UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Pemodelan dan Simulasi Reaktor Sintesis Amoniak di Industri Sebagai Sarana Evaluasi dan Optimasi Produksi Amoniak
Gihon Andre Asmitra Harahap, Prof. Dr. Ir. Edia Rahayuningsih, M.S., IPU; Ir. Maulana Gilar Nugraha, S.T., M.Eng.,
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

Produksi amoniak merupakan suatu proses yang membutuhkan konsumsi energi yang cukup tinggi sehingga diperlukan upaya untuk meningkatkan efisiensi energi, khususnya pada unit reaktor sintesis amoniak yang menjadi inti proses pembentukan produk amoniak. Evaluasi kinerja reaktor umumnya dilakukan menggunakan parameter *Approach Temperature to Equilibrium* (ATE), namun evaluasi tersebut dilakukan oleh vendor katalis dalam jangka waktu yang cukup lama sehingga evaluasi tidak tersedia secara langsung sesuai dengan kondisi operasi terkini. Penelitian ini bertujuan mengembangkan model matematis yang mampu merepresentasikan perilaku reaktor sintesis amoniak industri, melakukan karakterisasi parameter kinetika reaksi, serta memanfaatkan model yang dihasilkan untuk evaluasi dan optimasi kinerja reaktor berdasarkan nilai ATE.

Objek penelitian berupa sistem reaktor sintesis amoniak tipe *Adiabatic Indirect Cooled Reactor* (AICR) yang terdiri dari dua buah reaktor dengan reaktor pertama terdiri dari 2 *bed* katalis dan reaktor kedua terdiri dari 1 *bed* katalis. Model dikembangkan menggunakan pendekatan *one-dimensional pseudohomogeneous model* berbasis neraca massa, neraca energi dan beberapa persamaan yang berhubungan dengan kinetika dan kesetimbangan reaksi sintesis amoniak. Data operasional aktual industri digunakan untuk proses karakterisasi dan validasi model yang dibuat. Implementasi model dilakukan menggunakan bahasa pemrograman Python dengan metode penyelesaian numerik untuk mensimulasikan profil suhu, konversi nitrogen, dan konsentrasi amoniak di sepanjang bed katalis. Karakterisasi parameter dilakukan melalui optimasi terhadap data aktual sehingga diperoleh parameter yang mampu merepresentasikan kondisi operasi reaktor secara lebih akurat dengan kondisi aktual.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa model yang dikembangkan mampu mereproduksi perilaku reaktor sintesis amoniak industri dengan kesesuaian yang baik terhadap data aktual. Karakterisasi menghasilkan nilai *heterogeneity factor* sebesar 0,685 yang masih berada dalam rentang teoritis untuk katalis besi terpromosi komersial. Selain itu, diperoleh pula hasil parameter dalam persamaan konstanta kesetimbangan dan faktor koreksi panas reaksi yang bersifat spesifik terhadap masing-masing bed katalis. Evaluasi performa reaktor menggunakan model menghasilkan nilai ATE sebesar 9,543°C, 15,308°C, dan 9,591°C untuk masing-masing *Bed*-1, *Bed*-2, dan *Bed*-3. Simulasi optimasi menunjukkan bahwa penyesuaian kondisi operasional yaitu suhu masukkan umpan *Bed*-1 mampu meningkatkan nilai ATE *Bed*-1 menjadi 10,993°C tanpa menurunkan performa *bed* lainnya yang terukur pula dari nilai ATE. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model yang dikembangkan dapat digunakan sebagai sarana evaluasi dan optimasi kinerja reaktor secara cepat serta berpotensi menjadi dasar pengembangan sistem monitoring performa dan *digital twin* pada industri amoniak.

Kata kunci: sintesis amoniak; pemodelan reaktor; simulasi proses; optimasi reaktor; *approach temperature to equilibrium*

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Pemodelan dan Simulasi Reaktor Sintesis Amoniak di Industri Sebagai Sarana Evaluasi dan Optimasi Produksi Amoniak
Gihon Andre Asmitra Harahap, Prof. Dr. Ir. Edia Rahayuningsih, M.S., IPU; Ir. Maulana Gilar Nugraha, S.T., M.Eng.,
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

Ammonia production is an energy-intensive process that requires continuous efforts to improve energy efficiency, particularly in the ammonia synthesis reactor, which serves as the core unit for ammonia synthesis. Reactor performance is commonly evaluated using the Approach Temperature to Equilibrium (ATE) parameter. However, such evaluations are typically conducted by catalyst vendors and often require a considerable amount of time, making the results unavailable for immediate assessment under current operating conditions. This study aims to develop a mathematical model capable of representing the behavior of an industrial ammonia synthesis reactor, characterize reaction kinetic parameters, and utilize the resulting model for reactor performance evaluation and optimization based on ATE values.

The object of this study is an Adiabatic Indirect Cooled Reactor (AICR) ammonia synthesis reactor consisting of two reactors, where the first reactor contains two catalyst beds and the second reactor contains one catalyst bed. The model was developed using a one-dimensional pseudohomogeneous approach based on mass and energy balances, together with several equations describing the kinetics and equilibrium of the ammonia synthesis reaction. Actual industrial operating data were employed for model characterization and validation. The model was implemented in Python using numerical solution methods to simulate temperature profiles, nitrogen conversion, and ammonia concentration along the catalyst beds. Parameter characterization was performed through optimization against plant operating data to obtain parameters that more accurately represent actual reactor operating conditions.

The results demonstrate that the developed model successfully reproduces the behavior of the industrial ammonia synthesis reactor with good agreement to actual plant data. Parameter characterization yielded a heterogeneity factor value of 0.685, which remains within the theoretical range reported for commercially promoted iron-based catalysts. In addition, bed-specific parameters for the equilibrium constant equation and reaction heat correction factor were obtained for each catalyst bed. Reactor performance evaluation using the developed model produced ATE values of 9.543°C, 15.308°C, and 9.591°C for Bed-1, Bed-2, and Bed-3, respectively. Optimization simulations showed that adjusting the Bed-1 inlet feed temperature increased the Bed-1 ATE value to 10.993°C without adversely affecting the performance of the other catalyst beds, as indicated by their ATE values. These results demonstrate that the developed model can be utilized as a practical tool for real-time reactor performance evaluation and optimization, while also providing a foundation for the development of performance monitoring systems and digital twin applications in the ammonia industry.

***Keywords**: ammonia synthesis; reactor modelling; process simulation; reactor optimization; approach temperature to equilibrium*