

文章编号:1671-6833(2009)04-0048-05

氨合成工段过程模拟与优化

王定标, 张 荣, 向 颢, 黄 莺, 陶 钧, 张飞升

(郑州大学 化工与能源学院, 河南 郑州 450001)

摘 要: 应用化工流程模拟软件 Aspen Plus 对合成氨生产工艺中氨合成工段进行模拟, 通过选用合理的单元操作模型, 采用 RKS-BM 热力学计算方法, 所得模拟结果与实际生产值基本吻合, 模拟数据对实际生产具有指导意义. 同时, 分析了系统合成压力、合成塔出口气体温度、系统循环比、新鲜气氮氢比、压缩机绝热效率等操作参数的变化对氨合成工段的影响, 以合成工段净收益为目标函数对操作参数进行优化, 得到了最佳工艺操作参数: 合成压力 20 MPa, 合成塔出口温度 313 ℃, 系统循环比 3.35, 新鲜气氮氢比 3.0, 压缩机绝热效率 0.8.

关键词: Aspen Plus; 氨合成工段; 优化; 净收益; 模拟

中图分类号: TQ 113.2; TK 018

文献标识码: A

0 引言

近年来, 在国际能源价格不断上涨的情况下, 合成氨生产系统节能降耗在氮肥生产中愈来愈受到重视, 并逐渐向大型化、低能耗、清洁生产的方向发展^[1-2]. 氨合成工段作为合成氨生产的核心部分, 其生产状况直接影响到合成氨厂的生产成本, 是实现合成氨厂高产低耗的主要工段之一^[3].

过程模拟技术是与实验研究同样可靠且更为有效的一种研究手段, 可对经济效益、过程优化、环境评价进行全面的分析和精确评估^[4]. 对氨合成工段的模拟研究, 前人大都通过建立单元设备数学模型, 或采用不同的化工流程模拟软件对工段进行系统模拟和合成塔的优化分析, 对于操作参数的优化主要以氨产量为优化目标^[5-7], 缺乏操作参数对整个氨合成系统的影响分析.

笔者以某厂氨合成工段为研究对象, 运用 Aspen Plus 模拟软件对其进行模拟分析, 综合考虑氨产量、副产蒸汽量、冷却水消耗、系统功耗等, 研究了主要操作参数的变化对系统净收益的影响, 并可用于指导生产操作.

1 氨合成工段流程模拟

1.1 流程简介

某厂氨合成工段年产 18 万吨液氨项目工艺流程图如图 1 所示. 从烃化系统送来的新鲜氮氢混合气和氨冷却器反应后的气体混合后进入氨分离器, 使冷交换器没有分离下的液氨和补气带来的水、油等微量杂物分离下来; 分离后的气体从冷交换器底部进入冷交换器管内和管间水冷后的气体进行换热, 从顶部出来进入循环机进行加压, 经过油分离器后分为三部分: 其中一部分去热交换器与废热锅炉来的反应后的热气体进行换热后再进入合成塔, 另外两股直接进入合成塔; 出塔反应气进废热锅炉进行余热回收副产蒸汽, 通过热交换器换热进入水冷却器进一步冷却, 然后进入冷交换器, 并通过冷交换器下部旋流分离器进行氨

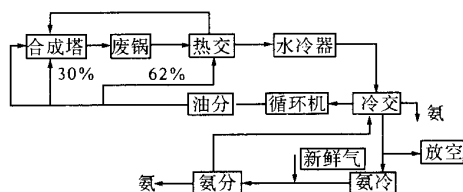


图 1 氨合成工段工艺简图

Fig. 1 The simple flow chart of the ammonia synthesis process

收稿日期:2009-04-16; 修订日期:2009-07-27

基金项目:河南省重大公益性科研项目(081100910100); 郑州大学研究生科学研究基金项目

作者简介:王定标(1967-), 男, 浙江杭州人, 郑州大学教授, 博士, 博士生导师, 主要从事工业装备及系统节能技术、装备 CAD/CAE/CFD 技术及其优化研究工作, E-mail: wangdb@zzu.edu.cn

分离,使气体中大部分液氨分离下来,分离后的气体和少量的氨进入氨冷却器,出来和烃化来的合格氮氢气混合进入氨分离器重新循环. 主要工艺参数见表 1.

