

METODOLOGIA MULTICRITERIO PARA EL DISEÑO DE PROCESOS QUIMICOS

RESUMEN

Se propone y desarrolla una metodología alternativa de diseño de procesos multicriterio utilizando como caso de estudio el diseño de un sistema de generación de hidrógeno a escala de laboratorio. La metodología propuesta desarrolla cuatro etapas: definición de los criterios de diseño, análisis de las variables de operación, construcción y solución del modelo matemático. Desde el punto de vista metodológico se demuestra que la decisión final de diseño se ve fuertemente influenciada por el número y calidad de criterios de diseño que se consideren, evidenciando así la necesidad de mejorar las metodologías de diseño convencionales de la ingeniería.

PALABRAS CLAVE: Diseño de procesos, optimización multiobjetivo, reactores químicos, hidrógeno.

ABSTRACT

An alternative methodology of multicriteria process design is proposed and developed using the design of a hydrogen generation system at lab scale like study case. The methodology proposed here have four stages: setting of design criteria, operational variables analysis, building and solution of mathematical model. From a methodological point view, is demonstrated that the final design decision is strongly influenced for the number and kind of design criteria selected, showing clearly the need to improve the conventional methodology of process design into the engineering.

KEYWORDS: *Process design, multicriteria optimization, chemical reactors, hydrogen.*

IVAN DARIO ORDOÑEZ

Ingeniero Químico
Estudiante Ph.D.
Universidad Industrial de Santander
dociq7@uis.edu.co

EDGAR CASTILLO

Ingeniero Químico, Ph.D.
Profesor titular
Universidad Industrial de Santander
efcastil@uis.edu.co

CLEMENTE RETAMOSO (Q.E.P.D.)

Ingeniero Químico, Ms.C.
Profesor Titular
Universidad Industrial de Santander

1. INTRODUCCIÓN

Las necesidades actuales y futuras del diseño de procesos químicos requieren metodologías que agrupen un mayor número de criterios para que los ingenieros encuentren diseños que cumplan simultáneamente con un mayor número de especificaciones de diferentes naturalezas como lo son las necesidades económicas, ambientales, sociales, entre otras.

Una revisión somera de la literatura especializada muestra que la principal preocupación ha sido optimizar los criterios económico-ambientales cuya condición óptima se logran en estados de operación generalmente opuestos [5]. La técnica más utilizada se conoce como optimización multiobjetivo y existen dos versiones importantes de ella: La primera reduce el problema de diseño a la optimización a un solo objetivo (generalmente el económico) y trata el otro objetivo (el problema ambiental) como una restricción de la función objetivo [3, 8]. La segunda es conocida como la Curva de Pareto, la cual se construye a partir de una función objetivo que es la suma lineal de cada criterio multiplicada por un peso [6, 20, 22]. Estas metodologías muchas veces no representan de manera realista cada uno de los criterios de diseño, desbalanceando con ello el sentido práctico de los resultados de la optimización. Por

otro lado, estas metodologías consumen muchos recursos computacionales y solo puede ser usadas para problemas con funciones objetivo no convexas.

Para abarcar toda la gama de criterios de diseño que se deseen, la metodología que aquí se propone parte del principio de la optimización de un modelo matemático, el cual debe componerse de una función objetivo factible de optimizar y que represente en iguales términos dimensionales a todos los criterios de diseño. Complementando la función objetivo estarán las restricciones de proceso en función de las variables independientes y dependientes del proceso. Este trabajo muestra a manera de ejemplo la aplicación de la metodología mencionada por medio del diseño de un Sistema de generación de hidrógeno para el Laboratorio de Investigación en Celdas de Combustible de la Universidad Industrial de Santander, donde el reactor catalítico de Reformado de Vapor con Metano constituye el corazón de todo el Sistema.

2. METODOLOGÍA DE DISEÑO MULTICRITERIO

La metodología propuesta consta de cuatro etapas para el diseño de todo el Sistema de generación de hidrógeno en

función del desempeño del reactor de reformado. Dichas etapas son (Ver Figura 1):

- 1) Definición de los criterios de diseño
- 2) Análisis de las variables de operación
- 3) Construcción del modelo matemático
- 4) Solución del modelo matemático.

