

MASTER

Invloed van de TLE op de optimale sturingen van een ethaankraakoven

Kluijtmans, R.J.G.F.

Award date:
1985

[Link to publication](#)

Disclaimer

This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

Invloed van de TLE op de optimale
sturingen
van een ethaankraakoven.

R.J.G.Kluijtmans NR-1121(1985-01-29)

afstudeerdocent : prof.dr.ir. P.M.E.M. van de Grinten
begeleider : ir. J.W.J.M. van der Heijden

Samenvatting

De laatste jaren is in de vakgroep Systeem- en Regeltechniek van de afdeling Technische Natuurkunde onderzoek verricht naar het gedrag en de optimale sturing van een ethaankraakinstallatie. Het kraakproces is een langzaam veranderend proces omdat er naast het hoofdproduct etheen en de nevenproducten ook ongunstige kool gevormd wordt. Deze koolvorming heeft tot gevolg dat het gedrag van de kraakoven in de loop van de tijd verandert.

Na verloop van tijd neemt de koolafzetting dusdanig grote vormen aan dat de installatie uit bedrijf genomen moet worden en schoon gemaakt dient te worden. Deze ongewenste onderbreking kan uitgesteld worden door voor een andere sturing te kiezen waardoor er gedurende langere tijd winst gemaakt kan worden. Maar deze veranderde sturing heeft als nadeel dat de winst per seconde lager wordt. Er zijn dus twee elkaar tegenwerkende invloeden op de winst. Het optimum kan gevonden worden door m.b.v. dynamisch optimaliseren de optimale tijdafhankelijke sturing te berekenen.

Het gasmengsel dat de kraakoven verlaat, wordt door een zgn. TLE gekoeld. In het verleden is de kraakinstallatie gemodelleerd zonder daarbij de TLE te betrekken. Uit de praktijk bleek echter dat een aanmerkelijk deel van de gevormde kool niet in de kraakbuis maar in de TLE neerslaat en dat door de diameterverkleining van de TLE de drukval over de TLE aanzienlijk verandert. Dit heeft tot gevolg dat bij een bepaalde gewenste uitgangsdruk de druk in de kraakbuis veel verandert, waardoor het kraakproces beïnvloed wordt. De modellering van de TLE is dus van groot belang. In dit verslag worden de gevolgen van het modelleren van de TLE op het gedrag en de optimale sturingen van de gehele installatie beschreven.

Bij het modelleren van de TLE is aangenomen dat slechts een fractie α in de kraakbuis neerslaat en dat het restant in de TLE neerslaat. De precieze waarde van α is niet bekend, daarom is de gevoeligheid van het gedrag en van de optimale sturingen van de installatie voor fractie α onderzocht.

De trends in het momentaan gedrag bleken voor een kraker incl. TLE hetzelfde te zijn als voor een installatie zonder TLE.

Ook de trends in de dynamisch optimale sturingen bleken vrijwel hetzelfde te zijn voor een installatie met en zonder TLE.

Door het toestaan dat een fractie van de gevormde kool uit de kraakbuis wordt weggevoerd, wordt de cyclusgemiddelde winst groter (cyclus = bedrijfstijd + schoonmaaktijd). De waarde van de optimale bedrijfstijd is voor alle waarden van α en ook zonder TLE voor de statisch en dynamisch optimale sturingen ongeveer 18 ± 1.5 dagen. Bij $\alpha = .5$ blijkt de grootste cyclusgemiddelde winst bereikt te kunnen worden.

INHOUDSOPGAVE :

Samenvatting

Inhoudsopgave

<u>1. Inleiding</u>	blz. 1
<u>2. Korte omschrijving van enige stoffen.</u>	2
<u>3. Kraakproces, probleemomschrijving en installatie.</u>	3
3.1 Kraakproces en probleemomschrijving.	3
3.2 Installatie	5
<u>4. Modelvorming van kraakprocessen</u>	7
4.1 Algemeen	7
4.2 Modelvorming van de pyrolyse van nafta/gasolie.	9
4.3 Modelvorming van het kraakproces van ethaan.	10
4.3.1 Inleiding.	10
4.3.2 Het model van de kraakoven.	11
4.3.3 Het model van de TLE.	15
4.3.4 Het model van de gehele installatie.	17
4.3.5 De winstfunctie.	17

<u>5. Momentaan gedrag van de ethaankraakoven met TLE.</u>	20
5.1 Inleiding	20
5.2 Invloed van de ingangsdruk op het kraakproces .	20
5.3 Invloed van de voeding zonder TLE.	29
5.4 Invloed van het stoomdebiet zonder TLE.	34
5.5 Invloed van de ovenwandtemperatuur zonder TLE.	36
5.6 Invloed van de TLE op het momentaan gedrag	41
5.7 Conclusies.	43
<u>6. Statisch en momentaan optimaliseren.</u>	44
6.1 Statisch optimaliseren.	44
6.1.1 Probleemomschrijving.	44
6.1.2 Verklaringsmechanismen.	44
6.1.3 Resultaten.	45
6.2 Momentaan optimaliseren.	54
6.2.1 Probleemomschrijving.	54
6.2.2 Resultaten.	55
<u>7. Dynamisch optimaliseren.</u>	61
7.1 Inleiding	61
7.2 Dynamisch optimale sturing bij vaste alfa.	62
7.3 Dynamische optima bij vaste bedrijfstijd.	69
7.4 Dynamische optima bij verschillende bedrijfstijd en alfa	71

8. Vergelijk van statische, momentane en dynamische optima. 74

9. Conclusies. 83

10. Symbolen.

11. Literatuur.

Appendix

A Het alfa-effect

B Winstgradient t.b.v. dynamisch optimaliseren

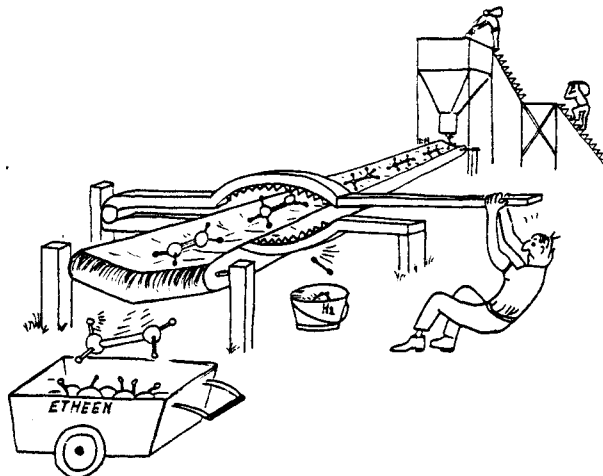
C Constanten en enkele formules.

1. Inleiding

Bij het thermisch kraken van ethaan ontstaat naast het hoofdproduct etheen en de nevenproducten ook kool. Deze vervuilt de kraakoven zodat de installatie na enige tijd uit bedrijf genomen moet worden om het systeem te ontkolen. Deze schoonmaakbeurt heeft twee vervelende aspecten :schoonmaken kost geld en wat nog ongunstiger is : tijdens het schoonmaken kan er niet geproduceerd en dus geen winst gemaakt worden. Nu kan de tijd tussen twee schoonmaakbeurten vergroot worden door voor een andere sturing te kiezen, bijvoorbeeld door het ethaan met stoom te verdunnen. Nu kan er over een langere tijd winst gemaakt worden hetgeen gunstig is. Maar de keerzijde van de medaille is dat de winst per seconde verlaagd wordt als gevolg van de stoomverdunding. Er werken dus twee elkaar tegenwerkende effecten op de integrale winst. De hamvraag is nu : Hoe is de (tijdafhankelijke) sturing zodat er het meeste winst gemaakt kan worden ?

De laatste jaren wordt er onderzoek verricht in de vakgroep Systeem- en Regeltechniek naar het gedrag en de optimale sturing van een ethaankraker. Tijdens het afstudeerwerk zijn de simulatiemodellen uitgebreid met een model van een deel van de koelsectie dat op de kraakoven volgt (zgn. TLE). In de praktijk blijkt dat een aanmerkelijk deel van de kool die in de kraakbuis gevormd wordt, naar de TLE getransporteerd wordt, waar deze vervolgens neerslaat. T.g.v. de kooldepositie in de TLE verandert de drukval over de TLE na verloop van tijd in grote mate met als gevolg dat de druk in de kraakbuis verandert, waardoor het kraakproces beïnvloed wordt. Er zijn simulaties gedaan en er zijn optimaliseringen met dit uitgebreide model uitgevoerd. De resultaten zijn vergeleken met die verkregen met de modellen zonder TLE.

Om de tijdafhankelijke sturing te vinden die de grootste cyclusgemiddelde winst oplevert, is een wiskundige methode op grond van geadjungeerde variabelen toegepast (cyclus:= bedrijfstijd + schoonmaaktijd).



bron: ir. P. Slenders, Servobode

2. Korte omschrijving van enige stoffen.

Het gewenste product van de in dit verslag beschreven installatie is etheen. Etheen is een chemisch halffabrikaat en dient als grondstof bij de produktie van o.a. polyetheen, etheenoxide vinylchloride (grondstof voor PVC), styreen. Etheen is de grondstof van 30 procent van alle petrochemische producten.

In de Verenigde Staten wordt hoofdzakelijk ethaan als grondstof voor de productie van etheen gebruikt terwijl in Europa hoofdzakelijk nafta gebruikt wordt. Procestechnisch gezien geniet ethaan de voorkeur boven het kraken van nafta/gasolie. De etheenopbrengst uit 1 mol ethaan is groter dan uit 1 mol nafta/gasolie en de vervuiling van de kraakinstallatie is minder. Tevens is nafta/gasolie een mengsel van stoffen dat niet precies gedefinieerd is, maar omschreven is door enkele globale grootheden zoals het traject van de destillatietemperaturen en gemiddelde moleculaire massa. Nafta/gasolie is dus slecht gedefinieerd. Het optimaal bedrijven van het proces is daardoor moeilijker. Een nafta/gasolie kraakinstallatie bevat naast de nafta/gasolie-kraakoven ook o.a. een ethaankraakoven. In figuur 2.1 is een indeling van ruwe olie in aardoliefracties gegeven.

fractie	destillatie traject (Celcius)	aantal koolstof-atomen per molecuul	toepassing (o.a.)
gas	=< 40	1 - 5	verwarming
nafta	40 - 180	6 - 10	benzine
kerosine	180 - 230	11 - 12	vliegtuig-brandstof
gasolie	>= 230	12 en meer	dieselolie
smeerolie	niet-vluchtige vloeistoffen		
asfalt/coke	niet-vluchtige vaste stoffen		

fig. 2.1 Fracties van ruwe olie.

In Europa wordt ondanks deze nadelen toch nafta als grondstof bij de etheenproductie gebruikt omdat er weinig ethaan in Europa voorhanden is, vergeleken met de Verenigde Staten. Maar in de Verenigde Staten treedt langzamerhand een verschuiving op naar nafta/gasolie als grondstof bij de etheenproductie vanwege het minder overvloedig en dus duurder worden van ethaan.

3. Kraakproces, probleemomschrijving en installatie.

3.1 Kraakproces en probleemomschrijving.

In deze paragraaf wordt het kraakproces beschreven en wordt het probleem omschreven. Er wordt hier over koolwaterstoffen gesproken omdat het verhaal algemeen van toepassing is, dus op het kraken van ethaan en van nafta/gasolie.

Een algemene eigenschap van het kraakproces is dat van grote moleculen kleinere gemaakt worden. Dit proces, ook wel pyrolyse genoemd, geschiedt zonder toevoeging van zuurstof i.t.t. het gewone verbranden (oxydatie) in ovens waar wel zuurstof wordt toegevoerd. Pyrolyse kan geactiveerd worden door een katalysator onder toevoeging van warmte, het zgn. katalytisch kraken. Deze vorm van kraken vindt vooral zijn toepassing bij de bereiding van benzine.

Bij een andere vorm van pyrolyse worden de moleculen afgebroken onder invloed van alleen warmte, dus zonder katalysator. Deze vorm wordt thermisch kraken genoemd. In de praktijk worden d.m.v. thermisch kraken vooral chemische halffabricaten geproduceerd.

In het lopend onderzoek in de vakgroep wordt onder kraken altijd thermisch kraken verstaan.

Pyrolyse berust op de vorming van vrije radicalen. Bij de reacties ontstaan geen vrije ionen, maar ongeladen deeltjes, de zgn. vrije radicalen. Bij dit mechanisme zijn er veel verschillende reacties mogelijk. Bij de modelvorming (hfst. 4) zal blijken dat dit tot te grote complicaties zou leiden en dat daarom slechts een klein aantal schijnbare, moleculaire reacties zijn gemodelleerd.

In het reactiemodel wordt een hoofdreactie en een aantal nevenreacties onderscheiden. De hoofdreactie zet de koolwaterstof om in etheen en nevenproducten:



Deze reactie is endotherm, zodat er warmte nodig is om het kraakproces te onderhouden.

Ook andere reacties treden op (nevenreacties), waaronder reacties die het door de hoofdreactie geproduceerde etheen in een andere stof omzetten.

Het geheel van de nevenreacties is exotherm. De vrijgekomen warmte is echter niet voldoende om de hoofdreactie te laten verlopen. Dit maakt het noodzakelijk warmte van buitenaf toe te voeren. Voor de pyrolyse van ethaan worden deze reacties nader beschreven in paragraaf 4.3.

Behalve bovenstaande reacties treedt nog een extra reactie op, namelijk de vorming van kool uit de aanwezige koolwaterstoffen. De gevormde kool zet zich enerzijds af op de binnenwand van de

reactorbuis en anderzijds wordt het afgevoerd naar de Transfer Line Exchanger (TLE) ,die op de kraakoven volgt,waar het vervolgens neerslaat (paragraaf 3.2). Als gevolg hiervan verandert het gedrag van de kraakoven en de TLE in de loop van de tijd. Het is dus een dynamisch (langzaam veranderend) proces.

De TLE is een warmtewisselaar die het gasmengsel dat de kraakoven verlaat afkoelt zodat de reacties snel afgeremd worden. De modelvorming van de TLE en optimaliseringen met de gehele installatie waren een deel van het afstudeerwerk. Er is onderzocht wat de invloed van de TLE op het gedrag en de optimale sturingen van de gehele installatie is.

Als gevolg van de opkoling stijgt ten eerste bij gelijkblijvende doorzet de drukval over de kraakoven en de TLE doordat de binnendiameter kleiner wordt. Verderop is te zien dat de uitgangsdruk van de TLE een voorgeschreven waarde dient te hebben. Stijging van de drukval betekent daarom dat een steeds hogere ingangsdruk aangelegd moet worden. Op den duur is verdere toename van deze druk niet meer toelaatbaar. De oven moet dan ontkoold worden.

Een tweede gevolg van de opkoling is het slechter worden van de warmteoverdracht via de buiswand naar het gasmengsel in de buis. De warmte die van buitenaf aan de buis wordt toegevoerd, kan steeds moeilijker worden doorgegeven aan het gas. Dit leidt tot stijgende temperaturen op de buitenwand van de buis. Overschrijding van een zekere maximaal toelaatbare waarde betekent ook hier dat de oven moet worden ontkoold.

De TLE beïnvloedt het kraakproces op de volgende wijze : door het inschakelen van de TLE wordt de drukval over het systeem groter en zal bij een bepaalde gewenste uitgangsdruk de ingangsdruk van de kraakbuis verhoogd moeten worden. Hierdoor wordt de druk in de kraakbuis in geringe mate groter hetgeen de koolvorming in de kraakbuis vergroot. Naast dit ongunstige gevolg van de TLE treedt er ook een nuttig effect op : een bepaalde fractie van de gevormde kool ($1 - \alpha$) slaat niet neer in de kraakbuis maar wordt naar de TLE voorgestuwd om daar tegen de relatief koele wanden neer te slaan.

Het opkoolproces kan worden vertraagd door de toegevoerde koolwaterstoffen te vermengen met stoom. De concentraties van de koolwaterstoffen worden door deze verdunning verlaagd. De opkoolreactie en de kraakreacties zullen hierdoor langzamer verlopen met als gevolg dat de momentane winst zakt (definitie paragraaf 4.3.5).

Hiermee is meteen het optimaliseringsprobleem aangestipt .Om een zo groot mogelijke winst per tijdseenheid te halen dienen de reacties zoveel mogelijk versneld te worden. Dit heeft echter ook een snellere opkoling tot gevolg. Dit verkort de bedrijfstijd tb waardoor er korter geproduceerd kan worden en er dus korter van die hoge winst per tijdseenheid geprofiteerd kan worden (tb := tijd tussen starten en stoppen van de kraakinstallatie). Bij een kortere bedrijfstijd is het relatieve aandeel van de schoonmaaktijd in de cyclustijd groter, hetgeen ongunstig is voor de cyclusgemiddelde winst (definitie paragraaf 4.3.5).

Wanneer er getracht wordt een lange bedrijfstijd te realiseren, dan zullen de reacties langzamer moeten verlopen. De winst per tijdseenheid zal lager worden, maar er kan wel langer van deze lagere winst geprofiteerd worden.

Tussen deze twee extremen :

- hoge winst per dag, korte bedrijfstijd
- lage winst per dag, lange bedrijfstijd

zal een optimum liggen. Bij de optimale bedrijfstijd is de cyclugemiddelde winst maximaal (cyclustijd $t_c := t_b + \text{schoon-}$ maaktijd t_s)

3.2 Installatie.

Het kraakproces vindt plaats in een buisreactor (fig. 3.1). De buis bevindt zich in een oven waarvan de binnenwand op hoge temperatuur wordt gehouden (1500 K) door een aantal branders. De ovenwand straalt warmte uit naar de buitenwand van de reactorbuis (temperatuur 1300 K).

De koolwaterstof wordt vermengd met stoom aan de oven toegevoerd. Het mengsel komt in de convectiesectie binnen. De buis wordt hier niet rechtstreeks aangestraald. Verwarming vindt plaats door warmteuitwisseling met de rookgassen die uit de radiatiesectie komen. De temperatuur van het gasmengsel wordt niet hoog genoeg om de reacties merkbaar te laten verlopen.

In de radiatiesectie wordt de buis aangestraald door de ovenwand. Hier zullen de reacties merkbaar op gang komen. In eerste instantie is dit alleen de hoofdreactie. Als het mengsel zich verder door de buisreactor verplaatst komen de nevenreacties op gang.

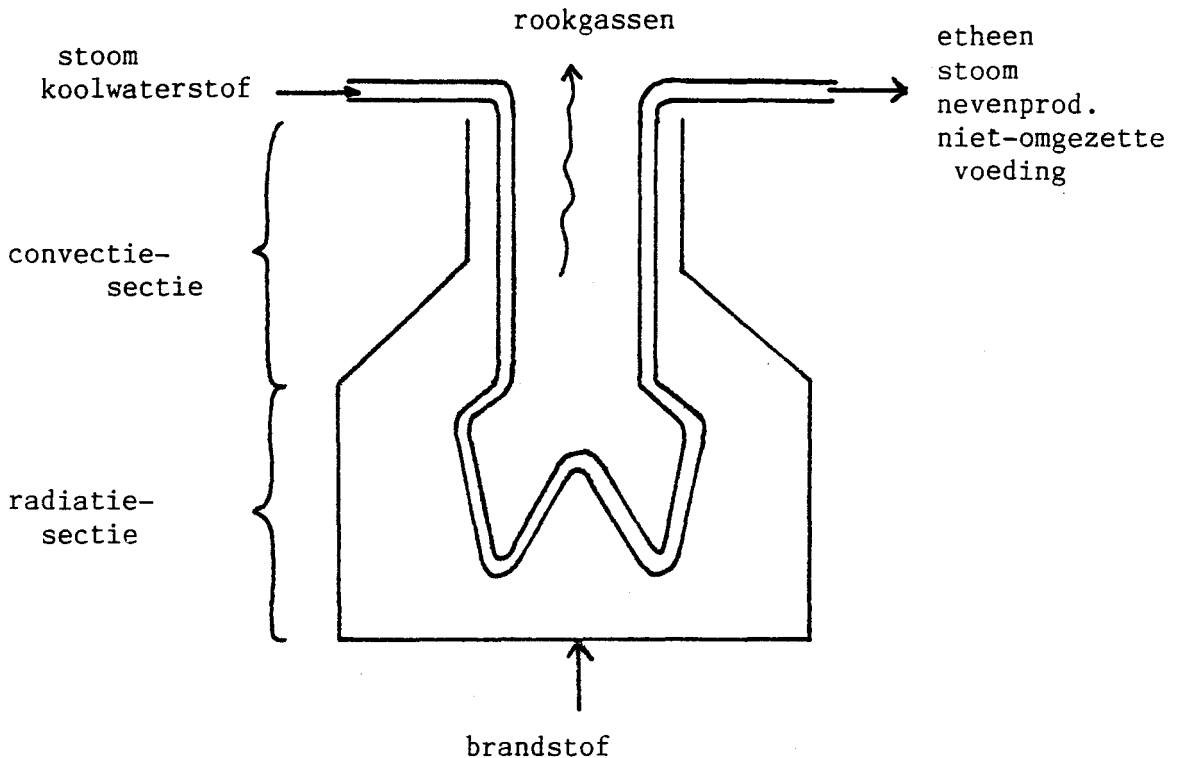


fig. 3.1 Schema van de kraakoven.

Het gasmengsel dat de buis verlaat bestaat uit niet-omgezette voeding, ethaan, nevenproducten en stoom. De stoom heeft niet aan de reacties deelgenomen.

De gehele ethaankraakinstallatie bestaat behalve uit een oven, nog uit een koelsectie, een compressor, een destillatiesectie en een mengpunt. Aan de oven wordt een mengsel van ethaan en stoom (resp. debieten: FI en FS) toegevoerd. In dit verslag wordt onder voeding verstaan : de stroom die de oven binnentreedt excl. het stroomdebiet. Ethaan dat niet is omgezet wordt opnieuw aan de oven toegevoerd (recycle). Een kraakinstallatie voor nafta/gasolie bevat zo'n recycle-lus niet. In fig. 3.2 is een overzicht gegeven van de gehele ethaankraakinstallatie.

Het gasmengsel dat de oven verlaat heeft een temperatuur van circa 1100 K. In de koelers wordt warmte aan dit gas onttrokken. Het eerste gedeelte van de koelsectie is een soort warmtewisselaar : de Transfer Line Exchanger (TLE). Hier wordt het mengsel enige honderden graden afgekoeld. Het tweede gedeelte van de koelsectie bevat zgn. quench coolers en luchtcoolers waar de temperatuur van het mengsel tot rond de omgevingstemperatuur wordt gereduceerd. Dit gedeelte van de koelsectie is niet bij de modelvorming betrokken.

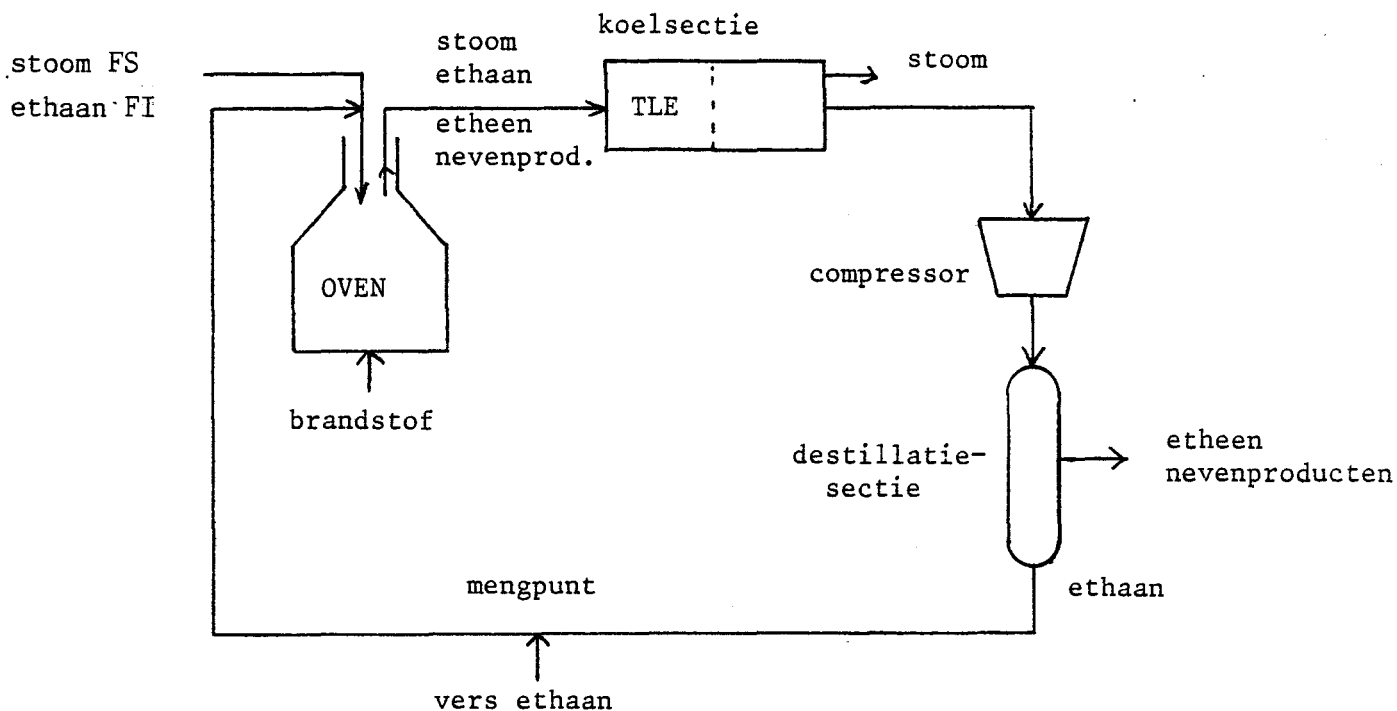


fig. 3.2 Overzicht van de ethaankraakinstallatie.

Na de koelsectie bevat de gasstroom geen stoom meer. Deze is dan inmiddels gecondenseerd. Een belangrijke functie van de koelsectie is het abrupt afremmen van de chemische reacties die in de oven verlopen. Zou de koelsectie ontbreken dan zouden de chemische reacties ook na de het verlaten van de oven zich voortzetten vanwege de nog hoge temperatuur van het mengsel. De reacties zijn bij het verlaten van de kraakbuis in een dusdanig vergevorderd stadium aangekomen dat de opbrengst van het gewenste product (etheen) zou gaan afnemen en de opbrengst van zwaardere koolwaterstoffen zou gaan toenemen. Ook de koolvorming zou groter worden. Daarom is de sterke afkoeling van het mengsel bij het verlaten van de kraakbuis erg nuttig.

Na de koelers wordt het gas gecomprimeerd. De ingangsdruk van de compressor moet voor een goede werking boven een zekere minimum waarde liggen. Wanneer door opkoling de drukval over de kraakbuis en TLE stijgt zal de ingangsdruk van compressor op de gewenste waarde worden gehouden door een drukregelaar. Deze regelaar maakt gebruik van de ingangsdruk van de oven als ingreepgrootheid.

4. Modelvorming van kraakprocessen.

4.1 Algemeen.

Modellen in het algemeen kunnen geclassificeerd worden op grond van de mate waarin de structuur van de processen in het model verwerkt is. Het ene uiterste op deze schaal is het empirische model ("black box") : weinig of geen kennis over de structuur van

de processen is in het model verwerkt. Omdat bij het opzetten van het empirische model veel statistische technieken (bijv. regressie methoden) gehanteerde worden, kunnen deze modellen ook met statistisch (ofwel regressie) model aangeduid worden. Aan een empirisch model liggen geen reactiehypotesen ten grondslag. Er zijn ook geen differentiaalvergelijkingen in de plaats bij betrokken. Er worden alleen overall materiaal- en warmtebalansen in verwerkt. Een empirisch model wordt gemaakt aan de hand van veel experimentele gegevens, waarop natuurlijk veel statistische technieken toegepast moeten worden bij de verwerking. Enkele voordelen van empirische modellen zijn dat de ontwikkeling van het model relatief snel verloopt en dat ze eenvoudig te hanteren zijn. Enkele nadelen van empirische modellen zijn dat er veel experimentele gegevens nodig zijn, dat de modellen voor een zeer beperkte range van voedingen (procescondities) geldig zijn en dat ze alleen toegepast mogen worden bij een specifieke installatie : de installatie waaraan de experimenten zijn gedaan.

Aan het andere uiterste van de schaal bevinden zich de theoretische modellen. Hier is zoveel mogelijk relevante kennis over het proces in het model verwerkt en worden vereenvoudigingen van het model pas in een later stadium verricht. Voor het kraakproces betekent dit o.a. dat alle mogelijke radicaalreacties in het model zijn ondergebracht. Deze modelvorm wordt ook wel mechanistisch model genoemd. Enkele nadelen van theoretische modelvorming zijn dat er veel meer kennis nodig is dan bij empirische modelvorming en dat de grootte van de modellen enorm wordt. Dit laatste heeft tot gevolg dat de rekentijden zeer groot worden en dynamisch optimaliseren dat op zich al aanleiding geeft tot lange rekentijden wordt vrijwel onmogelijk met de computers die nu beschikbaar zijn. De voordelen zijn dat bij wijzigingen in de procescondities (debieten, temperaturen, type voeding etc.) of in de ontwerpparameters (bijv. het reactorvolume) bepaalde variabelen in het model eenvoudig bijgesteld kunnen worden zonder dat de voorspellende kracht van het model in gevaar komt. Een hieruit voortvloeiend voordeel is dat er geen dure proeffabriek ("pilot unit") meer nodig is. Een voorbeeld van een mechanistisch model is het door Ranzi ontwikkeld Spyro-model (zie Albright 1983 pg. 140 e.v.). Dit model was getest voor het kraken van lichte koolwaterstoffen en voor nafta. Naderhand bleek het voor gasolie ook zeer bruikbaar te zijn.

Een modelvorm die tussen de empirische en de theoretische modelvorm ligt is de moleculaire (ofwel stoichiometrische) modelvorm. Deze modelvorm kan ook wel "grey box" genoemd worden: de structuur van het proces is vaag te onderscheiden in het model. Het moleculaire model van de pyrolyse bestaat uit schijnbare, globale moleculaire reacties ondanks het feit dat pyrolyse d.m.v. het radicaalmechanisme verloopt. Een voordeel is dat deze modelvorm sneller ontwikkeld wordt en veel minder rekentijd nodig heeft dan het theoretische model. Een nadeel is dat het geldigheidsgebied kleiner is dan bij het theoretische model (doch groter dan bij het empirische model).

De modelvorm die bij het onderzoek naar de pyrolyse van ethaan in de vakgroep is gehanteerd is het moleculaire model. De reden hiervoor is dat het doel van het onderzoek het dynamisch

optimaliseren van het kraakproces is. Dit dynamisch optimaliseren is op zich al een uitgebreid numeriek proces. Het dynamisch optimaliseren van een theoretische modelvorm vereist een veel krachtiger computer dan er nu beschikbaar is. Daarbij komt ook nog dat we niet geïnteresseerd zijn in de precisie van de voorspellingen gedaan door het theoretische model. Bepaalde set-points zijn niet zo interessant. Trends zijn belangrijker. Daarbij zijn ook de veranderingen in trends interessant, als er voor een andere regelstrategie gekozen wordt

4.2 Modelvorming van de pyrolyse van nafta/gasolie.

Er zijn twee verschillende richtingen ingeslagen bij de poging de pyrolyse van nafta/gasolie te modelleren. Beide richtingen bleken niet geschikt te zijn voor het dynamisch optimaliseren van de nafta/gasolie-kraakoven.

Als eerste is het model van Hirato (Hirato 1971 en 1973) gehanteerd. Dit is een moleculair model. Het is m.b.v. een experimentele opstelling geverifieerd door Hirato. Enige kenmerken van deze opstelling die afwijken van de industriële praktijk zijn de korte buislengte, een uniforme (geregelde) temperatuur, het ontbreken van een drukval over de buis en het ontbreken van koolvorming omdat er alleen momentane experimenten met een schone buis werden gedaan.

Er zijn aanpassingen gemaakt op dit model zoals het inbouwen van de de drukval en van een opgedrukt ,onafhankelijk temperatuurprofiel. De trends in de simulatieresultaten werden door industriële contacten acceptabel geacht.

Om uiteindelijk tot dynamisch optimaliseren te komen moest nog de koolvorming en de afhankelijkheid van het temperatuurprofiel ingebouwd worden. Het temperatuurprofiel wordt immers bepaald door de debieten, de soortelijke warmte van het mengsel en de reactiewarmte van de verschillende reacties (zie paragraaf 4.3). Er is onderzocht of de soortelijke warmte van het uitvalspakket benaderd kon worden door die van de ingaande stroom. Deze benadering bleek slechts verschillen in orde van procenten op te leveren , hetgeen voor het onderzoek acceptabel is. Dit is een zeer nuttig resultaat : overal in de kraakbuis kan de soortelijke warmte berekend worden door aan te nemen dat de voeding niet gereageerd heeft. Het benaderen van de reactiewarmte van de verschillende reacties als functie van de temperatuur leverde onoverkomenlijke problemen op. Er werden verschillen van orde van 100-200 % waargenomen. De oorzaak van de slechte benadering van de reactiewarmte ligt in het Hirato model : de samenstelling van de voeding en de talloze (> 100) radicaalreacties zijn niet gemodelleerd. Deze slechte benadering van de reactiewarmte was een dermate groot probleem dat er niet verder gegaan is in deze richting (Kluijtmans 6 april 1984).

