



Analytics aplicado a unidades de reformado de naftas: desarrollo de un modelo predictivo para la desactivación de catalizadores

Por **Alejandro Iriarte, Gustavo Garbati, Tomás Lew, J. Lucas Bali y José Carlucci** (YPF).

Este trabajo fue seleccionado en las 3º Jornadas de Revolución Digital para Petróleo y Gas.

El reformado catalítico enfrenta desafíos por la desactivación progresiva de catalizadores. Este desarrollo predictivo permite estimar el fin de ciclo y optimizar la planificación operativa con datos en tiempo real.

Las refinерías de petróleo dependen de unidades de proceso que emplean catalizadores para optimizar sus operaciones. Sin embargo, estos catalizadores se desactivan con el paso del tiempo, principalmente por la formación de coque derivado de reacciones de craqueo no deseadas. En el caso de las unidades de reformado semi-regenerativo de nafta (SRCRP¹), este fenómeno resulta en un aumento de la temperatura de entrada a los reactores para alcanzar la especificación deseada. Una vez que se alcanza un límite de temperatura, se hace necesario implementar un proceso de regeneración para recuperar la actividad del catalizador o reemplazarlo.

La desactivación del catalizador en unidades SRCRP impacta negativamente en la eficiencia y los costos operativos. La comprensión de los mecanismos de desactivación y la implementación de estrategias efectivas de mitigación son esenciales para mantener el óptimo funcionamiento y garantizar la producción eficiente de productos de alto octanaje.

La estimación precisa del momento en que se alcanza el fin de ciclo del catalizador es crucial para optimizar su vida útil y mejorar la planificación de paros en unidades de SRCRP. Para lograr este objetivo, se desarrolló una herramienta que realiza diariamente de forma automática el cálculo y seguimiento de la variable de decisión (denominada Delta WAIT²), y predice la carga acumulada por kilo de catalizador a la que se alcanzará el final del ciclo mediante un modelo analítico basado en datos.

El algoritmo de la herramienta se alimenta de datos tomados directamente del historizador de la planta y sus resultados se encuentran disponibles en línea a través de un tablero para los usuarios. Su utilización constituye una mejora respecto a la metodología empleada por los ingenieros de procesos, ya que permite contar con una mejor estimación en etapas tempranas del ciclo.

La predicción se realiza empleando únicamente datos del ciclo actual y se reajusta automáticamente en función del monitoreo del error. Adicionalmente, permite a los usuarios ajustar la predicción a través del input de variables operativas críticas que impactan en la desactivación del catalizador, combinando el modelo de regresión con las especificaciones propias del fabricante. Esto permite la construcción de escenarios, a fin de evaluar distintas simulaciones ante diferentes casos de uso de la unidad.

Planteo del problema

Las unidades de reformado semi-regenerativo de nafta (SRCRP) procesan principalmente nafta pesada proveniente de la unidad de destilación primaria, sometiéndola a un proceso por el cual moléculas de bajo número de octano (RON³) son transformadas en moléculas de alto octanaje. La reacción química tiene lugar en reactores, los cuales están rellenos con catalizador. La función de este material es activar la reacción química y que esta sea selectiva a los productos deseados.

El catalizador pierde paulatinamente su actividad, debido principalmente al depósito de coque sobre su su-

perficie, que se genera como producto de reacciones de cracking indeseadas. Esto impide el contacto del material catalítico con las moléculas presentes en la corriente de nafta pesada. Este fenómeno obliga a aumentar la severidad del proceso, lo cual se traduce principalmente en un incremento en la temperatura de ingreso de la nafta a los reactores, con el objetivo de compensar la pérdida de actividad del catalizador y lograr la especificación deseada.

