Optimieren (I)

1. Begriff und Bedeutung der Optimierung

2. Technische Optima (Teil-Optimierung)

2.1 Reaktor zur katalytischen SO_2-Oxidation (Parameter- und Funktionenoptimierung)

2.2 Reaktor zur katalytischen Ammoniak-Synthese (Parameter und Funktionenoptimierung)

3. Wirtschaftliche Optima (Gesamt-Optimierung)

3.1 Destillationskolonne (minimale Gesamtkosten)

3.2 Wärmeübertrager (optimale Kostenentlastung)

3.3 Anlagengröße (maximaler Gewinn oder maximale Rendite)

zu 1.: Begriff und Bedeutung

Unter Optimieren versteht man das Herausfinden , häufig aber keinesfalls immer durch mathematische Methoden, eines besonders vorteilhaften Zustands eines Systems (gesamte Chemieanlage,einzelne Apparate oder Grundoperationen) und zwar dafür, daß eine richtig ausgewählte Zielgröße, ein Extremum (Optimum) annimmt.

Wichtige Zielgrößen bzw. Zielfunktionen eines technischen Optimums (Teil-Optimums) sind:

- Umsatz
- Ausbeute
- Selektivität
- Produktionskapazität je Volumeneinheit des Reaktors
- Temperaturführung
- Energie

→ Vorlesung Chem. Reaktionstechnik I-2

Wichtige Zielgrößen eines wirtschaftlichen Optimums (Gesamt-Optimums) sind:

- Gesamtkosten (bzw. Gesamtkostenfunktionen)
- Rohstoffkosten
- Betriebsmittelkosten
- Investitionskosten
- Rendite ($\leq$ 20%): darf auch nicht zu hoch sein, da sonst der Markt unausgeglichen ist, so daß starke Konkurrenz auftritt
- Gewinn

→ Vorlesung Feasibility-Studie

Folgende Risiken gehen in eine Optimierung ein:

- Reinheit und Verfügbarkeit der Rohstoffe
- Energieträger
- Anfangsphase (Anfahren) der Anlage: oft zusätzlich 1/3 K_I
- Langzeiteffekte (z.B. Verschmutzungen, erhöhte Alterung von Katalysatoren)
- Nutzungsdauer (z.B. Korrosion); Zeitdauer der Abschreibung
- technische Zuverlässigkeit und Produktionsleistung
- Anlagenauslastung, Verkaufspreis, Absatzrisiken
- Standort (auch als Teiloptimum)
- Umweltschutz (z.B. behördliche Auflagen)

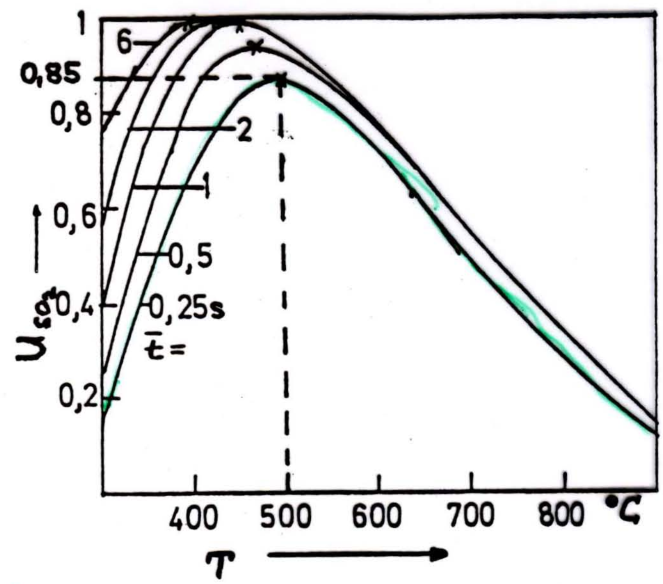
Es gibt kein absolutes Optimum, sondern - auch bei derselben Anlage - viele Optima.

