacidad de producción de combustibles. De forma que interesa en gran medida optimizar el uso del H₂.

El H₂ no puede almacenarse y ha de operarse con exceso del mismo puesto que un déficit influye gravemente en la degradación de la actividad de los catalizadores de los reactores y en su vida útil, siendo

dichos catalizadores muy caros. Por tanto, interesará en la operación ajustar lo más posible la producción de H_2 a la demanda para minimizar las pérdidas enviadas al colector de fuel gas, optimizando así la producción.

1.1 ENFOQUES

El propósito es desarrollar una herramienta de ayuda a la decisión para la gestión óptima de la red de H_2 de una refinería. El problema se abordará con dos enfoques de complejidad creciente.

En la primera aproximación sólo se considera la red de distribución de H_2 , tratando de optimizar la operación a través de buscar la mejor combinación de flujos de aporte desde los distintos colectores que garanticen que se mantienen las mismas condiciones de operación: iguales flujos totales y purezas en la entrada a las unidades consumidoras. El modelo considerado es estacionario, de balances de materia en las uniones y bifurcaciones de la red.

En la segunda aproximación se pretenden utilizar modelos dinámicos que permitan tomar decisiones sobre qué unidades y a qué ritmo han de producir H_2 de acuerdo con las dinámicas de las plantas productoras y consumidoras. Dichas dinámicas son lo suficientemente lentas (del orden de 1-3 horas) como para que la consideración de modelos dinámicos tenga especial interés.

En la sección 2 se describe la etapa de reconciliación de datos previa a la de optimización. En la sección 3 se describe el primer enfoque de resolución y en la sección 4 se describe el segundo. En la sección 5 se detalla el trabajo futuro a realizar.

2 RECONCILIACIÓN DE DATOS

Con el fin de obtener una idea del estado del proceso lo más próxima a la realidad, en primer lugar se aprovecharán todas las medidas disponibles de caudal y pureza de las corrientes –ver Figura 2–. Puesto que a partir del modelo estacionario considerado de balances de materia en las corrientes de gas existen medidas de caudal redundantes, se resolverá un problema de optimización (ec. (1)) de forma que se ajuste lo mejor posible el conjunto de todas las variables del modelo \hat{F}_i (perfecto, que cumple de forma exacta todos los balances) a todas las medidas experimentales existentes F_i para todos los instrumentos i disponibles. Al resolver el problema de reconciliación de forma dinámica, para un intervalo de tiempo dado, las variables de decisión a obtener son los bias o sesgos (ec. (2)) sobre el valor experimental para todas las variables introducidas

como entradas o condiciones de contorno en el cálculo del modelo.

Además es necesario considerar que en líneas de gas donde las medidas de caudal se obtienen a partir de caudalímetros de placa y orificio ha de efectuarse una corrección debida a que las condiciones de presión, temperatura y peso molecular de la corriente en la operación difieren de los valores de diseño de la placa de medida, valores que intervienen en la ecuación de conversión de la lectura de presión a caudal. El peso molecular de la corriente en la operación puede obtenerse de dos modos: a través de una medida en línea si está disponible el analizador o a través del modelo de balances de materia en las uniones y bifurcaciones de corrientes (de este modo, se corrige la lectura experimental F_i con valores de masa molecular obtenidos a partir del modelo \hat{F}_i). Las composiciones –purezas de H_2 – de aquellas corrientes que no puedan conocerse de este modo se estimarán como variables de decisión en el problema de reconciliación.

$$\text{Min} \sum_{i \in I} (\hat{F}_i - F_i(\hat{F}_i))^2 \quad (1)$$

$$\hat{F}_i = F_i(\hat{F}_i) + \text{bias} \quad \forall \text{bound} \quad (2)$$

Para no complicar la resolución no se ha considerado un error de span entre el valor del modelo \hat{F}_i y el dato experimental corregido F_i al que habría de ajustarse lo más posible (ec. (2)).