El incremento en la temperatura ocasionará que el catalizador se desactive con mayor velocidad, ya dicha condición favorece la ocurrencia de reacciones de cracking, y por ende la generación de coque. Eventualmente, el catalizador alcanzará un nivel de desactivación tal que resultará inviable continuar aumentando la severidad para alcanzar la especificación, por lo que se deberá llevar a cabo un proceso de regeneración del catalizador, con el objetivo de recuperar su actividad. Este consiste en someterlo a elevadas temperaturas para quemar el carbón depositado en la superficie, para lo cual se deberá sacar de servicio la unidad durante varios días, generando lucro cesante.

El parámetro que se utiliza para realizar el seguimiento de la desactivación del catalizador se denomina Delta WAIT y se calcula como:

$$\text{Delta WAIT} = \text{WAIT actual} - \text{WAIT teórico}$$

donde:

- WAIT actual: promedio de la temperatura de entrada a los reactores (ponderado por la masa de catalizador).
- WAIT teórico: temperatura requerida a la entrada de los reactores para el catalizador virgen. Se calcula a partir de parámetros operativos y de calidad de la carga, según fórmulas de cálculo dadas por el fabricante.

El Delta WAIT es, por lo tanto, una medida de cuánto se ha incrementado la severidad del proceso respecto de la condición inicial (catalizador virgen) y del grado de desactivación del catalizador.

Cuando se alcanza un valor de Delta WAIT de 35°C, se considera que se ha alcanzado el límite de desactivación y se deberá regenerar el catalizador. Este no puede ser regenerado de forma indefinida, por lo que tras una determinada cantidad de ciclos, se deberá reemplazar en su totalidad.

Poder estimar, con la mayor precisión posible, cuándo se alcanzará el valor de Delta WAIT de 35°C permite aprovechar mejor la vida útil del catalizador y planificar adecuadamente los paros de planta de la Unidad. La metodología que se emplea típicamente para llevar a cabo el monitoreo de este parámetro consiste en realizar una proyección lineal empleando los datos más recientes, lo cual solo resulta conveniente cuando el catalizador se encuentra próximo a la condición de desactivación total, ya que solamente en dicha situación la tendencia típica de la curva se suele aproximar más a un comportamiento lineal; cuando se está promediando el ciclo, las curvas de seguimiento del Delta WAIT muestran un comportamiento no lineal.

La figura 1 ejemplifica el seguimiento del Delta WAIT para varios ciclos operativos históricos.

