

MASTER

Dynamisch optimaliseren van een ethaankraker

de Grefte, H.

Award date:
1984

[Link to publication](#)

Disclaimer

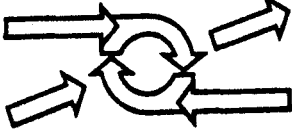
This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository.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

VAKGROEP SYSTEEM-



EN REGELECHNIEK

8481969

DYNAMISCH OPTIMALISEREN

VAN EEN

ETHAANKRAKER

H. de Grefte

NR-1153 (1984-08)

Afstudeerdocent: Prof.dr.ir. P.M.E.M. v.d. Grinten
Begeleider: Ir. J.W.J.M. v.d. Heijden

Met hartelijke dank aan iedereen die een handje heeft geholpen bij het maken van dit verslag, inclusief de uitvinder van het Tipp-Ex.

SAMENVATTING

Het thermisch kraken van ethaan tot etheen vindt plaats in buis-reaktoren. Hierbij wordt een continue stroom ethaan door een buis geleid die aan de buitenkant wordt verwarmd door een aantal branders. Behalve etheen ontstaan bij het kraakproces ook enkele nevenprodukten, voornamelijk koolwaterstoffen.

In de loop van de tijd groeit op de binnenwand van de buis een koollaag. Als gevolg van deze opkoling vindt een verschuiving plaats van de produktie van etheen naar de vorming van nevenprodukten. Hierdoor wordt met de kraakinstallatie minder winst gemaakt.

Na enige tijd is de winst zo ver gedaald dat het zinvol wordt het proces te onderbreken om de kool te verwijderen. Een dergelijke onderbreking kan zelfs noodzakelijk zijn, namelijk wanneer de ingangsdruk van de kraakoven te groot wordt of de temperatuur op de buitenwand van de buis te hoog oploopt.

Omdat een onderbreking van het proces economisch ongunstig is, probeert men dit uit te stellen door de opkoling te vertragen (langere bedrijfstijd). Een vermindering van de opkoolsnelheid kan onder andere worden bereikt door het toegevoerde ethaan te vermengen met stoom. Vertraging van de opkoling gaat echter samen met een vermindering van de ethaanomzet, waardoor de winst per tijdeenheid daalt. Het is niet altijd zeker dat de langere bedrijfstijd hier tegen opweegt.

Met behulp van dynamisch optimaliseren kan een tijd-afhankelijke sturing worden gevonden waarmee een kompromis wordt bereikt tussen een te lage winst per tijdeenheid en een te korte bedrijfstijd. Bij de optimalisering moet rekening worden gehouden met de beperkingen op de druk en op de temperatuur van de buiswand.

Het blijkt dat bij een optimale bedrijfstijd van 21 dagen een winst kan worden behaald die 1.2% hoger ligt dan bij de beste tijd-onafhankelijke sturing.

INHOUDSOPGAVE

blz.

SAMENVATTING

INHOUDSOPGAVE

1	<u>INLEIDING</u>	1
2	<u>KRAAKPROCES EN INSTALLATIE</u>	3
	2.1 Het kraakproces	3
	2.2 De kraakinstallatie	6
3	<u>MODELFORMING</u>	9
	3.1 Inleiding	9
	3.2 Het model van de reaktorbus	11
	3.3 Het model van de firebox	16
	3.4 Het model van de opkoling	19
	3.5 De winstfunctie	20
4	<u>SIMULATIERESULTATEN</u>	26
	4.1 Simulatie bij konstante sturing	26
	4.2 Invloed van voeding en stoomflow bij schone bus	41
	4.3 Invloed van voeding en stoomflow bij opgekoolde bus	49
	4.4 Invloed van de ovenwandtemperatuur bij schone en opgekoolde bus	54
	4.5 Konklusies	61
5	<u>STATISCH EN MOMENTAAN OPTIMALISEREN</u>	63
	5.1 Statisch optimaliseren: probleemstelling	64
	5.2 Statisch optimaliseren: resultaten	64
	5.3 Momentaan optimaliseren: probleemstelling	72
	5.4 Momentaan optimaliseren: resultaten	72

<u>6 DYNAMISCH OPTIMALISEREN</u>	80
6.1 Theorie	80
6.2 Resultaten bij verschillende bedrijfstijden	84
6.3 Vergelijking van statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren	92
 <u>7 KONKLUSIES EN OPMERKINGEN</u>	 100
7.1 Konklusies	100
7.2 Opmerkingen	103
 <u>SYMBOLENLIJST</u>	
 <u>LITERATUURLIJST</u>	
 <u>BIJLAGE A: HET REAKTORBUISMODEL</u>	 A1
A.1 De reaktiecomponenten en stoom	A1
A.2 De druk	A4
A.3 De temperatuur	A7
 <u>BIJLAGE B: HET OPKOOLMODEL</u>	 B1
 <u>BIJLAGE C: GRADIENBEREKENING</u>	 C1
 <u>BIJLAGE.D: ENKELE KONSTANTEN</u>	 D1

Hfdst. 1. Inleiding

In de vakgroep Systeem-en Regeltechniek wordt al geruime tijd onderzoek gedaan op het gebied van dynamisch optimaliseren van langzaam verouderende processen.

Hieronder worden processen verstaan waarvan de parameters veranderen op een tijdschaal die wezenlijk langzamer is dan die van het proces zelf. Voorbeelden van dergelijke veroudering zijn koolvorming en vermindering van katalysatoractiviteit.

Als gevolg van de veroudering kan steeds minder winst worden gemaakt. Uiteindelijk wordt het zinvol het proces voor zekere tijd te onderbreken, bijvoorbeeld om een reaktor te ontkolen of een katalysator te vervangen. Onderbreking kan ook nodig zijn om te voorkomen dat technische beperkingen worden overschreden (bijv. druk-of temperatuurgrenzen).

Uiteraard is een dergelijke onderbreking economisch niet aantrekkelijk. Men streeft er dan ook naar dit zo lang mogelijk uit te stellen door een geschikte sturing te kiezen. In het algemeen betekent dit echter dat de winst per tijdeenheid laag zal zijn. Dit moet worden afgewogen tegen een langere tijdsduur voordat de volgende onderbreking noodzakelijk wordt. (langere bedrijfstijd)

Met dynamisch optimaliseren kan een sturing worden uitgewerkt waarbij een kompromis wordt bereikt tussen enerzijds een te snelle veroudering en anderzijds een te lage winst per tijdeenheid. Bovendien kan de optimale waarde worden berekend voor de bedrijfstijd.

Een dergelijke studie wordt in de vakgroep uitgevoerd voor processen waarbij koolwaterstoffen thermisch worden gekraakt. Hier treedt veroudering op door koolvorming in de reaktor.

Het is de bedoeling uiteindelijk een dynamische optimalisering uit te voeren voor het kraken van nafta en gasolie. Door de grote spreiding in samenstelling van deze mengsels is de modelvorming echter zeer lastig. Het onderzoek beperkt zich daarom

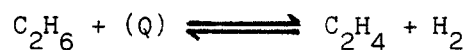
tot optimalisering van het kraakproces van ethaan. Door de eenduidige samenstelling van de voeding is dit proces redelijk goed te beschrijven.

In dit verslag worden de resultaten van de dynamische optimalisering beschreven. De zwaartepunten liggen op de hoofdstukken 4 en 6, waarin de inzichten in het proces resp. de dynamische optimalisering zelf aan de orde komen.

Hfdst. 2. KRAAKPROCES EN INSTALLATIE

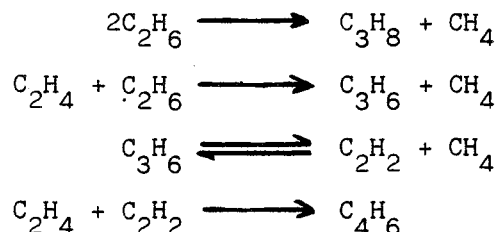
2.1 Het kraakproces

Het kraken van ethaan tot etheen verloopt via de volgende reactie:



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

Naast deze hoofdreactie onderscheiden we de volgende andere reacties (zie lit/2,5/):



Het geheel van deze andere reacties 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.

Behalve bovenstaande reacties treedt nog een extra reactie op, namelijk de vorming van kool uit de aanwezige koolwaterstoffen. Deze kool zet zich af op de binnenwand van de reaktorbuus. Als gevolg hiervan verandert het gedrag van de kraakoven in de loop van de tijd. Ten eerste stijgt bij gelijkblijvende doorzet de drukval over de buis, doordat de binnendiameter kleiner wordt. Verderop zullen we zien dat de uitgangsdruk een voorgeschreven waarde moet hebben. Stijging van de drukval betekent daarom dat we een steeds grotere ingangsdruk moeten aanleggen. Op den duur is verdere toename van deze druk niet meer toelaatbaar. De oven moet dan worden ontkoold.

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 tijd die verloopt tussen starten en stoppen van de oven, wordt de bedrijfstijd genoemd. Onder de cyclustijd wordt de som van bedrijfstijd en schoonmaaktijd verstaan.

Het opkoolproces kan worden vertraagd door het toegevoerde ethaan te vermengen met stoom. De concentraties van de koolwaterstoffen worden door deze verdunning verlaagd. De opkoolreactie en de kraakreacties zullen hierdoor langzamer verlopen.

Deze vertraging kan niet worden opgevat als een verandering van tijdschaal. De kinetiek van het kraakproces is hiervoor te ingewikkeld.

Door de kleinere reactiesnelheden daalt het ethaanverbruik. Dit nadelige effect wordt voor een deel gekompenseerd door het feit dat eenmaal gevormd etheen minder snel wordt omgezet in nevenprodukten. Toevoegen van stoom betekent echter toch een daling van de gemaakte winst.

We zien hier het optimaliseringsprobleem in een notedop. Wanneer we een hoge winst per tijdeenheid willen halen moeten we de reacties zoveel mogelijk versnellen. Dit heeft echter een snelle opkoling tot gevolg. Na korte tijd moet de oven dan worden stilgelegd voor een schoonmaakbeurt. De kosten en de tijd die hiermee gemoeid zijn hebben een nadelige invloed op de gemiddelde winst over de cyclus (bedrijfstijd plus schoonmaaktijd).

Wanneer we echter mikken op een lange bedrijfstijd dan zullen we de reacties langzaam moeten laten verlopen. De winst per dag zal laag zijn, maar de oven gaat wel een flink aantal dagen mee.

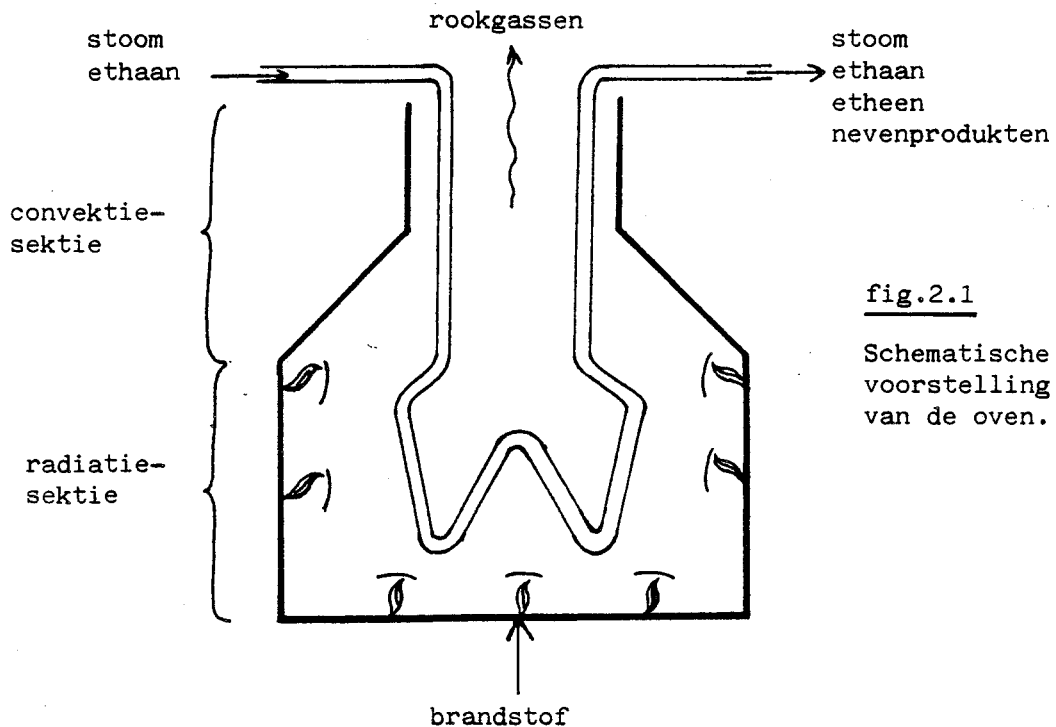
Tussen deze twee extremen:

- hoge winst per dag, klein aantal dagen
- lage winst per dag, groot aantal dagen

zal een optimum liggen. Bij de optimale bedrijfstijd is de gemiddelde winst, over de hele cyclus, maximaal.

2.2 De kraakinstallatie

Het kraakproces vindt plaats in een buisreaktor (zie fig. 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 reaktorbuis (temperatuur ≤ 1300 K).



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

In de radiatie-sectie wordt de buis aangestraald door de ovenwand. Hier zullen de reacties merkbaar op gang komen. In eerste instantie zijn dit alleen de hoofdreactie en de reactie waarbij propaan (C_3H_8) wordt gevormd. De laatste is van ondergeschikt belang. Pas wanneer onder andere de etheenconcentratie groot genoeg is geworden gaan ook

de andere reacties een rol van betekenis spelen.

Het gasmengsel dat de buis verlaat bestaat uit niet omgezet ethaan, etheen, nevenprodukten en stoom. De stoom heeft niet aan de reacties deelgenomen.

De kraakinstallatie bestaat behalve uit een oven, nog uit een koelsektie, een kompressor, een mengpunt en een destillatiesektie. Ethaan dat niet is omgezet wordt opnieuw aan de oven toegevoerd. In fig.2 is een overzicht van het geheel gegeven.

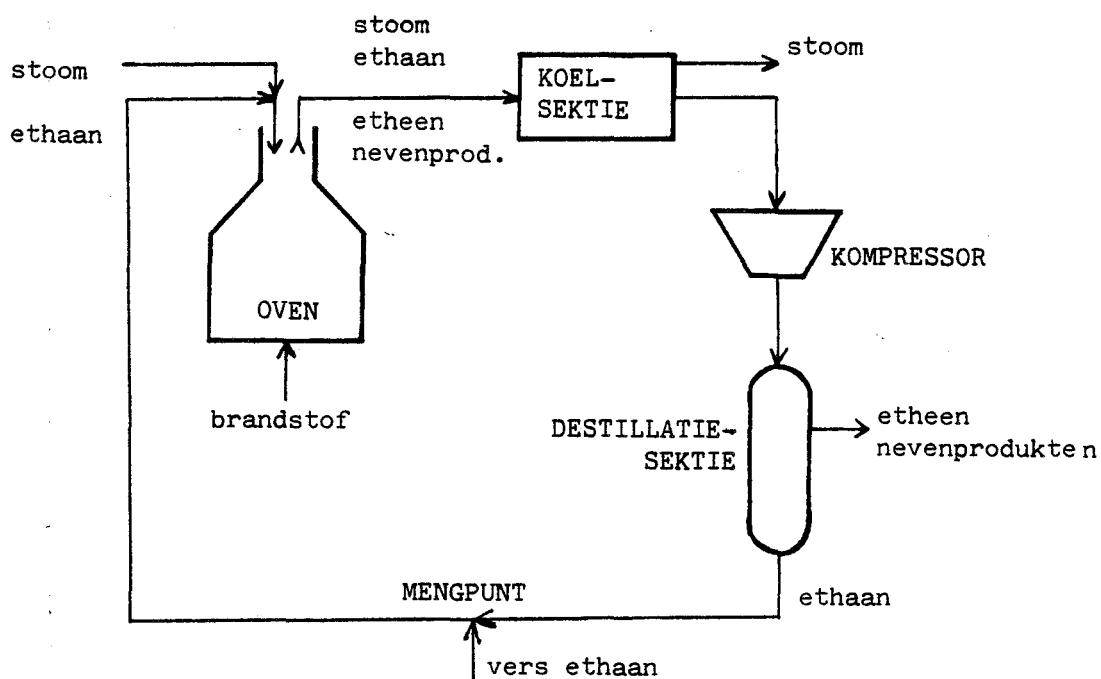


fig.2.2 Overzicht van de kraakinstallatie

Het gasmengsel dat de oven verlaat heeft een temperatuur van circa 1100 K. In de koelers wordt warmte aan dit gas onttrokken. Na de koelsektie bevat de gasstroom geen stoom meer. Deze stoom is dan inmiddels gekondenseerd.

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

In de destillatiesektie worden ethaan, etheen en nevenprodukten gescheiden. Het afgescheiden ethaan wordt samen met vers ethaan en stoom aan de oven toegevoerd.

In fig.2 is het mengpunt van niet omgezet ethaan en vers ethaan na de destillatiesektie geplaatst. Dit wordt gedaan wanneer een onbeperkte hoeveelheid zuiver ethaan beschikbaar is.

Het verse ethaan behoeft niet gedestilleerd te worden. De ethaantoevoer kan vrij worden gekozen. Deze situatie is bij de optimaliseringen bestudeerd.

In Europa komt ethaan meestal ter beschikking als nevenprodukt bij het kraken van nafta. In dit geval fungeert de destillatiesektie ook als deel van de naftakraker. Het verse ethaan wordt dan direkt na de koelers toegevoerd. De ethaantoevoer is nu een vast gegeven. Deze situatie is niet bestudeerd.

Hfdst. 3. MODELVORMING

3.1 Inleiding

In dit hoofdstuk wordt het model van de kraaker beschreven. Dit model was aan het begin van de afstudeerperiode al beschikbaar. (lit/2/)

Het model beschrijft het gedrag van de oven en de drukregeling. De koelsectie, de kompressor en de destillatiesectie blijven buiten beschouwing. Bij de optimalisering worden eenvoudige kostenfuncties gebruikt om het gedrag van deze delen van de installatie te verrekenen.

Het model bevat geen ethaanbalans voor de recycle-lus. Een dergelijke balans is alleen zinvol wanneer een voorgeschreven hoeveelheid ethaan moet worden omgezet. Alle optimalisering die in dit verslag worden besproken zijn echter uitgevoerd met een vrijgelaten ethaanverbruik.

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. Deze tijdsduur wordt bepaald door de snelheid waarmee de temperatuur op de wand van de reaktorbus reageert op bijvoorbeeld een grotere voeding.

Tegenover de snelle dynamica van het kraakproces staat de langzame dynamica van de opkoling. Het aangroeien van de koollaag op de reaktorwand 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 gewone differentiaalvergelijkingen in de plaats voor het kraakproces en een gewone differentiaalvergelijking in de tijd voor de opkoling.

In het model zijn drie stuurgrootheden beschikbaar:

- de ovenwandtemperatuur $TW(t)$
- de voeding $FI(t)$
- de stroomflow $FS(t)$

De ovenwandtemperatuur wordt niet plaatsafhankelijk gekozen. Dit zal worden besproken in paragraaf 3.

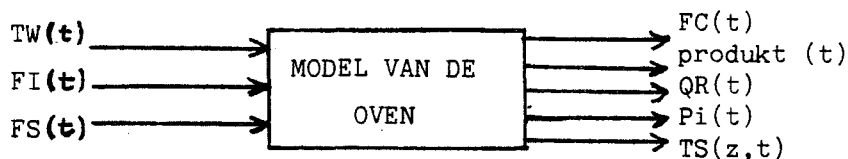


fig.3.1 Het model van de oven als black box.

De grootheden die door het model worden berekend zijn in twee groepen te verdelen. De eerste groep bevat grootheden die van belang zijn voor de berekening van de winst. Hieronder vallen:

- het ethaanverbruik $FC(t)$
- de produktstromen (t)
- de reaktiewarmte $QR(t)$

De tweede groep bevat grootheden die van belang zijn voor de beoordeling van de toelaatbaarheid van een sturing. Hieronder vallen:

- de ingangsdruk $Pi(t)$
- de buiswandtemperatuur $TS(z,t)$

Deze grootheden zijn aan een maximum gebonden. Voor de ingangsdruk is de limiet 6 atm., voor de buiswandtemperatuur 1300 K.

Het model kan worden gesplitst in drie delen, namelijk:

- het reaktorbuismodel
- het fireboxmodel
- het opkoolmodel

In paragraaf 2 zal het buismodel worden besproken. Het fireboxmodel en het opkoolmodel komen aan de orde in paragraaf 3 en 4.

3.2 Het model van de reaktorbuisk

Het reaktorbuismodel beschrijft het kraakproces dat zich in de buis afspeelt. In deze paragraaf zal het model globaal worden toegelicht. Een meer gedetailleerde beschrijving is te vinden in bijlage A en lit/2,5/.

Het model heeft als exogene grootheden:

- de voeding $FI(t)$
- de stroomflow $FS(t)$
- de warmteflux $qf(z,t)$
- het diameterprofiel $D(z,t)$

De grootheden $FI(t)$ en $FS(t)$ zijn in paragraaf 1 al genoemd als stuurgrootheden. De flux wordt berekend in het fireboxmodel. Het diameterprofiel volgt uit het opkoolmodel.

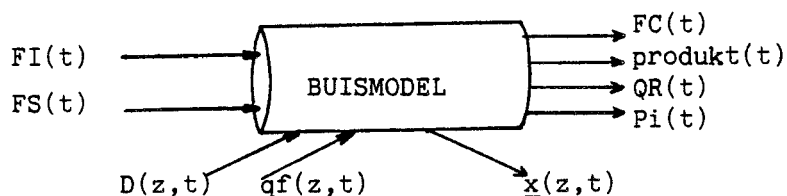


fig.3.2 Het buismodel als black box.

Het reaktorbuismodel levert de volgende endogene grootheden:

- het ethaanverbruik $FC(t)$
- de produktstromen (t)
- de reaktiewarmte $QR(t)$
- de ingangsdruk $Pi(t)$
- de toestandsvektor $\underline{x}(z,t)$

De vektor $\underline{x}(z,t)$ bevat de molstromen van ethaan, etheen, neven-

produkten, stoom en de druk en temperatuur. Deze grootheden worden gebruikt in het fireboxmodel en het opkoolmodel.

De stuurgrootheden $FI(t)$ en $FS(t)$, de produktflows en de ingangsdruk $P_i(t)$ zijn herbenoemingen van componenten van $\underline{x}(0,t)$ en $\underline{x}(L,t)$. Het ethaanverbruik $FC(t)$ is gelijk aan:

$$FC(t) = x_1(0,t) - x_1(L,t)$$

In het buismodel worden o.a. de volgende aannamen gemaakt:

- Er worden geen C_5 of hogere frakties gevormd. Deze aanname is van belang gezien de speciale rol die C_4 en hogere frakties spelen bij de opkoling. (zie paragraaf 4)
- In de buis doen zich geen radiale of tangentiële effecten voor. De stroming in de buis is zeer turbulent ($Re \approx 10^5$). Hierdoor zullen de concentraties van de reaktiecomponenten, de druk en de temperatuur vrijwel uniform zijn over de gehele doorsnede van de buis. In het buismodel wordt geen grenslaag in rekening gebracht.
- Axiale diffusie en geleiding zijn waarloosbaar. Door de hoge gassnelheden zal het konvektief transport van materie en energie veel groter zijn dan diffusie of geleiding.

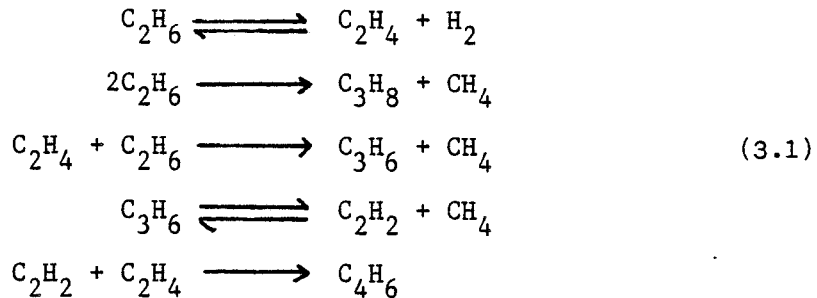
Het buismodel gaat uit van de fysische behoudswetten en de chemische kinetiek van het kraakproces.

Het model bestaat uit een stelsel gekoppelde niet-lineaire gewone differentiaalvergelijkingen in de plaats. Voor elke component van de toestandsvektor $\underline{x}(z,t)$ kan een differentiaalvergelijking en een randvoorwaarde worden geformuleerd.

In het navolgende zullen deze vergelijkingen en randvoorwaarden globaal worden behandeld.

Reaktiecomponenten en stoom

In de gebruikte kinetiek worden vijf reacties onderscheiden, waarvan twee evenwichtreacties. Deze reacties zijn:



De hoofdreactie is endotherm, het geheel van andere reacties is exotherm.

De snelheden $\underline{r}(z,t)$ waarmee de reacties verlopen kunnen worden berekend uit de concentraties van de verschillende componenten. De reactiesnelheidskonstanten zijn temperatuurafhankelijk volgens het Arrheniusverband.

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

$$\frac{\partial x_i(z,t)}{\partial z} = A(z,t) \cdot \underline{C}_i^T(z,t) \underline{r}(z,t) \quad (1 \leq i \leq 8) \tag{3.2}$$

De vektor \underline{C}_i bevat de stochiometrische coëfficiënten van de reacties waarbij component i betrokken is. De grootheid $A(z,t)$ is de inwendige doorsnede van de buis.

De differentiaalvergelijking voor de molstroom is triviaal:

$$\frac{\partial x_g(z,t)}{\partial z} = 0 \tag{3.3}$$

Stoom is een inert gas.

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

$$\begin{aligned}
 x_1(0,t) &= FI(t) \\
 x_i(0,t) &= 0 \quad (2 \leq i \leq 8) \\
 x_9(0,t) &= FS(t)
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

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. Deze laatste bijdrage wordt verrekend met behulp van een korrektiefactor.

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

$$\frac{\partial}{\partial z} (pA) = - m \frac{\partial v}{\partial z} - \pi D \sigma \quad (3.5)$$

Hierin is p de druk, A de doorsnede, m de massastroom, v de gas-snelheid, D de binnendiameter van de buis en σ de schuifspanning langs de wand.

Het linkerlid stelt het impulstransport ten gevolge van normaalspanning (=druk) voor. In het rechterlid staan termen die betrekking hebben op konvektief transport en schuifspanning (=wrijving) langs de wand.

Door de werking van de drukregelaar is de uitgangsdruk een vast getal. Dit is vereist voor een goede werking van de compressor. De randvoorwaarde voor de druk wordt hierdoor:

$$x_{10}(L,t) = P_u \quad (3.6)$$

In tegenstelling tot de andere randvoorwaarden geldt deze voorwaarde niet aan het begin van de buis, maar aan het einde ($z = L$). Het buismodel is daarom een tweepunts randwaardeprobleem.

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, reaktiewarmte en warmtetoever (flux).

De warmtebalans is:

$$CP \frac{\partial T}{\partial z} = \pi D_0 \cdot q_f + \frac{1}{4} \pi D^2 \cdot q_r \quad (3.7)$$

Hierin is CP de warmtecapaciteit van het gasmengsel, T de temperatuur, D_0 de binnendiameter van de schone buis, qf de flux en qr de reaktiewarmte. Uitgezonderd D_0 zijn deze grootheden functies van plaats en tijd.

De intreepijtemperatuur van het gas ligt vast:

$$x_{11}(0,t) = TI \quad (3.8)$$

Bovenstaande vergelijkingen en randvoorwaarden vormen het model van de reaktorbuis. Het model heeft de volgende vorm:

$$\frac{\partial \underline{x}(z,t)}{\partial z} = \underline{f}(\underline{x}, D, qf) \quad (3.2, 3.3, 3.5, 3.7)$$

$$\begin{aligned} x_1(0,t) &= FI(t) \\ x_i(0,t) &= 0 \quad (2 \leq i \leq 8) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} x_9(0,t) &= FS(t) \\ x_{10}(L,t) &= Pu \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$x_{11}(0,t) = TI \quad (3.8)$$

Hierin zijn Pu en TI konstanten, $FI(t)$ en $FS(t)$ zijn instelbaar.

Het stelsel vergelijkingen kan numeriek worden opgelost als de flux $qf(z,t)$ en de diameter $D(z,t)$ bekend zijn. De berekening van deze grootheden zal in de volgende paragrafen worden toegelicht.

3.3 Het model van de firebox

Het model van de firebox beschrijft de warmteoverdracht van de ovenwand naar het gasmengsel in de buis. Deze overdracht 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.

Het model kent de volgende exogene grootheden:

- de ovenwandtemperatuur $T_W(t)$
- de gastemperatuur $T(z,t)$
- de binnendiameter van de buis $D(z,t)$

De ovenwandtemperatuur is een stuurgrootheid, de andere zijn afkomstig van het buismodel resp. het opkoolmodel.

Een keuze van de brandstoftoevoer als stuurgrootheid in plaats van de ovenwandtemperatuur zou uit praktische overwegingen de voorkeur verdienen. Deze grootheid is direkt instelbaar, de ovenwandtemperatuur niet.

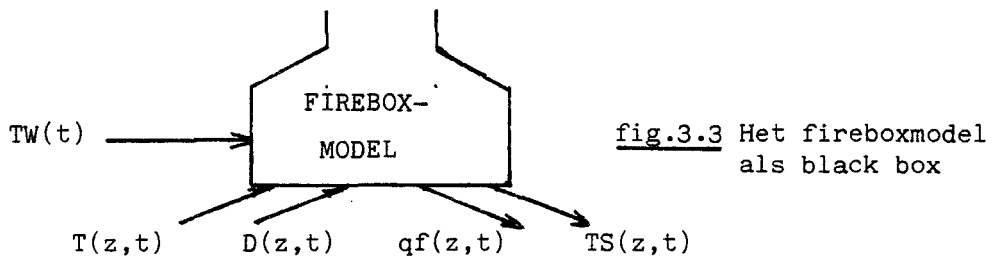
Om de flux als functie van de plaats te berekenen zou het dan echter nodig zijn de geometrie van de firebox en de verdeling van brandstof over de branders in de modelvergelijkingen op te nemen. Dergelijke berekeningen zijn voor ons doel, (het dynamisch optimaliseren), te omslachtig. Vandaar dat we liever de ovenwandtemperatuur gebruiken.

Deze temperatuur wordt uniform genomen. Dit wordt gerechtvaardigd door de ingewikkelde geometrie van de firebox. Ieder deel van de reaktorbuis ontvangt straling van elk punt van de

ovenwand. Dit maakt het mogelijk te rekenen met een uniforme ovenwandtemperatuur. Deze temperatuur moet gezien worden als een soort gemiddelde temperatuur van de wand.

Het fireboxmodel levert de volgende grootheden:

- de warmteflux $q_f(z,t)$
- de buiswandtemperatuur $TS(z,t)$



Bij de afleiding van de modelvergelijkingen worden de volgende aannamen gemaakt:

- warmteoverdracht door konvektie en geleiding in de firebox zijn verwaarloosbaar ten opzichte van stralingswarmte.
- de warmteoverdracht door straling is goed te beschrijven met een uniforme ovenwandtemperatuur.

De eerste aanname spreekt voor zich, de laatste is al aan de orde gekomen.

Het fireboxmodel bestaat uit algebraïsche vergelijkingen. De warmteoverdracht door straling wordt beschreven met behulp van:

$$q_f(z,t) = K(TW(t)^4 - TS(z,t)^4) \quad (3.9)$$

De evenredigheidsconstante K bevat onder andere de eigenschappen van de geometrie. Deze konstante is bepaald uit literatuurgegevens.