3 OPTIMIZACIÓN DE LA RED EN ESTACIONARIO

El problema de asignar el H_2 disponible en las unidades productoras a las unidades consumidoras con el fin de minimizar la producción teniendo en cuenta los distintos flujos y purezas de las corrientes ha sido ya abordado en el análisis del pinch de hidrógeno por Alves (1999) [1]. Towler et al. (1996) [11] complican el análisis incluyendo el coste de recuperación de H_2 en membranas; Hallale y Liu (2001) [7] desarrollan un nuevo método que tiene en cuenta restricciones de presión así como los costes de compresión. Estos métodos son útiles en el problema de diseño de la red, planteando decisiones sobre incorporar nuevas unidades purificadoras de H_2 o compresores y su ubicación. No obstante, existe asimismo una necesidad de optimizar el uso de H_2 en la operación en línea, siendo el que aquí se aborda. En la operación real, las condiciones nominales de funcionamiento no se mantienen, variando tanto los flujos como las purezas de las corrientes, y el

potencial de ahorro al intentar minimizar los excesos de H₂ enviados a fuel gas es grande.

3.1 MODELO

En esta sección se describe el modelo de optimización MINLP propuesto con el objetivo de seleccionar las condiciones de operación para las unidades productoras que permitan satisfacer las demandas de H₂ minimizando el coste de producción. El problema considera la redistribución del H₂ disponible en los colectores de la red, garantizando el mantenimiento de ciertas condiciones a la entrada de todas las unidades consumidoras en cuanto a flujo total y pureza del H₂ de aporte fresco suma del procedente de distintos colectores.

Todas las corrientes de la red son gaseosas con dos componentes, H₂ e impurezas (CH₄ principalmente). Las variables del modelo son los flujos y purezas de las corrientes.

Las restricciones del modelo se refieren a las unidades productoras, los colectores y las unidades consumidoras y se detallan a continuación, así como la función objetivo.

3.1.1 Función objetivo

La función objetivo (3) calcula el coste total del H₂ requerido para tratar las cargas de hidrocarburo especificadas. La correlación no lineal fc determina para cada unidad productora u el coste de producción como una función del flujo y pureza del H₂ generado, dependiendo de las características de la unidad u . Al H₂ del colector de baja pureza subproducto de la operación de las unidades de platformado o de otras unidades consumidoras se le ha asignado un coste nulo.

$$\text{Min Cost} = \sum_{u \in PU} fc(Q_u, P_u) \quad \forall u \in CU \quad (3)$$

3.1.2 Restricciones sobre unidades productoras

Si una unidad productora $u \in PU$ está en operación, entonces $Y_u = 1$, y las ecuaciones (4) y (5) fuerzan los correspondientes límites inferior y superior sobre los flujos (Q_u) y purezas (P_u) de H₂ de salida de la unidad. Los flujos y purezas de las corrientes de H₂ generadas en las unidades de platformado como subproducto están definidos por la operación y son parámetros del modelo en lugar de variables de decisión. La ecuación (6) define la cantidad de H₂ que se suministra desde cada unidad productora bien a los colectores $h \in H$ o bien a las unidades consumidoras $u \in CU$.

$$q_u^{\min} Y_u \leq Q_u \leq q_u^{\max} Y_u \quad \forall u \in PU \quad (4)$$

$$p_u^{\min} Y_u \leq P_u \leq p_u^{\max} Y_u \quad \forall u \in PU \quad (5)$$

$$Q_u = \sum_{h \in H} q_{uh} + \sum_{u' \in CU} q_{uu'} \quad \forall u \in PU \quad (6)$$

3.1.3 Restricciones sobre colectores

La red de colectores recibe corrientes de H₂ de alta pureza de las unidades productoras y corrientes de media-baja pureza de los platformados y de la salida de algunas unidades consumidoras. Las ecuaciones (7) y (8) fuerzan el cumplimiento de los balances de materia para las corrientes de entrada y salida de cada colector. Si en un momento dado la producción excede el consumo, el balance se satisface suministrando el exceso de H₂ al sistema de fuel gas de la refinería. La ecuación (9) calcula la pureza en el colector (P_h) teniendo en cuenta el flujo total de salida del colector (Q_h) y los flujos de corrientes de entrada al colector (q_{uh}) y sus correspondientes purezas (P_u y P_u^{out}).

