

# 低压高密度聚乙烯装置动态模拟模型开发策略浅谈

王淑清

(大庆石化总厂计算机开发公司,黑龙江 大庆 163714)

**摘要:**讨论了应用通用流程模拟软件 Aspen Plus、聚合物模拟软件 Polymers Plus 及动态模拟软件 Aspen Dynamics 开发低压高密度聚乙烯装置反应系统动态模型的策略和方法。

**关键词:**模拟软件;低压高密度聚乙烯(HDPE);动态模拟

中图分类号:TQ325.12

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2003)03-0044-04

## Development strategy of high-density polyethylene unit's dynamic simulative models

WANG Shu-qing

(Computer Development Company, Daqing Petrochemical Complex, Daqing 163714, China)

**Abstract:** The method of developing high-density polyethylene unit reactor system dynamic models was discussed with the general process simulative software Aspen Plus, the polymer process simulative software Polymers Plus and the dynamic process simulative software Aspen Dynamics as the key to the settlement.

**Key words:** simulative software; high-density polyethylene(HDPE); dynamic process simulation

化工过程的稳态模拟技术已经非常成熟,在国内的应用也较为普遍。但是基于稳态模型的动态模拟技术在国内应用还比较少。

应用 Aspen Dynamics 开发动态模拟模型可以模拟装置的动态特性,用于控制方案的分析,在设计一个新流程时,可评价工艺流程方案的可操作性。笔者借助于 AspenTech 公司的 Aspen Plus、Polymers Plus 及 Aspen Dynamics 模拟软件开发了低压高密度聚乙烯(HDPE)装置的稳态及动态模型。现将动态模拟模型开发策略做一简要剖析。

### 1 流程简述

大庆石化总厂 HDPE 装置是从日本三井化学公司引进的成套技术,采用淤浆法生产工艺,共有 3 条生产线,生产能力为 24 万 t/a。

淤浆法 HDPE 聚合反应是使用 Ziegler-Natta 聚合方式将高纯度的乙烯单体进行聚合,生产高密度聚乙烯。根据生产牌号不同,使用丙烯或丁烯作为共聚单体。催化剂包括主催化剂四氯化钛和助催化

剂三乙基铝,使用己烷作为聚合反应的溶剂。聚合反应温度在 70 ~ 85 °C,聚合压力在 0.2 ~ 0.8 MPa。由于反应温度远远低于 HDPE 树脂的熔点(140 °C 左右),因此,一旦生产了聚合物,它就会沉降下来。

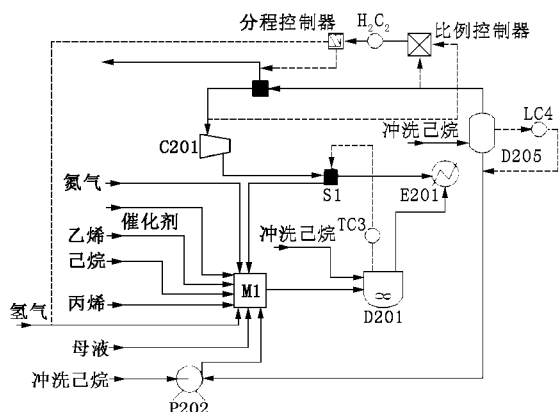
聚合反应是采用低压己烷淤浆法工艺,聚合釜 D201/221 按并联或串联方式排列。乙烯、氢气、丙烯或 1-丁烯与聚合釜循环气相混合,并通过气体注入管线加到聚合釜中,含有乙烯和氢气的循环气送入聚合釜底部,在聚合釜内聚合,生成聚乙烯,经溢流管到淤浆稀释罐 D202,再进入闪蒸釜 D223 进行闪蒸,浆液送到离心机 M301 进行分离,再经干燥,送到造粒工段造粒。并联 A 方式反应系统模拟流程见图 1。

### 2 动态模型开发策略

#### 2.1 稳态模型的要求与准备

##### 2.1.1 动态模型对稳态模型的要求

HDPE 装置的动态模拟模型是建立在稳态模型的基础之上的。通过建立稳态模型来获取物性、相



D201—反应釜; P202—凝液循环泵; E201—釜顶冷凝器; C201—循环气风机; D205—己烷接收罐;  $H_2C_2$ —循环气中氢气乙烯比控制器; M1—进料混合器; TC3—反应釜温度控制器; S1—循环气风机出口分流器; LC4—己烷接收罐液位控制器

