

Diss. ETH No. 16694

ISBN 3-906734-46-3

# Deterministic and stochastic batch design optimization techniques

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by  
Andrej Mošat'

Ing., Slovak Technical University Bratislava

born December 14<sup>th</sup>, 1978

citizen of Slovak Republic

Accepted on the recommendation of  
Prof. Konrad Hungerbühler, examiner  
Prof. Eckart Zitzler, co-examiner  
Dr. Ulrich Fischer, co-examiner

Zurich 2006

# Abstract

Custom chemicals and pharmaceuticals manufacturing is performed very often in multipurpose batch plants. Multipurpose plants offer a high degree of flexibility for the design and operation of chemical processes. As a consequence, problems related to mathematical models of different scenarios such as: design of a single process, design of a new plant, retrofit of an existing plant or scheduling a given portfolio of processes in a given plant are complex and demand substantial computational resources. The mathematical models of a given problem related to batch processing are usually very difficult to formulate. Typically these problems are highly nonlinear, and unless simplified, are believed not to be solvable in polynomial time. The problem complexity even increases if multiple objectives are to be considered. On top of the multiobjective decision problems, the uncertain factors inclusion further complicates the mathematical models.

A solution to the discussed problems is a design, i.e. an allocation of recipe tasks to batch plant equipment. The aim of the proposed algorithms is to optimize the design of a single chemical process to be implemented in an existing multipurpose batch plant. Various objective functions used in the multiobjective optimization are defined as quantitative measures of the quality of such process designs. In this work a Tabu Search metaheuristic method was successfully applied to a wide range of problems.

The main goals of the research posed in this thesis can be summarized as:

1. Formulation of the mathematical problems and development of methodologies supporting the batch plant engineering development team during the process design phase.
2. Proposing a set of solving algorithms for tackling the presented problems.
3. Finding and demonstrating a practical method of reducing significantly the size of the batch design optimization domain. A *Superequipment concept* was developed as a mathematical model of an equipment class capable of performing any chemical operation class. A *Superequipment unit* must additionally fulfill the reality criterion, that means it must be transformable into a real equipment unit during and after the optimization. This concept reduces the combinatorial complexity in the solution space significantly.
4. Stipulating and investigating a stochastic mathematical model, related to batch process development, which can be handled by multiobjective optimization in a reasonable time frame allowing rapid result output. Productivity robustness related to a design is defined in the stochastic approach.
5. Automatically selecting a set of feasible and good-performing designs as a basis for the decision making in the early batch process development.

The problem domain of early stage batch process development is extended in the presented formulations. In addition to the optimization of a single deterministic design, the new optimization algorithms assist in: retrofitting of equipment, grass-root design of a new plant, automated production plant line selection or in evaluating a design robustness by an automated stochastic method. The results compilation is also automatically presented as a selection of individual designs, sorted according to prioritized list of objective function values.

The methods, demonstrated on various case studies, show feasibility of the resulting designs, a broad applicability of the methods for automatized integrated process development. The discussed stochastic batch process design approach presents important measures related to the risks in the preliminary design stages.

# Zusammenfassung

Die Prozessentwicklung ist ein grundlegender Teil eines industriellen Projekts. Pharmazeutika und Spezialitätenchemie werden meistens in Batch-Anlagen hergestellt. Die Notwendigkeit einer effizienten Prozessplanung stellt den Prozessdesigner vor die Aufgabe, neue automatisierte Methoden zu entwickeln.

Die Methoden sollen eine *Integrierte Prozessentwicklung*, das heißt Beurteilung von allen relevanten Aspekten des Prozesses gewährleisten. Dabei ist zu beachten, dass oft nur unvollständige Informationen über das Verfahren vorhanden sind. Die Applikation dieser Methoden in der Praxis sollte eine schnelle Übersicht von Prozessalternativen und deren Parametern liefern. Eine methodische Formulierung von mathematischen Modellen für die Batch-Prozesse ist problematisch. Zur Zeit gibt es keine rigorosen Algorithmen, die eine zuverlässige Lösung für Probleme dieser Art liefern können. Üblicherweise werden die Probleme vereinfacht oder mit Hilfe von „*random – search*“ Algorithmen gelöst, die keine optimalen Lösungen garantieren. Die Komplexität der Probleme steigt, wenn man mehrere Zielgrößen betrachtet oder wenn Unsicherheiten in die Problemstellung mit einbezogen werden.

