Diseño conceptual óptimo de una planta de separación de dióxido de carbono con evaluación económica futura y riesgo ambiental

Juan Pablo Gutierrez*, Fabiana Torres, E. Liliana Ale Ruiz, J. Alberto Bandoni y Eleonora Erdmann

*Instituto de Investigaciones para la Industria Química (INIQUI- CONICET- UNSa)

Facultad de Ingeniería - Consejo de Investigación, Universidad Nacional de Salta.

Av. Bolivia 5150 (4400) Salta- Argentina

E-mail gutierrezjp@unsa.edu.ar

Resumen. El objetivo de este trabajo es optimizar el diseño conceptual de un proceso de separación de CO2 con metildietanolamina (MDEA) para la recuperación terciaria de petróleo. Se aplica un enfoque sistemático para predecir la rentabilidad económica del sistema a la vez que se reducen los impactos ambientales. En primer lugar, se simula el proceso en UniSim y se verificaron los grados de libertad gobernantes (GL). Luego, se procedió con la formulación del problema económico, donde el empleo de modelos econométricos permite predecir el potencial económico dinámico (DEP) en un horizonte de tiempo. En la segunda parte, se aplica el algoritmo de reducción de residuos (Waste Reduction) para cuantificar los riesgos ambientales del proceso estudiado. Este método se basa en la minimización del indicador ambiental potencial (PEI) mediante el uso de la generalización del algoritmo. Los resultados muestran que la combinación de GL encontrada, para planta de separación simulada, es factible en términos de ingresos económicos. Sin embargo, el valor de PEI indica que cuanto mayor es la rentabilidad económica, mayor es el riesgo ambiental. El valor óptimo de la DEP corresponde a 0,0274 kmol /h y 60 °C, con una capacidad de la planta de flujo molar de gas ácido producido. Además, el mayor riesgo ambiental se observa para altos valores de cada uno de los GL.

Palabras clave: Predicción económica, Impacto ambiental, Separación de dióxido de carbono.

1. Introducción

El principal problema relacionado con la aplicación de recuperación mejorada de petróleo (EOR) en escala real es la gran cantidad de CO2 que se debe disponer en forma continua. En este sentido, se encuentra que fuentes comunes para las grandes cantidades de CO2 corresponden al gas ácido que proviene de plantas de procesamiento del gas natural (GN). Al respecto, se han comparado diferentes tecnologías empleadas en la industria para la separación de CO2. Sobre la base de estudios de simulación y económicos, concluyen que la absorción química con metildietanolamina (MDEA) es la opción menos costosa y más viable en plantas de gas. Adicionalmente, se han atribuido a los procesos de amina altas eficiencias, grandes cantidades del gas ácido como subproducto y la posibilidad de regenerar el solvente haciendo de este proceso uno de los más usuales de la industria. Otro factor al evaluar las posibilidades de EOR con CO2 es la gran dependencia de las compañías de petróleo y gas a las condiciones económicas y el marco institucional del país. Por ejemplo, se afirma que las estructuras cambiantes del mercado influyen en la evolución a largo plazo de las cotizaciones del gas y, en consecuencia, en el desarrollo de los campos productivos. Además, la interdependencia entre la variación con el tiempo de las condiciones

* A quien debe enviarse toda la correspondencia

técnicas, operativas y económicas ha sido objetivo de una evaluación económica por algunos autores. Clásicamente, la interacción entre los aspectos operativos y los ingresos económicos durante la definición de un proceso se estima primero de acuerdo con el diseño conceptual convencional. El diseño conceptual de procesos (CD) consiste en la selección de las unidades de operación adecuadas, su secuencia y la estructura de reciclaje necesaria para obtener un producto específico. Sin embargo, se explica que este método convencional no es representativo al considerar la incertidumbre del mercado, las fluctuaciones de la oferta y la demanda y la inestabilidad de los precios de los productos básicos y los servicios públicos. Es por ello que Manca y Grana introducen los beneficios provenientes del diseño conceptual dinámico (DCD).

