

Procedimiento para la síntesis y diseño óptimo de plantas discontinuas (segunda parte)

Procedure to Optimal Synthesis and Design of Batch Plants (Second Part)

MSc. Yaillet Albernas-Carvajal^I, yailletac@uclv.edu.cu, Dra. Gabriela Corsano^{II},
Dra. Meilyn González-Cortés^I, Dr.Sc. Erenio González-Suárez^I, Dr. Harry Verelst^{III}

^ICentro de Análisis de Procesos (CAP), Facultad de Química y Farmacia, Universidad Central "Marta Abreu" Las Villas, Cuba, ^{II}INGAR-CONICET-UTN, Departamento de Matemática - FIQ, UNL, Argentina, ^{III}Department of Chemical Engineering, Vrije Universiteit Brussel (VUB)

El presente trabajo constituye la segunda y última parte del amplio estudio teórico que permite posteriormente continuar con el desarrollo del procedimiento para la síntesis y diseño óptimo de sistemas discontinuos. A partir del estudio teórico se obtiene el diagrama heurístico es una continuación del abordado en la primera parte del trabajo. En dicho diagrama no solo se tienen en cuenta los equipos y los problemas de materiales involucrados, sino que también se involucran aspectos relacionados con la incertidumbre tanto en el tiempo como en las variables de entrada. La síntesis y diseño óptimo se logra mediante la aplicación de reglas de optimización a superestructuras, que son previamente propuestas por el investigador del proceso, para lo cual se emplean rigurosas herramientas computacionales. Se analiza además, la integración material y energética del proceso.

Palabras clave: modelo, superestructura, optimización, integración, proceso discontinuo.

The present work is the second and last part of the wide theoretical study that it allows to continue with the development of the procedure to the synthesis and optimal design of batch systems. Starting from the theoretical study the heuristic scheme is obtained it is a continuation of the scheme developed in the first part of the work. In this scheme are kept in consideration the equipments and the involved materials problems, and also rather aspects related with the uncertainty are also involved the time as in the input variables. The synthesis and optimal design is achieved by means of the application of optimization rules to superstructures that are previously proposed by the process researcher, for that which rigorous computational tools are employed. The material and energetic integration of the process it is also analyzed.

Key words: model, superstructure, optimization, integration, batch process.

Introducción

A través de los años, la industria de procesos ha demostrado su eficiencia en procesos continuos a gran escala. Inicialmente las instalaciones de fabricación para un nuevo producto eran un proceso a batch o uno de laboratorio a gran escala; pero como la economía de escala es un punto clave en el éxito de los negocios, la Ingeniería Química e industrias de procesos enfocaron toda su atención en diseñar y desarrollar los procesos continuos. Los procesos continuos son dominantes en la fabricación de productos químicos a granel, sin embargo para la fabricación de productos químicos especiales y de los llamados de química

fina con un marcado énfasis en los requerimientos de calidad, el enfoque ha estado girado hacia los procesos discontinuos o a batch.

Para el tratamiento de procesos discontinuos no se puede simplemente tomar las metodologías de los procesos continuos y aplicarlas en discontinuos, debido a que ocurre una significativa pérdida de exactitud en los resultados. La dimensión de tiempo en procesos químicos discontinuos, hace más difícil su análisis pues lleva a 2 dimensiones para la interpretación gráfica apropiada. Por lo tanto, la mayoría de las técnicas prácticas dirigidas a las plantas discontinuas tiende a ser de naturaleza matemática y los adelantos en las herramientas matemáticas y computacionales indican que esta será la tendencia en el futuro.

El presente trabajo tiene como objetivo fundamental, continuar con el desarrollo del procedimiento para la síntesis y dimensionamiento óptimo de sistemas discontinuos, que se comenzó en la primera parte del artículo bajo el mismo nombre del presente, el cual se logra a partir de una amplia fundamentación teórica, con un conjunto de aspectos relevantes en el tratamiento de sistemas discontinuos.

Fundamentación teórica

Dando continuidad a los tópicos tratados en la primera parte del presente trabajo se impone analizar los aspectos relacionados con el análisis del tamaño del batch que viene dado por el cálculo de lo que se necesita producir en cada batchada que cumpla con la capacidad total de la planta, para lo cual se establecen balances de interconexiones entre etapas. Estos requisitos del tamaño del batch pueden ser fijos o variables /1/.

