

基于 Aspen Plus 的热解煤气制氢工艺 模拟及分析

李开坤, 王勤辉, 张瑞月, 朱 瑶, 余春江, 方梦祥
(浙江大学能源清洁利用国家重点实验室, 浙江 杭州 310027)

[摘 要] 本文利用 Aspen Plus 模拟软件, 构建了煤炭热解煤气吸附强化重整制氢工艺流程, 对强化重整、煅烧再生、蒸汽余热发电等单元进行了详细的模拟。在钙碳比为 2.75, 水碳比为 3.5, 重整温度 650 °C 条件下, 对不同重整压力 (0.5、1.0、1.5、2.0 MPa) 工况进行了模拟, 利用热效率和烟效率、制氢能耗、水耗和单位煤气制氢率等指标对系统进行了性能评价和优化。模拟结果显示, 重整压力为 0.5 MPa 时, 系统热力学性能最优。作为对比, 开展了水蒸气重整工艺系统的模拟。对比结果显示: 相同进料条件下, 强化重整制氢氢气产量提升 7.66%; 能量转化效率达到 79.55%, 烟效率从 73.14% 提高到 77.63%, 系统效率显著提高。综合系统效率和氢产量等指标, 热解煤气强化重整制氢系统具有较优的技术性能, 可作为现阶段煤气制氢的途径之一, 是具有应用前景的制氢技术。

[关键词] 热解煤气; 强化重整; 制氢; 烟效率; 能量转化效率

[中图分类号] TQ536.9 **[文献标识码]** A **[DOI 编号]** 10.19666/j.rlfid.202012295

[引用本文格式] 李开坤, 王勤辉, 张瑞月, 等. 基于 Aspen Plus 的热解煤气制氢工艺模拟及分析[J]. 热力发电, 2021, 50(7): 15-22. LI Kaikun, WANG Qinhui, ZHANG Ruiyue, et al. Simulation and analysis of hydrogen production from pyrolysis gas using Aspen Plus[J]. Thermal Power Generation, 2021, 50(7): 15-22.

Simulation and analysis of hydrogen production from pyrolysis gas using Aspen Plus

LI Kaikun, WANG Qinhui, ZHANG Ruiyue, ZHU Yao, YU Chunjiang, FANG Mengxiang
(State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: Simulation of hydrogen production by coal pyrolysis gas sorption enhanced reforming (SER-CPG) technology was established by using Aspen Plus software. Appropriate models for SER unit, calcination regeneration unit and waste heat power generation unit were set up in detail. Furthermore, optimization of the reactor pressure of SER unit under conditions with calcium to carbon ratio of 2.75, water to carbon ratio of 3.5 and reforming temperature of 650 °C was carried out. The thermal and exergy efficiency, energy consumption, water consumption during hydrogen production and hydrogen production rate were used to evaluate and optimize the system performance. A conventional CPG steam reforming process with the same feed conditions was chosen for comparison. The results showed that, the production of H₂ from SER system increased by 7.66%. The energy efficiency reached 79.55%, and the exergy efficiency increased from 73.14% to 77.63%, indicating a significant improvement in system efficiency. Taking the efficiency and hydrogen production into consideration, the SER-CPG technology has better technical performance, which could be considered as one of the routes of hydrogen production from coal gas at the present stage. In conclusion, the SER-CPG process is a hydrogen production technology with application prospect.

Key words: coal pyrolysis gas, sorption enhanced reforming, hydrogen production, exergy efficiency, energy conversion efficiency

中国是世界第一能源消费大国。2019 年, 中国一次能源消费总量占世界的 24.3%, 其中煤炭占比

57.64%^[1]。煤炭将在很长时间内仍然是中国一次能源的主力军, 因此发展清洁高效的煤炭利用技

收稿日期: 2020-12-22

基金项目: 国家重点研发计划项目(2019YFE0100100-05)

Supported by: National Key Research and Development Program (2019YFE0100100-05)

第一作者简介: 李开坤(1992), 男, 博士研究生, 主要研究方向为焦载体低阶煤流化床热解多联产系统, 11527034@zju.edu.cn。

通信作者简介: 王勤辉(1970), 男, 博士, 教授, 主要研究方向循环流化床燃烧技术、热电气多联产技术、煤气化技术等, qhwang@zju.edu.cn。

