

**NON-PARAMETRIC ANALYSIS AND MODELLING OF
FOULING DATA IN HEAT EXCHANGERS**

A Dissertation accepted by the
Faculty of Energy-, Process- and Bio-Engineering of the University of Stuttgart
in Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Doctor of Engineering Sciences (Dr.-Ing.)

by

ALIREZA MIRSADRAEE

born in Mashhad, Iran
August 25, 1984

Supervisor: Apl. Prof. Dr.-Ing. Klaus Spindler
Co-Referee: Univ.-Prof. Dr. techn. Günter Scheffknecht

Date of Oral Examination: 21. Dec. 2017

Institute for Thermodynamics and Thermal Engineering
of the University of Stuttgart

2018

ABSTRACT

Fouling of heat transfer surfaces is a severe operational drawback encountered in majority of heat exchangers. The deposit layer would reduce the performance of the heat exchangers in terms of hydraulic and thermal inefficiencies. Despite the increased attention in the past decades, common design methods is based on the operating conditions of the heat exchangers rather than considering the development of the fouling layer. The estimation of fouling resistance can only be made by considering the measurements from experimental results which are also noisy to some extent. Noise a coherent feature of fouling processes can negate the performance of modelling approach considerably.

Additionally, most of the available models and correlations approximate the initial fouling rate as a function of operating conditions of the heat exchanger and particularly for the dominant deposition mechanism. However, usually more than one deposition mechanism is involved in fouling of heat exchangers, e. g. crystallization fouling, chemical reaction fouling, particulate fouling. The interaction of various deposition mechanisms will result in a non-linear phenomenon which hampers the performance of mathematical modelling. Additionally, the removal of fouling layer due to the bulk shear stress has to be considered in estimation of fouling rate. Competition between the deposition and removal mechanisms results in various type of fouling trend, i. e. linear, falling and asymptotic. The final forms of such models include various proportionality coefficients which should be obtained through regressing the experimental data.

In this study, Kalman filter and Neural Networks are used as mathematical tools to accurately and reliably estimate the fouling propensity of the heat exchangers of the refinery's crude oil preheat trains (CPTs). Kalman filter minimizes the estimation error covariance by considering the error of both mathematical process and measurement models. This in turn, requires choosing correct values for the both mathematical process and measurement models. The relation between these two dictates the smoothness and the precision of the trend of fouling resistance.

Several scenarios are available to select the process and measurement noise covariance. For instance, constant values for process and measurement noise covariance facilitate the smoothness of the estimated fouling trend. Therefore, it would be possible to estimate very smooth or highly noisy fouling trends. However, an accurate value of the covariance matrices can only be obtained by trial and error. The other method would make a statistical analysis of process and measurement noise covariance by comparing the measurements with their estimated values which leads to better estimations of fouling resistance without

any trial and error attempt. Both methods were applied on the available data bank and the comparison of the experimental data with the estimated values confirmed the qualitative and quantitative estimation of fouling resistance for available experiments in the HTFU data bank. Although the Kalman filter can be used to make reasonably factual estimation of fouling resistance, the preparation of a general mathematical process model (which can be applied to all type of heat exchangers) that estimates the fouling resistance at each time step appropriately is impossible.

Another powerful tool to model fouling propensity in CPTs is to implement artificial neural networks (ANNs). The ANNs are usually used for estimating the behaviour of processes that cannot be modelled easily by mathematical correlations. The artificial neural networks should be trained firstly by a set of experimental data (the experimental input-output set which are usually the operating conditions and the related measured values of the fouling resistance at different time steps), which can later be exploited as an estimation tool for operating conditions which were not seen before.

The modelling of fouling resistance using neural networks has been conducted in this study by making various arrangement of input and output parameters as:

- (1) estimation (approximation and prediction) of fouling resistance as a function of time,
- (2) estimation of fouling resistance as a function of operating conditions at each time step, and
- (3) estimation of fouling resistance as a function of operating conditions and the fouling state of the heat exchanger at previous time step.

The results showed very good agreement of experimental data with their estimated values of fouling resistance in most of case studies.

The ANNs were also used to classify the fouling trends based on their behaviour whether linear, falling or asymptotic. The classification was made by using the initial operating conditions of the heat exchanger to predict the type of fouling trend. The classification of fouling trends were accurate for more than 70% of the available experiments in the data bank.

Despite the satisfactory performance of neural networks, their black box nature would not deliver any information about physical relationship between its inputs and output. Hence, to discriminate various inputs and study the impact of each parameter on the initial fouling rate, several methods including *connection weights*, *partial derivatives*, *input perturbation* and *profile analysis methods* were studied. The cumulative results of these methods suggested that the most important variable is the surface temperature which is followed by the crude instability index, bulk temperature, surface material and the bulk velocity. Finally, the performance of the developed ANNs has been evaluated by changing two input variables using PaD method simultaneously. The results can support the plant operators to avoid operating conditions under which the initial fouling rate is high.

