

Model-based Conceptual Design and Optimization of Continuous Chemical Processes under Uncertainty

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Dr.-Ing.
von der Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen
der Technischen Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Jochen Steimel
aus
Heppenheim

Tag der mündlichen Prüfung: 01.02.2016

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell
2. Gutachter: Prof. Dr. Zdravko Kravanja

Dortmund 2016

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

Band 3/2016

Jochen Steimel

**Model-based Conceptual Design and
Optimization of Continuous Chemical
Processes under Uncertainty**

D 290 (Diss. Technische Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Dortmund, Technische Univ., Diss., 2016

Copyright Shaker Verlag 2016

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4844-5

ISSN 1867-9498

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorgelegte Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Systemdynamik und Prozessführung an der TU Dortmund.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Herrn Professor Sebastian Engell, der mir ermöglichte nach meiner Diplomarbeit mein Interesse an Simulation und Optimierung chemischer Prozesse zu vertiefen. Ich bedanke mich für viele lange fachliche Gespräche und Unterstützung und Vertrauen in schwierigen Zeiten. Ohne sein Vertrauen in meine Selbstständigkeit und die somit gewährten Freiräume wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Die finanzielle Unterstützung erfolgte seitens der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereiches Transregio 63 "Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen" im Zeitraum 09/10 bis 12/14. Im Zeitraum von 01/15 bis 10/15 erfolgte die Finanzierung aus Haushaltsmitteln des Lehrstuhls.

Ich danke meinen Kollegen am Lehrstuhl für die andauernde Hilfsbereitschaft und die freundliche Zusammenarbeit. Das gute Umfeld hat mir die Kraft gegeben auch in schwierigen Zeiten die Hoffnung nie aufzugeben.

Weiterhin danke ich meinen Eltern Brigitte-Barbara Steimel und Prof. Dr.-Ing. Andreas Steimel für die langjährige finanzielle und moralische Unterstützung während meines Studiums und die Ermunterung ein Promotionsstudium aufzunehmen.

Besonders möchte ich meiner Freundin Anne-Christin Döring für ihre Unterstützung und Geduld während der vergangenen fünf Jahre danken.

Langenfeld, im Oktober 2016

Jochen Steimel

Publications

This thesis is the result of four and a half years of research activity at the chair of Process Dynamics and Operations at TU Dortmund University from September 2010 to March 2015. The following list gives an overview of the published results.

Part of the results of chapter 10 have been presented at the ProcessNet Jahrestagung der Arbeitsgruppen Prozess-, Automatisierungs und Anlagentechnik (PAAT), which was held November 2014 in Lüneburg, Germany.

The results of chapter 11 have been presented at the ProcessNet Jahrestagung der Arbeitsgruppen Prozess-, Automatisierungs und Anlagentechnik (PAAT) held November 2013 in Fulda, Germany and at the Conference on Foundations of Computer Aided Process Design (FOCAPD) held July 2014 in Cle Elum, WA, USA and the third article.

During the course of the research activity three journal articles and two conference proceedings have been published, which present additional results of both case studies.

Journal articles

J. Steimel, M. Haarmann, G. Schembecker and S. Engell. Model-based conceptual design and optimization tool support for the early stage development of chemical processes under uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 59, 63–73, 2013.

J. Steimel, M. Haarmann, G. Schembecker and S. Engell. A framework for the modeling and optimization of process superstructures under uncertainty. *Chemical Engineering Science*, 115, 225–237, 2014.

J. Steimel and S. Engell. Conceptual Design and Optimisation of Chemical Processes under Uncertainty by Two-Stage Programming, *Computers & Chemical Engineering*, 81, 200–217, 2015.

Conference proceedings

J. Steimel, M. Haarmann, G. Schembecker and S. Engell. Model-based Conceptual Design and Tool Support for the Development of Continuous Chemical Processes. In: Lockhart Bogle, Ian David ; Fairweather, Michael: Addendum to the Proceedings of the 22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering Elsevier, 2012.

J. Steimel and S. Engell. Conceptual Design and Optimisation of Chemical Processes under Uncertainty by Two-Stage Programming. Proceedings of the 8th International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design, FOCAPD, 2014.

Kurzfassung

Diese Dissertation umfasst ein Rahmenwerk und ein Werkzeug für die Modellierung und Optimierung von Fließbildsuperstrukturen in frühen Phasen der Prozessentwicklung. Die frühe Phase der Prozessentwicklung, auch Prozesssynthese genannt, ist durch einen Mangel an Informationen und einer heterogenen Qualität der vorhandenen Daten gekennzeichnet. Entscheidungen in dieser Situation zu treffen wird weiterhin dadurch erschwert, dass viele Prozessalternativen zur Verfügung stehen. Diese Alternativen in einer für eine Prozessoptimierung geeignete Struktur auszudrücken ist eine herausfordernde Aufgabe.