zu 2.: **Technische Optima** (Teil-Optimierung)

zu 2.1: Reaktor zur katalytischen SO_2- Oxidation

Parameteroptimierung ↳ $\bar{t}_{opt}$

optimale Zahlenwerte gesucht
(Optimierung für statische Modelle)



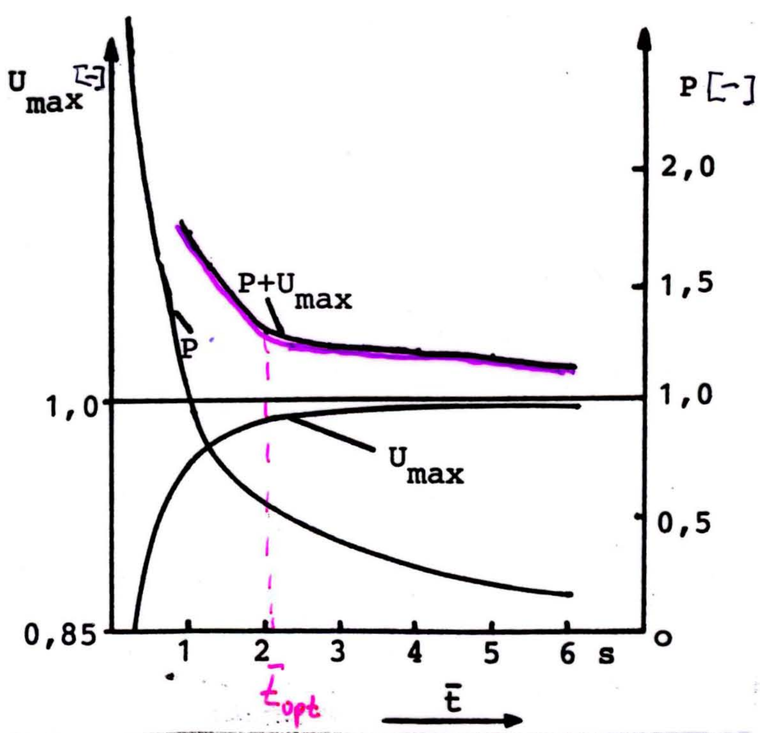
T (°C)	$\bar{t}$ (s)	U_{max} [-]	$P = a\frac{U_{max}}{\bar{t}}$ [-]	$P + U_{max}$
500	0,25	0,85	3,4~~0~~	4.25
475	0,5	0,92	1,85	2.77
450	1	0,97	0,97	1.94
425	2	0,99	0,5~~0~~	1.49
400	6	0,995	0,17	1.17

Tabelle 1: P: Reaktorleistung
$\bar{t}$: mittlere Verweilzeit ($V/\dot{V}_{in}$) $\bar{t} \approx \tau = \frac{V}{\dot{V}_{in}}$
$U_{SO_2,max} \equiv U_{max}$: maximaler Umsatz $\bar{t} = \frac{V}{\dot{V}}$
$a = 1\,s$

$P(\bar{t})$: kein Minimum

$U_{max}(\bar{t})$: kein Maximum

$P(\bar{t}) + U_{max}(t)$: flaches Minimum



Additionskurve ($P+U_{max}$): oft nur ganz flaches Extremum

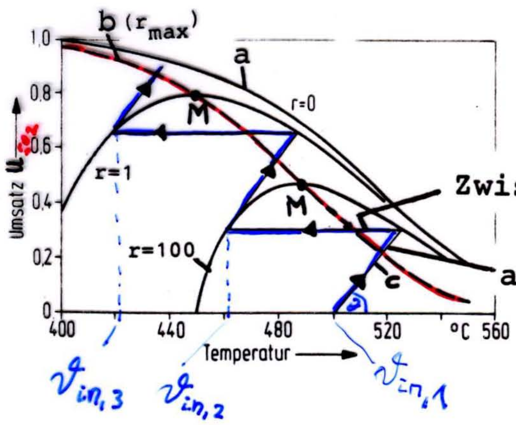
Zielgröße: U_{max} bzw. P

Optimum: maximaler Umsatz bzw. maximale Reaktorleistung (hier: U_{max} + P

Betriebszustand im Optimum: optimale Verweilzeit
↳ $\bar{t}_{opt}$

Funktionenoptimierung

→ optimale Funktion gesucht (Optimierung für dynamische Modelle)



$$\tan\vartheta = \frac{|\nu_A|\,\rho c_p}{c_{A,in}\,U_{max}\,(-\Delta h_R)}$$

a: Gleichgewichtsumsatz (r=0), d.h. U_{max}

b: Umsatz-Kurve bei maximaler Reaktionsgeschwindigkeit r_{max}

≙ Verbindungslinie der Umsatzmaxima bei r > 0:

≙ optimaler theoretischer Temperaturverlauf als f(U), d.h. T(U): Kurve b
(für $N_H \to \infty$)

c: optimaler Temperaturverlauf (in der Praxis) (d.h. bei N_H endlich)
↳ Sägezahn-Kurve c: für N_H endlich werden $\vartheta_{in,m}$ u. $U_{...}$ jeder Schicht so lange variiert, bis $V_{R,min}$ erreicht ist

M: Maximum ; N_H: Anzahl der Horden

Abb. 1 : Optimaler Temperaturverlauf in einem adiabat gefahrenen Schwefelsäure-Hordenkontaktofen mit Kühlung durch Wärmeaustauscher

$r \equiv \frac{1}{V}\frac{1}{\nu_i}\frac{dn_i}{dt}$ V: Vol. der Reaktionsmasse $\approx V_R$

Zielgröße: Reaktorvolumen (V_R) bzw. r

Optimum: minimales Reaktorvolumen bzw. maximale Reaktionsgeschw. (r_{max})

Betriebszustand im Optimum: Optimale Temperaturführung $T(U_{SO_2})$

↳ theoretisch : Funktion bzw. Kurve b

praktisch : "Sägezahn" - Kurve c

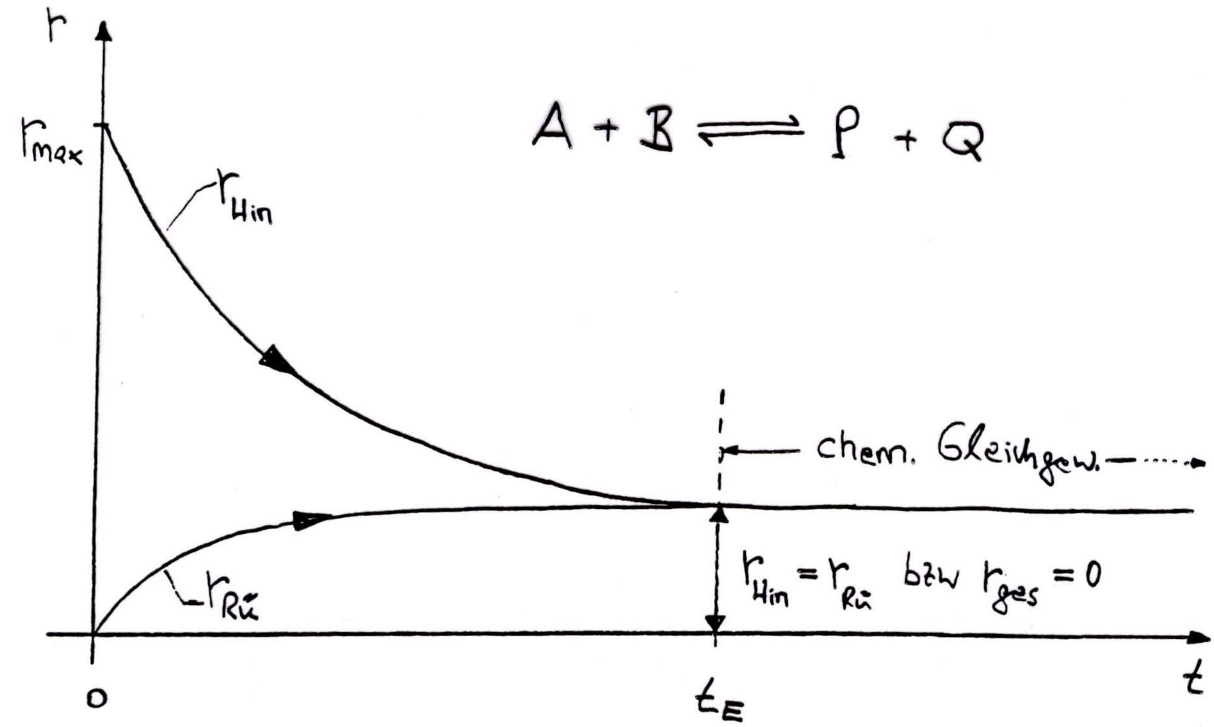


Abb. 4.1 Reaktionsgeschwindigkeiten der Hin- und Rückreaktion in Abhängigkeit der Zeit t und dynamischer Gleichgewichtszustand (≙ chem. Gleichgewicht)

