technische universität
dortmund

SCHRIFTENREIHE DES
LEHRSTUHLS FÜR
SYSTEMDYNAMIK UND PROZESSFÜHRUNG

Band 3/2022

Reinaldo Enrique Hernandez Rivas

Contributions to Real-time Optimization of Process Systems under Uncertainty

Fakultät Bio- und
Chemieingenieurwesen

Contributions to Real-time Optimization of Process Systems under Uncertainty

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Dr.-Ing.

von der Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen
der Technischen Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Reinaldo Enrique Hernández Rivas, M.Sc.

aus

Barinas, Venezuela

Tag der mündlichen Prüfung: 29. April 2022

1. Gutachter: Prof. Dr. Sebastian Engell
2. Gutachter: Prof. Dr. Johannes Jäschke

Dortmund 2022

Schriftenreihe des Lehrstuhls für
Systemdynamik und Prozessführung
herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell

Band 3/2022

Reinaldo Enrique Hernandez Rivas

Contributions to Real-time Optimization of Process Systems under Uncertainty

D 290 (Diss. Technische Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Düren 2022

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek
The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at http://dnb.d-nb.de.

Zugl.: Dortmund, Technische Univ., Diss., 2022

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8797-0
ISSN 1867-9498

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren
Phone: 0049/2421/99011-0 • Telefax: 0049/2421/99011-9
Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Acknowledgment

First, I would like to express my gratefulness to my supervisor Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell for giving me the unique opportunity of working under his supervision and for his constant support, encouragement and advice during these years. I would also like to thank Prof. Jäschke who agreed to co-referee this thesis. I would also like to express my deep gratitude to Prof. Agar and Prof. Vogt for being members of my PhD exam committee.

This work has been supported by the German Research Foundation (*Deutsche Forschungsgemeinschaft*, DFG) thorough the Collaborative Research Center "Integrated Chemical Processes in Liquid Multiphase Systems"- InPROMPT (TR63). It was a delightful experience to work in such an interdisciplinary project. Specially, I would like to thank Prof. Dr. rer. nat. Arno Behr, PD Dr. Andreas Vorholt and Dr.-Ing. Jens Dreimann for the support provided during the experimental part of this thesis at the Laboratory of Industrial Chemistry.

I would like to thank all my colleagues at the Group of Process Dynamics and Operations. They have contributed through numerous discussions and useful ideas to this dissertation. In particular, I would like to thank Dr. Weihua Gao with whom I collaborated in a few publications. I also would like to express my deepest gratitude to Doc. Ing. Radoslav Paulen for inciting me to undertake a PhD and for the fruitful discussions along all these years. I am also very grateful to all the students that I supervised.

I would like to thank my wife Robyn for her support, understanding and love. I would like to thank my family and friends for their continuous support.

Eidesstattliche Erklärung. Statutory Declaration

Eidesstattliche Erklärung Ich erkläre an Eides statt, dass die vorliegende Dissertation in allen Teilen von mir selbständig angefertigt wurde und die benutzen Hilfsmittel vollständig angegeben worden sind.

Statutory Declaration I hereby declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

Abstract

Real-time Optimization (RTO) has become the standard approach for improving plant performance in many petrochemical plants. In RTO, usually a first principle-based steady-state process model is used to formulate and solve a model-based optimization problem to compute the optimal operating conditions which maximize the economic performance of the plant while satisfying safety, process, and environmental constraints. However, despite its proclaimed benefits, the implementation of model-based online optimization is still limited to relatively few cases. One of the main reasons is the issue of model-plant mismatch: By using an inaccurate model, the computed operating point will be suboptimal and, in the worst scenario, the constraints can be violated.

This dissertation attempts to overcome some of the difficulties that the process industry is currently facing in the deployment of RTO with inaccurate models. This work builds on the main idea of iterative correction of the nominal optimization problem with the estimated plant gradients according to the principle of Modifier Adaptation (MA) algorithm and provides several methodological contributions to overcome some of its limitations. First, trust-region optimization is combined with the traditional MA approach with the goal of ensuring convergence to the plant optimum under relatively mild assumptions regarding the properties of the available model. Second, a new algorithm is presented for those cases where in addition to model uncertainties, the plant measurements are contaminated with significant levels of noise. Third, two approaches to fast RTO are investigated to combine dynamic information with the available process model resulting in a faster convergence to the plant optimum. Experimental results in a miniplant for hydroformylation of long-chain alkenes showed the potential benefits of using iterative optimization for improving plant performance.

Zusammenfassung

Real-Time Optimization (RTO) hat sich zum Standard entwickelt, um die Leistung petrochemischer Anlagen zu erhöhen. Bei dem Einsatz von RTO werden normalerweise physikalisch-chemisch begründete stationäre Prozessmodelle eingesetzt, um ein modellbasiertes Optimierungsproblem zu definieren und zu lösen. Dabei wird die ökonomische Performance einer Anlage optimiert unter Einhaltung von Sicherheits-, Prozess- und Umweltauflagen. Trotz des erheblichen Nutzens ist die Anwendung von modellbasierter online-Optimierung immer noch auf wenige Fälle beschränkt. Einer der Hauptgründe dafür ist der Aufwand für die Erstellung hinreichend genauer Modelle. Wenn man ein ungenaues Modell verwendet, wird der berechnete Betriebspunkt der Anlage suboptimal sein und im schlimmsten Fall können die erwähnten Beschränkungen verletzt werden.

Diese Dissertation versucht, einige der Schwierigkeiten aus dem Weg zu räumen, die derzeit der Prozessindustrie beim Einsatz von RTO mit ungenauen Modellen bestehen. Die Arbeit baut auf der Idee einer iterativen Korrektur des nominalen Optimierungs-Problems mit geschätzten Gradienten nach dem Prinzip des Modifier-Adaptation-Algorithmus (MA) auf und beschreibt methodische Neuerungen, um den Einsatz einfacher und sicherer zu machen. Als erstes wird Trust-Region-Optimierung kombiniert mit dem traditionellen MA-Ansatz mit dem Ziel, Konvergenz mit dem Anlagen-Optimum zu erreichen unter milden Annahmen bezüglich der Eigenschaften des Modells. Zweitens wird ein neuer Algorithmus für solche Fälle vorgestellt, in denen die Betriebsmessdaten der Anlage von signifikantem Rauschen kontaminiert sind. Drittens werden zwei Ansätze für schnelle RTO untersucht, um dynamische Information mit dem vorhandenen Prozessmodell zu kombinieren, was zu einer schnelleren Konvergenz zum Anlagen-Optimum führt. Experimentelle Ergebnisse aus einer Minianlage für die Hydroformylierung langkettiger Alkene belegen die möglichen Vorteile des Einsatzes iterativer Optimierung zur Verbesserung der Anlagenleistung.

Contents