No supone complejidad adicional extender la formulación para considerar no un balance de materia global a los colectores sino balances de materia a todas las uniones y bifurcaciones de corrientes, de modo que se tengan en cuenta cambios en la pureza a lo largo de los colectores.

$$\sum_{u \in PU} q_{uh} + \sum_{u' \in CU} q_{u'h} = Q_h \quad \forall h \in H \quad (7)$$

$$\sum_{u \in CU} q_{hu} + q_{h, \text{fuel}} = Q_h \quad \forall h \in H \quad (8)$$

$$\sum_{u \in PU} q_{uh} P_u + \sum_{u \in CU} q_{uh} P_u^{\text{out}} = Q_h P_h \quad \forall h \in H \quad (9)$$

3.1.4 Restricciones sobre unidades consumidoras

La ecuación (10) calcula el caudal total de aporte fresco de H₂ (Q_u^{in}) a la unidad consumidora u procedente de diferentes fuentes, mientras que la ecuación bilineal (11) determina la pureza real (P_u^{in}) de la corriente de entrada combinada suma de todas las individuales. La ecuación (12) fuerza un requisito de pureza mínima en la corriente combinada de entrada de cada unidad consumidora. Las necesidades mínimas de H₂ para procesar la carga de hidrocarburo (c_u) tratada en la unidad u se especifican mediante la ecuación (13) forzando una relación mínima H₂/hidrocarburo (r_u^{HH}). Las ecuaciones (14) y (15) predicen el flujo (Q_u^{out}) y pureza (P_u^{out}) de la corriente de salida de la unidad consumidora u que

contiene el H_2 no reaccionado; estas estimaciones se obtienen mediante correlaciones no lineales f_q y f_p que son funciones del flujo y pureza de las corrientes de aporte así como de las características de la carga procesada (densidad, contenido de azufre, contenido de aromáticos, etc.) y de las condiciones de operación (temperatura y tiempo de residencia en el reactor principalmente). La ecuación (16) determina la cantidad de gas de salida de la unidad que se dirige a colectores o bien a otras unidades consumidoras.

$$\sum_{h \in H} q_{hu} + \sum_{u' \in PU} q_{u'u} + \sum_{u' \in CU} q_{u'u} = Q_u^{in} \quad \forall u \in CU \quad (10)$$

$$\sum_{h \in H} q_{hu} P_h + \sum_{u' \in PU} q_{u'u} P_{u'} + \sum_{u' \in CU} q_{u'u} P_{u'}^{out} = Q_u^{in} P_u^{in} \quad \forall u \in CU \quad (11)$$

$$P_u^{in} \geq p_u \quad \forall u \in CU \quad (12)$$

$$Q_u^{in} P_u^{in} \geq c_u r_u^{HH} \quad \forall u \in CU \quad (13)$$

$$Q_u^{out} = f_q(Q_u^{in}, P_u^{in}, c_u) \quad \forall u \in CU \quad (14)$$

$$P_u^{out} = f_p(Q_u^{in}, P_u^{in}, c_u) \quad \forall u \in CU \quad (15)$$

$$Q_u^{out} = \sum_{h \in H} q_{uh} + \sum_{u' \in CU} q_{uu'} + q_{u, fuel} \quad \forall u \in CU \quad (16)$$

3.2 CASO DE ESTUDIO

La resolución del problema así considerado, con la restricción de mantener idénticas condiciones a las existentes en la operación en cuanto a flujo y pureza de H_2 en la corriente de entrada combinada (suma de los aportes frescos de distintas procedencias) a cada unidad consumidora permite una mejora escasa (2%) pero muy importante en cuanto a valor absoluto en el coste de producción. El modelo está implementado en el entorno de modelado y simulación EcosimPro[®] y como optimizador se emplea una librería NLP (NAG[®]).

