

Optimization models for design and operation of chemical batch processes

Doctoral Thesis

Author(s):

Ravemark, Dag Erik

Publication date:

1995

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-001591449>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Optimization Models for Design and Operation of Chemical Batch Processes



A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Technical Sciences

presented by
DAG ERIK RAVEMARK
MSc. Chem. Eng., Lund (Sweden)
born May 9, 1964
citizen of Illnau-Effretikon, ZH

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. K. Hungerbühler, examiner
Prof. Dr. I. E. Grossmann, co-examiner

Abstract

Batch and semi-batch processes are essential in the chemical processing industry. Products produced in batch plants range from simple agricultural chemicals to innovative, complex, high value pharmaceutical products. Batch processes can be readily scaled up from bench scale experimental data, designed from relatively modest engineering information and structured to handle multiple products whose individual production requirements are not large enough to justify the construction of a dedicated plant. Batch processes also offer a higher degree of production flexibility.

In this work the optimal preliminary grassroots design of a multi-product batch plant is addressed. In a multi-product plant several similar products are produced in the plant but usually only one product is produced at a time. This preliminary design problem arises when the physical steps in the product recipe are known and the different tasks, as defined by the recipe, are assigned to general purpose units. Now, a number of discrete decisions have to be made in order to determine an efficient design. The solution to the preliminary design problem that is obtained is intended to be a starting point for detailed mechanical design and actual plant layout.

In this thesis a number of models for the preliminary design of a batch plant are presented. The objective of these models is to minimize the capital cost of the plant. The structural alternatives that are considered for the design are; parallel batch units, parallel semi-continuous equipment items and the possible insertion of intermediate storage tanks.

The plant models, with their respective discrete decisions, are expressed as Mixed-Integer NonLinear Programming problems (MINLP). The MINLP models are solved with an implementation of the Outer-Approximation (OA) algorithm in the modeling language GAMS (Ge-

neral Algebraic Modeling System). An extension to the OA algorithm with convexity tests is suggested and tested.

In order to demonstrate the capability of the proposed models and solution techniques, a number of benchmark examples from the literature are solved. The obtained solutions for some of the benchmark problems are better than the previously "best" reported solutions.

The thesis consists of ten chapters. The first two chapters give an introduction to the batch processing area and the type of products that are typically produced in a batch plant. Chapter 3 presents a literature review. Chapter 4 describes the mathematical algorithm used to solve the formulated models. Chapter 5 describes how different alternatives are modeled on the stage level. Chapter 6 describes various plant-wide models. Chapter 7 develops a model when the task allocation is part of the optimization. Chapter 8 describes how a number of benchmark problems from the literature are solved and compares the solutions. Chapter 9 addresses the inherent parameter uncertainties at the design stage and in the operation of batch plants. A novel approach to the operation of a semi-batch reactor with uncertain models is presented. In Chapter 10 the achievements and the limitations of the work are discussed.

Kurzfassung

Diskontinuierliche Chargenprozesse, auch als Batchprozesse bezeichnet, sind von tragender Bedeutung für die chemische Industrie. Die Spanne von Produkten, die in Batchprozessen hergestellt werden, geht von einfachen Düngemitteln bis zu innovativen, komplexen und hochwertigen Pharmazeutika. Für Batchprozesse gestaltet sich die Übertragung vom Laboratoriums- zum Produktionsmasstab relativ einfach; ebenso kann eine bescheidenene Kenntnis der Prozessdaten als Basis dienen. Die Struktur der zugehörigen Anlagen kann für mehrere Produkte ausgelegt werden, für die es sich nicht lohnt, eine eigene Anlage zu betreiben. So ist auch eine höhere Flexibilität erreichbar.

Diese Arbeit befasst sich mit der optimalen vorläufigen Auslegung von Anlagen, die nacheinander mehrere ähnliche Produkte herstellen sollen. Das Problem der vorläufigen Auslegung stellt sich, sobald die Einzelschritte der Produkt-Herstellung bekannt und ihre Zuordnungen zu Standard-Anlageteilen vollzogen ist. Die Effizienz der Anlage hängt von einigen, nun zu treffenden, strukturellen Entscheidungen ab. Die Lösung dieses Problems der vorläufigen Auslegung wird dann zum Ausgangspunkt für die detaillierte Bestimmung des zu implementierenden Entwurfs.

In dieser Dissertation wird eine Anzahl von Modellen für die vorläufige Auslegung vorgestellt. Das Optimierungsziel ist jeweils die Minimierung der Kapitalkosten für die betrachteten Prozesse. Die strukturellen Entscheidungen umfassen: Parallele diskontinuierliche Prozess-Einheiten, parallele semi-kontinuierliche Einheiten und das Einschalten von Einheiten als Zwischenlager.

Die Modelle der Anlagen und die Formulierung ihrer zugehörigen strukturellen Entscheidungen werden ausgedrückt als gemischt-ganzzahlige nichtlineare Programmierungsprobleme (engl. mixed-integer nonlinear programming — MINLP). Diese werden gelöst mit ei-

ner Implementierung des OA-Algorithmus in GAMS. Eine Erweiterung des OA-Algorithmus zur Detektion/Transformation von nicht-konvexen Bedingungen wird vorgeschlagen und getestet.

Die Güte der vorgeschlagenen Methoden wird anhand von einigen gut bekannten Beispielen aus der Literatur ermittelt und mit bekannten Resultaten verglichen. Dabei werden die bekannten Lösungen zum Teil übertroffen.

Die Arbeit gliedert sich in 10 Kapitel: In den ersten beiden wird eine Einführung in das Feld der diskontinuierlichen chemischen Prozesse und deren Produkte gegeben. Ein Überblick zur bisherigen Literatur findet sich in Kapitel 3. In Kapitel 4 wird die zugrundeliegende Mathematik vorgestellt. Kapitel 5 erläutert die Modelle für strukturelle Alternativen im Kleinen, welche dann im Kapitel 6 auf neuartige Weise zu der Gesamtanlage zusammengefasst und modelliert werden. In Kapitel 7 wird ein neues Modell entwickelt für jene Fälle, in denen auch die Verteilung der Teilschritte auf verschiedene mögliche Anlageteile in die Optimierung einbezogen wird. Kapitel 8 löst wohlbekannte Beispiele aus der Literatur und vergleicht deren herkömmliche Lösungen mit denen der Methoden in den vorausgehenden zwei Kapiteln. In Kapitel 9 wird auf die oft unvermeidliche Unsicherheit in gewissen Parametern eingegangen, welche sowohl in der Entwurfs- als auch in der Betriebsphase einer Anlage existiert; es wird ein neuer Ansatz zur Verbesserung der Robustheit diesen Unsicherheiten gegenüber vorgeschlagen und in Simulation und Experiment evaluiert. Schliesslich werden die Schwerpunkte der Arbeit sowie deren Grenzen in Kapitel 10 zusammengefasst.