表 1 氨合成工段主要工艺参数
Tab. 1 The main process parameters of ammonia synthesis process

新鲜气组分	H ₂	N ₂	AR	CH ₄
组分摩尔分数/%	75.61	22.39	0.5	1.5
新鲜气流量/(m ³ ·h ⁻¹)	78 168			
新鲜气温度/℃	8.3			
新鲜气压力/MPa	18.88			
压缩机绝热效率	0.553			
合成压力/MPa	20.37			
出塔气温度/℃	298			
氢氮比	337			

1.2 模拟流程

该工段氨合成塔为 JD2000 型四段反应器,选

择 RPlug 作为氨合成反应器 TOWER1 ~ TOWER4 的单元模型,RPlug 是活塞流反应器的严格模型,在反应的化学计量与反应动力学已知的情况下,采用 RPlug 单元模型可获得较理想的结果^[8]. 热交换器(REJIAO)、冷交换器(LEJIAO)、塔底换热器(TDHEX)和塔内换热器(TINHEX)等涉及两个物流之间的换热,选用两股物流换热器模型 HEATX. 废热锅炉(E-100)、水冷却器(E-101)以及氨冷却器(E-102)只需确定出口物流的热和相态条件,故采用 HEATER 模型. 此外循环压缩机(K-101 ~ K-103)采用 COMPR 模型,冷交底部旋流分离器(SEP1)、氨分离器(SEP2)采用 FLASH2 模型,物流的混合与分流操作分别采用 MIXER 和 FSPLIT 模型. 模拟流程图如图 2 所示.

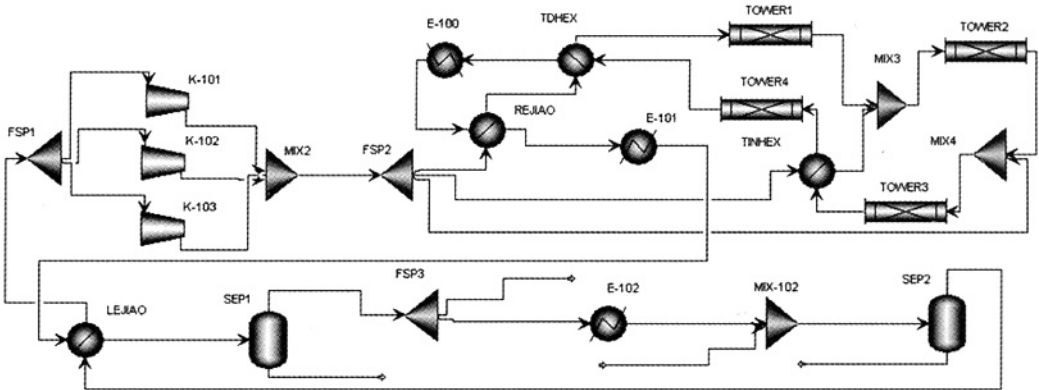


图 2 氨合成工段流程模拟图
Fig. 2 The process simulation chart of ammonia synthesis process

1.3 模型选择

对于合成氨装置 Aspen 推荐的物性方法为用于高压烃应用的状态方程(带二元交互参数). 用于高压烃的状态方程主要有 RKS-BM (逸度系数计算方法为带有 Boston-Mathias α 函数的 Redlich-Kwong-Soave)、PR-BM (逸度系数计算方法为带

有 Boston-Mathias α 函数的 Peng-Robinson)、LK-PLOCK(基于维里型方程 Lee-Kesler-Plocker)和 BWR-LS(基于 BWR-Lee-Starling 状态方程)4 种. 表 2 列出了采用 4 种不同热力学模型计算方法对氨合成工段进行模拟计算得到的结果与实测数据的比较.

表 2 模拟计算结果与实测数据比较
Tab. 2 The comparison of simulation results and actual plant data

参数	实测值	RKS-BM	PR-BM	LK-PLOCK	BWR-LS
进塔流量/(kmol·h ⁻¹)	14 709.00	15 039.70	15 070.79	15 532.79	15 349.88
出塔气中氨体积分数/%	14.30	14.40	14.98	14.52	14.01
氨产量/(t·h ⁻¹)	25.00	25.52	25.53	25.19	25.27
放空气量/(kmol·h ⁻¹)	475.28	489.65	491.54	510.80	502.66
压缩机入口温度/℃	6.50	7.08	7.67	7.63	6.99
压缩机出口温度/℃	19.70	19.93	19.76	19.97	20.23
热交冷流出温度/℃	182.80	186.91	187.04	187.88	184.94

表 2 结果表明,采用 RKS-BM 热力学计算模型计算的结果与工厂实际数据吻合的最好,因此氨合成工段的模拟计算采用 RKS-BM 热力学计算模型。同时,由表 2 的结果可以看出,运用 RKS-BM 模型计算的结果与实际数据结果相近,验证了采用 ASPEN 软件进行模拟定可行的和正确的。

