

# 合成氨工艺物料衡算程序文档

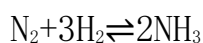
## 一、项目内容

物料衡算能够找出原料与产品间的定量关系、对化工过程进行模拟、计算原料消耗量与三废生成量，因此是化工计算中最基本、最重要的内容，也是化工过程模拟计算与设计计算的核心内容。物料衡算对实现化工过程的最优设计与操作，达到节能、降耗、减排目的的实现具有深远的意义。但化工过程中的单元操作种类繁多、计算过程复杂，研究如何快速、准确地进行过程单元物料衡算是一个很有必要的内容。

本项目基于化工模块分析法和数值方法，并结合 Python 语言编程对哈勃法合成氨工艺进行物料衡算，为后续的工艺优化奠定基础。

## 二、合成氨工艺描述

由元素直接合成氨的哈伯法是化学工程中的一大成就，其工艺流程简图见图 1，组分编号和过程物流名称见表 1 和表 2。工艺流程如下：进料为干燥的  $H_2$  和  $N_2$ ，并含有氩气和甲烷杂质。进料在 1MPa 下与低压循环物流在低压混合器中混合后压缩至 20MPa，再同高压循环物流在高压混合器内混合后进入催化反应器，在反应器中预热至反应温度并进行反应：



反应平衡时，氨气的产率约 10%，用冷却和冷凝的方法分离出氨，未反应的气体则经分流器、高压混合器再次循环到反应器（采用分流器以避免杂质在系统内的积累）。由高压分离器出来的液体氨含有溶解气体，将其送至低压分离器处理，并将气体再循环、液体作为氨产品抽出。

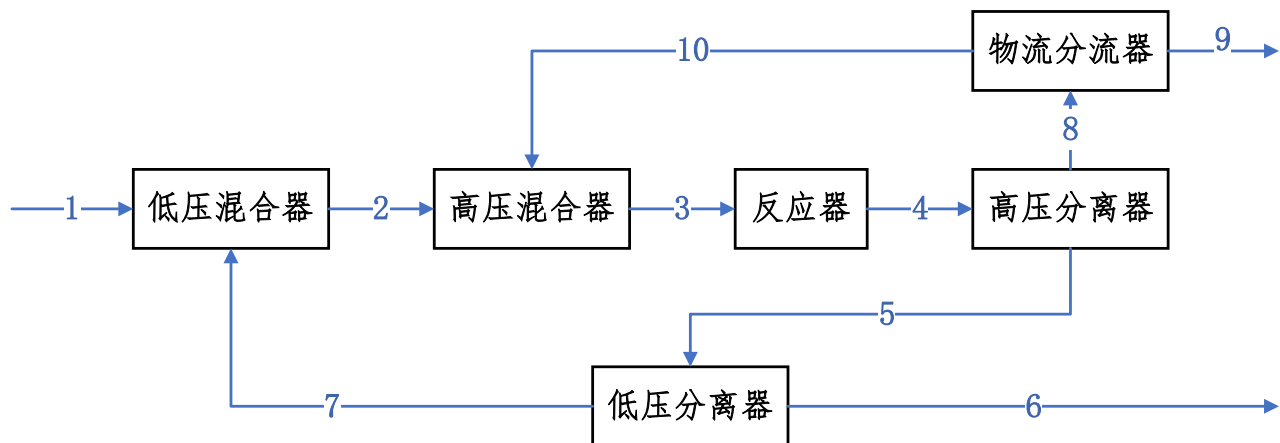


图 1 合成氨生成工艺流程简图

表 1 组分编号表

组分	组分编号
N <sub>2</sub>	1
H <sub>2</sub>	2
NH <sub>3</sub>	3
Ar	4
CH <sub>4</sub>	5

表 2 过程物流表

物流编号	过程物流名称
1	进料
2	低压进料加循环物料
3	高压进料加循环物料
4	从反应器出来的产品
5	高压液体
6	产品
7	低压循环物流
8	高压循环物流
9	排放物流
10	高压循环物流

### 三、程序简介

#### 1、编程语言：

Python

## 2、程序功能：

可根据用户输入的设计变量(如原料流量、原料组成、排放率、平衡常数等)，求解不同条件下合成氨工艺过程单元的物流流量和组成，为能量衡算和工艺优化奠定基础。

## 3、程序构成

本程序主要包括 gl,Chemical\_process,Reaction,Separation,value\_update 和 Main 几个模块，各模块的功能如下：