De andere richting die ingeslagen is, is die van de regressiemodellen. Op de simulatiegegevens van een ethaankraakoven is regressie toegepast om een regressiemodel te vinden ,hopende dat de structuur van dit model ook bij de pyrolyse van

nafta/gasolie van toepassing zou zijn. Het volgens deze weg verkregen regressiemodel bleek bij optimaliseringen uitgevoerd door J. van der Heijden niet geschikt te zijn. Een reden hiervoor zou kunnen zijn dat het regressiemodel geen drukprofiel of temperatuurprofiel bevat maar slechts gemiddelde waarden hiervan (Kluijtmans 13 februari).

Concluderend kan gezegd worden dat beide richtingen niet zinvol waren om tot dynamisch optimaliseren te komen. Dit is de reden dat er verder geen onderzoek naar de pyrolyse van nafta/gasolie is gedaan

4.3 Modelvorming van het kraakproces van ethaan.

In deze paragraaf wordt het model van het kraakproces van ethaan beschreven. In de eerste subparagraaf wordt zeer beknopt het model van de kraakoven opgefrist. Een groot deel van deze recapitulatie is afkomstig uit (Grefte 1984). Zie ook (Heijden 1983). In de daarop volgende subparagraaf wordt het model van de TLE besproken.

4.3.1 Inleiding.

De tijdafhankelijke verschijnselen in de kraakinstallatie spelen zich af op twee verschillende tijdschalen. De dynamica van het kraakproces zelf speelt zich af op een schaal van enkele minuten.

Tegenover de snelle dynamica van het kraakproces staat de langzame dynamica van de opkoling. Het aangroeien van de koollaag op de wand van de kraakbuis en van de TLE speelt zich af op een tijdschaal van dagen.

Door het grote verschil in snelheid tussen het kraakproces en de opkoling, is het mogelijk te stellen dat het kraakproces voortdurend in een stationaire toestand verkeert. Het model is dan ook quasi-stationair. Het bevat partiële differentiaalvergelijkingen in de plaats voor het kraakproces en in de tijd voor de opkoling.

Het model van de kraakoven en TLE bevat drie stuurgrootheden :

- de ovenwandtemperatuur $TW(t)$
- de voeding $FI(t)$
- het stoomdebiet $FS(t)$

Naast deze drie onafhankelijke stuurgrootheden bevat het model van de kraakbuis twee onafhankelijke grootheden die tijdens het onderzoek constant gehouden zijn. Ten eerste is de ingangsdruk van de kraakbuis in principe vrij te kiezen w.b. het model van de kraakoven. De compressor die op de koelsectie volgt vereist echter een bepaalde voordruk, die bij het onderzoek op 1.47 bar gesteld is. De consequentie op het model van de kraakoven met TLE is dat de ingangsdruk van de kraakbuis niet meer vrij te kiezen is, maar dusdanig groot moet zijn dat de uitgangsdruk van de koelsectie aan de bovengenoemde voorwaarde voldoet. De compressor bewerkstelligt dus dat de ingangsdruk niet meer vrij te kiezen is.

Een tweede onafhankelijke grootte die tijdens het onderzoek constant gehouden is, is de intreetemperatuur van de radiatiesectie $T_I(t)$. Deze blijkt in de praktijk weinig te variëren zodat deze bij de modellering als constante (925 K) opgevat is.

Vanwege technische redenen zijn de ingangsdruk van de kraakbuis $P_i(t)$ en de maximale buiswandtemperatuur $T_{SMAX}(t)$ aan maxima gebonden, resp. 6 bar en 1300 K.

De drie stuurgrootheden zijn in fig. 4.1 weergegeven.

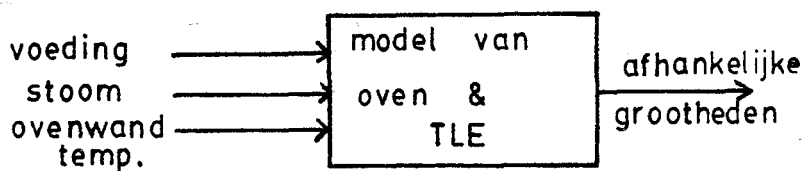
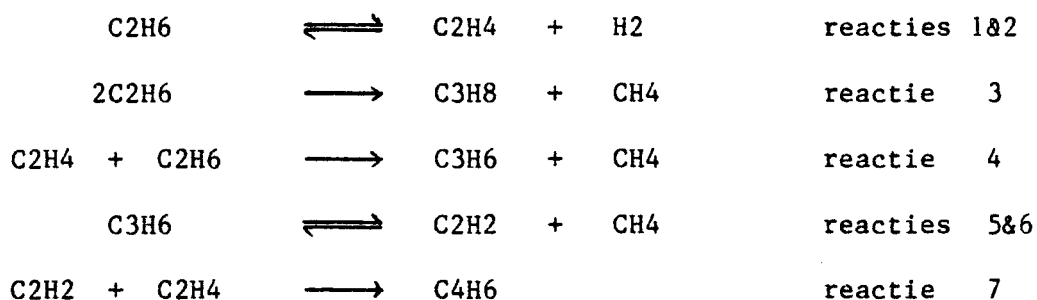


fig. 4.1 Het model van de oven met TLE als black box.

4.3.2 Het model van de kraakoven

Samenstelling gasmengsel

Het reactiemodel is een zgn. moleculair model (paragraaf 4.1) en is afkomstig uit (Froment 1977). In de gebruikte kinetiek worden vijf reacties onderscheiden, waarvan twee evenwichtsreacties. Deze reacties zijn :



De eerste reactie is de hoofdreactie. Deze is endotherm, het geheel van andere reacties is exotherm.

Naast deze reacties treedt er nog een zesde reactie op: de vorming van kool uit de aanwezige koolwaterstoffen. Deze koolvorming speelt momentaan gezien een zeer geringe rol. De koolvorming is op den duur echter niet verwaarloosbaar, omdat de gevormde kool in de buis neerslaat, waardoor de diameter verandert.

De snelheden $r(z,t)$ waarmee de reacties verlopen kunnen worden berekend uit de concentraties van de verschillende componenten. De reactiesnelheidsconstanten zijn temperatuurafhankelijk volgens het

Arrheniusverband. Er wordt aangenomen dat de (partiële) orde van de reacties 1 is.

De reactiesnelheden ($\text{mol/s}\cdot\text{m}^3$) worden berekend d.m.v. :

$$r_1 = k_1 * \{C_2H_6\} \quad (4.1)$$

$$r_2 = k_2 * \{C_2H_4\} * \{H_2\} \quad (4.2)$$

$$r_3 = k_3 * \{C_2H_6\} \quad (4.3)$$

$$r_4 = k_4 * \{C_2H_4\} * \{C_2H_6\} \quad (4.4)$$

$$r_5 = k_5 * \{C_3H_6\} \quad (4.5)$$

$$r_6 = k_6 * \{C_2H_2\} * \{CH_4\} \quad (4.6)$$

$$r_7 = k_7 * \{C_2H_2\} * \{C_2H_4\} \quad (4.7)$$

waarbij de reactiesnelheidsconstanten k_i ($1/s$ of $\text{m}^3/\text{mol}\cdot\text{s}$) gegeven zijn door het Arrhenius-verband :

$$k_i = k_{0,i} * \exp(-E_{Ai}/RT) \quad (4.8)$$

Hierin zijn $k_{0,i}$ en E_{Ai} resp. de frequentiefactor en de activeringsenergie van reactie i . De accoladen $\{\}$ geven aan dat het de concentratie (mol/m^3) betreft, bijv. :

$$\{C_2H_6\} := \frac{x_1}{F_T} * \frac{p}{RT} \quad (4.9)$$

hierin is F_T het totaaldebiet, R de gasconstante, p de druk, T de temperatuur en x_1 het ethaandebiet (mol/s).

Uit de reactiesnelheden volgen differentiaalvergelijkingen voor de molstromen van ethaan, etheen en nevenproducten:

$$\frac{\partial x_i(z,t)}{\partial z} = A(z,t) * C_i(z,t) * r(z,t) \quad i=1,\dots,8 \quad (4.10)$$

De vector C_i bevat de stoichiometrische coëfficiënten van de reacties waarbij component i betrokken is. De grootheid $A(z,t)$ is het oppervlak van de inwendige doorsnede van de buis.

De differentiaalvergelijking voor de stroom is triviaal :

$$\frac{\partial x_9(z,t)}{\partial z} = 0 \quad (4.11)$$

De toestandsvector $\underline{x}(z,t)$ bevat naast de debieten van de verschillende componenten ook de druk en de temperatuur (resp. x_{10} en x_{11}). Het ethaanverbruik $FC(t)$, de voeding $FI(t)$ en de ingangsdruk $Pi(t)$ zijn uit te drukken in \underline{x} :

$$FC(t) := x_{11}(L,t) - x_{11}(0,t) \quad (4.12)$$

$$FI(t) := x_{10}(0,t) \quad (4.13)$$

$$Pi(t) := x_{10}(0,t) \quad (4.14)$$

Voor alle molstromen gelden de randvoorwaarden aan het begin van de buis :

$$x_1(0,t) = F_1(t) \quad (4.15)$$

$$x_i(0,t) = 0 \quad i=2,\dots,8 \quad (4.16)$$

$$x_9(0,t) = F_9(t) \quad (4.17)$$

Druk.

Voor de druk kan een differentiaalvergelijking worden afgeleid uit de wet van behoud van impuls. De drukval over de buis wordt veroorzaakt door wrijving van het gas met de wand en de aanwezigheid van bochten in de buis.

De wet van behoud van impuls ziet er als volgt uit :

$$\frac{\partial (pA)}{\partial z} = -m * \frac{\partial v}{\partial z} - \pi * D * \sigma \quad (4.18)$$

Hierin is m de massastroom , v de snelheid van de gasstroom D de binnendiameter van de opgekoolde buis en sigma de schuifspanning langs de wand.

Door de werking van de drukregelaar is de uitgangsdruk van de TLE een vast getal. Dit is vereist voor de goede werking van de compressor. Het TLE model levert de ingangsdruk van de TLE op. Deze druk is per definitie gelijk aan de uitgangsdruk van de kraakbuis. De randvoorwaarden voor de druk in de kraakbuis wordt hierdoor :

$$x_{10}(L,t) = P_t(0,t) \quad (4.19)$$

Hierbij geeft achtervoegsel t aan dat het de TLE betreft.

Temperatuur.

Tenslotte geldt voor de temperatuur een differentiaalvergelijking die afgeleid kan worden uit de warmtebalans. In de balans komen termen voor die betrekking hebben op voelbare warmte, reactiewarmte en warmtetoevoer (flux).

De warmtebalans is :

$$CP * \frac{\partial T}{\partial z} = \pi * D_0 * q_f + \frac{\pi * D^2 * q_r}{4} \quad (4.20)$$

Hierin zijn CP en T de warmtecapaciteit resp. de temperatuur van het gasmengsel , D₀ de binnendiameter van de schone buis, q_f de flux en q_r de reactiewarmte. Uitgezonderd D₀ zijn deze grootheden functies van plaats en tijd. Flux q_f is gedefinieerd als de hoeveelheid warmte per eenheid van schoon binnenbuisoppervlak.

De intreetemperatuur van het gas ligt vast :

$$x_{11}(0,t) = T_I \quad (4.21)$$

De hiervoor besproken vergelijkingen en randvoorwaarden vormen het model van de reactorbuis. Het model heeft de volgende vorm :

$$\frac{\partial \underline{x}(z,t)}{\partial z} = f(\underline{x}, D, qf) \quad (4.22)$$

$$x_1(0,t) = F_I(t) \quad (4.23)$$

$$x_i(0,t) = 0 \quad i=2, \dots, 8 \quad (4.24)$$

$$x_9(0,t) = F_S(t) \quad (4.25)$$

$$x_{10}(L,t) = P_t(t) \quad (4.26)$$

$$x_{11}(0,t) = T_I \quad (4.27)$$

Hier is T_I een constante, $F_I(t)$ en $F_S(t)$ zijn instelbaar en $P_t(t)$ volgt uit het TLE model.

Het stelsel vergelijkingen kan numeriek worden opgelost als de flux $qf(z,t)$ en de diameter $D(z,t)$ bekend zijn.

Warmteflux

De flux $qf(z,t)$ wordt berekend d.m.v. het zgn. Fireboxmodel. De warmteoverdracht van de ovenwand naar het gasmengsel verloopt in twee stappen:

- warmteoverdracht door straling van de ovenwand naar de buitenwand van de buis
- warmteoverdracht door geleiding van de buitenwand van de buis naar het gasmengsel.

De laatste stap bevat het warmtetransport door de buiswand , de koollaag en een grenslaag in het gas.

Op grond van gastemperatuur T , ovenwandtemperatuur T_W , D en \underline{x} berekent het Firebox-model uit het stelsel $g(\underline{x}, D, qf, T_W, T_S, T) = 0$ de warmteflux qf en de buiswandtemperatuur T_S .

Diameter

In (Froment 1981) wordt een model gegeven om de door de opkoling veroorzaakte veranderingen van de diameter te berekenen. Dit opkoolmodel is t.b.v. het onderzoek aangepast : de parameter alfa is geïntroduceerd. Dit resulteert in de volgende vergelijking:

$$\frac{\partial D(z,t)}{\partial t} = - \gamma(T) * \{C_4H_6\}(z,t) * \alpha \quad (4.28)$$

Hierin is alfa de fractie van de hoeveelheid gevormde kool die in de kraakbuis neerslaat. Deze fractie is in het model van Froment geïntroduceerd omdat uit de praktijk bekend is dat niet alle kool in de kraakbuis neerslaat, maar een gedeelte met de gasstroom mee naar de TLE getransporteerd wordt. Omdat de grootte van de naar de TLE meegevoerde hoeveelheid niet bekend is, is in het model de parameter alfa ingevoerd ,waarvan de invloed op het proces

onderzocht kan worden. De factor $\gamma(T)$ is temperatuurafhankelijk via een Arrheniusverband.

De randvoorwaarde voor de diameter is:

$$D(z,0) = D_0 \tag{4.29}$$

4.3.3 Het model van de TLE.

Het TLE-model beschrijft het gedrag van het gedeelte van de installatie dat direct op de kraakbuis volgt en dat deel uitmaakt van de koelsectie : de Transfer Line Exchanger (TLE).

Het TLE-model heeft de volgende exogene grootheid :

- $x_i(L,t)$ $i=1, \dots, 11$

Deze grootheden worden met het model van de kraakoven berekend.

Het TLE-model heeft als endogene grootheid :

- de uitgangsdruk van de TLE : $P_t(L_t,t)$

De ingangsdruk van de TLE wordt bij het buismodel gebruikt als randvoorwaarde voor de druk in de kraakbuis.

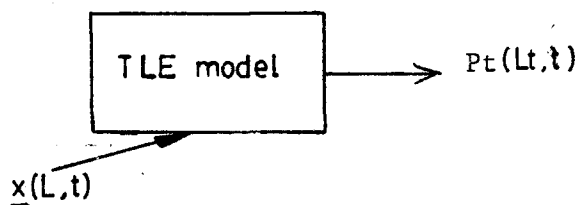


fig. 4.2 Het TLE-model als black box.

Bij het TLE-model zijn de volgende aannamen gemaakt :

- de uitgangstemperatuur van de TLE is constant (850 K) en het temperatuurverloop in de TLE is lineair
- er treden geen reacties en geen koolvorming op.

Deze aannamen weerspiegelen de werkelijkheid niet volledig , maar zij maken het TLE-model tot een hanteerbaar model waarmee in redelijke rekentijden geoptimaliseerd kan worden.

De hoeveelheid warmte die in de TLE onttrokken wordt is niet in het TLE-model ondergebracht. De hoeveelheid warmte die in de koelsectie ,waarvan de TLE deel uit maakt, wordt onttrokken was reeds in een eerder stadium van onderzoek (zie o.a. De Grefte) in de winstfunctie ondergebracht.

De drukval over de TLE wordt net als in het model van de kraakoven m.b.v. de wet van behoud van impuls berekend.

Het TLE-model is als volgt globaal weer te geven :

$$\partial x_{ti} / \partial z = 0 \quad i=1, \dots, 9 \quad (4.30)$$

$$\partial x_{t10} / \partial z = f(\underline{x}_t, Dt) \quad (4.31)$$

$$\partial x_{t11} / \partial z = \{ 850 - x_{11}(L,t) \} / Lt \quad (4.32)$$

met als randvoorwaarden:

$$\underline{x}(L,t) = \underline{x}_t(0,t) \quad (4.33)$$

$$x_{t10}(L,t) = P_u \quad (4.34)$$

$$x_{t11}(L,t) = 850 \text{ K} \quad (4.35)$$

Hierin geeft de letter t als achtervoegsel aan dat het de TLE betreft. Hierin is P_u de gewenste voordruk van de compressor (1.47 bar).

Diameter Dt

Doordat een fractie (1- α) van de gevormde kool niet in de kraakbuis neerslaat, maar naar de TLE getransporteerd wordt, verandert ook de diameter van de TLE in de loop van de tijd. De verandering van de diameter van een TLE-buisje wordt berekend volgens :

$$\frac{\partial Dt}{\partial t} = \frac{1}{n * Lt * Dt(t)} \int_0^L \frac{1-\alpha}{\alpha} * \frac{\partial D(z,t)}{\partial t} * D(z,t) dz \quad (4.36)$$

De integraal is evenredig met de hoeveelheid kool die niet in de kraakbuis neerslaat, maar naar de TLE getransporteerd wordt. De variabele n geeft het aantal TLE-buisjes aan dat op 1 kraakbuis is aangesloten (n=21). Enkele aannamen gemaakt voor de afleiding van (4.36) zijn :

- de hoeveelheid gevormde kool die naar de TLE getransporteerd wordt, slaat volledig neer in de TLE
- koolverdeling in de TLE is homogeen.

Door de diameterverkleiningen zal de drukval toenemen. De uitgangsdruk van de TLE moet een bepaalde waarde hebben om de compressor de benodigde voordruk te leveren. De druk in de kraakbuis zal daarom toenemen.

De parameter α is geen vrij te kiezen parameter. De waarde

hangt o.a. van de desbetreffende kraakinstallatie af en is niet precies bekend. Om toch een idee van de gevoeligheid van het model voor deze parameter te krijgen, zijn de simulaties en optimaliseringen bij enkele verschillende waarden van alfa gedaan.

4.3.4 Model van de gehele installatie.

In de vorige paragrafen zijn het model van de kraakoven en dat van de TLE behandeld. Gegeven de voeding $FI(t)$, het stroomdebiet $FS(t)$, de ovenwandtemperatuur $TW(t)$ en de fractie alfa kunnen de toestandsgrootheden op alle plaatsen en op elk tijdstip berekend worden.

Het model beschrijft het gedrag van de ethaankraakoven met een vrij ethaanaanbod. Het gedeelte van de koelsectie dat op de TLE volgt, de compressor en de destillatiesectie zijn niet gemodelleerd. Eveneens is de convectiesectie van de oven niet gemodelleerd. Deze gedeelten van de installatie worden wel in de winstfunctie verwerkt: destillatiekosten, compressiekosten en het totale verlies van voelbare warmte worden in rekening gebracht.

4.3.5 De winstfunctie.

De inschakeling van de TLE heeft geen invloed op de definities van de verschillende termen van de winstfuncties. Het onttrekken van warmte in de TLE was reeds in rekening gebracht in het rendement van het terugwinnen van de voelbare warmte. De definities van de verschillende termen veranderen niet, maar wel de grootte van de verschillende termen van de winstfunctie wordt beïnvloed omdat de TLE bepaalde invloeden op het kraakproces heeft (zie o.a. hoofdstuk 5).

De sturing van de oven wordt beoordeeld op de winst die met de installatie wordt gemaakt. Bij de optimalisering wordt een winstfunctie gebruikt die de prestatie van de oven uitdrukt in gulden per dag, gemiddeld over de bedrijfs cyclus (bedrijfstijd plus schoonmaaktijd).

In dit verslag zullen alle bedragen worden uitgedrukt in de schoonmaakkosten SK. Deze normering wordt ingevoerd om redenen van betrouwbaarheid.

De winstfunctie bevat de volgende opbrengsten en kosten:

- opbrengst: waarde uitvalpakket
- kosten: ethaanomzet
reactiewarmte
verlies voelbare warmte
scheidingskosten (compressie en destillatie)
schoonmaken

De grootste kostenpost is het ethaanverbruik. De kosten voor reactiewarmte en scheiding zijn met elkaar vergelijkbaar. Beide zijn duidelijk kleiner dan de ethaankosten. De andere verliesposten spelen geen rol van betekenis.

Waarde uitvalpakket.

De waarde van het uitvalpakket $WP(t)$ wordt berekend m.b.v. :

$$WP(t) := \sum_{i=2}^8 p_i * x_{ti}(L_t, t) \quad (4.37)$$

Omdat de molaire debieten in de TLE niet veranderen kan $x_{ti}(L_t, t)$ ook verwisseld worden door $x_i(L, t)$. Hierin is p_i de molaire prijs van component i .

Kosten ethaanverbruik.

De kosten van ethaan zijn gebaseerd op de calorische waarde van ethaan ($p_1=7 \text{ SK}/10^6 \text{ mol}$). De ethaankosten zijn :

$$k_e(t) := p_1 * FC(t) \quad (4.38)$$

Kosten reactiewarmte $k_{qr}(t)$ en verlies voelbare warmte $k_{qv}(t)$.

De warmte die door de branders in de firebox wordt geproduceerd, is slechts gedeeltelijk (ca. 1/3 deel) nodig voor de levering van de benodigde reactiewarmte.

De reactiewarmte wordt in rekening gebracht met behulp van de stookgasprijs :

$$k_{qr}(t) := p_s * QR(t). \quad (4.39)$$

Het restant van de door de branders geleverde warmte wordt omgezet in voelbare warmte van het gasmengsel in de kraakbuis of van de rookgassen die naar de convectiesectie getransporteerd worden. In de convectiesectie wordt deze voelbare warmte gebruikt om het inkomend gasmengsel voor te verwarmen. Een deel van de voelbare warmte wordt in de koelsectie teruggewonnen waarmee stoom geproduceerd wordt.

Bij het terugwinnen van voelbare warmte geldt een rendement η_{taqv} (=0.8). De kosten van de verliezen worden als volgt verrekend :

$$k_{qv}(t) := p_s * (1-\eta_{taqv}) * (Q_{Ve} * FI(t) + Q_{VS} * FS(t)) \quad (4.40)$$

Hierin is p_s de stookgasprijs ($5 \text{ SK}/10^{12} \text{ J}$) en is Q_{Ve} en Q_{Vs} de hoeveelheid voelbare warmte die resp. het ethaan en de stoom per mol opneemt in de convectiesectie. Deze warmten worden berekend uit de warmtecapaciteiten van stoom en ethaan en de temperatuurverschillen in convectiesectie. De verliesfactor $(1-\eta_{taqv})$ geeft de fractie van de hoeveelheid in de convectiesectie opgenomen warmte aan, die niet in de koelsectie teruggewonnen kan worden. In de radiatiesectie wordt duidelijk minder voelbare warmte opgenomen en deze wordt daarom niet in rekening gebracht.

Scheidingskosten ksch(t).

De scheidingskosten zijn de kosten van compressie en destillatie. Deze kunnen worden voorgesteld als evenredig met de totale molstroom van de koolwaterstoffen die de koelsectie verlaat (psch = 0.42 SK/10⁶ mol) :

$$ksch(t) := psch * \sum_{i=1}^8 x_{ti}(L_t, t) \quad (4.41)$$

Schoonmaakkosten SK.

Deze kosten hebben een aparte positie onder de winst- en verliesposten. De prijs van een schoonmaakbeurt is een vast getal dat niet afhangt van sturing of bedrijfstijd. Bovendien worden de schoonmaakkosten niet tijdens de bedrijfstijd gemaakt , zodat ze niet tijdafhankelijk zijn. Ze maken dan ook geen deel uit van de momentane winst , die verderop in deze paragraaf zal worden gedefinieerd.

In tegenstelling tot de schoonmaaktijd blijken de schoonmaakkosten geen belangrijke rol te spelen bij de optimalisering. De winst die wordt gemaakt is zo groot dat al enkele uren na het opstarten van de oven de kosten van het ontkolen zijn terugverdiend.

Momentane en gemiddelde winst.

Wanneer alle opbrengsten en kosten bij elkaar worden opgeteld ontstaat de winst die op een zeker tijdstip wordt gemaakt. Deze zogenaamde momentane winst is :

$$W_{mom}(t) := WP(t) - k_e(t) - k_{qr}(t) - k_{qv}(t) - ksch(t) \quad (4.42)$$

Met behulp van de momentane winst is de gemiddelde winst op een zeker tijdstip te definieren als :

$$W_{gem} := \frac{1}{t_b+t_s} \left\{ \int_0^{t_b} W_{mom}(t') dt' - SK \right\} \quad (4.43)$$

Deze uitdrukking geeft het totaal van alle opbrengsten en kosten , gemiddeld over de duur van een cyclus. Aangezien een deel van de cyclus wordt besteed aan het ontkolen van de reactorbuis , moet de schoonmaaktijd bij de middeling worden betrokken.

Bij alle uitgevoerde dynamische optimaliseringen is Wgem het criterium dat moet worden gemaximaliseerd.

5. Momentaan gedrag van de ethaankraakoven met TLE.

5.1 Inleiding.

In dit hoofdstuk wordt het momentaan gedrag van de kraakoven met TLE beschreven. De invloed van de druk en de onafhankelijke variabelen (de voeding FI, het stoomdebiet FS en de ovenwandtemperatuur TW) op het kraakproces worden beschreven en verklaard.

De invloed van verschillende waarden van de fractie alfa is eveneens bestudeerd en vergeleken met het gedrag van het systeem zonder TLE. (fractie alfa : fractie van de hoeveelheid gevormde kool die in de kraakbuis neerslaat).

Er is onderzoek gedaan met een schoon systeem en vervuild systeem. Onder een vervuild systeem wordt in dit hoofdstuk een kraakbuis met TLE verstaan die gedurende 12 dagen aan een statische sturing onderworpen is geweest waarbij de voeding FI, het stoomdebiet FS en de ovenwandtemperatuur TW resp. 28 en 2 mol/s en 1500 K waren.

In paragraaf 5.2 is de invloed van de ingangsdruk op het kraakproces beschreven. De paragrafen 5.3 t/m 5.5 beschrijven de invloed van de voeding, stoomdebiet en ovenwandtemperatuur op het kraakproces zonder TLE. Deze paragrafen zijn kort gehouden omdat dit reeds eerder beschreven is (Grefte 1984) en omdat de trends in de variabelen onafhankelijk van de grootte van alfa en van het al of niet ingeschakeld zijn van de TLE bleken te zijn.

De figuren in dit hoofdstuk zijn bij een schone buis tenzij expliciet het tegendeel vermeld is.

5.2 Invloed van de ingangsdruk op het kraakproces.

Het inschakelen van de TLE heeft tot gevolg dat de druk in de kraakbuis hoger wordt. Om een idee te krijgen wat de invloed van de druk op het kraakproces is, is in deze paragraaf de ingangsdruk van de kraakbuis als stuurvariabele genomen, hoewel het in werkelijkheid geen stuurgrootte is. In deze paragraaf is de invloed van de ingangsdruk op verschillende groottheden beschreven.

Zoals reeds eerder vermeld is, moet de uitgangsdruk van de kraakbuis met de TLE 1.47 bar zijn i.v.m. de vereiste voordruk van de compressor. In deze paragraaf echter worden geen eisen gesteld aan de uitgangsdruk. De ingangsdruk is hier onafhankelijk instelbaar. De ovenwandtemperatuur, de voeding en het stoomdebiet zijn hierbij constant gehouden (resp. 1500 K, 28 en 2 mol/s). De figuren in deze paragraaf zijn gemaakt bij een schone kraakinstallatie zonder TLE. In het laatste gedeelte van deze paragraaf wordt de invloed van de ingangsdruk bij een opgekoelde buis besproken. Eveneens wordt de invloed van de TLE en de fractie

alfa kort toegelicht.

Ingangsdruk

In fig. 5.1 is de uitgangsdruk van de kraakbuis als functie van de ingangsdruk gegeven. De afstand van de rechte lijn tot de kromme van de uitgangsdruk van de kraakbuis geeft de drukval over de kraakbuis weer. Het blijkt dat de drukval afneemt naarmate de ingangsdruk groter wordt. De verklaring hiervoor volgt uit de differentiaalvergelijking voor de drukval (appendix C).

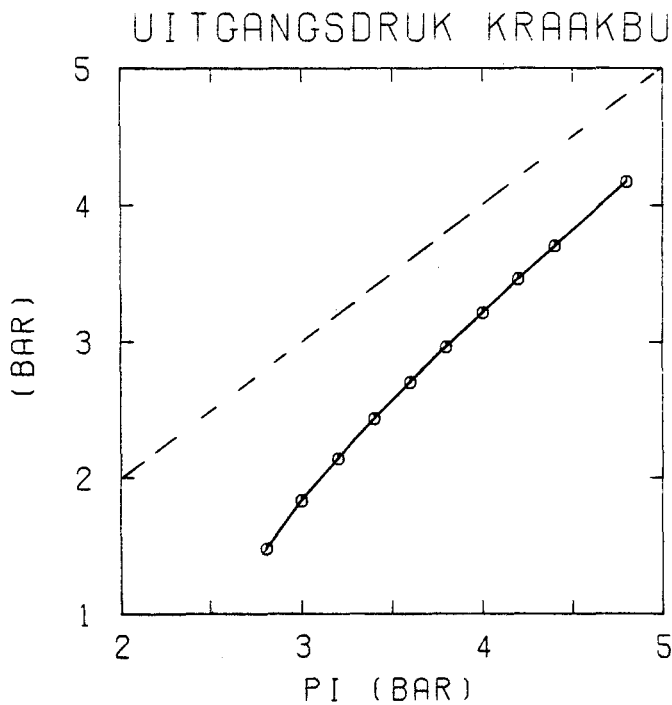


fig.5.1 Uitgangsdruk van de kraakbuis.

Ethaanverbruik en etheendebiet

In figuur 5.2 is het ethaanverbruik $FC(t)$ en het etheendebiet $FC_{2H_4}(t)$ aan de uitgang van de kraakbuis weergegeven. Het ethaanverbruik neemt toe als functie van de ingangsdruk omdat een hogere druk de concentratie van de reactanten vergroot waardoor de reacties sneller verlopen en er meer ethaan omgezet wordt.

Het etheendebiet aan de uitgang van de kraakbuis neemt af als de ingangsdruk vergroot wordt. Versnelling van de hoofdreactie zal tot gevolg hebben dat deze reactie meer etheen produceert maar deze grotere productie wordt tegengewerkt door het grotere etheenverbruik van de nevenreacties. Omdat er door twee nevenreacties etheen verbruikt wordt domineert het grotere etheenverbruik boven de grotere etheenproductie en neemt het netto etheendebiet af.

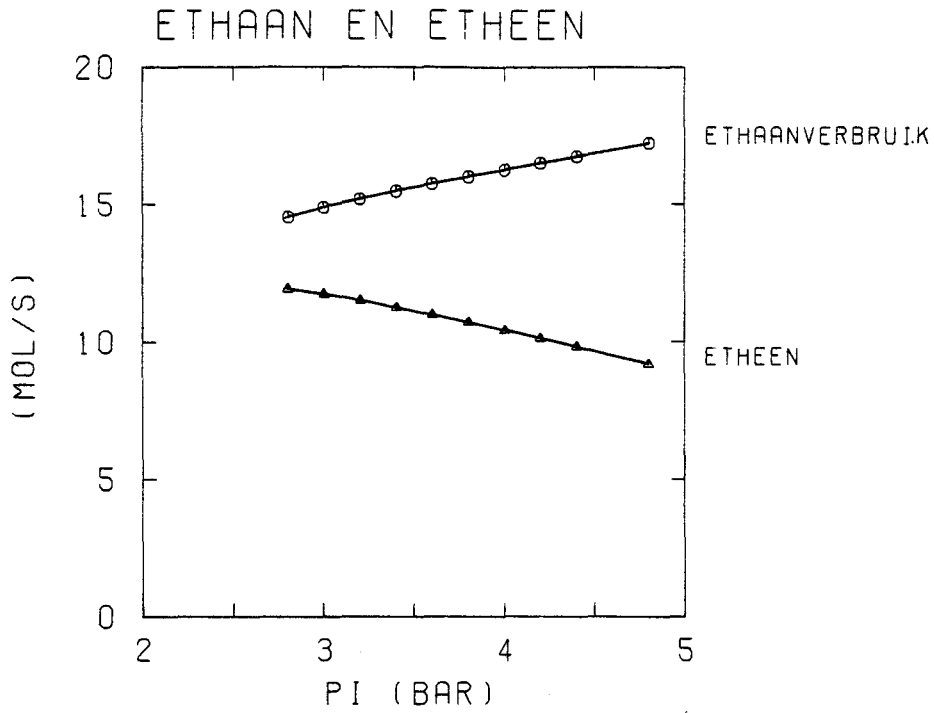


fig.5.2 Het etheendebiet en het ethaanverbruik.

