

Modelo de optimización para redes de hidrógeno de refinerías. Parte I

Enrique E. Tarifa^{1,2}, Carlos R. Vera^{1,3} & Samuel Franco Domínguez¹

(1) *Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy.*

eetarifa@fi.unju.edu.ar & sfdominguez@yahoo.com.ar

(2) *CONICET, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

eetarifa@arnet.com.ar & cvera@fiqus.unl.edu.ar

(3) *INCAPE, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.*

RESUMEN: Las refinerías de petróleo tienen varios procesos que consumen hidrógeno. Estos procesos se llevan a cabo en sectores distribuidos en toda la refinería. Para alimentar estos sectores, es necesario contar con fuentes capaces de proveer, en cantidad y calidad, el hidrógeno que requiere cada sector consumidor. También resulta imprescindible disponer de una red de distribución que esté adecuadamente diseñada, y cuya operación se ajuste en forma óptima a las condiciones cambiantes de la refinería. Esto implica la minimización del costo de instalación y de operación de la red. El costo de instalación está dominado por la cantidad de tuberías, de compresores y de purificadores; mientras que el costo de operación está dominado por la cantidad de hidrógeno fresco que consume la planta. En este trabajo se presenta un modelo matemático de optimización que se adapta a los distintos niveles de información disponible a medida que se avanza en el diseño de la red de hidrógeno. El modelo es actualmente utilizado por la Refinería Luján de Cuyo de YPF (Mendoza, Argentina). En esta primera parte se presenta el modelo básico, mientras que en la segunda parte se amplía el modelo para permitir la incorporación de unidades de purificación y nuevos compresores.

1 INTRODUCCIÓN

En las refinerías de petróleo y en los complejos petroquímicos existen una gran cantidad de unidades que consumen hidrógeno, tales como los hidrotratadores, los hidrocraqueadores, las unidades de isomerización y las plantas de lubricantes. También existen unidades productoras de hidrógeno, tales como las plantas de hidrógeno y los reformadores de nafta. Para llevar el hidrógeno desde los puntos donde se produce hasta los puntos donde se lo consume, es necesario contar con una red de distribución. Esta red de distribución debe estar adecuadamente diseñada, y debe ser también adecuadamente operada con el fin de suministrar la cantidad y calidad de hidrógeno requerido por cada sector demandante. Una red óptimamente diseñada y operada demandará una cantidad mínima de hidrógeno fresco (make-up); para ello, minimizará la cantidad de hidrógeno que abandona la red (off-gas) y maximizará la cantidad de hidrógeno que es reutilizado.

Todo estudio de optimización de una red de hidrógeno debe comenzar con un análisis del pinch de hidrógeno. A través de un análisis

sistemático de ofertas (fuentes) de hidrógeno y de demandas (sumideros), el análisis pinch de hidrógeno intenta minimizar el caudal de hidrógeno fresco de make-up y la descarga de off-gas; para ello, el estudio maximiza el flujo de hidrógeno recuperado y reusado, aunque la recuperación posiblemente requiera la purificación de hidrógeno de off-gas.

El primer paso en la determinación del pinch de hidrógeno es la realización de un balance de masa en las fuentes y sumideros de hidrógeno de la red de hidrógeno. Las fuentes de hidrógeno incluyen a fuentes de hidrógeno fresco (make-up), corrientes de reciclaje, corrientes de salida de sectores productores de hidrógeno (e.g. reformador catalítico), corrientes de producto y residuo de purificadores de hidrógeno (separadores de membrana, PSA, destilación criogénica), corrientes de off-gas de separadores de baja y alta presión, y corrientes de off-gas de unidades consumidoras (e.g. hidrotratadores e hidrocraqueadores). Las demandas de hidrógeno están integradas por las corrientes de entrada a las unidades consumidoras de hidrógeno y por aquellas corrientes enviadas como alimentación a

purificadores. Para cada corriente se especifican el caudal y la pureza. Se deben usar caudales estándar o caudales molares.