De flux q_f is het saldo van twee warmtestromen, één van de ovenwand naar de buiswand en één vice versa. De eerste is evenredig met TW^4 , de andere met TS^4 (stralingswet van Wien).

Wanneer de flux bekend is, kan uit de flux en de ovenwandtemperatuur de brandstofbehoefte worden berekend:

$$\text{fuel}(t) = \eta_{fb}(TW) \cdot \int_0^L qf(z,t) dz \cdot \pi D_0$$

Hierin is η_{fb} een rendement dat alleen afhangt van TW.

De warmteoverdracht door geleiding van buiswand naar gasmengsel wordt berekend met behulp van:

$$qf(z,t) = U(z,t) (TS(z,t) - T(z,t)) \quad (3.10)$$

De koëfficiënt $U(z,t)$ is de warmteoverdrachtskoëfficiënt van de combinatie van buiswand, koollaag en grenslaag. Door opkoling is deze koëfficiënt een functie van plaats en tijd. De modelvorming rond de opkoling zal worden besproken in de volgende paragraaf.

W. Heynen geeft een meer gedetailleerde beschrijving van het fireboxmodel (lit/3/).

3.4 Het model van de opkoling

Met behulp van het opkoolmodel is het mogelijk de binnendiameter van de buis te berekenen als functie van de tijd.

Het model kent de volgende exogene variabelen:

- de flows van ethaan, etheen nevenprodukten en stoom en de druk en temperatuur : $\underline{x}(z,t)$

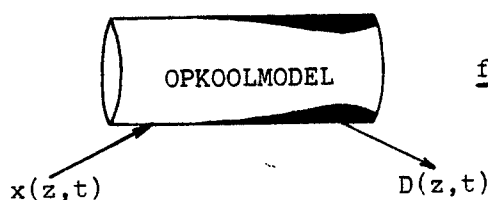


fig.3.4 Het opkoolmodel als black box

De endogene variabele is:

- de diameter $D(z,t)$

Het opkoolmodel is gebaseerd op een reactie van butadieen tot kool.

Froment gaat in zijn artikel (lit/6/) uit van kooovorming op basis van C_4 -frakties of hogere koolwaterstoffen. In de kinetiek die Froment gebruikt is de enige C_4 -komponent butadieen. Hogere koolwaterstoffen komen niet voor. Dezelfde kinetiek wordt gebruikt in het model van de reaktorbus (paragraaf 2).

Het gebrek aan informatie over reacties waarbij hogere koolwaterstoffen worden gevormd leidt tot onnauwkeurigheden bij de beschrijving van de opkoling. Zonder verder onderzoek op dit gebied zijn deze onnauwkeurigheden niet te verhelpen.

Alternatieve opkoolmodellen, zoals opkoling op basis van ethaan of etheen, zijn buiten beschouwing gebleven.

Uit het artikel van Froment volgt een differentiaalvergelijking in de tijd voor de binnendiameter van de buis:

$$\frac{\partial D(z,t)}{\partial t} = -\gamma(T) \cdot \{C_4H_6\}(z,t) \quad (3.11)$$

Hierin is $\{C_4H_6\}$ de butadieenconcentratie. De faktor $\gamma(T)$ is temperatuurafhankelijk via een Arrheniusverband. De reactiesnelheidskonstante en de aktiveringsenergie zijn overgenomen van Froment.

De randvoorwaarde voor de diameter is:

$$D(z,0) = D_0 \quad (3.12)$$

De schone buis heeft een uniforme diameter.

Aangezien slechts een paar promille van het gevormde butadieen wordt omgezet in kool, is het niet noodzakelijk dat de butadieenflow wordt gekorrigeerd voor de opkoolreactie.

Meer details worden gegeven in Bijlage B en lit/6/.

Het geheel van vergelijkingen en randvoorwaarden van het buismodel, het fireboxmodel en het opkoolmodel is numeriek oplosbaar.

3.5 De winstfunctie

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 bedrijfscyclus (bedrijfstijd plus schoonmaaktijd).

De winstfunctie bevat de volgende opbrengsten en kosten:

- Opbrengst: waarde uitvalpakket

- Kosten: ethaanomzet
 reaktiewarmte
 verlies voelbare warmte
 scheidingskosten (kompressie en destillatie)
 schoonmaken

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

In onderstaande tabel wordt als voorbeeld een overzicht gegeven van de grootte van de verschillende opbrengsten en kosten voor een commerciële oven. Deze getallen hebben betrekking op de dynamisch optimale sturing bij de optimale bedrijfstijd (21 dagen) op $t=12$ dagen. (zie Hoofdstuk 6, paragraaf 2)

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

OPBRENGSTEN EN KOSTEN	SK/dag	% VAN SUBTOTAAL OPBRENGST OF KOSTEN
Etheen	14,3	75
Nevenprodukten	<u>4,7</u>	<u>25</u>
OPBRENGST	19,0	100
Ethaanomzet	8,6	79
Scheiding	1,3	12
Reaktiewarmte	0,8	8
Verlies voelbare warmte	<u>0,1</u>	<u>1</u>
KOSTEN	10,8	100
<u>MOMENTANE WINST</u>	<u>8,2</u>	

Fig. 3.5: Opbrengsten en kosten bij dynamische optimale sturing en bedrijfstijd op $t = 12d$. Alle bedragen uitgedrukt in de schoonmaakkosten SK.

Waarde uitvalpakket $w_p(t)$

In de tabel van fig. 6 staan de prijzen, de geproduceerde hoeveelheden en de opbrengsten van etheen en nevenprodukten weergegeven, voor dezelfde situatie als in fig. 5 .

STOF	PRIJS (SK/10 ⁶ mol)	PRODUKTIE (mol/s)	OPBRENGST (SK/d)	OPBRENGST (% totale opbrengst)
<u>Etheen</u>	<u>14.5</u>	<u>11.4</u>	<u>14.3</u>	<u>75</u>
Waterstof	2.0	13.0	2.2	13
Methaan	4.0	1.9	0.7	4
Propaan	10.1	0.1	0.1	0
Propeen	16.0	0.1	0.1	0
Ethyn	5.7	0.1	0.1	0
Butadien	25.0	0.7	1.5	8
<u>Nevenprodukten</u>		<u>27.3</u>	<u>19.0</u>	<u>25</u>

fig.3.6 Prijzen, hoeveelheden en opbrengsten van de verschillende produkten.

De meeste winst wordt gemaakt op etheen, als gevolg van de gunstige combinatie van de hoge prijs en de grote geleverde hoeveelheid. De hoofdreactie, waarbij etheen en waterstof ontstaan, overheerst in ruime mate de andere reacties.

Van de nevenprodukten leveren waterstof en butadien de grootste bijdrage aan de winst. Voor waterstof berust dit op een hoge produktie. De grote bijdrage van butadien is het gevolg van de hoge prijs. De opbrengst van het uitvalpakket is:

$$wp(t) = \sum_{i=2}^8 p_i \cdot x_i(L,t)$$

Hierin is p_i de prijs per mol van komponent i .

Kosten_ethaanverbruik ke(t)

De kosten van ethaan zijn gebaseerd op de calorische waarde van ethaan. ($p_1=7,0$ SK/10⁶ mol)

De ethaankosten zijn:

$$ke(t) = p_1 \cdot FC(t)$$

Kosten reaktiewarmte $k_{qr}(t)$ 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 reaktiewarmte. De rest wordt direkt gebruikt voor de produktie van stoom of gaat als voelbare warmte mee naar de konvektiesektie. Hier wordt een groot deel van de voelbare warmte teruggewonnen om eveneens te worden gebruikt voor stoomproduktie.

De kosten van de produktie van warmte die uiteindelijk dient voor stoomproduktie, zijn niet expliciet in de winstfunctie opgenomen. Ze maken deel uit van de kosten van het scheidingsproces, waar de stoom gebruikt wordt.

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

$$k_{qv}(t) = p_s \cdot (1 - \eta_{qv}) \cdot (QV_e \cdot FI(t) + QV_s \cdot FS(t))$$

Hierin zijn QV_e en QV_s de hoeveelheden warmte die resp. het ethaan en de stoom per mol opnemen in de konvektiesektie. Deze warmten worden berekend uit de warmtecapaciteiten van stoom en ethaan en de temperatuurverschillen in de konvektiesektie. In de radiatiesektie wordt duidelijk minder voelbare warmte opgenomen.

De reaktiewarmte wordt in rekening gebracht met behulp van de stookgasprijs p_s (5.0 SK/10¹²J):

$$k_{qr}(t) = p_s \cdot QR(t)$$

Scheidingskosten $k_{sch}(t)$

De scheidingskosten zijn de kosten van kompressie en destillatie. Deze kunnen worden voorgesteld als evenredig met de molstroom die de koelsektie verlaat ($p_{sch} = 0.42$ SK/10⁶ mol):

$$k_{sch} = p_{sch} \sum_{i=1}^8 x_i(L, t)$$

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:

$$W_{\text{mom}}(t) = W_p(t) - k_e(t) - k_{qr}(t) - k_{qv}(t) - k_{sch}(t)$$

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

$$W_{\text{gem}}(t) = \frac{\int_0^t W_{\text{mom}}(t') dt' - SK}{t + t_s} \quad (3.13)$$

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 reaktorbuisk, moet de schoonmaaktijd bij de middeling worden betrokken.

Bij alle uitgevoerde dynamische optimaliseringen is $W_{\text{gem}}(t = t_b)$ het criterium dat moet worden gemaximaliseerd.

In hoofdstuk 5 zal naast dynamisch optimaliseren ook statisch en momentaan optimaliseren ter sprake komen. Bij statisch optimaliseren is eveneens W_{gem} ($t = t_b$) het optimaliseringscriterium. Bij momentaan optimaliseren moet op ieder tijdstip W_{mom} worden gemaximaliseerd.

Hfdst. 4. SIMULATIERESULTATEN

De tijdafhankelijke verschijnselen in de oven worden veroorzaakt door de opkoling (interne dynamica) en door tijdafhankelijke sturing (externe dynamica). In de eerste paragraaf van dit hoofdstuk zullen we een simulatie bespreken waarbij de sturing (TW, FI, FS) niet afhangt van de tijd. Aan de hand van deze simulatie kunnen de gevolgen van de opkoling duidelijk worden gemaakt.

De andere paragrafen behandelen het effect van de sturing op de processen in een schone en een opgekoelde buis. Hier zal blijken welke manier van sturen de winst verhoogt en welke de opkoling vertraagt.

Deze inzichten zullen van nut zijn bij de bespreking van de optimaliseringsresultaten in hoofdstuk 5 en 6.

4.1 Simulatie bij konstante sturing

De sturing die we in deze simulatie gebruiken is gekozen om een goed beeld te krijgen van de gevolgen van de opkoling voor het gedrag van de oven. De gekozen sturing en bedrijfstijd liggen dicht bij het optimum voor tijd-onafhankelijke sturing (zie hoofdstuk 5, paragraaf 2).

De drie stuurgrootheden hebben de volgende waarden:

ovenwandtemperatuur	TW = 1500 K
ethaanvoeding	FI = 28 mol/s
stoomflow	FS = 2 mol/s

De bedrijfstijd is 21 dagen.

Druk

De drukval over de buis stijgt als gevolg van de opkoling. De gasstroom moet immers door een steeds nauwere buis geperst worden. Om de uitgangsdruk op de gewenste waarde te houden moet de ingangsdruk steeds verder worden verhoogd.

In fig.1 zien we dat de druk in de loop van de tijd steeds sneller toeneemt. Dit wordt veroorzaakt door het feit dat de opkoling steeds sneller gaat, terwijl de druk steeds sneller toeneemt wanneer de diameter geleidelijk kleiner wordt.

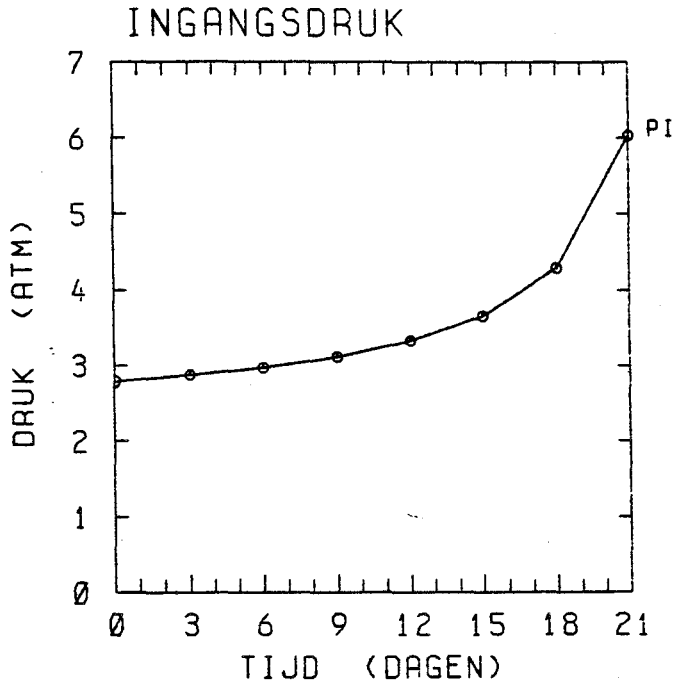


fig. 4.1 Ingangsdruk als
functie van de tijd

Bij de gebruikte sturing bereikt de ingangsdruk op $t = 21$ dagen de limiet van 6 atm. De oven moet dan worden gestopt en ontkoold.

Opkoling

In fig. 2 en 3 is de opkoling in beeld gebracht. Volgens het opkoolmodel wordt kool gevormd uit butadieen, dat het eindprodukt is van vier opeenvolgende reacties. De produktie komt daardoor pas halverwege de buis op gang. De hoogste butadieenconcentratie wordt achter in de buis aangetroffen. De koolvorming is daar dan ook het sterkst.

Fig. 2 laat zien dat na 9 dagen het nauwste punt van de buis helemaal aan het uiteinde ligt. Later blijkt de opkolling iets voor het buiseinde sneller te verlopen dan aan het uiteinde zelf. Ten gevolge van de hogere druk op meer naar voren gelegen plaatsen in de buis, is de butadieenconcentratie daar hoger en gaat de opkolling sneller. Op $t = 21$ dagen ligt het nauwste punt duidelijk voor het buiseinde.

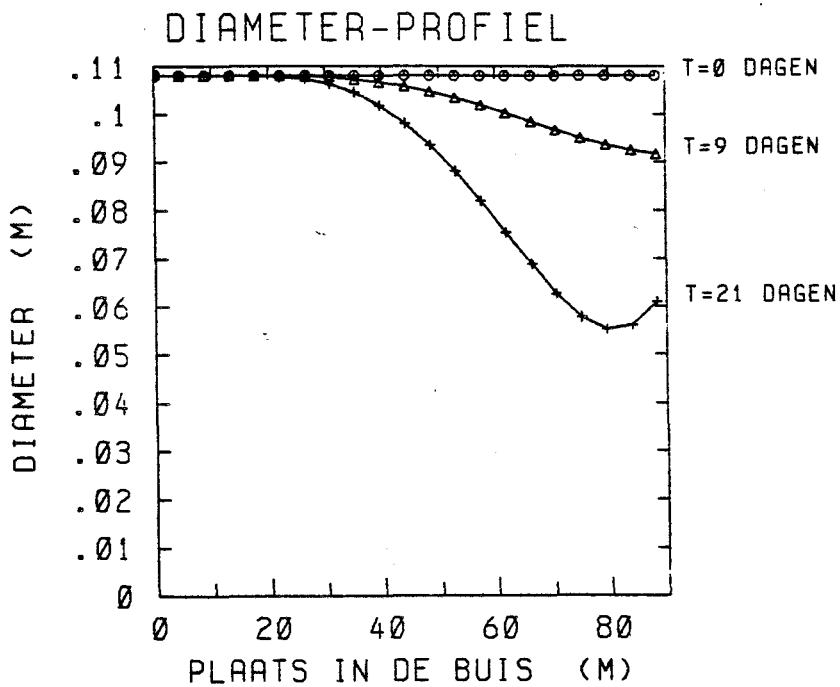


fig. 4.2 Binnendiameter als functie van de plaats op enkele tijdstippen.

In fig. 3 zien we het volume geproduceerde kool als functie van de tijd. De opkoling blijkt steeds sneller te gaan verlopen. Dit is het gevolg van de stijgende druk en de toenemende butadieenproduktie. Op dit laatste verschijnsel komen we terug bij de bespreking van het begrip selektiviteit.

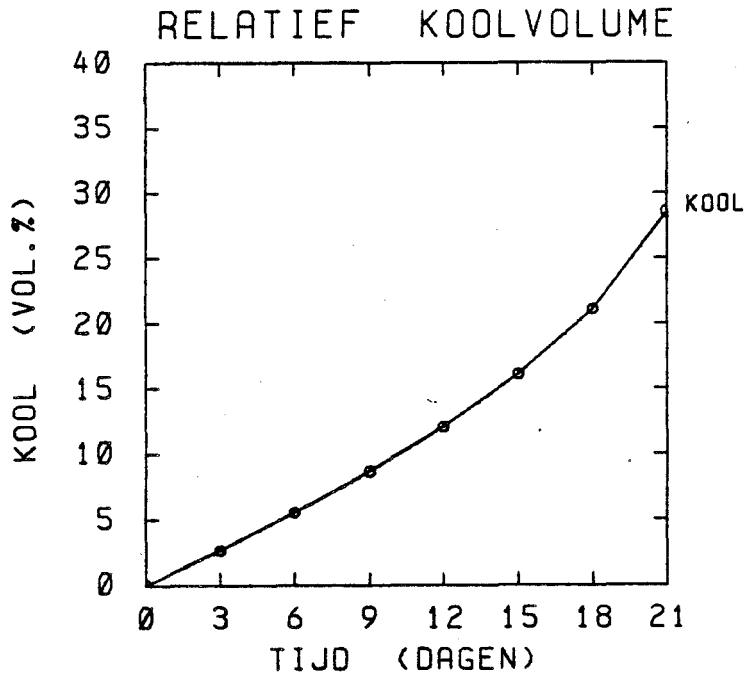


fig. 4.3 Geproduceerd koolvolume als functie van de tijd.

Conversie en ethaanverbruik

In fig. 4 en 5 staan o.a. de conversie en het ethaanverbruik uitgezet tegen de tijd. De conversie is gedefinieerd als de functie van de voeding die in de oven wordt omgezet:

$$\text{Conv.} = \frac{FC(t)}{FI(t)}$$

Hierin is $FC(t)$ het ethaanverbruik.

In fig.4 is een lichte daling van de conversie te zien tot vlak voor het einde van de bedrijfstijd. Dan vindt een kleine stijging plaats. Globaal gezien is de conversie niet erg gevoelig voor koolvorming. Om dit te begrijpen verdelen we de buis in twee delen. Het voorste deel is nagenoeg vrij van kool, het achterste zeker niet.

In het voorste deel leidt de stijgende druk tot hogere concentraties. De conversie zal hierdoor stijgen. In het achterste deel van de buis is het effect van de drukstijging ondergeschikt aan dat van de verminderde warmtetoever en het verkleinde reaktorvolume. Bij sterke opkoling kan het volume van de achterste buis helft afnemen van 50% tot 20 à 25% van het volume van de schone buis. De vermindering van de warmtetoever komt later nog ter sprake.

In het laatste deel van de buis daalt de ethaanomzet. Over de hele buis gerekend ontstaat een lichte daling van de conversie.

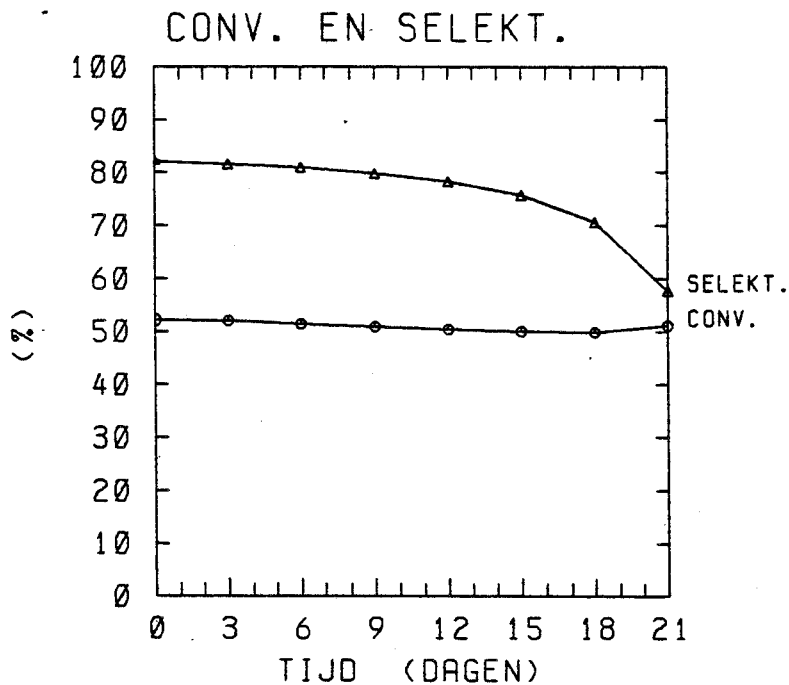


fig. 4.4 Conversie en selektiviteit als functie van de tijd.

Op het einde van de bedrijfstijd stijgt de druk tot een niveau waarbij het effect van hogere concentraties belangrijker wordt dan dat van het verminderde volume en de kleinere hoeveelheid toegevoerde warmte. Dit verklaart de stijging van de conversie op $t=21$ dagen.

Globaal bezien heffen de tegengestelde effecten van drukverhoging enerzijds en verkleind volume en minder warmtetoevoer anderzijds, elkaar vrijwel op. De conversie is hierdoor nagenoeg konstant in de tijd.

Door de konstante voeding is het verloop van het ethaanverbruik (fig. 5) hetzelfde als van de conversie (fig. 4).

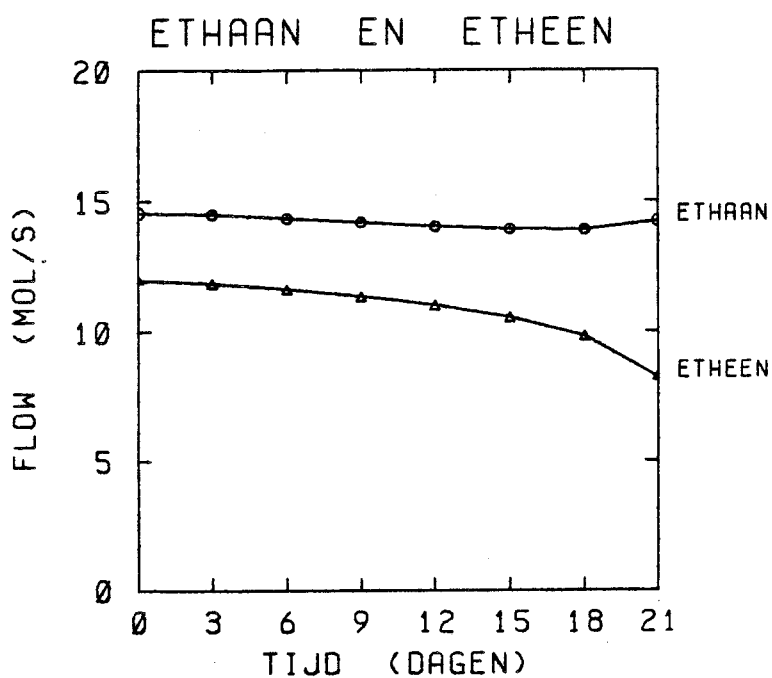


fig. 4.5 Ethaanverbruik en etheenproductie als functie van de tijd.

Selektiviteit en etheenproductie

In fig. 4 en 5 staan naast conversie en ethaanverbruik tevens selektiviteit en etheenproductie weergegeven. De selektiviteit

is gedefinieerd als de fraktie van het omgezette ethaan dat in de vorm van etheen de oven verlaat:

$$\text{Sel.}(t) = \frac{F_{\text{C}_2\text{H}_4}(t)}{FC(t)}$$

Hierin is $F_{\text{C}_2\text{H}_4}(t)$ de etheenproduktie in mol/s.

De selektiviteit is een maat voor de efficiëntie van het kraakproces. Een hoge selektiviteit betekent dat etheen een groot deel vormt van het uitvalpakket. Dit heeft een gunstige invloed op de winst. Bovendien zal de opkoling langzamer verlopen als minder nevenprodukten, en dus ook minder butadiëen, worden geproduceerd.

In fig. 4 zien we de selektiviteit belangrijk dalen. Dit is te wijten aan de stijging van de druk. Door de hogere concentraties nemen de reaktiesnelheden toe. Van elke mol gevormd etheen wordt een groter deel omgezet in nevenprodukten, waardoor de selektiviteit daalt. Een verdere daling ontstaat door versnelling van de nevenreacties waarbij ethaan wordt omgezet. Dit ethaan is verloren voor de produktie van etheen.

De etheenproduktie is bij konstante voeding evenredig met het produkt van conversie en selektiviteit. Aangezien de conversie nauwelijks verandert en de selektiviteit daalt, neemt de produktie van etheen af. (fig.5)

Warmte

Het kraakproces heeft warmte nodig om de (endotherme) hoofdreactie te laten verlopen. Een klein deel van deze warmte wordt geleverd door de andere reacties, die samen overwegend exotherm zijn. De netto hoeveelheid warmte die door de reacties wordt opgenomen noemen we de reaktiewarmte van het proces.

In de loop van de tijd neemt het ethaanverbruik af. Dit leidt tot een verminderde reaktiewarmte. Omdat bovendien de exotherme groep reacties steeds sneller gaat lopen wordt een groter deel

van de reaktiewarmte door het proces zelf geleverd. De reaktiewarmte wordt daarom steeds kleiner. (fig.6) Ook als op het einde van de bedrijfstijd de ethaanomzet nog even toeneemt, daalt toch de reaktiewarmte. Dit is het gevolg van de toenemende eigen warmteproductie van het proces.

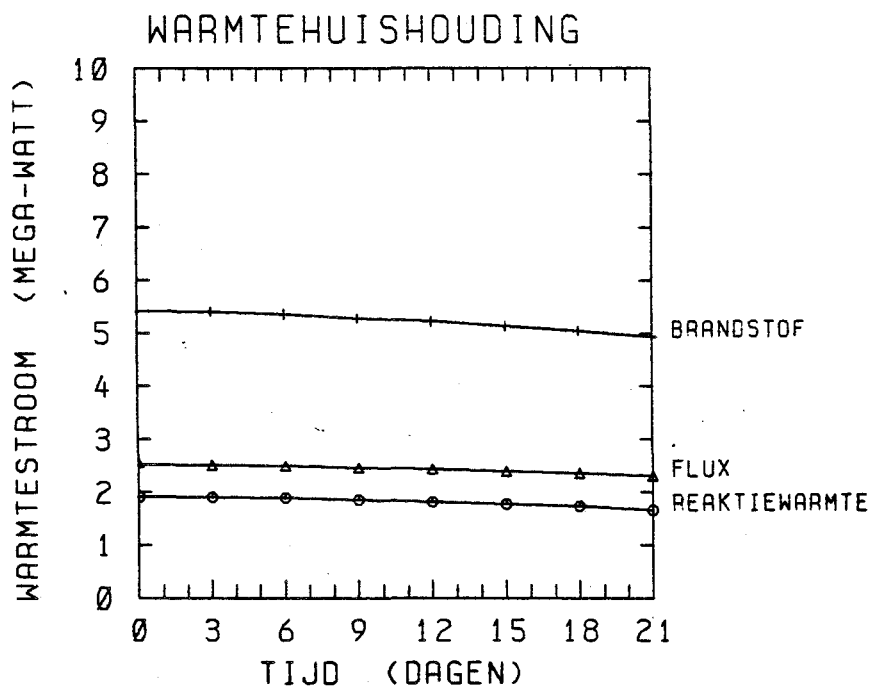


fig. 4.6 Enkele warmtestromen als functie van de tijd.

In fig. 6 zien we dat de warmtetoevoer van de buis ("flux") in de loop van de tijd daalt. Door het aangroeien van de koollaag neemt de warmteweerstand tussen de buitenwand van de buis en het gas toe, waardoor minder warmte wordt overgedragen.

De warmte die de ovenwand naar de buis straalt veroorzaakt een verhoging van de buiswandtemperatuur. De buis verliest hierdoor meer warmte door straling. Ook in de firebox ontstaat dus een fluxdaling.

Wanneer bij konstante ovenwandtemperatuur de warmtetoevoer naar de buis vermindert, is ook minder brandstof nodig.

Gastemperatuur

In fig. 7 wordt de gastemperatuur als functie van de plaats gegeven voor enige tijdstippen. Het temperatuurprofiel is als volgt verklaarbaar.

In het begin van de buis zijn de reactiesnelheden door de lage temperatuur vrijwel nul. De reactiewarmte is dan ook praktisch nul, zodat de toegevoerde warmte leidt tot een snelle opwarming van het gas.

Verderop in de buis komt allereerst de hoofdreactie op gang. Deze endotherme reactie neemt een deel van de toegevoerde warmte op, zodat de temperatuurstijging minder wordt.

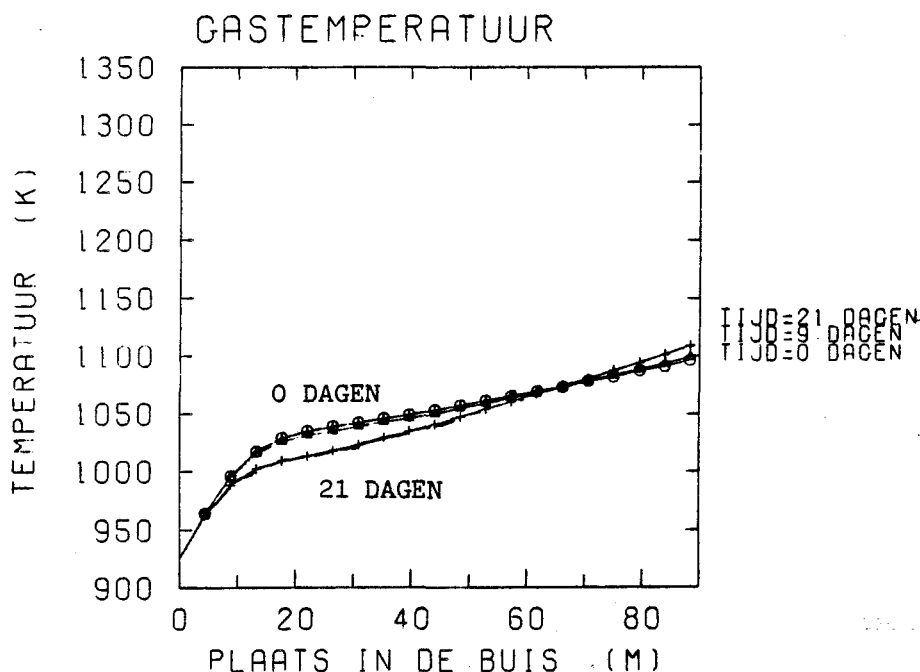


fig. 4.7 Temperatuur van het reactiemengsel als functie van de plaats op enkele tijdstippen.

Achter in de buis is zoveel ethaan verbruikt dat de hoofdreactie merkbaar minder warmte opneemt. Bovendien neemt door de andere reacties de eigen warmteproductie van het proces toe, zodat de temperatuur weer sneller gaat stijgen. In fig. 7 zien we de kromme omhoog buigen.

In de loop van de tijd wordt als gevolg van de drukverhoging voor in de buis steeds meer ethaan omgezet, waardoor de reactiewarmte stijgt. Dit leidt tot een daling van de temperatuur. (fig.7)

Achter in de buis wordt door het afnemende buisvolume en de verminderde warmtetoevoer juist steeds minder ethaan omgezet. Dit veroorzaakt een temperatuurstijging.