Conversie en selectiviteit

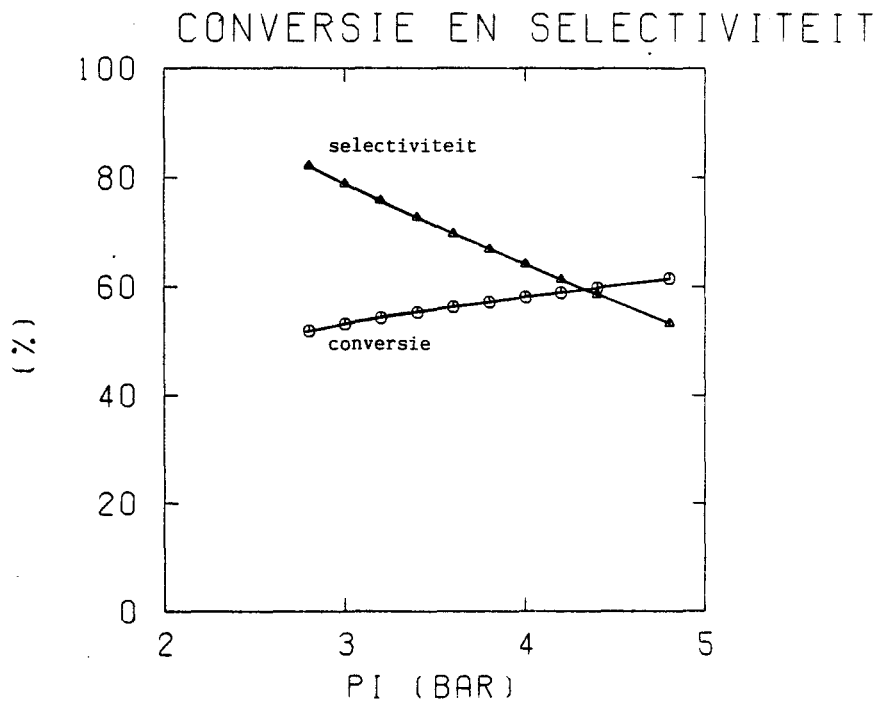


fig. 5.3 Conversie en selectiviteit.

In figuur 5.3 is de conversie en selectiviteit als functie van de ingangsdruk gegeven.

De conversie $CONV(t)$ is gedefinieerd als het ethaanverbruik $FC(t)$ per hoeveelheid voeding $FI(t)$:

$$CONV(t) := \frac{FC(t)}{FI(t)} \quad (5.1)$$

Een vergroting van de ingangsdruk leidt tot een grotere conversie omdat het ethaanverbruik toeneemt terwijl de voedingshoeveelheid FI gelijk blijft (fig. 5.2).

De selectiviteit $SEL(t)$ is gedefinieerd als het etheendebiet $FC2H4(t)$ gedeeld door het ethaanverbruik $FC(t)$:

$$SEL(t) := \frac{FC2H4(t)}{FC(t)} \quad (5.2)$$

De selectiviteit is af te leiden uit de curven van fig. 5.2.

De selectiviteit neemt af naarmate de ingangsdruk toeneemt omdat het etheendebiet afneemt en het ethaanverbruik toeneemt bij vergroting van de ingangsdruk (fig. 5.3). De selectiviteit verandert meer dan de conversie bij vergroting van de ingangsdruk omdat in de definitie van de selectiviteit het etheendebiet en het ethaanverbruik een vergrotende invloed hebben terwijl in de definitie van conversie alleen het ethaanverbruik een vergrotende invloed heeft.

Koolvorming

De hoeveelheid kool in de kraakbuis na 1 dag wordt groter bij het vergroten van de ingangsdruk (fig.5.4). De koolvorming is gedefinieerd als de fractie van het (schone) buisvolume dat door kool bezet is. De koolvorming (diameterverandering) is evenredig met de druk en het butadieendebiet (paragraaf 4.3.2). Als de ingangsdruk verhoogd wordt nemen de concentraties van de reactanten van de butadieenvormende reactie toe, zodat er meer butadieen gevormd wordt, waardoor de koolvorming groter wordt. De drukverhoging heeft ook een rechtstreekse vergrotende invloed op de koolvorming.

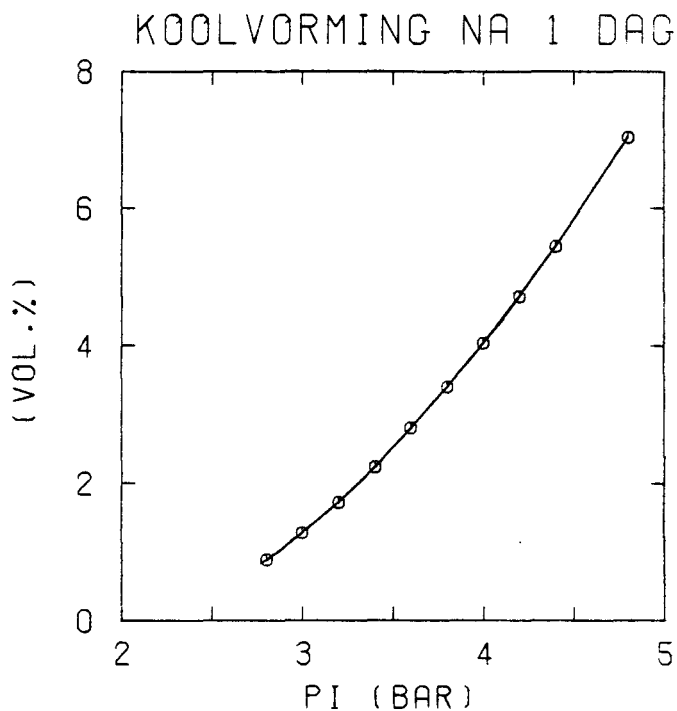


fig.5.4 Koolvorming.

Opbrengsten

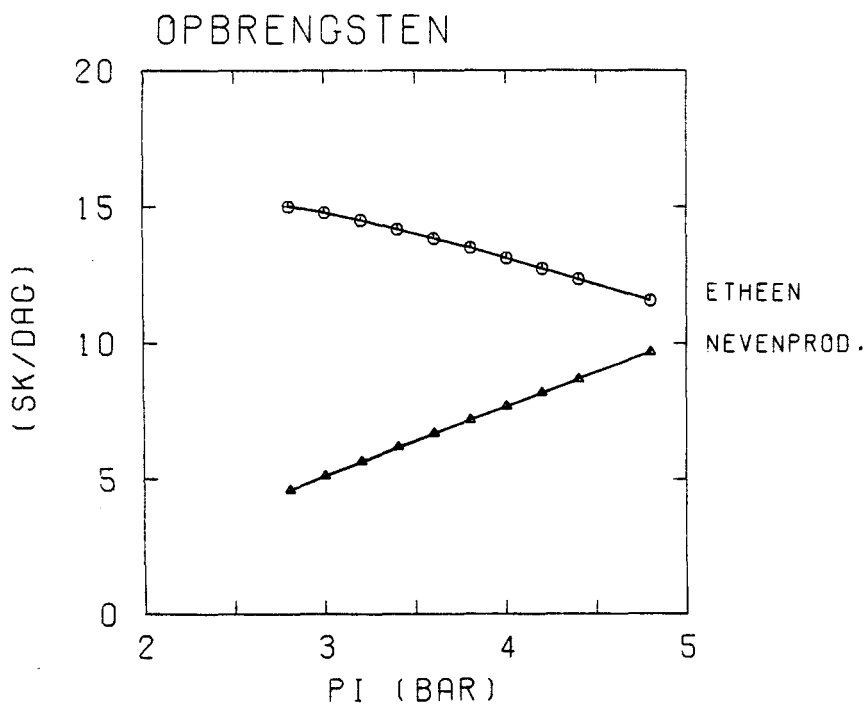


fig. 5.5 Opbrengsten.

De opbrengsten van etheen nemen af vanwege de afname van het etheendebiet en de opbrengsten van de nevenproducten nemen toe bij vergroting van de ingangsdruk vanwege de versnelling van de

nevenreacties (fig. 5.5).

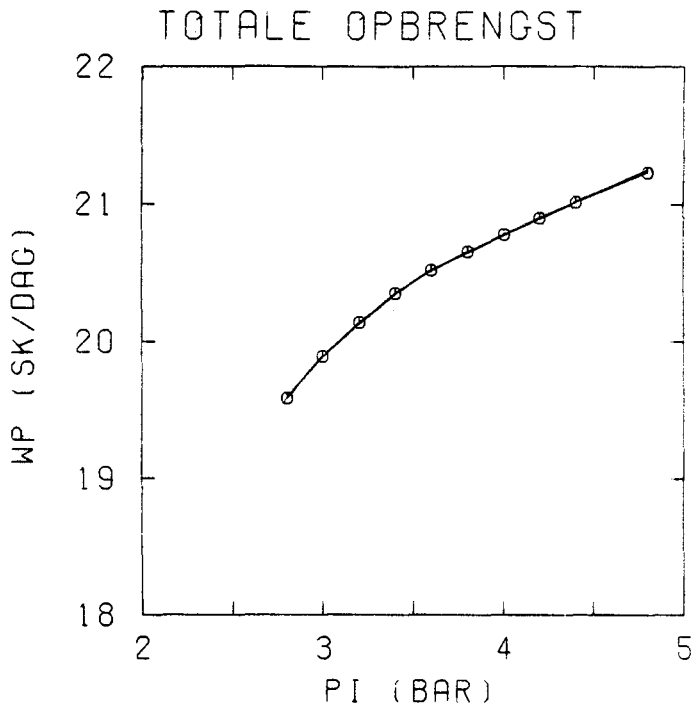


fig.5.6 Totale opbrengsten.

De toename van opbrengsten van de nevenproducten zijn dusdanig groot dat de totale opbrengst toeneemt bij vergroting van de ingangsdruk (fig.5.6).

Kosten

De kosten van het ethaanverbruik (fig.5.7) zijn evenredig met het ethaanverbruik en nemen toe omdat er meer ethaan omgezet wordt bij vergroting van de ingangsdruk.

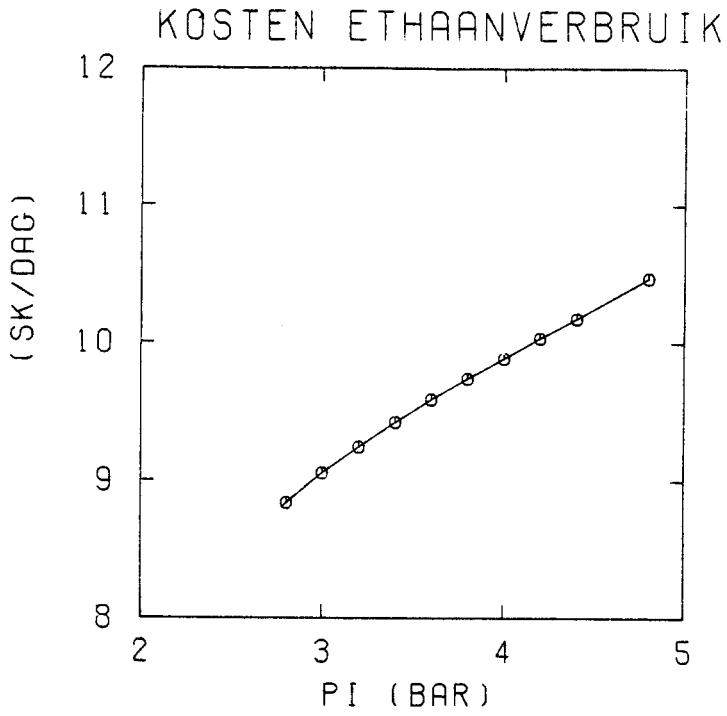


fig. 5.7 Kosten van het ethaanverbruik.

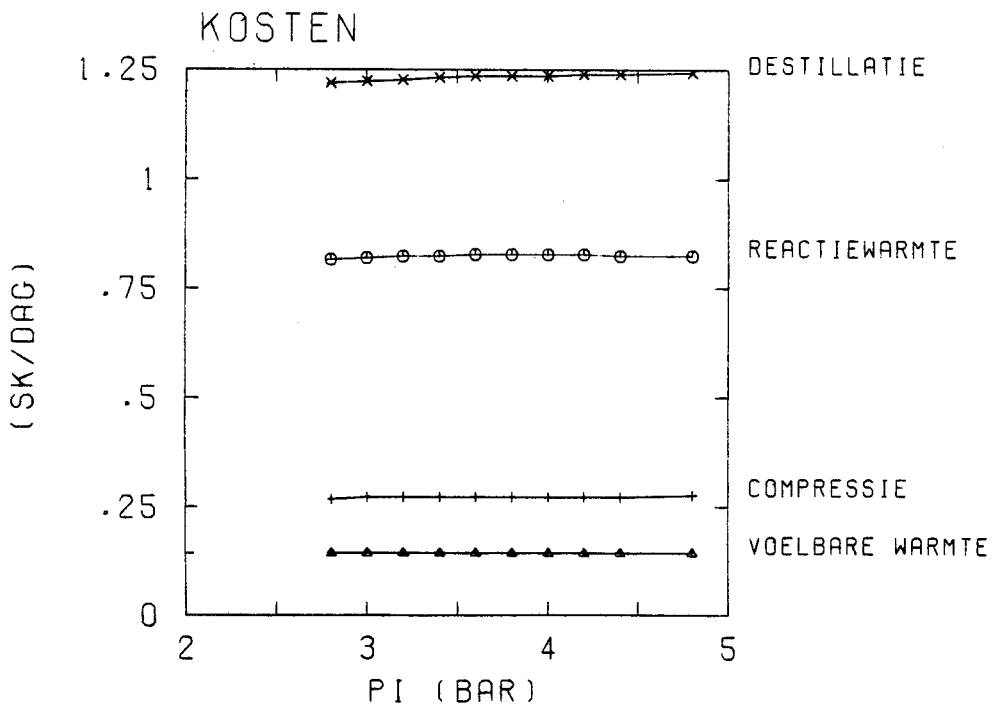


fig. 5.8 Kosten.

De destillatiekosten en compressiekosten, beiden evenredig met het

totale debiet aan de uitgang van de kraakbuis, nemen een weinig toe bij vergroting van de ingangsdruk omdat het totale debiet toeneemt (fig.5.8). De kosten voor het leveren van de reactiewarmte vertonen een ongenueanceerd maximum bij variatie van de ingangsdruk. Vergroting van de ingangsdruk versnelt de endotherme hoofdreactie waardoor er meer reactiewarmte nodig is. De als geheel exotherme nevenreacties worden ook versneld waardoor deze meer warmte afgeven. Toch kan bij een grotere ingangsdruk deze toegenomen warmteafgifte de toegenomen warmtebehoefte van de hoofdreactie niet compenseren en zal de netto benodigde reactiewarmte toenemen. Bij een grotere ingangsdruk gaan de nevenreacties voldoende warmte leveren om de netto behoefte aan reactiewarmte te doen afnemen. De kosten t.g.v. het verlies van de voelbare warmte zijn per definitie constant omdat in het model deze term alleen bepaald wordt door de voeding en het stoomdebiet.

Maximale buiswandtemperatuur

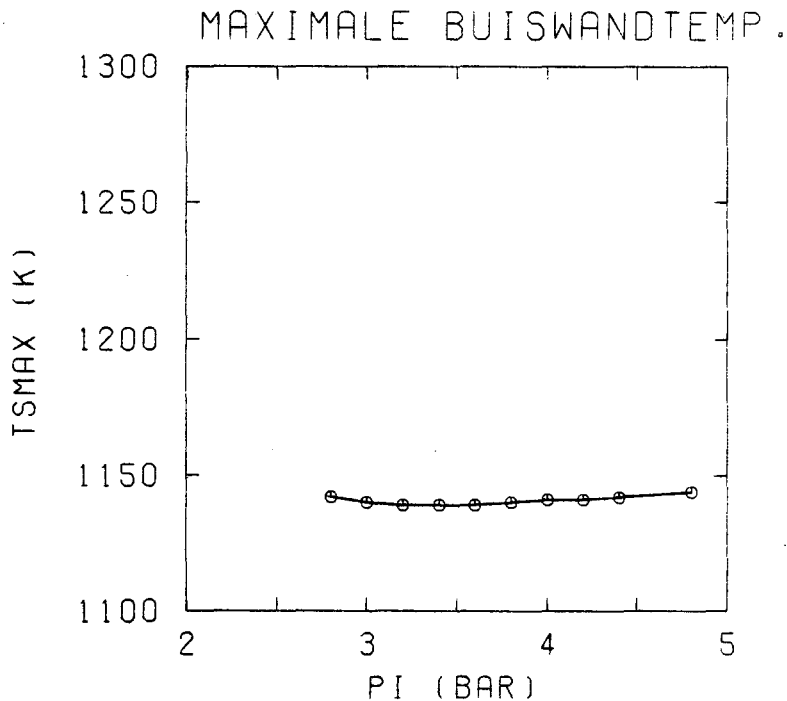


fig. 5.9 De maximale buistemperatuur.

In figuur 5.9 is de maximale buiswandtemperatuur TSMAX als functie van de ingangsdruk gegeven. Bij een vergroting van de ingangsdruk zal de maximale buiswandtemperatuur in eerste instantie afnemen vanwege de grotere debieten door de kraakbuis (zie fig. 5.8; de destillatie kosten zijn evenredig met het totaaldebiet en deze nemen iets toe). Een groter debiet kan immers minder verwarmd worden bij dezelfde ovenwandtemperatuur. Dit effect wordt versterkt omdat de benodigde reactiewarmte groter wordt (zie fig. 5.8; kosten

reactie warmte) en er dus minder warmte over blijft om het mengsel te verwarmen.

Bij vergroting van de ingangsdruk passeert TSMAX een minimum. De stijging die vervolgens in TSMAX optreedt wordt veroorzaakt door de afname van de reactiewarmte (zie ook bespreking fig. 5.8 ; de veranderingen in fig. 5.8 zijn niet duidelijk te onderscheiden, dit gaat beter met de getalwaarden).

Momentane winst

In figuur 5.10 is de momentane winst als functie van de ingangsdruk gegeven. Deze figuur is af te leiden door van de waarden uit figuur 5.6 de waarden uit de figuren 5.7 en 5.8 af te trekken, waarbij de voedingskosten en de totale opbrengst de belangrijkste termen van de totale winst zijn.

De momentane winst neemt eerst toe bij vergroting van de ingangsdruk om vervolgens af te nemen, omdat voor kleinere ingangsdrukken de toename van de totale opbrengst groter is dan die van de kosten van het ethaanverbruik (grafisch: steilere helling). Voor grotere ingangsdrukken neemt de totale winst af omdat de verandering van de verbruikskosten domineert.

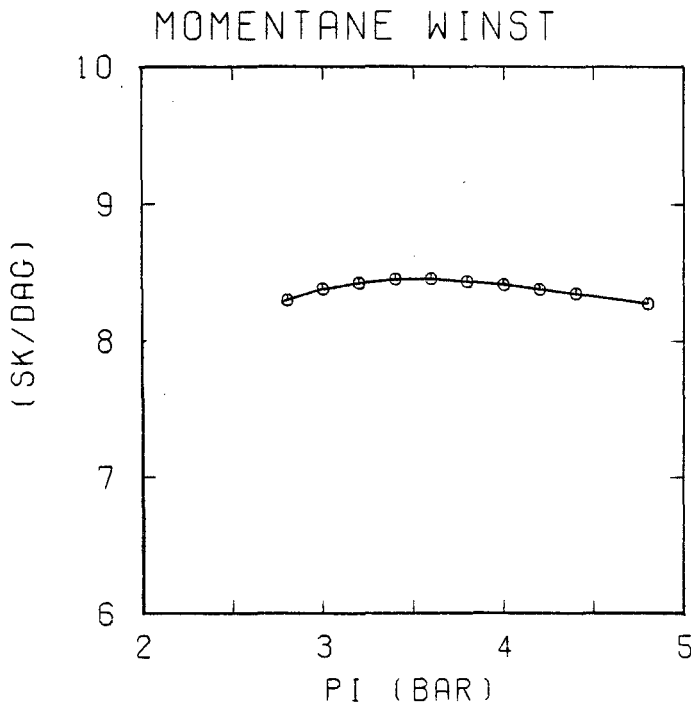


fig.5.10 Momentane winst.

Opgekoold systeem

De invloed van de ingangsdruk op de verschillende variabelen bij een opgekoold systeem is eveneens onderzocht. Het essentiële verschil met een schoon systeem is dat de diameterprofielen verschillend zijn van die van het schone systeem.

Dit opgekoelde systeem is verkregen door het systeem gedurende 12 dagen aan een statische sturing met voeding, stoomdebiet en ovenwandtemperatuur resp. 28 en 2 mol/s en 1500 K te onderwerpen. Dit is uitgevoerd voor het proces zonder TLE en voor een proces met TLE bij verschillende fracties alfa, hetgeen verschillende diameterprofielen opleverde. Wederom wordt bij de gegeven opgekoelde buis geen bepaalde uitgangsdruk geëist zoals wel geëist wordt alle andere paragrafen, maar is de ingangsdruk een vrij instelbare stuurvariabele.

De gesignaleerde trends voor een schone buis blijken bij de verschillende diameterprofielen niet wezenlijk verschillend te zijn.

Concluderend

Samenvattend kan opgemerkt worden dat als de ingangsdruk gevarieerd wordt dan dan de trends in het gedrag van een schoon systeem zonder TLE hetzelfde zijn als die voor een opgekoold systeem zonder TLE. De aanwezigheid van de TLE en de grootte van de fracties alfa hebben eveneens geen essentiële invloed op de trends.

5.3 Invloed van de voeding zonder TLE.

In de paragrafen 5.3 t/m 5.5 worden reeds eerder gepubliceerde resultaten opgefrist (Grefte 1984), zodat de bespreking zeer beknopt is gehouden. In paragraaf 5.6 wordt de invloed van de TLE besproken.

De figuren in de paragrafen 5.3 t/m 5.5 bevatten de curven zonder TLE en met TLE. In deze paragrafen zijn alleen de curven zonder TLE besproken. In paragraaf 5.6 worden de curven voor de situatie met TLE toegelicht. De curven met TLE zijn aangegeven door cirkeltjes en een kettinglijn. De curven zonder TLE zijn aangegeven door een driehoek en een getrokken lijn. Al deze figuren gelden bij een schone buis.

In deze paragraaf wordt de invloed van de voeding FI op het kraakproces beschreven. De voeding FI is het ethaandebiet dat de

kraakbuis binnentreedt.

Het stoomdebiet en de ovenwandtemperatuur zijn constant gehouden: resp. 2 mol/s en 1500 K. I.t.t. de voorgaande paragraaf worden in deze paragraaf, net als in de rest van het verslag, alleen resultaten besproken die verkregen zijn bij een gewenste, constante uitgangsdruk. De ingangsdruk is dus i.t.t. de voorgaande paragraaf geen vrij in te stellen grootte meer.

Ingangsdruk

In figuur 5.11 is de ingangsdruk van de kraakbuis gegeven als functie van de voeding. Zoals de differentiaalvergelijking van de drukval doet verwachten (zie appendix C) : een groter debiet vergroot de drukval. Omdat de ingangsdruk de som is van de drukval over het systeem vermeerderd met de gewenste uitgangsdruk, neemt de ingangsdruk ook toe bij een groter debiet.

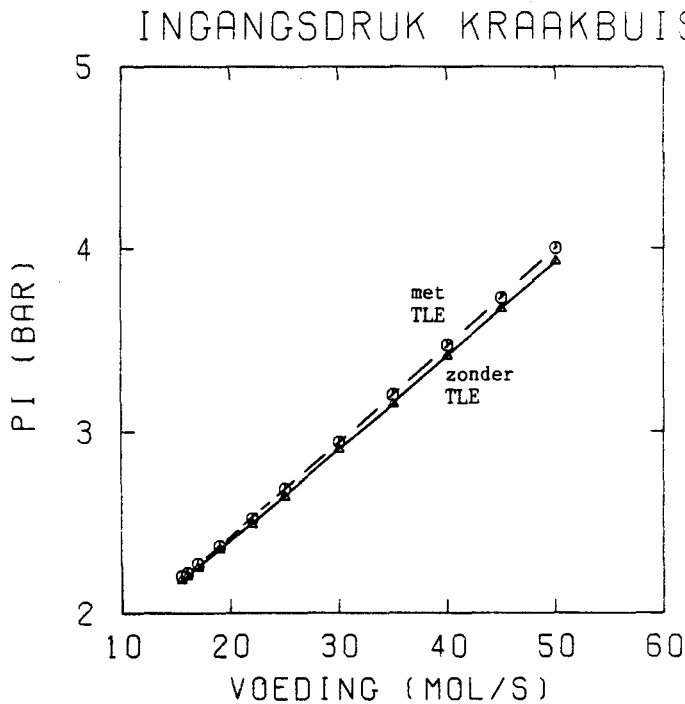


fig.5.11 Ingangsdruk .

Maximale buiswandtemperatuur

In figuur 5.12 is de maximale buiswandtemperatuur TSMAX als functie van de voeding gegeven. Een vergroting van de voeding resulteert in een lagere TSMAX omdat een groter totaaldebiet opgewarmd moet worden.

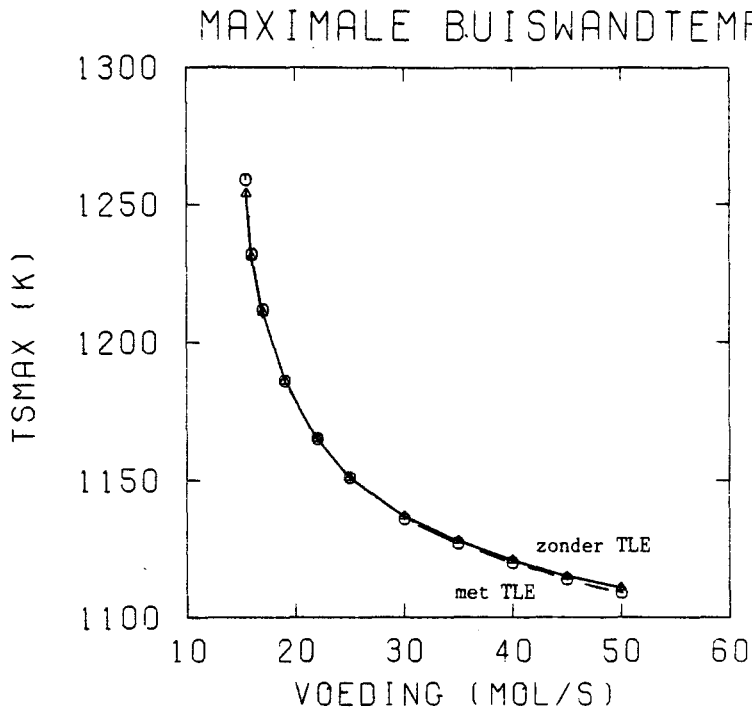


fig. 5.12 Maximale buiswandtemperatuur TSMAX.

Conversie en selectiviteit

In figuur 5.13 is de conversie en de selectiviteit als functie van de voeding weergegeven. Een vergroting van de voeding resulteert in een kleinere conversie vanwege de lagere temperaturen waardoor er minder ethaan door de reacties omgezet wordt. Het drukeffect is hier ondergeschikt.

De selectiviteit stijgt bij vergroting van de voeding omdat de lagere temperaturen de reacties vertraagd hebben zodat van elke mol etheen er minder via de nevenreacties reageert.

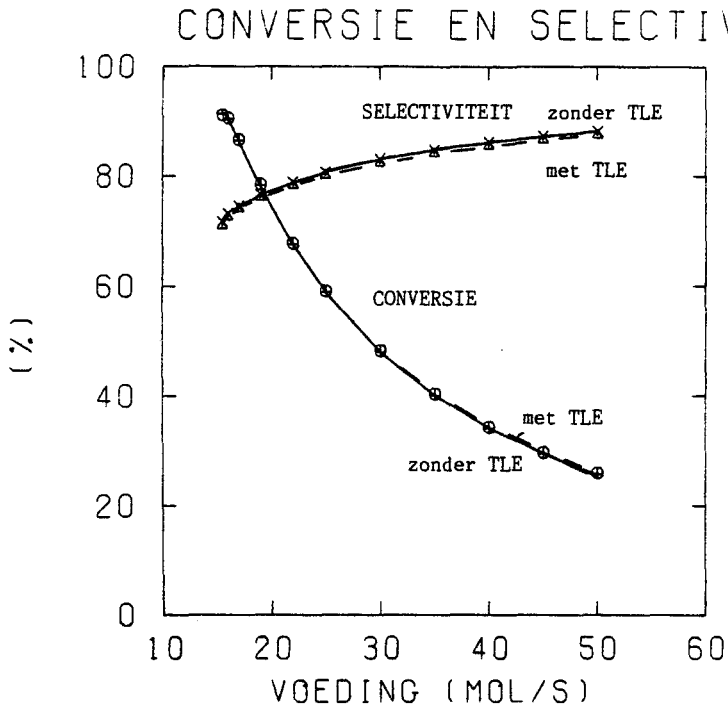


fig. 5.13 Conversie en selectiviteit.

Koolvorming

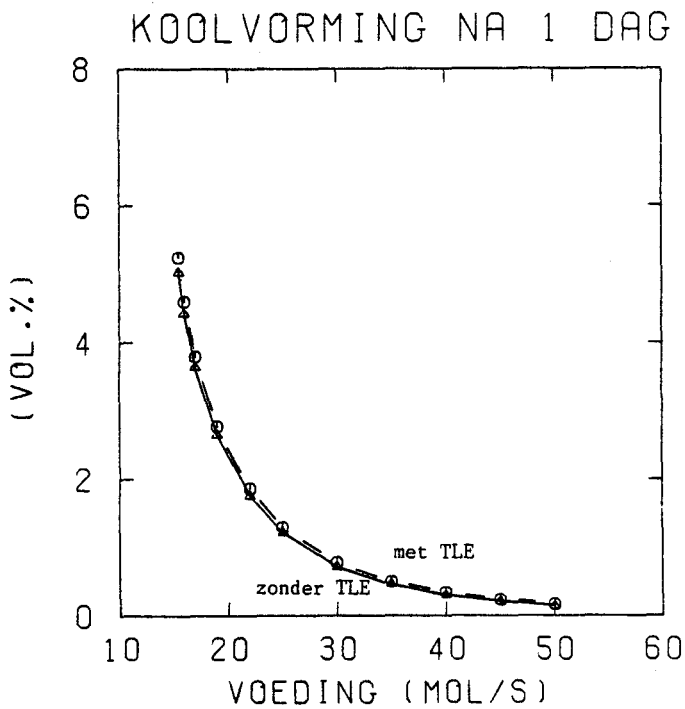


fig. 5.14 Koolvorming.

In figuur 5.14 is de koolvorming als functie van de voeding gegeven. Deze koolvorming is gedefinieerd als het volume percentage van de buis dat door kool wordt ingenomen na 1 dag. De toename van de voeding vertraagt de koolvorming omdat de vergrote selectiviteit en verkleinde conversie de productie van butadieen verkleinen waardoor de koolvorming daalt.

Momentane winst

In figuur 5.15 is de momentane winst als functie van de voeding gegeven. Deze curve vertoont een maximum rond 20 mol/s.

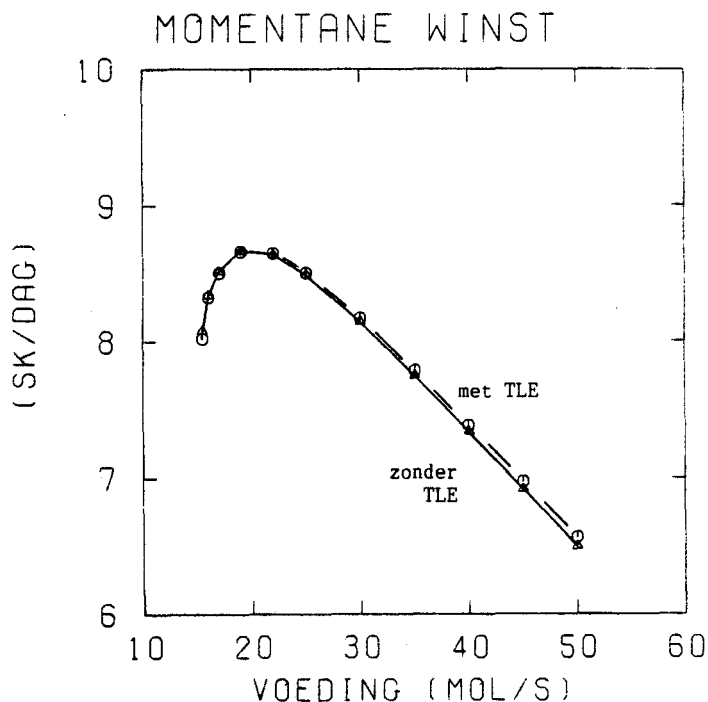


fig. 5.15 Momentane winst.

Opgekoolde buis

De invloed van de voeding is ook onderzocht voor een opgekoolde buis (definitie paragraaf 5.1). De trends in de verschillende grootheden bleken hetzelfde te zijn als bij een schone buis.

Concluderend

Samenvattend kan opgemerkt worden dat een vergroting van de voeding ,momenteaan gezien, gunstig is voor de maximale buiswandtemperatuur en de opkoling omdat beiden verlaagd worden. De vergroting van de voeding is daarentegen ongunstig voor de

ingangsdruk omdat deze vergroot wordt. Bij een voeding van 20 mol/s is de momentane winst voor een schone en opgekoolde kraakbuis (zonder TLE) maximaal.