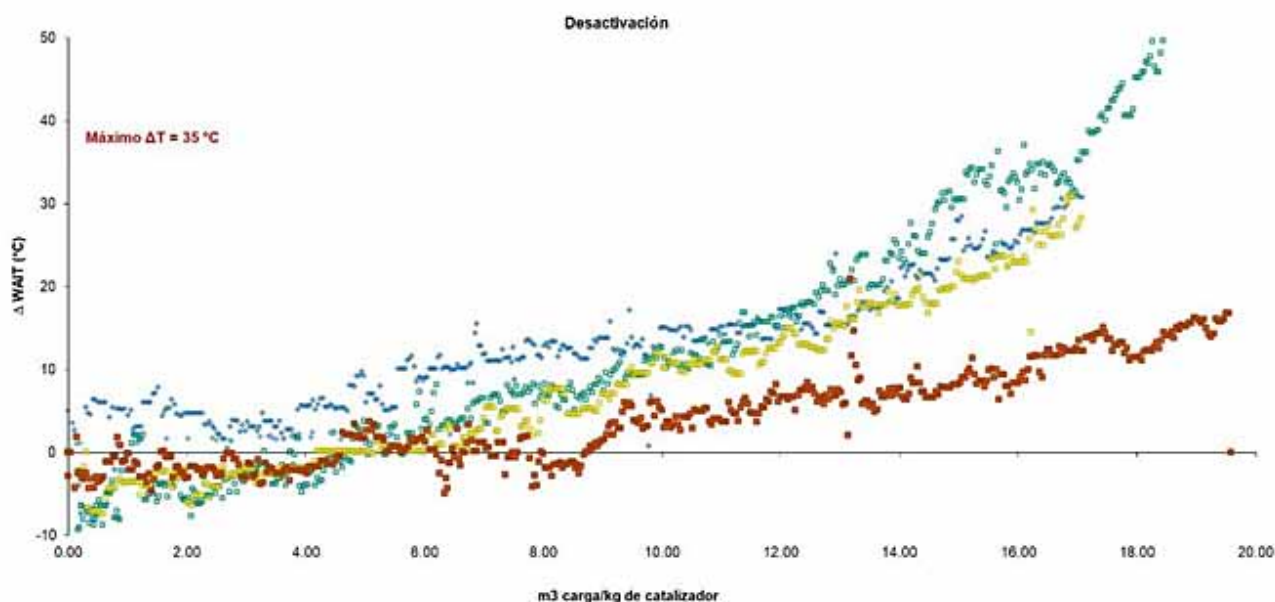


Figura 1. Evolución del Delta WAIT para varios ciclos operativos de catalizador de reformado.

Desarrollo técnico del trabajo

Se propuso desarrollar una herramienta de monitoreo del Delta WAIT capaz de predecir cuándo se alcanzará la condición de fin de ciclo en función de datos históricos tomados del historizador de la planta, que esté disponible en línea para los usuarios y que se actualice automáticamente en forma diaria.

Durante la etapa inicial del proyecto, se evaluó la posibilidad de emplear modelos avanzados de machine learning, tales como: algoritmos basados en series temporales (ARIMA, Prophet) y algoritmos de regresión basados en árboles de decisión (XGBoost y LightGBM). El objetivo en esta instancia fue desarrollar un modelo capaz de llevar a cabo la predicción del Delta WAIT, entrenado previamente con datos operativos y de calidad obtenidos de varios ciclos anteriores. Estas opciones se descartaron, puesto que se encontraron las siguientes limitaciones:

- No resulta viable utilizar como variables predictoras algunos parámetros operativos y de calidad que afectan a la desactivación del catalizador (ej.: RON, presión del reactor o análisis PIONA⁴⁾) debido a que no resulta factible conocerlos con la suficiente antelación.
- El impacto de las variables mencionadas anteriormente sobre el Delta WAIT resulta despreciable para los algoritmos de regresión frente al de la carga acumulada por kilogramo de catalizador. Esto fue verificado mediante estudios de importancia de variables, empleando la metodología Boruta.

Las conclusiones anteriores dictaron que solo tendría sentido utilizar la carga acumulada como variable predictora y datos del ciclo en curso para realizar la predic-

ción. Se propuso entonces la utilización de un modelo de ajuste de curvas mediante modelos de regresión tradicionales; luego de realizar pruebas con distintos tipos de funciones, se concluyó que el ajuste exponencial es la que logra una mejor performance, utilizando el RMSE (root mean squared error) como métrica. Debido a la presencia de datos atípicos, fue preciso limpiar la señal de temperatura con un filtro de Hampel de medianas.

El modelo queda entonces definido como una regresión exponencial con la siguiente forma, con a y b como parámetros de ajuste y la carga acumulada por kilogramo de catalizador como única variable independiente:

$$\Delta \text{WAIT} = a * e^{b \cdot \text{Cargaacum} / \text{kgcat}}$$

Los cálculos de carga acumulada y Delta WAIT se llevan a cabo diariamente, con lo cual sería viable ajustar la

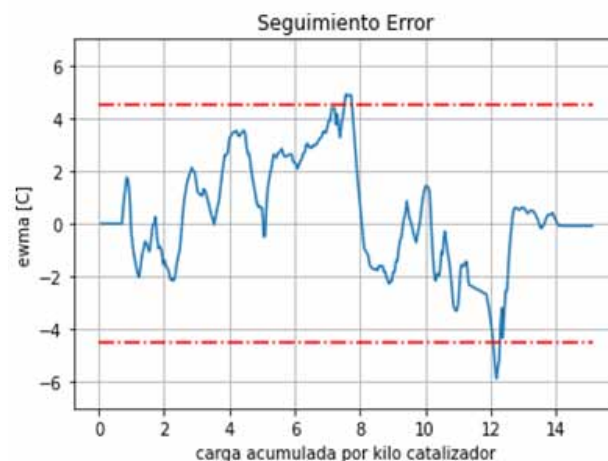


Figura 1. Monitoreo del error (EWMA) según ASTM D6299.