Básicamente, el pinch de hidrógeno es la pureza a la cual la red de hidrógeno no posee ni excedente (surplus) ni déficit de hidrógeno. El pinch representa el cuello de botella de la red o cuánto hidrógeno puede ser recuperado y reusado. El enfoque tradicional al pinch de hidrógeno (Alves y Towler, 2002; Bealins y Hutton, 2002; Foo y Manan, 2006; Zhao et al., 2006) es gráfico, y no considera la presión de cada corriente; por lo cual, el consumo teórico de hidrógeno determinado por el análisis pinch es un consumo teórico mínimo, que puede servir para tomar decisiones en un etapa temprana del diseño. Los cambios necesarios en la red real para alcanzar este mínimo pueden ser tan simples como la apertura y cierre de algunas válvulas, o tan costosos como la instalación de un compresor multietapa para hacer posible la conexión de una fuente de baja presión a un sumidero de alta. Un cambio intermedio puede ser la implementación de conexiones en cascadas entre la purga de una unidad y el make-up de otra (Zagoria y Huycke, 2003).

Para tomar en cuenta la presión en el manejo del hidrógeno, se pueden aplicar técnicas matemáticas de optimización (Hallale y Liu, 2001; Liu y Zhang, 2004; Agrawal y Shenoy, 2006), que minimizan tanto los costos de instalación como los de operación.

Un modelo de optimización tiene como objetivo determinar la mejor solución para un problema dado. El modelo de optimización está compuesto por variables de decisión, una función objetivo y las restricciones. Las variables de decisión son las variables del problema que pueden variarse con el fin de encontrar la mejor solución. En esta búsqueda, las variables de decisión deben respetar las condiciones impuestas por las restricciones del problema. La bondad de las alternativas exploradas es medida por la función objetivo. La mejor alternativa será aquella que minimiza o maximiza la función objetivo.

En este trabajo se presenta un modelo matemático de optimización que se adapta a los distintos niveles de información disponible a medida que se avanza en el diseño de la red de hidrógeno. El modelo es actualmente utilizado por la Refinería Luján de Cuyo de YPF (Mendoza, Argentina). El modelo de optimización fue implementado en una planilla de cálculo Excel. Esta planilla permite el ingreso de datos y realiza la presentación de los resultados. El modelo matemático es resuelto empleando un LINGO, el cual es un software específico de optimización.

2 MODELO PARA MINIMIZAR LA DEMANDA DEL SERVICIO DE HIDRÓGENO

2.1 Formulación del modelo

En este primer modelo, la función objetivo es la demanda de servicio de hidrógeno (cantidad de hidrógeno fresco o de make-up), y las restricciones tienen en cuenta las presiones y las capacidades de los compresores para determinar la factibilidad de los flujos en la red. El modelo determina las conexiones a realizar, junto con los flujos y las purezas de todas las corrientes de la red que hacen mínima la demanda de hidrógeno. En condiciones favorables, la demanda puede ser reducida hasta la cota mínima determinada por el análisis pinch.

La formulación del modelo exige la definición del siguiente conjunto:

- N : conjunto de nodos fuentes y sumideros pertenecientes a la red.

La Figura 1 presenta un esquema simplificado de una unidad consumidora de hidrógeno. En este diagrama se define la correcta localización de los nodos fuentes y sumideros.

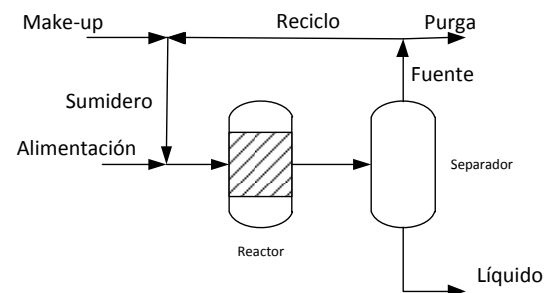


Figura 1: Esquema simplificado de una unidad consumidora de hidrógeno, en el que figura la localización correcta del nodo fuente y el nodo sumidero.