Primera etapa: Definición de los criterios de diseño.

Determina los criterios a tener en cuenta y desde los cuales se evaluará el diseño del Sistema. El concepto convencional de diseño de reactores y plantas químicas está fuertemente influenciado solo por criterios económicos y algunas consideraciones de seguridad industrial. La metodología propuesta permite incluir otros criterios como pueden ser los criterios ambientales, los de eficiencia, entre otros.

Segunda etapa: Análisis de las variables de operación.

Se definen los balances de masa, energía, las variables independientes (susceptibles a optimizar) y las variables dependientes. Para ello, las variables de operación se analizan a la luz de las limitaciones termodinámicas, cinéticas y de cualquier otro tipo que se considere conveniente.

Tercera etapa: Construcción del modelo matemático.

Esta etapa define un modelo matemático que conste de una

función objetivo y un conjunto de restricciones de diseño. La función objetivo debe constituir la sumatoria de unos factores representativos de los criterios de diseño de acuerdo con su importancia sobre el diseño en términos simples y cuantificables; la forma más adecuada para el lenguaje ingenieril es una función algebraica de costos.

Algunos de los términos que componen la función son costos reales del proceso (por ejemplo, costos de capital y de operación), mientras que otros términos son funciones de castigo, cuyo objetivo es penalizar aquellas soluciones que no cumplan algunos criterios importantes de un diseño y que normalmente no se cuantifican en dinero dentro de un proceso (por ejemplo, legislaciones ambientales, gasto exergético, etc.). Las restricciones de diseño, por su parte, pueden considerarse como la descripción cuantitativa del análisis de las variables de operación realizado en la segunda etapa.

El modelo matemático resultante puede ser de varios tipos: lineal, no lineal, con variables continuas o discretas, con ecuaciones diferenciales o parciales o bien una combinación de ellos. La complejidad dependerá del grado de conocimiento exacto de las variables independientes y dependientes consideradas.

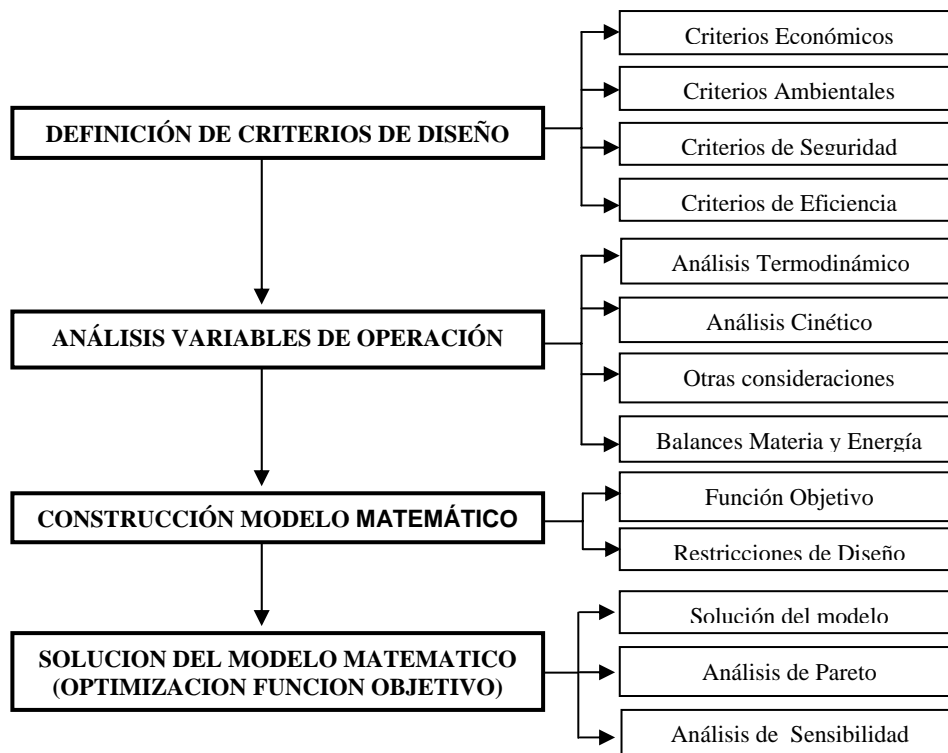


Figura 1. Esquema de la metodología aplicado a cualquier caso de estudio en general.