5.4 Invloed van het stoomdebiet zonder TLE.

In deze paragraaf is de voeding en de ovenwandtemperatuur constant gehouden ,resp. 28 mol/s en 1500 K. Bij vergelijking van de grafieken met die uit de voorgaande paragraaf moet de nodige voorzichtigheid in acht genomen worden : bij de voeding-diagrammen is het niet gevarieerde debiet (stoom) vrij klein (2 mol/s) en bij de stoom-diagrammen is het niet gevarieerde debiet (voeding) vrij groot (28 mol/s). De relatieve invloed op het totale debiet is dus bij de voeding-diagrammen groter.

De trends in de meeste figuren blijken niet veel af te wijken van de figuren zoals die bij variatie van de voeding behalve die van de momentane winst. Dit is de reden dat deze paragraaf beknopt gehouden.

Een vergroting van het stoomdebiet bij een schone kraakbuis zonder TLE resulteert in een grotere ingangsdruk omdat een grotere doorzet een grotere drukval veroorzaakt evenals bij vergroting van de voeding.

De invloed van het stoomdebiet op de maximale buiswandtemperatuur TSMAX is verwaarloosbaar ,dit in tegenstelling tot de invloed van de voeding op TSMAX. Ten dele komt dit doordat het relatieve aandeel van de stoomhoeveelheid in het totale debiet kleiner is dan het relatieve aandeel van de voeding bij de voeding-diagrammen. Een belangrijkere reden van de lage gevoeligheid van de maximale buiswandtemperatuur bij stoomvariatiëen i.t.t. die bij voedingsvariatiëen , is de veel lagere (factor drie) warmtecapaciteit van stoom dan die van ethaan.

De conversie vertoont een lichte afname bij vergroting van het stoomdebiet vanwege de verdunning van het ethaan. De selectiviteit neemt een weinig toe bij vergroting van het stoomdebiet omdat t.g.v. verdunning van allerlei componenten de reacties minder snel verlopen waardoor er per mol gevormd etheen minder reageert via de nevenreacties.

Een vergroting van het stoomdebiet resulteert net als bij een vergroting van de voeding in een lagere koolvorming .De afname wordt veroorzaakt door de concentratieverlagingen t.g.v. de stoomverdunning waardoor de reacties geremd worden.

Momentane winst

De momentane winst neemt af als functie van het stoomdebiet (5.16), omdat stoomverdunding de concentraties verlaagd waardoor er minder ethaan omgezet wordt en waardoor er minder nevenproducten gevormd worden. De trend in de momentane winst bij vergroting van het stoomdebiet is verschillend van die bij vergroting van de voeding. Bij vergroting van de voeding treedt immers een maximum op, terwijl bij vergroting van het stoomdebiet de momentane winst monotoon afneemt. Dit komt omdat de etheenopbrengsten bij vergroting van de voeding een maximum vertonen en bij vergroting van het stoomdebiet monotoon afnemen. Een maximale momentane winst wordt dus bereikt door een stoomdebiet van 0 mol/s.

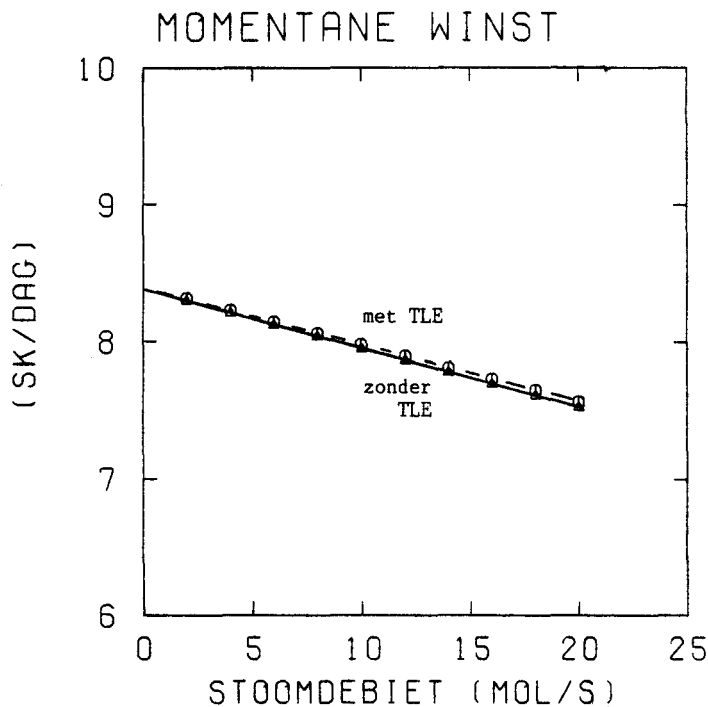


fig. 5.16 Momentane winst.

Opgekoelde buis

De invloed van het stoomdebiet is ook onderzocht voor een opgekoelde buis. De trends in de verschillende grootheden bleken hetzelfde te zijn als bij een schone buis.

Samenvattend

Concluderend kan men opmerken dat een vergroting van het stoomdebiet vrijwel geen invloed heeft op de buiswandtemperatuur. De invloed op de koolvorming is gunstig daar deze verkleind wordt. Een vergroting van het stoomdebiet is echter ongunstig voor de ingangsdruk en de momentane winst omdat de ingangsdruk vergroot wordt en de momentane winst afneemt.

5.5 Invloed van de ovenwandtemperatuur zonder TLE.

In deze paragraaf is de voeding en het stoomdebiet constant gehouden (resp. 28 en 2 mol/s).

Deze paragraaf is kort gehouden omdat de ovenwandtemperatuur bij het onderzoek slechts een onbelangrijke rol speelt. Bij de optimaliseringen is deze temperatuur zelfs constant gehouden. In het eerste gedeelte van deze paragraaf wordt de invloed van de ovenwandtemperatuur op een aantal grootheden besproken. In het tweede deel wordt uit de doeken gedaan waarom de ovenwandtemperatuur tijdens de optimaliseringen constant gehouden kan worden.

Ingangsdruk

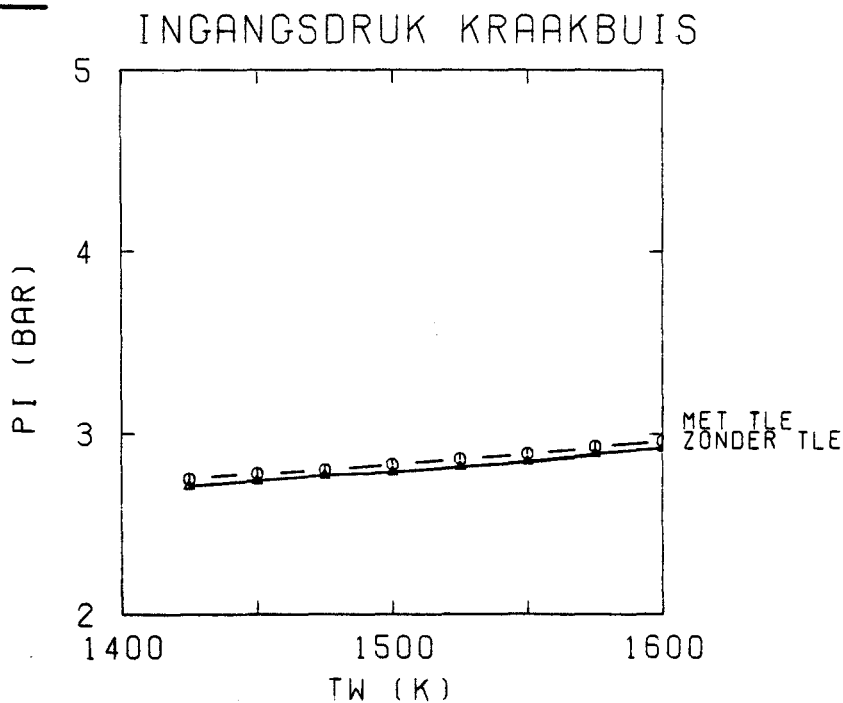


fig. 5.17 Ingangsdruk van de kraakbuis .

Een vergroting van de ovenwandtemperatuur resulteert in een vergroting van de ingangsdruk (fig. 5.17), omdat door uitzetting de volumestroom (bij gelijkblijvend molair debiet) groter wordt, waardoor de drukval toeneemt. Dit effect wordt nog versterkt doordat het totale molaire debiet toeneemt t.g.v. de grotere conversie.

Maximale buiswandtemperatuur

Een vergroting van de ovenwandtemperatuur resulteert in een hogere maximale buiswandtemperatuur, omdat de oven de gehele kraakbuis meer verwarmt (fig. 5.18).

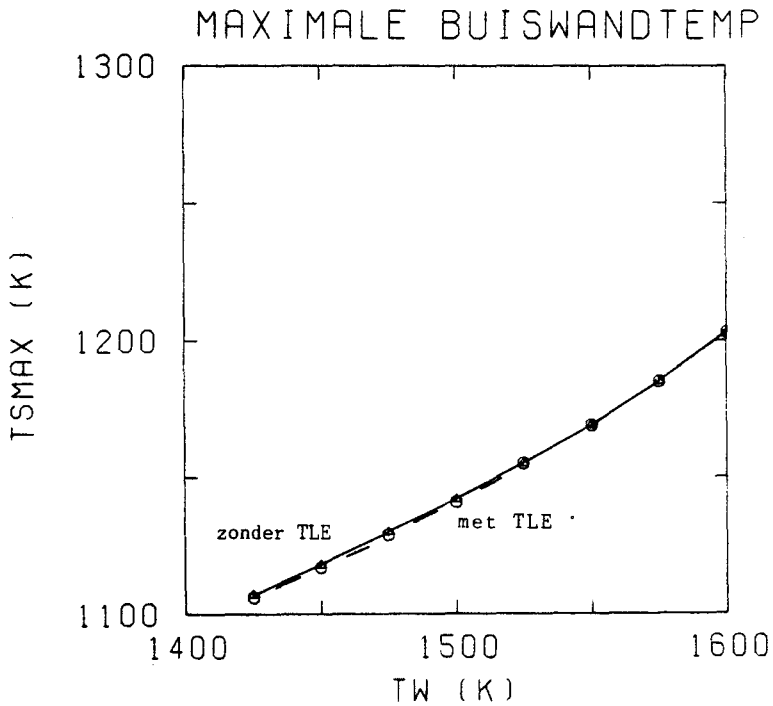


fig. 5.18 Maximale buiswandtemperatuur.

Koolvorming

Een vergroting van de ovenwandtemperatuur verhoogt de temperatuur in de kraakbuis waardoor de reacties versneld worden en er o.a. meer kool gevormd wordt (fig. 5.19).

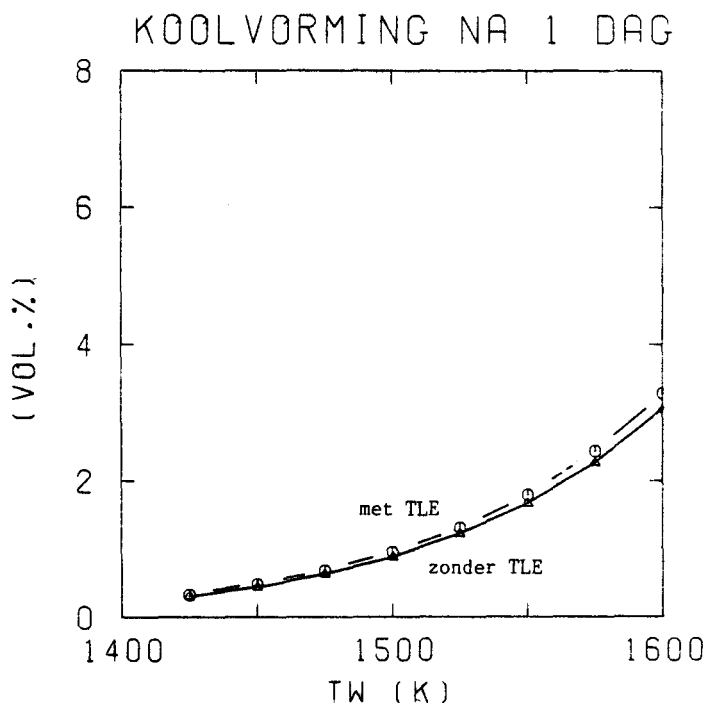


fig. 5.19 Koolvorming bij een schone buis.

Momentane winst

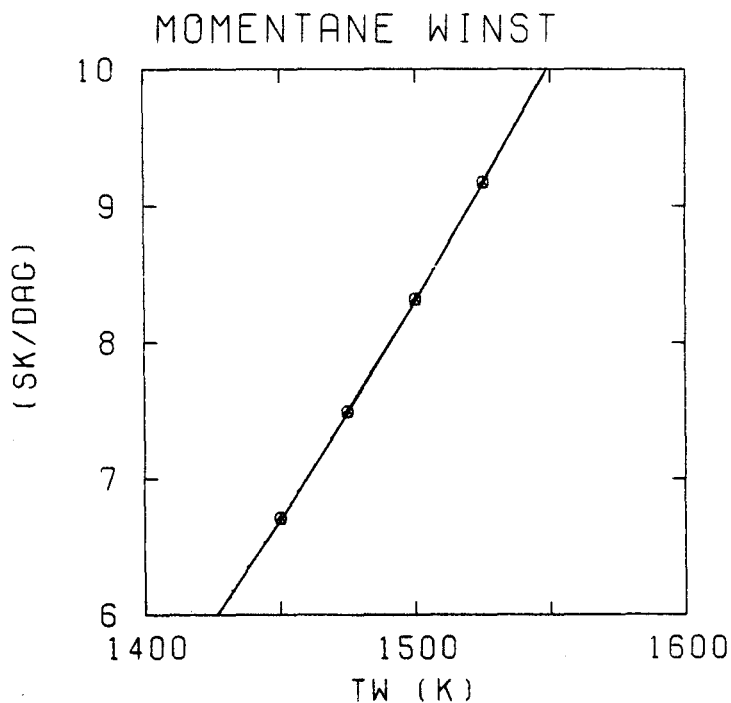


fig. 5.20 Momentane winst bij een schone buis.

Als de ovenwandtemperatuur groter wordt zal de momentane winst toenemen (fig. 5.20). Dit komt omdat de opbrengst meer toeneemt dan de kosten van het ethaanverbruik.

Uit dit figuur blijkt dat als de ovenwandtemperatuur zo groot mogelijk gekozen wordt de momentane winst het grootst is. In

overleg met de industrie is er voor een maximum van 1500 K voor de ovenwandtemperatuur gekozen. Dit randoptimum levert dus de grootste momentane winst.

Opgekoolde buis

De invloed van de ovenwandtemperatuur is ook onderzocht voor een opgekoolde buis. De trends in de verschillende grootheden bleken hetzelfde te zijn bij een schone buis.

Samenvattend

Een verlaging van de ovenwandtemperatuur verlaagt de maximale buiswandtemperatuur, de ingangsdruk, de opkoling en de momentane winst.

TW = 1500 kwestie

In het voorgaande gedeelte van deze paragraaf is duidelijk geworden dat bij momentane simulaties de ovenwandtemperatuur zo groot mogelijk (1500 K) gekozen moet worden om een maximale momentane winst op te leveren. In het resterende deel van deze paragraaf wordt uiteengezet dat bij simulaties in de tijd de ovenwandtemperatuur ook zo groot mogelijk gekozen moet worden om in een maximale cyclusgemiddelde winst (de totale winst over de gehele cyclus gemiddeld ; cyclus := bedrijfstijd + schoonmaaktijd) te resulteren.

Een statische sturing met een voeding van 28 mol/s, stoomdebiet van 2 mol/s en een ovenwandtemperatuur van 1500 K bij een bedrijfstijd van 21 dagen wordt hier nader beschouwd. Er wordt onderzocht of een verlaging van de ovenwandtemperatuur en gelijktijdige verhoging van de voeding in een grotere cyclusgemiddelde winst zal resulteren. Momentaan gezien is er geen enkel probleem : als de ovenwandtemperatuur van 1500 naar 1490 K wordt verlaagd, wordt de momentane winst kleiner (zie fig. 5.21).

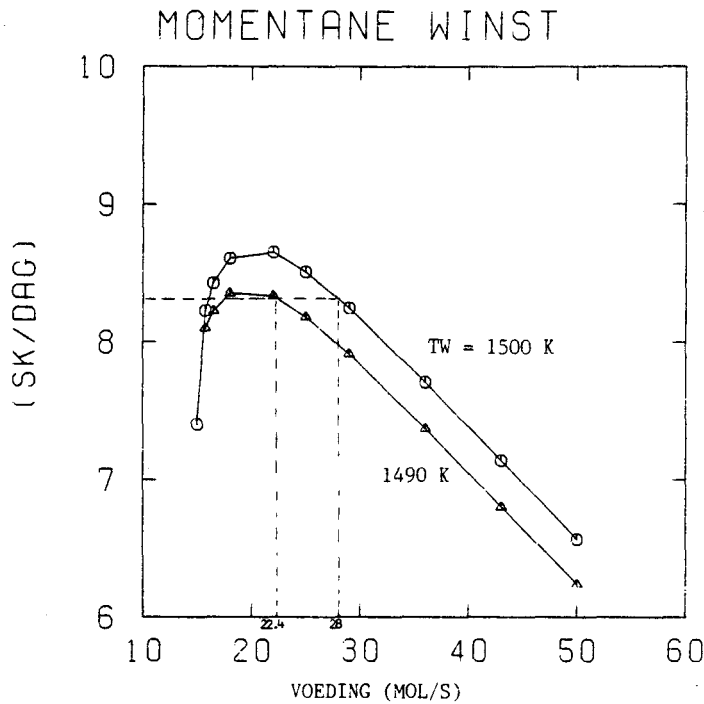


fig. 5.21 Momentane winst bij een schone buis .

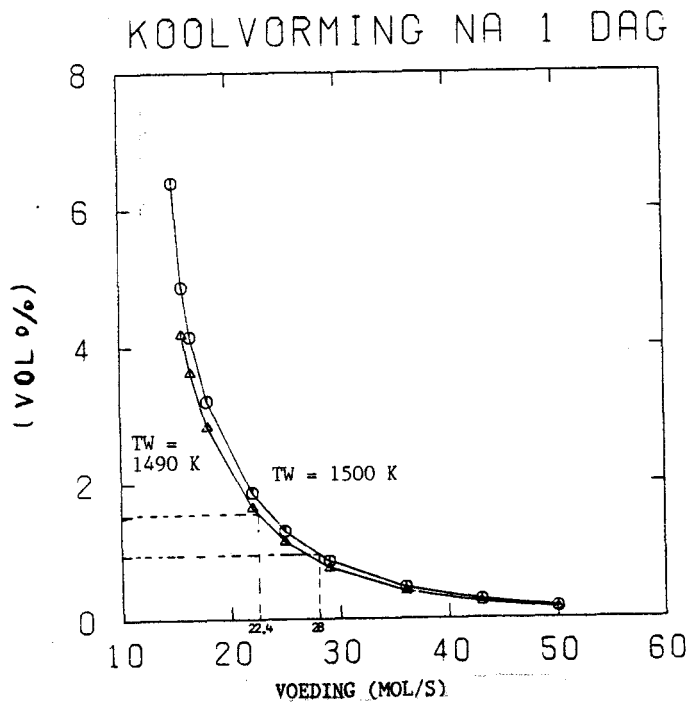


fig. 5.22 Koolvorming na 1 dag.

Een verlaging van de voeding naar ongeveer 22.4 mol/s brengt de momentane winst weer op een zelfde niveau. De daling van de momentane winst t.g.v. de daling van de ovenwandtemperatuur is dus gecompenseerd door de afname van de voeding.

Om ook een uitspraak over de cyclugemiddelde winst te doen moet ook het effect op het proces na verloop van de tijd beschouwd

worden. De koolvorming die bij de momentane winst bij een schone buis nog geen rol speelde, wordt nu van belang. De verlaging van de ovenwandtemperatuur van 1500 naar 1490 K verlaagt de koolvorming, maar de verkleining van de voeding van 28 naar 22.4 mol/s vergroot de koolvorming aanzienlijk (fig. 5.22).

Deze grotere koolvorming heeft een negatieve invloed op de cyclusgemiddelde winst. In figuur 5.23 is de cyclusgemiddelde winst gegeven voor een bedrijfstijd van 12 dagen. De winst bij de lagere ovenwandtemperatuur blijkt enkele procenten lager te zijn.

FI (mol/s)	TW (K)	cyclusgemiddelde winst Wgem (SK/dag)
28	1500	7.18
22.4	1490	7.02

fig. 5.23 Cyclusgemiddelde winst bij een bedrijfstijd van 12 dagen.

Voor een statische sturing is nu aangetoond dat de ovenwandtemperatuur gelijk aan 1500 K moet zijn om een maximale cyclusgemiddelde winst te verkrijgen. Bij verder onderzoek is de ovenwandtemperatuur gelijk aan deze waarde gehouden.

5.6 Invloed van de TLE op het momentaan gedrag.

In de figuren 5.1 t/m 5.20 zijn eveneens de curven gegeven voor een schone buis met TLE. De gevolgen van het inschakelen van de TLE zijn verklaarbaar m.b.v. het drukeffect dat de TLE heeft (zie paragraaf 5.2), maar de veranderingen zijn vrij gering.

De invloed van de TLE op een systeem dat enige tijd in bedrijf is, is ook onderzocht. Er is onderzoek gedaan aan een systeem met en zonder TLE dat gedurende 12 dagen aan een statische sturing (voeding, stoomdebiet en ovenwandtemperatuur van resp. 28 en 2 mol/s en 1500 K) onderworpen is geweest. Voor het model met de TLE is dit opkoolproces herhaald voor enkele waarden van de fractie alfa. Voor deze onderzoeksituatie heeft de TLE dus een tweeledige

invloed op het kraakproces : enerzijds een directe invloed van de drukverhoging en anderzijds zal het diameterprofiel niet op dezelfde wijze veranderen als zonder TLE vanwege de grotere opkolling. De fractie alfa heeft ook een invloed op de koolafzetting en dus op het diameterprofiel.

Op de hierboven geschetste wijze zijn verschillende diameterprofielen van de opgekoelde buis ontstaan. Hiermee is ook het momentaan gedrag van onderzocht. Het blijkt dat de trends in afhankelijke grootheden als functie van achtereenvolgens de voeding, het stoomdebiet en de ovenwandtemperatuur wederom niet veranderen t.g.v. de TLE en de parameter alfa. Het merendeel van deze figuren is niet zo interessant behalve de figuur met de momentane winst (fig. 5.24).

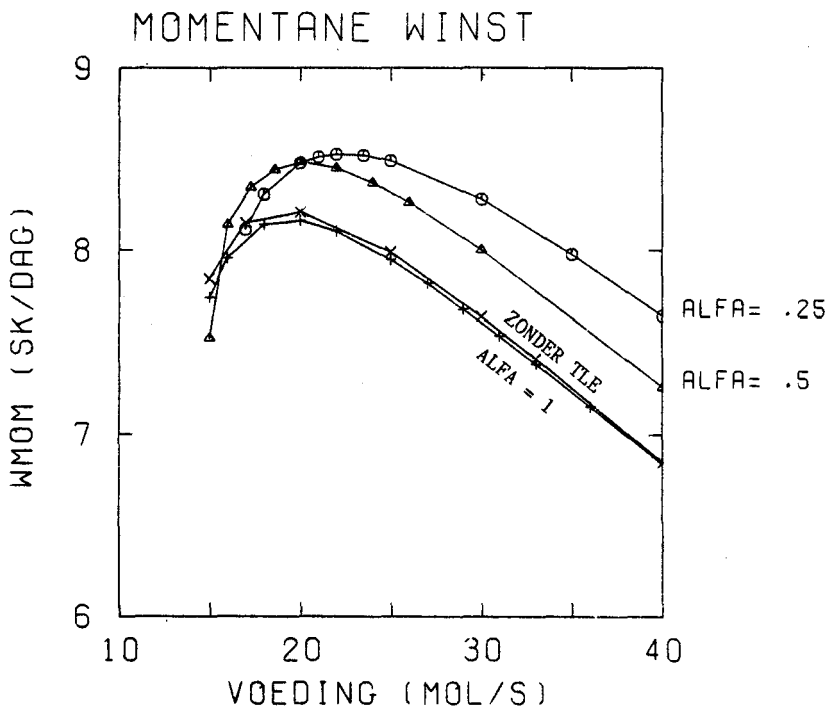


fig. 5.24 Momentane winst bij een opgekoelde buis.

Het maximum van de momentane winst voor het model zonder TLE blijft bij een opgekoelde buis bij een voeding ,stoomdebiet en ovenwandtemperatuur van resp. 20 en 0 mol/s en 1500 K. Dit geldt eveneens voor het model met de TLE voor de fracties alfa = 1 en 0.5. Echter voor de parameterwaarde alfa = .25 verschuift het maximum naar een voeding van ongeveer 22 mol/s. De bijbehorende optimale waarden voor het stoomdebiet en de ovenwandtemperatuur veranderen niet. Deze verschuiving is te verklaren met de verschuiving van de maximale etheenopbrengsten naar een hogere voeding. De verschuiving van het maximum van de momentane winst bij een opgekoelde buis met alfa = .25 is een opmerkelijk verschil t.o.v. de situatie zonder TLE zoals die ook in (Grefte 1984)

beschreven is. Hiermee is dus voor het model met de TLE de vuistregel voor de momentaan optimale voeding niet meer van kracht. De momentaan optimale voeding kan verlopen tussen 20 en 22 mol/s en kan zelfs nog groter worden (hfst.6).

De verschuiving van de momentaan optimale voeding heeft ook consequenties op het eindpunt van de dynamisch optimale voeding : zonder TLE was deze altijd 20 mol/s echter met TLE (met name bij $\alpha = .25$) verschuift deze naar een hogere waarde (zie hoofdstuk 7).

5.7 Conclusies.

De inschakeling van de TLE bij een schoon systeem heeft weinig invloed op het momentaan gedrag. De verschillen die optreden zijn verklaarbaar m.b.v. het drukeffect dat de TLE veroorzaakt.

Bij momentane simulaties met een vervuild systeem hebben de TLE en fractie α grotere verschuivingen in het momentaan gedrag tot gevolg.

De trends in het momentaan gedrag van de kraakbuis met TLE zijn echter hetzelfde als die bij een systeem zonder TLE. Dit geldt voor een schone en een vuile buis.

Verlaging van de ingangsdruk kan bereikt worden door verlaging van het stoom- of ethaandebiet of door verlaging van de ovenwandtemperatuur.

Verlaging van de maximale buiswandtemperatuur kan bereikt worden door vergroting van de voeding of door verlaging van de ovenwandtemperatuur. De gevoeligheid van de maximale buiswandtemperatuur voor het stoomdebiet is zeer gering.

De momentane winst wordt verhoogd door een verlaging van het stoomdebiet of door een verhoging van de ovenwandtemperatuur. De momentane winst heeft een maximum bij vergroting van de voeding.

De momentaan optimale sturingen zijn voor een schone en vervuilde buis 20 en 0 mol/s en 1500 K voor resp. de voeding, het stoomdebiet en de ovenwandtemperatuur. Dit geldt voor de situatie zonder en met de TLE en voor verschillende parameterwaarden α . Een uitzondering hierop vormen de kleine waarden voor α : bij $\alpha = .25$ verschuift de momentaan optimale voeding voor de vervuilde buis naar een hogere waarde.

Omdat de ovenwandtemperatuur begrensd is tot 1500 K is deze waarde de momentaan optimale.

Bij de statische simulaties levert een zo groot mogelijke ovenwandtemperatuur (1500 K) een maximale cyclugemiddelde winst.

6. Statisch en momentaan optimaliseren.

6.1 Statisch optimaliseren.

6.1.1 Probleemomschrijving.

In deze paragraaf wordt de omschrijving van het probleem en de resultaten van het statisch optimaliseren van de ethaankraakoven met de TLE besproken. In de volgende paragraaf komen de momentaan optimale sturingen aan bod.

De statisch optimale sturing bij een gegeven bedrijfstijd is de tijdonafhankelijke sturing die de cyclusgemiddelde winst maximaliseert. Voorwaarde hierbij is dat de beperkingen voor de ingangsdruk en de buiswandtemperatuur niet overschreden worden.

Omdat de cyclusgemiddelde winst het criterium is, wordt bij deze vorm van optimaliseren rekening gehouden met de momentane winst en met de gevolgen van de bijbehorende sturing op erna komende tijdstippen. Dit i.t.t. het momentaan optimaliseren uit de volgende paragraaf. In hoofdstuk 7 wordt de derde vorm van optimaliseren behandeld : dynamisch optimaliseren. De overeenkomst tussen dynamisch en statisch optimaliseren is dat in beide gevallen de cyclusgemiddelde winst het criterium is. Het verschil is echter dat bij dynamisch optimaliseren de sturing tijdafhankelijk mag zijn i.t.t. bij statisch optimaliseren.

Bij het statisch en momentaan optimaliseren is de ovenwandtemperatuur constant op de optimale waarde van 1500 K gehouden (rechtvaardiging : hfst.5). Er resteren nu slechts twee onafhankelijke variabelen waarnaar geoptimaliseerd dient te worden. Bij dynamisch optimaliseren is de ovenwandtemperatuur vrij gelaten : de optimaliseringsalgoritmen lieten deze zelf op 1500 K.

6.1.2. Verklaringsmechanismen.

In deze paragraaf wordt de grondslag gelegd voor het verklaren van de statische , momentane en dynamische optima. Twee effecten , het druk-effect en alfa-effect, spelen hierbij een belangrijke rol. In paragraaf 6.1.3 wordt hun invloed op een toestandsgrootheden en cyclusgemiddelde winst beschreven.

Het alfa-effect houdt in dat ,als $\alpha < 1$, een fractie van de hoeveelheid gevormde kool niet in de kraakbuis neerslaat, maar uit de kraakbuis afgevoerd wordt. Ten eerste blijft daardoor het reactievolume groter dan bij $\alpha = 1$ en ten tweede blijft de warmteweerstand van de buiswand incl. koollaag lager.

Een groter reactievolume leidt tot een hogere momentane winst (zie appendix A). Een lagere warmteweerstand leidt tot hogere gastemperaturen omdat de weerstand tussen de warmtebron en het gasmengsel kleiner wordt ,waardoor er meer warmte aan een mol gas

overgedragen kan worden. Een hogere gastemperatuur kan ook ontstaan gedacht worden uit een hogere ovenwandtemperatuur bij gelijkblijvende warmteweerstand. Een hogere ovenwandtemperatuur leidt tot een hogere momentane winst (hfst.5), dus ook een lagere warmteweerstand bij gelijkblijvende ovenwandtemperatuur leidt tot een hogere momentane winst.

Beide deeleffecten van het alfa-effect gelden niet alleen voor de momentane winst op het moment van ingreep, maar ook voor de momentane winst op latere tijdstippen. Derhalve heeft het alfa-effect ook een vergrotende invloed op de cyclugemiddelde winst.

Het druk-effect houdt in dat door het inschakelen van de TLE de druk in de kraakbuis groter wordt. Bij een zelfde koolverdeling over de buis neemt door de hogere druk de conversie toe, de koolvorming wordt groter en de opbrengsten en kosten nemen toe (hfst. 5). Op het tijdstip van ingreep blijkt de toename van de opbrengsten groter dan de toename van kosten te zijn zodat in eerste instantie de momentane winst vergroot wordt door het druk-effect. De versnelde koolvorming zal op de tijdstippen na de ingreep leiden tot een kleiner reactievolume en een grotere warmteweerstand van de buiswand incl. koollaag. Deze gevolgen zijn ongunstig voor de momentane winst zoals op analoge wijze als bij het alfa-effect aangetoond kan worden.

Een direct gevolg van de versnelde koolvorming dat ook ongunstig voor de momentane winst is, is dat de gewenste bedrijfstijd soms niet meer gehaald kan worden vanwege het vroegtijdig verstopt raken van de buis. Om toch de gewenste bedrijfstijd te bereiken zullen de debieten vergroot moeten worden om de opkoling te vertragen. Deze noodzakelijke verhoging van de debieten leidt tot een verlaging van de momentane winst.

In eerste instantie heeft het druk-effect dus tot gevolg dat de momentane winst groter wordt, maar deze toename gaat dusdanig snel over in een afname dat de cyclugemiddelde winst afneemt.

Samenvattend over deze paragraaf kan opgemerkt worden dat t.g.v. het modelleren van de TLE twee effecten een rol zijn gaan spelen: het alfa-effect en het druk-effect. Het alfa-effect is gunstig voor de cyclugemiddelde winst en het drukeffect ongunstig. Op grond van deze effecten kunnen de statische, momentane en dynamische optima uit resp. de paragrafen 6.1.3 en 6.2 en hfst. 7 verklaard worden.

6.1.3 Resultaten.

Voeding en stoom

In figuren 6.1 en 6.2 zijn resp. de statisch optimale voeding en stoomdebiet als functie van de bedrijfstijd gegeven.