©1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

术,对于以煤炭为支柱能源的中国来说是不可避免的重要课题,而煤的分级转化分质利用技术是实现我国煤炭清洁高效利用的重要途径之一。

浙江大学针对含有高富氢挥发分的低阶煤,提出了低阶煤双流化床热解分级转化联产焦油煤气半焦技术。在以煤热解为核心的煤炭分级分质利用系统中,焦油加氢过程需要大量氢气供应,目前通常采用外供氢源的方式进行加氢,主要的制氢手段包括天然气(甲烷)水蒸气重整(steam methane reforming, SMR)、煤气化制氢、水电解制氢、焦炉煤气制氢等,运输和储存成本较为昂贵。热解煤气与焦炉气成分相似,通过适当的转化,可以为多联产系统提供足够氢气,解决焦油加氢单元氢源问题。同时,氢气作为高能量密度的绿色能源,可广泛应用于其他不同场合。氢气热值为 142 351 kJ/kg,是汽油的 3 倍,是除核燃料以外热值最大的燃料。

甲烷重整反应是整个制氢过程的核心步骤。甲烷水蒸气重整工艺是目前较为成熟的甲烷制氢方法,提供了世界工业制氢产量的 70%^[2]。水蒸气重整反应是强吸热反应,通常需要燃烧部分天然气原料提供热量,燃料成本高^[3]。甲烷和水蒸气在 750~900 °C、0.35~4.0 MPa 条件下发生重整反应,然后辅之以水煤气变换(water-gas shift, WGS)过程,用以提高产品气中的 H₂ 浓度。由于经过水煤气变换后的气体中含有大量 CO₂,需要设置变压吸附(pressure swing adsorption, PSA)单元对 H₂ 和 CO₂ 进行有效分离。针对 SMR 制氢工艺苛刻的高温高压反应条件要求, Hufton 等人^[4]提出了采用吸附剂吸收 CO₂ 促使反应向生成 H₂ 的方向不断移动的吸附强化制氢(sorption enhanced reforming, SER)概念,辅以煅烧炉实现吸收剂的循环利用。其反应温度和压力都较低,能耗相对较低,产生的氢气纯度高,是具有前景的煤气重整制氢技术路线之一。

针对煤气重整制氢,前人进行了相关研究。Hajjaji 等人^[5]基于对传统甲烷水蒸气重整系统的焓平衡分析,提出了节能提产的优化流程。计算结果显示,优化后的新流程系统热效率从 70% 提升至 74%,焓效率由 65% 提高到 69.1%,系统氢气产率增加了 0.13 mol H₂/mol CH₄。Rosen 等人^[6]提出了利用单乙醇胺脱除产品气 CO₂、尾部串联甲烷化反应器脱除少量 CO 的甲烷水蒸气重整制氢工艺。热力学分析结果显示,其系统焓效率为 78.5%。王逊^[7]构建了在强化重整制氢反应器前后各串联一级

变压吸附气体分离单元的焦炉煤气制氢系统。对比发现,在重整反应器之前串联 PSA 单元,可进一步提高系统能量效率和氢气产率。吴嵘^[8]利用 Aspen Plus,分析对比了不同反应温度、压力、水碳比、钙碳比等操作参数对焦炉煤气强化重整制氢工艺系统性能的影响。模拟结果显示,该焦炉煤气组分在温度 600 °C、水碳比为 4、钙碳比为 2.75 条件下,可获得最优化的技术性能指标,系统能量转化效率高达 76.3%,产氢率为 1.8 m³ H₂/m³ 焦炉煤气。Tzanetis 等人^[9]利用 Aspen Plus 工具开展了甲烷强化重整和传统水蒸气重整制氢的对比研究。结果显示,相比水蒸气重整,强化重整产生的产品气中 H₂ 摩尔浓度提高了 17.3%,系统焓效率提升 3.5%。