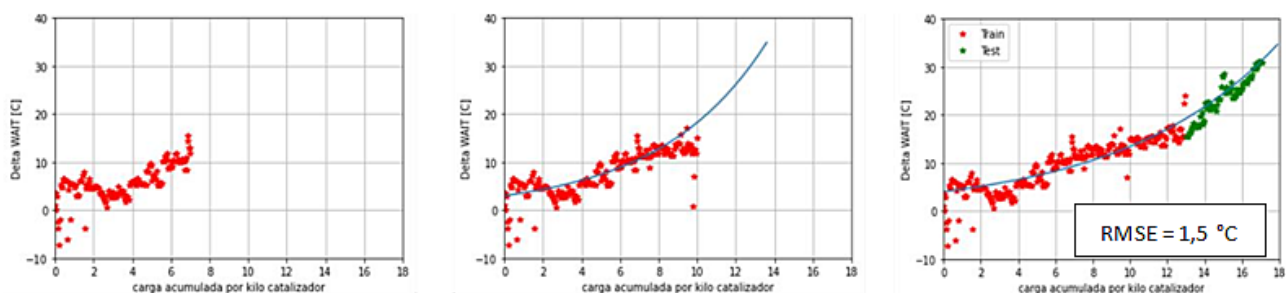


Figura 3. Secuencia de reajuste de la proyección conforme avanza el ciclo operativo del catalizador.

predicción todos los días. Sin embargo, esta metodología generaría una nueva curva de predicción por cada dato real ingresado, y esta no siempre tendría una variación significativa respecto a la anterior.

Por dicho motivo, a los fines prácticos, se propuso llevar a cabo un monitoreo de la performance del modelo a través del error entre los datos reales del ciclo y la última proyección realizada por el modelo. El criterio adoptado consistió en llevar a cabo un reajuste de la curva exponencial únicamente si se ha sobrepasado un determinado valor umbral del error.

Para el seguimiento del error, primero se verifica que no sea un valor atípico (outlier) y luego se utiliza una carta de control del tipo EWMA5, según norma ASTM D6299. El sistema (proyección del Delta WAIT) se considera “fuera de control” si los valores EWMA superan los límites más de 5 veces seguidas. Cuando esto ocurre, se procede a reentrenar el modelo automáticamente (obtener nuevos parámetros a y b de la función exponencial empleando los datos reales del ciclo con los que se cuenta hasta ese momento).

La herramienta fue desarrollada en Python y programada para ejecutarse diariamente. El flujo de trabajo es el siguiente:

1. Conexión al historizador de la planta y lectura de datos de proceso y de calidad correspondientes al día anterior.
2. Cálculo de WAIT actual y WAIT teórico a partir de

los datos obtenidos del historizador.

3. Actualización de carga acumulada y cálculo de Delta WAIT.
4. Aplicación de Filtro de Hampel para limpieza de datos atípicos.
5. Cálculo EWMA y reajuste de la curva de proyección de Delta WAIT, en caso de corresponder.
6. Escritura de resultados en tablas disponibles en un data warehouse, a las cuales se conecta un tablero para visualización por parte de los usuarios.

Resultados obtenidos

La herramienta desarrollada lleva a cabo la predicción del Delta WAIT hasta el valor de carga acumulada al cual se sobrepasa el límite de 35°C impuesto por la desactivación del catalizador. La Figura 3 ilustra su funcionamiento en distintas etapas de un mismo ciclo de catalizador: al inicio solo se lleva a cabo el monitoreo del Delta WAIT, puesto que el comportamiento del sistema aún no se encuentra en régimen, y por lo tanto no se cuenta con datos suficientes para realizar una proyección en forma adecuada. Cuando se alcanza un determinado valor de carga acumulada, se efectúa la primera proyección, la cual es luego reajustada según la metodología de monitoreo del error mencionada anteriormente.