T_E : Einstellzeit des chem. Gleichgewichts

die nach **außen hin makroskopisch beobachtbare** (Brutto-, Gesamt-) RG r_{ges} ist infolge (→ **Abb. 4.1**):

$$\boxed{r_{Hin} = r_{Rü}} \tag{4.3c}$$

$$\boxed{r_{Hin} - r_{Rü} \equiv r_{ges} = 0} \tag{4.3d}$$

zu 2.2 Reaktor zur katalytischen Ammoniaksynthese

Parameteroptimierung

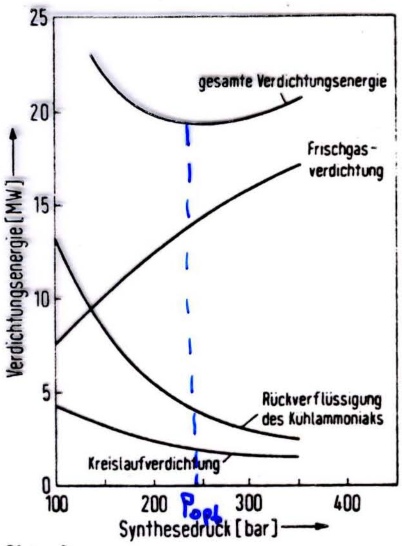


Abb. 2: Energieoptimierung einer NH_3-Synthese für 1000 s.t./d NH_3
Ansaugdruck 27 bar; Ansaugtemperatur 37 °C; 15 Vol.-% Inerte im Kreisgas

1 short ton (s.t.) ≈ 0.907t

Zielgröße: Kompressionsenergie

Optimum: minimale gesamte Kompressionsenergie

Betriebszustand im Optimum: optimaler Synthesedruck

P_{opt} [Parameter]

Funktionenoptimierung

Zielgröße: Reaktorvolumen V_R bzw. r

Optimum: minimales ($\rightarrow V_{R,min}$) Reaktorvolumen bzw. maximale Reaktionsgeschwindigkeit ($\rightarrow r_{max}$)