En este trabajo, se aplica el concepto de DCD para obtener CO2 con fines de EOR. Se establece el diseño conceptual del proceso en un contexto de inestabilidad del mercado e incertidumbres futuras.

Se formula un problema de optimización para minimizar el potencial económico dinámico (DEP) del diseño. Se analizan precios históricos del GN, materias primas y productos, utilizando herramientas estadísticas. Se presentan los precios del como referencia para estimar la evolución del resto de los componentes involucrados, mediante el uso de correlaciones numéricas. Los modelos de regresión lineal (como ARX) se aplican para interpretar el comportamiento de los precios anteriores. Estos modelos de econometría se utilizan para predecir cotizaciones y generar escenarios de mercado futuros. Por último, se realiza una evaluación para encontrar el par de GL que reduce el índice de potencial ambiental. El método se adapta del algoritmo de reducción de desechos Waste Reduction (WAR), aplicado a los procesos químicos.

1.1. Descripción de proceso

El propósito de un proceso de endulzamiento con gas natural es eliminar los gases ácidos de una corriente de gas de pozo. Debido a la alta selectividad del solvente, el subproducto de este proceso es una corriente de material de CO2 de alta pureza que, después del acondicionamiento, puede usarse como fluido EOR.

Un proceso regular de endulzamiento se divide en dos partes. En la primera, el gas ácido del gas natural reacciona químicamente con la MDEA, que es alimenta por cabeza de torre en solución acuosa y que desciende en contracorriente respecto del gas alimentado. Se indica que la reacción química se ve favorecida a altas presiones y bajas temperaturas. Después del contacto, la solución de amina que abandona la torre por el fondo de la torre se flashea, calienta y envía a la etapa de regeneración. En esta segunda etapa, el gas ácido en solución es eliminado en una torre de destilación mediante a una contribución externa de calor. Se han realizado diferentes estudios para optimizar los requisitos de energía de la columna de regeneración. El líquido de la columna del regenerador se enfría y se bombea nuevamente a la etapa de absorción.

2. Métodos

Un proceso de absorción de CO2 se simula mediante UniSim. Se asumen 2500 Mm3/d de gas natural como capacidad de la planta. Las condiciones de la planta son las reportadas en el trabajo de Gutiérrez et al.: gas natural ácido a 35 °C y 6178 kPa con 93 y 4% en moles de CH4 y CO2, respectivamente. Además, se reproducen las condiciones de amina pobre: 21000 kmol/h de una solución acuosa de MDEA (38% en peso), a 42 °C y 9610 kPa. La columna de absorción de 24 bandejas opera a la presión del gas de entrada. La MDEA rica de la parte inferior de la absorbedora se flashea a 441 kPa, se calienta hasta 90 °C y luego se envía a regeneración. La columna de regeneración consta de 24 bandejas, opera a 90 °C y 443 kPa. La MDEA reciclada se bombea y se enfría, primero intercambiando calor con la rica amina, y luego con un enfriador para que reproduzca la temperatura de absorción.

Las principales variables que afectan la absorción de CO2 son el caudal de solvente y la temperatura del absorbente, esto último a través del enfriamiento de la corriente de amina magra. El enfoque dinámico para la evaluación económica de la planta de acondicionamiento de CO2 emplea modelos de econometría (EM) que son funcionales para la evaluación de futuras trayectorias de precios y costos. Una vez que se identifican los EM, se optimiza el proceso en MatLab, de acuerdo al diseño conceptual de proceso. En el problema de optimización, determinamos el conjunto de GL que maximiza el valor acumulado del potencial económico, DEP4, y aquel por medio del cual se disminuye el índice de impacto ambiental.