Prediction of heat exchanger lifetime has usually a high priority for plant operators. In order to predict the lifetime of a heat exchanger, one has to calculate the needed time to reach the design margin of a heat exchanger. To do so, the Kalman filter was employed to

estimate the lifetime of a heat exchanger by considering only a small portion of data points at the beginning of each experiment. Results confirmed this possibility to estimate the lifetime and the asymptotic fouling resistance with a very good accuracy. The result will help to forecast the performance of the heat exchangers in advance and will help many researchers to shorten the length of experiments to 20%.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Verschmutzung (Fouling) von Wärmeübertragungsflächen stellt einen schwerwiegenden Nachteil für den Betrieb der meisten Wärmeübertrager dar. Die Foulingschicht verringert die Leistung der Wärmeübertrager aufgrund reduzierter hydraulischer und thermischer Effizienz. Trotz der zunehmenden Forschungsaktivitäten in den vergangenen Jahrzehnten basieren die üblichen Auslegungsmethoden auf den Betriebsbedingungen anstatt die Bildung der Foulingschicht zu berücksichtigen. Die Abschätzung des Foulingwiderstands (fouling resistance) kann ausschließlich anhand von experimentellen Ergebnissen erfolgen. Die Messdaten sind in der Regel zu einem gewissen Grad mit Rauschen behaftet. Foulingprozesse sind stets mit Rauschen verbunden, was die Anwendbarkeit von Modellierungsansätzen zunichtemacht.

Darüber hinaus approximieren die meisten verfügbaren Modelle und Korrelationen die anfängliche Foulingrate (initial fouling rate) als Funktion der Betriebsbedingungen des Wärmeübertragers. Insbesondere wird der dominante Ablagerungsmechanismus auf diese Weise beschrieben. Allerdings sind am Foulingprozess üblicherweise mehrere Mechanismen beteiligt, z. B. Kristallisation, chemische Reaktion, Partikelfouling. Die Wechselwirkung der verschiedenen Ablagerungsmechanismen führt zu einem nicht-linearen Phänomen, welches die Anwendbarkeit mathematischer Modelle erschwert. Zusätzlich muss die Abtragung der Foulingschicht aufgrund der Schubspannungen der Strömung zur Berechnung der Foulingrate berücksichtigt werden. Das Wechselspiel von Ablagerung und Abtragung ergibt eine Vielzahl an typischen Foulingkurven, bspw. lineare, abfallende und asymptotische Kurven. Die endgültige Form solcher Modelle beinhaltet eine Vielzahl an Koeffizienten, welche durch Regression an die experimentellen Daten bestimmt werden müssen.

In dieser Arbeit werden die mathematischen Werkzeuge Kalman-Filter sowie neuronale Netze angewendet, um die Foulingtendenz von Wärmeübertragern möglichst genau und zuverlässig abzuschätzen. Die Methoden werden auf Wärmeübertrager in Vorwärmungsstrecken (Crude Preheat Trains (CPTs)) für Rohölraffinerien angewendet. Der Kalman-Filter minimiert die Kovarianz des Abschätzungsfehlers indem sowohl die Ungenauigkeit des mathematischen Modells als auch der Messwerte berücksichtigt werden. Dies wiederum erfordert die korrekte Festlegung der Werte für das mathematische Modell und die Messwerte. Die Beziehung zwischen diesen Werten bestimmt die Glattheit und Genauigkeit des Verlaufs des Foulingwiderstands.

Eine Vielzahl an Algorithmen ist verfügbar um die Kovarianz des Prozess- und Messwerttauschens auszuwählen. Beispielsweise tragen konstante Werte für die Kovarianz des Prozess- und Messwerttauschens zur Glattheit der berechneten Foulingkurve bei. Folglich können sowohl sehr glatte als auch hochgradig rauschbehaftete Foulingkurve bestimmt werden. Ein genauer Wert für die Kovarianzmatrizen lässt sich jedoch nur durch Ausprobieren (trial-and-error) bestimmen. Eine andere Methode besteht in der statistischen Analyse der Kovarianz des Prozess- und Messwerttauschens. Hierbei werden die Messwerte mit den berechneten Werten verglichen, um zu einer besseren Abschätzung des Foulingwiderstands ohne Ausprobieren zu gelangen. Beide Methoden wurden auf eine Datenbank industrieller Foulingverlaufswerte (High Temperature Fouling Unit (HTFU)) angewendet. Der Vergleich der experimentellen Werte mit den berechneten Werten mittels Kalman-Filter bestätigte die Zuverlässigkeit der angewendeten Methode zur qualitativen und quantitativen Bestimmung des Foulingwiderstands für verfügbare Experimente der HTFU Datenbank. Obwohl der Kalman-Filter sinnvoll zur Berechnung von Foulingwiderständen eingesetzt werden kann, ist die Entwicklung eines allgemeingültigen mathematischen Prozessmodells (für alle Arten von Wärmeübertragern) zur Berechnung des Foulingwiderstands zu jedem Zeitpunkt nicht möglich.