Cada fuente del conjunto N consta de un núcleo de proceso y un divisor de salida (Figura 2), mientras que cada sumidero del conjunto N está conformado por un mezclador a la entrada y un núcleo de proceso (Figura 3). Cada nodo así definido tiene los siguientes atributos:

- *Tipo*:
 - FUE: fuente
 - SUM: sumidero
- *Equipo*: Código identificador del equipo al que pertenece el nodo.
- *Clase*: define el tipo de equipo al que pertenece el nodo, puede ser:
 - UP: unidad de proceso
 - COM: compresor. Se modela como la combinación de un

sumidero y una fuente porque tiene una única corriente de entrada y una única corriente de salida.

- SEP: separador
- GEN: generador puro, sólo tiene nodos fuentes.
- CON: consumidor puro, sólo tiene nodos sumideros.
- P_n : presión absoluta del núcleo (kgf/cm^2).
- F_n : flujo de la corriente conectada al núcleo (Nm^3/h).
- y_n : pureza de H_2 de la corriente conectada al núcleo (fracción molar).
- F_{max} : flujo máximo de entrada (máximo compatible con la capacidad del equipo o unidad en cuestión). Este atributo sólo es válido para los sumideros de equipos Clase COM.

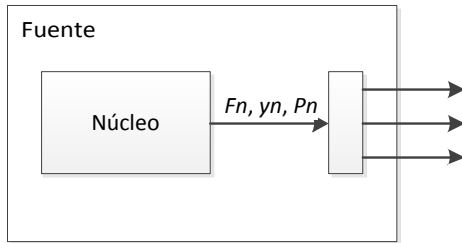


Figura 2: Estructura de un nodo fuente.

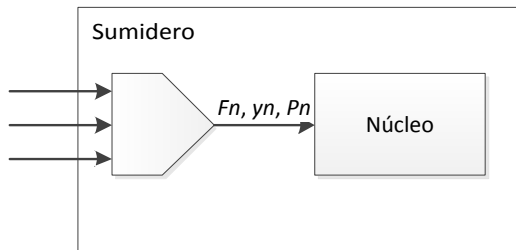


Figura 3: Estructura de un nodo sumidero.

A partir del conjunto N se definen los siguientes subconjuntos:

- CF : conjunto de nodos fuentes.
- CS : conjunto de nodos sumideros.

Los datos requeridos por las fuentes son los siguientes:

- De equipos clase UP: P_n, F_n, y_n
- De equipos clase COM: P_n
- De equipos clase SEP: P_n, F_n, y_n
- De equipos clase GEN: P_n, y_n

Los datos requeridos por los sumideros son los siguientes:

- De equipos clase UP: P_n, F_n, y_n
- De equipos clase COM: P_n, F_{max}

- De equipos clase SEP: P_n, F_n, y_n
- De equipos clase CON: P_n

Por conveniencia, se define el conjunto derivado FxS cuyos elementos son pares ordenados (i, j) del tipo fuente-sumidero:

$$(i, j) \in FxS \Leftrightarrow i \in CF, j \in CS \quad (1)$$

Los elementos de este conjunto, tienen los siguientes atributos:

- F : flujo de la corriente que va de la fuente i al sumidero j (Nm^3/h).
- y : pureza de H_2 de la corriente que va de la fuente i al sumidero j (fracción molar).

También se define el conjunto derivado $FxSP$ cuyos elementos son elementos de FxS que representan a conexiones entre nodos que no pertenecen a un mismo equipo y que son posibles por la diferencia de presión existente entre el origen y el destino de la conexión:

$$(i, j) \in FxSP \Leftrightarrow (i, j) \in FxS \mid (Equipo_i \neq Equipo_j) \wedge (P_{n_i} \geq P_{n_j}) \quad (2)$$

Es decir, se definen pares ordenados de fuente-sumidero, donde la primera condición evita la conexión de la fuente de un equipo con el sumidero del mismo equipo, y la última condición selecciona las conexiones que son factibles por las presiones de los nodos conectados.