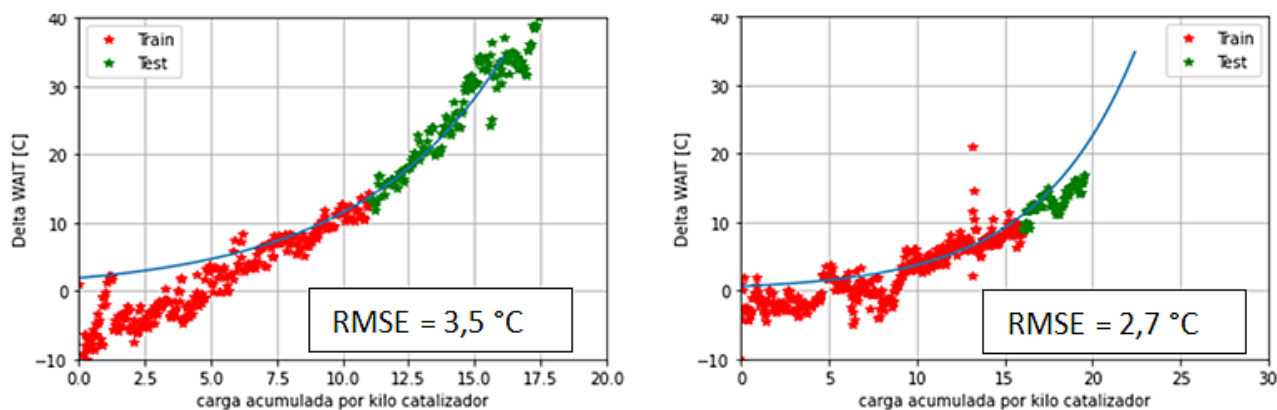


Figura 4. Ejemplos de aplicación a ciclos históricos.