Modelación de las etapas del proceso

Aspecto de vital importancia y que le aporta robustez al estudio, es tratar cada una de las etapas involucradas en el proceso de acuerdo a los modelos que la describen. Dichos modelos pueden ser fenomenológicos con las principales ecuaciones de diseño para el diseño como tal de la etapa y/o apoyados por modelos estadísticos que ayudan a determinar los valores experimentales de cada una de las variables involucradas en el proceso /2/.

Consideración de la incertidumbre en la síntesis, diseño y operación de procesos discontinuos.

La programación de operaciones ha sido generalmente el resultado de un análisis de información conocida o establecida y confiable. La mayoría de las plantas químicas se enfrentan a eventos inesperados en su operación, los cuales afectan la programación de las operaciones, es decir la incertidumbre es un elemento presente en el análisis de procesos discontinuos y ha sido considerada en muchos trabajos previos /3, 5, 7/.

El éxito en el tratamiento de la incertidumbre en la programación de operaciones puede ser considerada como la habilidad de alcanzar una ejecución apropiada de la programación predicha a pesar de la ocurrencia de eventos no previstos /8/. Por otra parte /9/ refiere que existen dos formas de enfrentar este problema en el análisis a nivel de operaciones, una es la forma preactiva, en la que se tiene en cuenta de alguna forma durante la modelación y la otra es la reactiva, en la que se realizan acciones ante su existencia durante la ejecución de la programación.

Planteamiento de la superestructura

De acuerdo con lo planteado por /10/. La metodología de resolución que contempla en forma esquemática todas las posibles configuraciones de una planta batch en un mismo modelo y que es formulada de acuerdo al conocimiento del diseñador, se le denomina "superestructura".

Modelación matemática y optimización de procesos discontinuos

La optimización de procesos químicos en general /11/ la ha definido como el proceso de seleccionar a partir de un conjunto de alternativas posibles, aquella que mejor satisfaga el o los objetivos propuestos. Las dos etapas fundamentales de la optimización son la formulación del modelo y la resolución y validación de dicho modelo. Según /12/, de acuerdo a la forma matemática del problema los modelos matemáticos de optimización se pueden clasificar en:

- LP (Programación lineal): Función objetivo y restricciones lineales.
- NLP (Programación no lineal): Función objetivo y/o restricciones no lineales.
- MILP (Programación Lineal Entera Mixta)
- MINLP (Programación no lineal entera mixta)

Clasificación de los modelos de optimización para la programación en procesos discontinuos (batch scheduling).

Para la obtención de modelos de optimización para la programación de procesos discontinuos /13/ propuso un esquema a seguir, el cual se resume en la figura 1.

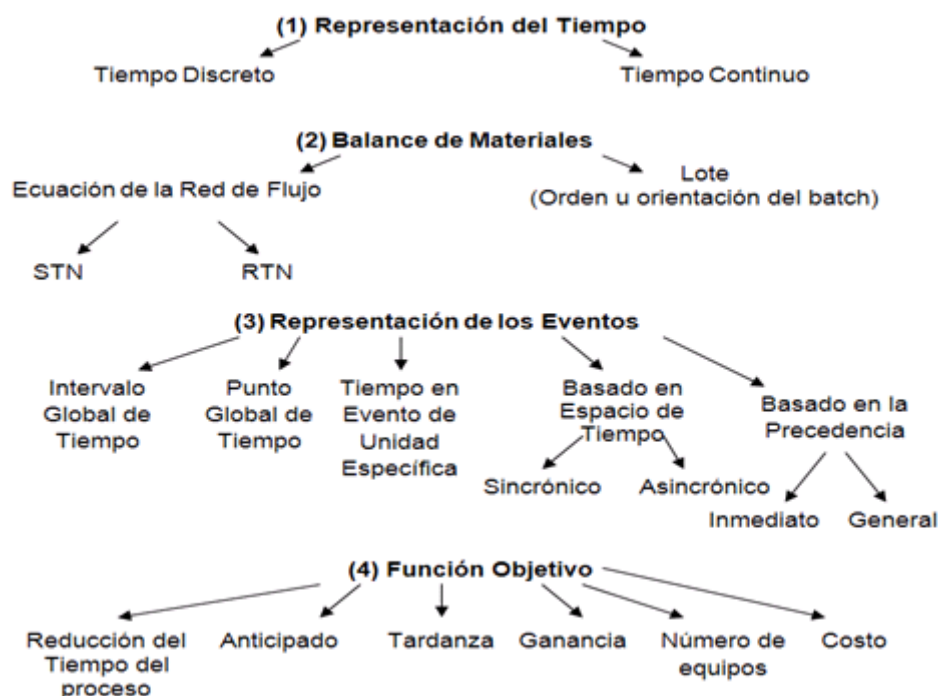


Fig. 1 Pasos para obtener modelos de optimización para la programación de plantas discontinuas.