De veranderingen in de gastemperatuur zijn klein (max 1 K/dag) vergeleken met die van de buiswandtemperatuur (max 6 K/dag). Elke verandering van de gastemperatuur wordt namelijk tegengewerkt door de resulterende veranderingen in reactiewarmte en flux.

Een hogere gastemperatuur betekent hogere reactiesnelheden en dus een grotere reactiewarmte. Bovendien neemt het temperatuurverschil tussen gas en buitenwand af, zodat de flux daalt. Beide effecten werken de temperatuurverhoging tegen, waardoor een gedeeltelijke compensatie van die verhoging ontstaat. Dit temperatuurstabiliserende effect zal ook verderop in dit hoofdstuk nog genoemd worden.

Buiswandtemperatuur

Bij vaste ovenwandtemperatuur wordt de temperatuur op de buitenwand bepaald door de gastemperatuur en de warmteweerstand tussen buiswand en gas.

Door het aangroeien van de koollaag neemt de warmteweerstand toe, zodat de warmte die de ovenwand naar de buis straalt steeds moeilijker wordt doorgegeven aan het gas. Hierdoor stijgt de buiswandtemperatuur.

In fig. 8 is deze temperatuur weergegeven als functie van de tijd. De uitgezette waarde is de hoogste waarde die op zeker tijdstip langs de buis voorkomt.

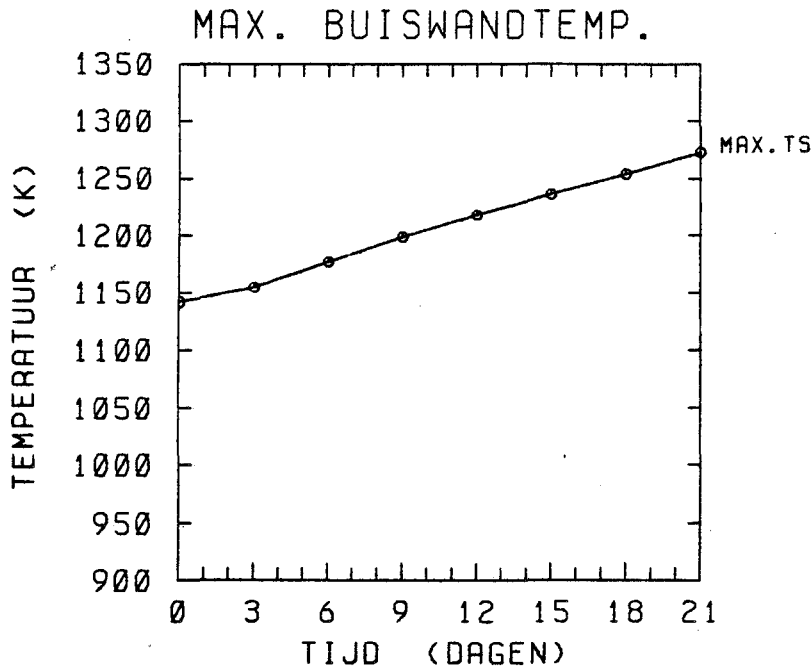


fig. 4.8 Hoogste buiswandtemperatuur als functie van de tijd

Het blijkt dat de maximale buiswandtemperatuur steeds wordt aangetroffen op het achterste deel van de buis. Hier is de gas-temperatuur het hoogst en de warmteweerstand het grootst, als gevolg van de opkoling. In fig. 9 wordt het verloop van de buiswandtemperatuur langs de buis gegeven op enige tijdstippen.

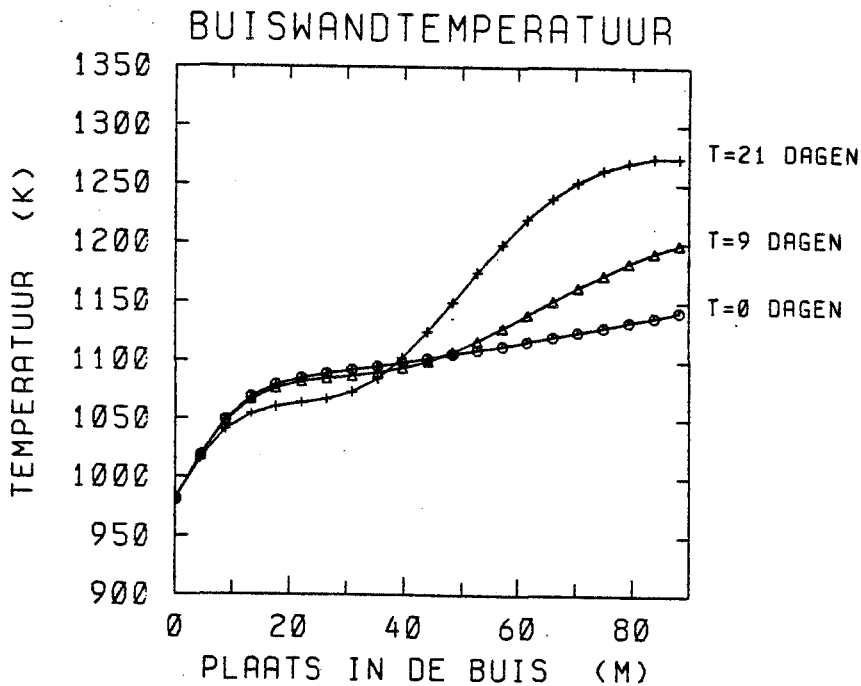


fig. 4.9 Profiel van de buiswandtemperatuur op enkele tijdstippen

Het punt van de grootste warmteweerstand (minimale diameter) schuift in de loop van de tijd naar voren in de buis. Het punt van de hoogste buiswandtemperatuur doet dit ook, maar minder snel. De gastemperatuur blijft namelijk het hoogst aan het einde van de buis.

Het profiel van de buiswandtemperatuur (fig. 9) bij schone buis wordt alleen bepaald door de gastemperatuur. De krommen voor $t = 0$ (schone buis) in fig. 7 en 9 hebben dan ook dezelfde vorm.

Op latere tijdstippen blijft voor in de buis de gastemperatuur bepalend voor de buiswandtemperatuur. De warmteweerstand verandert hier niet omdat in dit deel van de buis geen opkoling plaats vindt. In fig. 9 zien we dan ook dat de buiswandtemperatuur hier daalt, net als de gastemperatuur.

Achter in de buis veroorzaakt de stijging van de warmteweerstand een verhoging van de buiswandtemperatuur. Dit effect kwam al ter sprake.

Opbrengsten en kosten

De opbrengst van het uitvalpakket (fig. 10) wordt vooral bepaald door de etheenproduktie. De afname van deze produktie (dalende selektiviteit) in de tijd betekent dan ook een daling

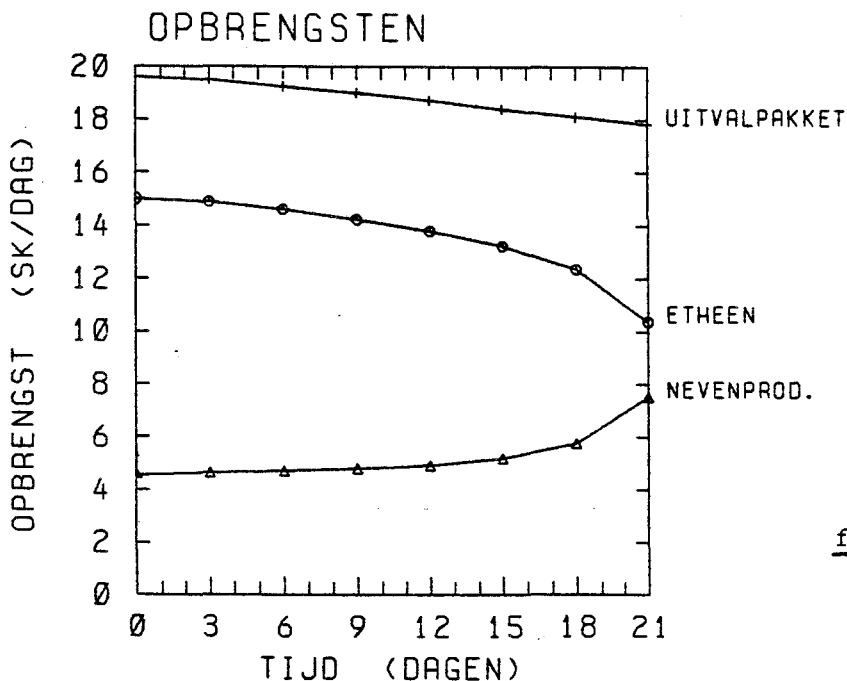


fig. 4.10 Opbrengst als
functie van de
tijd.

van de opbrengst. De produktie van nevenprodukten neemt in de tijd toe. De opbrengst van deze produkten, vooral van butadieen, vertoont dan ook een duidelijke stijging. Dit kan de daling van de etheenopbrengst echter niet kompensieren.

In fig. 11 zijn de verschillende kostenposten als funktie van de tijd weergegeven.

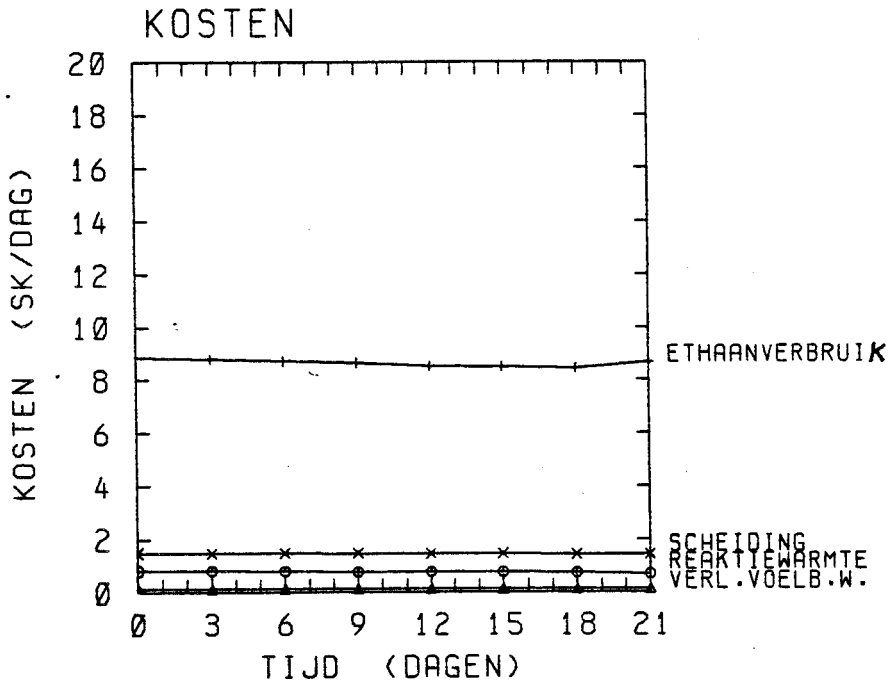


fig. 4.11 Kosten als funktie van de tijd

De kosten van ethaan en brandstof nemen af door het dalende ethaanverbruik en de steeds kleinere behoefte aan reaktiewarmte.

De scheidingskosten nemen evenredig toe met de grootte van de molstroom die de oven verlaat. Deze grootte wordt voornamelijk bepaald door de flows van ethaan, etheen en waterstof. Stoom is bij de scheiding niet meer in de gasstroom aanwezig.

Etheen en waterstof worden geproduceerd door de hoofdreactie. Hierbij treedt molvermeerdering op, zodat een grotere ethaanomzet leidt tot een grotere molstroom bij de scheiding. In de loop van de tijd neemt de ethaanomzet af, zodat de scheidingskosten dalen.

Op het laatste tijdstip, als de ethaanomzet nog even stijgt, wordt de molstroom toch kleiner, door verschuivingen in de samenstelling van het uitvalpakket. Ook dan gaan de scheidingskosten omlaag.

Het verlies bij het terugwinnen van voelbare warmte is alleen afhankelijk van de sturing. Omdat die tijd-onafhankelijk is, is deze kostenpost konstant.

Momentane en gemiddelde winst

De vermindering van de opbrengst in de tijd is enkele malen groter dan de vermindering van de kosten. De momentane winst daalt dus. (fig. 12)

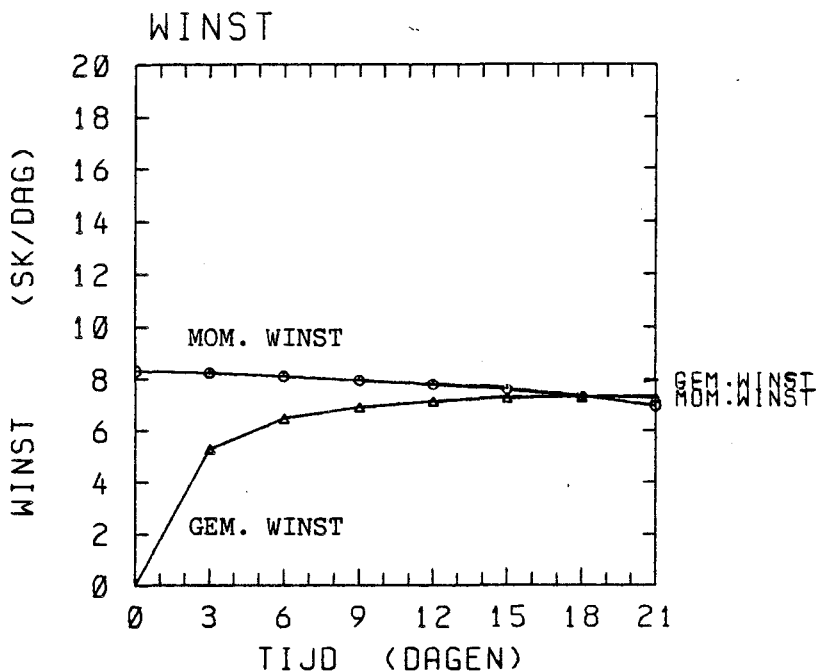


fig. 4.12 Momentane en gemiddelde winst als functie van de tijd

In fig. 12 is tevens de gemiddelde winst uitgezet. Deze kromme begint op $t = 0$ bij gemiddelde winst = 0. Wanneer een bedrijfstijd van 0 dagen wordt gekozen zal de winst triviaal nul zijn. Volgens de definitie van de winstfunctie zou hier een negatief getal voorkomen, ten gevolge van de schoonmaakkosten. Dit is in de figuur niet weergegeven.

Doordat de winst per dag een orde groter is dan de schoonmaakkosten, neemt de gemiddelde winst snel toe. In de loop van de tijd nemen de schoonmaakkosten in belang af en wordt het verloop van de gemiddelde winst sterker beïnvloed door de daling van de opbrengst. Wanneer momentane en gemiddelde winst aan elkaar gelijk worden, bereikt de gemiddelde winst een maximum. De oven moet dan worden ontkoold. Een verlenging van de bedrijfstijd zou alleen maar een vermindering van de gemiddelde winst tot gevolg hebben.

In fig.12 zien we dat de optimale bedrijfstijd bij de gebruikte sturing ligt op 18 dagen. Drie dagen later zou de oven gestopt moeten worden wegens overschrijding van de maximaal toelaatbare ingangsdruk. (zie fig.3). Bij de dynamische optimaliseringen zal blijken dat overschrijding van de limiet voor druk of buiswandtemperatuur meestal eerder optreedt dan daling van de gemiddelde winst.

4.2 Invloed van voeding en stroomflow bij schone buis.

In deze paragraaf bespreken we de invloed van variabele voeding FI en stroomflow FS op het kraakproces en de opkoling in een schone buis.

Fig. 13 t/m 19 tonen het verloop van enkele grootheden bij variabele voeding voor verschillende stroomflows. Zij zullen hieronder behandeld worden.

Druk

De ingangsdruk neemt praktisch lineair toe met de doorzet (ethaan + stoom). Bij schone buis wordt de limiet van 6 atm. niet bereikt bij maximale doorzet van in totaal 65 mol/s (zie fig. 13).

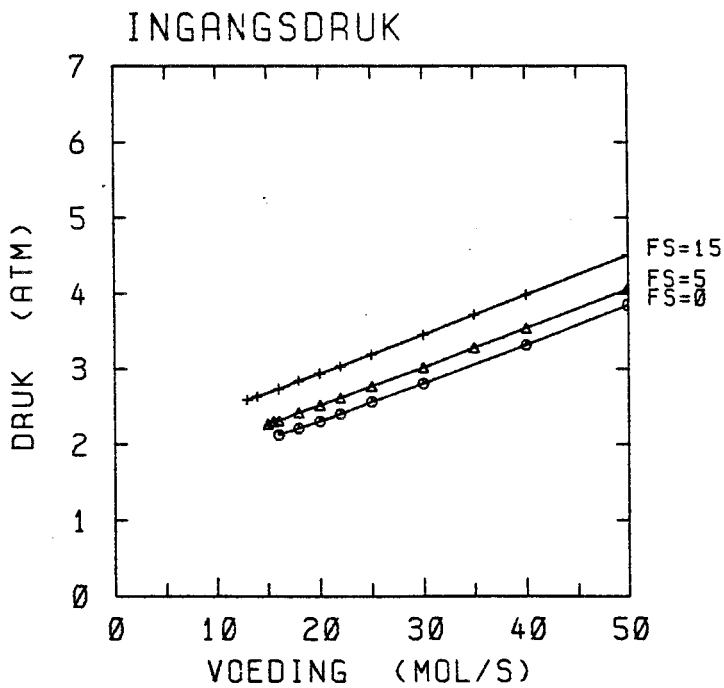


fig. 4.13 Ingangsdruk bij verschillende voedingen en stroomflows.

Buiswandtemperatuur

Fig. 14 laat zien dat bij voedingen groter dan 20 mol/s de stroomflow nauwelijks invloed heeft op de buiswandtemperatuur. De voeding daarentegen heeft wél een duidelijke invloed.

Het verschil tussen het effect van de voeding en stroomflow is als volgt verklaarbaar.

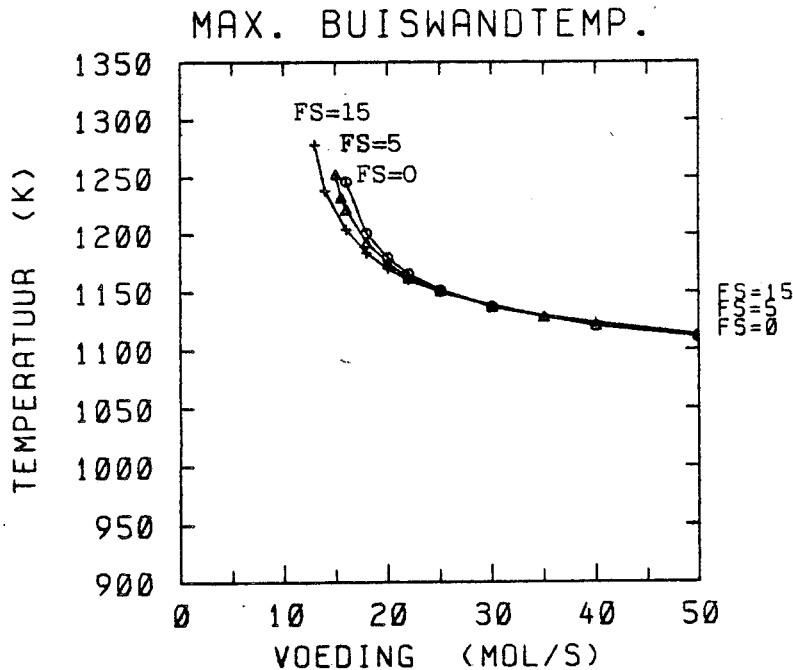


fig. 4.14 Hoogste buiswandtemperatuur bij verschillende voedingen en stroomflows.

Wanneer de doorzet (ethaan of stoom) wordt verhoogd, ontstaat een daling van de temperatuur, als gevolg van de toename van de warmtecapaciteit van de gasstroom. Doordat de warmtecapaciteit van ethaan drie maal zo groot is als van stoom, is deze temperatuurdaling sterker bij vergroting van de voeding dan bij vergroting van de stroomflow.

Dit is echter niet het enigste verschil.

De afkoeling wordt tegengegaan door het temperatuurstabiliserende effect, dat in paragraaf 1 al aan de orde kwam bij de bespreking van de gastemperatuur. De lagere temperatuur leidt tot

lagere reaktiesnelheden en lagere conversie, waardoor de ethaanomzet daalt. Hierdoor heeft het kraakproces minder warmte nodig. De toegevoerde warmte die niet meer nodig is voor de reacties, heeft een verhogende invloed op de temperatuur. De afkoeling wordt hierdoor gedeeltelijk gekompenseerd.

Bij vergroting van de voeding is dit compenserend effect niet erg sterk. Weliswaar daalt de conversie, maar dit wordt grotendeels teniet gedaan door het grotere ethaanaanbod. Het ethaanverbruik en de benodigde reaktiewarmte blijven daardoor vrijwel gelijk, zodat de temperatuurstabilisering gering is.

Vergroting van de stroomflow leidt echter wél tot een verminderd ethaanverbruik en dus tot stabilisering van de temperatuur. Dit effect wordt nog versterkt door de verdunning van het ethaan door de stoom, waardoor de ethaanomzet nog verder terugloopt.

Bij hoge voeding (50 mol/s) leidt toevoegen van stoom zelfs tot verhoging van de buiswandtemperatuur. Dit is het gevolg van een lokale afname van de benodigde reaktiewarmte.

Conversie en ethaanverbruik

In fig.15 staat onder andere de conversie uitgezet. We zien dat bij toenemende voeding een grote daling van de conversie optreedt. De extra ethaanflow leidt, zoals gezien, tot lagere temperaturen en dus tot lagere reaktiesnelheden. Van elke mol ethaan wordt een kleinere fraktie omgezet, de conversie daalt.

Dit temperatuureffekt overheerst het effect van de hogere concentraties door de grotere voeding en de hogere druk.

Het toevoegen van stoom verhoogt de conversie door verdunning van het ethaan. Het effect van drukverhoging is hieraan ondergeschikt.

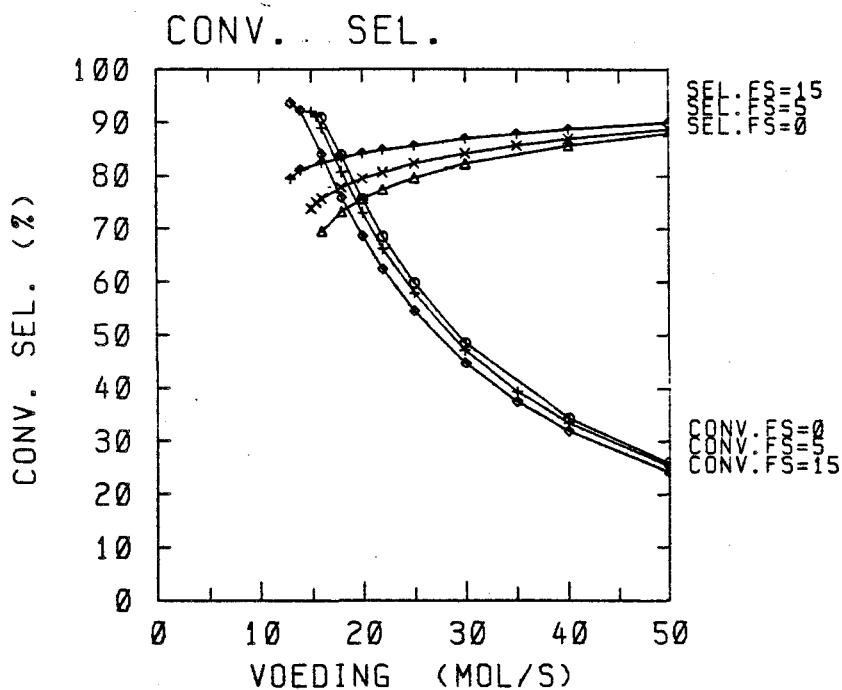


fig. 4.15 Conversie en selektiviteit bij verschillende voedingen en stoomflows

Wanneer we de conversie met de voeding vermenigvuldigen krijgen we het ethaanverbruik (fig.16). De daling van de conversie is zo sterk dat zelfs na deze vermenigvuldiging een dalende kromme ontstaat. In fig.16 zien we dat voor voedingen boven de 20 mol/s het toevoeren van meer ethaan betekent dat er minder ethaan wordt omgezet.

Bij kleinere voeding is de conversiedaling niet sterk genoeg om dit verschijnsel te veroorzaken. In fig.16 zien we dan ook een stijgende flank van de verbruikskromme bij lage voeding.

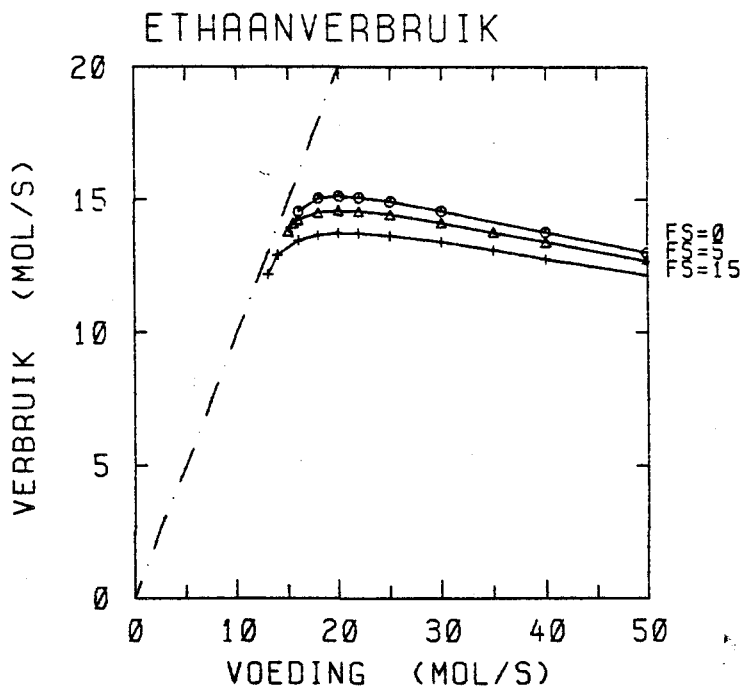


fig. 4.16 Ethaanverbruik bij verschillende voedingen en stoomflows

Selektiviteit en etheenproduktie

In fig.15 zien we dat vergroting van de selektiviteit kan worden bereikt door meer ethaan of stoom toe te voeren.

Vergroting van de voeding leidt tot lagere temperaturen in de buis. Van elke mol etheen reageert er dan een kleinere fraktie door tot nevenprodukt, zodat de selektiviteit stijgt.

Toevoegen van stoom verdunt het gevormde etheen, waardoor eveneens een hogere selektiviteit ontstaat.

De etheenproduktie (fig.17) is het produkt van ethaanverbruik en selektiviteit. Bij stijgende voeding gaat deze grootheid door een maximum, dat wordt bereikt bij een iets grotere voeding dan de maximale ethaanomzet. Het wat lagere ethaanverbruik wordt gekompenseerd door de hogere selektiviteit.

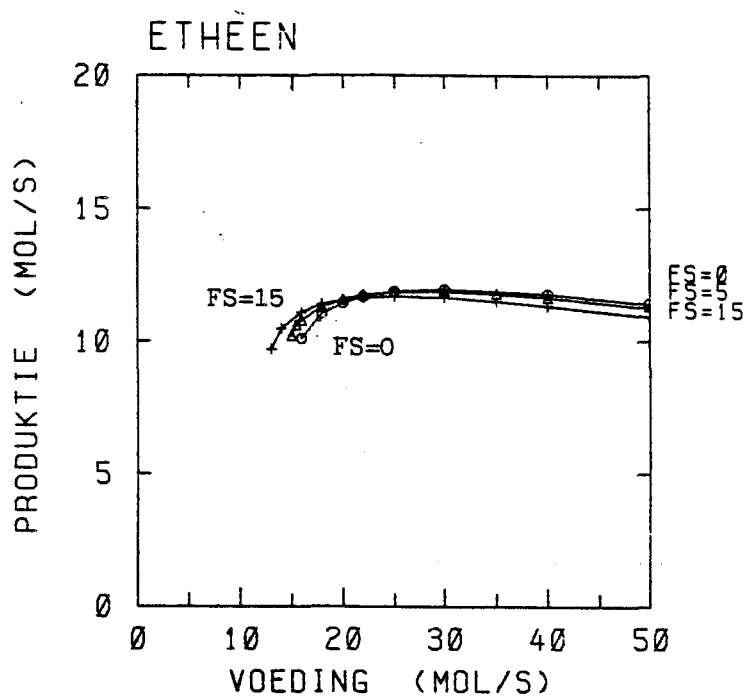


fig. 4.17 Etheenproduktie bij verschillende voedingen en stroomflows

Bij lage voeding (< 20 mol/s) leidt het toevoegen van stoom tot een sterke vergroting van de selektiviteit (fig.15) bij verlaging van de ethaanomzet (fig.16). De stijging van de selektiviteit is hier overheersend, zodat de etheenproduktie stijgt.(fig.17).

Bij hoge voeding is de daling van de ethaanomzet doorslaggevend, zodat de etheenproduktie daalt door toevoegen van stoom.

Opkoling

Vergroting van voeding of stoomflow leidt in het algemeen tot lagere ethaanomzet en hogere selektiviteit. Beide effecten verminderen de produktie van butadien, en daarmee de opkoling.

In fig.18 zien we dat de snelheid van de opkoling sterk kan worden beïnvloedt met behulp van de voeding en de stoomflow.

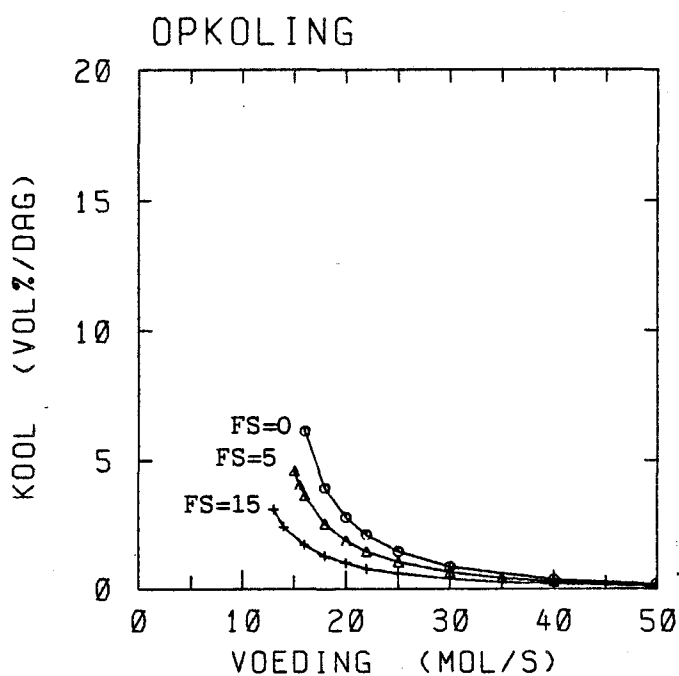


fig. 4.18 Opkoolsnelheid bij verschillende voedingen en stoomflows

Momentane winst

De kromme van de momentane winst (fig. 19) vertoont een sterke gelijkenis met die van de ethaanomzet. Als vuistregel mogen we stellen dat de momentane winst toeneemt wanneer meer ethaan wordt omgezet.