Betriebszustand im Optimum: optimale Temperaturführung $T(y_{NH_3})$

→ theoretisch: Kurve b

→ praktisch : Sägezahn-Kurve c

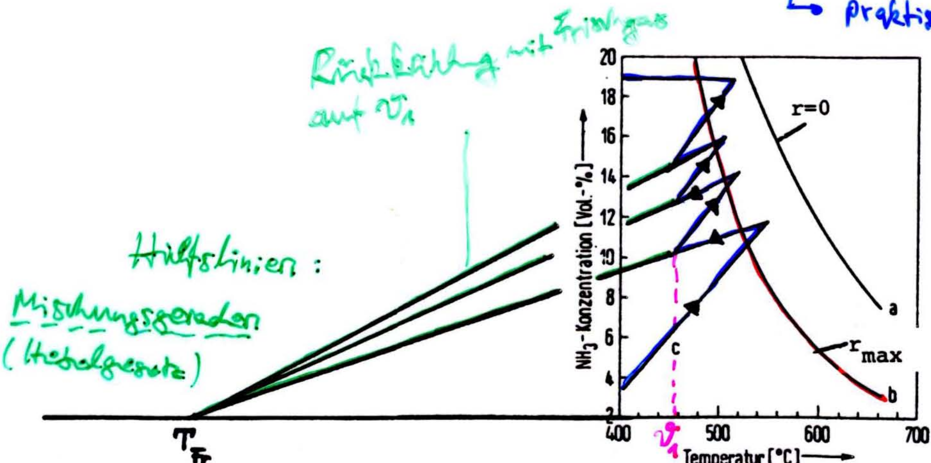


Abb. 3: Optimaler Temperaturverlauf (Kurve c) in einem Abschnittsreaktor mit Kaltgaskühlung — Sägezahn Kurve
a Gleichgewichtskurve; b Kurve maximaler Reaktionsgeschwindigkeit

→ theor. opt. Temp. verlauf

T_{Fr}: Temperatur des kalten Frischgases, das in den NH_3-Reaktor eingeblasen wird zu **3 Wirtschaftliche Optima** (Gesamt-Optimierung)

Das Ziel einer Optimierung sind i.a. nicht die technischen sondern die wirtschaftlichen Optima. Beide Optima-Kategorien unterscheiden sich oft erheblich in den Betriebszuständen, welche die optimale Zielgröße charakterisiert.

zu **3.1 Destillationskolonnen**

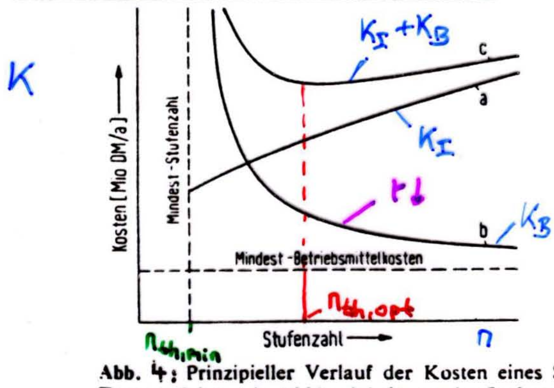


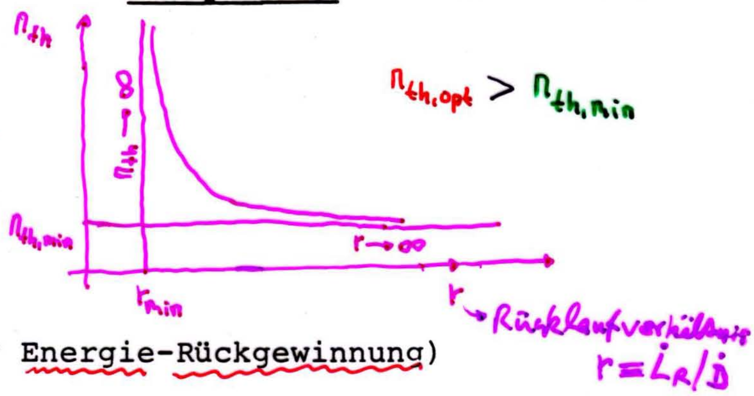
Abb. 4: Prinzipieller Verlauf der Kosten eines Stufen-Trennverfahrens in Abhängigkeit von der Stufenzahl
a jährlicher Investitionskosten-Anteil (z. B. 40 % der Anschaffungskosten); b Betriebsmittelkosten; c Summe von a und b

↳ K_E (Energiekosten)

Zielgröße: Gesamtkosten

Optimum: minimale Gesamtkosten

Betriebszustand im Optimum: Optimale Trennstufenzahl



zu **3.2 Wärmeaustauscher:** (z.B. für Energie-Rückgewinnung)

