

Control of Crystallization Processes Based on Population Balances

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktoringenieur
(Dr.-Ing.)**

von Dipl.-Ing. Ulrich Vollmer

geb. am 9. März 1972 in Kirchheim unter Teck

genehmigt durch die Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Jörg Raisch
Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel-Morgenstern
Prof. Dr. Doraiswami Ramkrishna

Promotionskolloquium am 20. Mai 2005

Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut
für Dynamik komplexer technischer Systeme

Band 11

Ulrich Vollmer

**Control of Crystallization Processes
Based on Population Balances**

Shaker Verlag
Aachen 2005

Bibliographic information published by Die Deutsche Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data is available in the internet at <http://dnb.ddb.de>.

Zugl.: Magdeburg, Univ., Diss., 2005

Copyright Shaker Verlag 2005

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-4317-8

ISSN 1439-4804

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg. Ich hatte das Vergnügen, zu sehen wie das Institut gewachsen ist, von den Anfängen mit einer Hand voll Mitarbeitern in Räumen der Universität Stuttgart bis hin zum beeindruckenden Institutsgebäude an der Elbe, in dem rund 150 Mitarbeiter tätig waren.

Mein Dank gilt an erster Stelle Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Jörg Raisch, der mein Interesse am Thema dieser Dissertation geweckt, mich bei der Bearbeitung stets unterstützt und mir dabei ein außergewöhnliches Maß an Freiraum eingeräumt hat.

Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. A. Seidel-Morgenstern danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit und die Begutachtung derselben. Weiter danke ich Herrn Prof. Dr. D. Ramkrishna für die freundliche Übernahme eines weiteren Mitberichts.

Darüberhinaus bedanke ich mich beim Gründungsdirektor des Max-Planck-Instituts Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.h.c. mult. E.D. Gilles, der die günstigen Rahmenbedingungen ermöglicht hat, unter denen meine Arbeit entstanden ist.

Den Mitarbeitern am Institut, insbesondere den Kollegen in der Fachgruppe für System- und Regelungstheorie und im Kristallisationsprojekt sowie den „Stuttgartern“ Stefan Motz und Aleksandar Mitrović danke ich für offene Türen, für vielfältige Hilfe und für ebenso anregende wie kurzweilige Diskussionen. Dies gilt in ganz besonderer Weise für meinen (Büro-)Nachbarn Eckart Mayer.

Schließlich danke ich meiner Familie: meinen Eltern, die die Grundlage für alles legten, meiner Frau Elisabeth, die mich begleitet und mir den Rücken gestärkt hat, sowie meinen Kindern, Sophie und Julian, die mir die nötige Ablenkung verschafften.

Contents

1	Introduction	1
1.1	Population Balance Modelling	1
1.2	Control of Crystallization Processes	2
2	Population Balance Model for a Continuous Crystallizer	5
2.1	Introduction to Continuous Crystallization	5
2.2	Population Modelling	7
2.2.1	Modelling of the Dispersed Solid Phase in the Crystallizer	9
2.2.2	Modelling of Liquid Phase in the Crystallizer	14
2.2.3	Modelling of the Dispersed Solid Phase in the Settling Zone . . .	15
2.2.4	Modelling of the Liquid Phase in the Settling Zone	16
2.2.5	Modelling of the Fines Dissolution Unit	17
2.3	Comparison to Real Plant	17
2.4	Discussion	18
3	Model Simplification	20
3.1	Introduction	20
3.2	Simplified Population Balance Model	22
3.2.1	Dispersed Solid Phase in the Crystallizer	22
3.2.2	Reformulation of Solute Mole Balance for the Crystallizer	26
3.2.3	Settling Zone and Fines Dissolution Loop	27

3.2.4	Summary of Simplified Model	31
3.2.5	Derivation of Transfer Function	34
3.3	Discussion	37
4	Controller synthesis	40
4.1	Introduction to Continuous Crystallizer Control	40
4.2	Choice of Controller Synthesis Method	42
4.3	H_∞ -Control for Infinite-Dimensional Systems	44
4.3.1	Multiplicative Model Uncertainty	45
4.3.2	Coprime Factor Uncertainty	46
4.3.3	Computation of Optimal Controller	48
4.3.4	Reduction of Controller Dimension	51
4.4	H_∞ -Controller Design for the Crystallizer Model	53
4.4.1	Factorization of Plant Transfer Function	53
4.4.2	Controller Design for Multiplicative Uncertainty	54
4.4.3	Controller Design Based on Coprime Factor Uncertainty	57
4.5	Simulation Study	58
4.6	Discussion	63
5	Batch Crystallization – Flatness Analysis	65
5.1	Introduction to Batch Crystallization	65
5.2	Batch Crystallizer Model	68
5.2.1	Population Balance Model	68
5.2.2	Moment Model	70
5.3	Differential Flatness and Orbital Flatness	72
5.3.1	Introduction to Flatness	72
5.3.2	Orbital Flatness	73
5.4	Orbital Flatness of Crystallizer Model	73

5.4.1	Flatness Test for Moment Model	73
5.4.2	Flatness of Time-Scaled Moment Model	74
5.5	Discussion	77
6	Batch Crystallization – Flatness Based Control Synthesis	79
6.1	Introduction to Batch Crystallizer Control	79
6.2	Feedforward Control for Desired CSD	81
6.3	Optimization of CSD Properties	88
6.4	Feedforward Control for Desired CSD Properties	94
6.5	Feedback Tracking Control	98
6.6	Discussion	103
7	Conclusion	105
7.1	Summary	105
7.2	Perspectives	106
A	Continuous Crystallizer	108
A.1	Details for Reference Model	108
A.2	Parameters for Reference Model	112
A.3	Parameters for Design Model	114
B	Batch Crystallizer	116
C	Computations for the Derivation of Plant Transfer Function	118
D	Notation	121
D.1	Continuous Crystallization, Chapters 2-4	121
D.2	Batch Crystallization, Chapters 5-6	125