4 MODELO GRIS DE UNA UNIDAD HIDRODESULFURADORA

4.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

En la Figura 2 se muestra un esquemático de una unidad hidrodesulfuradora. La unidad se alimenta con una mezcla de gasóleos de distinta procedencia. A esta corriente de hidrocarburo se le añade una corriente de hidrógeno mezcla de aporte fresco desde la red, más reciclo desde el separador gas-líquido de alta presión más el reciclo –de haberlo– desde la

unidad de membranas. En los reactores catalíticos se consume parte del H_2 a la vez que se forman hidrocarburos ligeros y otros gases.

El efluente del reactor se refrigera y se envía a un separador gas-líquido de alta presión. El azufre convertido en sulfuro de hidrógeno SH_2 puede eliminarse de la corriente gaseosa de salida del separador mediante absorción con una solución de aminas. Parte del gas de salida del separador se recomprime y recircula a la entrada del reactor; parte del gas puede purificarse en una unidad de membranas aumentando su pureza en H_2 y recirculándose a la entrada del reactor, y parte del gas se purga para evitar la acumulación de impurezas en el reciclo. La corriente de purga puede enviarse a un colector de H_2 de baja pureza o bien al colector de fuel gas si no tiene el nivel suficiente de pureza. La corriente líquida del separador de alta presión se envía a otras operaciones de separación a baja presión, de donde también se separa otra corriente gaseosa enviada al colector de fuel gas que contiene el resto del H_2 no reaccionado pero con más baja pureza al separarse en mayor proporción que a alta presión otros componentes ligeros.

Desde el punto de vista de la predicción dinámica del consumo de H_2 , sólo son relevantes el reactor, la cámara de flash de separación gas-líquido a alta presión, las membranas y la corriente de salida de la unidad (suma de la corriente rechazada en membranas, la purga a alta presión y la corriente gaseosa tras las separaciones a baja presión).

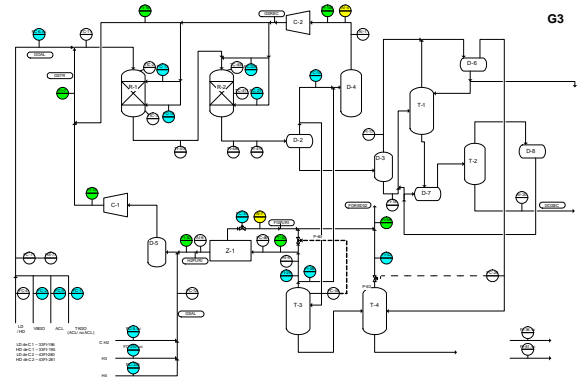


Figura 2: Unidad hidrodesulfuradora HDS.

El consumo de H_2 depende fundamentalmente de dos factores. Uno es el contenido de azufre del hidrocarburo tratado, que varía dependiendo del crudo procesado. Paralelamente a la eliminación de azufre, el H_2 también se consume en la eliminación de nitrógeno y en otras reacciones laterales, principalmente en hidrogenación de olefinas, hidrocrackeo e hidrosaromatización. De modo que el segundo factor que influye y determina en gran medida el consumo de H_2 es el tipo y composición

del hidrocarburo alimentado a la unidad. Habitualmente el hidrocarburo tratado es una mezcla de tres o cuatro fracciones procedentes de distintas unidades (columnas de destilación de crudo, unidad de craqueo catalítico en fase fluida FCC, unidad de visbreaker, etc.). Cada fracción se caracteriza por un contenido diferente de moléculas con dobles enlaces y anillos, siendo en particular los aceites cíclicos ligeros LCO procedentes del FCC los que provocan un mayor consumo de H_2 en reacciones paralelas a las de hidrosulfuración. Otros factores adicionales que influyen en el consumo de hidrógeno son la severidad de la operación (temperatura y tiempo de residencia en el reactor); la presión parcial de H_2 , que influye en la solubilidad del H_2 en la fase líquida y por tanto en la concentración de dicho reactivo; y el estado de actividad del catalizador. La severidad de trabajo del reactor se fija de acuerdo con la concentración de azufre en la corriente de hidrocarburo desulfurado de salida a conseguir, la cual es la especificación que determina la operación de la unidad.