$K_{Ent}(K_I)$-Kurven $\hat{=}$ $\dot{Q}(A)$-Kurven

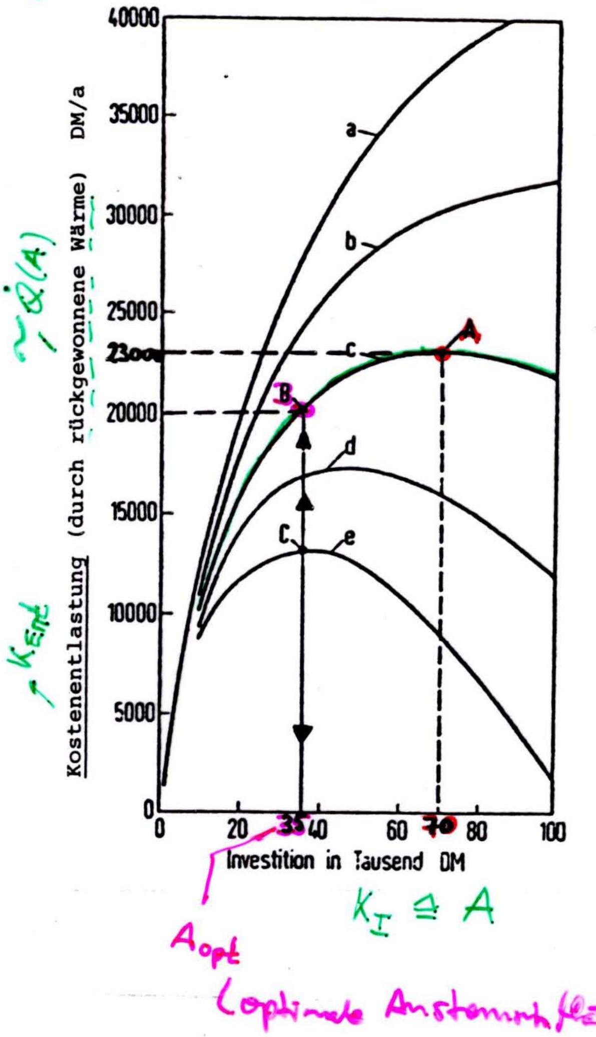


Abb.5: Prozeß- und/oder betriebswirtschaftliche Wärmeaustauscher-Optimierung
a: jährliche Kostenentlastung ohne Berücksichtigung des Kapitaldienstes; Kurve b,c,d,e entsprechen der Kostenentlastung abzüglich 10,20,30 und 40% Kapitaldienst
b c d e
A. maximale Kostenentlastung bei 20% Kapitaldienst (max. Nettogewinn)
B. optimale Kostenentlastung bei 20% Kapitaldienst* (Gewinnoptimum)
C. maximale Kostenentlastung bei 40% Kapitaldienst
*und einer Rendite-Erwartung von weiteren 20%

Zielgröße: Kostenentlastung ($\dot{Q}$) $\hat{=}$ K_{Ent}

Optimum: optimale Kostenentlastung $\neq$ maximale Kostenentlastung

unabhängige Variable im Optimum: optimale Größe ($\hat{=}$ Investitionskosten) des Wärmeaustauschers

↳ $K_{I,opt} \hat{=} A_{opt}$

$\dot{Q} = k \cdot A \cdot \Delta T(A) \neq \sim A$ ⇒ Kurve a in Abb. 5 flacht ab