2 氨合成工段的净收益

氨合成反应为放热,体积缩小的可逆反应,温度、压力及气体组成对反应进行的程度及过程运行的状况有一定的影响。笔者综合考虑了氨产量、副产蒸汽量、压缩机功耗、循环冷却水消耗量、锅炉给水消耗量以及冷冻氨使用量等指标,以氨合成工段净收益为目标函数,研究净收益随合成压力、合成塔出口气体温度、循环比、新鲜气氢氮比及循环压缩机绝热效率等主要操作参数变化的关系。表 3 给出了净收益各指标的参考价格。

净收益的相关计算公式为:

$$N = 2\ 500L + 120G - 2.5D_g - 0.25D_s - 2\ 500D_a - 1.0P - C.$$

式中: N 为净效益,元 \cdot h $^{-1}$; L 为氨产量, t \cdot h $^{-1}$; G 为副产蒸汽量, t \cdot h $^{-1}$; D_g 为废热锅炉给水量, t \cdot h $^{-1}$; D_s 为冷却水消耗量, t \cdot h $^{-1}$; D_a 为氨冷器冷冻氨使用量, t \cdot h $^{-1}$; P 为压缩机功耗, kW; C 为每小时新鲜进料气的消耗额。

在此不考虑设备折旧费用。另外新鲜气进料量涉及上一工段的生产过程,视为定值,因此本文中净收益的研究对此项也忽略不计。

表 3 净收益各指标参考价格

Tab.3 The reference price of the net income indications

指标	氨/ (元 \cdot t $^{-1}$)	冷却水/ (元 \cdot t $^{-1}$)	锅炉给水/ (元 \cdot t $^{-1}$)	蒸汽/ (元 \cdot t $^{-1}$)	电/(元 \cdot kW $^{-1}$ ·h $^{-1}$)
价格	2 500	0.25	2.5	120	1.0

3 操作参数对氨合成工段净收益的影响

3.1 合成压力

在其他条件均保持不变的情况下改变合成压力,运用 ASPEN 软件对氨合成工段进行流程模拟计算,结果表明,随着合成压力从 19 MPa 变化到 21 MPa,氨合成塔出塔气中氨的摩尔分数由 14.33% 上升至 14.45%,氨产量从 25.46 t \cdot h $^{-1}$ 增加至 25.54 t \cdot h $^{-1}$,压缩机功耗从 1 322.07 kW 上升到 2 404.43 kW,冷却水消耗量从 1 728.00 t \cdot h $^{-1}$ 变化到 1 735.58 t \cdot h $^{-1}$,氨冷器冷冻氨使用量从 5.69 t \cdot h $^{-1}$ 下降到 5.57 t \cdot h $^{-1}$,副产蒸汽在

19.34 t \cdot h $^{-1}$ 与 19.59 t \cdot h $^{-1}$ 之间变化。由此可见,增大合成压力可增加氨产量,减少冷冻氨使用量,但增加了压缩机功耗。图 3 给出了该氨合成工段净收益与合成压力的关系图,可知当合成压力为 20 MPa 时可以实现净收益的最大化,此时净收益为 5.05 万元 \cdot h $^{-1}$ 。

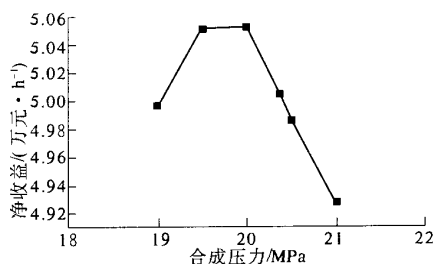


图 3 净收益随合成压力变化关系图

Fig.3 The relationship of net income against synthesis pressure

3.2 出塔气温度

保持其他条件不变,随着合成塔出口反应气体温度从 295 ℃ 变化到 313 ℃,氨合成塔出塔气中氨的摩尔分数由 14.34% 上升到 14.75%,氨产量从 25.49 t \cdot h $^{-1}$ 上升至 25.67 t \cdot h $^{-1}$,压缩机功耗从 1 803.28 kW 降低到 1 756.99 kW,冷却水用量从 1 733.19 t \cdot h $^{-1}$ 下降到 1 714.97 t \cdot h $^{-1}$,氨冷器冷冻氨使用量从 5.57 t \cdot h $^{-1}$ 降低到 5.35 t \cdot h $^{-1}$,副产蒸汽由 18.90 t \cdot h $^{-1}$ 增加到 21.88 t \cdot h $^{-1}$ 。图 4 为工段净收益与合成塔出口气体温度的关系图,可见随着出塔气温度的升高,净收益呈上升趋势。出塔气温度越高,进合成塔第一床层的待反应气体的温度就越低,有利于塔内氨的合成。因本工段使用的催化剂温度范围为 425 ~ 500 ℃,当出塔气温度为 313 ℃ 时,进合成塔第一床层的温度为 425.34 ℃,因此应控制出塔气温度不高于 313 ℃,此时净收益为 5.12 万元 \cdot h $^{-1}$ 。