La carga tratada no puede caracterizarse en línea, estando las medidas de laboratorio disponibles sólo cada cierto número de días. Además la calidad del crudo procesado puede variar con bastante frecuencia –cada dos o tres días–. Esto, unido a la complejidad de la mezcla tratada y de las reacciones presentes, hace que se cuente con cierta incertidumbre en el modelo de predicción de velocidad de consumo de H_2 en función de la carga de hidrocarburo. No obstante, será útil disponer de un modelo dinámico cuantitativo en la medida de lo posible.

4.2 MODELO REDUCIDO GRIS

4.2.1 Propósito del modelo y características

En el contexto de la operación óptima de la red de H_2 de la refinería, el objetivo es el desarrollo de un modelo dinámico orientado a proporcionar la velocidad de consumo de H_2 en función de la carga de hidrocarburo tratada en la unidad. A pesar de que existen correlaciones estáticas experimentales propietarias para predecir el consumo de hidrógeno en función de la carga de hidrocarburo tratada usadas con fines de diseño y planificación, la experiencia industrial confirma que el modelado dinámico es complejo.

El modelo para el consumo de H_2 en la unidad hidrosulfuradora ha de ser reducido puesto que se usará en una herramienta de gestión en línea donde un breve tiempo de cómputo es clave, aunque caracterizando adecuadamente las principales dinámicas del proceso. El modelo propuesto es de naturaleza híbrida (modelo gris), combinando

ecuaciones basadas en principios fisico-químicos con elementos de caja negra.

Varias razones hacen inviable el uso de un modelo basado únicamente en primeros principios fisico-químicos (balances de materia, energía, cantidad de movimiento, relaciones estequiométricas y leyes cinéticas). Entre estos cabe mencionar el gran número de reacciones presentes; la complejidad en cuanto a número de compuestos del hidrocarburo tratado que además no pueden conocerse en línea y que varían con la calidad del crudo procesado; la presencia de varias fases (fase gas de hidrógeno, fase líquida de hidrocarburo donde tiene lugar la reacción, y fase sólida del catalizador en cuyos puntos activos tienen lugar las reacciones); presencia de etapas de transferencia de materia entre fases en serie con la etapa de reacción, habiéndose de disolver en primer lugar el hidrógeno en la fase líquida; hidrodinámica compleja en el reactor y no bien conocida debido a las tres fases presentes; cinéticas no bien conocidas, que además pueden estar influidas por inhibidores no considerados en las ecuaciones disponibles en la literatura o la adsorción competitiva de metales, hidrocarburos u otros compuestos de azufre; el cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte exactas para mezclas tan complejas; así como el elevado número de parámetros que habrían de ser estimados.

El modelo gris combina balances de materia globales a las especies consideradas y parámetros pseudocinéticos estimados por medio de redes neuronales y que buscan un equilibrio entre simplicidad numérica y exactitud. Contribuciones previas en el área de modelos grises (Georgieva, Meireles, Fejo d'Azevedo, 2003), (Laurent, Boyer, Gatina, 2000), (Chen, Bernard, Bastin, Angelov, 2000) muestran la factibilidad del enfoque propuesto.

4.2.2 Descripción del modelo

A continuación se describe la estructura del modelo. Se considerarán cuatro componentes: hidrógeno (H_2); metano (CH_4) que es la principal impureza del H_2 en las corrientes a elevada presión, y engloba a todos los componentes ligeros que no son H_2 en las corrientes de gas; azufre (S); e hidrocarburo (HC), agrupando la compleja y cambiante mezcla de hidrocarburos en fase líquida en un único componente. Únicamente se considera dinámica en el reactor, planteándose modelos estáticos para las separaciones gas-líquido y membranas, y retardos de transporte en el resto de operaciones de separación.

El modelo del reactor se postula como un modelo globalizado de mezcla perfecta a pesar de que el modelo de flujo sea más próximo a pistón, sin

distinguir entre fases gaseosa y líquida, y está constituido por balances de materia.