文献报道中,尚未针对热解煤气的强化重整制氢系统进行热力学分析和性能评价。本文采用常见 CaO 作为 CO₂ 吸附材料,利用 Aspen Plus 流程模拟软件,构建了热解煤气强化重整制氢系统和水蒸气重整制氢系统;依据系统能量转化效率和焓效率、制氢能耗、单位煤气制氢率、单位煤气制氢能耗等指标对两者进行了性能评价,为下一步耦合煤热解分级转化焦油加氢提供制氢路线,为煤热解分级转化多联产技术工业化提供技术支撑和数据参考。

1 流程模拟

Aspen Plus 模拟软件是由美国麻省理工学院于 20 世纪 70 年代开始研发的大型化工流程模拟软件^[10]。经过 40 多年的发展和优化,Aspen Plus 已成为目前业界公认的标准化工流程模拟软件,广泛用于煤制替代天然气^[11]、煤气加工制甲醇^[12]、煤气化^[13]、部分气化制氢^[14]等过程的流程模拟和系统性能评价。

全局物性方法采用 PR-BM。该方法用于非极性或弱极性混合物的物性参数计算,如 CH₄、CO₂、H₂ 等^[15]。蒸汽发电单元物性方法采用 STEMTA。模拟假设如下^[9]: 1) 假设系统处于稳态模拟,且重整反应器、再生反应器和燃烧供热反应器都处于热力学平衡状态,基于 Gibbs 自由能最小化原理计算平衡产物组成; 2) 模拟和热力学计算时不考虑催化作用; 3) 换热器中物流换热的最小传热温差设置为 15 °C; 4) 假设空气组分由体积分数为 79% 的 N₂ 和 21% 的 O₂ 组成,不考虑空气中的水蒸气; 5) 环境条件假设为温度 T₀=298 K,压力 p₀=0.101 325 MPa; 6) 所有单元均不考虑压力损失; 7) 假设重整反应器、燃烧炉等无散热损失。

1.3 强化重整及吸附剂再生单元

根据文献[21], 随着钙碳比的增加, CO₂的吸附率与钙碳比关系为

$$w(\text{CO}_2) = \begin{cases} \frac{r_{\text{Ca/C}}}{2.75}, & r_{\text{Ca/C}} < 2.75 \\ 1, & r_{\text{Ca/C}} \geq 2.75 \end{cases} \quad (1)$$

式中: $w(\text{CO}_2)$ 为 CO₂的吸附率, %; $r_{\text{Ca/C}}$ 为钙碳比, 当 $r_{\text{Ca/C}} \geq 2.75$ 时 $w(\text{CO}_2)=1$, 即 CO₂完全转化。因此综合考虑能耗等因素, 本方案中钙碳比选择 2.75。

强化重整及吸收剂再生单元模拟流程如图 2 所示。强化重整单元采用 Gibbs 反应器模型模拟, 温度设置为 650 °C, 蒸汽流量通过设计规定调节, 以实现水碳比为 3.5^[22]。采用 RGibbs 反应器模拟煅烧再生炉, 煅烧温度为 950 °C, 压力为常压。利用设计规定调节空气流率, 控制过量空气系数为 1.2。CaO 流量通过设计规定调节, 使得重整反应器进口钙碳比为 2.75。来自系统内部余热回收产生的高温蒸汽与热解煤气混合后进入强化重整反应器。

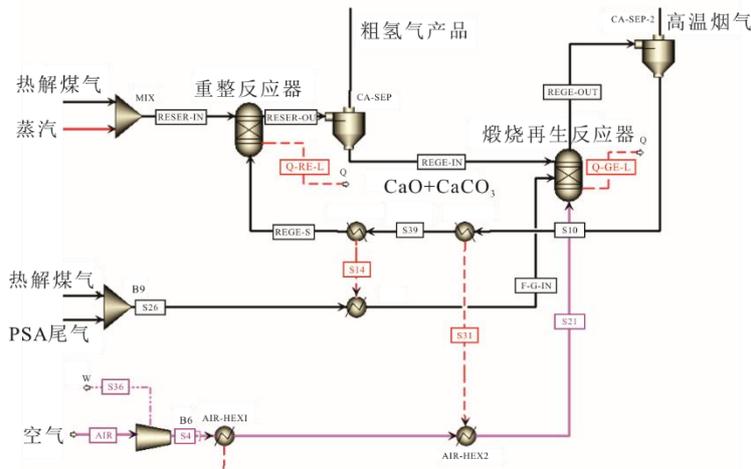


图 2 强化重整及吸收剂再生单元模拟流程
Fig.2 Simulation flow chart of the SER and absorber regeneration unit