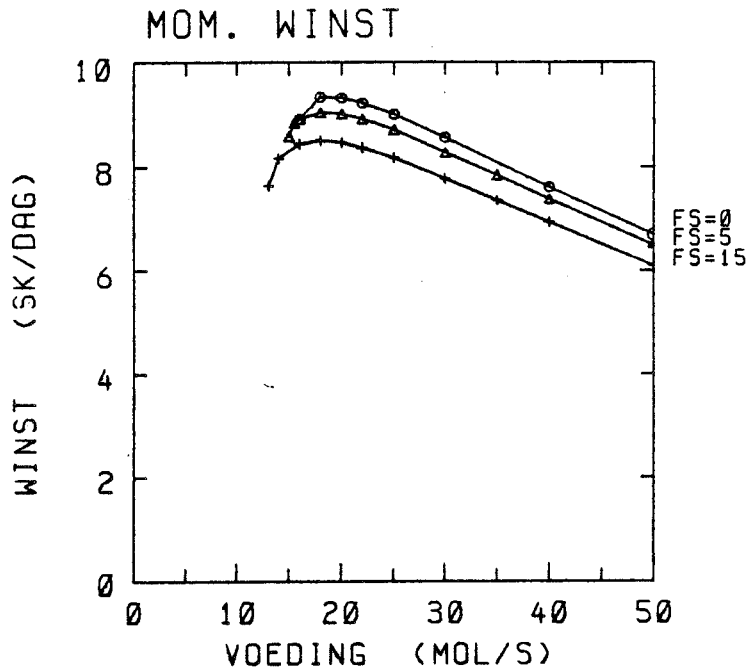


fig. 4.19 Momentane winst bij verschillende voedingen en stroomflows

Deze regel moet met enige voorzichtigheid worden gehanteerd. We mogen er bijvoorbeeld niet van uitgaan dat maximale ethaanomzet onder alle omstandigheden een maximale momentane winst garandeert. Evenmin mag worden gesteld dat de verhouding van de momentane winst en ethaanomzet (= toegevoegde waarde van ethaan) een vast getal is.

Als vuistregel is de relatie tussen momentane winst en ethaanomzet echter toch zinvol. Met name blijkt de omzet van groter belang te zijn dan de samenstelling van het uitvalpakket (etheen + nevenprodukten).

Wanneer we het verloop van de momentane winst vergelijken met die van de ingangsdruk (fig.13), de buiswandtemperatuur (fig.14) en de opkoolsnelheid (fig.18), dan kunnen we konkluderen dat maximaliseren van de momentane winst gepaard gaat met hoge temperaturen en snelle opkoling. De druk wordt niet opvallend hoog.

In de volgende paragraaf wordt de situatie bij opgekoelde buis besproken. We zullen zien dat de invloed van de sturing op de processen in de buis niet van karakter verandert.

4.3 Invloed van voeding en stroomflow bij opgekoelde buis

De veranderingen die in het kraakproces optreden ten gevolge van de opkoling, zijn al uitgebreid besproken aan de hand van een simulatie in de tijd (paragraaf 1).

Verder is de invloed van voeding en stroomflow bij schone buis al bestudeerd in paragraaf 2.

Met deze voorkennis levert het bestuderen van de invloed van voeding en stroomflow bij opgekoelde buis weinig verrassingen meer op. Voor veranderingen in de voeding zullen we dit illustreren met behulp van fig.20 t/m 24. Deze grafieken zijn gemaakt voor de opkoling op het eindtijdstip (21 dagen) van de simulatie van paragraaf 1. Het betreft hier een geval van sterke opkoling.

De ovenwandtemperatuur is 1500 K, de stroomflow is 5 mol/s.

Sturing, ingangsdruk en buiswandtemperatuur

Fig.20 laat zien dat bij opgekoelde buis de doorzet niet te groot mag worden gekozen. De ingangsdruk overschrijdt al bij een totale doorzet van 30 mol/s (25 mol/s ethaan, 5 mol/s stoom) de limiet van 6 atm. Bij schone buis is een totale doorzet van 65 mol/s nog ruim haalbaar. Door de opkoling is de ingangsdruk echter gestegen, waardoor hoge flows niet meer toelaatbaar zijn.

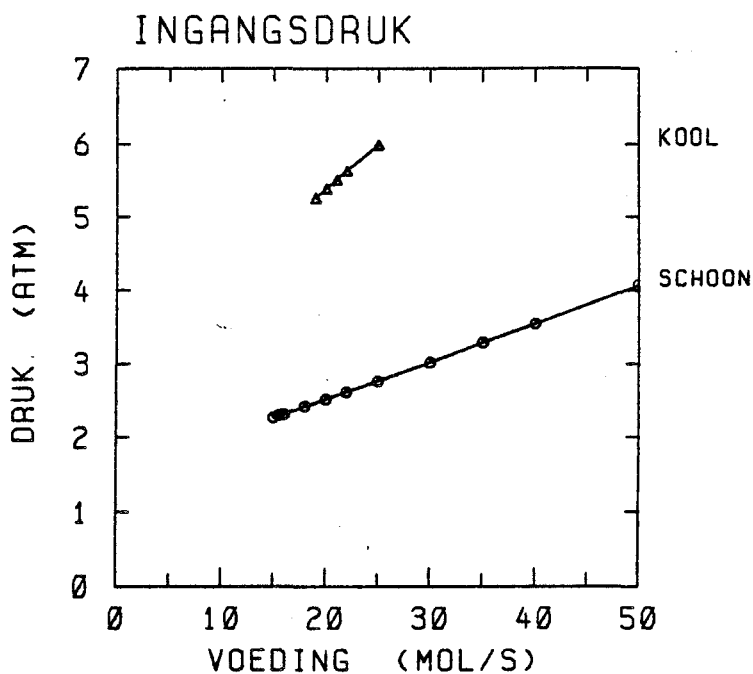


fig. 4.20 Ingangsdruk bij schone en opgekoelde buis

Fig.21 toont dat bij opgekoelde buis de voeding niet te laag mag worden gekozen. De limiet voor de buiswandtemperatuur wordt bereikt bij een voeding van 19 mol/s, tegen 15 mol/s bij schone buis.

Als gevolg van de opkoling wordt het gebied waarover de sturing mag worden gevarieerd, steeds kleiner. Wanneer de buis te veel kool bevat, zal geen enkele combinatie van voeding en stroomflow meer toelaatbaar zijn. Bij een ovenwandtemperatuur van 1500 K gebeurt dit wanneer het koolvolume 30% van het buisvolume bedraagt.

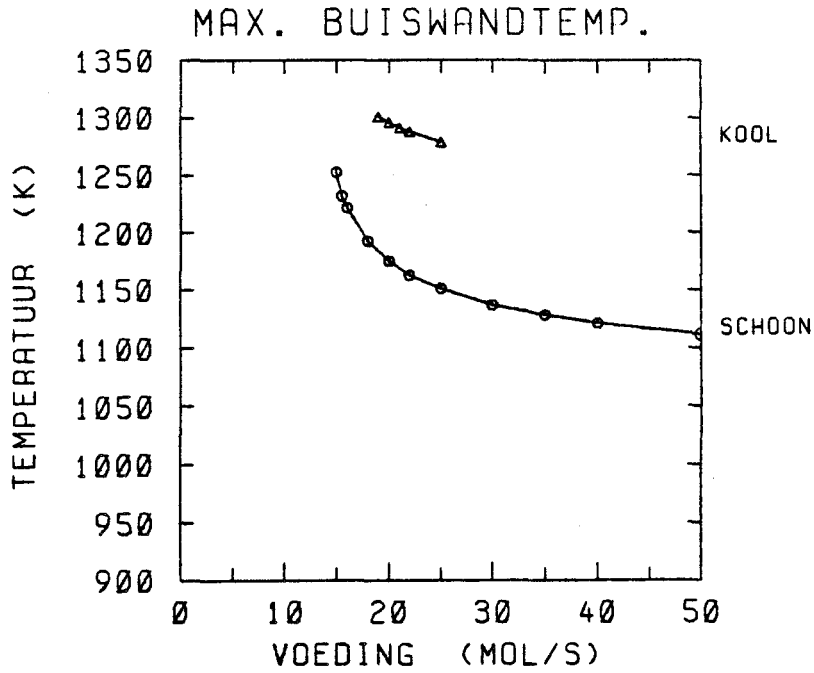


fig. 4.21 Hoogste buiswandtemperatuur bij schone en opgekoolde buis.

Ethaanverbruik

De voeding waarbij het ethaanverbruik maximaal is, blijkt niet meer bereikbaar wegens overschrijding van de maximaal toelaatbare buiswandtemperatuur. (fig.22).

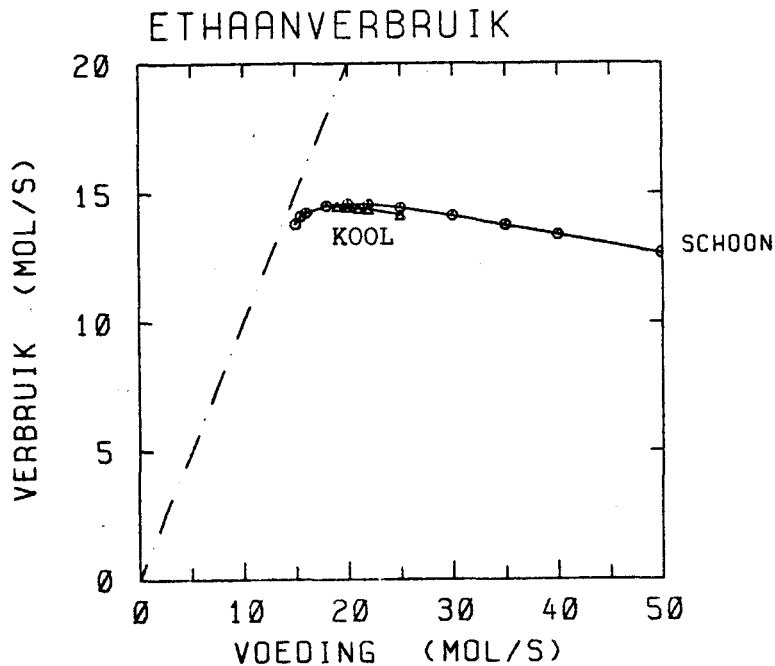


fig. 4.22 Ethaanverbruik bij schone en opgekoolde buis

Opkoling

Zoals gezien (fig.3) gaat de opkoling sneller bij een al opgekoolde buis. Het blijft mogelijk grote invloed uit te oefenen op de opkoolsnelheid, ook binnen het beperkte gebied waarin de sturing mag worden gevarieerd.(fig.23).

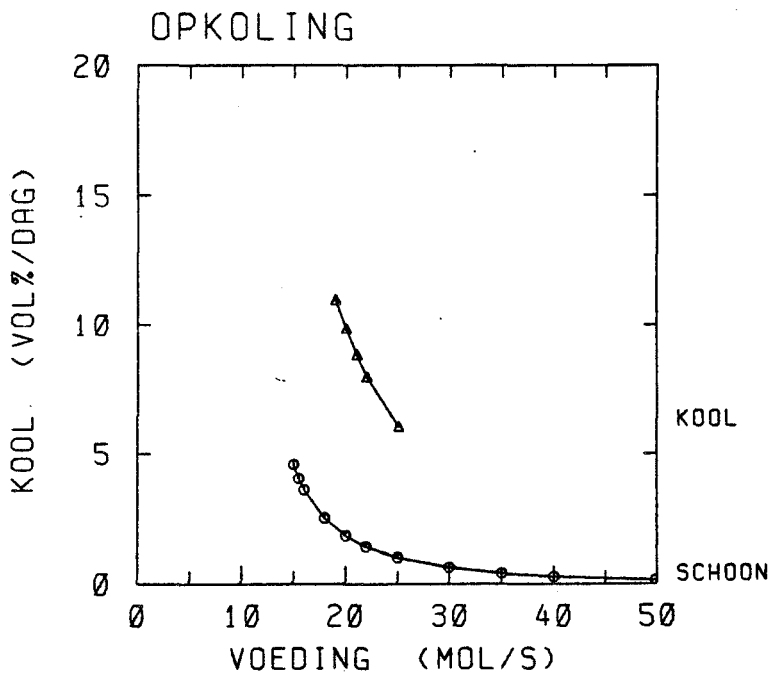


fig. 4.23 Opkoolsnelheid bij schone en opgekoolde buis.

Momentane winst

De voeding waarbij de momentane winst maximaal is, blijkt niet meer bereikbaar wegens overschrijding van de maximaal toelaatbare buiswandtemperatuur (fig.24, zie ook ethaanverbruik).

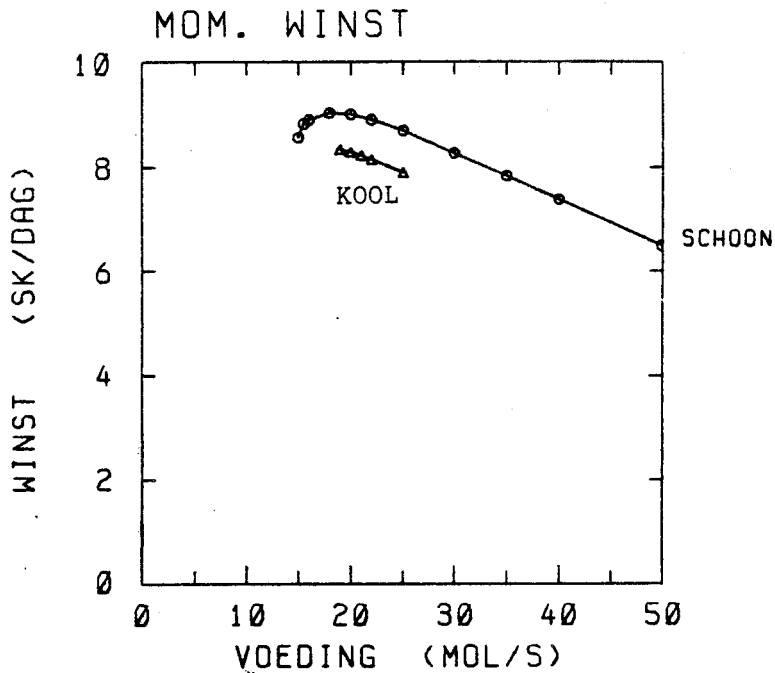


fig. 4.24 Momentane winst bij schone en opgekoolde buis

Gevoeligheden bij opgekoolde buis

In de volgende paragraaf zal de invloed van de ovenwandtemperatuur op het proces en de opkoling worden besproken. Daarna kan een afweging plaatsvinden van de mogelijkheden die de verschillende stuurgrootheden bieden om de momentane winst te vergroten, de opkoling te vertragen of aan de beperkingen op ingangsdruk en buiswandtemperatuur te voldoen. Dit zal gebeuren aan de hand van een gevoeligheidsanalyse.

4.4 Invloed van de ovenwandtemperatuur bij schone en opgekoolde buis

In deze paragraaf komt het effect van veranderingen van de ovenwandtemperatuur op het kraakproces en de opkoling ter sprake, zowel voor schone als voor opgekoolde buis. Voor de effecten van de opkoling wordt verwezen naar paragraaf 1. Het gebruikte diameterprofiel voor de opgekoolde buis is, evenals in de vorige paragraaf, het profiel van de simulatie in paragraaf 1 op het eindtijdstip (21 dagen). De sturing is eveneens die van paragraaf 1 (FI=28 mol/s, FS=2 mol/s).

Druk en buiswandtemperatuur

Het aanleggen van een hogere ovenwandtemperatuur veroorzaakt een grotere drukval over de buis, zodat de ingangsdruk groter wordt. Uit fig.25 blijkt dat bij opgekoolde buis de limiet van 6 atm. wordt bereikt bij een ovenwandtemperatuur van 1500 K.

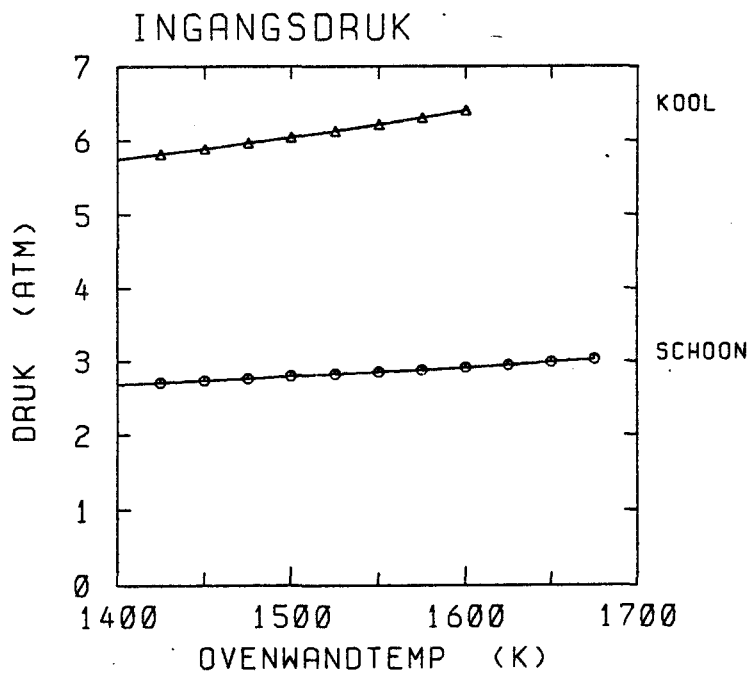


fig. 4.25 Ingangsdruk bij schone en opgekoolde buis

De ingangsdruk is niet erg gevoelig voor de ovenwandtemperatuur, zodat deze temperatuur niet geschikt is om de druk beneden de 6 atm. te houden.

De buiswandtemperatuur neemt toe bij stijgende ovenwandtemperatuur. (fig. 26)

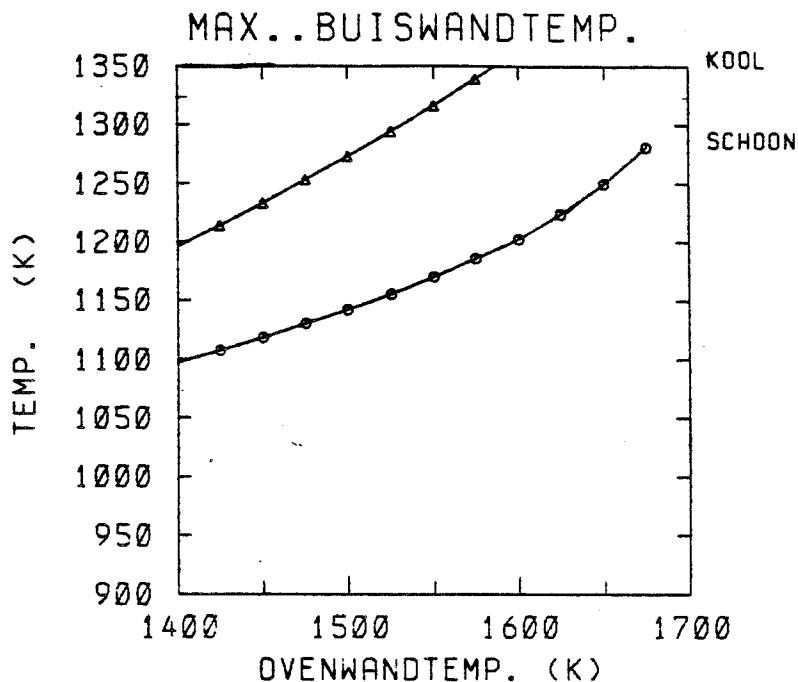


fig. 4.26 Hoogste buiswandtemperatuur bij schone en opgekoolde buis

Kinetiek en opkoling

Wanneer de ovenwandtemperatuur toeneemt wordt meer warmte aan de buis toegevoerd, waardoor hogere temperaturen ontstaan. De conversie en de ethaanomzet nemen hierdoor toe. (fig. 27 en 28)

De hogere temperaturen versnellen niet alleen de hoofdreactie, maar ook de andere reacties. De selectiviteit neemt hierdoor af. (fig. 27)

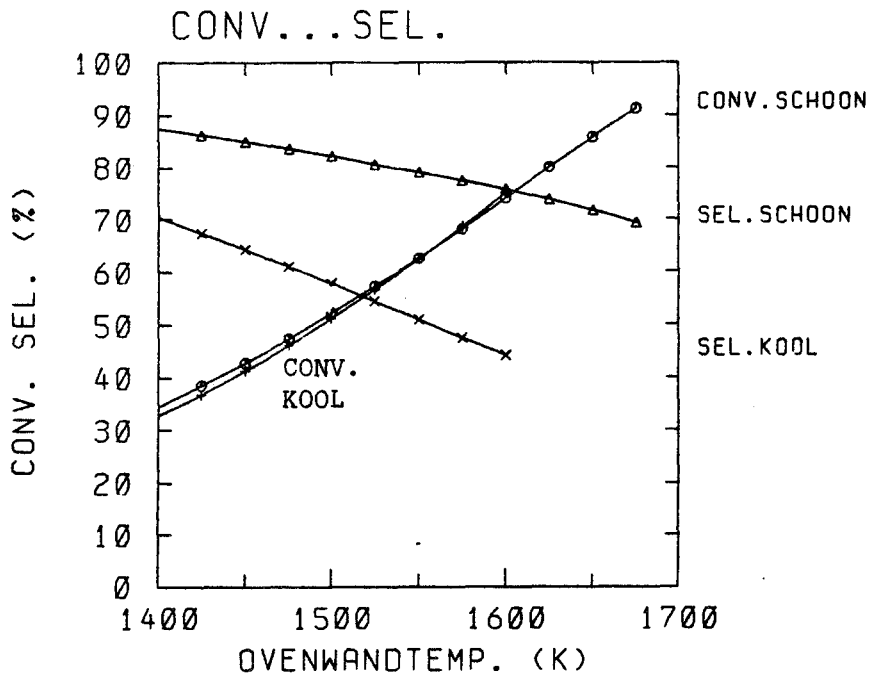


fig. 4.27 Conversie en selectiviteit bij schone en opgekoolde buis

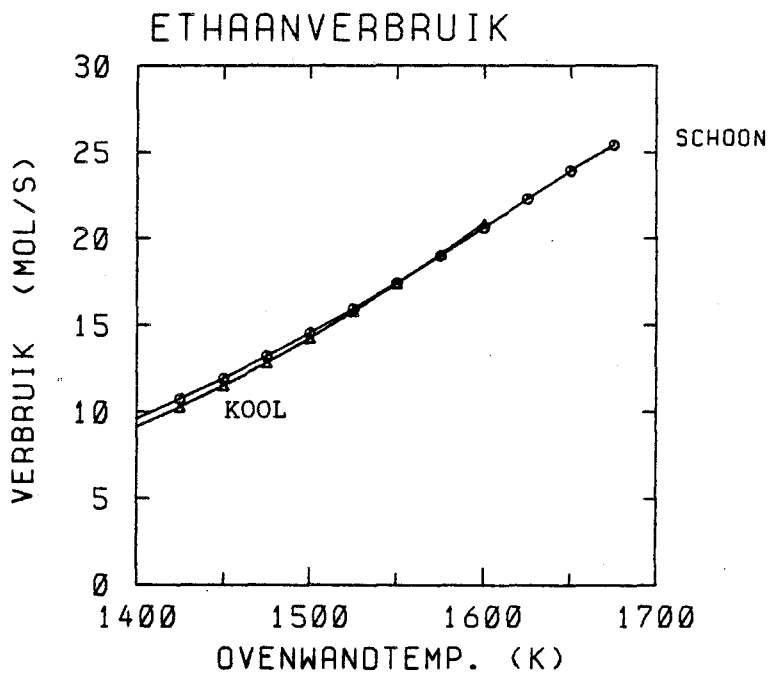


fig. 4.28 Ethaanverbruik bij schone en opgekoolde buis

De produktie van etheen stijgt door de grote ethaanomzet.
De daling van de selektiviteit verzwakt echter de stijging, zodat de kromme in fig. 29 bij hoge ovenwandtemperatuur vlakker wordt.

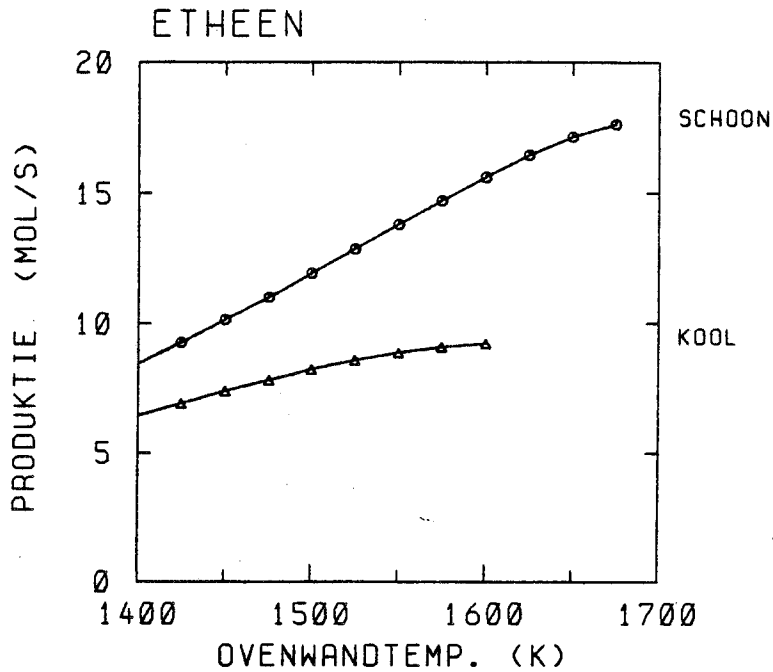


fig. 4.29 Etheenproduktie
bij schone en
opgekoelde buis

Bij hogere ovenwandtemperatuur gaat de opkoling sneller door de hogere ethaanomzet en de lagere selektiviteit (fig.30).

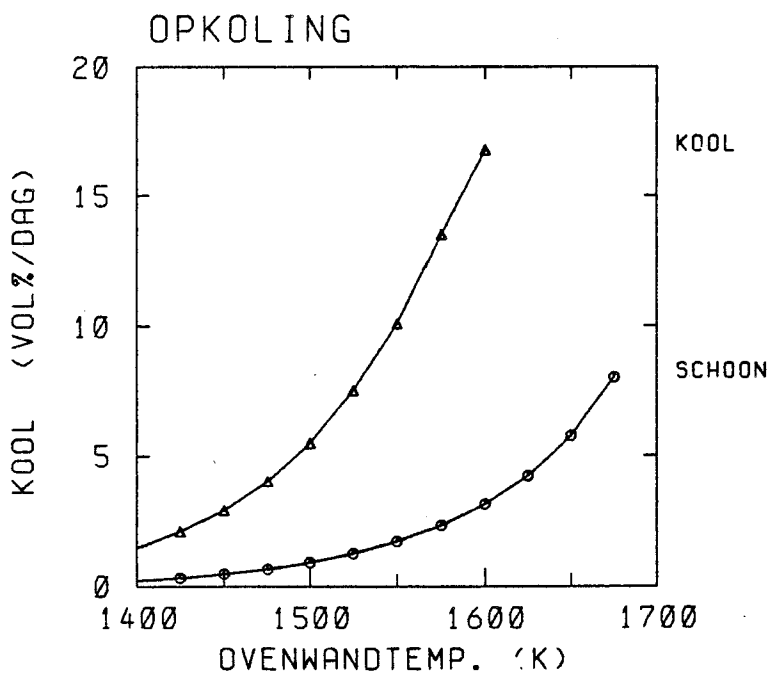


fig. 4.30 Opkoolsnelheid
schone en
opgekoelde buis

Momentane winst

Bij hogere ovenwandtemperatuur wordt meer momentane winst gemaakt. (fig. 31) Dit wordt voornamelijk veroorzaakt door de toegenomen ethaanomzet. Daarnaast stijgt echter ook de momentane winst per mol verbruikt ethaan. Bij schone buis bedraagt deze stijging 6% wanneer de ovenwandtemperatuur stijgt van 1400 K tot 1675 K.

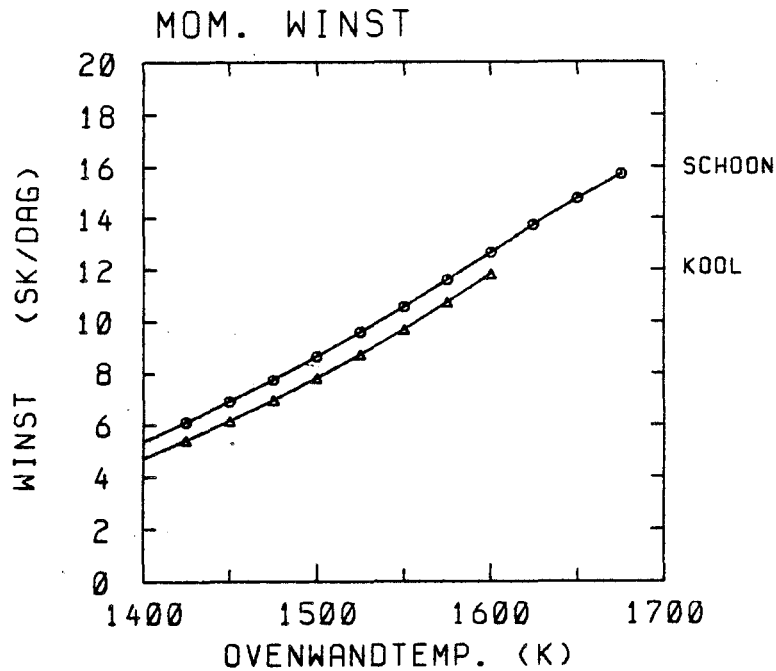


fig. 4.31 Momentane winst bij schone en opgekoelde buis

Gevoeligheden

Wanneer de ingangsdruk of de buiswandtemperatuur de limiet bereikt kan de betreffende grootte worden verlaagd door variaties in de voeding, stroomflow of ovenwandtemperatuur. Deze variaties hebben uiteraard ook invloed op de momentane winst.

Stel dat we de buiswand willen koelen door een verhoging van de voeding. Dit heeft een daling van de winst tot gevolg. Het quotiënt van de winstverandering en de temperatuurverandering ($0.020 \frac{\text{SK/d}}{\text{K}}$) geeft een aanwijzing of vergroting van de voeding geschikt is om de buiswandtemperatuur te verlagen. Hiervoor moet deze gevoeligheid

worden vergeleken met dezelfde gevoeligheid voor bijvoorbeeld verlaging van de temperatuur van de ovenwand ($0.032 \frac{SK/d}{K}$). Deze gevoeligheid is groter, wat betekent dat het verlagen van de ovenwandtemperatuur een grotere winstdaling tot gevolg heeft dan vergroting van de voeding, bij dezelfde afkoeling van de buiswand. Vergroting van de voeding verdient daarom de voorkeur.

Fig.32 geeft een overzicht van de verschillende gevoeligheden. De getallen gelden voor de opgekoolde buis met $TW=1500$ K en $FS=5$ mol/s. De gevoeligheden die betrekking hebben op de ingangsdruk zijn berekend voor $FI=25$ mol/s. De druk is dan 6 atm.

De gevoeligheden die te maken hebben met de buiswandtemperatuur gelden voor $FI=19$ mol/s. Hierbij is de temperatuur 1300 K.

In de tabel staan tevens de gevoeligheden die betrekking hebben op het vertragen van de opkoling. Hier is $FI=20$ mol/s.

VARIATIE in:	DRUKLIMIET $(\frac{SK/d}{atm})$	TEMP.LIMIET $(\frac{SK/d}{K})$	OPKOOLSNELHEID $(\frac{SK/d}{vol\%/d})$
VOEDING	-0.72	0.020	0.23
STOOMFLOW	-0.40	—	0.23
OVENWANDTEMP.	10	0.032	0.54

fig. 4.32 Gevoeligheid van de momentane winst voor verandering van ingangsdruk, buiswandtemperatuur en opkoolsnelheid ten gevolge van een variatie in een stuurgrootheid.

Doordat de invloed van de stroomflow op de buiswandtemperatuur niet altijd van hetzelfde teken is, kan hiervoor geen gevoeligheid worden berekend.

Het blijkt dat de ovenwandtemperatuur niet moet worden gebruikt om de ingangsdruk te verlagen. Dit kost geld, terwijl gebruik van voeding of stroomflow juist geld oplevert (negatieve gevoeligheden).