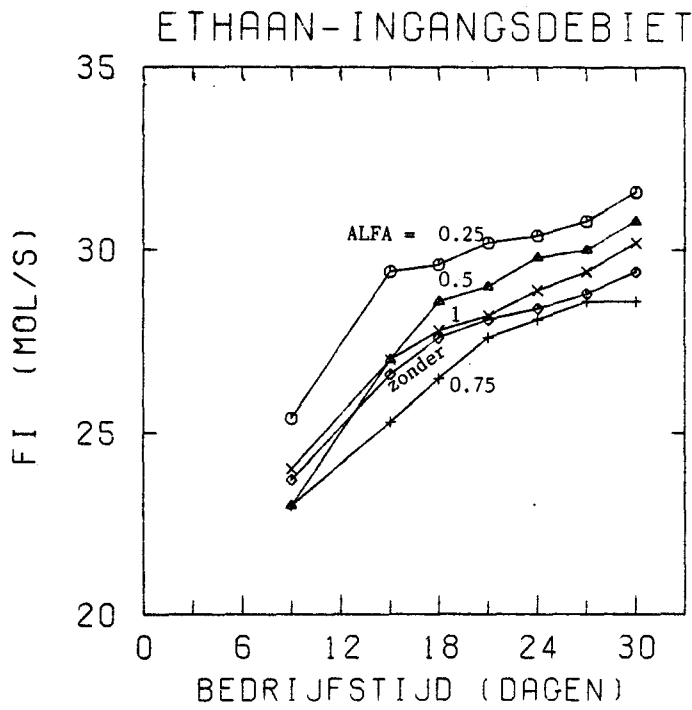


fig. 6.1 Statisch optimale voeding.

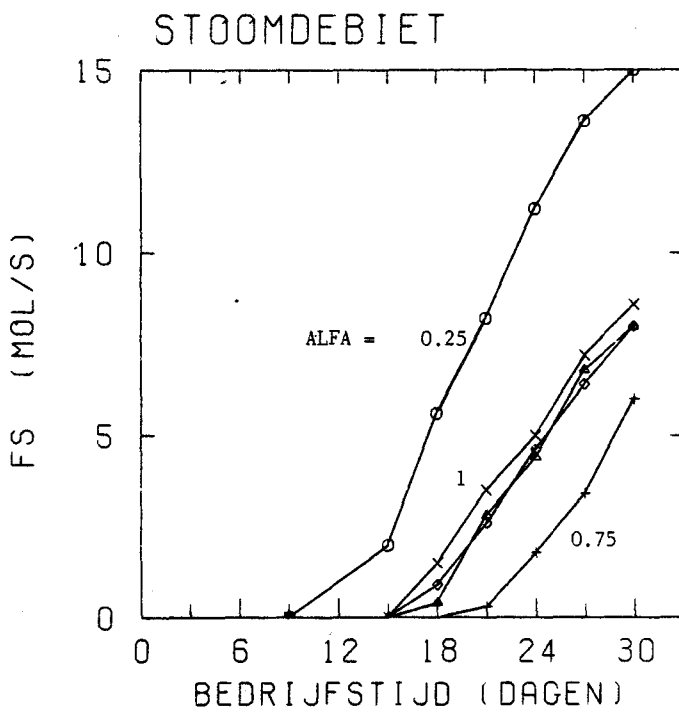


fig. 6.2 Statisch optimaal stoomdebiet.

Voor alle parameterwaarden nemen de statisch optimale debieten toe als de bedrijfstijd vergroot wordt omdat bij een grotere bedrijfstijd de opkoling een groter probleem wordt. Om de opkoling meer af te remmen moeten de debieten vergroot worden.

Onderlinge ligging

Als de overgang van de curven van het proces zonder TLE naar die van het proces met TLE en $\alpha=1$ beschouwd wordt, kan opgemerkt worden dat de statisch optimale debieten toenemen omdat alleen het druk-effect (paragraaf 6.1.2) actief is. Het druk-effect leidt immers tot een drukverhoging en een toename van de koolvorming. Om deze toegenomen koolvorming te remmen, moeten de debieten vergroot worden.

Na verkleining van α van 1 naar .75, is ook het α -effect actief geworden. Dit effect blijkt zelfs te domineren omdat de debieten lager dan bij alle andere waarden van α genomen worden. Deze lagere debieten versnellen de opkoling meer, maar dit is blijkbaar niet zo erg ongunstig meer: het α -effect zorgt voor de afvoer van de kool.

Als α verkleind wordt van .75 naar .5 overheerst bij kleine bedrijfstijden het α -effect, er is immers bij kleine bedrijfstijden nog te weinig kool in de TLE om een flinke drukverhoging te geven (De druk in de kraakbuis is nog pas een weinig groter t.o.v. $\alpha = .75$, zie figuren 6.5 t/m 6.7). Daarom zijn bij 9 dagen de debieten kleiner dan bij $\alpha=1$. Bij grotere bedrijfstijden wordt het druk-effect dominant. De drukval over de TLE dus ook de uitgangsdruk van de kraakbuis wordt groter, waardoor ook de druk in de kraakbuis groter wordt. De opkoling zal sterk toenemen waardoor de debieten vergroot moeten worden om deze te remmen.

Kooldepositie in kraakbuis

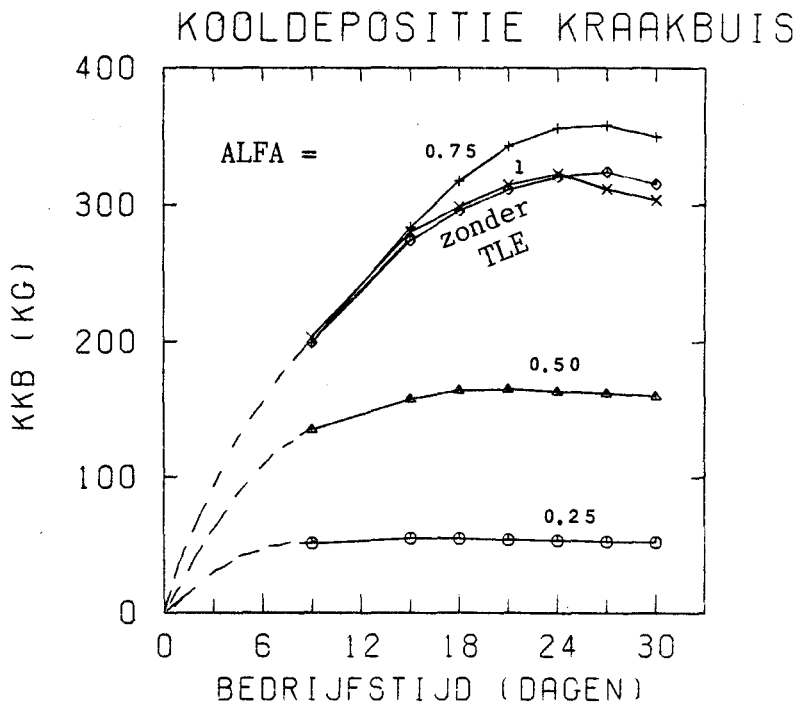


fig. 6.3 Kooldepositie in de kraakbuis bij de statische optima.

In figuur 6.3 is de kooldepositie in de kraakbuis op het einde van

de bedrijfstijd voor de statisch optimale sturingen weergeven.

Alle curven blijken na het bereiken van het maximum vrij constant te blijven.

Als alfa vergroot wordt ,uitgaande van alfa=.25, blijkt de kooldepositie in de kraakbuis meer te zijn omdat er dan immers een grotere fractie van de gevormde kool in de kraakbuis is neergeslagen. Vergroting van alfa van .75 naar 1 , resulteert echter in een afname van de kooldepositie in de kraakbuis, behalve bij kleine bedrijfstijden (< 12 dagen). De afname van de kooldepositie wordt veroorzaakt door de grotere debieten waardoor de koolvorming kleiner wordt. Bij alfa=1 is de kooldepositie in de kraakbuis groter dan bij het proces zonder TLE (voor $t_b < 24$ dagen) vanwege de grotere koolvorming. Het effect van de hogere druk blijkt te domineren boven het vertragende effect van de grotere debieten zodat de koolvorming toeneemt.

De kooldepositie neemt voor alfa = .75 , en zonder TLE toe bij vergroting van de bedrijfstijd (tot ca. 24 dagen) vanwege de langere bedrijfstijd waardoor er over een langere tijd kool geaccumuleerd kan worden. De kooldepositie neemt toe ondanks de vertraagde koolvorming ten gevolge van de grotere debieten. Pas bij grote bedrijfstijden (> 24 dagen) gaat de verlaagde koolvorming domineren zodat er een afname in de kooldepositie waar te nemen is.

Bij alfa=.25 en .5 is de kooldepositie in de kraakbuis vrijwel constant omdat de druk in de kraakbuis bij deze alfa's vrijwel constant (hoog ; zie fig. 6.5 t/m 6.7) is en omdat veranderingen in de kooldepositie steeds weer gedempt worden doordat een grote fractie van de gevormde kool naar de TLE afgevoerd wordt.

Kooldepositie in TLE

In figuur 6.4 is de kooldepositie in de TLE op het einde van de bedrijfstijd weergegeven. De massa van de kool in de TLE , KK_t , volgt uit de kooldepositie (kg) in de kraakbuis, KK_B , op de volgende wijze :

$$KK_t = \frac{1-\text{alfa}}{\text{alfa}} * KK_B \quad (6.1)$$

Uit deze formule blijkt de directe invloed van een verkleining van alfa : de kooldepositie in de TLE neemt toe (fig. 6.4). Een uitzondering hierop vormt de verkleining van alfa van .5 naar .25 bij een vaste bedrijfstijd groter dan 18 dagen : de kooldepositie in de TLE neemt af. De reden hiervoor is dat de debieten bij alfa = .25 dusdanig groter zijn dat de koolvorming zoveel verlaagd wordt dat dit effect boven het effect van de verlaagde alfa gaat domineren en de kooldepositie afneemt.

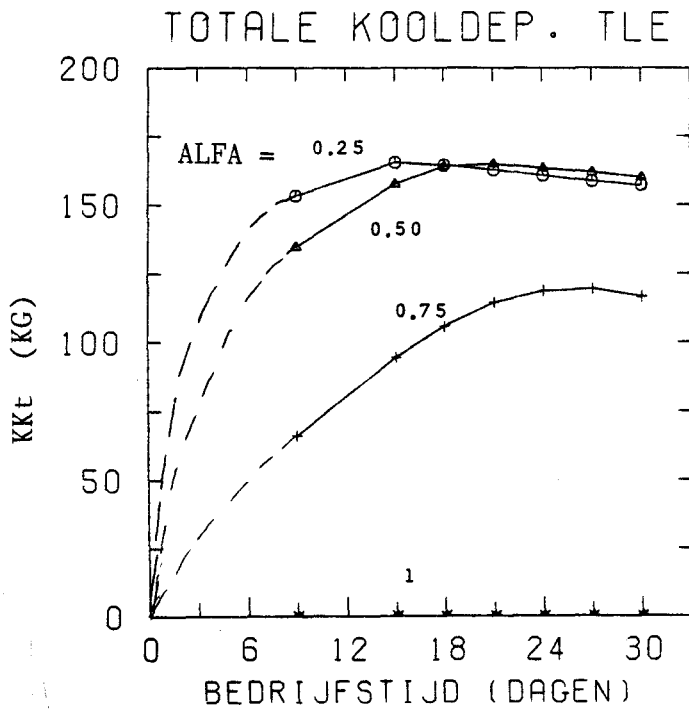


fig. 6.4 Kooldepositie in de TLE bij de statische optima.

Drukval TLE

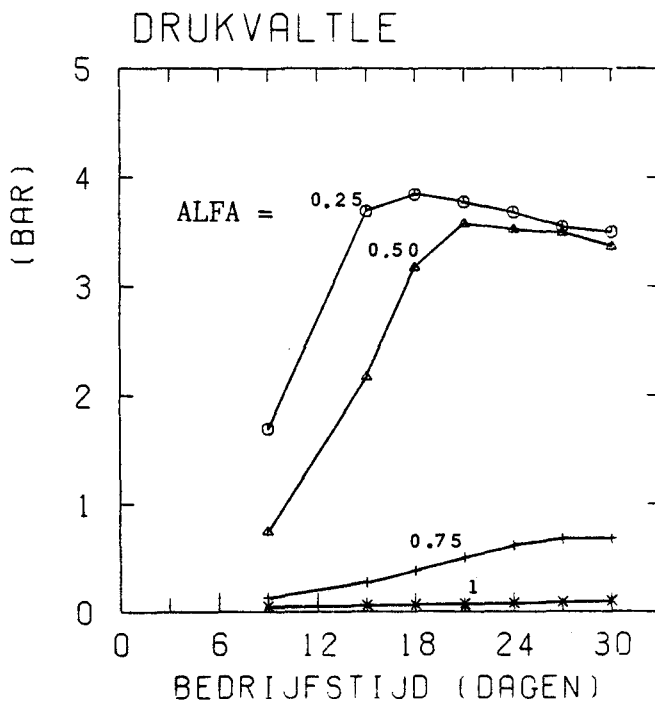


fig. 6.5 Drukval over de TLE bij de statische optima.

In figuur 6.5 is voor statisch optimale sturingen de drukval over de TLE op het einde van de bedrijfstijd weergegeven. Voor kleinere waarden van alfa neemt deze drukval snel toe als de bedrijfstijd vergroot wordt omdat dat kooldepositie in de TLE snel groter

wordt. De afname in de drukval bij $\alpha = .25$ en $.5$ voor grotere bedrijfstijden wordt veroorzaakt door de lagere kooldepositie in de TLE (fig. 6.4).

Drukval kraakbuis

In figuur 6.6 is voor de statisch optimale sturingen de drukval over de kraakbuis op het einde van de bedrijfstijd als functie van de bedrijfstijd weergegeven. Bij de fracties $\alpha = .25$ en $.5$ verandert de drukval over de kraakbuis weinig als de bedrijfstijd vergroot wordt vanwege het dempend effect van een lage α en vanwege de hoge uitgangsdruk van de kraakbuis (=drukval TLE + constante). De drukval is bij deze fracties laag vanwege de lage kooldepositie in de buis.

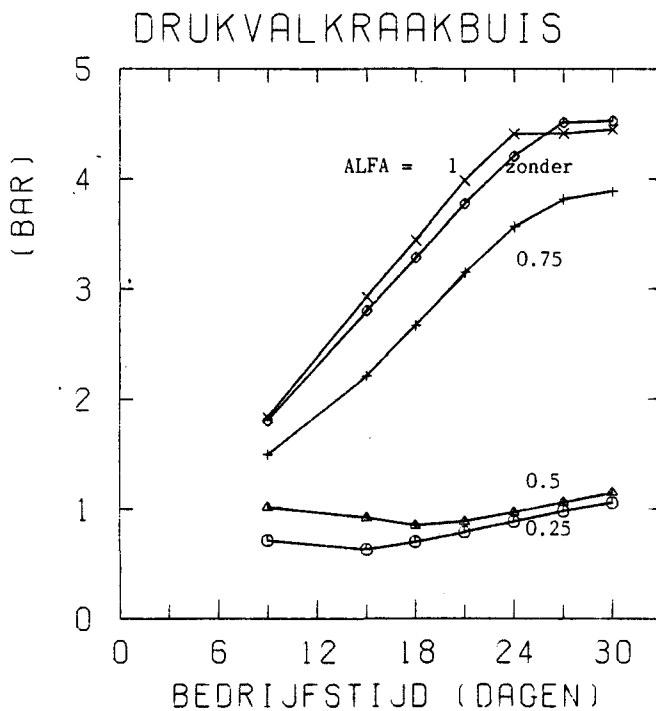


fig. 6.6 Drukval kraakbuis bij de statische optima.

Ingangsdruk kraakbuis

In figuur 6.7 is de ingangsdruk van de kraakbuis op het einde van de verschillende bedrijfstijden weergegeven. Deze is af te leiden door sommatie van de waarden uit fig. 6.5 en 6.6 vermeerderd met een constante.

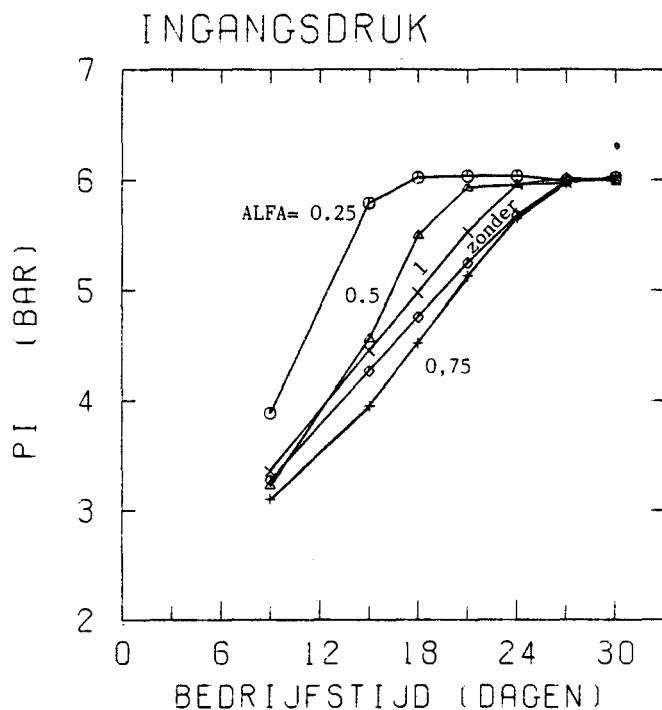


fig. 6.7 Ingangsdruk van kraakbuis bij de statische optima.

Voor kleinere fracties alfa wordt de drukbegrenzing reeds bij kleine bedrijfstijden gehaald.

Op grond van de figuren van de kooldepositie en de ingangsdruk kan grofweg opgemerkt worden : als het maximum van de kooldepositie bereikt wordt, is de ingangsdruk vrijwel 6 bar. Het maakt hierbij geen verschil uit of de kooldepositie in de kraakbuis of in de TLE beschouwd wordt : beide maxima vallen op hetzelfde tijdstip omdat formule (6.1) geldt.

Buiswandtemperatuur

In figuur 6.8 is de maximale buiswandtemperatuur aan het einde van de bedrijfstijd gegeven. Voor de curven bij alfa = .75 , 1. en zonder TLE blijkt de maximale buiswandtemperatuur voor een grotere bedrijfstijd groter te zijn tenzij de bedrijfstijd te groot (< ca. 21 dagen) wordt. De grotere maximale buiswandtemperatuur bij een grotere bedrijfstijd wordt veroorzaakt door een grotere kooldepositie. De afname van de maximale buiswandtemperatuur bij een grote bedrijfstijd wordt bij deze curven veroorzaakt door het afnemen van de kooldepositie (figuur 6.3) en door de toegenomen debieten.

Voor de curven bij alfa = .25 en .5 overheerst het effect van de debieten zelfs voor alle bedrijfstijden omdat de kooldepositie in de kraakbuis vrijwel constant is zodat de maximale buiswandtemperatuur afneemt bij een vergroting van de bedrijfstijd.

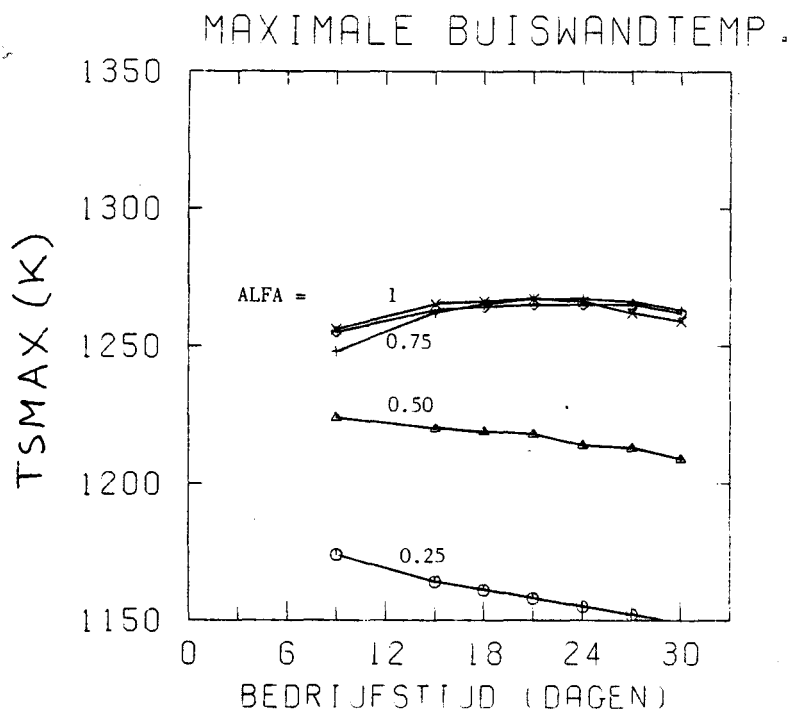


fig. 6.8 Maximale buiswandtemperatuur bij de statische optima.

De lage maximale buiswandtemperatuur TSMAX bij alfa = .25 en .5 wordt veroorzaakt door de lage kooldepositie in de kraakbuis.

De limiet voor de buiswandtemperatuur wordt bij de statisch optimale debieten bij de statisch optimale debieten niet bereikt i.t.t. de drukbeperking zoals reeds eerder naar voren is gekomen.

Cyclusgemiddelde winst

In figuur 6.9 is de cyclusgemiddelde winst voor de statische optima gegeven.

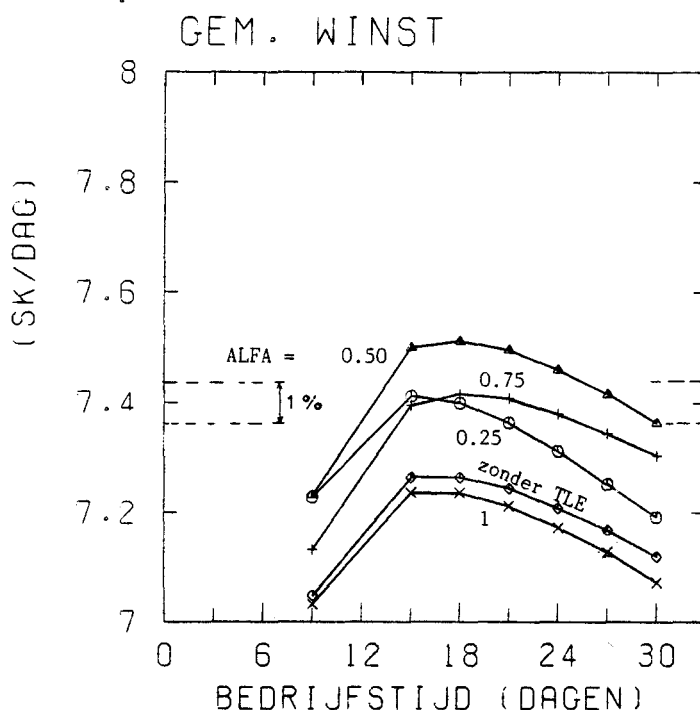


fig. 6.9 Cyclusgemiddelde winst bij de statische optima.

De curven in figuur 6.9 bevatten een stijgend deel dat veroorzaakt wordt doordat de cyclusgemiddelde winst bij een bedrijfstijd van 0 dagen per definitie negatief is en dat er bij grotere bedrijfstijden een positieve winst gemaakt wordt. De daling van de cyclusgemiddelde winst wordt veroorzaakt door de sterke afname van de opbrengst van de nevenproducten.

Onderlinge ligging

Uitgaande van de curve zonder TLE neemt de cyclusgemiddelde winst, W_{gem} , af bij overgang op de curve bij $\alpha=1$ omdat het drukeffect het enige actieve effect is.

Verkleining van α verhoogt W_{gem} omdat bij grote α 's (ongelijk 1) het α -effect bleek te domineren (zie beschrijving van fig. 6.1 en 6.2). Bij $\alpha = .25$ wordt het drukeffect aanzienlijk belangrijker dan bij $\alpha = .5$ zodat de gemiddelde winst voor $\alpha = .25$ kleiner wordt dan voor $\alpha = .5$.

Op grond van figuur 6.9 is de optimale bedrijfstijd bij een statisch optimale sturing afgeleid m.b.v. curve-fitting: fig. 6.10. De gevoeligheid van het optimum voor de bedrijfstijd is echter gering. In figuur 6.9 is met onderbroken lijnen $\pm 0.5\%$ rond 7.4 SK/dag aangegeven.

alfa (-)	bedrijfstijd (dagen)	Wgem (SK/dag)
.25	16.5	7.411
.50	18.2	7.518
.75	18.7	7.422
1.	17.4	7.242
zonder TLE	17.6	7.271

fig. 6.10 Optimale bedrijfstijd bij statisch optimale sturingen.

Conclusie

Uit de statische optima bleek dat het modelleren van de TLE in het algemeen een verhoging van de maximale cyclusgemiddelde winst oplevert, omdat een gedeelte van de gevormde kool uit de kraakbuis onttrokken kan worden. Een uitzondering op deze algemene uitspraak vormt het proces waarbij $\alpha=1$, omdat hier alleen het ongunstige druk-effect een rol speelt. Deze extreme waarde van α komt in de praktijk echter niet voor zodat het geen bezwaarlijke uitzondering is. Over de grootte van α voor de beschouwde ethaankraakinstallatie is niet veel bekend. De enige aanwijzing over de grootte van α is dat bij ethaankraakinstallaties de kraakbuis eerder verstopt raakt dan de TLE. Dit duidt erop dat α tussen .5 en 1 ligt.

De optimale bedrijfstijd voor de statische optima is ongeveer 18 dagen voor de verschillende reële waarden van α ($.5 \leq \alpha < 1$).

De gevoeligheid van de maximale W_{gem} voor α is groot : het maximum bij $\alpha = .5$ is ongeveer 3 % groter dan het laagste maximum (bij $\alpha = 1$).

Bij het statisch optimaliseren wordt de drukbeperking wel en de temperatuurbegrenzing niet actief.

6.2 Momentaan optimaliseren.

6.2.1 Probleemomschrijving.

De momentaan optimale sturing is die tijdafhankelijke sturing die op elk moment de momentane winst, $W_{mom}(t)$, maximaal maakt, waarbij de limieten voor de ingangsdruk en de buiswandtemperatuur niet overschreden mogen worden (zie ook paragraaf 6.1).

Op elk tijdstip wordt er alleen gekeken wat de momentane winst doet op dat tijdstip ,terwijl met de nadelige gevolgen (toenemende opkoling) geen rekening gehouden wordt. In het begin zal deze methode van optimaliseren tot de grootst mogelijke momentane winst leiden (dus ook groter dan bij statisch en dynamisch optimaliseren). De hiermee gepaard gaande sterke opkoling zal de bedrijfstijd aanzienlijk verkleinen.

Voor elke waarde van alfa kan bij momentaan optimaliseren de maximale bedrijfstijd niet vrij gekozen worden. Deze ligt vast.

6.2.2 Resultaten.

Voeding en stoom

In figuur 6.11 is de momentaan optimale voeding gegeven. Het samenvallen van de curven in deze figuur voor de curven met TLE bij tijd=1 dag komt door de discretisatie van de voeding (0.2 mol/s) bij het zoeken naar de momentaan optimale sturing. Zoals in overeenstemming met paragraaf 5.6 blijkt het momentaan optimale debiet voor kleinere waarden van de tijd rond de 20 mol/s te liggen.

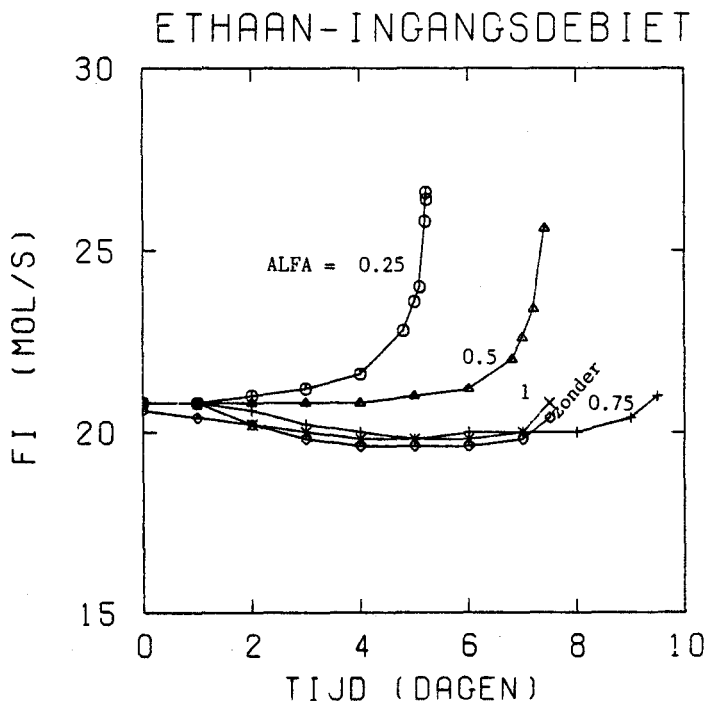


fig. 6.11 Momentaan optimale voeding.

Het is buitengewoon opvallend dat als de tijd voortschrijdt de momentaan optimale voeding voor kleine waarden van alfa veel groter dan 20 mol/s wordt. Dit is in overeenstemming met hetgeen in paragraaf 5.6 opgemerkt is over de verschuiving van de optimale voeding voor kleine alfa's naar een hogere waarde bij een opgekoelde buis.

Het diagram van het momentaan optimale stoomdebiet is niet gegeven

omdat deze voor alle tijdstippen nul is.

Kooldepositie

In de figuren 6.12 en 6.13 is de kooldepositie in resp. de kraakbuis en de TLE gegeven. Uit deze figuren blijkt dat de kraakbuis en de TLE niet meer dan resp. 380 en 170 kg kool kunnen bevatten ; dit komt overeen met circa 30 en 88 % van het desbetreffende schone volume. In de TLE kan dus een veel groter relatief volume door kool in beslag genomen worden dan in de kraakbuis. De reden hiervoor is dat de TLE veel korter is dan de kraakbuis waardoor de drukval bij gelijke koolafzetting kleiner is.

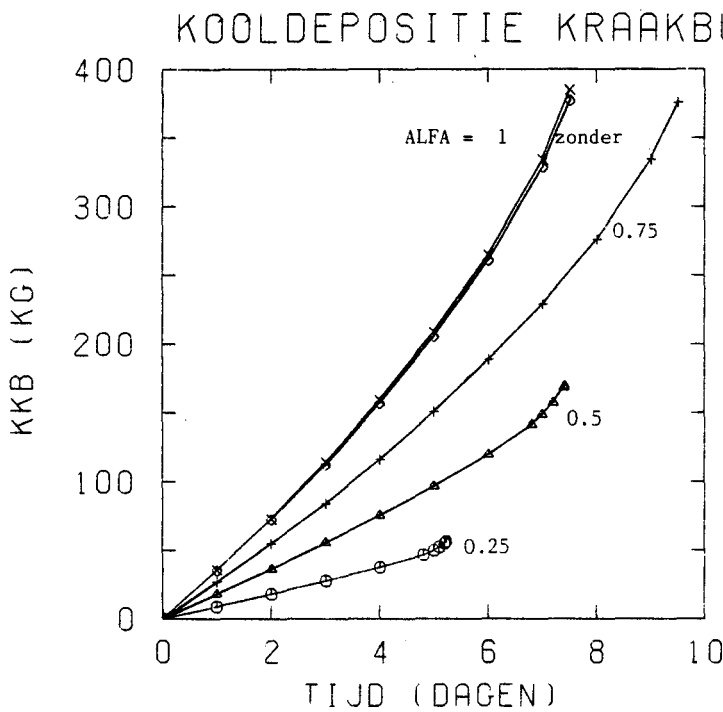


fig. 6.12 Kooldepositie kraakbuis voor momentane optima.

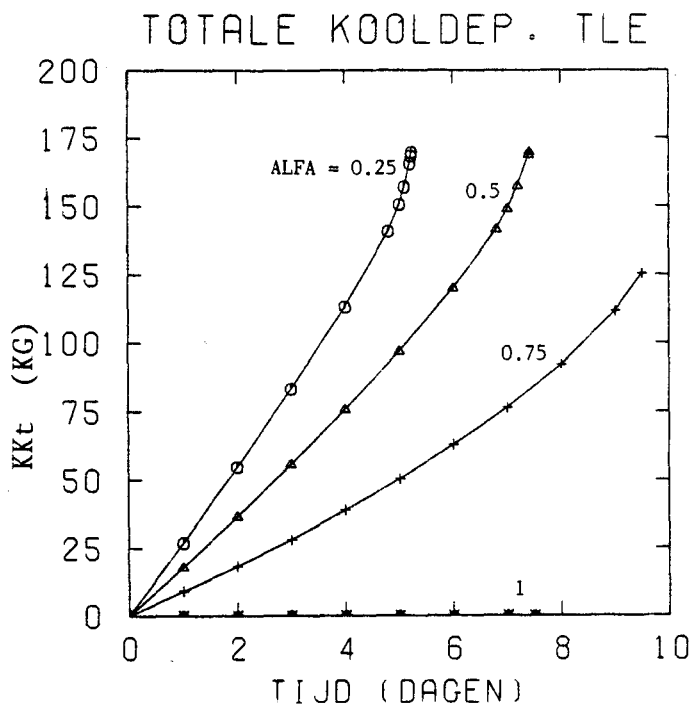


fig. 6.13 Kooldepositie TLE voor momentane optima.