表 3 模块功能

模块	功能
gl	声明平衡常数、入料性质、迭代精度等常数
Chemical_Process	计算整个过程单元的物流流量和组分构成
Reaction	计算反应器出口物流组成
Separation	计算分离器出口物流组成
Value_update	计算剥离变量的迭代值
Main	调用上述计算程序进行物料衡算并输出结果

## 4、符号说明

经总体变量分析得知：整个程序中包含流量、摩尔分率、设备参数等共计 72 个变量（变量在程序中的符号声明详见表 4），物料平衡、设备约束、摩尔分率约束等共计 55 个方程与约束式。

## 5、程序逻辑

依据模块分析法和模块流动次序，选取 F7、F10、X7 和 X10 为剥离变量，采用牛顿迭代法对整个过程单元进行求解，将迭代所得 F7、F10、X7 和 X10 的新值与初值进行比较，如不符合迭代精度，则使用新值再次迭代计算，直到所有玻璃变量均满足条件为止。程序计算图如图 2 所示。

表 4 程序符号说明

符号	意义
Hps_Gle_Const	高压分离器中组分的气液平衡常数
Lps_Cle_Const	低压分离器中组分的气液平衡常数
Mol_flow_f1	原料分子流量
Mol_fraction_x1	原料组成（摩尔分率）
Chem_reac_equ_const	化学平衡常数
Iteration_acc	迭代精度
Step	斜率计算步长
Newton_iter_factor	牛顿迭代阻尼因子
init_F7	物流 7 流量初值
init_F10	物流 10 流量初值
init_X7	物流 7 组分构成初值
init_X7	物流 10 组分构成初值
init_N43	物流 4 中 NH <sub>3</sub> 的摩尔流量初值
nx	物流 x 各组分的摩尔流量
fx	物流 x 的摩尔流量
xx	物流 x 各组分的摩尔分率
a1	高压分离器出口产品的液/气相比比例
a2	低压分离器出口产品的液/气相比比例
init_array	迭代过程中 f7、f10、x7、x10 的初值数组
iter_array	迭代过程中 f7、f10、x7、x10 的新值数组
error_array	迭代过程中 f7、f10、x7、x10 的误差数组
Mol_flow	10 个物流的摩尔流量数组
Mol_fraction	10 个物流的组分摩尔分率数组
f_reaction	反应模块构造函数关系值
fd	反应模块构造函数关系的导数值
Delta	迭代误差
N43_iteration	物流 4 中 NH <sub>3</sub> 的摩尔流量迭代值
phase_ratio_init	分离器出口产品的液/气相比比例初值
f	分离模块构造函数关系值
df	分离模块构造函数关系的导数值