Verder blijkt de ovenwandtemperatuur niet geschikt te zijn voor verlaging van de buiswandtemperatuur. Dit kan goedkoper gedaan worden met de voeding.

Iets soortgelijks geldt voor de vertraging van de opkoling. Het gebruik van de ovenwandtemperatuur is duidelijk duurder dan gebruik van voeding of stroomflow.

Uit het bovenstaande kan de konklusie worden getrokken dat de ovenwandtemperatuur altijd zo hoog mogelijk moet worden gekozen, om de momentane winst te maximaliseren.

De opkoling kan net zo goed worden vertraagd door toevoeren van extra ethaan als door het gebruik van stoom. In beide gevallen daalt de momentane winst met 0.23 SK/d wanneer de opkoolsnelheid met 1 vol%/d wordt vertraagd.

4.5 Konklusies

Uit de bestudering van het gedrag van de oven bij schone en opgekoolde reaktorbus, kunnen de volgende konklusies worden getrokken:

- Het opkoolmodel is gebaseerd op hogere koolwaterstoffen (C_4+). De kinetiek geeft onvoldoende informatie over de vorming van deze stoffen. Dit geeft aanleiding tot onnauwkeurigheden bij de beschrijving van het kraakproces en de opkoling.
- Als vuistregel kan worden gesteld dat optimaliseren van de momentane winst overeenkomt met maximaliseren van de ethaanomzet, ook bij opgekoolde bus.
- Een optimale momentane winst wordt bereikt door:
 - * Geen stoom toe te voeren
 - * De ovenwandtemperatuur zo hoog mogelijk te kiezen (Bij optimaliseringen geldt een maximum van 1500 K)
 - * De voeding in te stellen op maximale ethaanomzet. (FI = 20 mol/s bij TW = 1500 K)
- De buswandtemperatuur kan het beste worden beheerst met behulp van de voeding. Het gebruik van de ovenwandtemperatuur is te duur, terwijl de stroomflow geen duidelijke invloed heeft op de temperatuur.
- Verlaging van de ingangsdruk kan worden bereikt door verlaging van de voeding of de stroomflow. De momentane winst stijgt hierbij. Gebruik van de ovenwandtemperatuur om de druk te verlagen geeft een daling van de momentane winst.
- Wanneer de sturing zó wordt gekozen dat de momentane winst momentaan is, wordt alleen bij zeer sterke opkoling de limiet (6 atm.) voor de ingangsdruk bereikt.

- Vertraging van de opkoling kan met gelijke vermindering van momentane winst worden bereikt door toevoegen van ethaan of stoom. Het gebruik van de ovenwandtemperatuur is duurder.
- Opkoling heeft slechts weinig invloed op de conversie en het ethaanverbruik. De nadelige gevolgen van opkoling voor de winst berusten op een dalende selektiviteit.
- Naarmate meer kool wordt gevormd, wordt het bereik waarover voeding en stroomflow mogen worden gevarieerd, steeds kleiner. Te hoge flows leiden tot een te hoge ingangsdruk, te lage flows veroorzaken een te hoge buiswandtemperatuur. Wanneer de kool ca.30% van het volume van de schone buis inneemt, kan niet meer worden voldaan aan de beperkingen op druk en temperatuur (bij $T_W=1500$ K).
- De voeding moet niet lager worden gekozen dan voor maximaliseren van de momentané winst nodig is (≈ 20 mol/s). Lagere voeding leidt alleen maar tot hogere temperaturen en snellere opkoling, terwijl verlaging van de ingangsdruk in dit gebied niet nodig is.
- De ovenwandtemperatuur moet niet lager dan 1500 K worden gekozen.

Hfdst. 5. STATISCH EN MOMENTAAN OPTIMALISEREN

In dit hoofdstuk worden het statisch en momentaan optimaliseren van de oven besproken.

Bij statisch optimaliseren wordt in het optimaliseringskriterium (gemiddelde winst) rekening gehouden met de gevolgen van de opkoling. De sturing is tijd-onafhankelijk, in tegenstelling tot de tijd-afhankelijke sturing bij momentaan optimaliseren. Het kriterium is bij momentaan optimaliseren echter veel eenvoudiger, namelijk de momentane winst. Hierin komen de gevolgen van de toekomstige koolvorming niet tot uitdrukking.

Beide aspecten, een kriterium waarin de gevolgen van toekomstige opkoling zijn opgenomen en een tijd-afhankelijke sturing, worden samengebracht bij de dynamische optimalisering (zie hoofdstuk 6).

Wanneer geen grens wordt gesteld aan de ovenwandtemperatuur, loopt deze op tot boven 1900 K. Omdat dit naar alle waarschijnlijkheid boven de materiaalgrenzen ligt, is na overleg met de industrie een beperking tot 1500 K ingevoerd. Deze beperking is toegepast bij alle optimalisering die in dit verslag worden besproken.

De statische en momentane optimalisering zijn uitgevoerd door Ir. J. van der Heijden.

5.1 Statisch optimaliseren: probleemstelling

De probleemstelling bij statisch optimaliseren luidt:

Zoek bij gegeven bedrijfstijd t_b een tijd-onafhankelijke sturing, zodanig dat de gemiddelde winst over de cyclus ($w_{\text{gem}}(t_b)$) maximaal is, en op elk tijdstip t ($0 \leq t \leq t_b$) de ingangsdruk en de buiswandtemperatuur hun limieten niet overschrijden.

De optimale bedrijfstijd wordt gevonden door bij verschillende bedrijfstijden een statische optimalisering uit te voeren. De bedrijfstijd waarbij de hoogste gemiddelde winst wordt gevonden is optimaal.

5.2 Statisch optimaliseren: resultaten

In fig.1 t/m 7 zijn de resultaten van de statische optimaliseringen bij verschillende bedrijfstijden samengevat. In deze grafieken staat langs de horizontale as niet de tijd uit, zoals in hoofdstuk 4, maar de bedrijfstijd. Elk punt op een kromme is een resultaat van een afzonderlijke statische optimalisering.

Sturing en opkoling

Fig. 1 geeft voor enkele bedrijfstijden de voeding en stoomflow bij statisch optimale sturing. De ovenwandtemperatuur is steeds 1500 K.

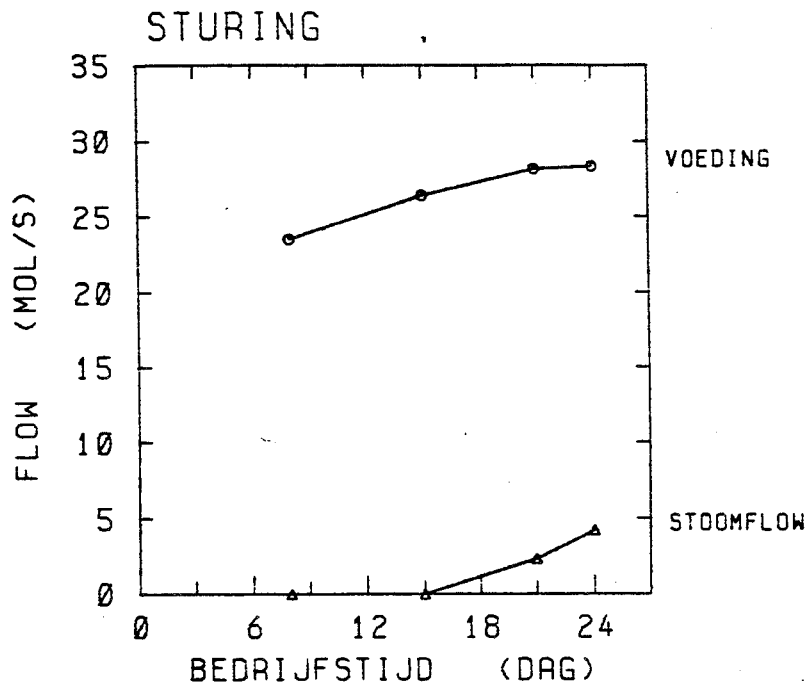


fig. 5.1 Statisch optimale voeding en stoomflow als functie van de bedrijfstijd.

Bij langere bedrijfstijden wordt meer ethaan en stoom toegevoerd om de opkoling te vertragen. Dit is in overeenstemming met de conclusies in paragraaf 4.5 .

Wanneer de bedrijfstijd toeneemt vindt een verschuiving plaats van het gebruik van extra ethaan naar het toevoeren van meer stoom.

Voor kleine bedrijfstijden is de stoomflow nul. Een sturing waarbij een zekere hoeveelheid stoom wordt toegevoerd leidt, ook met de bijbehorende optimale voeding, tot lagere opbrengsten doordat minder ethaan wordt omgezet. De opkoling en de selectiviteit blijven ongeveer hetzelfde, zodat geen gunstige verschuiving van nevenprodukten

naar ethaan ontstaat. Bovendien is de kostenvermindering door minder ethaanomzet en lagere scheidingskosten te gering om een daling van de opbrengst te compenseren. Het toevoegen van stoom leidt bij kleine bedrijfstijden daarom tot lagere gemiddelde winst.

Bij langere bedrijfstijden (vanaf 15 dagen) wordt wel stoom toegevoerd. Dit heeft hier een duidelijke stijging van de selectiviteit tot gevolg, wat de daling van de opbrengsten gedeeltelijk compenseert. De daling van de ethaankosten en de scheidingskosten is nu wel voldoende om de winst te laten stijgen. Dit verklaart de verschuiving van het gebruik van meer ethaan naar het toevoeren van meer stoom bij langere bedrijfstijden.

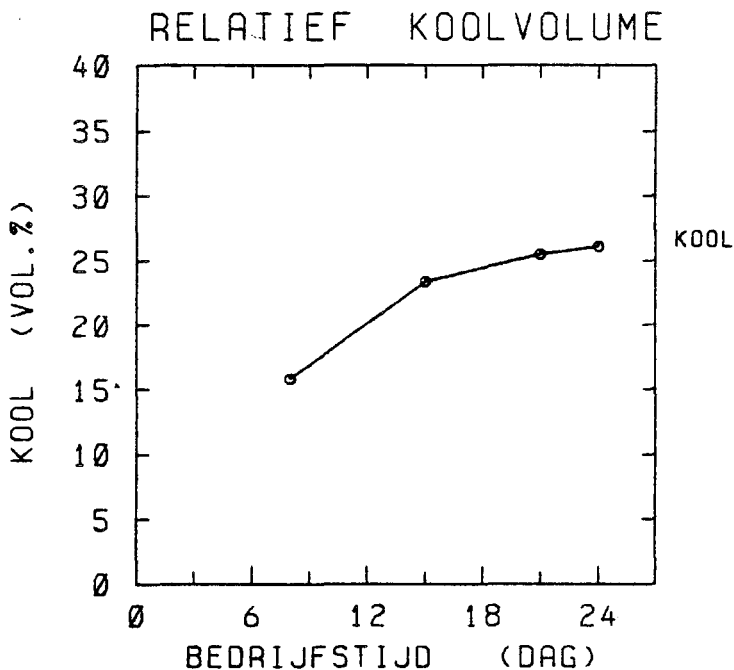


fig. 5.2 Opkoling als funktie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing.

Fig.2 laat zien dat bij langere bedrijfstijden het koolvolume op de bedrijfstijd groter wordt. Omdat dit volume niet boven de 30% van het volume van de schone buis kan stijgen, gaat de kromme bij hoge bedrijfstijden vlakker lopen. (zie paragraaf 4.5).

Ingangsdruk en buiswandtemperatuur

De hoogste buiswandtemperatuur wordt steeds bereikt op het laatste tijdstip, wanneer de opkoling het verst is gevorderd. Zoals gezien (fig.2) bevat de buis bij langere bedrijfstijden dan meer kool en moet bovendien de doorzet hoger worden gekozen (fig.1). Hierdoor wordt de druk groter bij langere bedrijfstijden (fig.3). De limiet van 6 atm. wordt niet bereikt.

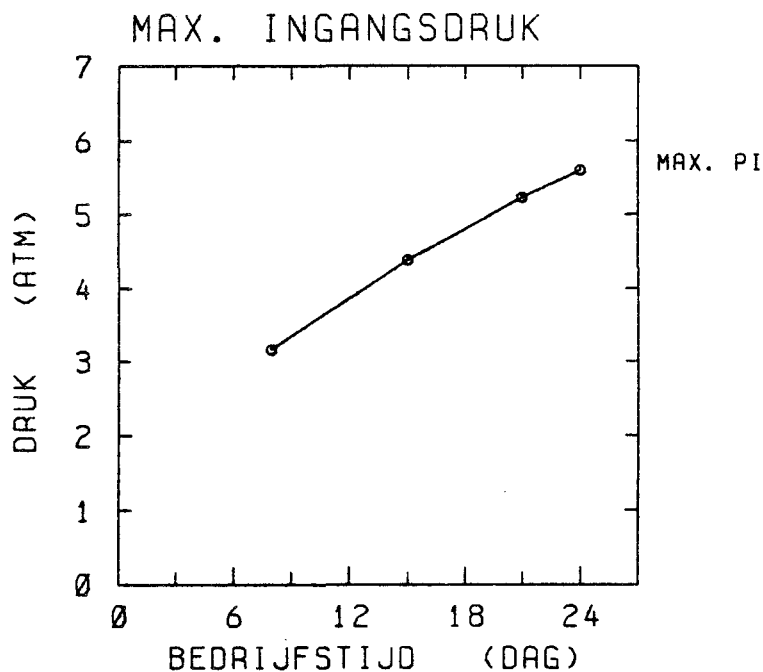


fig. 5.3 Hoogste ingangsdruk als funktie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing

De buiswandtemperatuur is niet erg afhankelijk van de bedrijfstijd. De grotere opkoling bij langere bedrijfstijd veroorzaakt weliswaar een stijging van de temperatuur, maar hier staat tegenover dat de voeding wordt vergroot, wat een koelende werking heeft. De limiet van 1300 K wordt niet bereikt (fig.4).

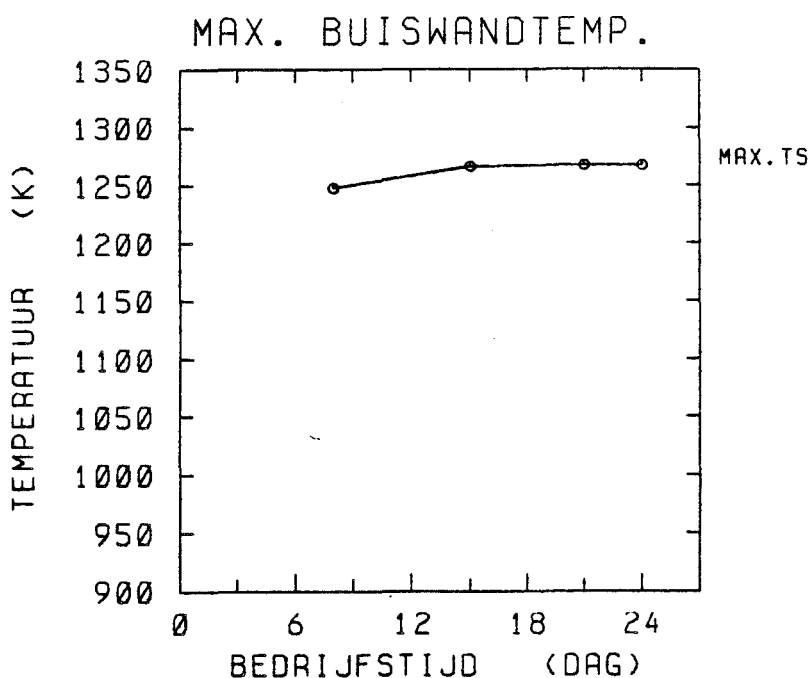


fig. 5.4 Hoogste buiswandtemperatuur als functie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing

Gemiddelde_winst, optimale_bedrijfstijd

Fig.5 laat zien dat de gemiddelde winst, het optimaliseringskriterium, maximaal is voor bedrijfstijden tussen 15 en 21 dagen. De gemiddelde winst is dan 7.26 SK/dag.

De winstkromme is zeer vlak. Een bedrijfstijd van 24 dagen levert nog altijd 99.5% van de winst bij optimale bedrijfstijd.

Het blijkt dat de schoonmaaktijd (1.5 dagen) bepalend is voor de grootte van de optimale bedrijfstijd. Een schoonmaaktijd van drie dagen zou tot een optimale bedrijfstijd langer dan 24 dagen leiden.

Wanneer een schoonmaakbeurt geen tijd zou vergen, dan was de optimale bedrijfstijd waarschijnlijk enkele uren. Deze tijd wordt dan bepaald door de tijd die nodig is om de schoonmaakkosten terug te verdienen. Bij een schoonmaaktijd van 1.5 dagen spelen deze kosten geen rol.

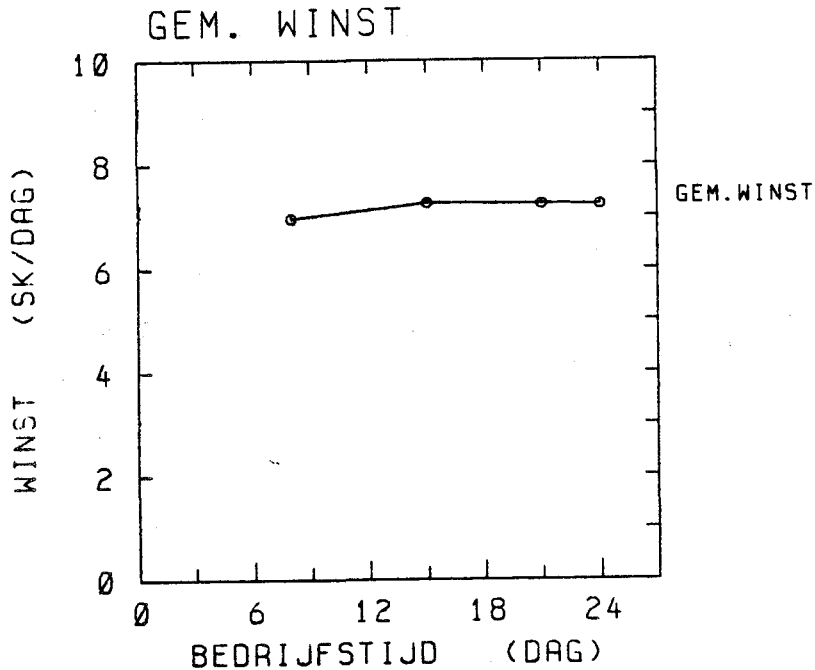


fig. 5.5 Gemiddelde winst als functie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing.

Conversie en selectiviteit, ethaanverbruik en etheenproductie

Het gebruik van hogere voeding en stroomflow bij langere bedrijfstijd leidt tot een lagere conversie en een iets hogere selectiviteit. In fig.6 zijn de gemiddelde conversie en selectiviteit uitgezet tegen de bedrijfstijd. Deze grootheden zijn gedefinieerd als resp. het totale ethaanverbruik gedeeld door de totale voeding en de totale etheenproductie gedeeld door het totale ethaanverbruik. In formule:

$$\text{Conv}_{\text{gem}} = \frac{\int_0^{t_b} \text{FC}(t) dt}{\int_0^{t_b} \text{FI}(t) dt}$$

$$\text{Sel}_{\text{gem}} = \frac{\int_0^{t_b} \text{FC}_{2\text{H}_4}(t) dt}{\int_0^{t_b} \text{FC}(t) dt}$$

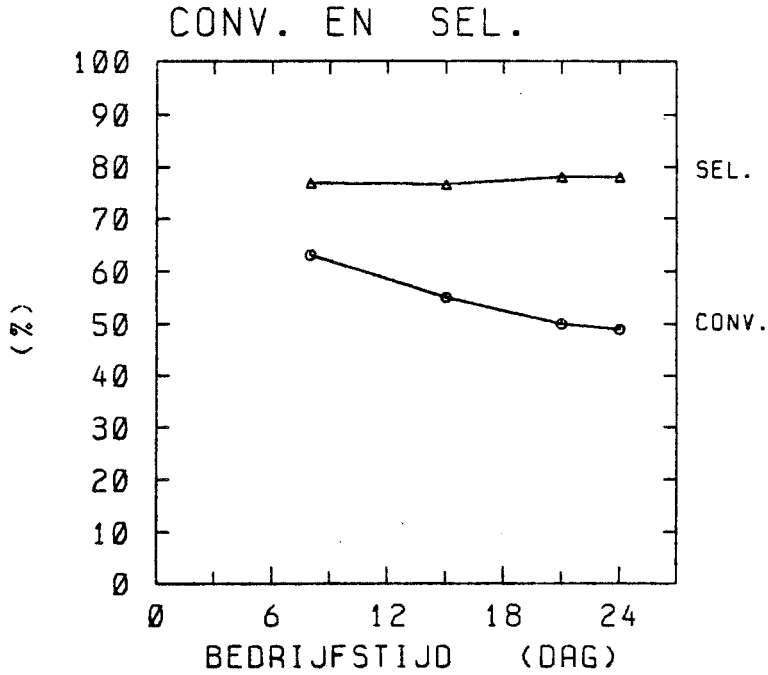


fig. 5.6 Conversie en selectiviteit als functie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing. (gemiddelde waarden).

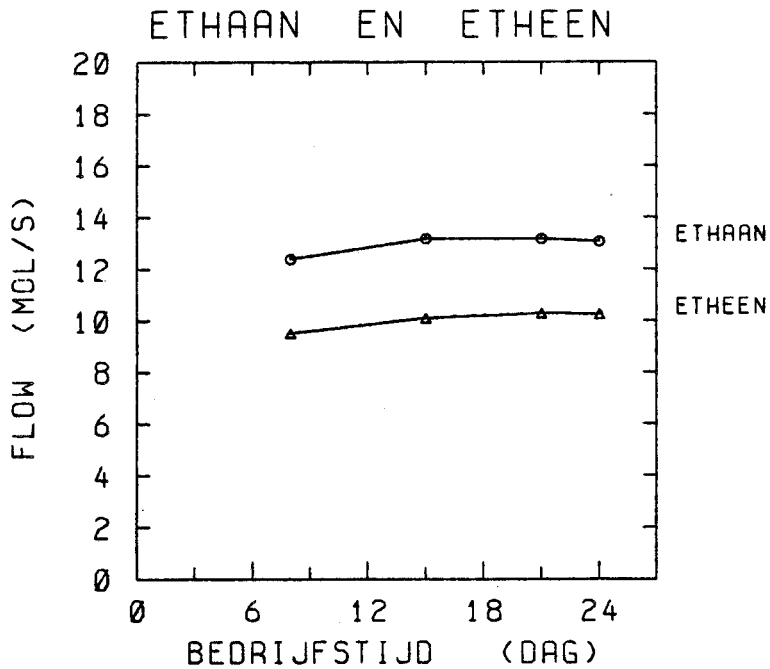


fig. 5.7 Ethaanverbruik en etheenproduktie als functie van de bedrijfstijd bij statisch optimale sturing. (gemiddelde waarden).

Het gemiddelde ethaanverbruik en de gemiddelde etheenproduktie (beide gemiddeld over de cyclustijd) gaan bij toenemende bedrijfstijd door een maximum. Doordat de schoonmaaktijd een steeds kleinere rol gaat spelen bij de middeling nemen beide grootheden eerst toe. Bij grotere bedrijfstijden ontstaat echter weer een daling, als gevolg van de toenemende stroomflow. (zie fig.7).

In paragraaf 4 van dit hoofdstuk zullen de resultaten van de statische optimalisering worden vergeleken met die van het momentaan optimaliseren. Hierbij zal gebruik worden gemaakt van de statische optimalisering over de optimale bedrijfstijd van 21 dagen.

5.3 Momentaan optimaliseren: probleemstelling

De probleemstelling bij momentaan optimaliseren luidt:

Zoek een tijd-afhankelijke sturing, zodanig dat op elk tijdstip t de momentane winst ($w_{\text{mom}}(t)$) maximaal is en de ingangsdruk en buiswandtemperatuur hun limieten niet overschrijden.

Momentaan optimaliseren is een stap-voor-stap aanpak, waarbij geen rekening wordt gehouden met de nadelige gevolgen (opkoling), die het maximaliseren van de onmiddellijke (momentane) winst met zich mee brengt.

Deze vorm van optimaliseren leidt in het begin tot hoge momentane winst. Door de opkoling neemt deze winst echter snel af. Zodra het niet meer mogelijk is om aan de beperkingen te voldoen, is de maximale bedrijfstijd bereikt en moet de oven worden ontkoold.

De bedrijfstijd kan vrij worden gekozen tussen nul en dit maximum..

5.2 Momentaan optimaliseren: resultaten

In fig.8 t/m 15 worden de resultaten van de momentane optimalisering gepresenteerd in vergelijking met de statische optimalisering bij de optimale bedrijfstijd van 21 dagen.

In deze grafieken is de horizontale as een gewone tijdas.

Sturing en opkoling

Bij momentaan optimaliseren is de voeding duidelijk kleiner dan bij statisch optimaliseren (fig.8). In overeenstemming met de konklusies uit paragraaf 4.5 blijkt de optimale waarde 20 mol/s te zijn. Op het einde van de bedrijfstijd loopt de voeding nog even op, om de buiswandtemperatuur niet groter dan 1300 K te laten worden.

De stoomflow is bij momentaan optimaliseren nul (fig.8). Het toevoegen van stoom is immers nadelig voor de momentane winst.

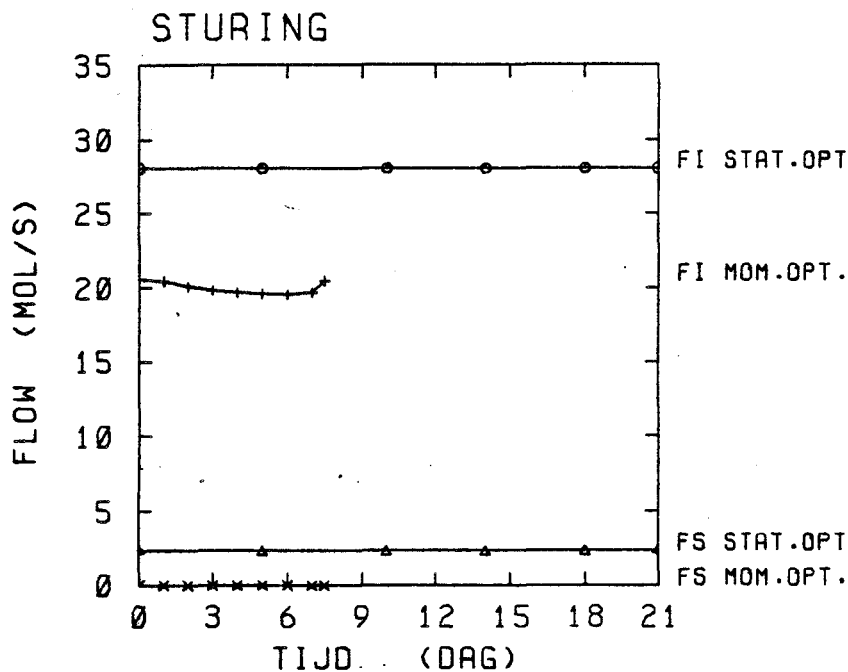


fig. 5.8 Voeding en stoomflow bij momentaan en statisch optimaliseren.

Fig. 9 laat zien dat bij momentaan optimaliseren de opkoling zeer snel verloopt. Al na $7\frac{1}{2}$ dag wordt bijna 30% van het buisvolume ingenomen door kool, tegen slechts 8% bij statisch optimaliseren. Zoals gezien in hoofdstuk 4, is een koolvolume van 30% de uiterste grens waarbij het nog mogelijk is aan de druk- en temperatuurbeperving te voldoen. De maximale bedrijfstijd bij momentaan optimaliseren is dan ook $7\frac{1}{2}$ dag.

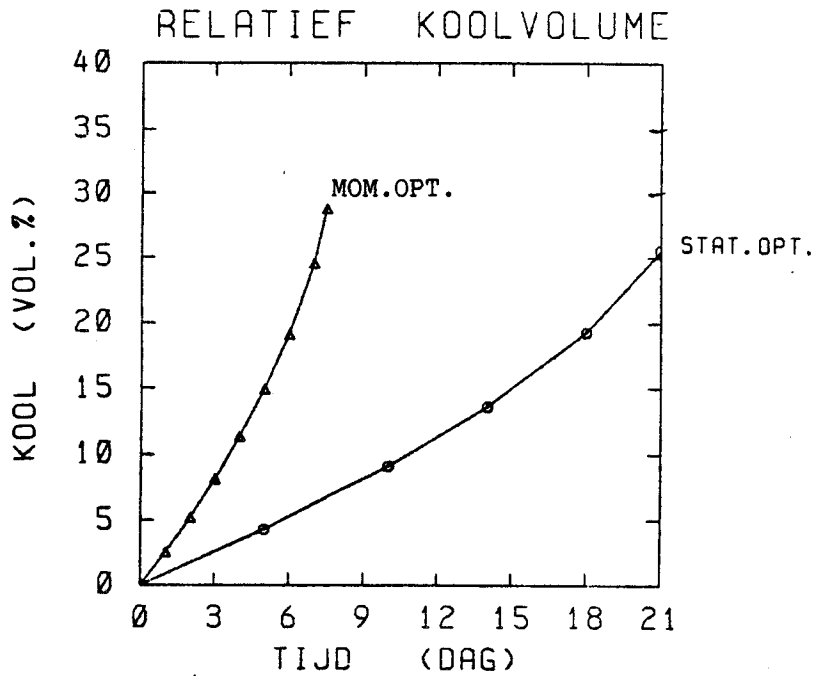


fig. 5.9 Koolvolume bij momentaan en
statisch optimaliseren.

De snelle opkoling wordt veroorzaakt door de lage voeding en het ontbreken van stoom in het reaktiemengsel. Omdat deze grootheden zo worden gekozen dat de momentane winst maximaal is, ontstaat behalve een hoge ethaanomzet ook een hoge opkoolsnelheid (zie hoofdstuk 4). We merken hier dat bij momentaan optimaliseren geen rekening wordt gehouden met opkoleffecten op latere tijdstippen.

Ingangsdruk en buiswandtemperatuur

Bij momentaan optimaliseren bereikt de ingangsdruk de limiet van 6 atm. op het laatste tijdstip. In fig.10 is dit niet te zien, als gevolg van de keuze van de tijddiscretisatie.

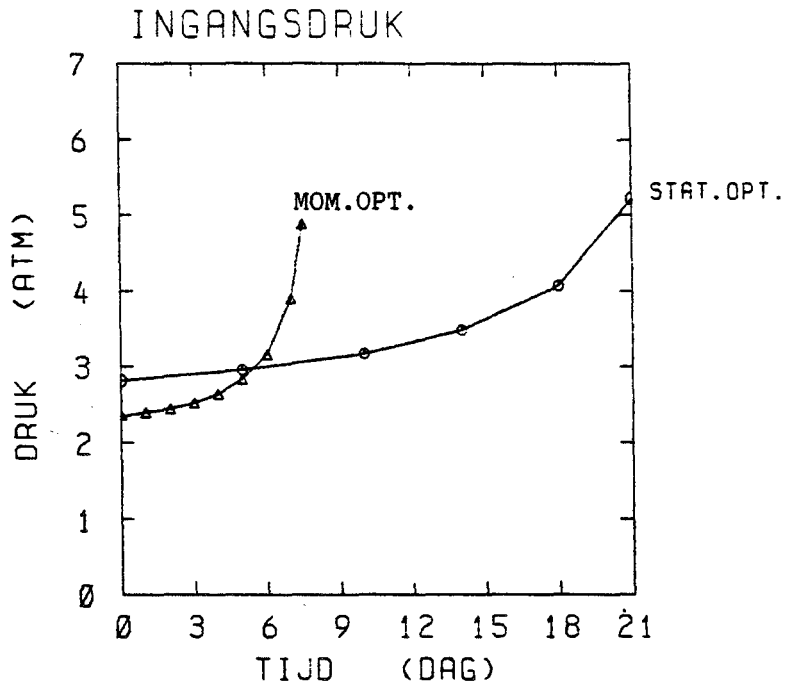


fig. 5.10 Ingangsdruk bij momentaan en statisch optimaliseren.