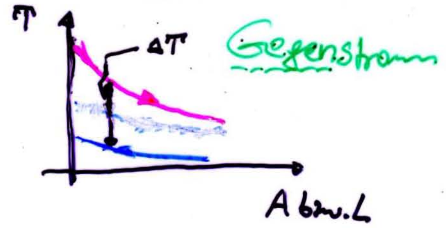
$\dot{Q}$: ausgetauschter Wärmestrom

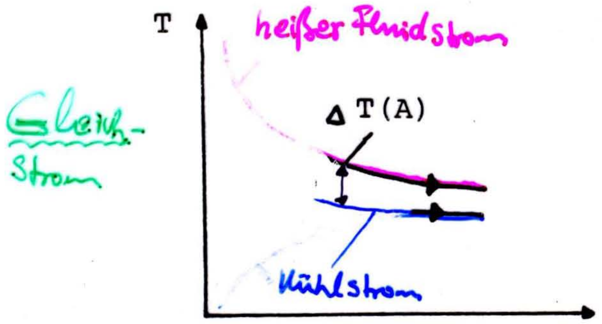
k: Wärmedurchgangskoeffizient

A: Austauschfläche z.B. $A = \pi d L$

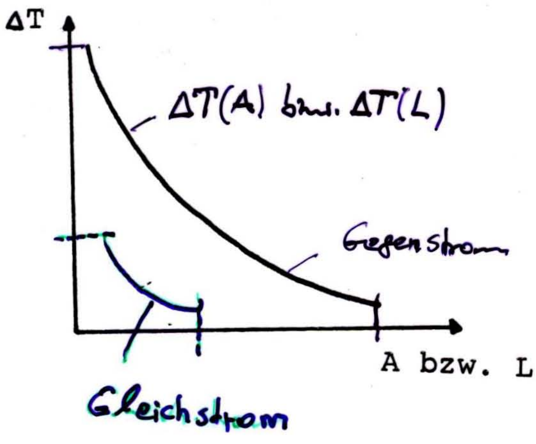
ΔT: Temperaturdifferenz zwischen den Fluiden : $\Delta T(A) \neq$ const.

L: Länge des Wärmeaustauschers





oder:



Zusätzliche Ersparnisse:

- Kühlwasserverbrauch wird kleiner, bzw. Rückkühlwerke kleiner dimensionierbar, da WA Wärme abführt
- konstruktive Verbesserungen der WA
  - höhere Strömungsgeschw. w, d.h. WA kleiner auslegbar
    Nachteile: höhere Energiekosten K_E
    höherer Δp
    ⇒ K/K_E möglichst groß
- steuerliche Gesichtspunkte
  - höhere Betriebskosten (im Unterschied zu K_I sofort abschreibbar) als dem Optimum entspricht

Kurve c   des K_I von Spalte 4

Tab. 2 Darstellung des Unterschiedes zwischen maximaler und optimaler Einsparung von Wärmeenergie nach Abb. 5

Investition DM	Einsparung von Wärmeenergie DM/Jahr 1)	zusätzl. Verzinsung 1)	Teileinsparung von Wärmeenergie DM/Jahr 2)	Teilverzinsung 2)	Rendite
10 000	10 000	100%	10 000	100%	100−20 = 80%
20 000	15 700	78%	5 700 (15700 − 10.000)	57%	57 − 20 = 37%
B → 30 000	19 000	63%	3 300 (19000 − 15700)	33%	→ 33% − 20% = 13% Rendite
40 000	21 000	52%	2 000	20%	20−20 = 0% ↳ Kapitaldienst (20%)
50 000	22 200	44%	1 200	12%	
60 000	22 800	38%	600	6%	
A → 70 000	23 100	33%	300	3%	

1) Nach Abzug von 20% Kapitaldienst.

2) Für die letzten 10 000 DM des investierten Kapitals

$\frac{K}{K_E}$ - Quotient: soll möglichst groß sein

K: Kapitaldienst (Investitionskosten +Gewinnerwartung)