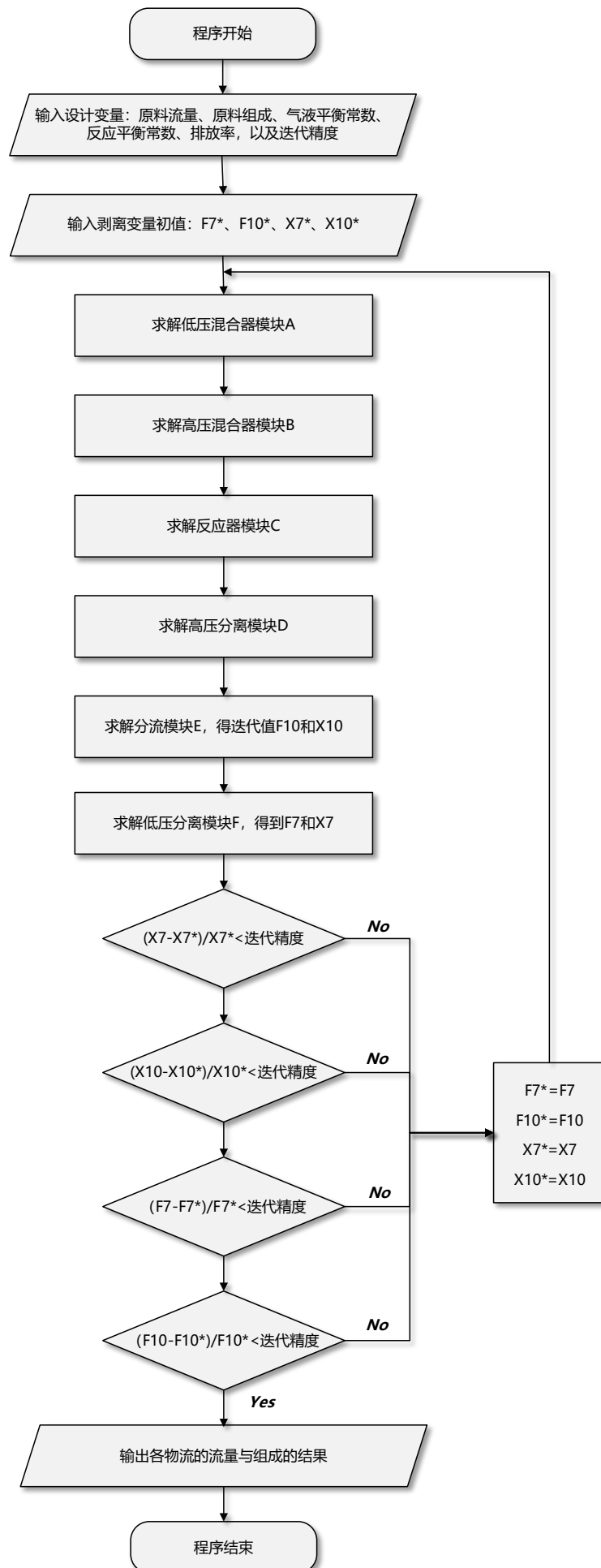


图 2 计算流程框图

## 四、结果输出

### 1、单值输出

排放率设置为 0.02 时，物料衡算的计算程序结果见表 5：

表 5 合成氨工艺物料衡算结果（排放率=0.02）

物流编号	摩尔流量 (mol/L)	摩尔分率				
		N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>	Ar	CH <sub>4</sub>
1	100.0000	0.2400	0.7430	0.0000	0.0060	0.0110
2	100.6630	0.2391	0.7411	0.0018	0.0061	0.0118
3	786.4282	0.1741	0.6673	0.0519	0.0378	0.0688
4	743.0419	0.1551	0.6187	0.1134	0.0400	0.0728
5	43.2423	0.0016	0.0073	0.9884	0.0004	0.0023
6	42.5793	0.0000	0.0003	0.9994	0.0000	0.0003
7	0.6630	0.0996	0.4589	0.2798	0.0265	0.1352
8	699.7997	0.1646	0.6564	0.0593	0.0425	0.0772
9	13.9960	0.1646	0.6564	0.0593	0.0425	0.0772
10	685.8037	0.1646	0.6564	0.0593	0.0425	0.0772

### 2、多值输出

F6（氨产量）与 F10（循环物流）是合成氨工艺重点关注的两个物流参数。

对设计变量 Emission\_ratio（排放分率）在（0.02，0.10）内取一系列值，其余设计变量不变，得到随排放分率取不同值时的一些列物料衡算结果，绘制的变化关系图如图 4 与图 5。可见，随着排放分率的增加，氨产量与循环量均降低。在排放分率为 0 的极限状态下，氨产量达到最大值，但循环量趋近于无穷大，杂质全部累计在循环回路中。