2.1. Modelos econométricos y formulación del problema de optimización

Para correlacionar los valores históricos de las citas utilizamos una metodología que emplea los coeficientes de Pearson (Ecuación (1)). Los coeficientes de Pearson miden la intensidad y la dirección de la relación lineal entre dos variables aleatorias. En este caso, ambas variables representan las cotizaciones mensuales de la RC, pero difieren en un período.

$$r_k = \frac{\sum_{t=k+1} (Y_t - \overline{Y})(Y_{t-k} - \overline{Y})}{\sum_{t=1}^{n} (Y_t - \overline{Y})^2} \tag{1}$$

Si rk varía de 0.7 a 0.9, la fuerza de la correlación es alta y suficiente para determinar el tamaño de la correlación. Esta característica se puede visualizar al trazar el coeficiente en función del intervalo de tiempo entre los datos. Una vez que se identifican los EM, es viable ejecutar la optimización de búsqueda Grid-search del DCD. En el problema de optimización, determinamos el par de GL que maximiza el valor acumulado del potencial económico de cuarto orden, DEP4 (Ecuaciones (2-4)).

$$(Cumulated)_i = \sum_{j=i}^{N} DEP4_{j,i}; i = 1,...l \tag{2}$$

$$DEP4_i \left(\frac{USD}{y} \right) = \sum_{j=1}^{N} \mathrm{Re}venues_{j,i} \cdot nHpY - \frac{CAPEX}{N/12} \tag{3}$$

$$\mathrm{Re}venues_{j,i} \left(\frac{USD}{y} \right) = \sum_{p=1}^{NP} C_{p,j,i} \cdot F_p - \sum_{r=1}^{NR} C_{r,j,i} \cdot F_r - OPEX_{j,i} \tag{4}$$

Donde: DEP4 es el potencial económico de cuarto nivel calculado para el i-ésimo escenario económico. j, i son los subíndices de un mes y escenario específicos, respectivamente; nHpY es el número de horas de trabajo por año. N representa el número de meses para realizar la evaluación económica. NP, NR y P y F_r representan el número de productos y reactivos, sus tasas de flujo y C sus costos. El término CAPEX se estima de acuerdo con las ecuaciones empíricas reportadas por Douglas. Se consideran cinco unidades principales para el cálculo: columnas de absorción y destilación, intercambiador de calor MDEA y dos enfriadores de aire.

El término OPEX considera una trayectoria de precio para cada materia prima, subproducto y utilidad para el i-ésimo escenario. Los principales contribuyentes del OPEX son: dos enfriadores de aire, condensador, combustible para calderas y la potencia total requerida para los compresores de gas ácido. Los balances de materia y energía necesarios para calcular el OPEX se toman de la simulación de estado estable del proceso.

El objetivo de la optimización es determinar la combinación de GL que maximiza el valor de Cumulatedi, con respecto a un conjunto de escenarios generados, donde la evaluación se vuelve probabilística. Para obtener un flujo de material de CO2 de alta pureza, Gutiérrez et al. utiliza un valor límite de 2% en moles en el gas proveniente de la parte superior del absorbente, por lo que consideramos la fracción molar de CO2 como una restricción para el problema planteado.

Empleamos el algoritmo de reducción de residuos (WAR) para describir el flujo y el impacto ambiental potencial de generación a través del proceso en estudio. La metodología general del algoritmo WAR define índices de impacto ambiental potencial (PEI) para caracterizar la generación de impacto potencial en un proceso, dividido en ocho categorías. Las primeras cuatro categorías evalúan globalmente la compatibilidad con el medio ambiente de un proceso: el potencial de toxicidad humana por ingestión, el potencial de toxicidad humana por exposición tanto dérmica como por inhalación, el potencial de toxicidad terrestre y el potencial de toxicidad acuática. Por otro lado, los otros cuatro están relacionados con los aspectos toxicológicos de los químicos involucrados dentro del proceso: potencial de calentamiento global, de agotamiento del ozono, de oxidación fotoquímic y de acidificación.