Ein weiteres leistungsfähiges Werkzeug zur Modellierung der Foulingneigung in CPTs stellt die Implementierung von künstlichen neuronalen Netzen dar (Artificial Neural Networks (ANNs)). ANNs werden üblicherweise zur Berechnung von Prozessen eingesetzt, welche sich nicht oder nur schwer durch mathematische Korrelationen beschreiben lassen. Die künstlichen neuronalen Netze müssen zu Beginn mit einem Satz an experimentellen Daten (Betriebsbedingungen und gemessenen Foulingwiderständen über der Zeit) trainiert werden. Die so trainierten ANNs lassen sich im Anschluss als Berechnungswerkzeug für neue Betriebsbedingung anwenden.

Die Modellierung des Foulingwiderstands mittels neuronaler Netze wurde im Rahmen dieser Arbeit durch eine Vielzahl an Kombinationen von Eingangs- und Ausgangsgrößen realisiert:

- (1) Berechnung (Approximation und Vorhersage) des Foulingwiderstands als Funktion der Zeit,
- (2) Berechnung des Foulingwiderstands als Funktion der Betriebsbedingungen in jedem Zeitschritt und
- (3) Berechnung des Foulingwiderstand als Funktion der Betriebsbedingungen und des Foulingzustands des Wärmeübertragers.

Die Ergebnisse zeigten sehr gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Werten und den berechneten Foulingwiderständen der meisten Fälle. ANNs wurden auch zur Klassifizierung von Foulingkurven angewendet. Die Foulingkurven können in lineare, abfallende und asymptotische Kurven unterschieden werden. Die Klassifizierung erfolgte ausgehend von den anfänglichen Betriebsbedingungen der Wärmeübertrager zur Vorhersage der Foulingkurve. Die Klassifizierung war für 70% der verfügbaren Experimente der Datenbank genau.

Trotz der zufriedenstellenden Leistung von neuronalen Netzen, liefern diese aufgrund ihres Black-Box-Charakters keine physikalische Beziehung zwischen den Ein- und Ausgangsgrößen. Zur Unterscheidung verschiedener Eingangsgrößen und deren Einfluss auf

die anfängliche Foulingrate wurden daher einige Methoden wie Verknüpfungsgewichte (Connection Weights), partielle Ableitungen (Partial Derivatives), Störung der Eingangsgrößen (Input Perturbation) und Profilanalysen (Profile Analysis) angewendet. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass die wichtigste Einflußgröße die Oberflächentemperatur ist, gefolgt vom Rohöl Instabilität Index (Crude Instability Index (CII)), der Fluidtemperatur, dem Oberflächenmaterial sowie der Strömungsgeschwindigkeit. Abschließend wurde die Leistungsfähigkeit der entwickelten ANNs überprüft, indem zwei Eingangsgrößen simultan variiert wurden. Dies ermöglicht es dem Anlagenbetreiber Betriebsbedingungen zu vermeiden, bei denen die anfängliche Foulingrate hoch ist.

Der Kalman-Filter wurde abschließend eingesetzt um die Lebensdauer eines Wärmeübertragers unter Berücksichtigung einer geringen Zahl an Datenpunkten zu Beginn jedes Experiments zu schätzen. Die Ergebnisse bestätigten, dass die Lebensdauer und der asymptotische Foulingwiderstand mit sehr hoher Genauigkeit berechnet werden kann. Die Ergebnisse tragen dazu bei das Leistungsverhalten von Wärmeübertragern vorherzusagen und die Dauer von Experimenten auf 20% zu reduzieren.