Ingangsdruk

In figuur 6.14 is de ingangsdruk van de kraakbuis voor de momentane optima gegeven.

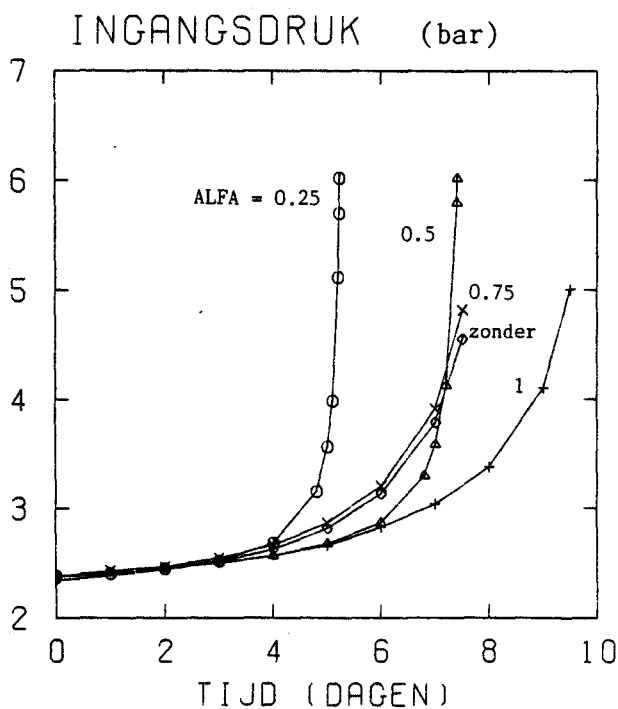


fig. 6.14 Ingangsdruk voor momentane optima.

Alleen bij de kleinere waarden voor alfa wordt de drukbegrenzing

bereikt. De snelle toename van de ingangsdruk voor $\alpha = .25$ en $.5$ wordt veroorzaakt door de snelle toename van de drukval over de TLE.

Buiswandtemperatuur

Uit figuur 6.15 blijkt dat de begrenzing van de buiswandtemperatuur bereikt wordt voor grotere waarden van α en zonder TLE.

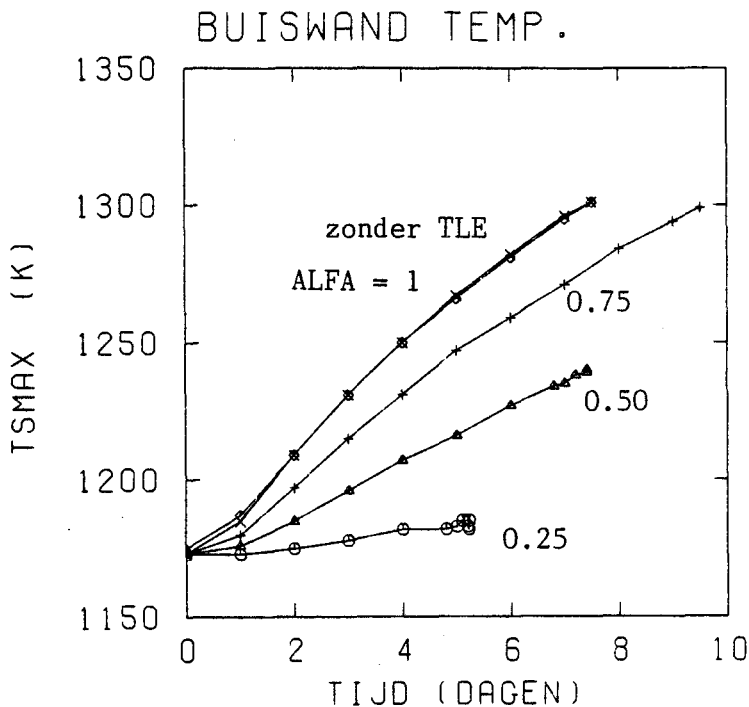


fig. 6.15 Maximale buiswandtemperatuur voor momentane optima.

Momentane winst

In figuur 6.16 is de momentane winst voor momentaan optimale sturingen weergegeven. Behalve op het einde van de bedrijfstijd, neemt de momentane winst toe als parameter α verkleind wordt. Deze afname is te wijten aan de sterke toename van de opbrengst van de nevenproducten. Op het einde van de bedrijfstijd zakt de momentane winst voor $\alpha = .25$ en $.5$ in, omdat dan de toename van de kosten van het etheenverbruik groter wordt dan de toename in de opbrengst.

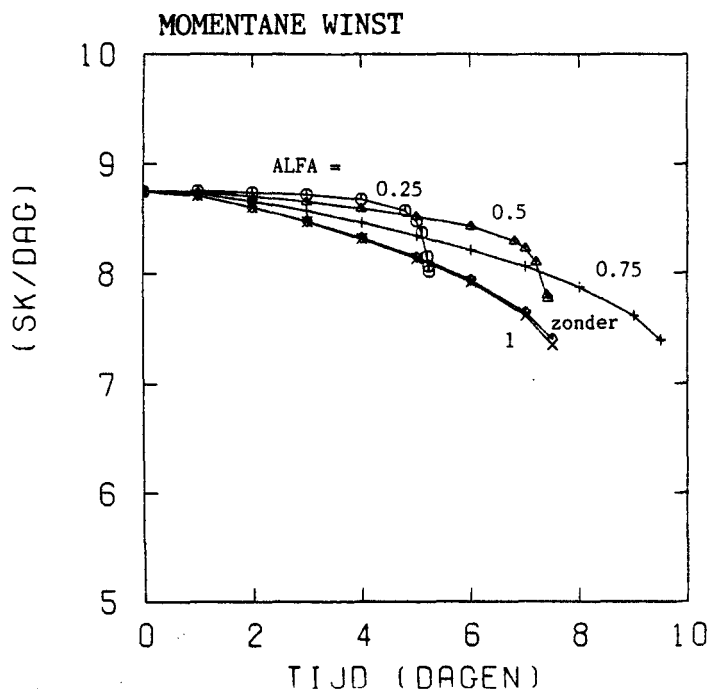


fig. 6.16 Momentane winst voor momentane optimale sturingen.

Net als bij de statische optima valt op te merken dat het onttrekken van kool uit de kraakbuis gunstig is en dat daardoor tot vlak voor het einde van de bedrijfstijd de momentane winst bij kleinere alfa groter is dan bij grotere alfa. Op het einde van de bedrijfstijd gaat echter het druk-effect overheersen waardoor de momentane winst inzakt. Bij alfa=.25 is verkorting van de bedrijfstijd t.g.v. het druk-effect dusdanig dat de rol van de schoonmaaktijd bij de middeling zo belangrijk wordt dat de cyclugemiddelde winst lager is dan bij andere fracties.

In figuur 6.17 is de cyclugemiddelde winst voor de momentane optima weergegeven voor de verschillende waarden van alfa en zonder TLE. Ter vergelijking zijn ook de statische optima in de figuur aangegeven. Uit figuur 6.17 blijkt dat de cyclugemiddelde winst voor de momentane optima 5-10 % lager is dan bij de statische optima. De belangrijkste reden hiervoor is de zeer korte bedrijfstijd die bij momentaan optimaliseren bereikt kan worden, waardoor de schoonmaaktijd in de middeling relatief zwaar weegt (zie voor verdere vergelijking : hoofstuk 8).

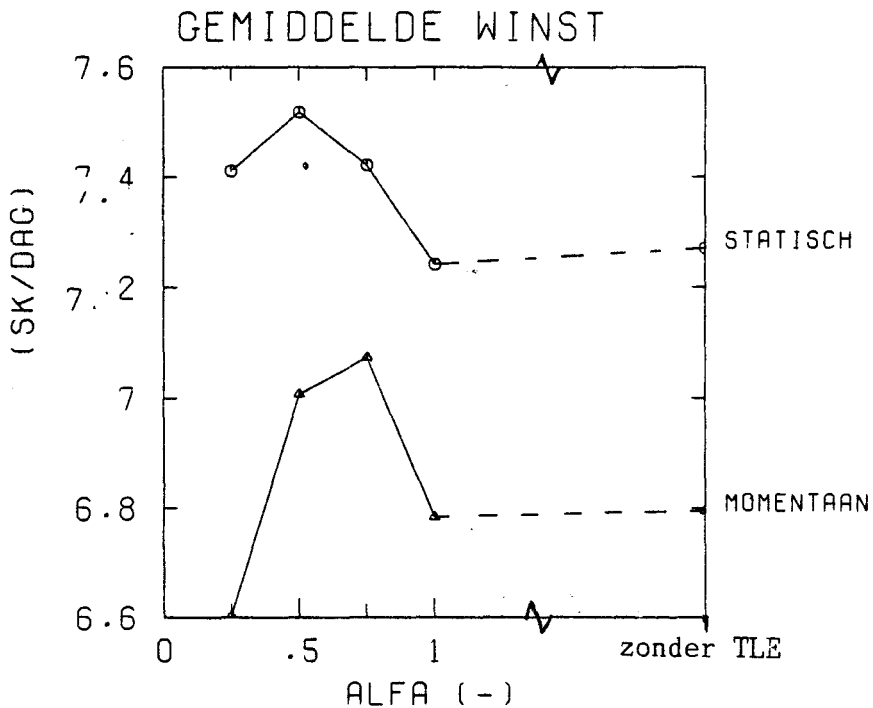


fig. 6.17 Cyclusgemiddelde winst.

Voor $\alpha=0.75$ is W_{gem} het grootst. Dit komt door de redelijke momentane winst gecombineerd met een lange bedrijfstijd waardoor de rol van de schoonmaaktijd bij de middeling onbelangrijker wordt.

Conclusie

De cyclusgemiddelde winst is voor het momentaan optimaliseren lager dan bij het statisch optimaliseren (fig. 6.9 en 6.17).

Als $\alpha=0.5$ wordt de grootste W_{gem} bij statisch optimaliseren gemaakt, gevolgd door $\alpha=0.75$ en $.25$. Bij momentaan optimaliseren is deze waarde van $\alpha=0.75$ gevolgd door $.5$. Er dient niet vergeten te worden dat α in de praktijk niet vrij instelbaar is, maar vastligt voor een gegeven installatie. De verhoging van W_{gem} t.o.v. het model zonder TLE wordt veroorzaakt doordat een gedeelte van de kool uit de kraakbuis onttrokken wordt waardoor het kraakproces efficiënter kan functioneren.

In hoofdstuk 8 vindt een uitgebreidere vergelijking plaats van statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren.

7. Dynamisch optimaliseren

7.1 Inleiding

De dynamisch optimale sturing bij een gegeven bedrijfstijd is de tijdafhankelijke sturing die de cyclusgemiddelde winst maximaliseert (zie ook paragraaf 6.1). Een noodzakelijke voorwaarde hierbij is dat op elk moment gedurende deze bedrijfstijd de ingangsdruk en de maximale buiswandtemperatuur hun maximum niet overschrijden.

Dynamisch optimaliseren is geen eenvoudige zaak : de sturing is tijdafhankelijk en het criterium betreft het proces over de gehele bedrijfstijd, nl. de cyclusgemiddelde winst. De tijdafhankelijkheid en het criterium hebben tot gevolg dat dynamisch optimaliseren een oneindig dimensionaal probleem is i.t.t. de drie dimensies van de problemen van het statisch en momentaan optimaliseren.

Het lukt niet om de dynamisch optimale sturing te vinden door analoog aan statisch en momentaan optimaliseren het proces stap voor stap door te rekenen. Hiervoor is het aantal vrijheidsgraden te groot. Als er uitgegaan wordt van een bepaalde beginschatting moet via een traject door de n -dimensionale ruimte de optimale sturing uopt gevonden worden. Het aantal dimensies n is het aantal stuurgrootheden vermenigvuldigd met het aantal tijdstippen waarover ge-discretiseerd is.

Het traject dat naar de optimale sturing leidt kan gevonden worden door de richting van de winstgradiënt te volgen. Deze gradiënt kan numeriek bepaald worden, maar bij het onderzoek wordt deze bepaald d.m.v. de methode van ge-adjungeerde variabelen.

Een bijkomend probleem is dat in de toestandruimte twee hypervlakken aanwezig zijn die niet overschreden mogen worden : de drukbegrenzing van 6 bar en de temperatuurbeperving van 1300 K. Deze beperkingen brengen teweeg dat als het optimum met de maximale winst zich in een verboden gebied bevindt, dat dan via het volgen van de winstgradiënt het toegestane maximum niet gevonden kan worden. Een geschikte zoekrichting wordt dan gevonden door de winstgradiënt op het hypervlak van de beperking te projecteren.

Bij het dynamisch optimaliseren in de n -dimensionale ruimte zijn dus drie gradiënten nodig : de afgeleide van de winstfunctie en de de ingangsdruk- en buiswandtemperatuurbepervingen naar de sturing.

Berekening van de gradiënten

Tussen de kraakinstallatie met en zonder TLE zijn geen essentiële verschillen m.b.t. het berekenen van de gradiënten ,zodat dit gedeelte beknopt is gehouden : meer informatie zie appendix B en

(Grefte 1984).

De modelvergelijkingen worden beschouwd als beperkingen en worden m.b.v. ge-adjungeerde (toegevoegde) toestandsgrootheden aan het criterium toegevoegd. De ge-adjungeerde grootheden zijn verwant aan de Lagrange-multipliers.

De gradienten worden berekend d.m.v. variatie-rekening, waarbij er vanuit gegaan wordt dat variaties in de sturing \underline{u} , toestandsgrootheden \underline{x} en qf , en de diameter D onafhankelijk van elkaar zijn.

Om de gradiënten van de beperkingen te berekenen dienen wel eerst de beperkingen in integraal-vorm gegoten te worden. De beperkingen veranderen van :

$$P_i \leq 6 \text{ bar} \quad (7.1)$$

$$T_{SMAX} \leq 1300 \text{ K} \quad (7.2)$$

in:

$$\frac{1}{t_b} \int_0^{t_b} \left[\frac{P_i(t)}{6 \text{ bar}} \right]^m dt \leq 1 \quad (7.3)$$

$$\frac{1}{t_b * L} \int_0^{t_b} \int_0^L \left[\frac{TS(z,t)}{1300 \text{ K}} \right]^m dt dz \leq 1 \quad (7.4)$$

met $m > 0$. Voor m wordt een geschikte waarde gekozen. Uit de integralen blijkt dat als de ingangsdruk ten alle tijde en de buiswandtemperatuur ten alle tijde en plaatse kleiner dan hun begrenzing zijn, dat dan de integralen ook kleiner dan 1 zijn.

Door het modelleren van de TLE verandert de gradiënt van de winst, die van de beperkingen blijft echter hetzelfde.

7.2 Dynamisch optimale sturingen bij vaste alfa.

In deze paragraaf worden een aantal karakteristieken van de dynamisch optimale sturingen bij een zelfde alfa (.75) voor verschillende bedrijfstijden behandeld. De trends in een aantal grootheden zijn dezelfde als die voor de situatie zonder TLE (Grefte 1984). Onderlinge vergelijking daarmee vindt, voor een bepaalde bedrijfstijd, in de volgende paragraaf plaats.

Sturingen

In de figuren 7.1 en 7.2 is resp. de dynamisch optimale voeding en stoomdebiet als functie van de tijd weergegeven. Dit is voor verschillende bedrijfstijden uitgevoerd.

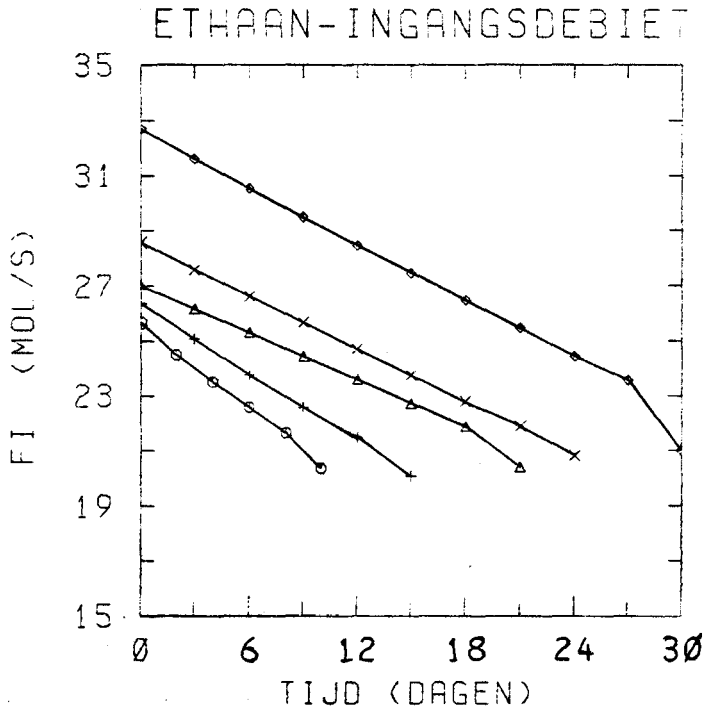


fig. 7.1 Dynamisch optimale voeding bij alfa = 0.75

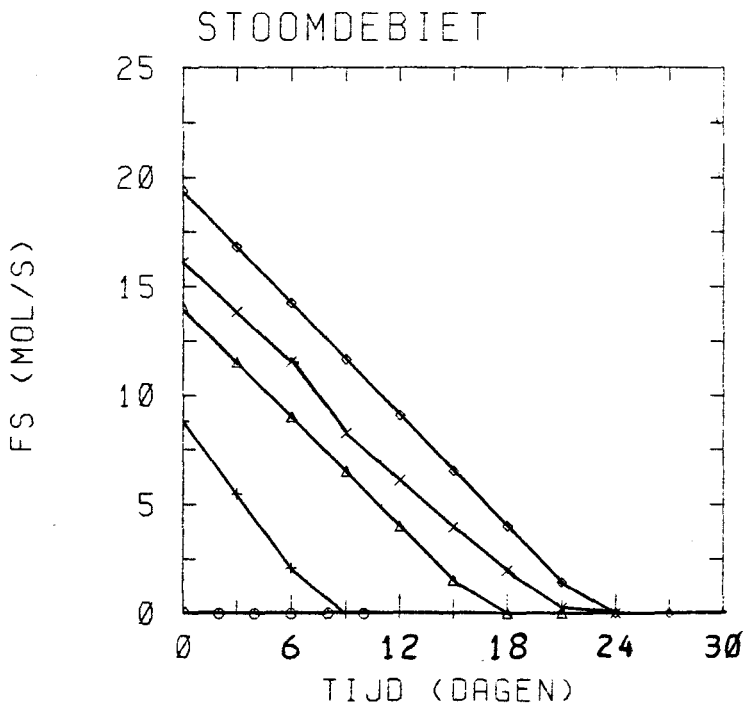


fig. 7.2 Dynamisch optimale stoomdebiet bij alfa = 0.75

Uit deze figuren blijkt dat in het begin voor grote debieten gekozen wordt. Bij het verlopen van de tijd zal de dynamisch optimale voeding en stoomdebiet afnemen tot ongeveer 20 en 0 mol/s op het einde van de bedrijfstijd. De momentaan optimale sturing is resp. 20 en 0 mol/s (hfst.6). Bij de dynamisch optimale sturingen blijkt dat in het begin de voeding en het stoomdebiet veel groter zijn dan ze zouden zijn als de momentane winst gemaximaliseerd had moeten worden. In het begin wordt dus genoeg genomen genomen met minder winst per tijdseenheid. Toch is de integrale winst die over een cyclus gemaakt wordt groter. Dit komt omdat door de hoge debieten in het begin de opkoling geremd wordt (hfst. 5), waardoor na verloop van tijd een grotere momentane winst gemaakt kan worden.

Op het einde van de bedrijfstijd zijn de voeding en het stoomdebiet gelijk aan de momentaan optimale sturingen : de gevolgen erna zijn niet meer van belang. Op het laatste tijdstip moet dus de momentane winst gemaximaliseerd worden.

Ook blijkt uit de figuren dat naarmate de bedrijfstijd groter wordt, ook de dynamisch optimale debieten groter worden. De opkoling moet sterker geremd worden om de grotere bedrijfstijd te realiseren.

Diameters

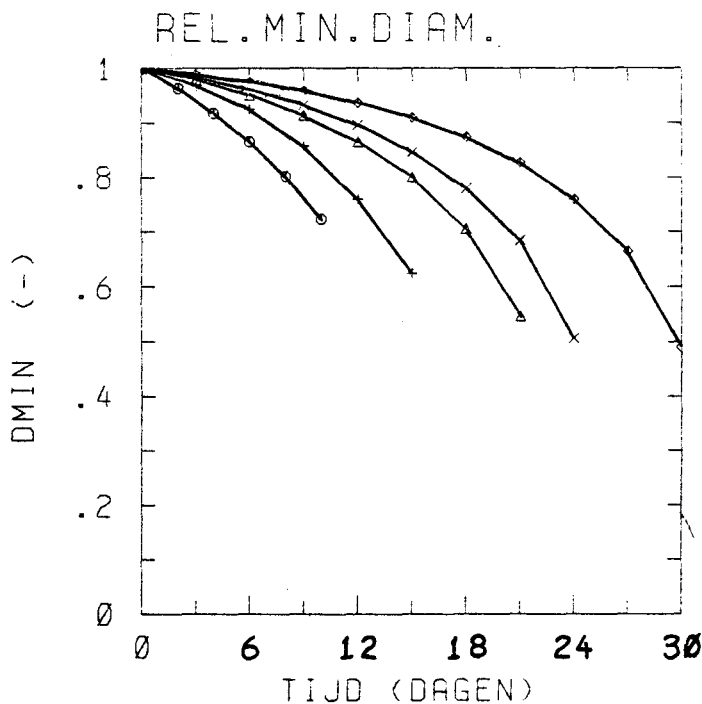


fig. 7.3 Relatieve diameter van kraakbuis.

In figuur 7.3 is resp. de relatieve minimale diameter van de kraakbuis gegeven. Deze grootte is de kleinste binnendiameter van de opgekoelde buis t.o.v. de diameter van de schone buis. In figuur 7.4 is de diameter van de TLE weergegeven. In beide figuren is te zien dat bij grotere bedrijfstijden de diameters langzamer verkleinen, hetgeen in overeenstemming is met de grotere debieten

(fig.7.1 en 7.2). Uit de figuren blijkt dat de eindwaarden voor grotere bedrijfstijden lager liggen.

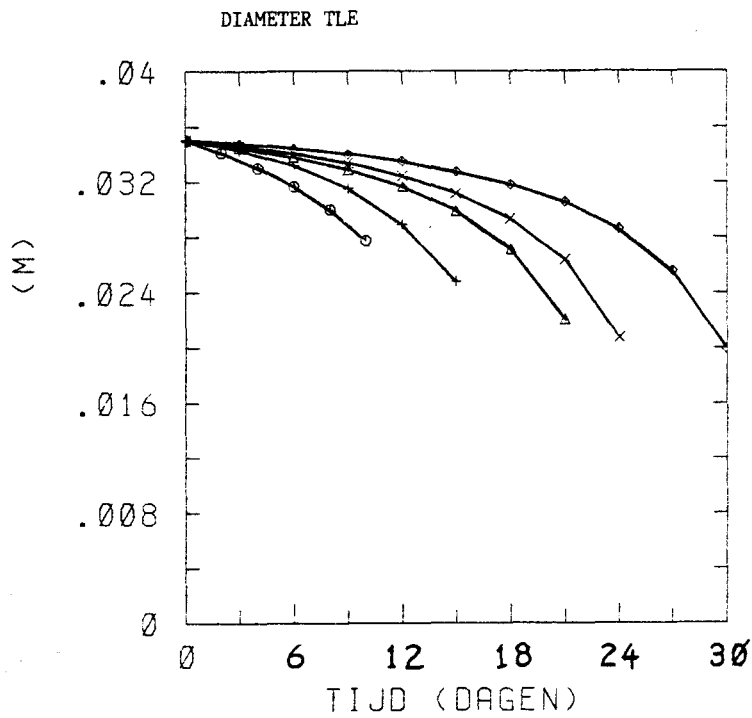


fig.7.4 Diameter van de TLE.

Ingangsdruk

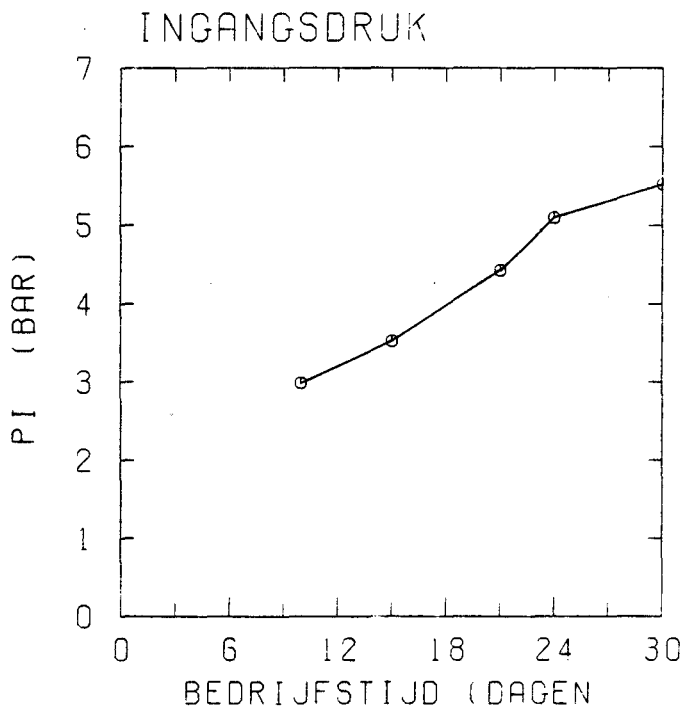


fig. 7.5 Finale ingangsdruk

In figuur 7.5 is de ingangsdruk op het einde van de bedrijfstijd voor verschillende bedrijfstijden weergegeven.

Bij grotere bedrijfstijden blijkt uit deze figuren dat de finale ingangsdruk toeneemt. Dit wordt veroorzaakt door de kleinere diameters (fig. 7.3 en 7.4). De limiet van 6 bar wordt niet bereikt.

Maximale buiswandtemperatuur

In figuur 7.6 is de maximale buiswandtemperatuur op het einde van de bedrijfstijd weergegeven. Een grotere bedrijfstijd zal een hogere finale maximale buiswandtemperatuur tot gevolg hebben. De diameters zijn voor grotere bedrijfstijden op het einde immers kleiner. De koollaag is dus dikker waardoor de buiswand incl. koollaag minder warmte doorlaat met als gevolg dat de buiswandtemperatuur hoger wordt. I.t.t. de drukbegrenzing wordt de buiswandtemperatuur beperking van 1300 K bij de dynamisch optimale sturing wel bereikt.

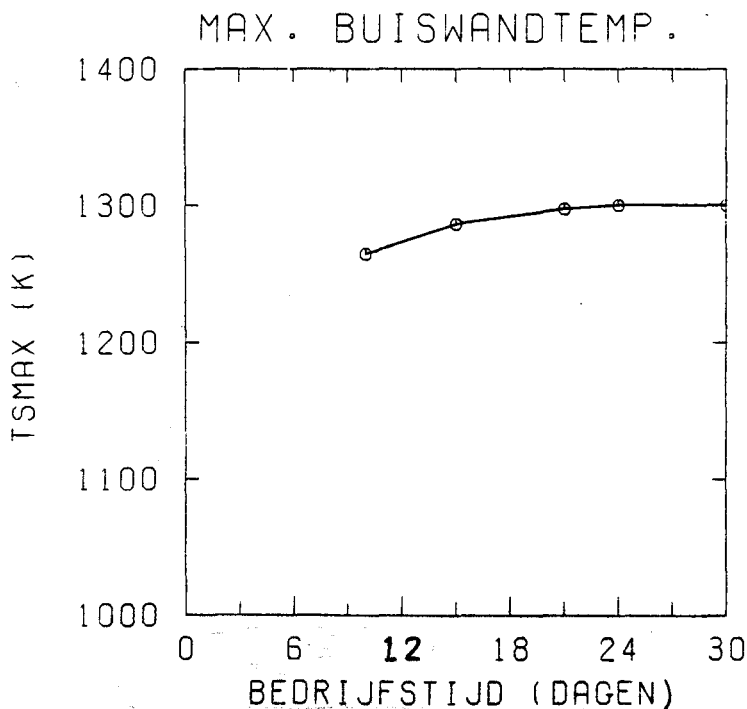


fig. 7.6 Maximale buiswandtemperatuur op einde van bedrijfstijd.

Ethaanverbruik

In figuur 7.7 is het gemiddelde ethaanverbruik bij de dynamisch optimale sturingen weergegeven. Deze grootte is een waarde gemiddeld over de bedrijfstijd, dus niet cyclusgemiddeld.

Als de bedrijfstijd vergroot wordt neemt het gemiddelde ethaanverbruik af omdat bij de grotere bedrijfstijden de voeding en het stoomdebiet groter is.

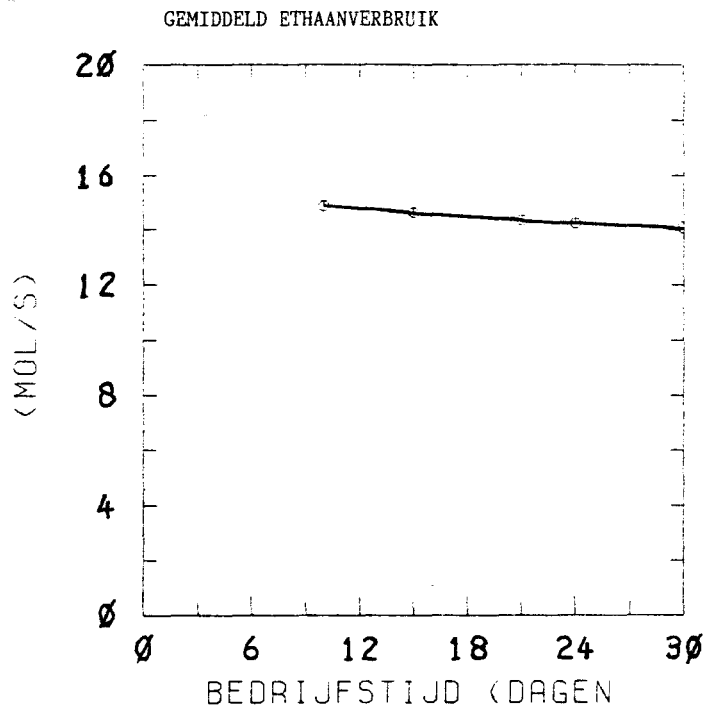


fig. 7.7 Het bedrijfstijdgemiddelde ethaanverbruik.

Conversie en selectiviteit

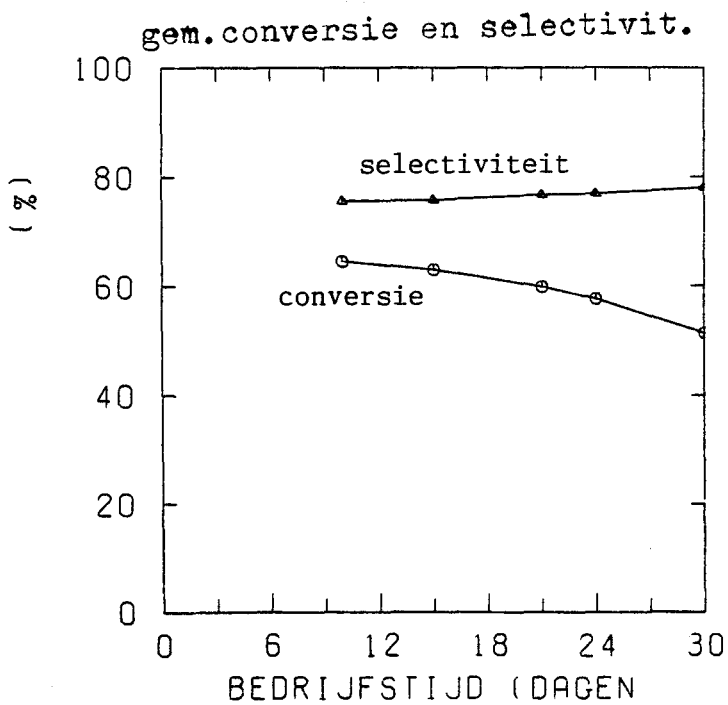


fig. 7.8 Gemiddelde conversie en selectiviteit.

In figuur 7.8 is de gemiddelde conversie en selectiviteit gegeven.

De gemiddelde conversie is gedefinieerd als :

$$\text{CONVGEM} := \frac{\int_0^{tb} \text{FC}(t) dt}{\int_0^{tb} \text{FI}(t) dt} \quad (7.5)$$

De definitie van de gemiddelde selectiviteit is op analoge wijze af te leiden.

Als de bedrijfstijd groter wordt neemt de gemiddelde conversie af omdat bij vrijwel gelijkblijvend ethaanverbruik de voeding groter is voor grotere bedrijfstijd.

De lichte toename van de gemiddelde selectiviteit voor grotere bedrijfstijden wordt veroorzaakt door het over langere tijd constant blijven van het etheendebiet, terwijl deze voor kortere bedrijfstijden al snel inzakkt (deze figuur is niet gegeven). Dit inzakken komt doordat bij deze kortere bedrijfstijden de druk vrij snel flink toeneemt. Een indicatie hiervoor is bijvoorbeeld de grotere diameterveranderingen voor kleinere bedrijfstijden (fig.7.3 en 7.4).