La función objetivo es la demanda total Fg de servicio de hidrógeno. El problema de optimización se plantea para minimizar esta función objetivo variando los flujos de hidrógeno existentes entre los nodos de la red. El planteo matemático correspondiente es el siguiente:

$$\begin{aligned} & \text{Min}_{F_{i,j}, y_{i,j}, F_{n_k}, F_{n_l}, y_{n_l}, F_g} F_g \\ & (i, j) \in FxSP, k \in N \mid Clase_k = \text{GEN}, \\ & l \in N \mid (Clase_l = \text{CON}) \vee (Clase_l = \text{COM}) \end{aligned} \quad (3)$$

La función objetivo se define como sigue:

$$F_g = \sum_{i \in CF \mid Clase_i = \text{GEN}} F_{n_i} y_{n_i} \quad (4)$$

Por otra parte, se deben plantear los balances de masa en el divisor de cada fuente k y en el mezclador de cada sumidero l :

$$\sum_{(i,j) \in FxSP \mid i=k} F_{i,j} = F_{n_k} \quad k \in CF \quad (5)$$

$$\sum_{(i,j) \in FxSP | j=l} F_{i,j} = Fn_l \quad l \in CS \quad (6)$$

Las purezas de las corrientes de intercambio deben cumplir con la siguiente restricción:

- Definición de fracción molar:

$$0 \leq y_{i,j} \leq 1 \quad (i,j) \in FxSP \quad (7)$$

- Balance de hidrógeno en los divisores de las fuentes:

$$yn_i = y_{i,j} \quad (i,j) \in FxSP \quad (8)$$

- Balance de hidrógeno en los mezcladores de los sumideros:

$$\sum_{(i,j) \in FxSP | j=l} F_{i,j} y_{i,j} = Fn_l yn_l \quad l \in CS \quad (9)$$

Para los compresores, se plantean las siguientes restricciones adicionales:

$$Fn_i = Fn_j$$

$$(i,j) \in FxS \mid (Equipo_i = Equipo_j) \quad (10)$$

$$\wedge (Clase_i = COM)$$

$$yn_i = yn_j$$

$$(i,j) \in FxS \mid (Equipo_i = Equipo_j) \quad (11)$$

$$\wedge (Clase_i = COM)$$

$$Fn_j \leq Femax_j \quad j \in CS \mid Clase_j = COM \quad (12)$$

También se deben anular todas aquellas conexiones que son imposibles:

$$F_{i,j} \leftarrow 0 \quad (i,j) \in FxS \mid (i,j) \notin FxSP \quad (13)$$

$$y_{i,j} \leftarrow 0 \quad (i,j) \in FxS \mid (i,j) \notin FxSP \quad (14)$$

Por el mismo motivo, para todos los nodos que no son entradas de compresores, se debe anular $Femax$:

$$Femax_k \leftarrow 0$$

$$k \in N \mid (k \notin CS) \vee (Clase_k \neq COM) \quad (15)$$

Por último, se fijan las purezas de todas las corrientes que nacen en fuentes que tienen purezas fijas:

$$y_{i,j} \leftarrow yn_i \quad (i,j) \in FxSP \mid (Clase_i \neq COM) \quad (16)$$

2.2 Implementación

El modelo descrito fue implementado en el programa matemático LINGO. Para facilitar el ingreso de datos y la recuperación de los

resultados, se desarrolló una planilla Excel que emplea varias hojas y un código de colores. Las hojas con solapas de color celeste se reservan para el ingreso de datos; mientras que las hojas con solapas de color salmón se emplean para que LINGO vuelque en ellas los resultados de la optimización.

1.1 Ejemplo 1

La Figura 4 presenta la configuración inicial de una planta a analizar en este ejemplo. El ejemplo fue tomado del trabajo de Hallale y Liu (2001). El análisis pinch para esta planta reporta que la producción mínima de H2 Plant es 182.8 MMscfd; esto significa un ahorro potencial de 8.6 % con respecto a los 200 MMscfd iniciales. Sin embargo, el método empleado considera solamente los flujos y las purezas, dejando de lado las presiones. Por lo tanto, el resultado logrado puede considerarse como una cota inferior para la producción de hidrógeno requerida por la planta. La Figura 5 presenta la implementación de la solución reportada por el método pinch. Esta solución no es factible ya que plantea la conexión entre la salida de A y la entrada de B, la cual no es posible por la diferencia de presiones existente.

