



## Guia docent

# 820542 - PSCPQ - Planificació i Programació d'Operacions de Processos Químics

Última modificació: 14/06/2023

**Unitat responsable:** Escola d'Enginyeria de Barcelona Est  
**Unitat que imparteix:** 713 - EQ - Departament d'Enginyeria Química.  
**Titulació:** GRAU EN ENGINYERIA QUÍMICA (Pla 2009). (Assignatura optativa).  
**Curs:** 2023      **Crèdits ECTS:** 6.0      **Idiomes:** Català, Anglès

## PROFESSORAT

**Professorat responsable:** MOISES GRAELLS SOBRE  
**Altres:** Segon quadrimestre:  
MOISES GRAELLS SOBRE - T10  
ANA SOMOZA TORNOS - T10

## COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

### Específiques:

3. Capacitat per analitzar, dissenyar, simular i optimitzar processos i productes.
4. Capacitat per dissenyar, gestionar i operar procediments de simulació, control i instrumentació de processos químics.

### Transversals:

1. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 3: Tenir en compte les dimensions social, econòmica i ambiental en aplicar solucions i dur a terme projectes coherents amb el desenvolupament humà i la sostenibilitat.
6. TERCERA LLENGUA: Conèixer una tercera llengua, que serà preferentment l'anglès, amb un nivell adequat de forma oral i per escrit i amb consonància amb les necessitats que tindran les titulades i els titulats en cada ensenyament.

## METODOLOGIES DOCENTS

Lliçó magistral (50%) i aprenentatge actiu davant l'ordinador (50%).

## OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

En relació a l'operació de processos químics (continus, semicontinus i batch):

1. Aprendre a pensar i formular problemes d'optimització relacionats amb l'assignació de recursos sota restriccions.
2. Aprendre a utilitzar les eines computacionals disponibles per a la solució (òptima o sub-òptima) d'aquests problemes.
3. Aprendre a utilitzar les solucions d'aquests problemes com a suport a la presa de decisions.

## HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	60,0	40.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

**Dedicació total:** 150 h



## CONTINGUTS

### TEMES 1-5

#### Descripció:

1. Introduction to Modelling and Optimization (2h). Decision-making and tools: modelling, simulation, optimization. Definitions: Model, variable, parameters, constraints and objective function. Model limitations and model levels. Optimality and sub-optimal results. Divide and conquer. Computing time as a problem variable. Preliminary calculations: estimating, bounding and heuristics. Exercises.
2. Introduction to Process Planning and Scheduling (2h). Process flexibility and resource allocation. The Design-Operation Paradigm. Time independent problems and time dependent problems: continuous processes, semi-continuous processes and batch processes. Short-term decisions and long-term decisions. Reactive scheduling. Information flow through levels and models. Review exercises.
3. Continuous Processes (4h). Blending and flowsheeting problems. Introduction to linear programming (LP) and optimization: graphical interpretation. Importance of constraints. Problem definition. Modelling and solving with MS-Excel (Solver). Optimization tools: LP sensitivity analysis. Exercises using EXCEL (Blending.xls, Refynery.xls, Alkyl.xls).
4. Semi-Continuous processes (4h). Standard problems: the transportation problem. Formulation and solution using Solver. Semi-continuous processes: parallel production lines (extruders, fed-batch reactors, etc.). Assignment of time to lines. Model limitations (changeovers and sequencing, etc.). Study and discussion of possible objective functions. Analysis and decision-making. Exercises using EXCEL (Transport.xls, Production\_lines.xls, Solver\_tester.xls).
5. Assignment problems (4h). Introduction to GAMS. Solving the transport and the parallel lines problems using GAMS. Comparing GAMS and the Excel Solver. Standard problems: the knapsack problem. Introduction to integer programming (MIP). Exercises using GAMS (Trnsport.gms, knpsk.gms).

#### Dedicació: 50h

Grup gran/Teoria: 10h

Grup petit/Laboratori: 10h

Aprenentatge autònom: 30h



## TEMES 5-10

### Descripció:

6. Sequencing problems I (4h). Introduction to set-up and cleaning needs. Constant and sequence dependent changeover times. The changeover matrix. Simulation using EXCEL.

7. Dynamic processes (4h). A first-order kinetics model. Ordinary Differential Equations using Excel (Euler Method). Optimization of the operation of a batch reactor. Objective function: introduction to cyclic operations, idle time and cycle time. Maximum operation performance. Maintenance planning. Exercises using Excel (Maintenance.xls).