图1 并联A生产方式模拟流程图

平衡等热力学性质及聚合工艺动力学数据。所以,要求稳态模型必须准确,能够反映聚合过程的实际情况。表1是我们建立的并联A牌号的稳态模型模拟结果。

表1 并联A牌号模型结果与目标值对比

| 项目                         | 目标值            | 模型结果  |
|----------------------------|----------------|-------|
| HDPE 产率/ $kg \cdot h^{-1}$ | 5833 ~ 5896    | 5833  |
| 数均相对分子质量                   | 21000 ~ 25000  | 21655 |
| 相对分子质量分布(PDI)              | 5.0 ~ 5.5      | 5.4   |
| 循环气中氢气乙烯摩尔比                | $0.6 \pm 0.05$ | 0.62  |
| 乙烯转化率/%                    | $97.5 \pm 0.5$ | 96.9  |
| 丙烯转化率/%                    | $82 \pm 2$     | 83.8  |
| 反应器停留时间/h                  | 2.1            | 1.96  |
| 循环气流量/ $m^3 \cdot h^{-1}$  | 4500 ~ 4800    | 4698  |

A牌号的HDPE产品的数均相对分子质量( $M_n$ )为21 654,重均相对分子质量( $M_w$ )为116 979,相对分子质量分布为5.4。可见,模型结果与目标值吻合得很好,所以该模型是准确和可用的。

### 2.1.2 稳态模型的准备

动态模型运行时数据处理量很大,所以将稳态模型中不必要的计算减到最小,是保证动态模型质量的前提之一。用于动态模型的稳态模型中不必要的计算包括以下几点。

#### (1) 不必要的组分

不必要的组分指体系中少量的不影响模拟结果的组分。在稳态模型中应将这组分删除,以减少

动态模型的计算量。

#### (2) 无关的相平衡计算

检查稳态模型中每个物流的气相摩尔分率(VFRAC)。如果一个物流只有一个相态,则要在该物流的闪蒸选项中规定其为单一计算结果相态。这样可以避免单相物流闪蒸结果出现异常。

对于每个单元操作的出口物流也要进行检查。如果物流为单相,要使单元模块的闪蒸选项中不出现气液两相的选项。

#### (3) 无关的单元操作模块

无关的单元操作模块是指可将其与其他单元进行合并计算的模块。在稳态模型中,连续搅拌槽反应器(CSTR)后有一个计量反应器(RSTOIC)。在CSTR中包含所有相关聚合反应的Ziegler-Natta(ZN)反应集,在RSTOIC中含有生成低聚物、乙烷和丙烷的反应。这些反应中只包含反应的化学计量系数及用户规定的转化率。可以将RSTOIC模块删除,将低聚物、乙烷和丙烷的生成反应加入到CSTR的Power-law类反应中。

## 2.2 稳态模型向动态模型的转化

要将稳态模型转成动态模型,需注意这样几个问题:①在稳态模型中输入使用控制器的单元操作的动态数据;②完成模拟运行并确认结果中没有错误产生;③在转成动态时同时生成APPDF文件。

### 2.3 聚合物属性的处理

如果物流中含有少量的催化剂或聚合物(如循环气物流),Aspen Dynamics将把该物流作为聚合物物流,从而使得固定变量数和自由变量数与方程数一致。所以,将稳态模型转化为动态模型后,要首先解决这个问题。方法是根据工艺过程校正每一股物流,具体地说是校正每个物流中的Catalyst\_in\_stream变量。

### 2.4 反应器的处理

10.2版的Aspen Plus中的CSTR反应器没有气相出口,在做稳态模型的时候在反应器后面加了一个闪蒸模块。而Aspen Dynamics的RCSTR模型中有气相出口,所以要注意删除稳态模型中反应器后面的闪蒸单元,将气相物流连接到反应器上。

### 2.5 控制器的建立

模型建立控制器的总体原则如下:

①如果单元模块为液相,Aspen Dynamics加入液位控制器。②如果单元模块为气相,Aspen Dynamics加入压力控制器。③如果单元模块为反应器,Aspen Dynamics加入温度控制器。

Aspen Dynamics 自动完成的控制策略并不一定是所需的,必须根据实际的控制策略添加和删除控制器。在这里需要注意以下几点:

#### (1) 反应器的控制

该反应器没有液位控制器,但有一个堰。首先重新连接液位控制器到液相出口物流。并在 flow-sheet 表格中加入堰的方程。

#### (2) 换热器的压力处理

加入换热器 E201 出口压力计算方程,反应器的温度控制器才能正常运行。该方程如下:

$$\text{换热器出口流率} = C_V \sqrt{\Delta P}$$

这里  $C_V$  为阀常数,  $\Delta P$  为换热器的压降。

#### (3) $H_2/C_2H_4$ 控制器

通过调节氢气流率和 D205 放空流率来控制氢气与乙烯摩尔比。需要加入 3 个模块来完成该控制器。第一个模块为比率控制器模块 (Ratio), 计算循环气中氢气和乙烯的摩尔比。第二个模块为 PID 控制器, 在与 Ratio 模块相同的文件夹中选择该模块, 规定该控制器的作用为正向。第三个模块为 Splitrange, 用于加入 PID 信号。该模块允许 PID 控制器调节两个变量(氢气进料和 D205 放空)来控制  $H_2/C_2H_4$  摩尔比。

