Fortschritt-Berichte VDI

VDI

Reihe 8

Mess-,
Steuerungs- und
Regelungstechnik

Dipl.-Math. techn. Maxim Stuckert,
Ludwigsburg

Nr. 1253

# Theory and Application of the Lang-Gilles Observer for Distillation Processes

Berichte aus der
Aachener Verfahrenstechnik - Prozesstechnik

RWTH Aachen University

# Theory and Application of the Lang-Gilles Observer for Distillation Processes

# Theorie und Anwendung des Lang-Gilles Beobachters für Destillationsprozesse

Von der Fakultät für Maschinenwesen der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Maxim Stuckert

Berichter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle

Tag der mündlichen Prüfung: 28. Oktober 2016

# Fortschritt-Berichte VDI

Reihe 8

Mess-, Steuerungs- und Regelungstechnik

Dipl.-Math. techn. Maxim Stuckert, Ludwigsburg

Nr. 1253

## Theory and Application of the Lang-Gilles Observer for Distillation Processes

Berichte aus der
Aachener Verfahrenstechnik - Prozesstechnik

RWTH Aachen University

Stuckert, Maxim
**Theory and Application of the Lang-Gilles Observer for Distillation Processes**
Fortschr.-Ber. VDI Reihe 8 Nr. 1253. Düsseldorf: VDI Verlag 2016.
168 Seiten, 39 Bilder, 14 Tabellen.
ISBN 978-3-18-525308-9, ISSN 0178-9546,
€ 62,00/VDI-Mitgliederpreis € 55,80.

**Keywords:** Distillation – Multicomponent mixtures – Nonlinear state observer – Observer convergence – Observer tuning – Tray efficiency – Tray-efficiency estimator – Model predictive control – Plant-model mismatch – Large-scale simulation

This thesis deals with the nonlinear full state observer for distillation processes first introduced by Lang and Gilles in 1990. The observer is very attractive in practice as it requires only few temperature measurements in each section of a distillation column and only few observer parameters need to be tuned. We provide conditions under which this observer converges and derive a simple rule for the tuning of the observer parameters. We also give a method for the on-line estimation of the Murphree tray efficiency. Such on-line methods are rarely found in literature. In a sequence of simulation studies, we investigate the capabilities of the observer for the estimation of the tray efficiency and for model-predictive control. The simulation studies are based on distillation processes for separation of multicomponent mixtures and one of the studies introduces a plant-model mismatch.

**Bibliographische Information der Deutschen Bibliothek**
Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliographie; detaillierte bibliographische Daten sind im Internet unter http://dnb.ddb.de abrufbar.

**Bibliographic information published by the Deutsche Bibliothek**
(German National Library)
The Deutsche Bibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliographie (German National Bibliography); detailed bibliographic data is available via Internet at http://dnb.ddb.de.

D82 (Diss. RWTH Aachen University, 2016)



Als Manuskript gedruckt. Printed in Germany.

ISSN 0178-9546

ISBN 978-3-18-525308-9

# Vorwort

Diese Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Prozesstechnik der RWTH Aachen. Viele Personen haben zu deren Gelingen und meiner persönlichen Weiterentwicklung beigetragen. Es ist mir deshalb eine große Freude, ihnen an dieser Stelle danken zu können.

Dabei möchte ich mich ganz besonders bei meinem Doktorvater, Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt, bedanken. Seine seltene Gabe, Schwachstellen in der Argumentation schnell zu erkennen und mögliche Lösungen aufzuzeigen, erlaubte uns stets konstruktive Diskussionen und anschließend gezielte Forschung. Genauso schätzte ich seine vorbildliche Art, tagtäglich im Interesse seiner Mitarbeiter und Doktoranden zu agieren und den interdisziplinären Dialog zu fördern. Ich möchte auch Herrn Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle für die Übernahme des Berichts danken. Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder möchte ich mich für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission bedanken.

Für die vielen Diskussionen im Zusammenhang mit dieser Arbeit möchte ich mich herzlich bei meinen ehemaligen Kollegen, Andreas Harwardt, Ionut Muntean, René Schneider und Holger Scheu bedanken.

Für Ideen und Ratschläge zur richtigen Zeit danke ich Dr.-Ing. Adel Mhamdi. Genauso bin ich Prof. Dr.-Ing. Jorge Otávio Trierweiler und Luciane Trierweiler, PhD, dankbar, die ein Jahr am Lehrstuhl verbracht haben und währenddessen mich durch ihre vielseitigen Ansichten bereichert haben.