Als grundlegendes Werkzeug für die Lösung dieses Problems wird in dieser Arbeit die Zweistufige Stochastische Optimierung mit operationellen Freiheitsgraden verwendet, da diese Methode den Designprozess gut widerspiegelt. Entscheidungen können zu zwei Zeitpunkten getroffen werden: Während der Planung des Prozesses, und während des Betriebes des Prozesses, wobei hier mehr Informationen zur Verfügung stehen. Die Grundlage der Zweistufigen Stochastischen Optimierung ist die Aufteilung der Freiheitsgrade in Designvariablen und Betriebsvariablen. Mit Hilfe dieser Dekomposition kann die Problemgröße verringert und die Wahrscheinlichkeit einer Lösung der Probleme verbessert werden. Die Optimierungsprobleme wurden in der objektorientierten Modellierungssprache Modelica implementiert und werden mit Hilfe eines hybriden evolutionären Algorithmus gelöst. In dieser Kombination übernimmt die evolutionäre Suche die Optimierung der Designgrößen, während die Betriebsgrößen von einem gradientenbasierten Löser wie IPOPT oder CONOPT für die einzelnen Szenarien bestimmt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neues Computerwerkzeug namens FSOpt (Flowsheet Superstructure Optimization) entwickelt und in der Sprache C# implementiert. FSOpt unterstützt die Modellierung von Fließbildsuperstrukturen durch die Bereitstellung von drei Eingabeformalismen (tabellarisch, graphisch, Modelica). Die in FSOpt modellierten Superstrukturen werden automatisch in ausführbare Optimierungsprogramme übersetzt, wobei die hierarchischen Strukturen aufgelöst und automatisch erste und zweite partielle Ableitungen der Gleichungen berechnet werden.

Die Entwicklungsmethode und das Werkzeug werden in zwei Fallstudien angewendet: die Optimierung eines Prozesses für die Hydroformylierung von n-Dodecen in thermomorphen Lösungsmittelsystemen und die Auftrennung eines azeotropen Gemisches aus Wasser und Ameisensäure mit Hilfe einer Druckwechselrektifikation.

Abstract

This contribution presents a framework and a tool for modelling and optimizing process flowsheet superstructures in the early phase of process design. The early phase of process design, called process synthesis, is characterized by a lack of information and a heterogeneous quality of the available information. Decision making in this environment is challenging due to the large number of possible process alternatives that are available. Expressing these alternatives in a structure suitable for searching by means of an optimization algorithm is a challenging task.

The algorithmic tool employed for handling uncertainties in process design in this thesis is two-stage stochastic programming, which reflects the real-world process design process well. Decisions can be taken at two points of time, once during the design of a plant and once during operation, when more measurements and information are available. Two-stage stochastic programming is based on the decomposition of the decision variables into design parameters and operational degrees of freedom, thereby reducing the overall problem size. The optimization problems are implemented using the object-oriented language Modelica and are solved using a hybrid evolutionary algorithm. In this setup the evolutionary search creates new designs which are optimized by the gradient-based solvers IPOPT or CONOPT for different scenarios.

For this thesis a new tool called FSOpt (Flowsheet Superstructure Optimization) was developed and implemented. FSOpt supports the modelling and optimization of superstructures using three input formalisms and provides algorithms for the translation of abstract superstructure models into executable non-linear programs. The transformation process is integrated into an automated work flow and includes the instancing of hierarchical models and the calculation of exact first- and second-order derivatives.

The method and the tool are applied to two case studies, the hydroformylation of dodec-1-ene in thermomorphic multicomponent solvent systems and the separation of an azeotropic mixture of water and formic acid.

Contents

1	Introduction	2
1.1	Overview	2
1.2	Uncertainty and limited knowledge	5
1.3	Uncertainty-aware decision making	6
1.4	Outline	7
I	Theoretical Foundations	10
2	Process synthesis	12
2.1	Introduction	12
2.2	Heuristic process design	13
2.3	Optimization-based process design	14
2.4	Superstructures	15
2.4.1	Direct encoding	16
2.4.2	Abstract superstructures models	16
2.5	Literature review	17
2.5.1	Heuristic-numeric approaches	18
2.5.2	Graphical-numeric approaches	18
2.5.3	Combinatoric-numeric approaches	19
2.6	Discussion	21
3	Numerical methods for optimization	24
3.1	Introduction	24
3.2	Mathematical programming	24
3.3	Meta-heuristics	26
3.4	Hybrid methods	28
3.5	Discussion	30