Los impactos ambientales potenciales se calculan a partir de las tasas de flujo másico de la corriente, la composición de la corriente y un puntaje de impacto ambiental potencial relativo para cada producto químico presente en el proceso de separación. De acuerdo con la notación, la salida PEI al proceso químico se puede reescribir como Ecuación (5):

$$i_{out}^{(op)} = \sum_{w=1}^{N} M_W^{(out)} \sum_i x_{i,w} \psi_i \quad (5)$$

$$\psi_k = \sum_l \alpha_l \psi_{i,l}^s \quad (6)$$

Donde Mwout es el caudal másico de salida de la corriente w, x(i, w) la fracción másica de la sustancia química i en la corriente w, y ψ_i el PEI general para la química k. ψi se puede calcular a partir de la ecuación (6). En la Ecuación (6), ψ(i, l)^s es el PEI específico normalizado de la sustancia química k para la categoría de impacto l, y αl es el factor de peso relativo. Se asigna un valor unitario a α para ilustrar el caso en el que las ocho categorías tienen la misma importancia en la evaluación. Las puntuaciones de impacto normalizadas se obtienen del complemento del algoritmo WAR incluido en la última versión de COCO Simulation Environment.

3. Resultados y discusión

El EM de GN como compuesto de referencia (RC) se convierte en la expresada a través de la Ecuación (5).

$$P_{NG,k+1} = (A + B \cdot P_{NG,k} + C \cdot P_{NG,k-1}) \cdot (1 + rand \cdot \sigma_{NG} + \overline{P}_{NG}) \quad (5)$$

Donde: P(NG, k+1) es la cotización mensual de NG. σ y P son la desviación estándar de los precios y el promedio de errores relativos, respectivamente. rand es una función estocástica normalmente distribuida, y A, B y C son parámetros adaptativos calculados con regresión lineal, que minimizan el error cuadrado y los predichos por el modelo. De acuerdo con los índices de correlación, elaboramos los EM para el proceso de acondicionamiento de CO2. La Tabla 1 presenta los modelos Autorregressive Distributed Lag (ADL) para estimar la evolución de cada cita, sin el factor estocástico. La Tabla 2 muestra los coeficientes de adaptación para los modelos de NG, CO2, MDEA y energía eléctrica (EE).

Tabla 1. ADL EM para el GN, CO2, y MDEA ($)

Componente	Modelo
CO2	$P_{CO_2,k+1} = A + B \cdot P_{NG,k+1} + C \cdot P_{CO_2,k} + D \cdot P_{CO_2,k-1}$
MDEA	$P_{MDEA,k+1} = A + B \cdot P_{NG,k+1} + C \cdot P_{MDEA,k} + D \cdot P_{MDEA,k-1}$

Table 2. Parámetros ADL del GN, CO2 y MDEA.

Componente	A	B	C	D	σ	$\overline{P}$
NG	0.0362	-0.0285	1.2205	-	0.1918	0.0705
CO2	0.0033	0.0078	1.4167	-0.0171	0.0126	0.0074
MDEA	0.1124	0.9731	0	-0.4870	0.0606	0.0002

Se utilizan los EM de CO2, MDEA y EE para generar un conjunto de escenarios económicos aleatorios. Particularmente para el caso de la EE, presentamos un breve modelo predictivo donde A = 2.98, B = 1.316 y C = 0.81. La naturaleza predictiva de este modelo viene dada por su dependencia con los precios pronosticados de GN. Otros modelos informados asocian los precios de EE con las cotizaciones del petróleo crudo, pero también esos pronósticos son de naturaleza de variabilidad aleatoria. Aunque los precios de la utilidad varían periódicamente con el dominio de tiempo, asumimos este comportamiento simplificado para el alcance de este artículo.

La Figura 1 ilustra la tendencia de la DEP4 acumulada en función del par de GL: composición del flujo de agua y la temperatura de la amina reciclada. La superficie presentada representa la maximización del DEP4, donde se estima un gasto de capital total de 1.44E + 07 USD a partir del cálculo. Como se indicó anteriormente, el DEP4 no está representado por un solo valor sino por una distribución de valores, uno para cada escenario. Para tener una representación simple de la función del objetivo económico, presentamos el valor promedio de la DEP4 acumulada. La configuración que arroja el valor máximo de la

DEP4 acumulada corresponde a una temperatura igual a 60 ° C para que la MDEA se recicle y el valor del caudal de agua de la amina es igual a 0.0274 kmol/h.