Cuarta etapa: Solución del modelo matemático. Se construye un algoritmo de búsqueda para la solución del modelo matemático. Obviamente, la dificultad del método

de solución es proporcional a la complejidad del modelo. Un análisis de Pareto y el consecuente análisis de sensibilidad constituyen herramientas valiosas para

caracterizar las principales variables de operación que influyen en los resultados y concluir información útil sobre la solución al modelo matemático.

3. CASO DE ESTUDIO

Sistema de Generación de Hidrógeno

La Figura 2 muestra el Sistema de generación de hidrógeno propuesto para asegurar el suministro de 2/3 litro/minuto ($1.11 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$) de hidrógeno requeridos según las necesidades del laboratorio. Las materias primas (Gas natural y vapor de agua) provenientes del servicio público son llevadas a las condiciones de reacción por diferentes equipos (compresor, intercambiadores de calor, caldereta, etc.) e ingresan al reactor de reformado. El gas producto pasa a través de un separador de membranas con el objeto de separar el hidrógeno de los subproductos y reactivos remanentes. Una pequeña red de intercambiadores de doble tubo permite maximizar el uso de la energía térmica de las corrientes de entrada y salida del reactor de reformado [2, 9, 10, 13]. Todos los equipos mencionados son dimensionados en función de las condiciones de operación del reformador.

Este trabajo evaluará tres sistemas de generación de hidrógeno, cuya única diferencia esencial es la configuración del reactor de reformado [1, 14]. Las configuraciones de reactor consideradas son:

- Reactor convencional de lecho fijo con suministro de energía de una fuente externa (Plug Flow Reforming Reactor PFRR).
- Reactor intercambiador de calor con suministro de energía mixta, tipo bayoneta (Reforming Heat Exchanger Reactor RHER).
- Reactor de membrana permeable con suministro de energía de fuente externa (Reforming Membrane Reactor RMR).

4. DESARROLLO DE LA METODOLOGIA DE DISEÑO

Para el presente caso de estudio se define que la primera etapa involucra cuatro criterios de diseño: Económicos, Ambientales, de Seguridad industrial y de Eficiencia del sistema. Los Criterios por Economía evaluarán el concepto convencional de los costos del proceso (costos de capital y operación). El Criterio por Eficiencia buscará tener en cuenta el desempeño mismo del Sistema evaluando el aprovechamiento máximo tanto de las materias primas y los productos (potencial químico) como los intercambios energéticos en el diseño del Sistema (potencial energético). El Criterio Ambiental considerará las emisiones a las que el ambiente y la vida humana están expuestas como resultado de los subproductos del proceso. El Criterio de Seguridad se verá reflejado en la selección de materiales y el potencial de riesgo a la salud. Estos últimos están implícitamente evaluados al determinar el costo de capital y el costo por emisiones ambientales respectivamente.

Como parte de la segunda etapa de la metodología se definen las variables independientes de operación para las tres configuraciones de reactor de reformado, tales como: Flujo de gas de alimento, temperatura del gas de alimento, presión del gas alimento, temperatura de la pared externa del tubo del reactor, relación vapor/metano (S/M) en el alimento, tubo del reactor (metalurgia y dimensiones), tamaño de la partícula del catalizador, relación área transversal anulo / área transversal tubo y la presión de entrada de la corriente de gas de barrido para el RMR.

Como parte de la tercera etapa, el modelo matemático de manera simplificado puede representarse como:

Función objetivo:

$$f(X, Y) = \sum C_i \quad (1)$$

Sujeto a:

Ecuaciones diferenciales

$$G'(X, Y) = 0 \quad (2)$$

Variables continuas

$$h_{min} \leq H(X) \leq h_{max} \quad (3)$$

Variables discretas

$$K(Y) = [k_1, k_2, k_3, \dots, k_n] \quad (4)$$

Este modelo matemático resultante es un problema de Programación Mixta No Lineal Mixto (PMNL) donde la función objetivo (1) representa cuantitativamente el costo de generación de hidrógeno por unidad de volumen producido ($\$/\text{m}^3 \text{ H}_2$) de acuerdo con los criterios de diseño establecidos y donde cada C_i es el costo representativo de cada criterio de diseño tal como lo propuso [12].