4	Uncertainty in process design	32
4.1	Introduction	32
4.2	Modelling uncertainty spaces	32
4.2.1	Heuristic representation	33
4.2.2	Worst-case representation	33
4.2.3	Scenario representation	34
4.3	Stochastic programming	34
4.3.1	Two-stage stochastic programming with recourse	35
4.3.2	Decomposition approaches	36
4.3.3	Value of the stochastic solution and perfect information	37
4.4	Discrimination of alternatives under uncertainty	39
4.5	Guiding laboratory research	41
4.6	Discussion	41
5	Tools for chemical process design	44
5.1	Flowsheet simulators	44
5.1.1	Block-oriented simulators	44
5.1.2	Equation-oriented simulators	45
5.2	Algebraic modelling languages	46
5.3	MOSAIC	47
5.4	Discussion	48
II	Methods and Implementation	50
6	Process superstructure modelling framework	52
6.1	Design goals	52
6.2	Information required during early-phase process design	52
6.3	Thermodynamics for process simulation	54
6.4	Process cost models	55
6.5	Process topology models	57
6.6	Unit operation models	59

6.6.1	The general unit operation model	59
6.6.2	Material stream model	60
6.6.3	Energy stream model	61
6.6.4	Feed stream model	61
6.6.5	Product stream model	62
6.6.6	Reactor model	62
6.6.7	Component splitter model	66
6.6.8	Equilibrium-stage separator model	67
6.6.9	Flash evaporation model	69
6.6.10	Membrane model	71
6.6.11	Crystallizer model	72
6.6.12	Distillation model	74
6.6.13	Transformation modules	80
6.7	Modelling philosophy	82
6.8	Discussion	84
7	FSOpt - a tool for design optimization under uncertainty	86
7.1	Introduction	86
7.2	Software architecture	87
7.3	Input languages	89
7.3.1	Tabular input language	89
7.3.2	Graphical input language	92
7.3.3	Textual input language	94
7.4	Translation between languages	96
7.4.1	Translation from tabular language to textual language	96
7.4.2	Translation from graphical language to textual language	97
7.5	Optimization object model	98
7.6	Expression object model	101
7.7	Optimization Algorithms	104
7.8	Discussion	106

8	Symbolic transformations of the object model	108
8.1	Introduction	108
8.2	Transformation tool chain architecture	108
8.3	Parsing and matching	111
8.4	Instanting	112
8.5	Hybrid symbolic differentiation	113
8.6	Model structure simplification	115
8.7	Feasibility-based bound tightening	116
8.8	Flexible code generation	117
8.9	Discussion	120
III	Case studies and results	122
9	Case studies	124
9.1	Introduction	124
9.2	Hydroformylation of dodec-1-ene	125
9.2.1	Chemical components	127
9.2.2	Reactions and chemical properties	127
9.2.3	Equipment and units	127
9.3	Purification of formic acid	129
9.3.1	Chemical components	129
9.3.2	Reactions and chemical properties	129
9.3.3	Equipment and units	131
10	Handling uncertainties in design problems without integer variables	132
10.1	Introduction	132
10.2	Solution approaches	132
10.3	Hydroformylation of dodec-1-ene	133
10.3.1	Problem formulation	133
10.3.2	Results	137
10.3.3	Discussion of the results	139

10.4	Purification of formic acid	143
10.4.1	Problem formulation	143
10.4.2	Results	148
10.4.3	Discussion of the results	152
10.5	Summary	155
11	Handling uncertainty in discrete-continuous design problems	158
11.1	Introduction	158
11.2	Hydroformylation of dodec-1-ene	159
11.2.1	Problem formulation	159
11.2.2	Results	161
11.2.3	Discussion of the results	163
11.3	Purification of formic acid	168
11.3.1	Problem formulation	168
11.3.2	Results	171
11.3.3	Discussion of the results	173
11.4	Summary	174
12	Summary of part III	178
IV	Final Remarks	180
13	Conclusions	182
13.1	Summary	182
13.2	Conclusion	183
13.3	Future Work	184
V	Appendix	188
A	Chemical properties	190
A.1	Hydroformylation case study	190
A.2	Formic acid case study	192

B Process Model Library	194
B.1 Basic Flowsheet Units	194
B.2 Reactor models	197
B.3 TSS Hydroformylation Reactor	199
B.4 Equilibrium stage separator	201
B.5 Flash separator	202
B.6 Crystallizer separator	203
B.7 Membrane separator	204
B.8 MESH Column	205
B.9 Cost models	207
B.10 Transformation modules	209
Bibliography	212