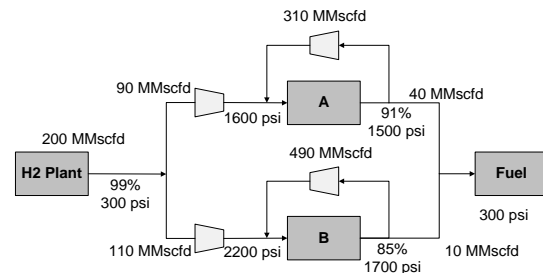


Figura 4: Configuración inicial de la planta del Ejemplo 1.

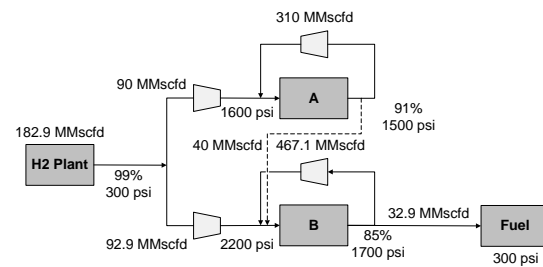


Figura 5: Esquema que implementa la solución no factible obtenida por el método pinch para el Ejemplo 1.

La Figura 6 muestra la superestructura a implementar en el modelo de optimización presentado. En ella, la planta fue descompuesta en nodos fuentes y sumideros, y se contemplan todas las conexiones factibles entre ellos. El flujo máximo $Femax$ de cada compresor se supuso un

5% superior al flujo de operación. La primera solución obtenida tiene un consumo de 195.9 MMscfd; sin embargo involucra flujos que no tienen sentido práctico (por ejemplo, conexión entre la salida del compresor de make-up con la entrada del compresor de reciclo). Dichos flujos serían automáticamente eliminados si la función objetivo considerara el costo de compresores y de tuberías. Una alternativa menos compleja para eliminar esos flujos es minimizar la cantidad de conexiones de la red. Esa alternativa será presentada en la sección siguiente.

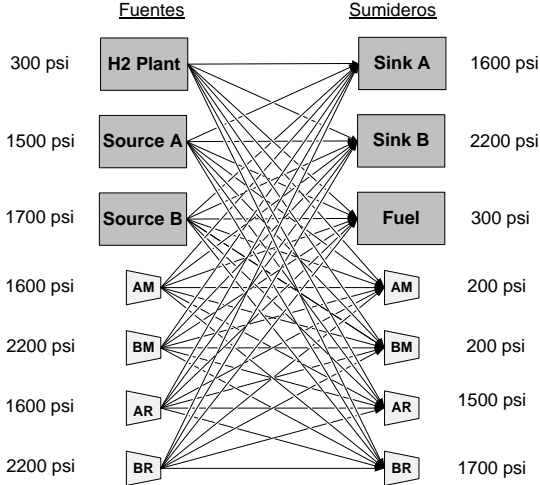


Figura 6: Superestructura para el Ejemplo 1. M: compresor de make-up; R: compresor de reciclo.

3 MODELO PARA MINIMIZAR EL NÚMERO DE CONEXIONES

Como se explicó en la sección anterior, la minimización de la demanda de hidrógeno puede conducir al planteo de flujos que no tienen sentido práctico. Una alternativa para eliminar esos flujos espurios es resolver nuevamente el modelo de optimización planteado en la sección anterior, pero esta vez adoptando la siguiente función objetivo y restricción adicional:

$$\text{Min}_{F_{i,j}, y_{i,j}, F_{nk}, F_{nl}, y_{nl}, F_g} \sum_{(i,j) \in F_{XSP}} \text{sign}(F_{i,j}) \quad (17)$$

$$(i, j) \in F_{XSP}, k \in N \mid \text{Clase}_k = \text{GEN},$$

$$l \in N \mid ((\text{Clase}_l = \text{CON}) \vee (\text{Clase}_l = \text{COM}))$$

$$F_g \leq F_{g_{\min}} \quad (18)$$

donde $F_{g_{\min}}$ es la demanda mínima de hidrógeno determinada por el modelo de la sección anterior, y $\text{sign}(x)$ es la función signo de x . Como todos los flujos $F_{i,j}$ son no negativos, la función objetivo representa la cantidad de corrientes que emplea la solución. Lo que se desea es minimizar esta cantidad manteniendo el consumo mínimo

conseguido en la primera solución; para ello se agrega la restricción adicional. La nueva función objetivo trata de minimizar la cantidad de tuberías requeridas por la red; y si bien no tiene en cuenta la longitud de las mismas, es una buena aproximación para utilizar en una etapa temprana del diseño de la red.