Como se puede apreciar, este diagrama presenta cuatro aspectos fundamentales que son la representación del tiempo, los balances de materiales, la representación de los eventos y la función objetivo a obtener, los cuales serán brevemente tratados a continuación:

Representación del tiempo: este es el primer problema y el más importante, dependiendo de si los eventos pueden tener lugar en varios puntos del tiempo predefinidos o pueden ocurrir en cualquier momento en el horizonte de tiempo de interés, las aproximaciones de optimización pueden ser clasificadas en tiempo discreto o continuo.

El modelo de tiempo discreto está basado en:

1. Dividir el horizonte de scheduling en un número finito de intervalos de tiempo con una duración predefinida.
2. Permitir que los eventos tales como el inicio y la terminación de las actividades solo puedan ocurrir en el límite de ese período de tiempo.

Sin embargo, las restricciones de scheduling solo son vistas en un punto del tiempo específico

y conocido, lo cual reduce la complejidad del problema y hace que la estructura del modelo sea más simple y fácil de resolver, particularmente cuando se tienen en cuenta las limitaciones de recursos. Por otra parte este tipo de problema tiene dos desventajas fundamentales, primero el tamaño del modelo matemático, así como su fuerte eficiencia computacional. En el orden de superar las limitaciones anteriores y generar datos independientes con los modelos, una variedad ancha de aproximaciones de optimización emplea una representación de tiempo continuo. En estas formulaciones, las decisiones de tiempo son explícitamente representadas como un juego de variables continuas definiendo los tiempos exactos en los que se llevan a cabo las operaciones.

Balance de materiales: El tratamiento de las batchadas y el tamaño del batch dan lugar a dos tipos de categorías de modelos de optimización. La primera categoría se refiere a aproximaciones monolíticas con simultánea distribución del juego óptimo de batches, (número y tamaño), la asignación y secuencia de los recursos industriales

y el tiempo de procesamiento de las tareas. Estos modelos para la representación del problema emplean los conceptos de red de estados y tareas (STN) o red de recursos y tareas (RTN).

La segunda categoría comprende modelos que asumen que el número de batches de cada tamaño es conocido de antemano. El problema del batching convierte los requisitos primarios de productos en lotes individuales que apuntan a optimizar algún criterio como el trabajo de la planta. Luego, los recursos disponibles de fabricación son asignados a los lotes en el tiempo. Estas dos aproximaciones pueden dirigirse a problemas prácticos más grandes que los métodos monolíticos, sobre todo aquéllos

que involucran un número bastante grande de tareas del lote relacionado a diferentes productos intermedios o final. Esta aproximación todavía se restringe a procesos que comprenden las recetas secuenciales del producto.

Representación de los eventos: Los modelos de planificación son basados en diferentes conceptos o ideas básicas que organizan los eventos del scheduling con el tiempo, con el objetivo fundamental de garantizar que la máxima capacidad de los recursos compartidos nunca se exceda. /13/ ofrece una clasificación los diferentes conceptos en cinco tipos de representación de los eventos, que se pueden apreciar en la figura 2.