Cada criterio se evalúa en términos que no son necesariamente consistentes dimensionalmente hablando. Por tanto, se requiere que algunos de los criterios sean multiplicados por un valor de costo equivalente para que cada criterio se transforme en términos de costos ($\$/\text{m}^3 \text{ H}_2$). El costo por el criterio Económico es un costo de efecto real, por lo cual no requiere un valor de costo equivalente. El costo por el criterio por Eficiencia es un costo de penalización y se cuantifica como el costo en dinero de la cantidad de hidrógeno que se deja de producir por no alcanzar la conversión máxima posible y por el costo en dinero de la cantidad de energía que no es posible aprovechar en la integración del proceso. El costo por el Criterio Ambiental es un costo de penalización y requiere un valor de costo equivalente. Este costo se mide en función del Índice Ambiental (IA) basado en criterios de la técnica del Ciclo de Vida de los productos (LCA) [19]. El costo equivalente para este caso fue estimado en un valor tal que igualara en $\$/\text{m}^3 \text{ H}_2$ al valor generado en el Criterio Económico de un caso de diseño previamente validado. El costo del criterio de Seguridad también es un costo del mismo tipo que el Ambiental y se halla implícito en los

costos de capital y de emisiones como se mencionó anteriormente. La ecuación (2) representa los balances de materia y energía en forma de ecuaciones diferenciales en función de la longitud del reactor. Las variables independientes y dependientes pueden ser de naturaleza continua (X) ó discreta (Y) y sus rangos de validez están representados por las funciones $H(X)$ (3) y $K(Y)$ (4) respectivamente. En la Figura 2 se puede observar de manera más detallada la estructura conceptual de la función objetivo.

Para la cuarta etapa se diseña una herramienta computacional soportada en una interface Excel VB versión 7.0® que contiene cuatro algoritmos anidados (algoritmo Branch & Bound, Complex, regla de oro y Runge- Kutta), los cuales ejecutan la estrategia de optimización para la solución del modelo. En [11] se desarrolla de manera más detallada cada una de las etapas mencionadas.

5. RESULTADOS

Cada uno de los tres Sistemas de generación con su respectivo reactor fueron sometidas al algoritmo de solución PMNL y los resultados se muestran en la Tabla 1. Casi todas las variables independientes de operación de las configuraciones óptimas para los reactores de reformado se hallaron cuantitativamente entre valores bajos y moderados (Véase Tabla 1). Según esta misma tabla, el Sistema de generación de hidrógeno con el reactor convencional PFRR es el mejor diseño.

Es obvio que durante el diseño de un reactor se deseen alcanzar las condiciones más cercanas posibles al equilibrio químico y termodinámico; Para el caso de la tecnología de reformado de vapor con metano las condiciones que lo favorecen se encuentran a muy bajas presiones y muy altas temperaturas [16, 17]. Por tanto, se consideraría perjudicial para la conversión de la reacción emplear entre moderadas y altas presiones. Sin embargo, los reactores PFRR y RHER demuestran que en tales condiciones obtener no tan altas conversiones puede favorecer el costo del diseño ya que manipulando el flujo de gas en el alimento y el diámetro de tubo se logran relaciones volumen del lecho/costo suficientes como para lograr reactores más pequeños (Ver Tabla 1).

Análisis de Pareto

Este análisis destaca las variables que más influyen individualmente sobre los resultados de la función objetivo. Un primer cuadro de Pareto a los resultados muestra que el costo de mayor influencia para todas las tecnologías es el costo económico (Ver Tabla 2). Sucesivos Paretos dentro del costo económico de cada configuración permiten destacar que en promedio el 74% corresponden a los costos de operación y dentro de éste es el costo por mano de obra ampliamente el factor de mayor peso (90% en promedio).