1.2 Ejemplo 2

Continuando con el ejemplo dado en la sección anterior, se hace $F_{g_{\min}} = 195.8 \times 0.99$ MMscfd de H_2 . La Figura 7 muestra la estructura óptima conseguida con el modelo que considera las presiones de los nodos, y que emplea una cantidad mínima de corrientes. Esta vez, no existen flujos espurios.

Analizando la solución, se concluye que el compresor de make-up de B es el limitante para la recuperación de hidrógeno. Esto se puede verificar realizando un estudio de sensibilidad, en el cual se determina el mínimo consumo de hidrógeno para un rango de capacidades de los compresores. Ese estudio demuestra que el consumo de hidrógeno reportado por el método del pinch (182.8 MMscdf) puede ser alcanzado con un incremento del 21% en el flujo del compresor de make-up de B.

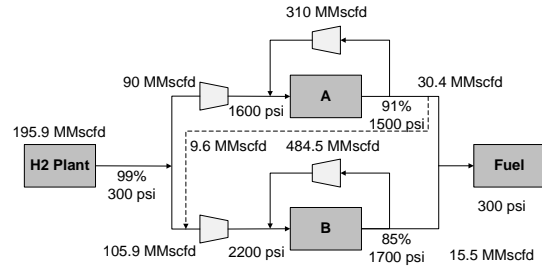


Figura 7: Planta del Ejemplo 2 optimizada para minimizar el consumo del servicio de hidrogeno considerando las presiones de los nodos y minimizando la cantidad de conexiones.

4 CONCLUSIONES

En esta primera parte del trabajo se presentó un modelo de optimización destinado a redes de hidrógeno de refinерías. El modelo tiene varias variantes que se ajustan a los niveles de información disponible a lo largo del diseño o de la evaluación de la red. La variante básica minimiza el consumo de hidrógeno considerando las presiones de los nodos de la red. La segunda variante, minimiza además el número de conexiones de la red.

El modelo fue implementado en un software específico de optimización: LINGO. Para el ingreso de datos y la presentación de los

resultados, se implementó una planilla Excel que se comunica con LINGO.

En la segunda parte, el modelo se ampliará para considerar la longitud de las tuberías, la instalación de unidades purificadoras y la instalación de nuevos compresores.

5 REFERENCIAS

- Agrawal, V., U. V. Shenoy, Unified Conceptual Approach to Targeting and Design of Water and Hydrogen Networks, *AIChE J.*, 53, p. 1071, 2006.
- Alves, J. J., G. P. Towler, Analysis of Refinery Distribution Systems, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 41, p. 5759, 2002.
- Bealins, C., D. Hutton, Hydrogen Pinch Analysis, *Chem. Eng.*, p. 56, May. 2002.
- Foo, D., Z. Manan, Setting the Minimum Utility Gas Flowrate Targets Using Cascade Analysis Technique, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45, p. 5986, 2006.
- Hallale, N., F. Liu, Refinery Hydrogen Management for Clean Fuels Production, *Adv. Environ. Re.*, 6, p. 81, 2001.
- Liu, F., N. Zhang, Strategy for Purifier Selection and Integration in Hydrogen Networks, *Trans. IChemE*, 82, No. A11, p. 1, 2004.
- Zagoria, A., R. Huycke, Refinery Hydrogen Management-The Big Picture, *Hydrocarbon Processing*, 41, Feb., 2003.
- Zhao, Z., G. Liu, X. Feng, New Graphical Method for the Integration of Hydrogen Distribution Systems, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45, p. 6512, 2006.