CONTENTS

DEDICATION	i
ABSTRACT	iii
ZUSAMMENFASSUNG	vii
ACKNOWLEDGEMENTS	xi
CONTENTS	xiii
LIST OF FIGURES	xvii
LIST OF TABLES	xxiii
NOMENCLATURE	xxv
1 INTRODUCTION	1
1.1 Fouling Propensity in Crude Preheat Trains (CPTs)	3
1.2 Prediction of Crude Oil Fouling	4
1.3 Objectives of Study	6
1.4 Scope of Present Study	7
2 LITERATURE SURVEY	9
2.1 Sequence of Fouling in Heat Exchangers	9
2.1.1 Initiation or Induction Period	9
2.1.2 Mass Transport	10
2.1.3 Deposition	10
2.1.4 Removal or Auto-retardation	11
2.1.5 Ageing	12
2.2 Various Fouling Trends	12
2.3 Fouling Mechanisms	13
2.3.1 Chemical Reaction Fouling	13
2.3.2 Crystallization Fouling	14
2.3.3 Corrosion Fouling	15
2.3.4 Biofouling	15
2.3.5 Particulate Fouling	15
2.3.6 Mixed Fouling	16
2.4 Removal Mechanisms	16
2.4.1 Shear Stress	16
2.4.2 Turbulent Burst	17
2.4.3 Suppressing Asphaltene Adhesion	17
2.5 Approximate Influence of Operating Conditions on the Formation of Fouling Layer	17
2.5.1 Surface Temperature	17
2.5.2 Bulk Velocity	18

2.5.3	Bulk Temperature	19
2.5.4	Surface Substrate	19
2.5.5	Chemical Properties of Crude Oil	19
2.6	General Fouling Mechanism in CPTs	20
3	PARAMETRIC MODELLING OF CRUDE OIL FOULING IN PREHEAT TRAINS	21
3.1	Introduction	21
3.2	Calculation of Fouling Resistance	23
3.3	Governing Equations	23
3.3.1	Energy Equation for the Bulk Fluid	23
3.3.2	Energy Equation for the Tube Wall under Clean Conditions	24
3.3.3	Energy Equation for the Tube Wall under Fouling Conditions	24
3.4	Crude Oil Threshold Fouling Models in CPTs	26
3.4.1	Ebert-Panchal Model	26
3.4.2	Polley Model	27
3.4.3	Nasr-Givi Model	27
3.4.4	Experimental Set-up for Investigation of Fouling Propensity in CPTs	27
3.4.5	Analysis of the Data-bank for Implementing Artificial Neural Networks	27
4	NON-PARAMETRIC MODELLING OF FOULING PROPENSITY IN CPTS	31
4.1	Introduction to Non-Parametric Modelling	32
4.2	Kalman Filter as a Universal Estimator of the Fouling Propensity in CPTs	32
4.2.1	Mathematical Principles of Discrete Kalman Filter	33
4.2.2	Implementation of Kalman Filter for Estimation of Fouling Propensity in CPTs	41
4.2.3	Adapting the Kalman Filter	42
4.2.4	Process and Measurement Noise Covariance	43
4.2.5	Adaptive Estimation of Measurement Noise Covariance	54
4.2.6	Adaptive Estimation of Process Noise Covariance	58
4.3	Modelling of Fouling Propensity in CPTs Using Artificial Neural Networks (ANNs)	61
4.3.1	Principles of Neural Networks	63
4.3.2	Network Architectures	63
4.3.3	Training the Neural Networks	65
4.3.4	Implementation of Neural Networks	67
4.3.5	Estimation of Fouling Resistance Using Artificial Neural Networks Based on the Fouling Trend of the Heat Exchanger	71
4.3.6	Estimation of Fouling Resistance Using Artificial Neural Networks Based on the Operating Conditions of the Heat Exchanger	79
4.3.7	Estimation of Fouling Resistance Using Artificial Neural Networks Based on Operating Conditions and the Fouling State of the Heat Exchanger	84
4.3.8	Classification of Fouling Trends Based on the Initial Operating Conditions	89
4.4	Input Analysis and Input Discrimination	93
4.5	Input Discrimination and the Performance of Various Neural Network Architectures	93
4.5.1	Connection Weights Method	94
4.5.2	Partial Derivatives (PaD) Method	95
4.5.3	Input Perturbation Method	97

4-5-4	Profile Analysis Method	99
4-5-5	Conclusions	101
4.6	Parametric Assessment of the Developed Neural Networks Using Partial Derivative Method	101
5	PREDICTION OF CRITICAL STATUS OF HEAT EXCHANGERS	107
5.1	Prediction of Fouling Trend Based on Initial Fouling Rate and Initial Rate of Fouling Rate	107
5.2	Other Case Studies	111
6	CONCLUSIONS AND FUTURE WORK	115
6.1	Future Works	118
A	NORMALIZATION METHODS	121
A.1	Min-Max Normalization	121
A.2	Gaussian Normalization	122
B	TRAINING ALGORITHMS	125
B.1	Levenberg-Marquardt back-propagation	125
B.2	Gradient descent with adaptive learning rate back-propagation	125
B.3	Gradient descent with momentum back-propagation	125
B.4	Gradient descent with momentum and adaptive learning rate back- propagation	126
	BIBLIOGRAPHY	127