1.4 PSA 单元

PSA 技术因具有能耗低、流程简单、产品纯度高、成本低、技术成熟等特点而成为氢气分离提纯的主要技术之一。其基本原理是利用吸附剂在不同压力下对不同气体吸附速率和吸附率的差异来实现气体的分离。本文中, PSA 单元采用简化的模型

模拟, 脱除产品气中未反应的 CH₄、CO、CO₂ 等组分。假设氢气回收率 90%, 纯度为 99.99%^[23], PSA 单元操作压力 2.0 MPa, 温度设置 40 °C^[24], 氢气回收率设定为 90%。

1.5 余热蒸汽发电单元

蒸汽轮机余热发电单元模拟流程如图 3 所示。

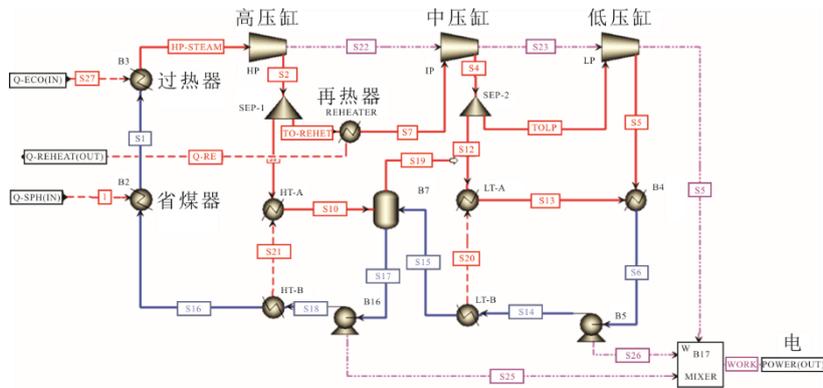


图 3 蒸汽轮机余热发电单元模拟流程
Fig.3 Simulation flow chart of the steam turbine and waste heat recovery unit

系统余热回收是降低工艺能耗、提高系统热效率的关键过程，煅烧再生炉烟气出口温度高于 600 °C，符合三压再热锅炉的设计条件^[25]。

采用相对简化的模型来模拟余热蒸汽轮机发电过程。汽轮机为 N40-13.24/535/535 型高温超高压、一次中间再热的汽轮机，额定功率 40 MW，额定蒸汽流量 127 t/h。采用 Compr 模块模拟高中压汽轮机组。设置高压和低压加热器各 1 个，用 Heater 模块模拟，1 个除氧器用 Flash2 模块模拟。汽轮机等熵效率设置为 0.9，机械效率设置为 0.98^[20]。

2 系统性能评价指标

根据热力学第二定律，能量有能级差异，其转化和传递过程具有方向性，因此本文在考察第一定律效率（能量转化效率）的同时，分析系统焓效率，从能量转化和焓平衡 2 个方面来评价不同方案的系统性能表现^[26]。

从系统能量守恒的角度衡算：

$$H_{in} + Q_{in} + W_{in} = H_{out} + Q_{out} + W_{out} \quad (2)$$

从系统焓守恒的角度衡算：

$$\begin{aligned} E_{x,in} + E_{xQ,in} + E_{xW,in} \\ = E_{x,out} + E_{xQ,out} + E_{xW,out} + E_{x,loss} \end{aligned} \quad (3)$$

式中： H 、 Q 、 W 分别表示进出系统的物流的焓值、进出系统的热量和功，kJ； E_x 、 E_{xQ} 、 E_{xW} 和 $E_{x,loss}$ 分别表示进出系统的物流焓、热流焓、功流焓和系统的焓损失，kJ。