El modelo incorpora tres parámetros ajustables: $k_{r_{H2}}$, k_{r_S} y $k_{r_{lig}}$, que se calculan mediante sendas redes neuronales teniendo como entradas las principales variables que afectan a las cinéticas de reacción (ver sección 4.2.4). k_{r_S} es el coeficiente cinético que modela las reacciones de consumo de S, $k_{r_{H2}}$ el coeficiente cinético que modela el consumo de H_2 en las reacciones laterales (puesto que el consumido en la desulfuración se obtiene a partir de k_{r_S}), y $k_{r_{lig}}$ el coeficiente cinético que modela la generación de componentes ligeros.

En la separación gas-líquido a alta presión se consideran balances de materia y relaciones de equilibrio termodinámico, donde los coeficientes se estiman en la etapa de calibración del modelo.

La corriente gaseosa de salida del flash se recircula en parte a través del compresor de reciclo y otra parte purificada a través de membranas. La corriente líquida de salida del flash se considera que se escinde en dos corrientes, una líquida que lleva todo el HC y S y que constituye la corriente de gasóleo desulfurado y otra gaseosa que lleva todo el H_2 y CH_4 presentes y constituye la corriente gaseosa procedente de las separaciones a baja presión.

El modelo de las membranas considera balances de materia y una ecuación de correlación obtenida experimentalmente que proporciona la pureza de H_2 de la corriente recirculada en función del caudal purgado a fuel gas y del flujo y pureza de la corriente de entrada, siendo el caudal purgado a fuel gas la variable manipulada en la operación de las mismas.

4.2.4 Metodología

Se ajustarán tres redes neuronales una para cada coeficiente cinético. Las entradas consideradas en la regresión no lineal –que son aquellas que se sabe influyen en la cinética de la reacción y además pueden medirse en línea– son las fracciones de hidrocarburo alimentadas a la unidad (diesel ligero o pesado procedente de destilación en las columnas de crudo, aceites cíclicos ligeros, gasóleo de tanques, gasóleo de visbreaker, etc.), la temperatura de entrada al reactor y la concentración de H_2 en el reactor.

La red se entrena mediante una toolbox de Matlab® [10] que implementa el algoritmo de optimización NLP de Levenberg-Marquardt, habiéndose obtenido previamente valores de los coeficientes cinéticos a partir de simulaciones del modelo y las siguientes salidas medidas del proceso: concentración de S en la corriente de gasóleo desulfurado, pureza de H_2 en la

corriente de reciclo desde el flash de alta presión y flujo total de la corriente gaseosa de salida enviada a fuel gas.

A pesar de haber trabajado aún sobre un reducido conjunto de datos experimentales, los resultados de la validación de las redes neuronales son esperanzadores.

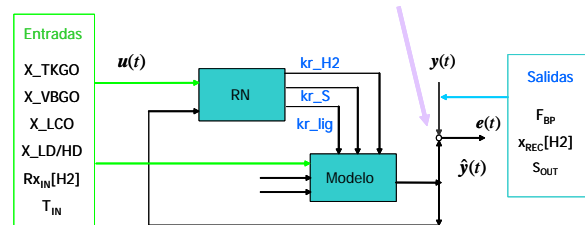


Figura 3: Modelo gris de unidad hidrodesulfuradora.

5 TRABAJO FUTURO

En cuanto al primero de los enfoques propuestos de optimización de la distribución en la red empleando relaciones estáticas, se plantea como trabajo futuro relajar la restricción de mantener iguales condiciones a las actuales a la entrada de las unidades consumidoras y en vez de eso trabajar con relaciones de H_2 /hidrocarburo mínimas a la entrada de las unidades consumidoras así como con las correlaciones para estimar los flujos y purezas de salida de las unidades. Asimismo, el modelo propuesto con pequeños cambios puede utilizarse con el objetivo más ambicioso de optimizar los beneficios de la refinería. En ese caso, el modelo podría seleccionar de forma óptima las fracciones de hidrocarburo a procesar sujetas a unos límites máximo y mínimo de carga a las unidades consumidoras y a una disponibilidad de H_2 máxima. Este escenario tiene particular interés cuando en el futuro haya de trabajarse con especificaciones de azufre muy bajas que conduzcan a una operación con déficit de H_2 .

