

# Design and parameter sensitivity analysis of small modular synthesis ammonia process package

Wei Xiao

Nanjing Guochang Chemical Technology Co., Ltd., Nanjing, Jiangsu, 210000, China

## Abstract

In the context of global energy transition and carbon neutrality goals, small modular synthetic ammonia processes have gained attention for their flexibility and efficiency. Particularly suitable for wind-solar hybrid systems integrating electrolysis-based hydrogen production, these processes enable direct installation near renewable energy facilities, effectively addressing intermittency issues in renewable power generation as well as challenges in hydrogen storage and transportation. This study focuses on small modular synthetic ammonia processes, conducting design and parameter sensitivity analysis of process packages. Through systematic process design, key parameters such as reaction temperature, pressure, and hydrogen-to-nitrogen ratio were identified. Chemical simulation software was then employed to model the designed process packages, analyzing how parameter variations affect ammonia synthesis efficiency. Results demonstrate that reaction pressure and hydrogen purity are critical factors influencing ammonia yield.

## Keywords

modular ammonia synthesis; process package design; chemical engineering simulation software; ammonia synthesis efficiency

# 小型模块化合成氨工艺包设计及参数敏感性分析

肖伟

南京国昌化工科技有限公司, 中国 · 江苏 南京 210000

## 摘要

在当前全球能源转型与碳中和目标的大背景下, 小型模块化合成氨工艺凭借其灵活性与高效性受到关注。该工艺特别适用于风光发电结合电解水制氢的场景, 能够在风场和光伏场周边直接建设, 有效解决可再生能源发电的间歇性问题以及氢气存储与运输的难题。本文以小型模块化合成氨工艺为研究对象, 开展了合成氨工艺包的设计及参数敏感性分析。研究首先通过系统的工艺设计, 确定了合成氨的关键工艺参数, 如反应温度、压力和氢氮比等; 然后运用化工模拟软件对设计的工艺包进行了模拟, 以分析各参数变化对合成氨效率的影响。研究结果表明, 反应压力和氢气纯度是影响合成氨产量的关键因素。

## 关键词

模块化合成氨; 工艺包设计; 化工模拟软件; 合成氨效率

## 1 引言

小型模块化合成氨工艺用它的特别的适应性和高性能融合特性, 于现今环保动力转变的趋势里, 重点集中在合成氨也就是绿氨的制造范围。此工艺借助模块化设计, 可以方便地布置在风光发电站周边, 立即运用电解水制成的绿氢开展合成氨, 高效地克服了可再生能源不稳定性和氢气储备输送的困境。传统合成氨范围常常依靠化石燃料, 工艺流程稳定并且规模较大, 不易匹配小型模块化工艺的适应性需要。小型模块化技术可以通过根据需要调整, 而且能融合环保工艺。

【作者简介】肖伟 (1987-), 男, 中国安徽人, 本科, 工程师, 从事氨和甲醇工艺包设计研究。

## 2 背景及意义

### 2.1 全球合成氨生产现状

全球合成氨生产首要以哈伯博施法为根本, 该工艺从 20 世纪初发展之后, 持续占据了领先地位。传统的合成氨生产装置规模庞大, 一般与氮肥生产密切联合, 占用众多资源和能源。全球合成氨产量已经超越 1.8 亿吨/年, 该产业极度聚集, 少数公司掌控了绝大多数市场。大规模合成氨装置因为它的规模效应从而拥有成本优势, 然而昂贵的初步投资和运行保养成本令其于市场需求波动之际看起来不足弹性。合成氨生产是为一个能耗非常高的过程, 对于化石燃料的依靠导致生产过程中二氧化碳排放量高居不下, 造成了环境担忧。为了面对这些挑战, 新型、小型、模块化的合成氨装置着手获得重视。这类装置能够在较少的投入之下达成更加机动的反应条件调节, 因而减少运营风险。模块化设计也

可以在分布式能源系统中施展功能，和可再生能源融合，明显削减碳足迹，提升可持续性。此类机动和绿色的解决方案为分散的市场需求供给新颖的面对途径，期待在合成氨领域带动全新的进步潮流。

## 2.2 小型模块化合成氨设备的优势

小型模块化合成氨设备结构设计非常简单，投资需要的资金不多，而且布置起来特别灵活，合成氨行业因此受到很多人重视。这样的设备完全能够适应各种不同的生产环境，特别适合那些规模不算大的化工厂，或者位于偏远地区远离主要工业基地的地方，展现出非常不错的经济效益和技术实力。模块化设计最大的亮点就是整合程度很高，可以先工厂里提前制作好，经过非常严格的检测之后运送到指定地点进行安装，建设所需时间大大缩短。这样的设计方式完全满足生产的要求，同时还能减少设备运行时消耗的能源，提升整体生产效率和经济效益，真正做到节能又实用。和传统的大型一体化合成氨装置相较于，小型模块化设备于迅速反应市场变化领域展现出强大的灵活性，能依据区域市场需求调节生产规模，符合本地化合成氨的供应需求。它的更小的占地面积和设备简化设计同样使适合于更广条件受限的区域。