Den ehemaligen Büro-Kollegen Reinout Romijn, David Kauven, Hans Pirnay und Jennifer Puschke, die stets für das gute Arbeitsklima sorgten, möchte ich hiermit meinen persönlichen Dank ausdrücken. Allen Kollegen am Lehrstuhl sei gedankt – ohne sie wäre meine Zeit am Lehrstuhl um viele schöne Erinnerungen ärmer.

Natürlich wäre die Anfertigung einer Dissertation ohne die Unterstützung meiner Familie sehr beschwerlich. Ich danke deshalb vor allem meinen Eltern, die mich stets bei meinen Vorhaben unterstützt haben. Nicht zuletzt gilt mein Dank meiner Frau, die mit mir diesen langen Weg gegangen ist und durch ihr Verständnis, Geduld und Unterstützung die Fertigstellung dieser Arbeit außerordentlich erleichterte.

Ludwigsburg, Oktober 2016 Maxim Stuckert

# Contents

# Nomenclature

**Abbreviations**

ANN artificial neural network

CMO constant molar overflow

DMPC distributed model-predictive control

EQ equilibrium stage

MPC model-predictive control

NEQ nonequilibrium stage

PDE partial differential equations

PI proportional-integral controller

PID proportional-integral-derivative controller

PLS partial least squares

QP quadratic programming

RGA relative gain array

S-DMPC sensitivity-driven distributed model-predictive control

SP setpoint

VLE vapor-liquid equilibrium

**Greek letters**

$\alpha$ observer tuning parameter, see Eq. (3.3)

$\alpha_i$ observer tuning parameter

$\Delta\hat{T}_{k,m}^{pred}$ predicted temperature difference between two trays $k$ and $m$

$\delta\hat{y}^*$ deviation of the estimated vapor compositions from the estimated equilibrium compositions, see Eq. (3.6)

$\Delta h_{L,0}$ heat of vaporization

$\delta T$ vector of temperature differences, see Eq. (3.7)

$\Delta T_{k,m}$ temperature difference between two trays $k$ and $m$

$\gamma_{i,j}$ activity coefficient of component $i$

$\lambda_M$, $\lambda_V$ parameters specifying liquid dynamics with respect to holdup and vapor flow rate changes

$\nu_i^L$ liquid phase molar volume of component $i$

$\phi_{i,j}^L$ fugacity coefficient of pure component $i$ in the liquid phase

$\phi_{i,j}^V$ fugacity coefficient of pure component $i$ in the vapor phase

$\Psi_j$ Jacobian of the vapor-liquid equilibrium function

$\xi_0$, $\xi_1$ correlation constants in pressure relation

**Latin letters**

$\bar{f}(\bar{x}, t)$ majorant of $f(x, \hat{x}, t)$, see Eq. (3.14)

$\bar{T}$ vector of all temperature differences in the plant, see Eq. (3.8)

$\Delta x$, $\Delta u$, $\Delta d$, $\Delta y$ vector deviations in state equation, see Eq. (5.6)

$\hat{D}$ estimated mass transfer matrix, see Eq. (3.4)

$\mathcal{H}$, $\mathcal{F}$, $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ matrices in QP formulation, see Eq. (5.22)

$\mathcal{T}_x$, $\mathcal{T}_d$, $\mathcal{T}_u$ matrices in prediction equation, see Eq. (5.17)

$f_i^{vap}(\cdot)$ function specifying vapor component $i$

$f^{vle}$ vapor-liquid equilibrium function

$A$, $B$, $C$ matrices in state equation of the plant, see Eq. (2.65)

$A_c$, $B_c$, $C_c$, $D_c$ continuous-time matrices in state equation, see Eq. (5.7)

$A_d$, $B_d$, $C_d$, $D_d$ discrete-time matrices in state equation, see Eq. (5.12)

$a_j$ interfacial area between liquid and vapor phases on tray $j$

$A_{l_1 l_2}$, $B_{l_1 l_2}$, $C_{l_1 l_2}$ inner matrices in state equation of the plant, see Eq. (2.66)

$a_{r,s,l}$, $b_{r,s,l}$, $c_{r,s,l}$, $f_{r,l_1,s,l_2}^L$, $f_{r,l_1,s,l_2}^V$ sub-matrices, see Eq. (2.67)

$C_l^V, C_l^L$ efficiency factors with resistance on the vapor and liquid side, respectively