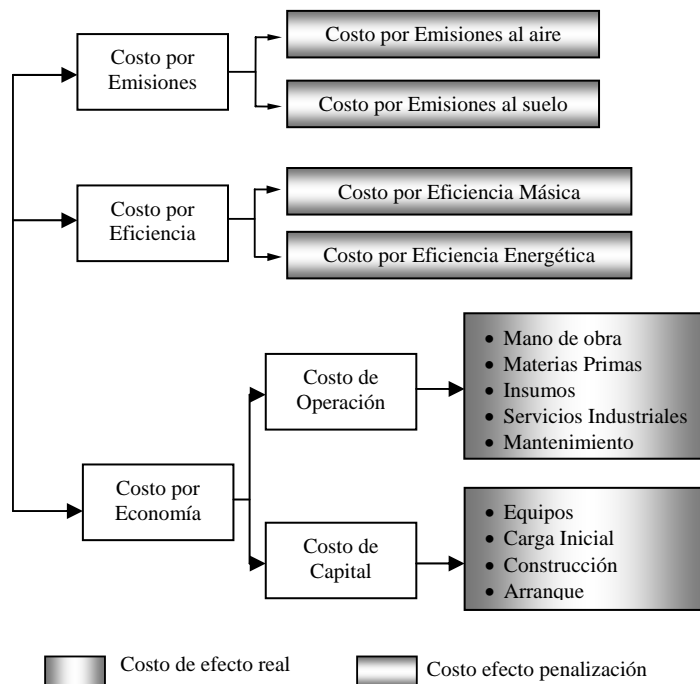


Figura 2. Estructura de la función objetivo

	Unidades	PFRR	RHER	RMR
Función Objetivo	\$/ m ³ H ₂	70,777	72,676	72,206
Flujo metano alimento	mol/s	2.50*10 ⁻⁴	1.66*10 ⁻⁴	1.52*10 ⁻⁴
Temperatura alimento	K	694	766	580
Presión alimento	Pa	268510	434680	144895
Temperatura pared tubo	K	943	1226	1170
Relación Vapor/Metano	-	3.60	4.98	3.22
Diámetro de partícula	m	3.05*10 ⁻³	3.05*10 ⁻³	3.05*10 ⁻³
Diámetro Tubo	m	1.90*10 ⁻²	1.27*10 ⁻²	1.27*10 ⁻²
Relación A/A _a	%	-	1.34	1.48
Temp. Tope Tubo Interior	K	-	857	1170
Presión Gas Barrido	Pa	-	-	75994
F _{N2} / Flujo CH _{4,0}	%	-	-	11.52%
Altura del Reactor	m	29.70*10 ⁻²	22.48*10 ⁻²	49.13*10 ⁻²
Conversión alcanzada	%	53.88	86.95	98.17

Tabla 1. Configuraciones óptimas para los diferentes Sistemas con reactores de reformado.

Este Pareto sucesivo permite inferir que el costo de mano de obra es el de mayor influencia en general dentro del proceso. En términos rigurosos y para las circunstancias de operación dentro del laboratorio, este costo por mano de obra es irreducible. Lo anterior es un fuerte indicio de que el volumen de producción es muy bajo para la mano de obra empleada.

Por otra parte, el Costo por Eficiencia y por Emisiones influye de gran manera en la decisión final de diseño. La Tabla 2 muestra que el menor costo por Economía lo posee el RHER, mientras que el menor Costo por Eficiencia y por Emisiones lo posee el RMR. Claramente el reactor PFRR no posee individualmente los menores Costos por Economía, ni por Eficiencia, ni por Emisiones de las tres configuraciones y sin embargo en suma constituye el menor costo de todos los tres reactores. Como se observa en la Tabla 3, si se emplea el criterio convencional (Costo por Economía exclusivamente) combinado con uno de los criterios adicionales propuestos en este trabajo, las decisiones de diseño podrían ser completamente diferentes. El reactor que aprovecha mayor su potencial es el reactor RMR ya que posee los Costos por Eficiencia mucho más bajos que las demás configuraciones e inclusive también tiene los menores Costos por Emisiones. A pesar de poseer estas ventajas, el reactor de membranas RMR no constituye la mejor opción debido al altísimo Costo por Economía que genera (el mayor de todas las configuraciones). El RHER constituye de acuerdo con los criterios convencionales de diseño la mejor opción ya que posee el Costo por Economía