## 3 关键工艺参数定义

### 3.1 反应温度压力和氢氮比的选择

反应温度、压力还有氢氮比例属于小型模块化合成氨工艺里面最为关键的几个控制因素，直接决定合成氨反应的效率高低和最后产量的多少。反应温度作为合成氨反应中一个特别重要的控制指标，挑选适合的温度需要认真思考化学反应速度的快慢以及热力学平衡状态的影响关系。温度偏高会让反应速度变快，但不利于反应平衡向生成氨的方向转变发展。把温度控制在 400° C 到 500° C 这个范围里面，可以让反应速度和平衡转化率维持在一个比较理想的水平状态。反应压力同样属于一个很重要的控制因素，适当提高压力水平有利于提升氨气生成的比例数量。

高压力环境能够帮助增加反应物浓度，推动化学平衡向生成氨的方向发生变化。如果压力设置得太高，就会对设备稳定运行、能源消耗费用以及整体工作效率带来不利影响。考虑到小型设备采用模块化设计带来的便利，研究提出建议，将压力范围设定于 10MPa 至 20MPa 这个区间。氢气与氮气配比的选择会直接决定反应物利用程度和整个反应的效果好坏。工业生产环节中，大多采用理论上的化学计量配比，也就是氢气与氮气按照 1 比 3 混合，但实际操作时会稍作调整，设定为 2.8 至 3.0 这个范围，以降低氮气过多可能引发的麻烦。小型模块化设备运行时，精确设定氢气与氮气的配比显得格外重要，这对提升氢气利用效果和反应转化效率有很大帮助。

### 3.2 氢气纯度的重要性

氢气纯度的水平合成氨生产过程中是一个非常重要的

因素，直接关系到反应的效率和最终产品的质量。传统合成氨工艺中，如果氢气纯度得到提高，就能有效降低杂质对催化剂性能的不良影响，让反应的选择性和运行速度都得到提升。像甲烷、水蒸气、氧化物这样的杂质气体，会抢占催化剂上的活性点位，甚至可能导致催化剂长时间失去活性，最终造成氨的产量明显减少。小型模块化生产模式中，设备规模比较小，对氢气的使用效率要求非常高，使用纯度更高的氢气可以让整个工艺运行更平稳，同时提高能量使用的效率。氢气纯度的高低还会影响到整个系统的工艺参数平衡，比如反应所需的压力大小以及氢氮比例的调整范围大小。工艺包设计过程中，对氢气纯度进行精确的控制和调节，对完善小型模块化合成氨技术具有重要意义。

## 4 工艺包设计与模拟实现

### 4.1 利用化工模拟软件的策略

为了实现小型模块化合成氨工艺包的设计与优化，化工模拟软件被选为关键工具，以便构建准确的流程模型并评估系统性能。模拟策略的核心包括对反应器、分离装置及辅助设备性能的精确描述，确保工艺流程的整体性和模拟结果的可靠性。在方法选择上，采用基于热力学和传递理论的模型构建方式，通过输入反应物性质、工艺条件及设备参数，完成对工艺过程的虚拟表达。

参数设定环节的重点在于反应温度、压力及原料氢氮比，其中反应器作为关键模块，需要详细定义活性中心及反应动力学特性以准确预测合成氨生成速率。

在小型模块化合成氨工艺包的规划和仿真达成环节，隔离环节担当着极其关键的角色，当中气液隔离为关键步骤其一。该环节意在把合成化学作用之后生成的混合气体之中的氨气和尚未化学作用的气体、水蒸气等等高效隔离，用以获取优纯度的氨产品。借助精巧的气液隔离装置规划和仿真，能够减少能耗，尾气去循环机再度加入化学作用。在构建模型的环节，软件推动化学计量平衡和能量平衡计算，使系统热效率和物料转化率实现理想预期。为保障仿真结果的价值，模型校验时期通过实验数据对比开展精确度评价，着重监测参数变动对于模型的实时反馈。使用这样的方法能够判断工艺包在真实运行环境中的表现好坏，帮助在未来开展参数敏感度方面的深入研究以及设备性能的不断完善。

### 4.2 工艺包的模拟流程

在小型模块化合成氨工艺包设计过程中，工艺包的模拟流程是关键环节之一。模拟流程基于化工模拟软件建立，主要涵盖基础数据输入、流程图构建、参数设置与优化以及结果分析等步骤。依据目标工艺确定基础数据，包括主要反应物的物性参数和初始操作条件，如温度、压力及流量比例。在此基础上，通过软件构建气体分离、压缩以及合成反应模块的流程图，确保各单元操作参数的合理衔接。在关键参数设置阶段，分别赋值反应压力、氢氮比和反应器内温度的初始范围，并引入氢气纯度标准作为优化目标。针对已经定好

的范围条件限制,来进行多组不同参数的组合模拟实验,确保挑选出来的参数在可行性和经济性这两个方面都要比传统的设计方案更好。等到模拟运行全部结束后,生成一份包含产能大小、能量效率高低以及转化率多少等数据的详细分析报告,用这份报告来对比不同工艺条件下的具体表现和区别之处。