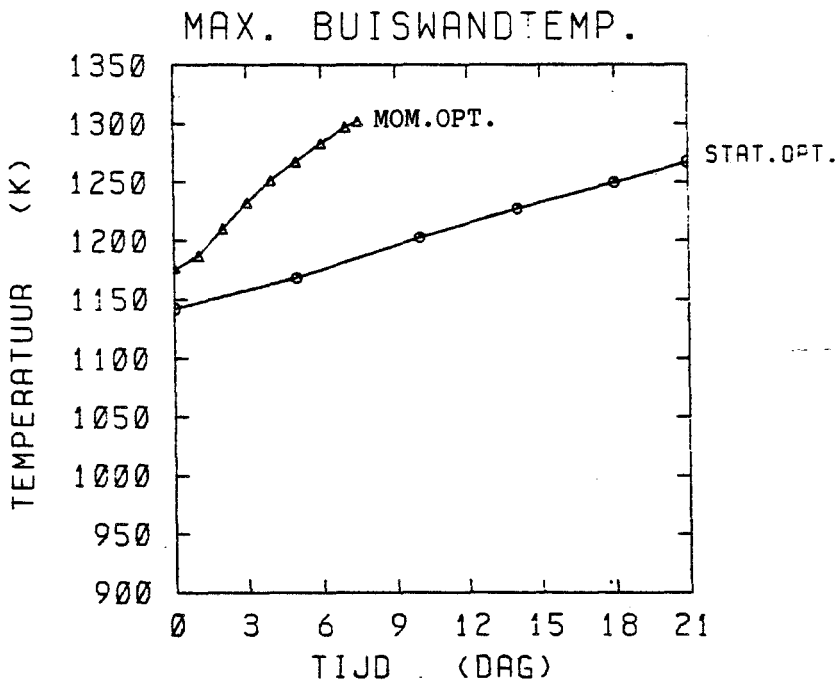


fig. 5.11 Hoogste buiswandtemperatuur bij momentaan en statisch optimaliseren

De buiswandtemperatuur bereikt de limiet van 1300 K op het laatste tijdstip (7½ dag). Tot op dat moment blijft het mogelijk de top van de kromme van de momentane winst te bereiken bij een buiswandtemperatuur lager dan 1300 K. (zie hoofdstuk 4, fig.21 en 24).

Winst

Door de snelle opkoling daalt de momentane winst duidelijk sneller dan bij statisch optimaliseren.(fig.12). Na een hogere beginwaarde wordt na ongeveer 5 dagen de winst bij momentaan optimaliseren gelijk aan die bij het statische optimum. Na 7½ dag is de opkoling zo ver gevorderd dat de oven moet worden ontkoold. Met de statisch optimale sturing wordt echter nog winst gemaakt tot aan de geplande bedrijfstijd van 21 dagen.

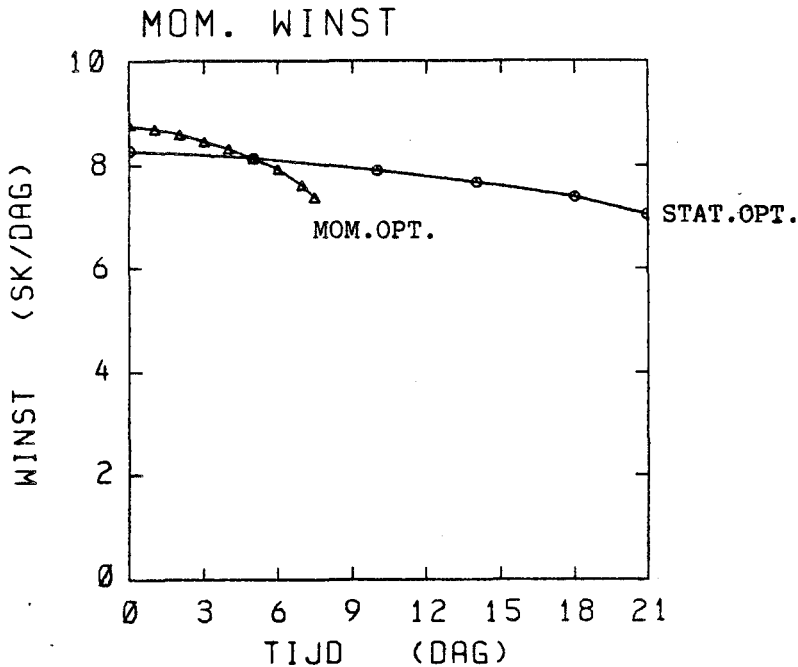


fig. 5.12 Momentane winst bij momentaan en statisch optimaliseren

De hoogste gemiddelde winst die met momentaan optimaliseren wordt behaald is 6.79 SK/dag na de maximale bedrijfstijd van $7\frac{1}{2}$ dag. De statische optimalisering levert over de optimale bedrijfstijd van 21 dagen een gemiddelde winst van 7.26 SK/dag, dus 6.9% meer.

Een statische optimalisering over 8 dagen, een bedrijfstijd die vrijwel gelijk is aan die bij momentaan optimaliseren, levert 6.95 SK/dag. Dit is 2.4% meer dan momentaan optimaliseren opbrengt.

Conversie en selektiviteit, ethaanverbruik en etheenproduktie

Bij momentaan optimaliseren liggen de conversie en het ethaanverbruik op een hoger niveau dan bij statisch optimaliseren. Beide grootheden zijn ongevoelig voor de opkoling (zie paragraaf 4.1), zodat ze in de loop van de tijd niet veel veranderen (fig.13 en 15).

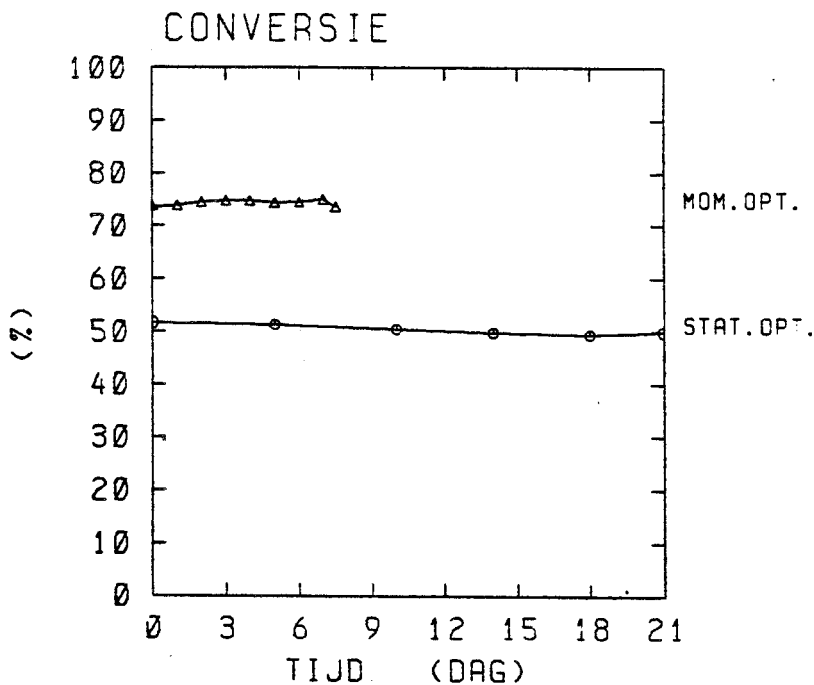


fig. 5.13 Conversie bij momentaan en statisch optimaliseren

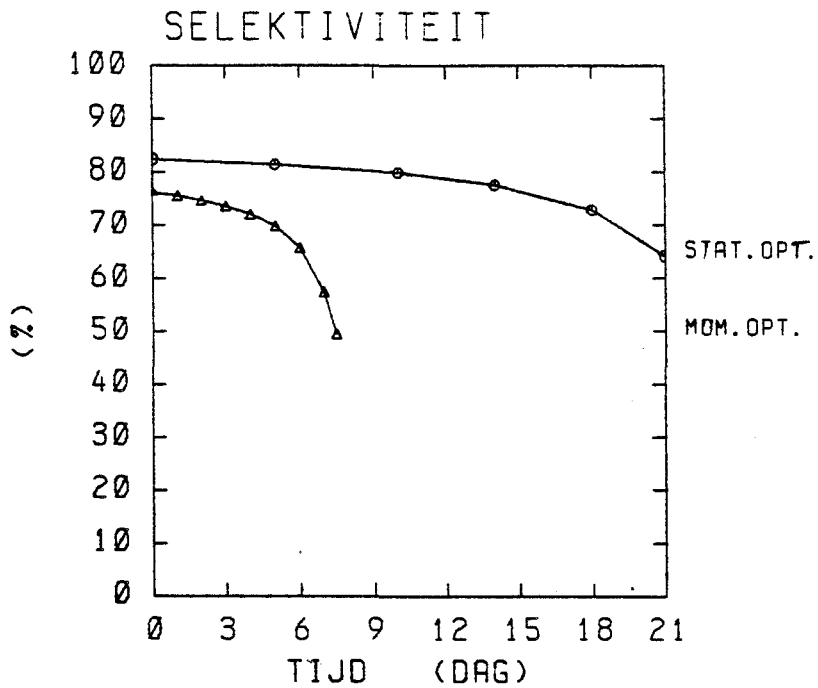


fig. 5.14 Selektiviteit bij momentaan en statisch optimaliseren

De selektiviteit daalt door de snelle opkoling bij momentane optimalisering meer dan bij statisch optimaliseren (fig.14). Dit verklaart de snelle daling van de etheenproduktie.(fig.15).

Bij een vrijwel konstant ethaanverbruik is de selektiviteit in hoge mate bepalend voor de momentane winst. De daling van de selektiviteit bij de momentaan optimale sturing is dan ook de oorzaak van de daling van de momentane winst.

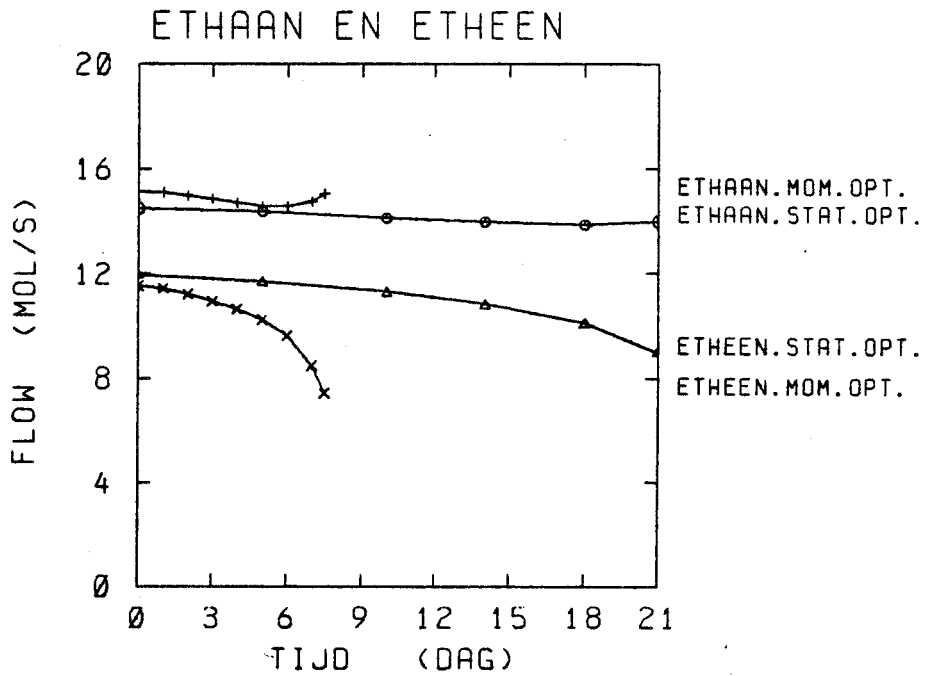


fig. 5.15 Ethaanverbruik en etheenproduktie bij momentaan en statisch optimaliseren.

De resultaten van de statische en de momentane optimalisering zullen in het volgende hoofdstuk worden vergeleken met die van dynamisch optimaliseren.

Hfdst. 6. DYNAMISCH OPTIMALISEREN

In dit hoofdstuk wordt het dynamisch optimaliseren van de oven besproken. Na een korte behandeling van de techniek van deze vorm van optimaliseren zal een overzicht worden gegeven van de resultaten bij verschillende bedrijfstijden. In de laatste paragraaf van dit hoofdstuk wordt dynamisch optimaliseren vergeleken met de statische en momentane optimalisering.

6.1 Theorie

De probleemstelling bij dynamisch optimaliseren luidt als volgt:

Zoek bij gegeven bedrijfstijd t_b een tijd-afhankelijke sturing, zodanig dat de gemiddelde winst over de cyclus ($W_{\text{gem}}(t_b)$) maximaal is, en op elk tijdstip t ($0 \leq t \leq t_b$) de ingangsdruk en buiswandtemperatuur hun limieten niet overschrijden.

Het verschil met statisch optimaliseren wordt gevormd door de tijd-afhankelijkheid van de sturing, waardoor meer vrijheidsgraden beschikbaar zijn. Hierdoor kan een hogere winst worden behaald.

Dynamisch optimaliseren onderscheidt zich van momentaan optimaliseren door het gebruik van de gemiddelde winst in plaats van de momentane winst. Dit maakt de stap-voor-stap aanpak onmogelijk, omdat op ieder moment rekening moet worden gehouden met de gevolgen die de sturing heeft voor de momentane winst op alle latere tijdstippen.

De combinatie van tijd-afhankelijke sturing en het gebruik van de gemiddelde winst als optimaliseringskriterium maakt dynamisch optimaliseren een wiskundig lastig probleem.

Een belangrijke complicatie wordt gevormd door de limieten op de ingangsdruk en de buiswandtemperatuur. Er bestaat geen direkt bruikbare wiskundige techniek om dergelijke "toestandsbeperkingen" te behandelen.

Verderop in deze paragraaf zullen we zien dat met behulp van een andere formulering van de beperkingen toch een zinvolle optimalisering mogelijk is.

Voor alle uitgevoerde optimaliseringen geldt een begrenzing van de ovenwandtemperatuur tot 1500 K.

De optimaliseringen worden iteratief uitgevoerd. Te beginnen met een ruw idee over de optimale sturing wordt een reeks van veranderingen op de sturing toegepast:

$$\underline{u}^*(t) = \underline{u}(t) + s \cdot \delta \underline{u}(t)$$

Hierin bevat de stuurvektor $\underline{u}(t)$ de ovenwandtemperatuur, voeding en stroomflow. Verder is s een stapgrootte en $\delta \underline{u}(t)$ een "zoekrichting". Elke iteratieslag levert een nieuwe sturing $\underline{u}^*(t)$ op, die als startpunt dient voor de volgende verandering.

De zoekrichting die de snelste verbetering van de winst geeft is de gradiënt van de winstfunctie. We zullen later in deze paragraaf zien hoe de berekening van deze gradiënt in zijn werk gaat.

Wanneer de sturing wordt veranderd in de richting van de winstgradiënt, dan blijkt steeds dat op den duur de ingangsdruk of de buiswandtemperatuur de limietwaarde bereikt. Het gezochte optimum is kennelijk een randoptimum, waarbij minstens een van beide kritische grootheden de limietwaarde heeft.

Het is hierom nuttig te weten hoe de sturing moet worden veranderd om de ingangsdruk of de buiswandtemperatuur te laten dalen. Hiervoor hebben we gradiënten van de beperkingen nodig, net zoals we de gradiënt van de winst nodig hebben om een idee te krijgen in welke richting verbetering moet worden gezocht. Ook dit komt verderop in deze paragraaf nog ter sprake.

Gradiënt van de winstfunctie

We volstaan hier met een globale behandeling van de berekening van de winstgradiënt. Voor details wordt verwezen naar bijlage C en lit/1/.

Bij het berekenen van de gradiënt doet zich de moeilijkheid voor dat elke variatie van een stuurgrootte op zeker tijdstip een verandering in de toestandsgrootheden en de momentane winst op elk volgend tijdstip tot gevolg heeft. Hierdoor is niet eenvoudig in te zien wat de afgeleide van de gemiddelde winst naar een stuurgrootte op zeker tijdstip is.

Deze moeilijkheid kan worden aangepakt met behulp van variatierkening. Men gaat hierbij uit van het idee dat variaties in de sturing u , de toestandsgröotheden x en qf , en de diameter D onafhankelijk van elkaar mogelijk zijn. De modelvergelijkingen worden vervolgens gezien als beperkingen, die met behulp van zogenoemde toegevoegde toestandsgröotheden bij de winst worden opgeteld. Deze gröotheden zijn verwant aan Lagrange-multipliers.

Door de toegevoegde gröotheden geschikte waarden te geven is het mogelijk een uitdrukking af te leiden die direkt de afgeleide geeft van de gemiddelde winst naar een stuurgrootte op zeker tijdstip. Het is dan niet meer nodig de waarden van de toestandsgröotheden op alle volgende tijdstippen uit te rekenen.

Gradiënten van de beperkingen

Omdat de beperkingen niet de vorm van een tijdintegraal hebben, is het niet mogelijk een gradiënt van ingangsdruk of buiswandtemperatuur te berekenen. Voor de winst was de berekening van de gradiënt wél mogelijk, door de vorm van de winstfunctie (zie formule 3.13).

We kiezen daarom voor een andere formulering van de beperkingen. In plaats van:

$$P_i(t) \leq 6 \text{ atm.}$$

$$TS(z, t) \leq 1300 \text{ K}$$

schrijven we:

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

$$\frac{1}{t_b \cdot L} \int_0^{t_b} \int_0^L \left[\frac{TS(z,t)}{1300 \text{ K}} \right]^m dz dt \leq 1 \quad (m > 0)$$

Deze uitdrukkingen zijn wél integralen over de bedrijfstijd, zodat nu met behulp van variatierekening de gewenste gradiënten kunnen worden berekend.

De nieuwe formulering heeft een belangrijke eigenschap, die we toelichten voor het geval van de drukbeperking.

Wanneer de druk op zeker tijdstip ruim onder de 6 atm ligt, is de integraal ongevoelig voor variaties in de druk op dat tijdstip. Alleen boven de 6 atm. zijn bij voldoende grote m drukvariaties aanleiding tot belangrijke variaties in de waarde van de integraal. De berekende gradiënt zal dan ook vooral gericht zijn op het veranderen van de druk op die tijdstippen waarop de limiet wordt overschreden. Deze eigenschap kan worden versterkt door m groter te kiezen.

Voor de buiswandtemperatuur geldt precies dezelfde redenering, maar dan ook in de plaats.

Met behulp van de gradiënten van de gemiddelde winst, de ingangsdrukbeperking en de buiswandtemperatuurbeperring zijn de dynamische optimaliseringen iteratief uitgevoerd.

6.2 Resultaten bij verschillende bedrijfstijden

In deze paragraaf zullen we de resultaten van de dynamische optimaliseringen bij enkele bedrijfstijden bespreken. Voor de verklaring van het procesgedrag wordt verwezen naar hoofdstuk 4.

Sturing en opkoling

In fig.1 en 2 zijn de dynamisch optimale voeding en stroomflow uitgezet tegen de tijd voor enkele bedrijfstijden.

De sturing vertoont steeds dezelfde trend:

- Ovenwandtemperatuur op ieder tijdstip 1500 K
(niet in grafiek gezet)
- Geleidelijk dalende voeding. Op het laatste tijdstip is de voeding 20 mol/s.
- Geleidelijk dalende stroomflow. Enkele dagen voor het einde van de bedrijfstijd wordt de stroomflow nul.

Aan de geleidelijke daling van voeding en stroomflow zien we dat bij dynamisch optimaliseren de nadruk verschuift van het vertragen van de opkoling naar het maximaliseren van de momentane winst. Omdat op het laatste tijdstip geen rekening meer hoeft te worden gehouden met de opkoling op latere tijdstippen, worden voeding en stroomflow zo gekozen dat de momentane winst maximaal is. Hierdoor is bij elke bedrijfstijd de voeding op het laatste tijdstip 20 mol/s en de stroomflow nul (zie paragraaf 4.5). In feite wordt op dit tijdstip een momentane optimalisering uitgevoerd.

Om een langere bedrijfstijd te realiseren wordt een hogere voeding en stroomflow gebruikt. Bovendien wordt de stoom gedurende een langere tijd toegevoerd. Op deze manier ontstaat een grotere vertraging van de opkoling.

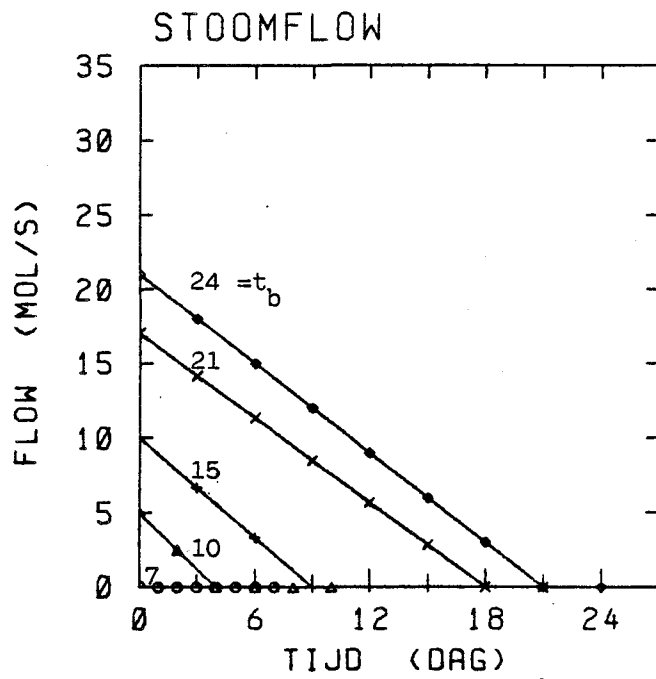
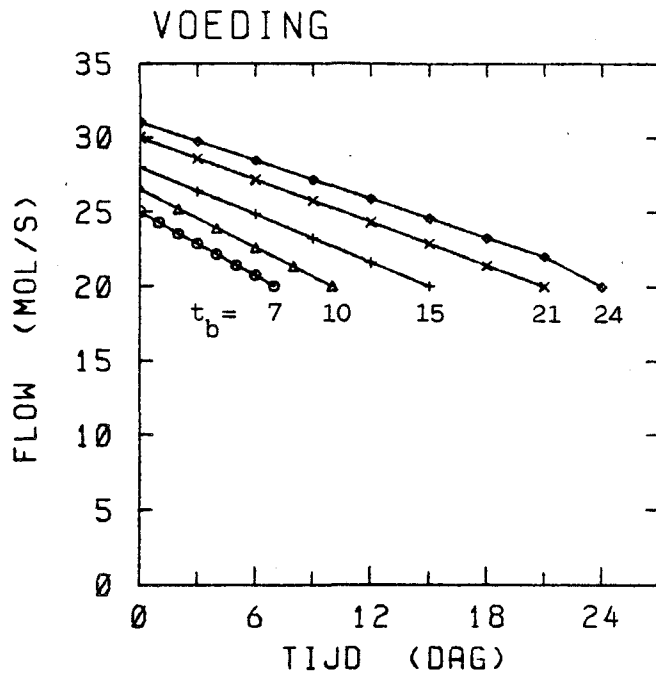


fig. 6.1 en 6.2 Dynamisch optimale voeding en stroomflow bij enkele bedrijfstijden.

Fig.3 laat het verloop van de opkoling zien bij verschillende bedrijfstijden. Bij langere bedrijfstijd gaat de koolvorming merkbaar langzamer door het gebruik van een hogere voeding en stroomflow.

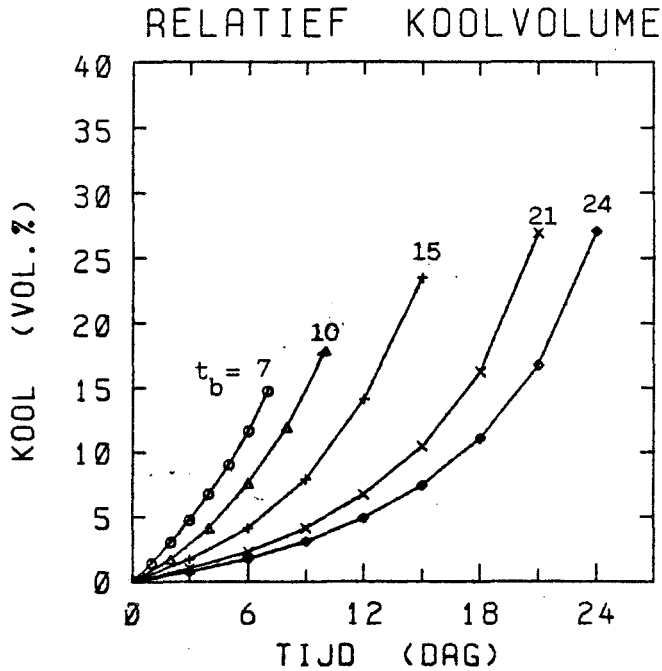


fig. 6.3 Relatief koolvolume bij dynamisch optimale sturing.

Momentane winst

In fig.4 zien we de momentane winst als functie van de tijd. Door het afnemen van de voeding en stroomflow ontstaat in het begin een stijging van de winst (zie ook fig.4.19). Het effect van de dalende voeding en stroomflow is hier sterker dan de invloed van de opkoling, die in het begin nog gering is.

Na verloop van tijd ontstaat door de opkoling een daling van de momentane winst.

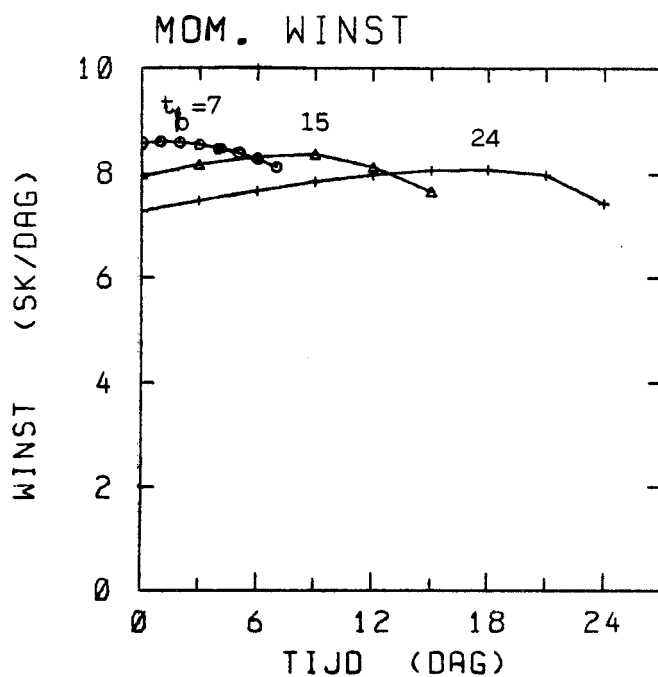


fig. 6.4 Momentane winst bij dynamisch optimale sturing.

Bij langere bedrijfstijd is de momentane winst in het begin kleiner. De sturing wordt dan zo gekozen dat de opkoling wordt vertraagd, ten koste van de momentane winst. Door de kleinere opkoolsnelheid kan het winstniveau dan langer worden gehandhaafd. Uiteindelijk komt de momentane winst bij langere bedrijfstijd hoger te liggen dan bij korte.

In fig.5 t/m 9 worden enkele grootheden gepresenteerd als functie van de bedrijfstijd. In deze grafieken komt elk punt overeen met een afzonderlijke dynamische optimalisering.

Gemiddelde_winst

In fig.5 is de gemiddelde winst uitgezet tegen de bedrijfstijd. De kromme blijkt zeer vlak te zijn. Een bedrijfstijd van 15 of 24 dagen geeft maar 0.1% minder winst dan de optimale bedrijfstijd van 21 dagen. De maximaal haalbare winst is 7.35 SK/dag. Dit is 1.2% meer dan bij statisch optimaliseren en 8% meer dan bij de momentaan optimale sturing.

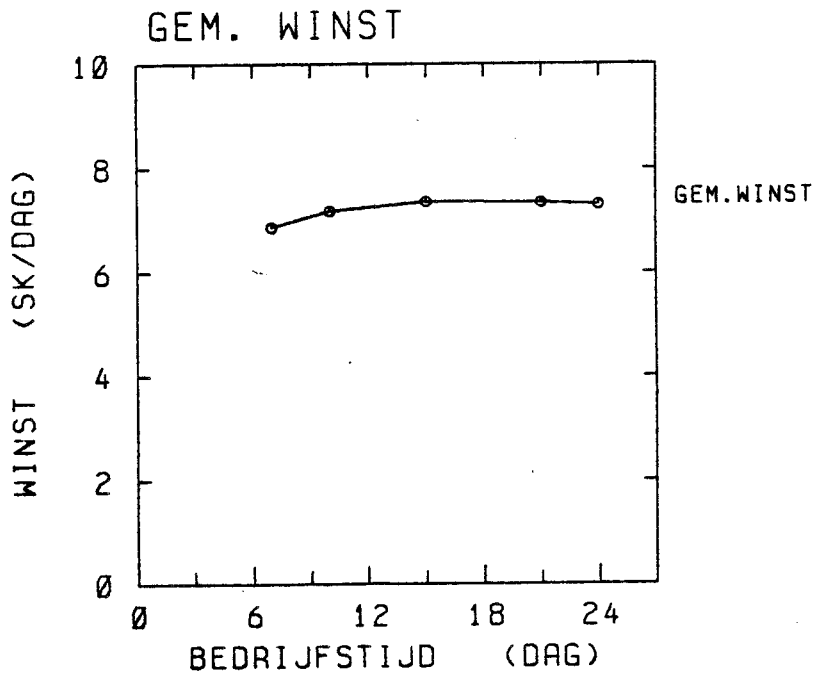


fig. 6.5 Gemiddelde winst als functie van de bedrijfstijd bij dynamisch optimale sturing.

Druk en temperatuur

De ingangsdruk blijft bij alle bedrijfstijden beneden de limiet van 6 atm. (fig.6). De hoogste ingangsdruk wordt steeds gehaald op het laatste tijdstip, wanneer de opkoling het sterkst is. Op dat moment is de doorzet laag ($FI=20$ mol/s, $FS=0$), zodat de druklimiet niet wordt bereikt.

Bij langere bedrijfstijden wordt de druk groter, als gevolg van de grotere opkoling.

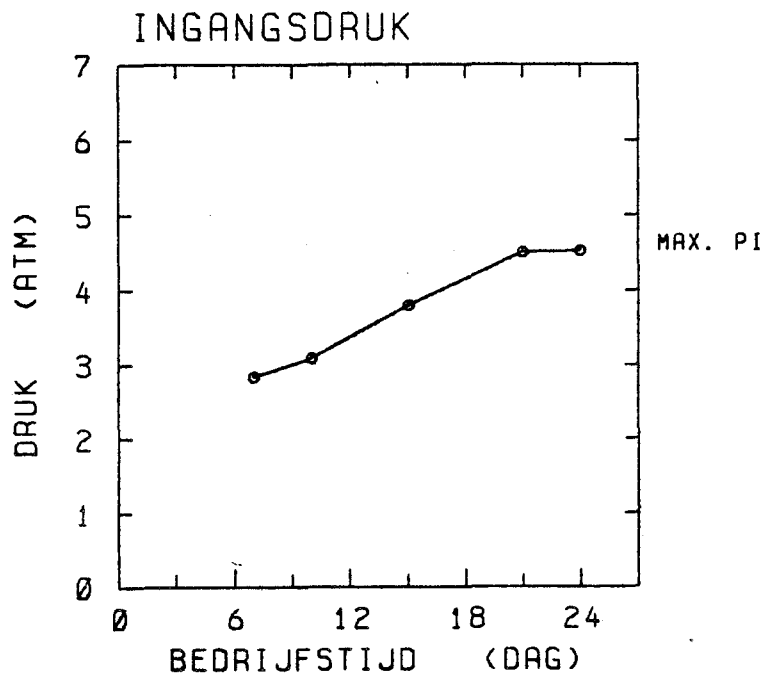


fig. 6.6 Ingangsdruk als funktie van de bedrijfstijd.