Cyclusgemiddelde winst

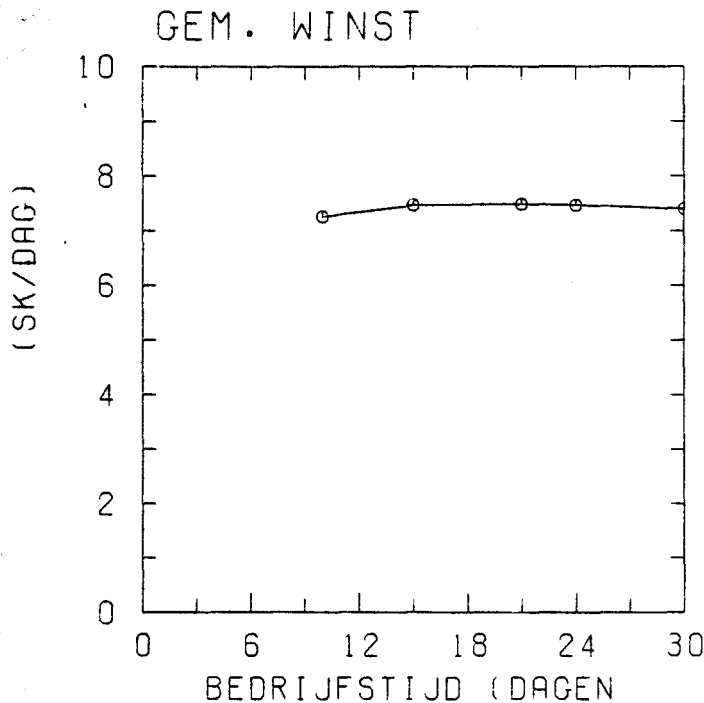


fig. 7.9 Cyclusgemiddelde winst.

In figuur 7.9 is de cyclusgemiddelde winst als functie van de bedrijfstijd gegeven. Deze grootte is het criterium waarnaar de dynamische optimaliseringsplaats hebben gevonden. Let wel :hier

wordt over de cyclustijd (=bedrijfstijd + schoonmaaktijd) gemiddeld, i.t.t. bedrijfstijdgemiddelde grootheden (fig. 7.7 en 7.8).

De cyclusgemiddelde winst vertoont bij 21 dagen een zeer ongenueanceerd maximum van 7.48 SK/dag.

De verschillen in winst als van deze bedrijfstijd afgeweken wordt, zijn minimaal :een bedrijfstijd van 15 dagen levert een cyclusgemiddelde winst op die slechts 0.3 % lager is. In paragraaf 7.4 wordt een nauwkeurige schatting van de optimale bedrijfstijd gegeven die berekend is door curve-fitting op o.a. figuur 7.9 toe te passen. toe te passen.

7.3 Dynamische optima bij vaste bedrijfstijd.

In deze paragraaf worden de dynamisch optimale sturingen beschreven die voor een vaste bedrijfstijd van 15 dagen gelden.

De sturingen voor verschillende waarden van alfa zijn met elkaar vergeleken. Ook de situatie zonder TLE is bij de vergelijking betrokken.

Er wordt hier slechts een bedrijfstijd besproken. Het is gebleken dat de trends en de onderlinge ligging van de dynamisch optimale sturingen voor andere bedrijfstijden weinig verschillen vertonen.

Debiten

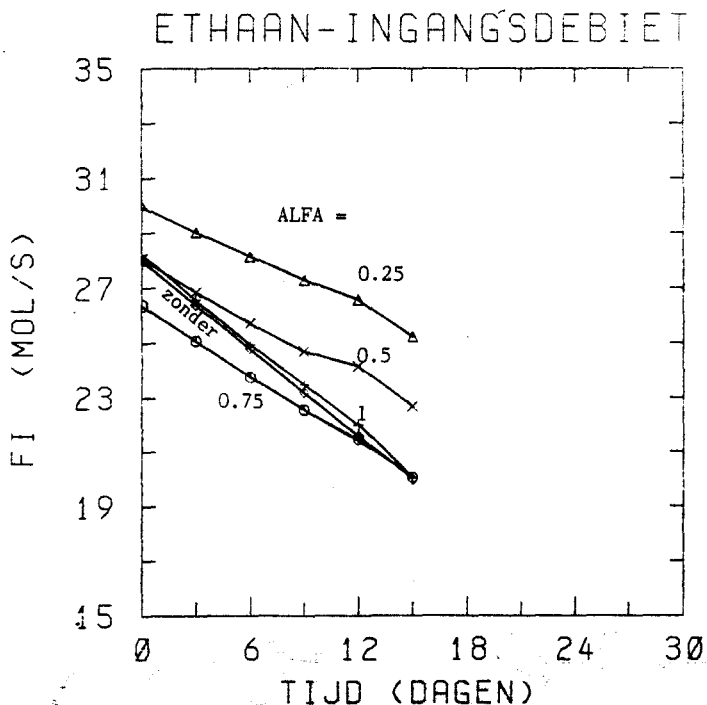


fig. 7.10 De dynamisch optimale voedingen bij 15 dagen.

In de figuren 7.10 en 7.11 is de dynamisch optimale voeding en stoomdebiet weergegeven. Elke curve komt overeen met een andere

waarde voor alfa. De debieten vertonen een dalend verloop. Het stoomdebiet eindigt bij alle curven in 0 mol/s en de voeding eindigt in 20 mol/s, behalve bij alfa = .5 en .25 die bij een hoger ethaandebiet eindigen.

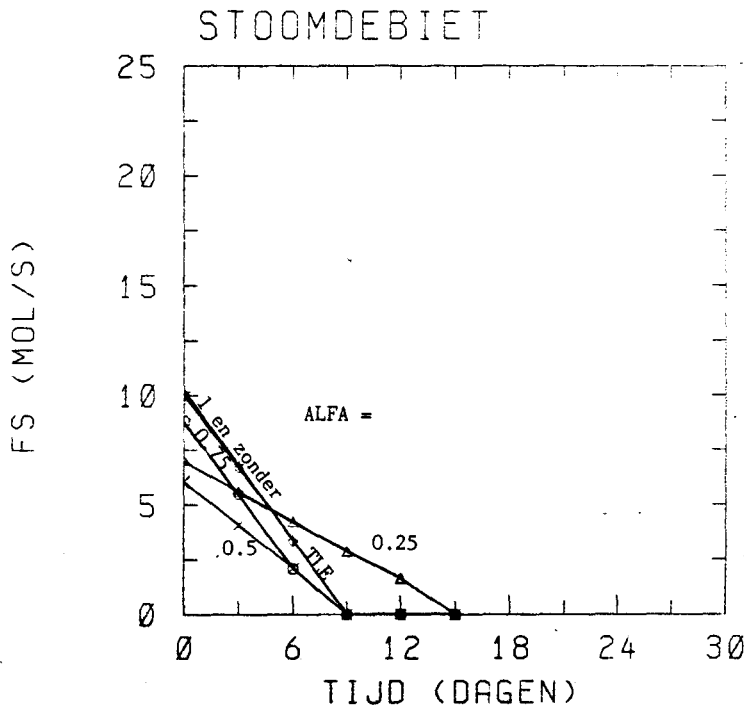


fig. 7.11 Het dynamisch optimale stoomdebiet bij 15 dagen.

De debieten beginnen hoog om de opkoling te remmen. Naarmate de tijd verstrijkt nemen de debieten af. Op het eindpunt moet de momentane winst rücksichtsloos gemaximaliseerd worden. De eindwaarden van de debieten zijn dus de momentane optima. In paragraaf 5.6 is gedemonstreerd dat bij kleinere alfa de momentaan optimale voeding van 20 mol/s naar een hogere waarde verschuift naarmate de tijd verstrijkt. Dit verklaart dat in fig. 7.10 voor de minder grote alfa's (0.5 en 0.25) de dynamisch optimale eindwaarde van de voeding groter dan 20 mol/s is. In de eindwaarde van het dynamisch optimale stoomdebiet wordt een dergelijke verschuiving niet geconstateerd, hetgeen in overeenstemming is met paragraaf 5.6.

De onderlinge ligging.

De voeding en het stoomdebiet ten dele, zijn bij alfa=0.25 het grootst. De dynamisch optimale voeding is bij alfa=1 iets groter dan bij de situatie zonder TLE, de verschillen in het stoomdebiet zijn echter verwaarloosbaar. De dynamisch optimale debieten bij alfa=0.75 zijn kleiner dan die bij alfa=1 en zonder TLE.

Deze constatering is dezelfde als gedaan in het voorgaand hoofdstuk en kunnen m.b.v. dezelfde redenering verklaard worden (alfa- en druk-effect). De dynamisch optimale debieten bij alfa=.5 zijn echter niet goed te voorspellen. De situatie bij alfa=.5 ligt net als bij de statisch optimale sturingen in een overgangsgebied, waar de

rol van beide effecten in belangrijkheid verwisselen.

Omdat het optimaliseringscriterium, de cyclusgemiddelde winst, niet zo gevoelig bleek te zijn voor veranderingen in de debieten, moeten deze dynamisch optimale debieten plaatjes niet als een stevig fundament gebruikt worden bij verder onderzoek.

In figuur 7.12 is de cyclusgemiddelde winst bij de bedrijfstijd van 15 dagen weergegeven.

alfa	Wgem SK/dag
0.25	7.432
0.50	7.528
0.75	7.460
1.00	7.340
zonder TLE	7.360

fig. 7.12 Cyclusgemiddelde winst bij 15 dagen.

De volgorde van deze winst voor de verschillende alfa's is dezelfde als die bij de statische optima. Het modelleren van de TLE heeft in het algemeen dus een gunstige invloed op de winst tenzij er geen kool naar de TLE getransporteerd wordt.

7.4 Dynamische optima bij verschillende bedrijfstijden en alfa's.

alfa(-)	bedrijfstijd (dagen)								
	7	9	10	15	18	21	24	27	30
0.25			+	+		+	+		+
0.50				+	+				
0.75			+	+		+	+		+
1.00		+		+		+	+		+
zonder TLE	+		+	+		+	+		+

fig. 7.13 Onderzochte combinaties

De verschillen in dynamische optima bij andere bedrijfstijden en alfa's blijken niet essentieel verschillend te zijn en worden dan ook zeer beknopt besproken. In figuur 7.13 is gegeven voor welke waarden alfa en bedrijfstijd er dynamisch optimaliseringsen zijn uitgevoerd. Eveneens is dit gegeven voor het proces zonder TLE. Deze laatste combinaties waren in een vorig onderzoek reeds

uitgevoerd.

De temperatuurbepierking wordt voor alle waarden van alfa na een bedrijfstijd van circa 21-24 dagen bereikt, behalve voor alfa = .25 die zelfs voor een bedrijfstijd van 30 dagen zijn beperking niet bereikt.

De drukkbeperking wordt voor geen enkele waarde van alfa bereikt.

In figuur 7.14 is de cyclusgemiddelde winst gegeven als functie van de bedrijfstijd voor verschillende alfa's. De onderlinge ligging van de curven blijkt dezelfde te zijn als die bij de statische optima en kan op analoge wijze verklaard worden (alfa- en druk-effect).

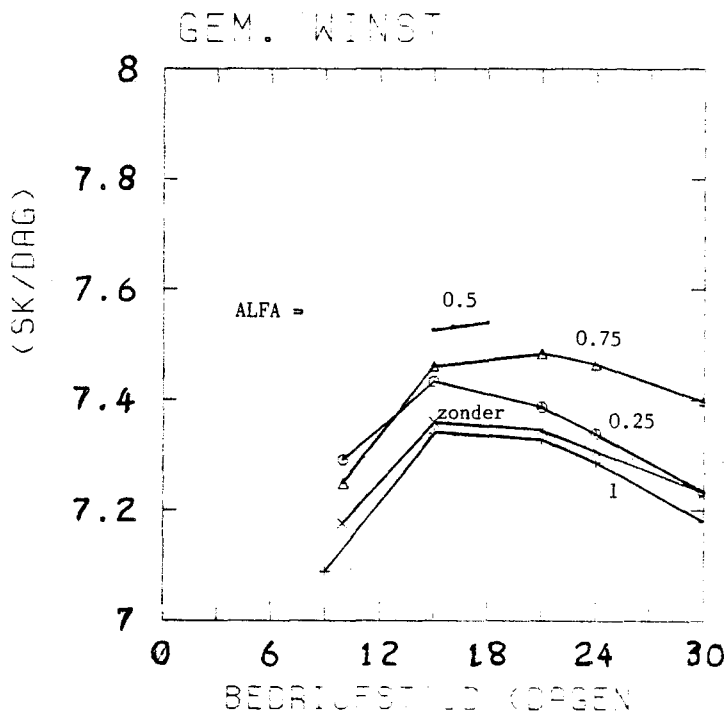


fig. 7.14 Cyclusgemiddelde winst voor dynamische optima.

Om een schatting van het maximum van elke curve uit fig. 7.14 te bepalen, is curve-fitting met een derde-gradspolynoom toegepast. Op deze wijze is de optimale bedrijfstijd met bijbehorende cyclusgemiddelde winst bepaald (fig. 7.15).

alfa (-)	bedrijfs- tijd (dagen)	Wgem (SK/dag)
0.25	16.5	7.436
0.50	18	7.536
0.75	19.0	7.497
1.00	17.7	7.358
zonder TLE	19.5	7.377

fig. 7.15 Optimale bedrijfstijd voor dynamische optima.

De gevoeligheid van het optimum voor de bedrijfstijd rond de optimale bedrijfstijd blijkt gering te zijn : een bedrijfstijd van 15 of 21 dagen blijkt voor alle waarden van alfa in een cyclusgemiddelde winst te resulteren die hoogstens enkele promillen lager ligt dan voor de optimale bedrijfstijd.

Concluderend kan gezegd worden dat de TLE in het algemeen een gunstig effect heeft op de cyclusgemiddelde winst. De reden hiervoor is dat er een gedeelte van de gevormde kool in de TLE neerslaat. Hierdoor vervuult de kraakbuis minder waardoor er meer winst gemaakt kan worden. De door de TLE veroorzaakte drukverhoging is ongunstig voor de winst maar dit drukeffect kan de winststijging niet teniet doen. In het voorgaand hoofdstuk werd op deze zaken uitvoerig ingegaan.

8. Vergelijking van statische, momentane en dynamische optima.

In dit hoofdstuk worden de resultaten van het statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren met elkaar vergeleken. Deze verhandeling is beperkt tot de optima voor $\alpha = 0.5$ en bij een bedrijfstijd van 18 dagen. Bij het momentaan optimaliseren is de maximale bedrijfstijd genomen (7.41 dagen bij $\alpha = 0.5$). Er is juist tot deze α beperkt omdat voor deze waarde bij het statisch optimaliseren de grootste cyclusgemiddelde winst bereikt kan worden. Hier wordt een bedrijfstijd van 18 dagen beschouwd omdat deze vrijwel gelijk is aan de statisch optimale bedrijfstijd van 18.2 dagen.

De ovenwandtemperatuur is in dit hoofdstuk wederom 1500 K.

In dit hoofdstuk wordt niet elk figuur uitputtend beschreven en verklaard. Trends en onderlinge ligging van curven kunnen op een wijze verklaard worden analoog aan het voorgaande.

Voeding en stoom

Uit figuur 8.1 blijkt dat voor het momentane optimum de voeding en het stoomdebiet gedurende een groot gedeelte van de bedrijfstijd een waarde hebben die ongeveer gelijk is aan de momentaan optimale waarde (hfst.5).

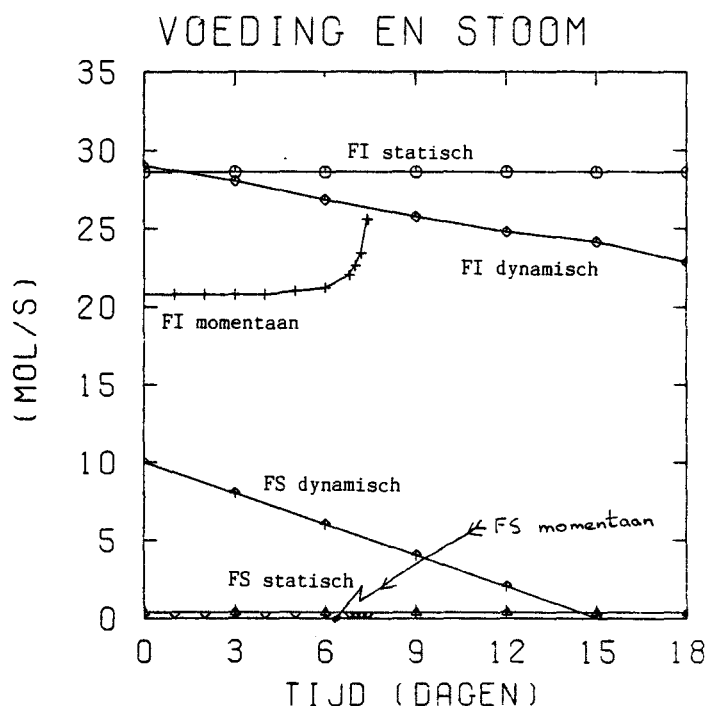


fig. 8.1 Voeding en stoom.

De momentane winst zal dus gedurende een groot deel van de bedrijfstijd maximaal zijn (zie ook figuur 8.9). De statisch optimale sturing heeft vrijwel hetzelfde stoomdebiet meer een veel

grotere voeding dan bij het momentaan optimum. De grotere voeding verlaagt weliswaar de momentane winst (zie ook fig. 8.9) maar verlaagt ook de opkoling (zie ook fig. 8.2).

Het dynamische optimum vertoont in het begin dezelfde hoge voeding als bij het statische optimum, alleen het stoomdebiet is veel groter dan bij het statische optimum zodat de opkoling nog meer geremd wordt dan bij het statische optimum (hfst. 5 ;fig. 8.2).

De sterke toename van de momentane optimale voeding tegen het einde van de bedrijfstijd wordt veroorzaakt door het verschuiven van het maximum van de momentane winst naar een hogere waarde. Zoals reeds eerder besproken is, treedt deze verschuiving voor een opgekoelde buis op bij minder grote α 's (.25 en .5 ; zie ook paragraaf 6.2.2).

De afname van de dynamisch optimale debieten komt omdat gedurende de bedrijfstijd het accent verschuift van het vertragen van de opkoling (hoge debieten) naar het streven naar maximaal momentane winst (lagere debieten) zodat de debieten afnemen (zie ook hfst. 7).

Kooldepositie

Uit figuur 8.2 blijkt dat er bij het momentane optimum veel meer kool zich in de kraakbuis zich afzet dat bij de andere optima omdat bij het momentaan optimaliseren de momentaan optimale waarden worden gekozen zonder met de gevolgen van de opkoling rekening te houden. Bij de andere sturingen wordt de opkoling meer vertraagd door grotere debieten (zie ook fig. 8.1).

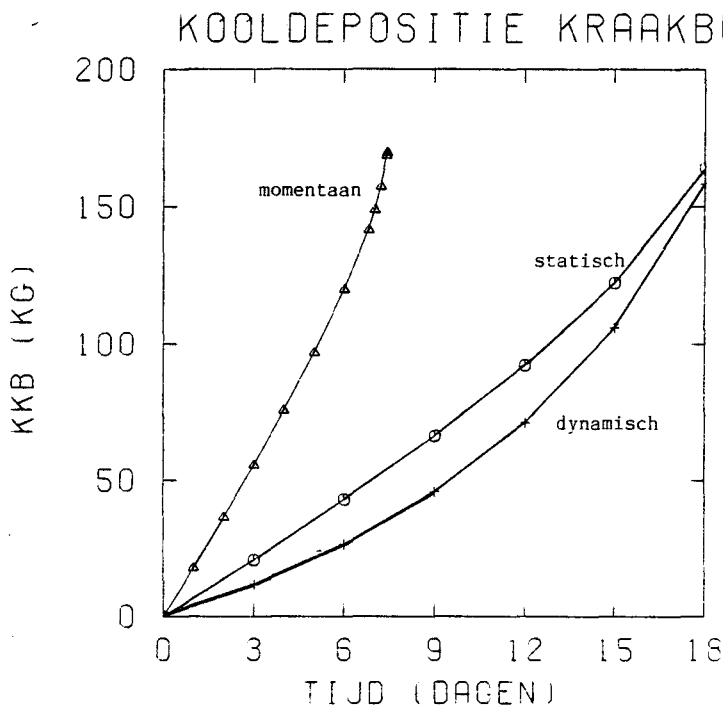


fig. 8.2 Kooldepositie in kraakbuis.

Het dynamisch optimaliseren resulteert in het minste kool omdat in

het begin de voeding hetzelfde en het stoomdebiet het grootst is van de optimale sturingen. Na verloop van tijd wordt de voeding bij het dynamische optimum kleiner dan bij het statische optimum en wordt het verschil van het dynamisch optimale stoomdebiet met dat van het statisch optimum kleiner, zodat het verschil tussen de kooldepositie bij het statisch en dynamisch optimum kleiner wordt. Omdat $\alpha = .5$ zet zich in de TLE evenveel kool af.

Druk

Uit fig. 8.3 volgt dat de drukval over de TLE voor het momentane optimum snel oploopt tegen het einde van de bedrijfstijd omdat de kooldepositie in de TLE snel toeneemt (zie beschrijving bij fig. 8.2). De drukval over de TLE is na verloop van tijd voor het dynamische optimum lager dan voor statische optimum vanwege de lagere kooldepositie en het lagere totaaldebiet.

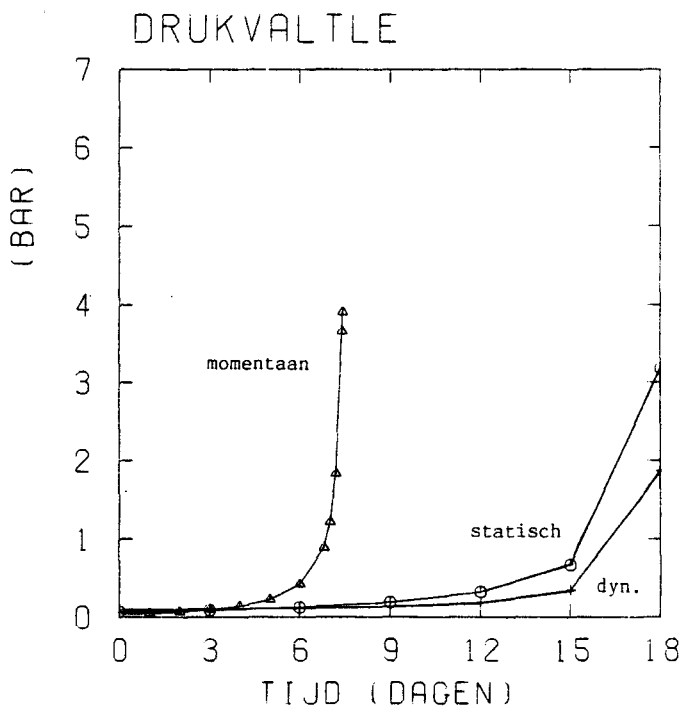


fig. 8.3 Drukval over de TLE.

Uit figuur 8.4 volgt dat de ingangsdruk in het begin voor het dynamische optimum het hoogst en voor het momentane optimum het laagst is vanwege het hoogste resp. laagste totaaldebiet. Na zes dagen wordt echter de koolafzetting in de TLE voor het momentane optimum dusdanig groot dat de drukval over de TLE snel toeneemt en dat de ingangsdruk van de kraakbuis snel de drukbeperking nadert. De andere sturingen bereiken de drukbegrenzing niet.

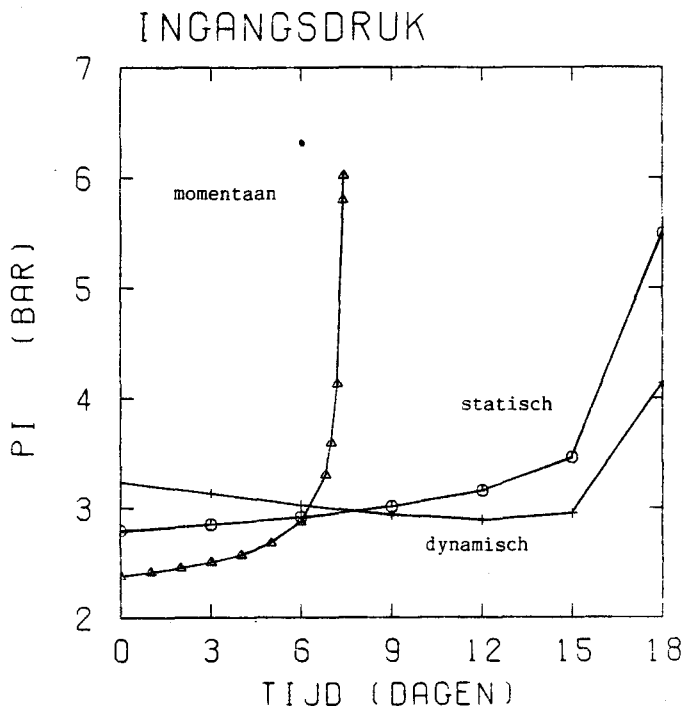


fig. 8.4 Ingangsdruk van de kraakbuis.

De buiswandtemperatuur

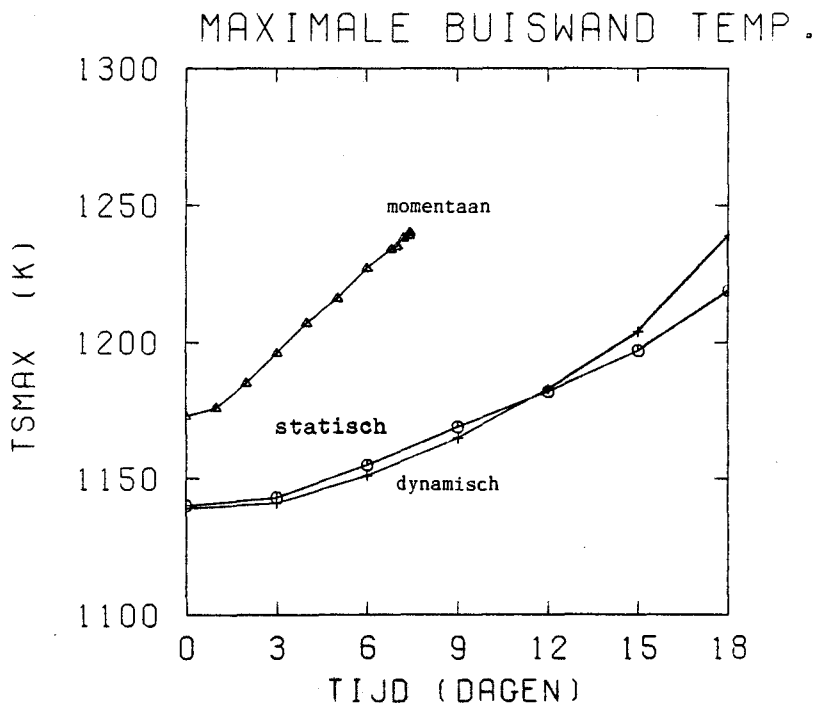


fig. 8.5 De maximale buiswandtemperatuur.

De maximale buiswandtemperatuur is voor de momentaan optimale sturing groter dan beide andere sturingen vanwege het lage ethaandebiet en na verloop van de tijd de hoge kooldeposities in de kraakbuis (fig. 8.5). De temperatuurbegrenzing

wordt voor geen enkele sturing bereikt. De verschillen in maximale buiswandtemperatuur bij het statische en dynamische optimum zijn gering omdat de verschillen in kooldepositie gering zijn en omdat de gevoeligheid van TSMAX voor het stoomdebiet gering is. In het begin is TSMAX bij het dynamisch optimaliseren iets lager dan bij het statisch optimaliseren vanwege de lagere kooldepositie. Na verloop van tijd wordt TSMAX bij het dynamisch optimaliseren iets groter dan bij het statisch optimum omdat het effect van het lagere ethaandebiet (zie ook paragraaf 5.3) is gaan domineren boven dat van de lagere kooldepositie.

Ethaanverbruik en etheendebiet

Het ethaanverbruik is bij dynamisch optimaliseren tot ongeveer de helft van de bedrijfstijd het laagste (fig. 8.6), omdat het stoomdebiet het hoogste is. Rond de 12-15 dagen is het ethaanverbruik bij dynamisch optimaliseren iets groter dan bij statisch optimaliseren; blijkbaar overheerst het effect van de hogere temperaturen (zie ook paragraaf 5.5 en 8.5). Tegen het einde van de bedrijfstijd gaat het drukeffect overheersen en wordt het ethaanverbruik bij het statische optimum weer groter dan bij het dynamisch optimum (zie ook fig. 8.3, 8.4 en paragraaf 5.2). bedrijfstijd gaat het drukeffect overheersen en wordt het ethaanverbruik bij het statische optimum weer groter dan bij het dynamisch optimum.

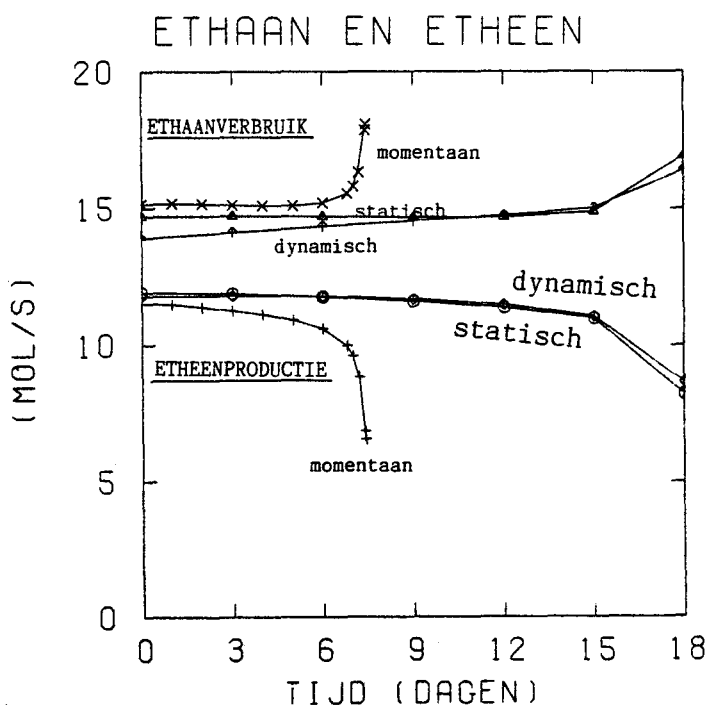


fig. 8.6 Ethaanverbruik en etheendebiet.

Het ethaanverbruik bij het momentane optimum is vanwege de hoge temperaturen het grootst en loopt tegen het einde van de bedrijfstijd snel op t.g.v. de grote druktoename. Ook in etheendebiet is er bij momentaan optimaliseren tegen het einde van de bedrijfstijd een grote verandering te constateren : sterke afname t.g.v. de druktoename. Het etheendebiet is bij momentaan

optimaliseren lager dan bij de beide andere sturingen omdat de voeding lager is.

Conversie en selectiviteit

De conversie is voor het momentaan optimaliseren vrij constant en hoog (fig. 8.7), omdat een hoog ethaanverbruik gecombineerd is met een lage voeding. De conversie voor de dynamisch optimale sturing begint laag waarna deze vrijwel lineair toeneemt en groter wordt dan de conversie bij het statische optimum. Dit wordt veroorzaakt doordat bij vrijwel gelijk ethaanverbruik de voeding lager is dan bij het statische optimum. De selectiviteit is voor het momentane optimum laag omdat het hoge ethaanverbruik gecombineerd is met een laag ethaandebiet (fig.8.8).

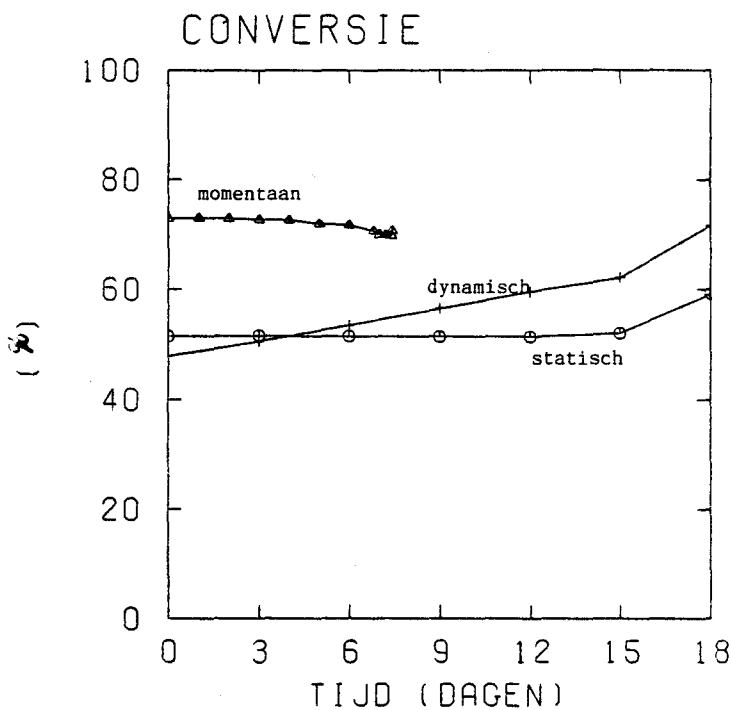


fig. 8.7 Conversie.