化工合成的系统中一般不考虑动能焓和势能焓，因此系统内物流的焓为物理焓和化学焓之和：

$$E_x = E_{xPh} + E_{xCh} \quad (4)$$

式中 E_{xPh} 、 E_{xCh} 分别为物流的物理焓和化学焓，kJ。

物理焓是由于系统处于不完全平衡的状态时所具有的焓值，化学焓是环境状态下 (T_0, p_0)，系统因为化学不平衡状态而具有的焓，本文采用 Szargut 环境模型。

物理焓可由 Aspen Plus 软件直接输出，化学焓采用公式(5)计算^[27]。

$$\bar{E}_{xCh} = \sum y_i \bar{E}_{xCh,i}^0 + RT_0 \sum y_i \ln y_i \quad (5)$$

式中： \bar{E}_{xCh} 为物流的摩尔化学焓，kJ/mol； y_i 是计算物流中组分 i 的摩尔分数； $\bar{E}_{xCh,i}^0$ 是组分 i 处于环境状态 (T_0, p_0) 下的标准摩尔化学焓，根据文献^[19,28-29]，计算结果见表 3；理想气体常数 R 取 8.314 5 J/(mol·K)。

表 3 各组分标准摩尔化学焓 单位：kJ/mol
Tab.3 Standard molar chemical exergy of the components

组分	状态	\bar{E}_{xCh}^0	组分	状态	\bar{E}_{xCh}^0
H ₂ O	气态	9.49	C ₆ H ₆ O	液态	3 297.65
H ₂ O	液态	0.9	C ₁₆ H ₃₄	液态	10 659.08
H ₂	气态	236.09	C ₉ H ₇ N	液态	5 042.35
N ₂	气态	0.72	C ₁₀ H ₈	液态	5 546.02
CO ₂	气态	19.87	C ₁₂ H ₈ S	液态	7 112.29
CO	气态	274.98	CaO	固态	110.2
CH ₄	气态	831.7	CaCO ₃	固态	16.30
C ₂ H ₄	气态	1 360.9	O ₂	气态	3.974 501
C ₂ H ₆	气态	1 495.99	NH ₃	气态	346.19
C ₃ H ₆	气态	2 003.9	H ₂ S	气态	812
C ₃ H ₈	气态	2 154			

系统内单元模块之间还存在热量和能量的交换，因此计算单元模块的焓时，还需要考虑热流焓和电能等功流焓。热物流从温度为 T_1 降低为 T_2 ，传递 Q 的热量的过程中传递的热流焓计算式为^[26]：

$$E_{xQ} = Q(1 - T_0 / \bar{T}) \quad (6)$$

$$\bar{T} = \frac{T_1 - T_2}{\ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right)} \quad (7)$$

式中： Q 为热量，kJ； T_1 、 T_2 分别为冷热两端温度，K。

根据热力学第二定律，功的能级为 1，因此功流焓 E_{xW} 计算式为

$$E_{xW} = W \quad (8)$$

水碳比 $r_{H_2O/C}$ 和钙碳比 $r_{Ca/C}$ 分别定义为重整反应器进口物流中，水蒸气摩尔流量和 Ca 的摩尔流量与组分中 C 的摩尔流量之比，计算式为：

$$r_{H_2O/C} = n(H_2O) / (n(CO_2) + n(CO) + n(CH_4) + n(C_2H_4) + n(C_2H_6) + n(C_3H_6) + n(C_3H_8)) \quad (9)$$

$$r_{Ca/C} = n(CaO) / (n(CO_2) + n(CO) + n(CH_4) + n(C_2H_4) + n(C_2H_6) + n(C_3H_6) + n(C_3H_8)) \quad (10)$$

式中 n_j 为组分 j 的摩尔流量，kmol/h。

为考察系统的热力学性能，定义单位热解煤气 (CPG) 的 H₂ 产率，单位为 kmol H₂/ kmol CPG；单位产氢能耗为总耗电量/H₂ 产率，单位为 kW·h/kmol H₂；单位产氢水耗为总耗水量/H₂ 产率，单位为 kmol H₂O/kmol H₂。

为了评价重整单元的性能，定义甲烷转化率为

$$w(CH_4) = \frac{X_{out}(CH_4) - X_{in}(CH_4)}{X_{in}(CH_4)} \times 100\% \quad (11)$$