$C_l$ efficiency factor with resistance on the vapor or liquid side

$E_{MV,i,j}$ Murphree tray efficiency for component $i$ on stage $j$

$E_{MV,j}$ multi-component Murphree tray efficiency on stage $j$

$E_{OV,i,j}$ Murphree point efficiency for component $i$ on stage $j$

$E_{OV,j}$ multi-component Murphree point efficiency on stage $j$

$F$ flow rate through a valve

$f(x, \hat{x}, t)$ redefinition, see Eq. (3.11)

$f^L$ function specifying liquid dynamics

$F_j^L$ feed liquid stream on stage $j$

| | |
|---|---|
| $f^V$ | function specifying vapor dynamics |
| $F_j^V$ | feed vapor stream on stage $j$ |
| $F_0$ | distillate flow rate |
| $F_j$ | side stream on stage $j$ |
| $F_{m+1}$ | bottom flow rate |
| $F_{max}$ | maximum flow rate through a valve |
| $h_j^{tot}$ | total height of the liquid on tray $j$ |
| $h_F$ | enthalpy of feed stream $F$ |
| $h_L$ | enthalpy of liquid stream $L$ |
| $h_{S^L}$ | enthalpy of stream $S^L$ |
| $h_{S^V}$ | enthalpy of stream $S^V$ |
| $h_V$ | enthalpy of vapor stream $L$ |
| $J_j$ | interphase stream on stage $j$ |
| $K_j^L$ | matrix of mass transfer coefficients in the liquid phase on tray $j$ |
| $K_j^V$ | matrix of mass transfer coefficients in the vapor phase on tray $j$ |
| $L_j$ | liquid stream leaving stage $j$ |
| $M_j^L$ | liquid holdup on stage $j$ |
| $M_j^V$ | vapor holdup on stage $j$ |
| $m_l$ | number of stages in column $l$ in-/excluding feed stages/condenser and reboiler |
| $M_{i,j}$ | holdup of component $i$ on stage $j$ |
| $m_{sec}$ | number of stages in a distillation column section |
| $N_{i,j}$ | molar flux between the vapor and liquid phases of component $i$ on stage $j$ |
| $NTU_{L,j}$ | matrix of numbers of transfer units for the liquid phase |
| $NTU_{OV,j}$ | matrix of overall number of transfer units on tray $j$ |
| $p_i^{sat}$ | vapor pressure of component $i$ |
| $p_j$ | pressure on stage $j$ |
| $q$ | number of components in the mixture |
| $Q_C$ | heat flow out of condenser |
| $Q_R$ | heat flow into reboiler |
| $q_{L,0}$ | thermal condition of the reflux flow |
| $R$ | ideal gas constant |
| $S_j^L$ | side liquid stream on stage $j$ |
| $S_j^V$ | side vapor stream on stage $j$ |
| $S_j$ | side stream on stage $j$ |

$S_{actual}$ current valve stem position

$T_j$ boiling temperature on stage $j$

$U_j$ internal energy of both phases on stage $j$

$V_j$ vapor stream leaving stage $j$

$x$, $y$, $z$ vectors of all liquid and vapor compositions in the plant, see Eq. (2.64)

$x_l$, $y_l$, $z_l$ vectors of all liquid and vapor compositions in column $l$, see Eq. (2.63)

$x_{i,j}$, $y_{i,j}$, $z_{i,j}$ molar liquid, vapor or feed fraction of component $i$ on stage $j$, page 12

$x_{j,l}$, $y_{j,l}$, $z_{j,l}$ vectors of all liquid and vapor compositions in column $l$ on stage $j$, see Eq. (2.62)

$y^*$ vapor compositions in equilibrium with liquid

## Mathematical symbols

$\circ$ Hadamard product

$\dot{(\cdot)}$ time derivative

$\mathbb{R}^n$ vector space over $\mathbb{R}$

$\mathbb{R}^{n\times m}$ $n \times m$ matrix space over $\mathbb{R}$

$L(\cdot)$ linear function

$N(\cdot)$ nonlinear function

## Subscripts, superscripts, accents

$(\cdot)^{nom}$ nominal value

$(\cdot)^{rec}$, $(\cdot)^{str}$ refers to a quantity in the rectifying or stripping distillation sections

$(\cdot)^{true}$ refers to a quantity in the plant replacement model

$(\cdot)_{j_i}$ stage number selected from all stages in the distillation column

$\bar{(\cdot)}$ difference between estimated and measured quantities

$\breve{(\cdot)}$ nominal value of the variable

$\hat{(\cdot)}$ an observer variable