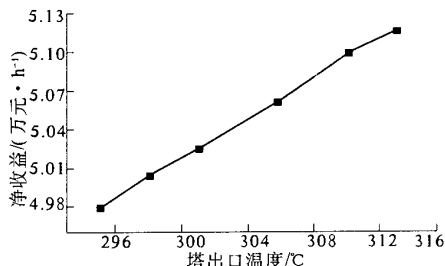


图 4 净收益随出塔气温度变化关系图

Fig.4 The relationship of net income against converter outlet temperature

3.3 循环比

保持其他条件不变,随着系统循环比从 3.05

变化到3.85,氨合成塔出塔气中氨的摩尔分数由14.97%下降到13.20%,氨产量则从 $24.88 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 上升到 $25.74 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,压缩机功耗从1 680.02 kW上升到2 007.32 kW,冷却水用量由 $1\,654.70 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $1\,836.14 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,氨冷却器冷冻氨使用量从 $5.07 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $6.56 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,副产蒸汽由 $18.10 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $21.72 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 。由此可见,增大循环比可增加氨产量,增大副产蒸汽量,但与此同时,冷却水消耗量增大,冷冻氨使用量增加,压缩机功耗上升。图5给出了净收益随循环比变化的关系图,可知当循环比为3.35时可以实现净收益的最大化,此时净收益为5.01万元·h⁻¹。

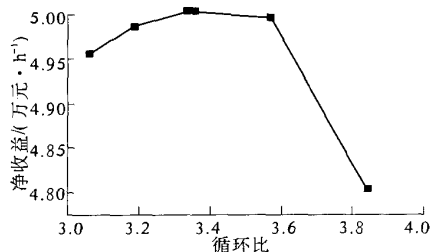


图5 总收益随循环比变化关系图

Fig. 5 The relationship of net income against recycle ratio

3.4 氢氮比研究

随着新鲜补充气中氢氮比从2.8变化至3.4,氨合成塔出塔气中氨的摩尔含量由15.83%下降到14.40%,氨产量从 $25.58 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 降低至 $25.52 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,压缩机功耗则从1 635.16 kW上升到1 795.72 kW,冷却水用量从 $1\,688.96 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $1\,730.23 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,氨冷却器冷冻氨使用量从 $5.51 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $5.53 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,副产蒸汽由 $18.73 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 增加到 $19.34 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 。由此可见,随着新鲜气中氢氮比值的增大,副产蒸汽量增大,但与此同时,氨产量下降,冷却水消耗量增多,氨冷使用量增加,压缩机功耗上升。图6为净收益随氢氮比变化的关系图,当氢氮比为3.0时可以实现净收益的最大化,此时净收益为5.21万元·h⁻¹。

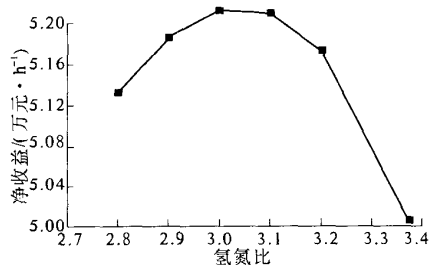


图6 净收益随氢氮比变化关系图

Fig. 6 The relationship of net income against H/N

3.5 压缩机绝热效率

使压缩机绝热效率从0.2变化到0.9,压缩机出口处循环气体温度由43.87℃降低至14.70℃,氨合成塔出塔气中氨的摩尔分数由14.25%增加到14.49%,氨产量从 $25.46 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 上升至 $25.56 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,压缩机功耗从5 017.34 kW降低到1 097.3 kW,冷却水用量从 $1\,877.77 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 下降至 $1\,726.32 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,氨冷却器冷冻氨使用量从 $5.61 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 下降到 $5.49 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$,副产蒸汽量由 $19.61 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 降低至 $19.29 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ 。由此可知,随着压缩机绝热效率的增加,氨产量略有升高,压缩机功耗降低,冷却水消耗量和冷冻氨使用量均下降,但净副产蒸汽量有所降低。由图7净收益与压缩机绝热效率关系图可知,净收益随着压缩机绝热效率的提高呈上升趋势,在绝热效率达到0.8以后曲线逐渐平缓。实际生产中应采取措施保证压缩机的绝热效率,当绝热效率为0.8时,净收益可达5.07万元·h⁻¹。