式中 $X(CH_4)$ 分别为重整反应器进出口的甲烷流量，kmol/h。

3 结果与讨论

3.1 重整压力的影响

基于上述模型设置,在钙碳比为 2.75,水碳比为 3.5,重整反应器温度为 650 °C 条件下,开展了不同重整压力(0.5、1.0、1.5、2.0 MPa)的系统模拟,并获得了系统效率等热力学性能指标,模拟结果如图 4 和图 5 所示。由图 4 和图 5 可以看出,重整压力增加,不利于反应正向进行,甲烷转化率显著降低,氢气产率降低,系统能量转化效率和烟效率逐渐降低;与此同时,低甲烷转化率意味着 PSA 单元产生的尾气中可燃组分增加,导致煤气中作为燃料气燃烧的比例大幅减少,在水碳比保持不变的情况下,单位产氢水耗增加。

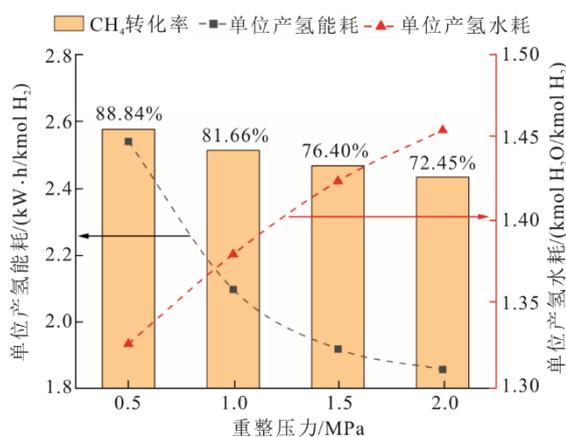


图 4 重整压力对系统能耗和水耗的影响

Fig.4 The influence of reforming pressure on system energy consumption and water consumption

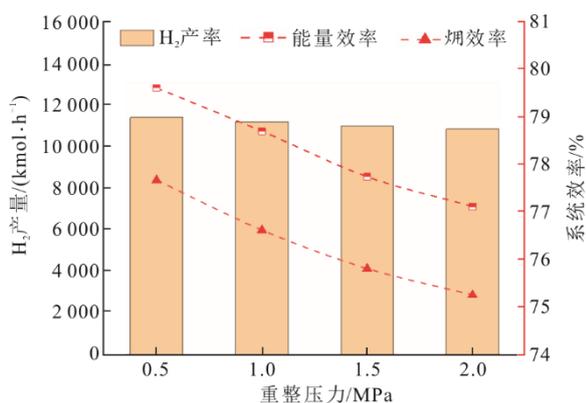


图 5 压力对系统热力学性能的影响

Fig.5 The effect of pressure on the system thermodynamic performance

图 6 描述了当重整压力变化时,系统各主要性能指标变化的敏感程度。由图 6 可知:单位产氢能耗受重整压力变化的影响最大,其次是甲烷转化

率;相对而言,系统的能量转化效率和烟效率的敏感程度较低。

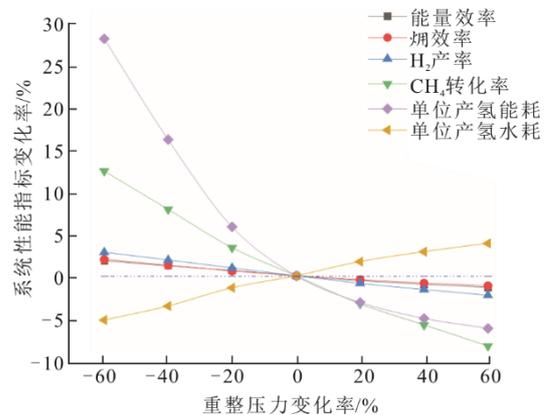


图 6 重整压力对系统性能影响的敏感性分析

Fig.6 Sensitivity analysis of reforming pressure on system performance

综合图 4 和图 5 的模拟结果,重整压力为 0.5 MPa 时,高甲烷转化率可获得较大的氢气产率,系统能量转化效率和烟效率均处于最大值。因此,选择 0.5 MPa 的重整压力较为合适,下文将对该工况进行焓平衡分析。