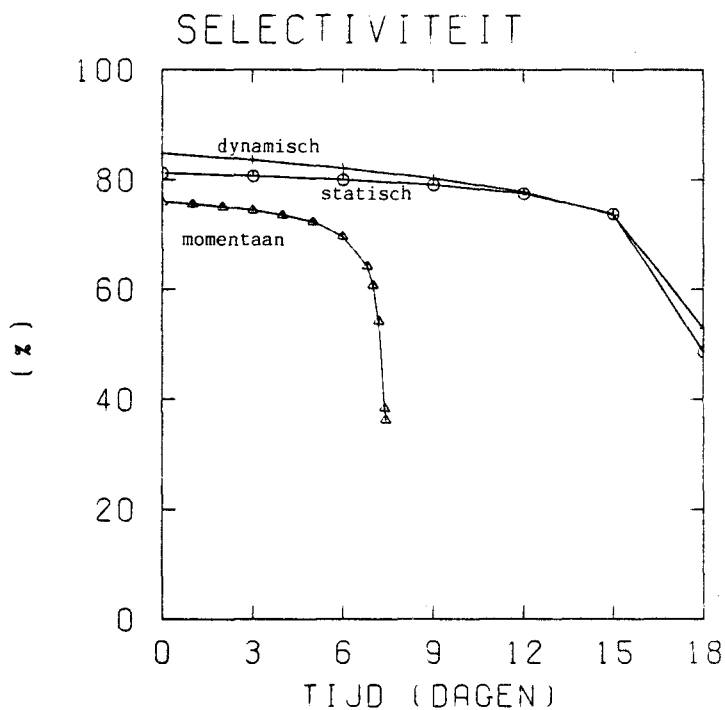


fig. 8.8 Selectiviteit.

Winst

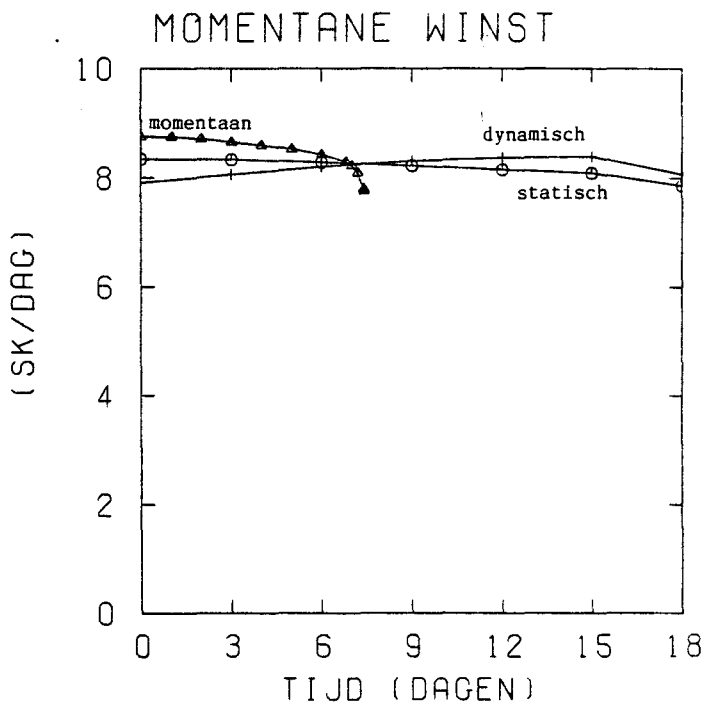


fig. 8.9 Momentane winst.

Uit figuur 8.9 blijkt een karakteristiek aspect van de dynamische optima : in het begin wordt genoeg genomen met een momentane winst die lager is dan bij de statisch en momentaan optimale sturingen. De momentane winst bij het dynamische optimum is lager

dan bij beide andere sturingen omdat de debieten het grootst zijn. De opkoling wordt meer geremd zodat uiteindelijk de momentane winst bij dynamisch optimaliseren het hoogst wordt. Deze veranderingen zijn dusdanig dat de cyclusgemiddelde winst bij dynamisch optimaliseren het grootst wordt.

Ook blijkt uit deze figuur dat de momentaan optimale sturing in het begin wel het meest lucratieve is, maar dat deze t.g.v. de sterke opkoling na een dag of zes reeds inzakt zodat er gedurende een zeer korte tijd maar van deze hoge winst geprofiteerd kan worden.

Ondanks dat de momentane winst bij het momentaan optimaliseren gedurende een groot deel van de bedrijfstijd het grootst is, is toch de cyclusgemiddelde winst voor dit optimum het laagst omdat de schoonmaaktijd bij de kleine bedrijfstijd een relatief grote rol speelt.

	cyclusgemiddelde winst (SK/dag)
momentaan optimum	7.01
statisch optimum	7.51
dynamisch optimum	7.54

fig. 8.10 Cyclusgemiddelde winst bij $\alpha = .5$
en $t_b =$ resp. 7.41 en 18 dagen.

In figuur 8.10 is de cyclusgemiddelde winst voor de drie sturingen gegeven (bij $\alpha = .5$ en de bedrijfstijd is resp. 7.41 en 18 dagen). Hieruit blijkt dat met dynamisch en statisch optimaliseren een grote verbetering t.o.v. momentaan optimaliseren bereikt kan worden: resp. 7.6 en 7.1%. De verbetering bereikt m.b.v. dynamisch optimaliseren t.o.v. statisch optimaliseren is slechts 0.4%. Deze verbetering lijkt erg klein, misschien wel te klein. Als echter absolute bedragen op jaarbasis wordt beschouwd, resulteert deze halfprocent-verbetering toch in een winstverhoging die zeker niet verwaarloosbaar is.

De relatieve verhoudingen van de cyclusgemiddelde winst voor de drie curven van optimaliseren voor andere waarden van α , blijken, voor optimale bedrijfstijden, van dezelfde orde te zijn als die bij $\alpha = .5$.

Samenvattend

Concluderend kan opgemerkt worden dat m.b.v. momentaan optimaliseren in het begin de grootste momentane winst bereikt kan worden, maar dat dit in de sterkste opkoling en een zeer korte bedrijfstijd resulteert. De cyclusgemiddelde winst is bij momentaan optimaliseren het laagst. Dynamisch optimaliseren levert in het begin de laagste momentane winst, maar op den duur wordt dit de grootste omdat de opkoling in het begin het meest vertraagd is. De cyclusgemiddelde winst is bij dynamisch optimaliseren bij

een bedrijfstijd van 18 dagen en $\alpha = .5$ een half procent groter dan bij statisch optimaliseren.

De drukbeperking wordt bij $\alpha=.5$ voor momentaan optimaliseren bereikt. De beide andere vormen van optimaliseren bereiken bij een bedrijfstijd van 18 dagen en $\alpha = .5$ de drukbeperking niet .

De temperatuurbeperring wordt niet bereikt bij $\alpha=.5$ en $t_b =$ resp. 7.41 en 18 dagen.

9. Conclusie

Invloed van modellering van de TLE op momentaan gedrag.

De gevolgen van het modelleren van de TLE op het momentaan gedrag zijn voor een schone buis klein tot verwaarloosbaar. Na verloop van tijd ontstaan er wel duidelijke verschillen.

De trends in het momentaan gedrag van de kraakbuis met TLE blijven echter hetzelfde.

Een opmerkelijk verschil met de situatie zonder TLE is dat de momentaan optimale voeding bij een opgekoolde buis voor kleinere alfa's ($\leq .5$) van 20 mol/s bij een schone buis naar een hogere waarde is verschoven. Er is zelfs een verschuiving tot 26 mol/s geconstateerd. De reden hiervoor is het verschuiven van het maximum van de etheenopbrengst naar een hogere voeding t.g.v. de druktoename.

Optima

Uitgaande van een ethaankraakoven zonder TLE kunnen statische, momentane en dynamische optima van een oven met TLE verklaard worden op grond van twee effecten : het alfa-effect en het druk-effect. Ook kan de invloed van de factor alfa op de verschillende optima met deze effecten verklaard worden. Alfa is de fractie van de gevormde kool die in de kraakbuis neerslaat. Alfa is geen stuurvariabele, maar is een vaststaand gegeven voor een kraakinstallatie. Het alfa-effect duidt het effect aan dat niet alle gevormde kool in de kraakbuis neerslaat, maar dat een gedeelte weg gevoerd wordt naar de TLE. Het druk-effect betreft het effect van de drukverhoging op het kraakproces veroorzaakt door het aanwezig zijn van de (opgekoolde) TLE. Het alfa-effect is gunstig en het druk-effect is ongunstig voor de cyclusgemiddelde winst.

Temperatuurbeperving

De temperatuurbeperving van 1300 K wordt voor de verschillende waarden van alfa bij de dynamisch optimale sturingen bereikt voor een bedrijfstijd van ongeveer 21-24 dagen, behalve bij alfa = .25 die zelfs bij een bedrijfstijd de beperking niet bereikt. Bij het statisch optimaliseren wordt de temperatuurbegrenzing niet actief. Bij momentaan optimaliseren wordt de temperatuurbegrenzing bereikt bij de grotere waarde van alfa (.75 en 1) en voor het proces zonder TLE.

Drukbe grenzing

De drukbe grenzing van 6 bar wordt bij dynamisch optimaliseren voor geen enkele waarde van alfa en bij geen enkele bedrijfstijd (\leq 30 dagen) actief. Bij statisch optimaliseren wordt de drukbeperking op zijn vroegst na ca. 18 dagen bereikt (bij alfa = .25). Voor de andere onderzochte waarden wordt bij statisch optimaliseren de drukbeperking later bereikt. Bij momentaan optimaliseren wordt de drukbeperking alleen actief voor de minder grote waarden van alfa (.25 en .5).

Winst

Voor de waarden van alfa = .25 , .5 en .75 blijkt er een hogere cyclusgemiddelde winst bij het statisch en dynamisch optimaliseren bereikt te kunnen worden dan bij het model zonder TLE. De reden hiervoor is dat na het modelleren van de TLE toegelaten wordt dat een hoeveelheid van de kool zich niet meer in de kraakbuis maar in de TLE afzet (alfa-effect). Een belangrijke kanttekening is dat alfa niet vrij instelbaar is , maar voor een bepaalde installatie en voeding een vaste waarde heeft.

Als alfa = 1 speelt alleen het ongunstige druk-effect mee en is de cyclusgemiddelde winst lager bij statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren dan voor een installatie zonder TLE.

Voor dynamisch optimaliseren wordt de hoogste cyclusgemiddelde winst bereikt bij alfa = .5 voor een optimale bedrijfstijd van 18 dagen : 7.536 SK/dag. Dit is enkele promillen hoger dan bij statisch optimaliseren bij de optimale bedrijfstijd van 18.2 dagen bereikt is. En 7.6 % . hoger dan de winst die bereikt is bij momentaan optimaliseren.

Bij statisch en momentaan optimaliseren wordt de grootste cyclusgemiddelde winst bereikt bij alfa = .5 resp. .75.

De optimale bedrijfstijd voor alle waarden van alfa voor het proces met TLE en voor het proces zonder TLE ligt bij statisch en dynamisch optimaliseren tussen 16.5 en 19.5 dagen.

De gevoeligheid van de cyclusgemiddelde winst voor afwijkingen van de optimale bedrijfstijd blijkt gering te zijn : een bedrijfstijd van 15 of 21 dagen resulteert hoogstens in een cyclusgemiddelde winst die enkele promillen lager ligt.

Trends in momentaan optimale sturingen

De momentaan optimale sturing vereist een stoom-en ethaandebiet van resp. 0 en 20 mol/s, behalve tegen het einde van de

bedrijfstijd waar de optimale voeding naar een hogere waarde verschuift.

Trends in statisch optimale sturingen

Er wordt meer ethaan en meer stoom dan bij de momentane optima toegevoegd om de opkoling te vertragen zodat er een veel langere bedrijfstijd gehaald kan worden.

Trends in dynamisch optimale sturingen

De dynamisch optimale sturingen vertonen voor alle waarden van α de volgende kenmerken :

- de ovenwandtemperatuur moet gelijk aan zijn maximaal toegestane waarde van 1500 K gehouden worden.

-de voeding neemt bij het verstrijken van de tijd af. Op het einde van de bedrijfstijd wordt de momentaan optimale waarde aangenomen. Voor grote α 's (> 0.5) is deze ongeveer 20 mol/s, maar voor kleinere α 's (≤ 0.5) zijn vergrotingen van deze momentaan optimale voeding tot 26 mol/s geconstateerd.

-het stoomdebiet neemt eveneens af. De eindwaarde is 0 mol/s.

In het begin wordt met deze sturingen minder momentane winst gemaakt dan bij statische en momentane optimaliseringen, maar wordt wel de opkoling meer vertraagd. Op den duur wordt de momentane winst groter dan die voor beide andere optimale sturingen, zelfs dusdanig groter dat de cyclugemiddelde winst het grootst wordt.

Hoeveelheid kool

Tijdens de bedrijfsvoering kan het relatieve volume van de TLE dat door kool wordt bezet, veel groter zijn dan dat van kraakbuis : 88 resp. 30 %. Dit is mogelijk doordat de TLE veel korter is dan de kraakbuis.

Symbolen

Symbolen.

<u>Symbol</u>	<u>Omschrijving</u>	<u>Eenheid</u>
A(z,t)	inwendige doorsnede van kraakbuis	m ²
alfa	fractie van hoeveelheid kool dat in de kraakbuis neerslaat	-
CONV(t)	conversie	-
CP	warmtecapaciteit	J/(mol K)
D(z,t)	inwendige diameter kraakbuis	m
DO	inwendige diameter schone kraakbuis	m
DPF	correctiefactor drukvergelijking	-
EAc	activeringsenergie opkoolreactie	J/mol
EAj	activeringsenergie reactie j	J/mol
f(x,D,qf)	modelvergelijkingen	
f	frictiefactor	-
FC(t)	ethaanverbruik	mol/s
FC2H4(t)	etheenproductie	mol/s
FI(t)	voeding	mol/s
FS(t)	stoomdebiet	mol/s
FT(z,t)	totaaldebiet	mol/s
FU(t)	debieten uitvalpakket kraakbuis	mol/s
g(TW,T,TS,D,x,qf)	fireboxvergelijking	
gamma(T)	factor van opkoolvergelijking	m ⁴ /(mol s)
-GEM	suffix ,gemiddeld over tb of tc	
h(x)	opkoolvergelijking	m/s
J	functionaal	fl/s
ke(t)	kosten ethaanverbruik	fl/s
kj	reactiesnelheidsconstante reactie j	l/s of m ³ /(mols)
kj,0	kj bij oneindig hoge temperatuur	"
KKB	hoeveelheid kool neergeslagen in kraakbuis	kg
KKt	hoeveelheid kool in TLE	kg
kqr(t)	kosten reactie warmte	fl/s
kqv(t)	kosten voelbare warmte	fl/s
ksch(t)	scheidingskosten	fl/s
L	lengte kraakbuis	m
Lt	lengte TLE	m
λ	toegevoegde grootheden	
m̄(t)	massastroom	kg/s
m	exponent formulering beperking	-
Mi	molaire massa component	kg/mol
μ(z,t)	toegevoegde grootheid	
mu	viscositeit	kg/ms
n	aantal (2l) TLE-buisjes per kraakbuis	
etaqv	rendement terugwinnen voelbare warmte	-
ν(z,t)	toegevoegde grootheid	
p(z,t)	druk	Pa

10 Symbolen

pi	prijs component i	SK/mol
ps	prijs stookgas	SK/J
psch	kosten scheiding	SK/mol
Pi(t)	ingangsdruk	Pa
Pu	uitgangsdruk	Pa
qf(z,t)	warmteflux	W/m ²
qr(z,t)	reactiewarmte	W/m ³
QR(t)	reactiewarmte	W
QVe	opname voelbare warmte door ethaan	J/mol
QVs	opname voelbare warmte door stoom	J/mol
$\underline{r}(z,t)$	reactiesnelheden	mol/m ³ s
R	gasconstante	J/molK
RE	getal van reynolds	-
rho	dichtheid van gas	kg/m ³
rhokool	dichtheid van kool	kg/m ³
SEL(t)	selectiviteit	-
SK	schoonmaakkosten	fl/s
sigma	schuifspanning	N/m ²
suffix t	grootheid betreft TLE	
t	tijd	s of dag
tb	bedrijfstijd	dag
tc	cyclustijd	dag
ts	schoonmaaktijd	dag
T(z,t)	temperatuur	K
TI	intreetemperatuur radiatiesectie	K
TS(z,t)	buiswandtemperatuur	K
TSMAX	maximale buiswandtemperatuur	K
TW(t)	ovenwandtemperatuur	K
\underline{u}	stuurvector :	
	u1 = ovenwandtemperatuur	
	u2 = voeding	
	u3 = stoomdebiet	
\underline{uopt}	optimale stuurvector	
$\underline{u}(t)$	zoekrichting voor sturing u(t)	
v	gassnelheid	m/s
V	specifiek volume gas	m ³ /mol
WP(t)	opbrengst producten	SK/s
W1 en W2	delen van winstfuncties	SK/s
Wgem	cyclusgemiddelde winst	SK/s
Wmom(t)	momentane winst	SK/s
$\underline{x}(z,t)$	toestandsvector :	
	x1 = ethaandebiet	
	x2 = etheendebiet	
	x3 = waterstofdebiet	
	x4 = methaandebiet	
	x5 = propaandebiet	
	x6 = propeendebiet	
	x7 = ethyndebiet	
	x8 = butadieendebiet	
	x9 = stoomdebiet	
	x10 = druk	
	x11 = gastemperatuur	
z	plaats in buis	m

11. Literatuur.

<u>Code</u>	<u>Omschrijving</u>
Albright 1983	Pyrolysis : theory and industrial practice editeuren: L.F.Albright, B.L.Crynes en W.H.Corcoran Academic Press 1983 code bibliotheek THE: JFP 83 PYR blu
Froment 1977	Modeling of thermal cracking kinetics 1 Thermal cracking of ethane, propane and their mixtures. G.F.Froment en K.M.Sundaram ChE Science 32. 1977 pg.601-608
Froment 1981	Coke deposition in the thermal cracking of ethane. G.F.Froment, P.S.van Damme en K.M.Sundaram ChE Journal 27(6) pg. 946-951 (1981)
Hirato 1971	Gas oil pyrolysis by tubular reactor and its simulation model of reaction M.Hirato, S.Yoshioka en M.Tanaka Hitachi Review Vol.20 No.8 1971
Hirato 1973	On simulation of pyrolysis reaction of hydrocarbon in a pyrolysis furnace M.Hirato en S.Yoshioka Chemical Economy & Engineering Review November 1973 Vol.5 No.11

Van vakgroep Systeem- en Regeltechniek:

Grefte 1984	Dynamisch optimaliseren van een ethaankraker. afstudeerverslag van H. de Grefte. intern vakgroepnummer: NR-1153(1984-08)
Heijden 1982	Het statisch simuleren van een ethaankraker. ir. J.W.J.M. van der Heijden bijdrage aan de Servobode juni 1982 nr. 28
Heijden 1983	Reacties en reactiekinetiek, modelvorming kraakoven. ir. J.W.J.M. van der Heijden NR-849 (1982-03-11)

Heijnen 1983

Fireboxmodel en energiebalans van een ethaankraker.

W.Heijnen

NR-983(83-03-02)

Van R.Kluijtmans:

Kluijtmans 13 februari 1984 Optimaal regressiemodel voor het gewichtspercentage van C₂H₄ : GPC₂H₄.
NR-1098(1984-02-13)

Kluijtmans 6 april 1984 Korte uiteenzetting over activiteiten.
inhoud: een moleculair model voor pyrolyse van nafta/gasolie.
NR-1121(1984-04-06)

Kluijtmans 6 juli 1984 Verslag van activiteiten.
inhoud: model en toegevoegd systeem van de TLE.
NR-1150(1984-07-06)

Kluijtmans 20 september 1984 Momentane simulaties van een ethaankraakoven met TLE.
NR-1170(1984-09-20)

Kluijtmans 5 oktober 1984 Presentatie statisch optimale sturing en enige andere resultaten.
NR-1172(1984-10-05)

Kluijtmans 23 oktober 1984 Invloed van de hoeveelheid kool in de kraak kraakbuis.
NR-1176(1984-10-23)

Kluijtmans 29 november 1984 Presentatie dynamisch optimale sturingen en verklaring statisch optimale sturing.
NR-1197(1984-11-29)

Appendix A Alfa-effect.

Dit deel is een bijlage bij hfst. 7. Hier wordt plausibel gemaakt dat een groter reactievolume een vergroting van de momentane winst oplevert. Dit volume-effect is een deeleffect van het alfa-effect.

Het totaaldebiet FT aan de uitgang van de kraakbuis kan als volgt geschat worden:

$$(1 + \text{conv}) * Fi \leq FT \leq 2 * Fi \quad (A1)$$

De factor twee in de bovengrens vindt zijn origine in de molverdubbeling die bij enkele reacties optreedt. Als het reactievolume groter is zal het totaaldebiet groter worden, neem aan met een factor β . Het totaaldebiet kan ook als volgt geschreven worden :

$$FT = Fi * (1 + \beta * \text{conv}) \quad (A2)$$

Het oppervlak A neemt met een factor β toe, dus ook de omzettingen:

$$dXi/dz = A * \beta * fi\{r1, \dots, r1, \dots, r8\} \quad (A3)$$

De opbrengsten WP worden ook een factor β groter :

$$WP = \beta * WPoud \quad (A4)$$

en de kosten van het ethaanverbruik $WC2H6$ nemen toe :

$$WC2H6 = \beta * \text{conv} * p1 * Fi \quad (A5)$$

Het ethaanverbruik en de opbrengsten zijn de belangrijkste termen van de winstfunctie. Als de andere termen even verwaarloosd worden, verandert de winst o.i.v. β als volgt:

$$Wmom = \beta * WPoud - \beta * \text{conv} * p1 * Fi \quad (A6)$$

$$Wmom = \beta * Wmomoud$$

Hiermee is dus plausibel gemaakt dat als het reactievolume groter is, de momentane winst groter is.

Appendix B Winstgradiënt t.b.v. dynamisch optimaliseren

Om snel de veranderingen t.g.v. het modelleren van de TLE te onderkennen, zijn de termen waarin directe veranderingen optreden geëncadreerd.

Het criterium bij dynamisch optimaliseren is de cyclusgemiddelde winst. Deze is als volgt te schrijven :

$$W_{gem}(tb) = \frac{1}{tb+ts} \int_0^{tb} W_{mom}(t) dt + \frac{SK}{tb+ts} \quad (B1)$$

,waarbij de momentane winst de volgende vorm heeft :

$$W_{mom}(t) = W1(\underline{x}(0,t), \underline{x}(Lt,t)) + \int_0^L W2(\underline{x}(z,t)) dz \quad (B2)$$

Achterevoegsel t geeft wederom aan dat het de TLE betreft. De eerste term van de momentane winst bevat de opbrengsten van de producten en de kosten van ethaan, scheiding en verlies van voelbare warmte. De tweede term betreft de kosten van de reactiewarmte :

$$W1(\underline{x}(0,t), \underline{x}(Lt,t)) = WP(t) - ke(t) - ksch(t) - kqv(t) \quad (B3)$$

$$\int_0^L W2(\underline{x}(z,t)) dz = -kqr(t) \quad (B4)$$

De winst wordt uitgebreid tot functionaal J door d.m.v. de ge-adjungeerde grootheden $\underline{\lambda}$, μ en ν de systeemvergelijkingen toe te voegen:

$$J = W_{gem}(tb) + \int_0^{tb} \left\{ \int_0^L \underline{\lambda}^T(z,t) \left[\frac{\partial \underline{x}}{\partial z} - \underline{f} \right] dz + \int_L^{Lt} \underline{\lambda}_t^T(z,t) \left[\frac{\partial \underline{x}_t}{\partial z} - \underline{f}_t \right] dz \right\} dt$$

$$+ \int_0^{tb} \left\{ \int_0^L \mu(z,t) \left[\frac{\partial D}{\partial t} - h(\underline{x}) \right] dz + \int_L^{Lt} \mu_t(z,t) \left[\frac{\partial D_t}{\partial t} - h_t(\underline{x}) \right] dz \right\} dt$$

$$+ \int_0^{tb} \int_0^L \nu(z,t) g dt dz \quad (B5)$$

De systeemvergelijkingen van de kraakoven hebben de volgende vorm :

$$\frac{\partial \underline{x}}{\partial t} = \underline{f}(\underline{x}, D, qf) \quad (B6)$$

$$x_i(0, t) = x_{i,0}(t) \quad \text{voor } i \neq 10$$

$$x_{10}(L, t) = x_{10,L}(t)$$

opkoolvergelijking:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = h(\underline{x}) \quad (= \text{alfa} * \text{houd}(\underline{x})) \quad (B7)$$

$$D(z, 0) = D_0$$

fireboxvergelijking :

$$g(\underline{x}, D, qf, T, TS, TW) = 0 \quad (B8)$$

De systeemvergelijkingen van de TLE zijn :

$$\frac{\partial x_{ti}}{\partial z} = f_{ti}(\underline{x}_t, Dt) = 0 \quad i=1, \dots, 9 \quad (B9)$$

$$\frac{\partial x_{t10}}{\partial z} = f_{t10} = \frac{\partial P_t}{\partial z} \quad (B10)$$

$$\frac{\partial x_{t11}}{\partial z} = f_{t11} = \frac{\partial T_t}{\partial z} \quad (B11)$$

opkoolvergelijking :

$$\frac{\partial Dt}{\partial z} = h_t(\underline{x}) = \frac{1-\text{alfa}}{L_t * Dt * n} \int_0^L h(\underline{x}) D(z) dz \quad (B12)$$

Om de winstgradiënt te berekenen wordt na partiële integratie van de objectfunctionaal (B5) toegepast te hebben, variatierekening toegepast om de invloed van variaties in $\underline{x}(0)$, $\underline{x}(z)$, $\underline{x}(L_t)$, D , Dt , $Dt(\circ)$, $D(0)$, $D(t_b)$, $Dt(t_b)$, qf en TW op de functionaal te berekenen. Dit resulteert in :

variatiës naar $\underline{x}(0)$ en $\underline{x}(Lt)$:

$$\delta J = \int_0^{tb} \left\{ \frac{\partial W_1}{\partial \underline{x}(0)} \delta \underline{x}(0) + \frac{\partial W_1}{\partial \underline{x}(Lt)} \delta \underline{x}(Lt) + \cancel{\lambda^T(L,t) \delta \underline{x}(L)} - \cancel{\lambda^T} \delta \underline{x}(0) + \cancel{\lambda^T} \delta \underline{x}(Lt) - \cancel{\lambda^T(L,t) \delta \underline{x}(Lt)} \right\} dt \quad (B13)$$

variatiës naar $\underline{x}(z)$:

$$\delta J = \int_0^{tb} \left\{ \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial \underline{x}} - \frac{\partial \lambda^T}{\partial z} - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \underline{x}} - \mu \frac{\partial h}{\partial \underline{x}} + \nu \frac{\partial g}{\partial \underline{x}} \right) \delta \underline{x} dz + \int_L^{Lt} \left(-\frac{\partial \lambda^T}{\partial z} - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \underline{x}} - \mu \frac{\partial h}{\partial \underline{x}} \right) \delta \underline{x} dz \right\} dt \quad (B14)$$

variatiës naar $D(0), Dt(0), D(tb)$ en $Dt(tb)$:

$$\delta J = \int_0^{tb} \left[\mu(tb) \delta D(tb) - \mu(0) \delta D(0) \right] dz + \int_L^{Lt} \left[\mu t(tb) \delta Dt(tb) - \mu t(0) \delta Dt(0) \right] dz \quad (B15)$$

variatiës naar D en Dt :

$$\delta J = \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial D} - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial D} - \frac{\partial \mu}{\partial t} + \nu \frac{\partial g}{\partial D} \right) \delta D dz + \int_L^{Lt} \left(-\lambda^T \frac{\partial f}{\partial D} - \frac{\partial \mu t}{\partial t} \right) \delta Dt dz \quad (B16)$$

variatiës naar qf :

$$\delta J = \int_0^{tb} \int_0^L \left(-\lambda^T \frac{\partial f}{\partial qf} + \nu \frac{\partial g}{\partial qf} \right) \delta qf dz dt \quad (B17)$$

variatiës naar TW :

$$\delta J = \int_0^{tb} \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial TW} + \nu \frac{\partial g}{\partial TW} \right) \delta TW dz dt \quad (B18)$$

Als λ, μ en ν geschikt gekozen worden, kunnen de variatiës in J berekend worden m.b.v. de eenvoudige vergelijking :

$$\delta J = \int_0^{tb} \left\{ \frac{\partial W_1}{\partial \underline{x}_i(0,t)} - \lambda_i(0,t) \right\} \delta \underline{x}_i(0,t) dt + \int_0^{tb} \left\{ \frac{\partial W_1}{\partial \underline{x}_g(0,t)} - \lambda_g(0,t) \right\} \delta \underline{x}_g(0,t) dt + \int_0^{tb} \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial TW} + \nu \frac{\partial g}{\partial TW} \right) \delta TW dz dt \quad (B19)$$

Omdat ten alle tijde aan de systeemvergelijkingen is voldaan, is de gradiënt van de winst altijd gelijk aan die van de objectfunctionaal ((B5) en (B19)) op voorwaarde dat de toegevoegde grootheden aan bepaalde vergelijkingen voldoen. Formule (B19) volgt rechtstreeks uit de som van de vergelijkingen (B13) t/m (B18), als aangenomen wordt dat de ge-adjungeerde variabelen aan de volgende vergelijkingen voldoen (zgn. toegevoegd systeem) :

kraker :

$$(B14) \rightarrow \frac{\partial \lambda}{\partial z} = -\lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} - \mu \frac{\partial h}{\partial x} + \nu \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial W_2}{\partial x} \quad (B20)$$

$$(B13) \rightarrow \lambda_{10}(0,t) = \frac{\partial W_1}{\partial x_{10}(0,t)} \quad (B21)$$

$$(B13) \rightarrow \lambda(L,t) = \lambda t(L,t) \quad (B22)$$

TLE :

$$(B14) \rightarrow \frac{\partial \lambda t^T}{\partial z} = -\lambda t^T \frac{\partial f t}{\partial x} - \mu \frac{\partial h t}{\partial x} \quad (B23)$$

$$(B13) \rightarrow \lambda t_i(L,t) = \frac{\partial W_1}{\partial x t_i(L,t)} \quad \text{voor } i=1, \dots, 9, 11 \quad (B24)$$

en:

$$(B16) \rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial t} = -\lambda^T \frac{\partial f}{\partial D} + \nu \frac{\partial g}{\partial D} + \frac{\partial W_2}{\partial D} \quad (B25)$$

$$(B15) \rightarrow \mu(z, t_b) = \mu t(z, t_b) = 0 \quad (B26)$$

$$(B16) \rightarrow \frac{\partial \mu t}{\partial t} = -\lambda t^T \frac{\partial f t}{\partial D} \quad (B27)$$

$$\text{en} : \quad (B17) \rightarrow \nu \frac{\partial g}{\partial q f} = \lambda^T \frac{\partial f}{\partial q f} \quad (B28)$$

Verloop dynamisch optimaliseren

Uitgaande van een bepaalde sturing worden de systeemvergelijkingen enige malen doorgerekend zodat de juiste gewenste uitgangsdruk bereikt wordt (twee punts RVW probleem). Vervolgens wordt het toegevoegd systeem van de uitgang van de TLE naar de ingang van de kraakbuis doorgerekend, uitgaande van de zojuist berekende toestand. Dit wordt ook enige malen herhaald (eveneens tweepunts RVW probleem). Als aan de RVW voldaan is, kan de winstgradiënt berekend worden.

Appendix C Constanten en enkele formules

$D_0 = .1080 \text{ m}$
 $D_{t0} = .035 \text{ m}$
 $K = 2.3305 * 10^5$
 $L = 88.252 \text{ m}$
 $L_t = 6 \text{ m}$
 π (eenheid $\text{SK}/10^6 \text{ mol}$) :

$p_1 = 7$
 $p_2 = 14.5$
 $p_3 = 2$
 $p_4 = 4$
 $p_5 = 10.1$
 $p_6 = 16$
 $p_7 = 5.7$
 $p_8 = 25$

$p_s = 5 \text{ SK}/10^{12} \text{ mol}$
 $p_{sch} = .42 \text{ SK}/10^6 \text{ mol}$

$P_u = 1.47 \text{ bar}$

$Q_{Ve} = 55325 \text{ J/mol}$

$Q_{Vs} = 63459 \text{ J/mol}$

$\rho_{kool} = 1600 \text{ kg/m}^3$

$t_s = 1.5 \text{ dag}$

$T_I = 925 \text{ K}$

$$dp/dz = - DPF * \rho * v^2 * \left(\frac{2f}{D} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} + \frac{1}{FT} \frac{dFT}{dz} \right)$$

met

DPF : correctiefactor voor bochten (1.3685)

$f = 0.046 \text{ RE}^{-0.2}$ = frictiefactor

ρ = dichtheid

$RE = \rho * v * D / \mu$

μ = viscositeit

$v = RT * FT / (p * \text{oppervlak})$

voor uitleg symbolen : zie (Grefte 1984)