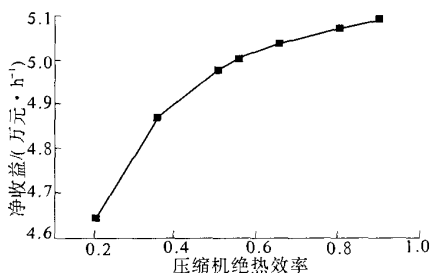


图7 净收益随压缩机绝热效率变化关系图

Fig. 7 The relationship of net income against recycle compressor outlet temperature

4 结论

(1)运用 Aspen Plus 对氨合成工段进行了模拟。模拟选用 RPlug 作为氨合成塔的单元模型,采用 RKS-BM 热力学方法进行计算,模拟结果与实际运行结果基本吻合,证明了模拟给出的各项数据是可信的,模型可以用于指导同类装置的改造、设计和操作优化。

(2)分析了合成压力、合成塔出口气体温度、循环比、新鲜气氢氮比及循环压缩机绝热效率等操作参数变化对系统产生的影响,以合成工段净收益为目标函数,对各操作参数进行了优化。结果表明,当合成压力为20 MPa时净收益可达到最大值5.05万元·h⁻¹;净收益随合成塔出口气体温度的增加而增加,考虑到催化剂的适用范围,取出塔气温度为313℃,收益可达5.12万元·h⁻¹;当

循环比为 3.35 时可以实现净收益的最大化,此时净收益为 $5.01 \text{ 万元} \cdot \text{h}^{-1}$;当氢氮比为 3.0 时净收益达到最大值为 $5.21 \text{ 万元} \cdot \text{h}^{-1}$;净收益随着压缩机绝热效率的提高而增加,当压缩机绝热效率达 0.8 时,净收益为 $5.07 \text{ 万元} \cdot \text{h}^{-1}$ 。

参考文献:

- [1] 蒋德军.合成氨工艺技术的现状及其发展趋势[J].现代化工,2005,25(8):9-16.
- [2] 沈曙华.合成氨生产工艺节能增效综合改造的探索[J].上海化工,2006,31(8):31-32.
- [3] 程桂华.合成氨[M].北京:化学工业出版社,1999:267.
- [4] 屈一新.化工过程数值模拟及软件[M].北京:化学工业出版社,2006:2-3.
- [5] DASHTI A, KHORSAND K, MARVAST M A, et al. Modeling and simulation of ammonia synthesis reactor[J]. Petroleum & Coal 2006,48(2):15-23.
- [6] XIE C. Modeling the performance and emissions of integrated gasification combined cycle based Lurgi ammonia synthesis system[D]. Raleigh: North Carolina State University,2001.
- [7] 蒋柏泉,陈常青,刘玉德.30 万 t/a 凯洛格氨合成系统流程分析与模拟[J].化肥设计,2006,44(5):15-17.
- [8] SHIM H M, LEE S J, YOO Y D, et al. Simulation of DME synthesis from coal syngas by kinetics model[J]. Korean journal of chemical engineering,2009,26(3):641-648.

Simulation and Optimization of Ammonia Synthesis Process

WANG Ding-biao, ZHANG Rong, XIANG Sa, HUANG Ying, TAO Jun, ZHANG Fei-sheng

(School of Chemical and Energy Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: Aspen Plus has been used to simulate the ammonia synthesis process for producing ammonia by using the reasonable unit operation model and the RKS-BM thermodynamic model. The simulation results obtained showed good agreement with the actual plant data. The simulated date has certain guiding significance. In addition, the efficiency of change in operating conditions on the synthetic process was discussed through aspects of synthetic pressure, converter outlet temperature, recycle ratio, fresh gas hydrogen-nitrogen ratio, recycle compressor adiabatic efficiency etc. The operating conditions were optimized with net income as objective function: synthetic pressure 20 MPa, converter outlet temperature $313\text{ }^{\circ}\text{C}$, recycle ratio 3.35, fresh gas hydrogen-nitrogen ratio 3.0, recycle compressor adiabatic efficiency 0.8.

Key words: Aspen Plus; ammonia synthesis process; optimization; net income; simulation