Sobre la base de la experiencia, las altas temperaturas de la MDEA implican un aumento de la conversión de la reacción de absorción y, en consecuencia, el CO2 producido. Un incremento del caudal de agua demuestra que la concentración de MDEA del 38% en peso puede modificarse para obtener un mejor rendimiento en términos del aspecto económico de este proceso. Aparece un indicador global con el mismo valor de temperatura de 60 °C y 0.1074 kmol/h, donde el DEP4 acumulado es igual a 1.06E + 08 USD.

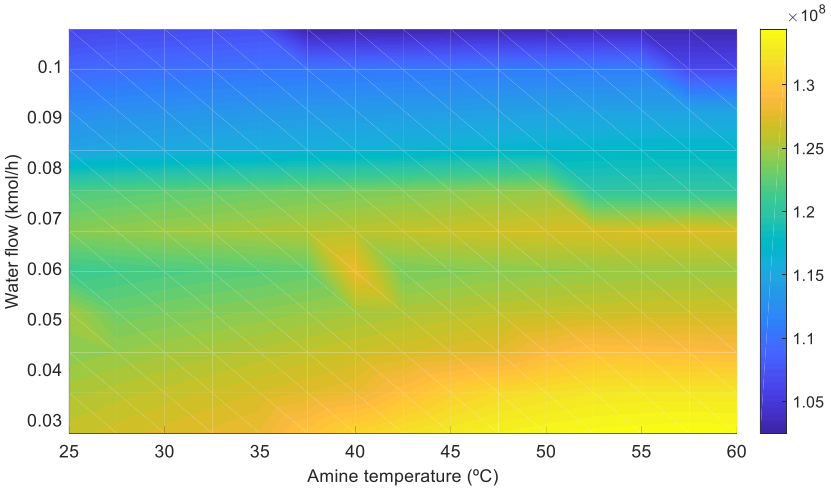

Figura 1. DEP ($) vs flujo de agua (kmol/h) y temperatura de amina (°C).

La Figura 2 muestra el comportamiento de la PEI. En este caso, el mayor riesgo ambiental se observa en los límites superiores del par de GL. Un enfoque probabilístico para los escenarios futuros se refiere a encontrar la combinación de GL decisiva que maximice el indicador de sustentabilidad económica. Del mismo modo, también se evalúa el riesgo ambiental potencial. Los resultados muestran que este diseño de separación de CO2 es prometedor, aunque el PEI indica que cuanto mayor es la rentabilidad, mayor es el riesgo ambiental. El riesgo ambiental aparece a altos valores de flujo de reposición de agua y recicla la temperatura de la amina. Esta situación puede explicarse por los aspectos toxicológicos de los productos químicos involucrados en el proceso: aumento de la potencia de la etapa de enfriamiento y modificación de los parámetros de combustión del hervidor.

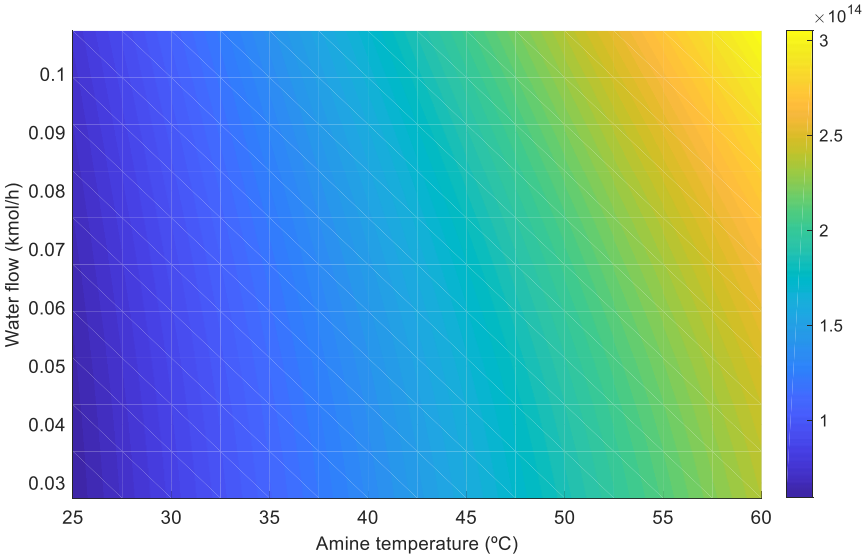

Figura 2. PEI vs flujo de agua (kmol/h) y temperatura de amina (°C).