#### (4) 控制器的调节

Aspen Dynamics 为每个控制器提供了初值,但还需要调节控制器参数,如增益、积分和微分来优化控制器。具体的调节方法如下:

① 将一个控制器设定点进行小的改变时,动态响应能达到稳态但达不到设定点,则需增加控制器的积分时间。

② 如果动态响应能达到设定点但时间太长,需增加控制器的增益。

按以上两种方法调节直到控制成功。需要注意的是一个不好的控制器会影响其他控制器。当调节每个单独参数时应同时监控所有控制器的控制图。

### 3 模型的结果

动态模型与稳态模型要考察的结果有所不同。现以我们开发的某一牌号为例进行说明,见表 2。

### 4 模型的验证

HDPE 装置的动态模型可以通过以下几个方面得以验证。

#### (1) 考察乙烯进料的影响

现场生产经常要调节原料进料。所以乙烯进料

对工艺的影响是工艺工程师所关心的问题。

表 2 并联 A 牌号动态模型结果

|                            | 目标值         | 模拟结果值   |
|----------------------------|-------------|---------|
| 氢气与乙烯比控制器 SP 值             | 0.55 ~ 0.65 | 0.63    |
| D205 液位控制器 SP 值/m          | 1.58 ~ 1.78 | 1.68    |
| 反应釜温度控制器 SP 值/°C           | 84 ~ 86     | 85      |
| 输入干扰后被控变量达到稳态趋势图           | 2 个周期内      | 1 个周期   |
| 输入干扰控制器达稳态后 PV 值与 SP 值间的偏差 | 0           | 0       |
| HDPE 产量/kg·h <sup>-1</sup> | 5833        | 5837.65 |
| 熔融指数                       | 0.8 ~ 1.2   | 0.97    |
| 密度/kg·m <sup>-3</sup>      | 949 ~ 953   | 952     |
| 循环气中氢气与乙烯摩尔比               | 0.6 ± 0.05  | 0.63    |

考察乙烯进料影响的具体方法为:增加乙烯进料流率 10%,每次增加 2%。在动态模型中用 PID 控制器来控制循环气中氢气与乙烯摩尔比、反应器温度及闪蒸罐 D205 液位。观察 2 个指标,一是增加乙烯进料流率对 HDPE 产品数均相对分子质量 ( $M_n$ ) 和相对分子质量分布 (PDI) 的影响;二是增加乙烯进料对 HDPE 产量的影响。分别见图 2 和图 3。

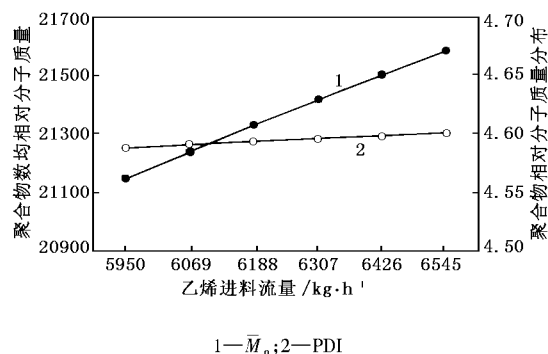
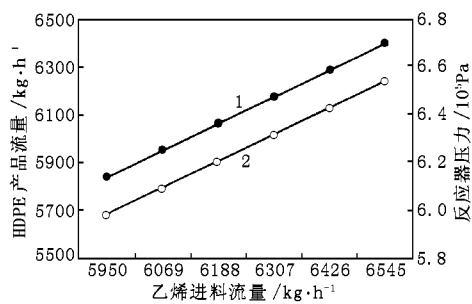


图 2 增加乙烯进料对产品数均相对分子质量及相对分子质量分布的影响

由图 2 可以看出,增加乙烯进料,  $M_n$  线性增加,而 PDI 不变,这是因为氢气与乙烯摩尔比和反应器温度没有改变。

由图 3 可以看出,增加乙烯进料,HDPE 产量增加,而同时反应器压力也增加。这是因为乙烯进料的增加导致氢气与乙烯比控制器设定值增加,加大了氢气进料。而催化剂进料保持不变,乙烯和氢气进料的增加必定会使反应器压力增加,这是符合实际情况的。