Uit fig.7 blijkt dat voor bedrijfstijden vanaf 21 dagen de buiswandtemperatuur de limiet van 1300 K bereikt.

De hoogste buiswandtemperatuur ontstaat altijd op het laatste tijdstip. De opkoling is dan het sterkst, terwijl de voeding laag is en geen stoom wordt toegevoerd.

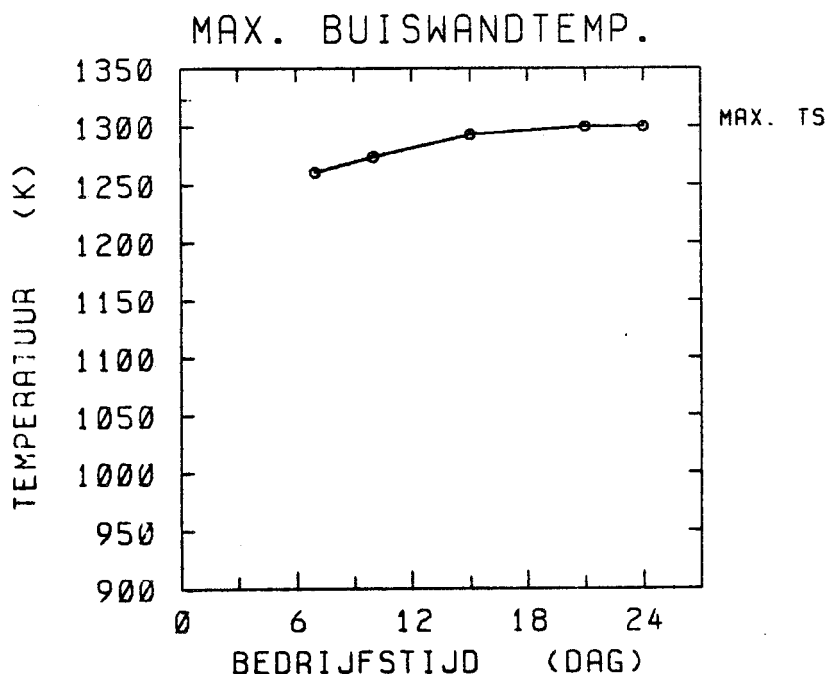


fig. 6.7 Hoogste buiswandtemperatuur als functie van de bedrijfstijd.

Conversie en selectiviteit, ethaanverbruik en etheenproduktie

In fig.8 en 9 zien we de gemiddelde waarde van conversie, selectiviteit, ethaanverbruik en etheenproduktie uitgezet tegen de bedrijfstijd. Deze grootheden zijn gedefinieerd in hoofdstuk 5, paragraaf 2. Het ethaanverbruik en de etheenproduktie zijn gedefinieerd als gemiddelden over de cyclusduur, incl. schoonmaaktijd.

Bij langere bedrijfstijd wordt gewerkt met een lagere conversie en een iets hogere selectiviteit, als gevolg van de hogere voeding en stroomflow. Beide effecten werken vertragend op de opkoling.

Het ethaanverbruik gaat bij toenemende bedrijfstijd door een maximum, terwijl de etheenproduktie stijgt. De stijgingen van deze grootheden worden veroorzaakt door de kleinere rol die de schoonmaaktijd gaat spelen bij de middeling. Wanneer alleen over de bedrijfstijd wordt gemiddeld daalt zowel het ethaanverbruik als de etheenproduktie. Door het gebruik van een hogere voeding en stroomflow wordt niet alleen de opkoling vertraagd, maar ook de ethaanomzetting.

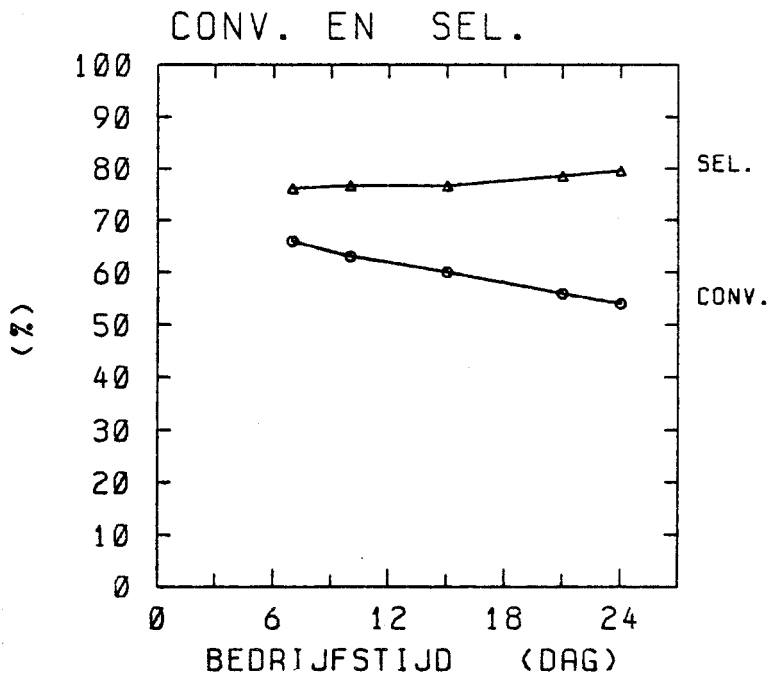


fig. 6.8 Conversie en selektiviteit als
functie van de bedrijfstijd

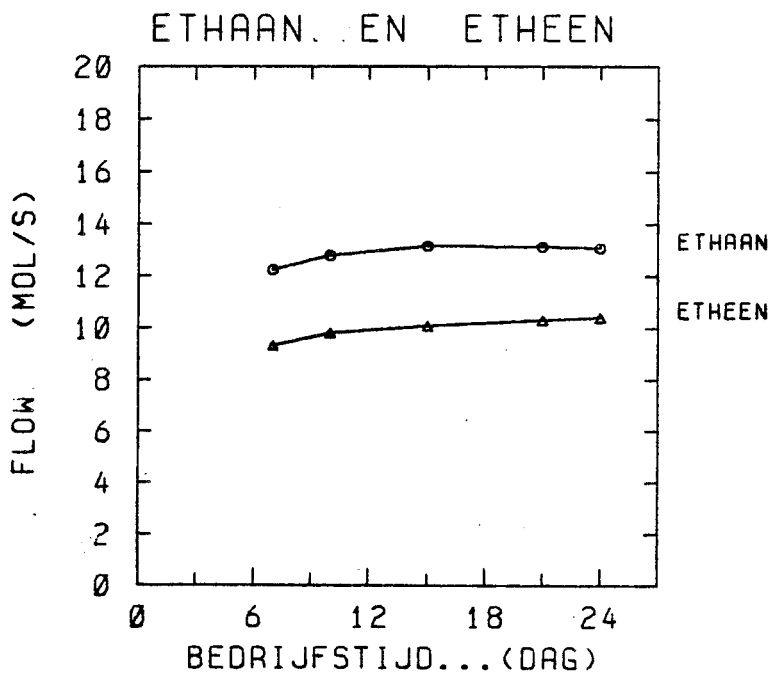


fig. 6.9 Ethaanverbruik en etheenproductie als
functie van de bedrijfstijd.

6.3 Vergelijking van statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren

In fig.10 t/m 17 wordt een vergelijking gemaakt tussen het momentane optimum en de statische en dynamische optima, beide bij de optimale bedrijfstijd van 21 dagen. De horizontale as in de grafieken is de gewone tijd-as.

De krommen voor de statisch optimale en de momentaan optimale sturing zijn al gepresenteerd in hoofdstuk 5, fig. 5.8 t/m 5.15 . Deze grafieken worden hier uitgebreid met krommen voor de dynamisch optimale sturing.

Sturing en opkoling

In fig.10 zien we dat door het gebruik van stoom de voeding over een groot deel van de bedrijfstijd lager mag zijn dan bij de statisch optimale sturing.

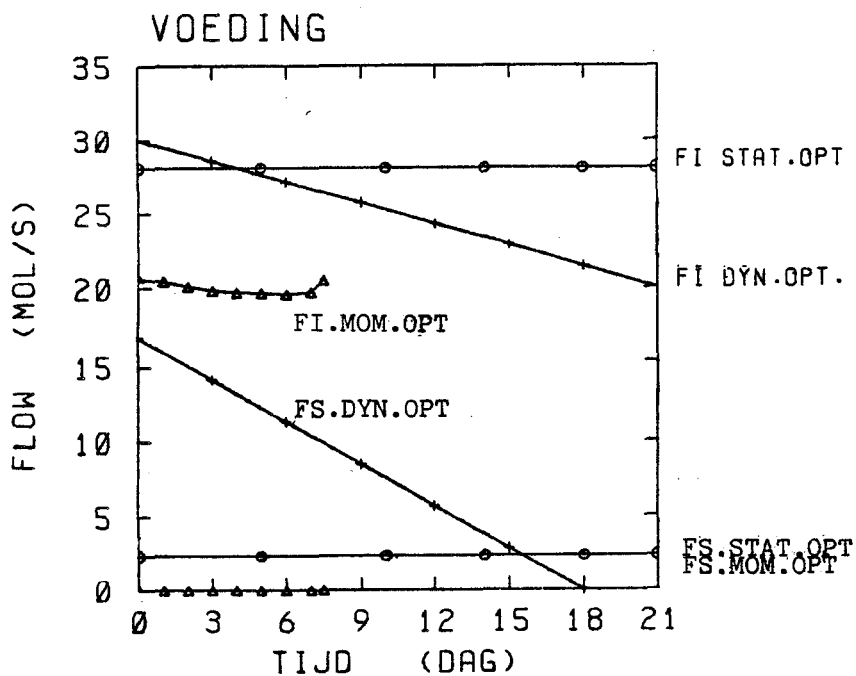


fig. 6.10 Voeding en stoomflow als functie van de tijd bij statisch, momentaan en dynamisch optimaliseren.

De opkoling (fig.11) verloopt langzamer dan bij de statische optimalisering. Alleen op het einde gaat de koolvorming sneller. De sturing bij de dynamische optimalisering is dan gericht op het maximaliseren van de momentane winst.

Uiteindelijk bevat de buis meer kool dan bij de statische optimalisering.

Voor alle drie de optimaliseringes geldt dat op het eindtijdstip de kool 25 tot 30 % van het buisvolume in beslag neemt. Dit heeft tot gevolg dat de situatie bij de dynamische optimalisering op het laatste tijdstip vergelijkbaar is met de situatie bij de momentane optimalisering op het laatste tijdstip. In beide gevallen wordt een momentane optimalisering uitgevoerd bij vrijwel dezelfde graad van opkoling. We zullen in het navolgende dan ook zien dat grootheden op het eindtijdstip bij momentaan en dynamisch optimaliseren vergelijkbare waarden hebben.

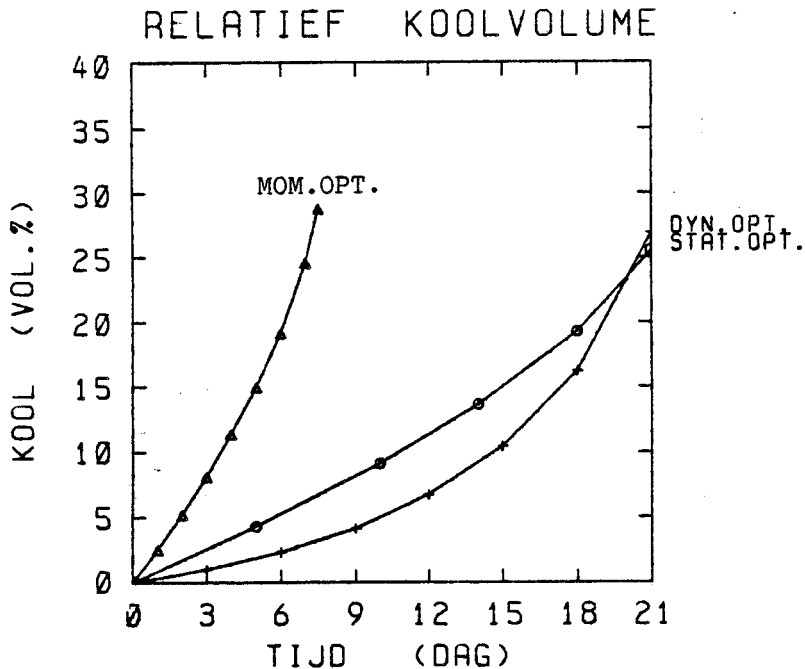


fig. 6.11 Relatief koolvolume bij de drie optimaliseringes

Winst

In het dynamisch optimum wordt in het begin minder momentane winst gemaakt dan bij statisch of momentaan optimaliseren (fig.12). De nadruk ligt dan sterk op het vertragen van de opkoling.

Doordat steeds minder ethaan en stoom wordt toegevoerd, ontstaat in de loop van de tijd een stijging van de momentane winst. Na enige tijd wordt deze winst groter dan die bij statisch en momentaan optimaliseren.

Op het laatste tijdstip is de momentane winst bij dynamisch optimaliseren groter dan bij statisch optimaliseren, ondanks de grotere opkoling (zie fig.11). De dynamische optimalisering kiest echter de momentaan optimale waarde voor de voeding en de stroomflow, wat bij statisch optimaliseren niet mogelijk is.

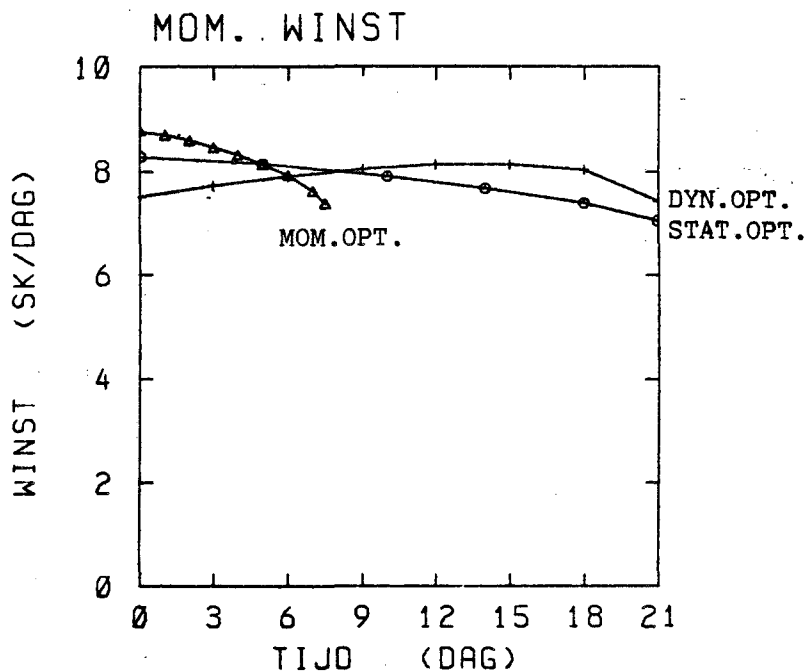


fig. 6.12 Momentane winst bij de drie optimaliseringen.

De gemiddelde winst is bij:

- momentaan optimaliseren: 6.79 SK/dag
- statisch optimaliseren: 7.26 SK/dag
- dynamisch optimaliseren: 7.35 SK/dag

Ten opzichte van momentaan optimaliseren is de volgende verbetering bereikt:

- statisch optimaliseren: 6.9 %
- dynamisch optimaliseren: 8.2 %

Ten opzichte van statisch optimaliseren is de verbetering door:

- dynamisch optimaliseren: 1.2 %

Deze verbetering wordt behaald door vermindering van de scheidingskosten (destillatie).

Druk en temperatuur

In fig. 6.13 en 14 zijn de ingangsdruk en de buiswandtemperatuur uitgezet tegen de tijd.

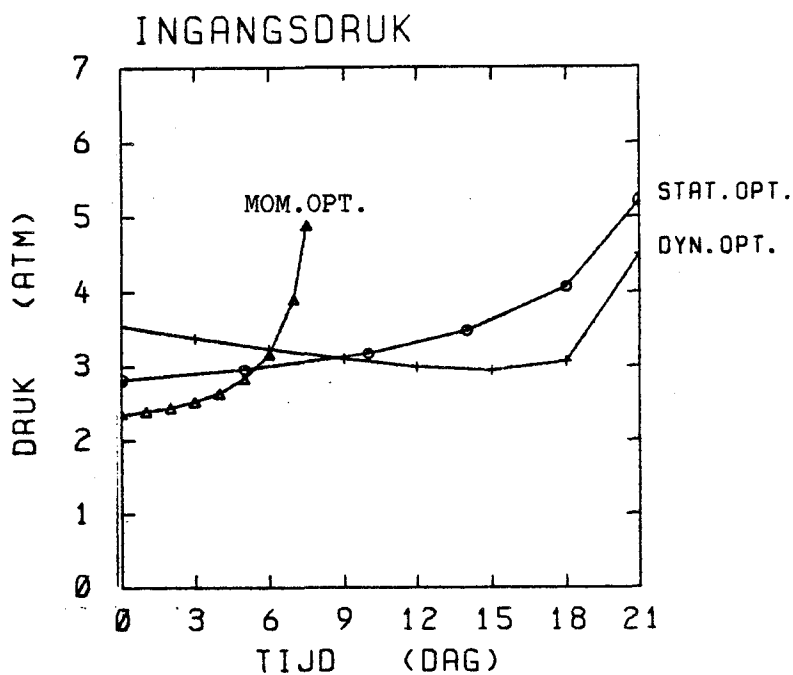


fig. 6.13 Ingangsdruk bij de drie optimalisering.

De ingangsdruk bij dynamisch optimaliseren (fig.13) neemt gedurende een groot deel van de bedrijfstijd af, in tegenstelling tot de druk bij statisch en momentaan optimaliseren. Dit wordt veroorzaakt door de daling van de doorzet (zie fig.10) Alleen op het einde ontstaat door de opkoling een stijging van de druk. De limiet van 6 atm. wordt niet gehaald. Bij statisch en momentaan optimaliseren gebeurt dit wel.

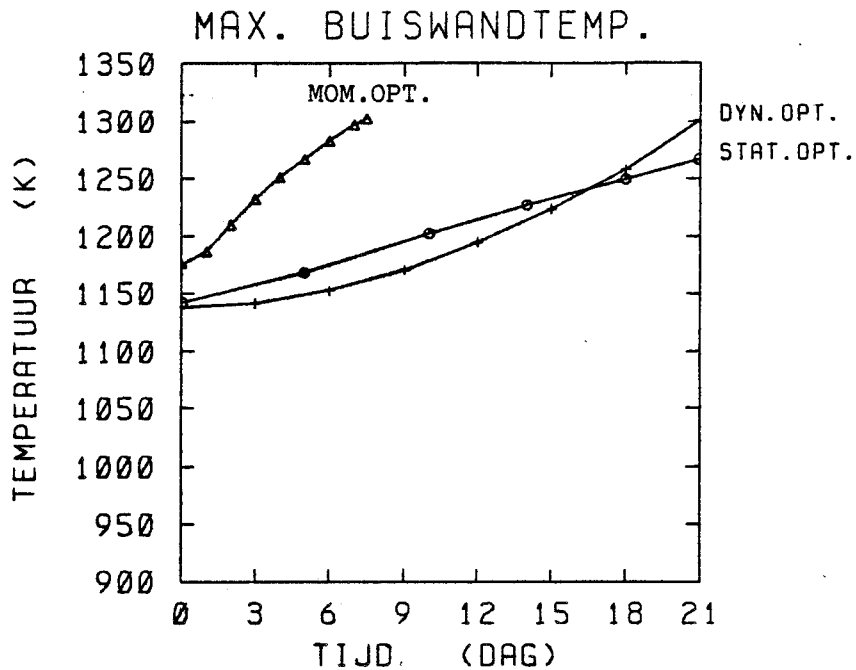


fig. 6.14 Hoogste buiswandtemperatuur bij de drie optimaliseringen

De buiswandtemperatuur blijft bij dynamisch optimaliseren door de langzame opkoling vrij lang laag. Pas tegen het einde vindt door de opkoling en de lage voeding een snelle stijging plaats. (fig.14).

Conversie en selectiviteit, ethaanverbruik en etheenproduktie

Doordat bij momentaan optimaliseren gestreefd wordt naar een hoge ethaanomzet (zie paragraaf 4.5), is de conversie hoog. (fig.15). De selectiviteit is vrij laag (fig.16).

Bij statisch en dynamisch optimaliseren is de voeding hoger en wordt bovendien gebruik gemaakt van stoom. Hierdoor is de conversie lager en de selectiviteit hoger.

Door de dalende voeding en stroomflow bij de dynamisch optimale sturing stijgt de conversie. De beginwaarde is erg laag (45%). Dit helpt bij de vertraging van de opkoling. De eindwaarde is hoog (75%). Er wordt dan zo veel mogelijk ethaan omgezet om een maximale momentane winst te behalen. Deze waarde van de conversie is vergelijkbaar met de eindwaarde bij momentaan optimaliseren.

In fig.17 zien we het ethaanverbruik toenemen van een laag niveau (13 mol/s) naar een niveau dat vergelijkbaar is met de momentane optimalisering (15 mol/s).

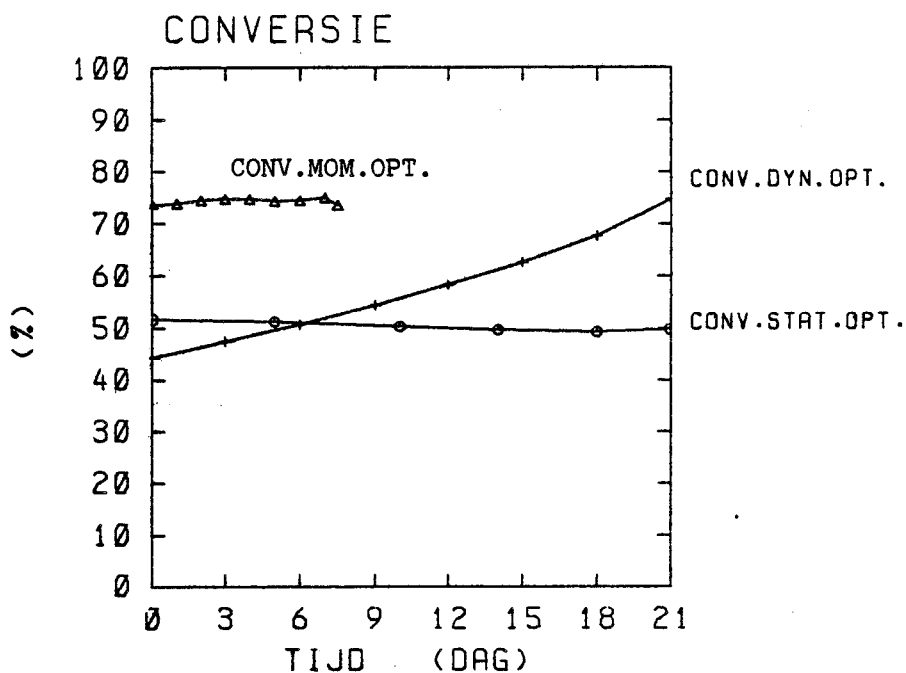


fig. 6.15 Conversie bij de drie optimalisering

De selektiviteit begint bij de dynamisch optimale sturing op een hoge waarde (87%), als gevolg van de hoge voeding en stroomflow. stroomflow. Daarna vindt echter een daling plaats tot een niveau dat te vergelijken is met de momentane optimalisering (52%). Deze daling wordt veroorzaakt door de afnemende voeding en stroomflow en de stijgende opkoling.

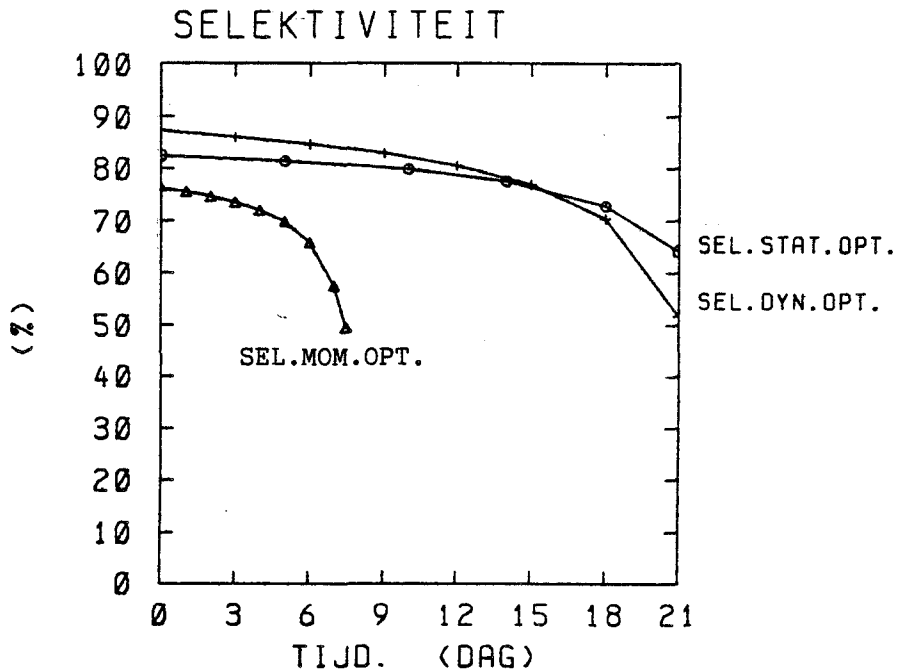


fig. 6.16 Selektiviteit bij de drie optimalisering

Vergeleken met statisch optimaliseren daalt de selektiviteit bij dynamisch optimaliseren sneller. Daar staat tegenover dat de ethaanomzet stijgt, in plaats van daalt, zoals bij de statische optimalisering. De combinatie van deze twee trends leidt tot een etheenproduktie die vrijwel gelijk is voor beide optimalisering. (fig.17).

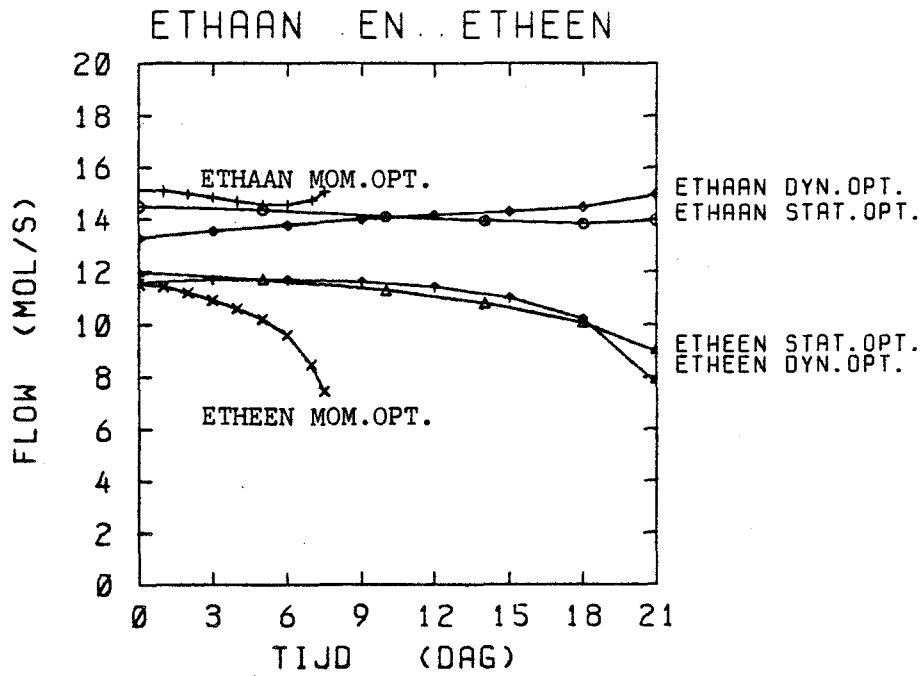


fig. 6.17 Ethaanverbruik en etheenproductie bij de drie optimaliseringingen.

Samenvattend kan gesteld worden dat met behulp van dynamisch optimaliseren een maximale gemiddelde winst kan worden bereikt door in het begin de opkoling te vertragen en op het einde de momentane winst te maximaliseren.

Hfdst. 7 KONKLUSIES EN OPMERKINGEN

7.1 Konklusies

1 Gemiddelde_winst_

Met behulp van dynamisch optimaliseren kan bij de optimale bedrijfstijd een gemiddelde winst worden behaald van 7.35 SK/dag. Dit is 8.2% meer dan bij de momentane optimalisering en 1.2 % meer dan bij statisch optimaliseren, eveneens over de optimale bedrijfstijd. Ten opzichte van momentaan optimaliseren wordt de verbetering vooral bereikt door vergroting van de bedrijfstijd. Vergeleken met statisch optimaliseren ligt de verbetering in een vermindering van de scheidingskosten.(destillatie).

2 Bedrijfstijd_

De optimale bedrijfstijd bij statisch en dynamisch optimaliseren is 21 dagen. In beide gevallen is het optimum zeer vlak. Bedrijfstijden tussen 15 en 24 dagen leveren een gemiddelde winst op die hoogstens 0.5 % lager is dan bij de optimale bedrijfstijd.

3 Dynamisch_optimale_sturing_

De dynamisch optimale sturing over een zekere bedrijfstijd t_b heeft het volgende verloop:

- Ovenwandtemperatuur voortdurend 1500 K. Deze waarde is bij de optimaliseringen als maximum gesteld.
- Voeding geleidelijk dalend. Op het eindtijdstip is steeds $FI=20$ mol/s.
- Stoomflow geleidelijk dalend. Vanaf enkele dagen voor het eindtijdstip wordt geen stoom meer toegevoerd.

Het verloop van de voeding en de stoomflow is er in het begin op gericht de opkoling te vertragen (hoge waarden). Op het einde wordt de momentane winst gemaximaliseerd ($FI=20$ mol/s en $FS=0$).

4 Langere bedrijfstijd

Om een langere bedrijfstijd te realiseren moeten een hogere voeding en stroomflow worden gebruikt. De ovenwandtemperatuur blijft de maximaal toegelaten waarde van 1500 K behouden.

5 Conversiesturing

In de praktijk is het niet mogelijk de ovenwandtemperatuur in te stellen. In plaats hiervan wordt de brandstoftoevoer ingesteld door een conversieregelaar. Voor een dynamisch optimale sturing moet de conversie in de loop van de tijd stijgen. Bij de optimale bedrijfstijd van 21 dagen moet de conversie toenemen van 45 % tot 75 %.

6 Vlakheid van het optimum: BANG-BANG sturing ?

Het gevonden dynamische optimum blijkt zeer vlak te zijn. In plaats van de geleidelijke afname van de voeding is het bijvoorbeeld ook mogelijk deze stuurgrootheid gedurende enige tijd een hoge waarde te geven, en dan geleidelijk over te gaan op lage waarden ($FI=20$ mol/s en $FS=0$). Dit kost niet meer dan 0.1 tot 0.2 % van de gemiddelde winst. Voor toepassing in de praktijk zou het interessant zijn na te gaan of volstaan kan worden met een sturing waarbij op zeker tijdstip wordt overgeschakeld van hoge naar lage voeding of stroomflow. Deze mogelijkheid is nog niet onderzocht.