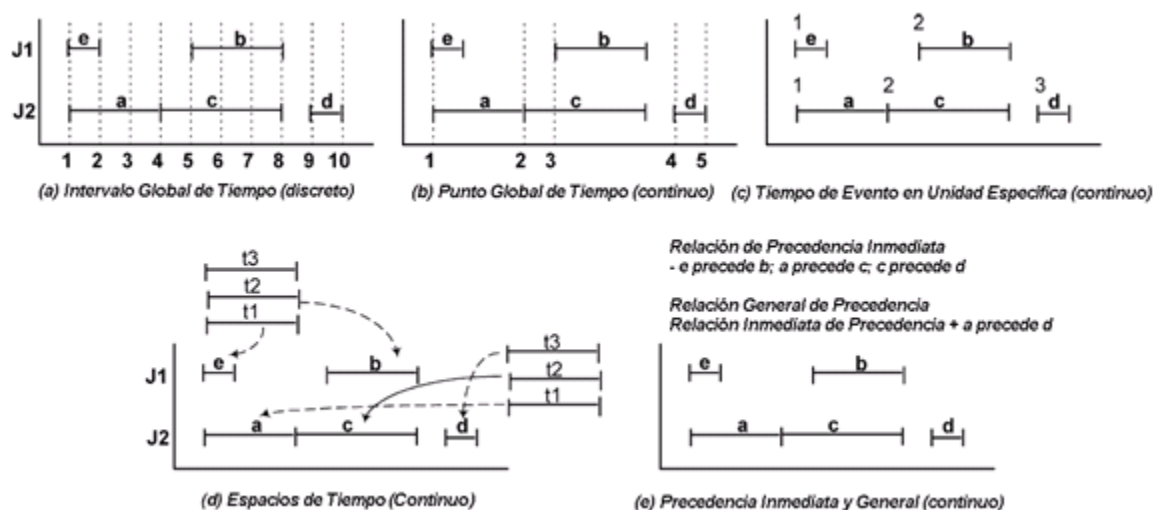


Fig. 2 Diferentes conceptos para la representación del problema de planificación (scheduling).

Como se puede apreciar, este ejemplo involucra cinco batches (a, b, c, d, e) asignadas a dos unidades (J1 y J2). Para representar esta solución, las diferentes alternativas requieren: a) 10 intervalos de tiempo fijos, b) cinco puntos de variables globales, c) tres unidades específicas de eventos en el tiempo, d) tres tiempos asincrónicos para cada unidad, e) tres relaciones inmediatas de precedencia o cuatro relaciones generales de precedencia.

Función objetivo: Se pueden emplear diferentes medidas de la calidad de la solución para los problemas de planificación. Sin embargo, el criterio normalmente seleccionado para la optimización tiene un efecto directo en la ejecución del modelo computacional.

Además, algunas funciones objetivo pueden ser muy difíciles llevar a cabo para algunas representaciones de evento, requiriendo variables adicionales y restricciones complejas.

Integración de procesos en la síntesis, diseño y operación de procesos discontinuos

La integración de procesos desarrollada en los años 70 a través de la tecnología Pinch para la optimización del uso de la energía y el diseño sustentable de los sistemas relacionados con ésta. Esta tecnología es partidaria de la exploración de la recuperación de la energía máxima dentro del

proceso a través del intercambio de calor de proceso-proceso antes de acudir a los requisitos externos de utilidades /14/. Su fortaleza queda en la habilidad de poner los objetivos de energía antes del compromiso de diseñar /15/. Por otra parte su naturaleza gráfica le permite al diseñador guiar el proceso de optimización que necesariamente no es el caso con las aproximaciones matemáticas. El resultado final es una eficiente red de intercambio de calor (HEN)/16/. Sin embargo, esta contribución ha tenido su principal impacto en procesos continuos ignorando el impacto de las intervenciones dependientes del tiempo que tradicionalmente aparecen en procesos discontinuos /17/. El aumento de la rigidez de las legislaciones medioambientales y el crecimiento de los procesos discontinuos en el sector industrial han hecho

necesario el desarrollo de técnicas de integración de procesos que son particulares para procesos discontinuos. En /10/ se puede apreciar la integración material entre varias plantas que producen diferentes productos alimenticios.

Desarrollo

En la primera parte del presente artículo quedaron pendientes aspectos de vital importancia para la síntesis y dimensionamiento de plantas con funcionamiento discontinuo. A partir de aspectos tratados en la fundamentación teórica se diseñó la segunda parte del diagrama heurístico que se presenta en la figura 3.