más bajo (Ver Tabla 3). Sin embargo, el RHER es la peor opción desde el punto de vista de la metodología propuesta. Los anteriores resultados demuestran que la calidad y cantidad de criterios que se combinen influyen enormemente en la decisión de diseño y que a pesar del bajo porcentaje de peso de los Costos por Eficiencia y por Emisiones, estos sí influyen en la decisión de diseño.

Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad estudia el comportamiento de la función objetivo ante las variaciones importantes de las variables más destacadas en el análisis de Pareto. Para el presente caso de estudio, se realiza un análisis de sensibilidad sobre el costo por m³ de hidrógeno producido. La Tabla 4 muestra que el costo por m³ de hidrógeno producido disminuye significativamente con un aumento del volumen de producción suponiendo que el costo por mano de obra se puede mantener constante. Además, la decisión de diseño puede afectarse fuertemente favoreciendo en la mayoría de los casos al reactor de membranas RMR. Mientras el PFRR y el RHER para producir 4.8*10⁻⁵ m³/s (3 l/min.) promedian una disminución máxima del 60% respecto al caso base 1.1*10⁻⁵ m³/s (2/3 l/min.), el RMR logra una disminución cercana al 77%. Lo anterior sugiere que el RMR constituiría la mejor opción si se aumentara moderadamente la escala del reactor.

	PFRR		RHER		RMR	
	[\$ / s]	%	[\$ / s]	%	[\$ / s]	%
Costo Función Objetivo	\$ 0.820		\$ 0.842		\$ 0.8369	
Costo Económico	\$ 0.669	81.65%	\$ 0.670	79.30%	\$ 0.7300	87.24%
Costo Eficiencia	\$ 0.016	1.90%	\$ 0.047	5.86%	\$ 0.0005	0.06%
Costo Emisiones	\$ 0.135	16.55%	\$ 0.125	14.84%	\$ 0.1064	12.70%

Tabla 2. Cuadro de Pareto para los costos de la función objetivo de los reactores de reformado.

	PFRR	RHER	RMR	Mejor Reactor
Costo a tener en cuenta	[\$ / s]	[\$ / s]	[\$ / s]	
Económico	\$0.6694	\$0.6683	\$0.7300	RHER
Económico + Eficiencia + Emisiones	\$0.8200	\$0.8427	\$0.8369	PFRR
Económico + Eficiencia Másica	\$0.6841	\$0.7169	\$0.7300	PFRR
Económico + Eficiencia Energética	\$0.6702	\$0.6688	\$0.7305	RHER
Económico + Emisiones	\$0.8044	\$0.7933	\$0.8363	RHER

Tabla 3. Efecto de la combinación de los Costos en la decisión de diseño.

Volumen de Producción	PFRR		RHER		RMR	
	[\$ / m ³ H ₂]	%Cambio	[\$ / m ³ H ₂]	%Cambio	[\$ / m ³ H ₂]	%Cambio
0.8*10 ⁻⁵ m ³ /s (0.5 l/min)	\$ 96,705	36.51%	\$ 94,176	29.17%	\$ 89,578	23.91%
1.11*10 ⁻⁵ m ³ /s (2/3 l/min)*	\$ 70,842		\$ 72,908		\$ 72,295	
3.2*10 ⁻⁵ m ³ /s (2 l/min)	\$ 34,934	-50.69%	\$ 51,785	-28.97%	\$ 23,038	-68.13%
4.8*10 ⁻⁵ m ³ /s (3 l/min)	\$ 28,940	-59.15%	\$ 25,896	-64.48%	\$ 16,641	-76.98%

Tabla 4. Sensibilidad del volumen de producción de hidrógeno en la función objetivo. *Caso Base