以本程序的物料衡算结果为基础，进一步结合产品价格、环保要求、能耗物耗等参数，可编制详细的工艺优化方案。

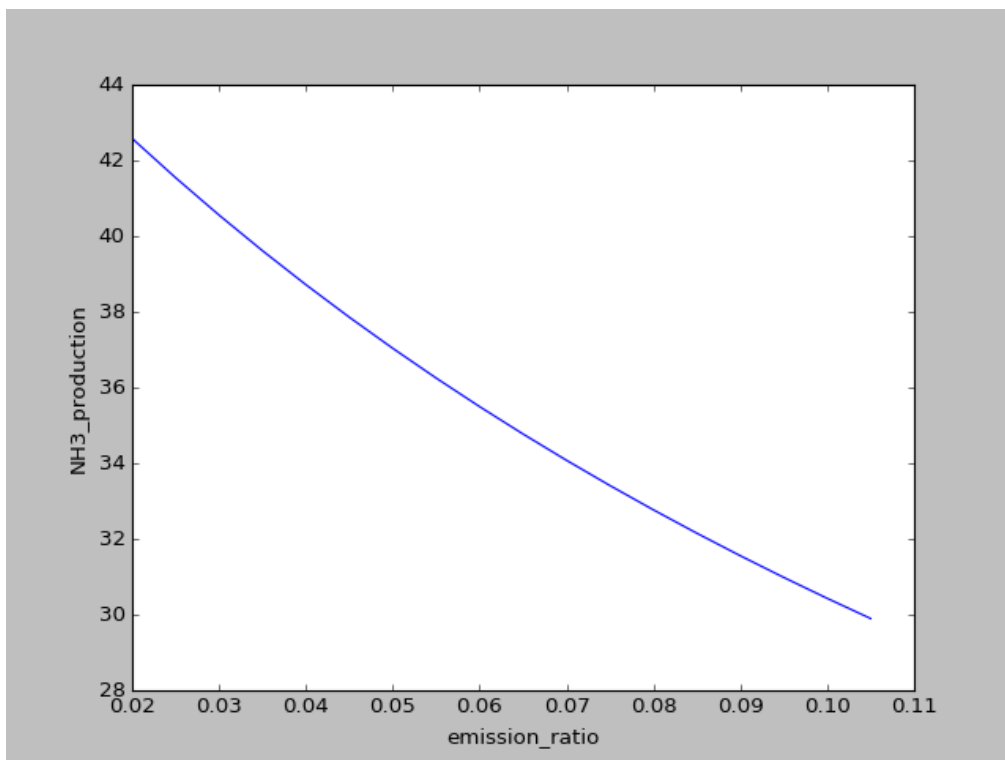


图 3 氨产量随排放分率的变化关系

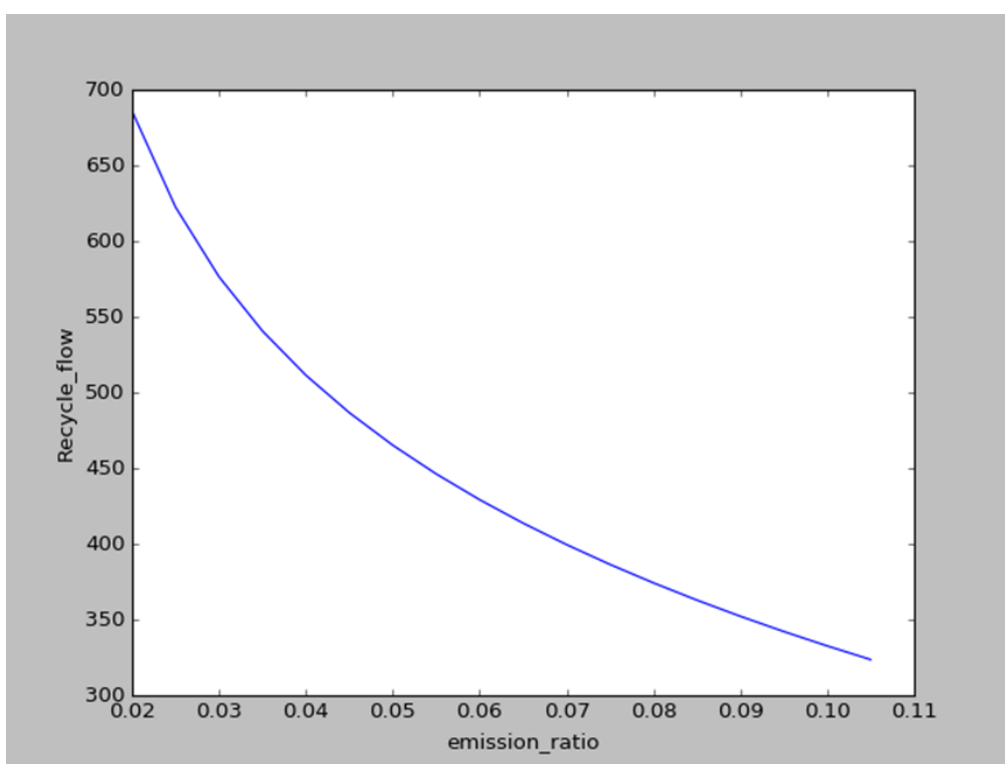


图 4 循环量随排放分率的变化关系