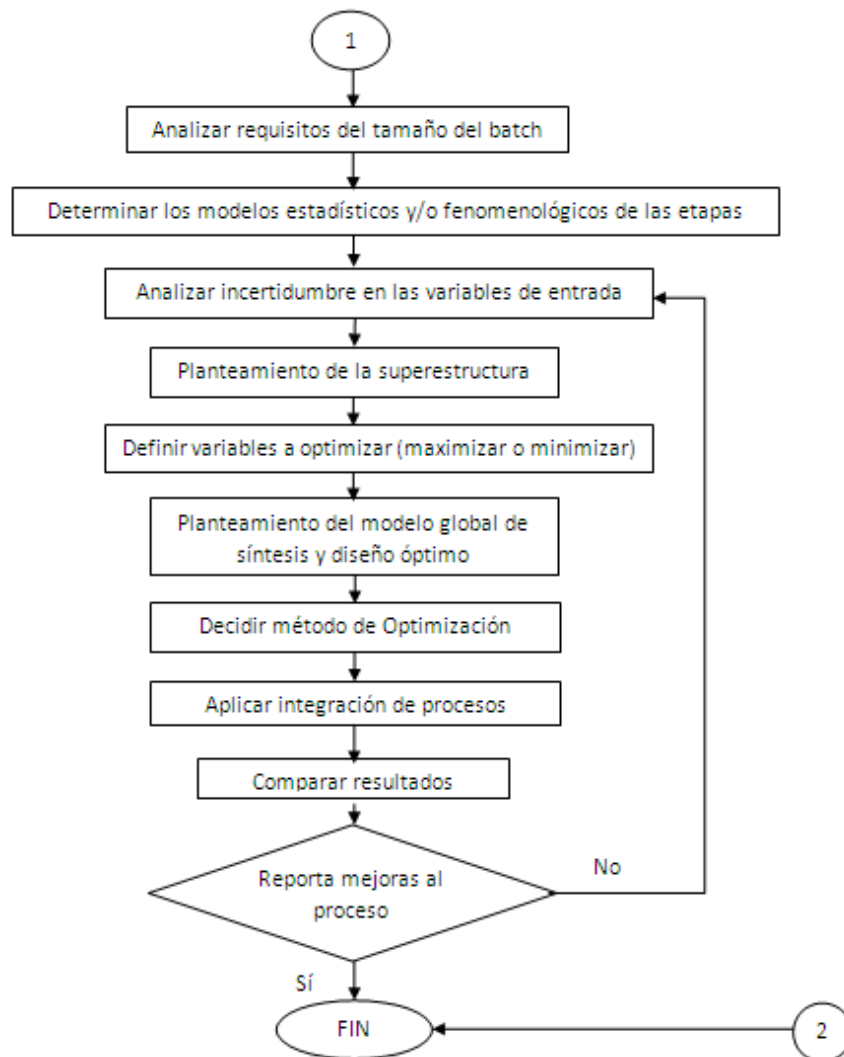


Fig. 3 Segunda parte del diagrama heurístico para el análisis, síntesis y diseño óptimo de procesos discontinuos.

La primera parte del diagrama heurístico culminaba en el análisis del solapamiento entre etapas como alternativa para la reducción del tiempo del ciclo limitante.

La introducción dentro de la línea de producción de equipos que permitan el almacenaje de productos intermedios puede aportar notables mejoras en la utilización del resto de los equipos instalados. La situación de los equipos de almacenaje dentro del camino de producción definirá una serie de divisiones del mismo en subprocesos, y la capacidad de almacenaje determinará el alcance del desacoplamiento entre dichos subprocesos. Así, puede introducirse la capacidad suficiente para que los tiempos de ciclo y los tamaños de lote queden desacoplados entre cada uno de los subprocesos para que operen de forma totalmente independiente, o bien instalar un sistema de almacenaje de capacidad más limitada que impondrá restricciones adicionales de productividad.

Esto lleva a que posteriormente se necesite hacer un análisis del tamaño del batch que viene dado por el cálculo de lo que se necesita producir en cada batchada que cumpla con la capacidad total de la planta, para lo cual se establecen balances de interconexiones entre etapas, es aquí donde comienza el presente diagrama heurístico.

Seguidamente se hace un compendio de modelos para cada etapa que pueden ser tanto estadísticos, para la determinación de parámetros experimentales como fenomenológicos con las principales ecuaciones de diseño que pueden involucrar las diferentes variables de entrada y los parámetros determinados mediante los modelos estadísticos.

Estas variables de entrada como por ejemplo la duración de las operaciones, en la disponibilidad de la materia prima, en la demanda de los productos, en la disponibilidad de un equipo dado, presentan un grado de incertidumbre que debe ser sujeto a análisis, lo cual se refleja en el siguiente paso del procedimiento.

La duración tiene dos partes, la etapa de preparación del equipo (por ejemplo, limpieza) y el procesamiento en sí. En ocasiones la etapa de preparación del equipo es tan compleja que puede considerarse como otra operación /9, 18/.