Das Hauptziel dieser Arbeit liegt in der Entwicklung von Methoden und Software für die frühe Beurteilung der Prozessalternativen in Mehrzweckanlagen. Die Methoden sollen vielversprechende Prozessdesigns entwerfen, deren Zielgrößen berechnen und eine Auswahl von Designs zur Weiterentwicklung vorschlagen.

Die Basis für die Entwicklung dieser Methoden bildet eine Reihe von Problemstellungen bezüglich der Prozessentwicklung in Batchanlagen.

In dieser Arbeit wurden die folgenden Themen behandelt: eine deterministische Problemstellung, eine stochastische Problemstellung mit *Design Robustness*, das *Superequipment Konzept*.

Eine deterministische Problemstellung baut auf mathematischen Modellen auf, welche die Daten über die Batchanlage, das Rezept und die Produktionsheuristiken enthalten. Damit kann man eine Reihe von Szenarien bezüglich des Designs eines Prozesses, das Retrofit von Produktionsanlagen oder Neuanlagengestaltung lösen.

Ein weiterer Lösungsansatz ist das *Superequipment Konzept*. Das Superequipment ist ein mathematisches Modell. Es ist definiert als eine übergeordnete Klasse von Produktionsgeräten. Diese Klasse kann alle betriebsüblichen Operationen durchführen. Dabei muss es aber die Bedingung der Realität erfüllen, so dass dieses Modell innerhalb der Optimierung in ein reales Gerät transformierbar ist. Letztendlich reduziert dieses Konzept die Komplexität von Optimierungsproblemen im Prozessdesign. In dieser Arbeit wird das Superequipment Konzept in unterschiedlichen Fallstudien erfolgreich demonstriert.

Die nächste Stufe in der Entwicklung der präsentierten Methoden ist die Betrachtung einer Batchproduktion mit multiplen Entscheidungskriterien unter Beachtung von Unsicherheiten. Das Ziel ist, mehrere Designs zu entwerfen, die nicht nur eine gute Produktionsrate haben, sondern auch die erwartete Produktionsrate unter variablen Beschaffenheiten gewährleisten können. Die Robustheit wird als ein Kriterium für das Design vorgeschlagen. Die unsicheren Parameter werden mit der Latin-Hypercube Methode behandelt und sind im Rezept definiert. In der Evaluationsfunktion werden dann die Wahrscheinlichkeitsdistributionen der Variablen

für die Berechnung der Produktionsrate, und die Produktionsrate zur Berechnung der Robustheit benutzt.

Um die Methodologie ausführlich zu testen, wurden mehrere industriecrelevante Fallbeispiele verwendet. Listen von vielversprechenden Designs mit entsprechenden Beschreibungsindikatoren wurden innerhalb einer Stunde Rechenzeit generiert. Die verschiedenen Indikatoren erlauben Diskussionen und Bewertungen des Designs bezüglich weiterer Kriterien (z.B. Batchgrösse), die während der Optimierung nicht benutzt wurden. Die Lösungsansätze von unterschiedlichen kombinatorischen Problemstellungen kann man erfolgreich mit dem Superequipment Konzept verbessern. Die Fallbeispiele haben gezeigt, dass eine Rechenzeiterparnis gegenüber den konventionellen Methoden erreicht werden kann.

Die präsentierte Unsicherheitsbehandlung beider multikriterieller Optimierung demonstriert anhand mehrerer Fallbeispiele, welche der Prozessparameter einen bedeutenden Einfluss auf die Designproduktionsrate haben.

Die Methoden, die in dieser Arbeit vorgestellt werden, zeigen eine gute Anwendbarkeit, relativ niedrige Rechenzeiten und helfen bei den Entscheidungen im Rahmen der Integrierter Prozessentwicklung.