## 5 参数敏感性分析

### 5.1 反应压力对产量的影响

反应压力为合成氨过程中作用于产量的关键因素其中之一。于稳定温度和氢氮比情况下,压力的变动直观确定了反应体系之中气体分子的彼此影响力度,因此作用于均衡。在小型模块化合成氨工艺中,反应温度一般调节在400~500℃,在此期间,形成的氨产品成为气态。因为合成氨反应是一个体积减少的反应,换言之反应之后气体分子数降低,依据勒夏特列原理,提升压力将令均衡朝气体分子数降低的趋向转移,换言之有助于氨的合成。在该工艺中,借助合理提升反应系统的压力,可以高效提升氨的产率,一同配合精确的温度调节,达成高性能、稳固的合成氨生产,为绿氨的工业化应用给予强有力支撑。从热力学角度来看,反应平衡常数会因为压力变大而明显增多,这样就能更好地推动氨气生成。如果压力继续变大,就会造成设备运行时消耗更多能量,同时物料传递也会遇到很多困难,进而容易导致整个工艺的经济效益变差。经过全面分析可以发现,合理控制压力可以有效提高合成氨的产量,同时还能稳定保持设备运行的经济效益,这样的结论对小型模块化合成氨工艺包的设计优化提供了非常重要的参考价值。

### 5.2 氢气纯度对效率的影响

氢气纯度是影响小型模块化合成氨工艺效率的重要参数。高纯度氢气有助于提高反应的选择性,从而促进氨气生成效率。在模拟分析中,基于不同纯度的氢气输入条件,对合成氨产量的变化进行了研究。结果显示,当氢气纯度从99.0%提升至99.9%时,氨气产量显著增加。较低纯度的氢气可能引入更多杂质,降低催化剂的活性,进而影响反应速率和效率。氢气纯度对系统能耗也具有显著影响,高纯度氢气输入可以降低循环气分离负荷,从而提升整体能源利用率。这一分析揭示了氢气纯度控制的重要性,为优化合成氨工艺提供了关键参考。

## 6 结果与应用

### 6.1 实验数据与分析结果概述

对于小型模块化合成氨工艺包实施了全面的设计以及参数敏感性分析,依托化工模拟软件进行了详尽数据研究与结果确认。实验结果表明,合成氨产量对反应压力的敏感性

极其明显。在反应压力自8 MPa逐渐提高到15 MPa之际,产量明显增长,详细体现为氨气生成率展现直线型上升倾向,表明较高水平的反应压力能够推动氨气生成反应的均衡朝生成方向偏移,因此提升产量。

氢气纯度对合成氨效率的影响亦然明显。在氢气纯度由85%提高到99%的阶段,合成氨生产效率显著提高,在此中纯度每一个百分比提高,氨气产量均值提高大约2.8%。这一现象表明氢气中的杂质含量对反应过程造成不良干扰,其纯化水平直接影响催化剂的性能稳定性和反应进程。

其他灵敏度参数如氢氮比对于生产效率也具有关键影响,但其优先级较低于压力和纯度。实验数据标示最佳氢氮比范围为2.8:1至3.2:1,过高或过低均会导致反应率下降。

### 6.2 工艺包优化的应用前景

小型模块化合成氨工艺包经过改进设计后,工业应用方面的潜力变得非常大。针对关键参数进行细致的敏感性分析,可以大幅提升合成氨生产的效能和成本节约效果,特别是通过精心调整反应压力和氢气纯度,能更好地实现资源的充分利用,同时把能源消耗降到很低。改进后的设计完全可以满足不同地区和不同生产规模的实际需要,给那些偏远地方、资源匮乏区域以及分散型生产模式提供非常实用的解决方法。绿色化工理念越来越受到重视,小型模块化设备的生态环保优势也为削减传统大型生产装置所带来的碳排放量,找到了一条切实可行的解决道路。该工艺包不仅能够用于稳定的氨生产,还可以在工业园区实现灵活部署,满足季节性或者短期氨需求。

## 7 结语

本文面向当前小型模块化合成氨设备的研究和开发需求,详尽研究了合成氨工艺包的设计还有关键工艺参数的敏感性分析。借助准确确定反应的温度、压力和氢氮比等参数,融合化工模拟软件的应用,本文顺利阐明了参数变化对合成氨效率的具体影响。尤其是反应压力和氢气纯度充当影响合成氨产量的关键因素,为更深入的工艺优化给予了重要依据。未来工作亦将探究更广实用性的技术和策略,以促进小型模块化合成氨技术的市场化应用。

## 参考文献

- [1] 崔俊辉.合成氨生产工艺及KBR合成氨工艺研究[J].化工设计通讯,2021,47(04):5-6.
- [2] 张伟.合成氨生产工艺及KBR合成氨工艺分析[J].化工设计通讯,2020,46(07):1-1.
- [3] 邓战听.合成氨工艺的作用及合成氨工艺及节能改造分析[J].锋绘,2020,(04):230-230.