6. CONCLUSIONES

La desventaja de diseñar a pequeña escala, como el caso propuesto en este trabajo, radica en la preponderancia de los costos fijos (mano de obra, por ejemplo) sobre los costos variables que son precisamente más susceptibles de optimizar. Mientras aumente el volumen de producción y la escala sea mayor, los costos fijos pierden importancia y los costos variables pueden ser optimizados mediante la manipulación de las variables independientes de operación. Se ha demostrado en este trabajo que no necesariamente la selección de las mejores condiciones termodinámicas ofrecen los mejores costos de producción, ni tampoco necesariamente el reactor que aproveche más su potencial químico y energético es el más económico, ni siempre se cumple que el reactor más económico es aquel que potencialmente contamina más el ambiente. Todo lo anterior valida la idea de que la metodología de diseño convencional no abarca todos los aspectos que hoy en día se deben tener en cuenta en un diseño y se hace imperioso continuar generando metodologías de diseño que agrupen criterios más acordes con las necesidades actuales y futuras de manera sistemática y simple.

NOTA: Los autores desean expresar su especial reconocimiento a la memoria del profesor Clemente Retamoso (Q.E.P.D), coautor de este trabajo.

7. BIBLIOGRAFIA

- [1] ADRIS, A.M y otros. Can. J. Chem. Eng., Vol.. 74, 1997; p 177-187.
- [2] BARBIERI, Giuseppe y DI MAIO, Francesco. Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 36, 1997; pp. 2121-2127.
- [3] BRODESKYM, SF; HAHN, RW. IEEE Trans. Power Syst. Vol.. 1, 1986; pp. 57-62.
- [4] CHANG, CS y otros. IEE Proc.—Gener. Transm. Distrib. Vol.. 142, 1995; pp. 406-414.

- [5] CIRIC, A; JIA, T. ILEC Special Symposium on Emerging Technologies in Hazardous Waste Management, Septiembre 1992.
- [6] DHILLON, JS y otros. Electr. Power Syst. Res. Vol.. 26, 1993; pp. 179-186.
- [7] FARAG, A. y otros. IEEE Trans. Power Syst. Vol.. 10, 1995; pp. 731-738.
- [8] GRANELLI, GP y otros. Electr. Power Syst. Res. Vol.. 24, 1992, pp. 56-64.
- [9] MADIA, Guisepe y otros. Can. J. Chem. Eng., Vol. 77, 1999, pp. 798-707.
- [10] MEZIOU, A.M. y otros Int. J. Hyd. Ener., Vol.. 20, 1995, pp.187-192.
- [11] ORDOÑEZ S., Iván. Trabajo grado Ing. Química. Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga, 2001. 110 páginas.
- [12] SCHAACK J.A. y CHAN, F. Oil & Gas J. Vol.. 27, 1989, pp. 90-91.
- [13] SHU, Jun y otros. App. Cat. A: General, Vol.. 119, 1994, pp. 305-325.
- [14] SOGGE, J y STROM, T. Natural Gas Conversion IV. Vol.. 107, 1997, pp. 328-331.
- [15] SOLIMAN, M.A. y otros. Chem. Eng. Sci., Vol.. 43, 1988, pp. 1801-1807.
- [16] SOLIMAN, M.A. y otros. Chem. Eng. Sci., Vol.. 45, 1990, pp. 491-501.
- [17] TINDALL, B.M. y CREWS, M.A.. Hydroc. Process.. 1995, pp 75 - 81.
- [18] TWIGG, Martyn. Catalyst Handbook. Londres: Wolfe Publishing, Segunda Edición, 1989. pp. 230-283.
- [19] United Nations Environment Program (UNEP): Lyfe Cycle Assessment, 1996.
- [20] XU, JX y otros. IEE Proc.—Gener. Transm. Distrib. Vol.. 143, 1996, pp. 435-446.
- [21] XU, Jianguo y FROMENT, Gilbert. AIChE Journal, Vol.. 35, 1989, pp. 88-92.
- [22] ZAHAVI, J; EISENBERG, L. IEEE Trans. Syst. Man. Cybernet Vol.. 5, 1985, pp. 485-489.