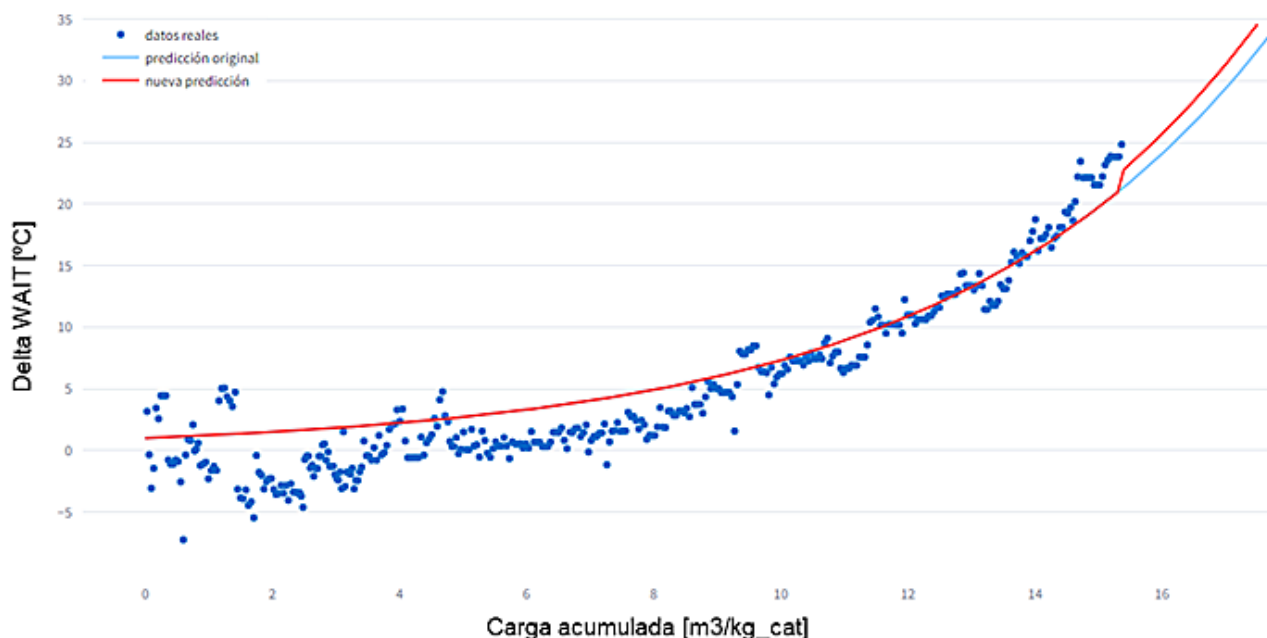


Figura 5. Complemento para evaluación de escenarios.

El modelo fue testeado empleando datos históricos correspondientes a siete ciclos anteriores. Los resultados para tres de ellos pueden visualizarse en las Figuras 3 y 4. Allí, las series de puntos graficadas en color rojo corresponden a los datos históricos utilizados para realizar la proyección, mientras que la serie en color verde corresponde a datos históricos no utilizados para entrenar el modelo, pero sí para evaluar su performance.

Se seleccionó el RMSE como métrica para evaluar la performance del método, obteniéndose una media de 2,5°C entre todos los ciclos históricos evaluados.

Como complemento, se desarrolló también un módulo para evaluación de escenarios, que permite ajustar la proyección original entregada por algoritmo en función de inputs proporcionados por los usuarios. El fundamento de este método consiste en afectar la proyección del Delta WAIT por un factor de corrección (v_{des}):

$$\text{Delta WAIT} = a \cdot e^{b \cdot \text{Carga acum. / kg cat}} \cdot v_{des}$$

El cálculo del factor de corrección se realiza en función de datos experimentales proporcionados por el fabricante para evaluar el impacto de determinados parámetros sobre la desactivación del catalizador, tales como el RON, la presión de operación o la relación de reciclo de H_2 .

La figura 5 muestra el ajuste de la proyección que resulta de modificar el RON en 0,5 puntos respecto a la tendencia del ciclo. Este módulo se encuentra en evaluación por parte de los usuarios.

Conclusiones

Se desarrolló en Python una herramienta que permite estimar la carga acumulada por kilogramo de catalizador a la cual se alcanzará la condición de desactivación del catalizador en unidades de reformado de naftas.

El algoritmo implementado se basó en un modelo de regresión de una función exponencial. Los resultados obtenidos al testear el modelo con datos de ciclos anteriores de desactivación del catalizador fueron evaluados empleando el RMSE como métrica y resultaron satisfactorios.

La herramienta fue puesta a disposición en línea y contribuye a que los usuarios (ingenieros de procesos y de producción) puedan planificar mejor los paros de la unidad y optimizar la vida útil del catalizador.

- 1 Semi-regenerative catalytic reformer process
- 2 Weight Average Inlet Temperature
- 3 Research Octane Number
- 4 Parafinas, isoparafinas, olefinas, nafténicos y aromáticos
- 5 Exponentially Weighted Moving Average

Buscá todo sobre el **shale** en nuestra **web**



LOS NO CONVENCIONALES OPORTUNIDAD QUÍMICOS SISMICIDAD USO DEL AGUA



www.shaleenargentina.org.ar

El sitio del IAPG destinado especialmente a los hidrocarburos de reservorios no convencionales, como *shale gas* y *shale oil*.

Pensada como herramienta útil para toda la comunidad, especializada o no, que quiera conocer con mayor profundidad lo relativo a estos reservorios y al *fracking* o estimulación hidráulica, así como los aspectos que generan mayores cuestionamientos: el uso del agua, la protección de los acuíferos, el uso de químicos, etcétera.

Toda la información de los expertos y las últimas noticias.

¡Y además, la posibilidad de consultar interactivamente a un experto sobre cualquier aspecto relacionado con el shale en la Argentina!