K_E: Energiekosten

zu 3.3 Anlagengröße

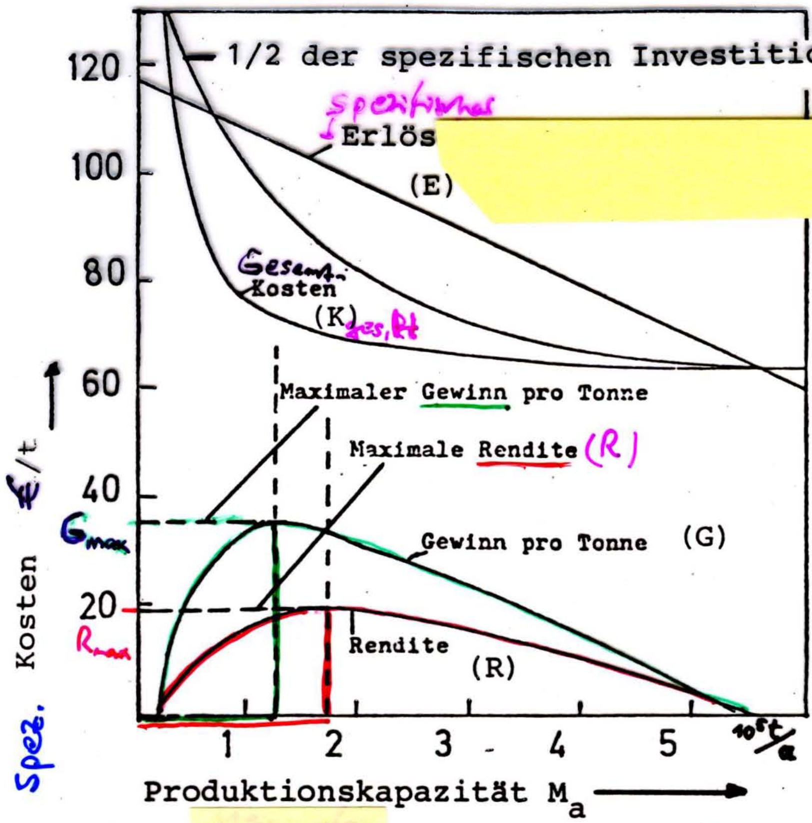


Abb.6: Maximaler spezifischer Gewinn und maximale Rendite

$a_1 = 10^{-4}\ \frac{€}{t^2/a}$; $E_0 = 120$ €/t;

$a_2 = 1{,}5 \cdot 10^6\ \frac{€}{a}$; $K_0 = 61$ €/t;

$b = 5 \cdot 10^3\ \frac{€}{a^{0,28}\,t^{0,72}}$; m=0,72

optimale Anlagengröße ($\dot{M}_{a,opt}$) ist abhängig von der Wahl der Zielgröße G od. R:

$(\dot{M}_{a,opt})_G \approx 1.3 * 10^5$ t/a

$(\dot{M}_{a,opt})_R \approx 1.8 * 10^5$ t/a

$(\dot{M}_{a,opt})_R > (\dot{M}_{a,opt})_G$

Zielgröße: spezifischer Gewinn G oder spezifische Rendite R

Optimum: maximaler spezifischer Gewinn G_{max} oder maximale spezifische Rendite R_{max}

unabhängige Variable im Optimum:

optimale Anlagengröße $M_{a,opt}$
(Produktionskapazität)

Auswertung zahlreicher bestehender Produktionsanlagen hat ergeben: Opt. I

$$E(M_a) = E_0 - a_1 M_a$$ linear mit M_a — Erlös-Kurve in Abb.6

$$K_{H,ges}(M_a) = K_0 + \frac{a_2}{M_a}$$ umgekehrt proportional zu M_a — Gesamt-(Produktions) Herstell-Kosten-Kurve in Abb.6

$$G(M_a) = E - K_{H,ges} = (E_0 - K_0) - \left(a_1 M_a + \frac{a_2}{M_a}\right)$$ Gewinn-Kurve in Abb.6

$$K_{I,a} = b\,M_a^{m}$$ degressiv ($m<1$) mit M_a : Investitionskosten

bzw.

$$\frac{K_{I,a}}{M_a}(M_a) = b\,M_a^{m-1}$$ spezifische Investitions-Kurve in Abb.6

$$R(M_a) = \frac{G}{K_{I,a}/M_a}$$ spezifische Rendite-Kurve in Abb.6

Hierin bedeuten:

E	€/t	spezifischer Erlös nach Abzug von Transportkosten, Mengenrabatten sowie Stillegungskosten
M_a	t/a	Anlagenkapazität (Maß für die Größe einer Anlage)
$K_{ges,H}$	€/t	spezifische Gesamt(Produktions) Herstell-kosten der Anlage
G	€/t	spezifischer Gewinn
$K_{I,a}$	€/a	Investitionskosten pro Jahr
$\frac{K_{I,a}}{M_a}$	€/t	spezifische Investitionskosten
R	—	Rendite
E_0, a_1, K_0, a_2, b, m		Konstanten deren Zahlenwerte und Einheiten in (Abb.6) angegeben sind