7 Opkoling

Bij langere bedrijfstijd is op het eindtijdstip meer kool gevormd. Het koolvolume wordt echter niet groter dan ongeveer 28 % van het volume van de buis.

8 Ingangsdruk

De ingangsdruk ligt bij dynamisch optimale sturing bij alle bedrijfstijden onder de limiet van 6 atm. Tot een bedrijfstijd van 21 dagen neemt de druk toe bij grotere bedrijfstijd. Daarna vindt geen verdere stijging meer plaats.

9 Buiswandtemperatuur

Voor bedrijfstijden groter dan 21 dagen bereikt de buiswandtemperatuur de limiet van 1300 K.

10 Effekt van opkoling

Uit simulaties is gebleken dat de opkoling nauwelijks invloed heeft op de conversie. De nadelige gevolgen van de opkoling ontstaan door een daling van de selektiviteit. De samenstelling van het uitvalpakket verschuift hierdoor van etheen naar nevenprodukten, met name butadieen. Omdat deze komponent verantwoordelijk wordt gesteld voor de vorming van kool, zien we een versnelling van de opkoling.

11 Speelruimte voor voeding en stroomflow

Naarmate de opkoling sterker wordt, mogen bij vaste ovenwandtemperatuur de voeding en stroomflow minder worden gevarieerd. Te lage voeding of stroomflow leidt tot te hoge buiswandtemperatuur, te hoge doorzet heeft een te hoge ingangsdruk tot gevolg. Wanneer de opkoling te sterk wordt (ca.30 % van het buisvolume), is geen enkele waarde voor voeding of stroomflow meer toegelaten.

7.2 Opmerkingen

1 Kinetisch model

Het kinetisch model van het kraakproces bevat geen reacties waarbij hogere koolwaterstoffen worden gevormd. De hoogste component in het reaktiemengsel is de C_4 -fractie butadieen. Omdat het opkoolmodel gebaseerd is op juist de hogere koolwaterstoffen (C_{4+}) leidt het kinetisch model tot onnauwkeurigheden bij de beschrijving van de opkoling. Zonder verder onderzoek op dit gebied zijn deze onnauwkeurigheden niet te verhelpen.

2 Nut formele optimalisering

Het is bebleken dat door het uitvoeren van simulaties voldoende proceskennis kan worden opgedaan om de dynamisch optimale sturing te voorspellen. Een meer formele aanpak met behulp van variatierekening en optimaliseringsprogramma's leidt niet tot betere resultaten. Uiteraard speelt de vlakheid van het optimum hierbij een rol. Het is daardoor voldoende de globale trend van de optimale sturing vast te stellen.

Gezien de tijd en moeite die aan het uitvoeren van een formele optimalisering moet worden besteed, kan het nut van een dergelijke aanpak worden betwijfeld.

3 Opkoling in de koelsectie

Uit de praktijk is bekend dat een belangrijke hoeveelheid kool neerslaat in de koeler die direkt na de oven is geplaatst (Transfer Line Exchanger). Deze koeler zal bij de optimalisering worden betrokken.

4 Beperking ovenwandtemperatuur

De beperking van de ovenwandtemperatuur tot 1500 K is te sterk. Uit metingen aan een bestaande oven is gebleken dat ovenwandtemperaturen tot 1650 á 1700 K voorkomen. Een beperking tot 1700 K zou daarom beter zijn geweest. Het is echter niet te verwachten dat dit een wezenlijk verschil in de trend van de optimale sturing op zou hebben geleverd.

5 Voorgescreven ethaanverbruik

Alle optimaliseringen die in dit verslag zijn beschreven, zijn uitgevoerd met een vrij ethaanverbruik. In de praktijk draaien echter veel kraakovens met een voorgeschreven verbruik. Voor deze situatie zullen nog dynamische optimaliseringën worden uitgevoerd.

Literatuur

- /1/ A.E. Bryson en Yu-Chi Ho
Applied optimal control Blaisdell 1969
- /2/ J.W.J.M. van der Heijden
Reakties en reaktiekinetiek, modelvorming kraakoven
NR-849 (1982-03-11)
- /3/ W. Heijnen
Fireboxmodel en energiebalans van een ethaankraker
NR-983 (83-03-02)
- /4/ W. Heijnen
Grenslaageffekten en radiale temperatuurgradienten
NR-993 (83-03-17)
- /5/ K.M. Sundaram en G.F. Froment
Modeling of thermal cracking kinetics 1
Thermal cracking of ethane, propane and their mixtures
Chemical Engineering Science 32. p601-608 (1977)
- /6/ K.M. Sundaram, P.S. van Damme en G.F. Froment
Coke deposition in the thermal cracking of ethane
ChE Journal 27 (6) p946-951 (1981)

SYMBOLENLIJST

<u>Symbol</u>	<u>Omschrijving</u>	<u>Eenheid</u>
$A(z,t)$	Inwendige doorsnede buis	m^2
α	Hoek van bocht in buis	graden
$Conv(t)$	Conversie	-
CP	Warmtecapaciteit gas	W/K
CP_i	Warmtecapaciteit komponent i	J/mol K
CPA_i	Konstant deel $CP_i(T)$	J/mol K
CPB_i	Koëff. T in $CP_i(T)$	J/mol K ²
$D(z,t)$	Inwendige diameter buis	m
D_0	Inwendige diameter schone buis	m
DPF	Korrektiefactor drukvergelijking	-
EA_c	Aktiveringsenergie opkoolreactie	J/mol
EA_j	Aktiveringsenergie reactie j	J/mol
$f(x,D,qf)$	Modelvergelijkingen buis	
f en f'	Friktiefactoren	-
fuel(t)	Brandstofverbruik	W
FC(t)	Ethaanverbruik	mol/s
$F_{C_2H_4}(t)$	Etheenproduktie	mol/s
FI(t)	Voeding	mol/s
FS(t)	Stoomflow	mol/s
FT(z,t)	Totale flow in de buis	mol/s
$g(TW,T,qf)$	Fireboxvergelijking	
$\gamma(T)$	Deel van opkoolvergelijking	$m^4/mol\ s$
$h(x)$	Opkoolvergelijking	m/s
ΔH_j	Reaktieënthalpie reactie j	J/mol
J	Funktionaal	gld/s
k_c	Reaktiesnelheidskonstante opkoling	$kg/m^2s(kg/m^3)$
$k_{c,0}$	k_c bij $T = \infty$	
$k_e(t)$	Kosten ethaanverbruik	gld/s
k_j	Reaktiesnelheidskonstante reactie j	1/s of $m^3/mol\ s$
$k_{j,0}$	k_j bij $T = \infty$	

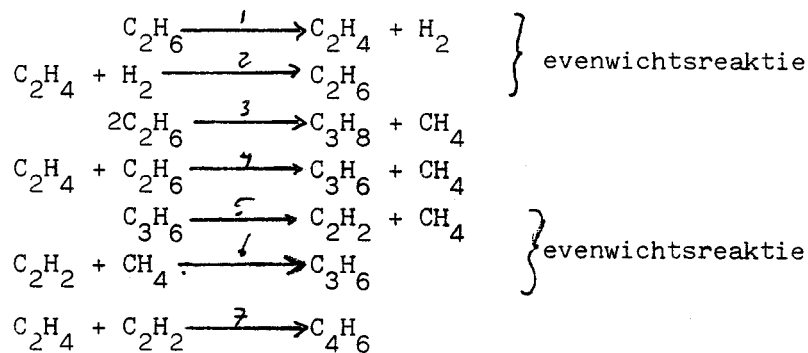
<u>Symbol</u>	<u>Omschrijving</u>	<u>Eenheid</u>
$k_{qr}(t)$	Kosten reaktiewarmte	gld/s
$k_{qv}(t)$	Kosten voelbare warmte	gld/s
$k_{sch}(t)$	Kosten scheidingsproces	gld/s
K	Evenredigheidsconstante straling	$W/m^2 K^4$
L	Lengte buis	m
$\lambda(z,t)$	Toegevoegde grootheden	
$m(t)$	Massastroom door buis	kg/s
m	Exponent formulering beperkingen	-
M_i	Molmassa component i	kg/mol
$M_{C_4H_6}$	Molmassa butadien = M_8	kg/mol
$\mu(z,t)$	Toegevoegde grootheid	
ν	Viskositeit gas	kg/ms
ν_i	Viskositeit component i	kg/ms
μ_i^a	Konstant deel $\mu_i(T)$	kg/ms
μ_i^b	Koëff. T in $\mu_i(T)$	kg/msK
η_{fb}	Rendement firebox	-
η_{qv}	Rendement terugwinnen voelbare warmte	-
$p(z,t)$	Druk	Pa
p_i	Prijs component i	gld/mol
p_s	Prijs stookgas	gld/J
p_{sch}	Prijs scheidingsproces	gld/mol
$P_i(t)$	Ingangsdruk	Pa
P_u	Uitgangsdruk	Pa
$q_f(z,t)$	Flux	W/m^2
$q_r(z,t)$	Reaktiewarmte	W/m^3
$QR(t)$	Reaktiewarmte	W
QV_e	Opname voelbare warmte door ethaan	J/mol
QV_s	Opname voelbare warmte door stoom	J/mol
$r(z,t)$	Reaktiesnelheden	$mol/m^3 s$
R	Gaskonstante	J/mol K

<u>Symbol</u>	<u>Omschrijving</u>	<u>Eenheid</u>
R_b	Kromtestraal bocht in buis	m
Re	Getal van Reynolds	-
ρ	Dichtheid gas	kg/m ³
ρ_{kool}	Dichtheid kool	kg/m ³
Sel(t)	Selektiviteit	-
SK	Schoonmaakkosten	gld/s
σ	Schuifspanning	N/m ²
t	Tijd	s of dag
t_b	Bedrijfstijd	dag
t_s	Schoonmaaktijd	dag
T(z,t)	Temperatuur in de buis	K
TI	Intreëtemperatuur	K
TS(z,t)	Buiswandtemperatuur	K
TW(t)	Ovenwandtemperatuur	K
$\underline{u}(t)$	Stuurvektor: u_1 = ovenwandtemperatuur u_2 = voeding u_3 = stroomflow	K mol/s mol/s
$\delta \underline{u}(t)$	Zoekrichting voor sturing $\underline{u}(t)$	
U(z,t)	Warmtedoorgangskoeff. buiswand	W/m ² K
v	Gassnelheid	m/s
V	Specifiek volume gas	m ³ /mol
$w_p(t)$	Opbrengst uitvalpakket	gld/s
W_1 en W_2	Delen van winstfunctie	gld/s
$W_{\text{gem}}(t)$	Gemiddelde winst	gld/s
$W_{\text{mom}}(t)$	Momentane winst	gld/s
$\underline{x}(z,t)$	Toestandsvektor x_1 = ethaanflow x_2 = etheenflow x_3 = waterstofflow x_4 = methaanflow x_5 = propaanflow x_6 = propeenflow x_7 = ethynflow x_8 = butadiëenflow* x_9 = stroomflow x_{10} = druk x_{11} = temperatuur	mol/s mol/s mol/s mol/s mol/s mol/s mol/s mol/s Pa K
z	Plaats in de buis	m

BIJLAGE A: HET REAKTORBUISMODEL

A.1 De reaktiecomponenten en de stoom

In de buis vinden de volgende reacties plaats:



(zie ook vergelijkingen 3.1)

!!! Aannamen:

- Er worden geen C₅- of hogere frakties gevormd.
- Alle reacties zijn van eerste orde

Deze aannamen komen rechtstreeks uit het model van Froment (zie lit /5/). De eerste aanname is van belang bij de beschrijving van de opkoling (zie lit /6/ en paragraaf 3.4).

De reaktiesnelheden worden gegeven door:

$$\begin{array}{l}
 r_1 = k_1 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_6\} \\
 r_2 = k_2 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_4\} \cdot \{\text{H}_2\} \\
 r_3 = k_3 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_6\} \\
 r_4 = k_4 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_4\} \cdot \{\text{C}_2\text{H}_6\} \\
 r_5 = k_5 \cdot \{\text{C}_3\text{H}_6\} \\
 r_6 = k_6 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_2\} \cdot \{\text{CH}_4\} \\
 r_7 = k_7 \cdot \{\text{C}_2\text{H}_2\} \cdot \{\text{C}_2\text{H}_4\}
 \end{array}$$

Hierin is $\{S\}$ de concentratie van stof S in mol/m³. Voor de concentraties volgt uit de ideale gaswet dat:

$$\{C_2H_6\} = \frac{x_1}{FT} \cdot \frac{P}{RT} \text{ enz.}$$

Hierin is FT de totale molstroom:

$$FT = \sum_{i=1}^9 x_i$$

!!! Aanname

- Ideale gaswet is bruikbaar.
- Dit is bij alle voorkomende drukken en temperaturen het geval.

De reactiesnelheidskonstanten zijn temperatuurafhankelijk volgens het Arrhenius-verband:

$$k_j = k_{0,j} \cdot e^{-EA_j/RT} \quad (1 \leq j \leq 7)$$

Hierin is EA_j de aktiveringsenergie.

Met behulp van de molbalansen volgen uit de reactiesnelheden differentiaalvergelijkingen voor de molstromen:

(zie ook vergelijking 3.2 en 3.3).

De vergelijking voor de negende component, stoom, is triviaal.

De stroomflow is plaatsonafhankelijk omdat stoom niet aan de reacties deelneemt.

De differentiaalvergelijkingen zijn:

$$\frac{\partial x_1}{\partial z} = A (-r_1 + r_2 - 2r_3 - r_4)$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial z} = A (r_1 - r_2 - r_4 - r_7)$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial z} = A (r_1 - r_2)$$

$$\frac{\partial x_4}{\partial z} = A (r_3 + r_4 + r_5 - r_6)$$

$$\frac{\partial x_5}{\partial z} = A (r_3)$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial z} = A (r_4 - r_5 + r_6)$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial z} = A (r_5 - r_6 - r_7)$$

$$\frac{\partial x_8}{\partial z} = A (r_7)$$

$$\frac{\partial x_9}{\partial z} = 0$$

!!! Aannamen:

- Geen radiale of tangentiële effecten.
Door de grote turbulentie ($Re \approx 10^5$) kunnen radiale en tangentiële effecten ten gevolge van wrijving en warmteoverdracht "uitgesmeerd" worden gedacht over de gehele doorsnede van de buis.
- Axiale diffusie en warmtegeleiding verwaarloosbaar.
Deze aanname mag gedaan worden op grond van de grote gas-snelheden. Het konvektief transport van materie en energie zal veel groter zijn dan het transport door diffusie of geleiding.

De molstromen zijn aan het begin van de buis gegeven ($z=0$):

$$x_1(0,t) = FI(t)$$

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

$$x_9(0,t) = FS(t)$$

(zie ook vgl.3.4)

!!! Aanname:

- Geen reacties in de konvektiesektie. Door de nog lage temperatuur (onder 925 K) mag gesteld worden dat de produktstromen bij het binnenkomen van de radiatiesektie nul zijn ($x_i(0,t)=0$,
 $2 \leq i \leq 8$).

A.2 De druk

De drukvergelijking volgt uit de wet van behoud van impuls. In de buis vindt impulstransport plaats door konvektie, normaalspanning (druk). en schuifspanning langs de wand (wrijving): (zie ook vgl. 3.5)

$$\frac{\partial}{\partial z} (mv) + \frac{\partial}{\partial z} (pA) + \sigma\pi D = 0$$

Hierin is m de massastroom, v de gassnelheid, p de druk en σ de schuifspanning. Verder is A de doorsnede van de buis en D de diameter. Deze grootheden zijn plaats- en tijdafhankelijk.

!!! Aanname:

└ - Geen radiale of tangentielle effecten. (zie paragraaf A.1).

De gassnelheid v volgt uit de ideale gaswet:

$$p V = R T \quad \text{met: } V = \text{gasvolume per mol}$$

Met behulp van:

$$V = \text{volumestroom} / \text{molstroom} = vA / FT$$

vinden we:

$$v = \frac{FT \cdot RT}{A \cdot p}$$

!!! Aanname:

└ - Ideale gaswet bruikbaar. (zie paragraaf A.1).

Volgens de stromingsleer is de schuifspanning σ :

$$\sigma = f \cdot \frac{1}{2} \rho v^2$$

Hierin is ρ de dichtheid van het gas. De friktiefactor f wordt gegeven door:

$$f = 0.046 \cdot \text{Re}^{-0.2}$$

Het getal van Reynolds Re is gedefinieerd als

$$\text{Re} = \frac{\rho v D}{\mu}$$

Met μ als viscositeit van het gasmengsel. De dichtheid ρ volgt uit de massastroom m :

$$\rho v A = m = \sum_{i=1}^g M_i \cdot x_i$$

waarin M_i de molmassa van component i is. De viscositeit van het gasmengsel is een gewogen gemiddelde van de viscositeiten μ_i van de verschillende componenten:

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^g \mu_i M_i x_i$$

De viscositeiten μ_i zijn vrijwel lineair afhankelijk van de temperatuur;

$$\mu_i = \mu a_i + \mu b_i \cdot T$$

De drukvergelijking ziet er na uitwerking als volgt uit:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\frac{2f}{D} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{FT} \frac{\partial FT}{\partial z} + \left(\frac{p}{v^2} - 1\right) \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial z}}{\frac{1}{\rho v^2} - \frac{1}{p}}$$

Hierin moeten voor f , σ en v nog bovenstaande uitdrukkingen worden gebruikt.

In de buis komen een aantal bochten voor. De drukval in deze bochten kan worden berekend met een extra term voor de friktiefactor: (zie lit /2/).

$$f' = f + \frac{1}{2}D \cdot \left(0.7 + \left(\frac{\alpha}{90^\circ}\right) \cdot 0.35\right) \left(0.051 + 0.19 \frac{D}{Rb}\right)$$

Hierin is α de hoek die de bocht beschrijft in graden en Rb de kromtestraal van de bocht.

Bij de optimaliseringen is gebruik gemaakt van een vereenvoudigde versie van de drukvergelijking:

- Geen $\frac{\partial \rho}{\partial z}$ term in de teller.
- Geen $\frac{1}{\rho}$ term in de noemer.
- Geen extra drukval in de bochten, maar een korrektiefactor DPF.

We krijgen dan de vergelijking:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -DPF \frac{\frac{2f}{D} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{FT} \frac{\partial FT}{\partial z}}{\frac{1}{v^2}}$$

!!! Aannamen:

- Diameter voldoende uniform.
Het is gebleken dat deze aanname niet juist is bij sterke opkoling. Voor simulaties in de tijd blijkt echter geen grote afwijking op te treden. Aangezien gedurende het grootste deel van de tijd de buis niet of nauwelijks is opgekoold speelt het niet-uniform zijn van de diameter een ondergeschikte rol.
- Statische druk veel groter dan stuwdruk ($p \gg v^2$).
Bij sterke opkoling zijn beide drukken vergelijkbaar. Voor simulatie in de tijd blijkt ook deze aanname goed bruikbaar.
- Effect drukval in de bochten goed te beschrijven met een korrektiefactor.

Omdat voor een goede werking van de kompressor de uitgangsdruk van de oven een zekere waarde moet hebben, geldt als randvoorwaarde voor de druk (zie ook vergelijking 3.6):

$$x_{10}(L,t) = PU \quad (PU = 1.47 \text{ atm.})$$

A.3 De temperatuur

De differentiaalvergelijking voor de temperatuur volgt uit de warmtebalans. Warmtetransport vindt uitsluitend plaats door konvektie. Reaktiewarmte en flux worden als brontermen verrekend (zie ook vergelijking 3.7):

$$CP \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \pi D_o \cdot q_f + \frac{1}{4} \pi D^2 \cdot q_r$$

!!! Aannamen:

- Geen axiale warmtegeleiding. Het konvektief transport van warmte is overheersend. (zie paragraaf A.1)
- Warmte door wrijving met de wand is verwaarloosbaar.

De reaktiewarmte q_r (W/m^3) wordt berekend uit de reaktiesnelheden en de reaktie-enthalpiën:

$$q_r(z,t) = \sum_{j=1}^7 r_j \cdot \Delta H_j$$

De warmtecapaciteit van het gas volgt uit de warmtecapaciteiten CP_i van de verschillende componenten:

$$CP = \sum_{i=1}^9 CP_i \cdot x_i$$

De warmtecapaciteiten CP_i worden lineair in de temperatuur gekozen:

$$CP = CPA_i + CPB_i \cdot T$$

Uitwerking van de warmtebalans geeft de differentiaalvergelijking voor de temperatuur.

De randvoorwaarde bij deze vergelijking is:
(zie ook vergelijking 3.8)

$$x_{11}(0,t)=T_I \quad (T_I=925 \text{ K })$$

De intreetemperatuur T_I is vast gekozen.

BIJLAGE B: HET OPKOOLMODEL

De reaktiesnelheidskonstante k_c van de opkoolreactie wordt uitgedrukt in:

$$\frac{\text{kg kool}}{\text{m}^2 \text{ wandoppervlak} \cdot \text{s} \cdot \left(\frac{\text{kg Butadieen}}{\text{m}^3} \right)}$$

De concentratie butadieen in kg/m^3 is:

$$\{C_{4H_6}\}_{\text{kg}} = M_{C_4H_6} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

De hoeveelheid gevormde kool in kg per vierkante meter wandoppervlak per seconde is dus:

$$\text{Massa}_{\text{kool}} = k_c \cdot M_{C_4H_6} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

Omgerekend naar volume wordt dit:

$$\text{Vol}_{\text{kool}} = k_c \cdot \frac{M_{C_4H_6}}{\rho_{\text{kool}}} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

Integratie over de omtrek van de buis (=vermenigvuldigen met D) levert het gevormde koolvolume per meter buislengte per seconde:

$$\pi D \cdot \text{Vol}_{\text{kool}} = \pi D \cdot k_c \cdot \frac{M_{C_4H_6}}{\rho_{\text{kool}}} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

Dit is gelijk aan de vermindering van de buisdoorsnede:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\pi D \cdot k_c \cdot \frac{M_{C_4H_6}}{\rho_{kool}} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

Met behulp van de relaties:

$$A = \frac{1}{4}\pi D^2$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{1}{2}\pi D \cdot \frac{\partial D}{\partial t}$$

ontstaat de differentiaalvergelijking voor de diameter:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -2k_{c,0} \cdot e^{-E_{Ac}/RT} \cdot \frac{M_{C_4H_6}}{\rho_{kool}} \cdot \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

Hierin is voor k_c nog het Arrheniusverband gebruikt. De differentiaalvergelijking heeft de vorm: (zie ook vergelijking 3.11):

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -\gamma(T) \cdot \{C_4H_6\}$$

met:

$$\gamma(T) = 2k_{c,0} \cdot e^{-E_{Ac}/RT} \cdot \frac{M_{C_4H_6}}{\rho_{kool}}$$

$$\text{en: } \{C_4H_6\} = \frac{x_8}{FT} \cdot \frac{P}{RT}$$

BIJLAGE C: GRADIËNTBEREKENING

De winstfunctie die bij dynamisch optimaliseren wordt gebruikt heeft de volgende vorm (zie paragraaf 3.5, formule 3.13).

$$W_{\text{gem}}(t_b) = \frac{1}{t_b + t_s} \int_0^{t_b} W_{\text{mom}}(t) dt + \frac{SK}{t_b + t_s}$$

De momentane winst is te schrijven als:

$$W_{\text{mom}}(t) = W_1(\underline{x}(0,t), \underline{x}(L,t)) + \int_0^L W_2(\underline{x}(z,t)) dz$$

De eerste term van deze uitdrukking bevat de opbrengsten van de verschillende produkten en de kosten van ethaan, scheiding en verlies van voelbare warmte. De tweede term brengt de kosten van de (verdeelde) reaktiewarmte in rekening.

$$W_1(\underline{x}(0,t), \underline{x}(L,t)) = w_p(t) + k_e(t) + k_{\text{sch}}(t) + k_{\text{qv}}(t)$$

$$\int_0^L W_2(\underline{x}(z,t)) dz = k_{\text{qr}}(t)$$

Omdat de winstfunctie de vorm heeft van een tijdintegraal kan met behulp van variatierekening de gradiënt naar de sturing worden bepaald.

Om deze gradiënt naar de sturing te berekenen, worden eerst de modelvergelijkingen met behulp van toegevoegde toestands-grootheden bij de winst opgeteld:

$$\begin{aligned}
 J := W_{\text{gem}}(t_b) + & \int_0^{t_b} \int_0^L \lambda^T(z,t) \left[\frac{\partial x}{\partial z} - f \right] dz dt + \\
 & \int_0^{t_b} \int_0^L \rho(z,t) \cdot g \cdot dz dt + \\
 & \int_0^{t_b} \int_0^L \mu(z,t) \left[\frac{\partial D}{\partial t} - h \right] dz dt
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

Hierin zijn λ , μ en ρ de toegevoegde grootheden. De modelvergelijkingen van de buis (3.2, 3.3, 3.5, en 3.7), de firebox- (3.9 en 3.10) en de opkoling (3.11) heten hier resp. f , g en h . De fireboxvergelijking wordt gevonden door TS te elimineren uit 3.9 en 3.10 .

Als we in de uitdrukking voor J de grootheden \underline{x} en D variëren, vinden we:

$$\begin{aligned}
 \delta J = & \int_0^{t_b} \frac{\partial W_1}{\partial \underline{x}(0,t)} \cdot \delta \underline{x}(0,t) dt + \int_0^{t_b} \frac{\partial W_2}{\partial \underline{x}(L,t)} \cdot \delta \underline{x}(L,t) dt + \\
 & \int_0^{t_b} \lambda^T \cdot \delta \underline{x} \Big|_0^L dt + \\
 & \int_0^{t_b} \int_0^L \left(-\frac{\partial \lambda^T}{\partial z} - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial \underline{x}} - \rho \frac{\partial h}{\partial \underline{x}} + \rho \frac{\partial g}{\partial \underline{x}} + \frac{\partial W_2}{\partial \underline{x}} \right) \delta \underline{x} dz dt + \\
 & \int_0^L \mu \cdot \delta D \Big|_0^{t_b} dz + \int_0^{t_b} \int_0^L \left(-\frac{\partial \mu}{\partial t} - \lambda^T \frac{\partial f}{\partial D} + \rho \frac{\partial g}{\partial D} + \frac{\partial W_2}{\partial D} \right) \delta D dz dt + \\
 & \int_0^{t_b} \int_0^L \left(-\lambda^T \frac{\partial f}{\partial qf} + \rho \frac{\partial g}{\partial qf} \right) \delta qf dz dt + \\
 & \int_0^{t_b} \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial TW} + \rho \frac{\partial qf}{\partial TW} \right) \delta TW dz dt
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

Wanneer de stuurgrootheden ($x_1(0,t)$, $x_9(0,t)$ en $TW(t)$) worden gevarieerd ontstaan volgens de modelvergelijkingen ook variaties in de toestandsgrootheden ($\underline{x}(z,t)$, $D(z,t)$ en $qf(z,t)$). Omdat dan aan de modelvergelijkingen wordt voldaan is J gelijk aan de winst (zie C.1). Voor de berekening van de gradiënt zijn we geïnteresseerd in de variatie van de winst, ofwel J , bij variatie in de stuurgrootheden. Formule C.2 laat zien dat deze variaties op een gekompliceerde manier met elkaar samenhangen. Door een geschikte keuze van de toegevoegde grootheden kan echter een aanzienlijke vereenvoudiging worden bereikt. Met behulp van de volgende keuze voor $\underline{\lambda}$, μ en ρ kunnen een groot aantal termen in C.2 nul worden gemaakt:

$$\text{Buis: } \left[\begin{array}{l} \frac{\partial J}{\partial z} = -\left(\frac{\partial f}{\partial \underline{x}}\right)^T \underline{\lambda} - \mu \left(\frac{\partial h}{\partial \underline{x}}\right) + \rho \left(\frac{\partial g}{\partial \underline{x}}\right) + \left(\frac{\partial W_2}{\partial \underline{x}}\right) \\ \lambda_i(L,t) = -\frac{\partial W_1}{\partial x_i(L,t)} \quad (i \neq 10) \\ \lambda_{10}(0,t) = \frac{\partial W_1}{\partial x_{10}(0,t)} \quad (i = 10) \end{array} \right.$$

$$\text{Firebox: } \rho \frac{\partial g}{\partial q} = \underline{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial q} \quad (\text{C.3})$$

$$\text{Opkoling: } \left[\begin{array}{l} \frac{\partial \mu}{\partial t} = -\underline{\lambda}^T \frac{\partial f}{\partial D} + \rho \frac{\partial g}{\partial D} + \frac{\partial W_2}{\partial D} \\ \mu(z,tb) = 0 \end{array} \right.$$

De toegevoegde grootheden worden gekozen volgens een stelsel vergelijkingen dat grote overeenkomsten vertoond met het model van de oven.

Net als het model kent het "toegevoegde model" een stelsel gekoppelde gewone differentiaalvergelijkingen in de plaats, die nu echter lineair zijn. Het tweepunts randwaarde-probleem is in het toegevoegde model dan ook eenvoudig op te lossen.

Evenals het model bevat het toegevoegde model een algebraïsche vergelijking voor de firebox en een gewone differentiaalvergelijking in de tijd voor de opkoling.

Met de gegeven keuze van de toegevoegde grootheden houden we van C.2 alleen termen over met variaties van stuurgrootheden:

$$\delta J = \int_0^{tb} \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial T_w} + \rho \frac{\partial g}{\partial T_w} \right) - \delta T_w(t) dz dt +$$

$$\int_0^{tb} \left(\frac{\partial W_1}{\partial x_1(0,t)} - \lambda_1(0,t) \right) \delta FI(t) dt +$$

$$\int_0^{tb} \left(\frac{\partial W_1}{\partial x_9(0,t)} - \lambda_9(0,t) \right) \delta FS(t) dt$$

Hieruit volgt de uitdrukking voor de gradiënt $\nabla_{\underline{u}} W_{gem}(t_b)$. Deze gradiënt valt uiteen in verschillende delen voor overwandtemperatuur, voeding en stroomflow:

$$\frac{\partial W_{gem}(tb)}{\partial T_w(t)} = \int_0^L \left(\frac{\partial W_2}{\partial T_w} + \rho \frac{\partial g}{\partial T_w} \right) dz$$

$$\frac{\partial W_{gem}(tb)}{\partial FI(t)} = \frac{\partial W_1}{\partial x_1(0,t)} - \lambda_1(0,t)$$

$$\frac{\partial W_{gem}(tb)}{\partial FS(t)} = \frac{\partial W_1}{\partial x_9(0,t)} - \lambda_9(0,t)$$

Met behulp van deze gradiënt kan de sturing worden verbeterd totdat een van de beperkingen wordt bereikt.

BIJLAGE D: ENKELE KONSTANTEN

$$D_0 = 0.1080 \text{ m}$$

$$DPF = 1.3685$$

$$K = 2.3305 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{K}^4$$

$$L = 88.252 \text{ m}$$

$$p_i: \begin{aligned} p_1 &= 7.0 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_2 &= 14.5 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_3 &= 2.0 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_4 &= 4.0 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_5 &= 10.1 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_6 &= 16.0 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_7 &= 5.7 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \\ p_8 &= 25.0 \text{ SK}/10^6 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$p_s = 5.0 \text{ SK}/10^{12} \text{ J}$$

$$p_{sch} = 0.42 \text{ SK}/10^6 \text{ mol}$$

$$P_u = 147000 \text{ Pa}$$

$$QV_e = 55325 \text{ J/mol}$$

$$QV_s = 63459 \text{ J/mol}$$

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

$$t_s = 1.5 \text{ dag}$$

$$T_I = 925 \text{ K}$$