Posteriormente se plantea la superestructura que como bien se explicó en la fundamentación teórica, según /2/ es una metodología de resolución que contempla en forma esquemática todas las posibles configuraciones de una planta batch en un mismo modelo y que es formulada de acuerdo al conocimiento del diseñador. A continuación se definen cuáles son las variables que se desean optimizar a través de una función objetivo de minimización o maximización; dicha función puede ser relacionada con los costos o rentabilidad del proceso.

Con todo ello se plantea el modelo global para la síntesis y el diseño óptimo, el cual es el que le da solución a la superestructura planteada. Para la solución del modelo se selecciona el método de optimización a emplear de acuerdo a los aspectos relacionados con la optimización de procesos discontinuos que fueron ampliamente tratados en la fundamentación teórica.

El siguiente aspecto a tener en cuenta según el diagrama es el relacionado con la integración de procesos, buscando que la planta que fue diseñada teniendo en cuenta la optimización de las superestructuras planteadas sea integrada energética y materialmente, aprovechando todas las posibles corrientes que así lo permitan.

Para el tratamiento de procesos discontinuos no se puede simplemente tomar las metodologías de los procesos continuos y aplicarlas en estos, debido a que ocurre una significativa pérdida de exactitud en los resultados. La mayoría de las metodologías de integración de procesos tiende a ser de naturaleza gráfica que le permite al diseñador formar parte del proceso de optimización; todas estas metodologías no pueden aplicarse a los procesos discontinuos ya que ellos excluyen la dimensión de tiempo.

La dimensión de tiempo en procesos químicos discontinuos, hace más difícil el análisis de estos procesos pues lleva a dos dimensiones para la interpretación gráfica apropiada. Por lo tanto, la mayoría de las técnicas prácticas dirigidas a las plantas discontinuas tiende a ser de naturaleza matemática y los adelantos en las herramientas matemáticas y computacionales indican que esta será la tendencia en el futuro. Sin embargo, el hecho de que los procesos discontinuos sean

reducidos a dos dimensiones no es la razón principal para su exclusión del proceso de análisis de integración.

Por otro lado, es considerado verdadero que los procesos discontinuos no presentan una energía intensiva como los continuos. Además, debido a las cantidades de uso de agua fresca y generación de aguas residuales en procesos discontinuos es necesario desarrollar metodologías específicas. Luego de los estudios realizados por /19/ se comprendió que en algunas operaciones de procesos discontinuos el uso de la energía tiende a ser tan intensiva como en los procesos continuos. También se ha demostrado que la naturaleza de los procesos discontinuos es tal que los efluentes presentan una alta toxicidad, aunque sea en cantidades pequeñas, ejemplos típicos son la industria farmacéutica y agroquímica /15/.

Seguidamente estos parámetros deben ser comparados con datos reportados en la literatura, así como con los procesos convencionales que ya existan, para comprobar si aportan mejoras al proceso o no; esto es en el caso de que se esté trabajando con un proceso existente, si es un proceso que se está diseñando por primera vez, la comparación sería para ver si los resultados se encuentran dentro de los rangos establecidos. De no presentar mejoras se debe ir nuevamente al paso del análisis de la incertidumbre en las variables de entrada y seguir sucesivamente.

Como resultado de la aplicación del procedimiento planteado se obtendrá la síntesis y el diseño óptimo de una planta discontinua, con una maximización de la ganancia o una minimización de los costos, teniendo en cuenta las alternativas posibles en cada una de las etapas, las cuales son analizadas cuando se plantea la superestructura, así como la integración del proceso.

Conclusiones

1. El diagrama heurístico propuesto resume la segunda parte de los pasos para la síntesis y diseño óptimo de procesos batch que son: el análisis de los requisitos del tamaño del batch; la determinación de los modelos que describen la etapa; el análisis de la incertidumbre en las variables; el planteamiento de la superestructura;

de las variables a optimizar y del modelo global de síntesis y diseño óptimo; la selección del método de optimización; la integración de procesos y la comparación de los resultados obtenidos.

2. Los procesos discontinuos presentan un amplio rango de incertidumbre fundamentalmente relacionados a eventos inesperados en la operación, que afectan la programación de las operaciones y los tiempos de duración de las etapas.
3. Los cuatro aspectos fundamentales para obtener los modelos de optimización en plantas discontinuas son: la representación del tiempo, los balances de materiales, la representación de los eventos y la función objetivo a obtener.