Conclusiones y desarrollos futuros.

Este documento evalúa el proceso para obtener y condicionar el CO2 para ser utilizado como un fluido EOR. Enfocamos el estudio en la evaluación de los aspectos económicos en un contexto de variabilidad del mercado e incertidumbres de precios. Se adopta la metodología diseño conceptual dinámico para lograr el objetivo del artículo. Con la técnica, se trata de un enfoque probabilístico de los escenarios futuros para encontrar la combinación de GL decisivo que maximice el indicador de sostenibilidad económica. De acuerdo con los resultados, la implementación de la planta en esta etapa del estudio es factible y conduce a valores prometedores de ingresos y rentabilidad económica.

Se demuestra que el potencial económico de cuatro órdenes es alto, con una magnitud de ocho órdenes USD / año. También los índices estadísticos demuestran que la planta es rentable con los 12 años de vida útil del proceso. Finalmente, se identifican las condiciones de la planta que maximiza el EP: un flujo de reciclaje de amina de 0.0274 kmol/h a 60 °C demostró ser una combinación óptima de las variables de decisión. Con respecto a los riesgos "verdes", se demuestra que cuanto más altos son los límites superiores del par de GL, más alto es el riesgo ambiental.

El trabajo futuro puede ampliar los límites de esta metodología e incluir un mayor número de GL, como los relacionados con la columna de regeneración de la columna, que rara vez se analizan en la bibliografía. El último aspecto importante que se debe tener en cuenta es que el CO2 se consideró históricamente como un "subproducto", y en el pasado era una práctica común ventearlo. Sin embargo, la recuperación de este gas y la instalación de una planta adecuada que funcione en las condiciones adecuadas podrían ser el punto de partida para implementar la tecnología de EOR en la región, teniendo en cuenta los escenarios de volatilidad del mercado.

Referencias

Douglas, J.M., (1988) Conceptual design of chemical processes. Vol. 1110: McGraw-Hill New York.

Sepiacci, P., V. Depetri, and D. Manca (2017) A systematic approach to the optimal design of chemical plants with waste reduction and market uncertainty. Computers & Chemical Eng. 102 96-109.

Manca, D. and R. Grana (2010) Dynamic conceptual design of industrial processes. Computers & Chemical Engineering. 34656-667.

Cabezas, H., J.C. Bare, and S.K. Mallick (1999) Pollution prevention with chemical process simulators: the generalized waste reduction (WAR) algorithm—full version. Computers & Chemical Engineering. 23 623-634.

Gutierrez, J.P., E.L.A. Ruiz, and E. Erdmann (2017) Energy requirements, GHG emissions and investment costs in natural gas sweetening processes. J. of Natural Gas Science and Eng. 38 187-194.

Young, D., R. Scharp, and H. Cabezas (2000) The waste reduction (WAR) algorithm: environmental impacts, energy consumption, and engineering economics. Waste Management. 20 605-615.

Gutierrez, J.P., L.A. Benitez, E.L. Ale Ruiz, and E. Erdmann (2016) A sensitivity analysis and a comparison of two simulators performance for the process of natural gas sweetening. Journal of Natural Gas Science and Engineering. 31 800-807.

Manca, D. (2012) A methodology to forecast the price of commodities, in Computer Aided Chemical Engineering, I.A. Karimi and R. Srinivasan, Editors. Elsevier. 1306-1310.

Manca, D. (2013) Modeling the commodity fluctuations of OPEX terms. Computers & Chemical Engineering. 57 3-9.

Sepiacci, P. and D. Manca (2015) Economic assessment of chemical plants supported by environmental and social sustainability. Chem. Eng. Transactions. 43 2209-2214.

Young, D. and H. Cabezas (1999) Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm. Computers & Chemical Engineering. 23,1477-1491.

Manca, D. (2016) Price model of electrical energy for PSE applications. Computers & Chemical Engineering. 84, 208-216.