En lo que respecta al segundo enfoque, se está trabajando sobre el desarrollo y validación del modelo reducido para una unidad consumidora. Para la identificación del mismo se utilizan datos experimentales cubriendo un amplio rango de condiciones de operación y calidades de hidrocarburo. Mientras que los resultados empleando modelos NARX son relativamente buenos, aún no se han obtenido modelos recursivos NOE fiables que permitirían hacer el modelo independiente del proceso.

Se trabaja asimismo en plantear una posible adaptación de las redes neuronales en línea, con el fin

de ajustarse a las variaciones en la calidad de la carga de hidrocarburo tratada en cada caso. En este caso el modelo se calibra empleando un procedimiento de optimización que modifique los pesos de las redes neuronales con el fin de ajustar las salidas del modelo a los datos experimentales, con la tasa de aprendizaje adecuada. El modelo se simula en el entorno EcosimPro[®] y como optimizador se emplea una librería NLP (NAG[®]).

El disponer de modelos dinámicos de predicción del consumo de H₂ permitirá además optimizar la operación a nivel no sólo de la red de distribución, sino también a nivel de las unidades consumidoras. Habrán de considerarse ciertas restricciones técnicas como garantizar una presión parcial de H₂ mínima a la salida del reactor –para evitar la degradación prematura del catalizador por deposición de carbón debida al déficit de H₂–; restricciones de flujo de gas en las líneas (que además están interrelacionadas las de unas unidades con otras, y marcadas principalmente por la operación de los compresores de aporte); limitaciones debido al funcionamiento de los compresores –restricciones de pureza de H₂ máxima para evitar que el compresor entre en surge si es centrífugo–; así como capacidades de operación de dichos compresores. No obstante, se prevé un mayor margen de maniobra para la optimización económica de la operación.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo recibido del grupo Petronor – Repsol YPF así como de la CICYT española a través del proyecto número DPI2006-13593.

Referencias

- [1] Alves, J., (1999) Analysis and design of refinery hydrogen systems, Ph.D. Thesis, UMIST.
- [2] Bohlin, T., (2006) Practical grey box process identification, Springer.
- [3] Chen, L., Bernard, O., Bastin, G., Angelov, P., (2000) “Hybrid modelling of biotechnological processes using neural networks”, *Control Engineering Practice*, 8, pp. 821-827.
- [4] Cheng, Z-M. et al., (2004) “Deep removal of sulphur from diesel”, *Chem. Eng. Sci.*, 59, pp. 5465-5472.
- [5] Froment, G.F. et al., (1994) “Kinetic model and simulation in HDS”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 33, pp. 2975-2988.
- [6] Georgieva, P., Meireles, M.J., Foyo de Azevedo, S., (2003) “Knowledge-based hybrid modelling of a batch crystallization when accounting for nucleation, growth and agglomeration phenomena”, *Chem. Eng. Sci.*, 58, pp. 3699-3713.
- [7] Hallale, N., Liu, F., (2001) “Refinery hydrogen management for clean fuels production”, *Advances in Environmental Research*, 6, pp. 81-98.
- [8] Lauret, P., Boyer, H., Gatina, J.C., (2000) “Hybrid modelling of a sugar boiling process”, *Control Engineering Practice*, 8, pp. 299-310.
- [9] Linnhoff, B., Townsend, D.W., Boland, D. et al., (1982) User guide on process integration for the efficient use of energy, IChemE, Rugby, UK.
- [10] Norgaard, M., (2000) Neural Network Based System Identification Toolbox, Department of Automation, Technical University of Denmark.
- [11] Towler, G.P., Mann, R., Serriere, A.J.-L., Gabaude, C.M.D. (1996) “Refinery hydrogen management: cost analysis of chemically-integrated facilities”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35, 7, pp. 2378-2388.
- [12] Tsamatsoulis, D., Papayannakos, N., (1998) “Investigation of HDS kinetics”, *Chem. Eng. Sci.*, 53, pp. 3449-3458.