8. Introduction to discontinuous processes (4h). Need for the batch-wise operation mode: batch chemical process industries. Concepts and definitions: batch size, cycle time and size factor. Debottlenecking: identification of time and size limiting stages. The Gantt chart. Detail of the model and granularity. Exercises and preliminary hand calculations.

9. Design of batch processes I (4h). The single-product line. Simulation and study of the production line: effect of parallel units, in-phase, out-of-phase, semi-continuous units and intermediate storage. Equipment sizing. Constant processing time and batch-size dependent processing time. Exercises using Excel (Batch.xls, Hydrogenation.xls).

10. Design of batch processes II (4h). Equipment reuse: time-window and need of storage. Plant retrofitting. The multiproduct-product case. Campaign planning. Optimization: MILP problems and Branch and Bound procedures Exercises using Excel (Roblon.xls, B&B.xls) and GAMS (batchdes.gms).

### Objectius específics:

En relació a l'operació de processos químics batch:

1. Aprendre a pensar i formular problemes d'optimització relacionats amb l'assignació de recursos sota restriccions.
2. Aprendre a utilitzar les eines computacionals disponibles per a la solució (òptima o sub-òptima) d'aquests problemes.
3. Aprendre a utilitzar les solucions d'aquests problemes com a suport a la presa de decisions.

### Activitats vinculades:

Pensar i formular problemes d'optimització.  
Resoldre els problemes en EXCEL i GAMS.

### Dedicació: 50h

Grup gran/Teoria: 10h

Grup petit/Laboratori: 10h

Aprenentatge autònom: 30h



## TEMES 11-15

### Descripció:

11. Storage. Storage needs for adjusting production sub-trains: matching continuous and batch processes. Storage policies in batch processing: ZW, FW, UIS, FIS. Storage location and sizing. The Lowest Storage Level Rule (LSL). Exercises using Excel (Roblon.xls, B&B.xls) and GAMS (batchdes.gms).

12. Sequencing problems II (4h). The Travelling Salesman Problem (TSP). Problem formulation. Limitation of the solution time, decision making and need for sub-optimal solutions. Greedy heuristics. Metaheuristics and stochastic methods. Developing and programming algorithms: the MSES method. Exercises using Excel (TSP.xls).

13. Scheduling of batch processes I (4h). Elementary formulations for the multiproduct case. Basic sequencing and assignment variables. Binary variables and problem size. Time discretization. Enhanced formulations: time slots, the State Task Network (STN). Formulation exercises using GAMS.

14. Scheduling of batch processes II (4h). Advanced model development. Representing logical constraints: from Big-M to disjunctive programming. Enhanced formulations and tricks: introducing cuts, tightening relaxations, breaking symmetry, tuning parameters, etc. Formulation exercises using GAMS.

15. Detailed scheduling of batch chemical processes (8h). Review of available commercial software: BatchPlus (AspenTech), SuperPro & SchedulePro (Intelligen Inc.), etc. Recipe management standards: the ISA88. Development of a case study simulation and debottlenecking problem in the biotechnological or pharmaceutical industry.

### Objectius específics:

En relació a l'operació de processos químics complexos i híbrids (continu/batch):

1. Aprendre a pensar i formular problemes d'optimització relacionats amb l'assignació de recursos sota restriccions.
2. Aprendre a utilitzar les eines computacionals disponibles per a la solució (òptima o sub-òptima) d'aquests problemes.
3. Aprendre a utilitzar les solucions d'aquests problemes com a suport a la presa de decisions.

### Activitats vinculades:

Pensar i formular problemes d'optimització.  
Resoldre els problemes en EXCEL i GAMS.

### Dedicació: 50h

Grup gran/Teoria: 10h

Grup petit/Laboratori: 10h

Aprenentatge autònom: 30h

## SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

S

## BIBLIOGRAFIA

### Bàsica:

- Edgar, Thomas F.; Himmelblau, David Mautner; Lasdon, Leon S. Optimization of chemical processes. 2nd ed. Boston [etc.]: McGraw-Hill, cop. 2001. ISBN 0070393591.
- Biegler, Lorenz T.; Grossmann, Ignacio E.; Westerberg, Arthur W. Systematic methods of chemical process design. Upper Saddle River (New Jersey): Prentice Hall PTR, cop. 1997. ISBN 0134924223.
- Mah, Richard S. H. Chemical process structures and information flows. Boston [Mass.] [etc.]: Butterworths, cop. 1990. ISBN 0750692308.