Bibliografía

1. ACEVEDO, L. & GONZÁLEZ, E. "Diseño de Plantas Discontinuas Para Instalaciones de la Industria Química y Fermentativas", Ed. Vías para el Desarrollo de Instalaciones de la Industria Química y Fermentativa en Condiciones de Incertidumbre, Ciudad de La Habana, 1999.
2. CORSANO, G. "Estrategia en el Diseño Óptimo de Plantas de Procesos Batch de la Industria Alimenticia Integradas a Procesos Fermentativos". Tesis en Opción al Título de Doctor en Ingeniería, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 2005.
3. NISHIDA, N., ICHIKAWA, A. & TAZAKI, E. "Synthesis of Optimal Process Systems with Uncertainty", *Industrial Engineering Chemical Process Design and Development*, 13, 209-214, 1974.
4. IERAPETRITOU, M. G. & PISTIKOPOULOS, E. N. "Batch Plant Design and Operations under Uncertainty", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 35. Págs. 772-787. 1996.
5. LI, Z. & IERAPETRITOU, M. G. "Process Scheduling Under Uncertainty Using Multiparametric Programming", *AIChE Journal*, 53, 3183-3203, 2007.
6. BARBOSA, A. P. "A Critical Review on the Design and Retrofit of Batch Plants", *Computer and Chemical Engineering*, 31. Págs. 833 - 855. 2007.
7. CASTRO, P. M., HARJUNKOSKI, I. & GOSSMANN, I. "Optimal Short - Term Scheduling of Large - Scale Multistage Batch Plants", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48. Págs. 11002-11016. 2009.
8. BONFILL, A. "Proactive Management of Uncertainty to Improve Scheduling Robustness in Process Industries", Barcelona, Universidad Politécnica de Cataluña, 2006.

-
9. SABADÍ, J. "Metodología de Apoyo a la Síntesis y Dirección de Procesos en la Casa de Calderas del Ingenio Azucarero", Tesis presentada en opción al título de Doctor en Ciencias Técnicas, Instituto Cubano de los Derivados de la Caña de Azúcar, La Habana, 2010.
 10. CORSANO, G., MONTAGNA, J. & AGUIRRE, P. "Design and Planning Optimization of Multiplant Complexes in the Food Industry", *Food and Bioproducts Processing*, 85. Págs. 381-388. 2007.
 11. SCENNA, N., FERRERO, M. B. & CHIOTTI, O. J. A. "Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos", Cap XIX, 1999. Págs. 741-766. ISBN: 950-42-0022-2.
 12. SMITH, R., "Chemical Process Design and Integration", Editor John Wiley & Sons, Ltd, England, ISBN: 0-471-48680-9. 2005.
 13. MÉNDEZ, C. A., CERDÁ, J., GROSSMANN, I. E., HARJUNKOSKI, I. & FAHL, M. "State of The Art Review of Optimization Methods for Short Term Scheduling of Batch Processes". *Computers and Chemical Engineering*, 30. Págs. 913-946. 2006.
 14. GONZÁLEZ, M., VERELST, H., ESPINOSA, R. & GONZÁLEZ, E. "Simultaneous Energy and Water Minimization Applied to Sugar Process Production", *Chemical Engineering Transactions*, 25. Págs. 177-182. 2011.
 15. MAJOZI, T. "Introduction to Batch Chemical Processes". (Ed.) B.V, S. S. B. M. Batch Chemical Process Integration, Analysis, Synthesis and Optimization, New York, USA, 2010.
 16. ADONYI, R., ROMERO, J., PUIGJANER, L. & FRIEDLER, F. "Incorporating Heat Integration in Batch Process Scheduling", *Applied Thermal Engineering*, 23. Págs. 1743-1762. 2003.
 17. GONZÁLEZ, M., VERELST, H. & GONZÁLEZ, E. "Energy Integration of Multiple Effect Evaporators in Sugar Process Production", *Chemical Engineering Transactions*, 21. Págs. 277-282. 2010.
 18. PEDRAZA, J. "Estrategia Para el Diseño de una planta para la producción de Ácido Fosfórico en Condiciones de Incertidumbre", tesis presentada en opción al grado científico de Doctor en Ciencias Técnicas, Santa Clara, Cuba, Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, 1997.
 19. MIGNON, D. & HERMIA, J. Using Batches for Modeling and Optimizing the Brewhouses of an Industrial Brewery. *Computer and Chemical Engineering*, 17 (Suppl), S51-S56. 1993.