#### (2) 考察催化剂进料量的影响



1—HDPE 产品流率; 2—反应器压力

图3 增加乙烯进料对 HDPE 产量及反应器压力的影响

具体方法为:增加催化剂进料量,观察对反应器压力、氢气与乙烯比的影响。

①现场 P1 牌号催化剂配比为:主催化剂(PZ) 0.175 kg/h,助催化剂(AT) 0.658 kg/h,总量为 0.82 kg/h。经动态模型计算,P1 牌号催化剂进料量按比例减少对压力的影响,见表 3。

表 3 P1 牌号催化剂进料量与压力对照表

| 催化剂进料量/<br>kg·h <sup>-1</sup> | 压力/<br>MPa | PZ <sup>①</sup> 进料量/<br>kg·h <sup>-1</sup> | AT <sup>②</sup> 进料量/<br>kg·h <sup>-1</sup> |
|-------------------------------|------------|--|--|
| 0.72                          | 0.664845   | 0.154                                      | 0.577                                      |
| 0.74                          | 0.651844   | 0.158                                      | 0.594                                      |
| 0.76                          | 0.639559   | 0.162                                      | 0.610                                      |
| 0.78                          | 0.62784    | 0.166                                      | 0.626                                      |
| 0.80                          | 0.61667    | 0.170                                      | 0.642                                      |
| 0.82                          | 0.60300    | 0.175                                      | 0.658                                      |

注:①主催化剂,主要成分为四氯化钛;②助催化剂,主要成分为三乙基铝。

催化剂进料量增加,参与反应的乙烯和氢气便会增加。反应器中没有反应的氢气和乙烯减少,所以反应器的压力会降低。

②催化剂进料量增加,参加反应的乙烯增加,反应器中氢气/乙烯就会随之增加。而图 4 所反映出来的趋势与分析结果是一样的。

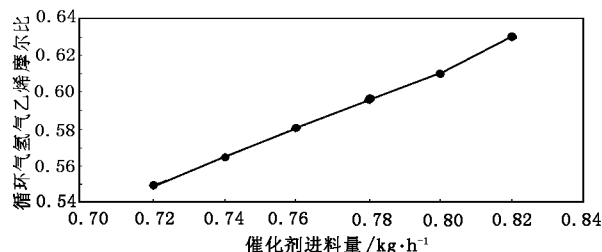
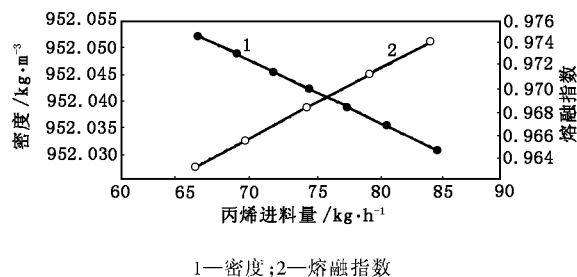


图4 催化剂进料量对氢气乙烯比的影响

### (3) 共聚单体对熔融指数和密度的影响

共聚单体对熔融指数和密度的影响也是工艺工程师所关心的问题。考察共聚单体对熔融指数和密度的影响方法如下:增加共聚单体丙烯的进料量并跟踪 HDPE 密度和熔融指数的变化。

丙烯进料量增加,聚合物的支化程度增加,密度就会降低。而支化程度增加使得聚合物流动性好,熔融指数增加。图 5 的趋势正好与实际情况符合。



1—密度; 2—熔融指数

图5 共聚单体丙烯进料量对产品密度和熔融指数的影响

如果在建立 HDPE 动态模型的过程中注意到上述问题,并通过相应验证,便能够建立起准确的动态模型,为装置的生产服务。■

## 欢迎订阅 2003 年《化工新型材料》

《化工新型材料》创刊于 1973 年,系中国化工信息中心主办的化工科技类刊物。主要报道国内外新近发展和正在开发的具有某些优异性能或特种功能的先进化工材料的研究开发、技术创新、生产制造、加工应用、市场动向及产品发展趋势。

《化工新型材料》为月刊,大 16 开。国际刊号:ISSN 1006-3536,国内刊号:CN 11-2357/TQ,国内定价:10 元/期,120 元/年。邮发代号:82-816,全国各地邮局均可订阅或

通过编辑部直接订阅。

地址:北京安定门外小关街 53 号 邮编:100029

电话:(010)64437113 64444093-843、844、845、846

传真:(010)64444086

E-mail:q-linl@mail. encic. gov. cn

开户行:农行亚运村支行营业室

户名:北京中化信深达信息技术有限责任公司

帐号:230101040001610