3.2 焓分析

在水碳比为 3.5,钙碳比为 2.75,重整温度为 650 °C,重整压力为 0.5 MPa 的条件下,根据公式(4)对系统各主要单元进行了详细的焓分析,绘制系统焓流桑基图如图 7 所示。从图 7 可以看出:热解煤气中的焓能 75.15% 转移到了氢气产品中,系统整体焓损失为 188.99 MW,占总输入焓的 18.01%;焓损失占比最大为煅烧再生单元(60.90%),其次为强化重整单元(13.17%)。

3.3 系统技术性能对比

为了对比不同重整工艺,利用 Aspen Plus 软件,开展了相同进料参数的水蒸气重整模拟,重整单元温度设置为 900 °C,压力 3.69 MPa,水碳比设置为 3.5^[14]。强化重整(SER)、水蒸气重整(SMR)2 种工艺的模拟结果对比见表 4、表 5。由表 4、表 5 可以看出:在 6 000 kmol/h 的热解煤气输入条件下,采用吸附强化重整工艺氢气产率为 11 281.79 kmol/h,较水蒸气重整系统提升 7.66%;吸附强化重整系统的单位产氢能耗和水耗均低于水蒸气重整,系统能量效率从 74.55% 提升到 79.55%,烟效率从 73.14% 升高到 77.63%,显示了一定的节能效益。系统烟效率与文献[5,9]的甲烷水蒸气重整(76.5%)和强化重整

(78%)较为接近,能量转化效率略高于文献[8]的焦炉煤气强化重整系统(76.3%)。因此,在一定程度上,可验证本文流程设计与系统模拟的合理性。综合上

文来看,强化重整工艺可在较低反应温度和压力下制取较高产量的氢气,同时系统的热力学性能大幅提升,是具有广阔应用前景的煤气重整制氢工艺。

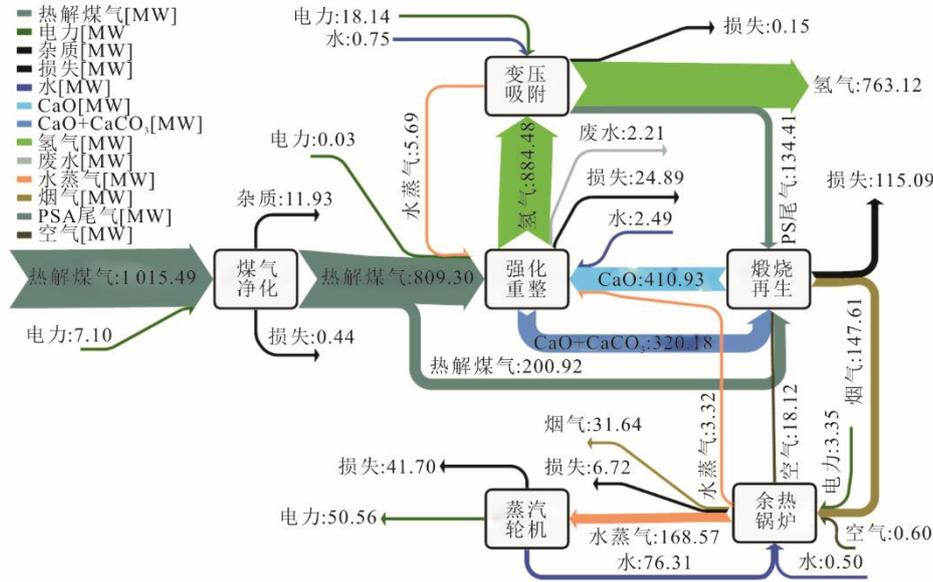


图 7 强化重整制氢系统焓流桑基图

Fig.7 The exergy flowchart of H₂ production system by SER

表 4 系统热力学性能对比
Tab.4 Thermodynamic performances of the systems

项目	强化重整	水蒸气重整
钙碳比	2.75	
水碳比	3.50	3.50
重整温度/℃	650	900
重整压力/MPa	0.50	3.69
再生温度/℃	950	950
热解煤气流量/(kmol·h ⁻¹)	6 000	6000
氢气产率/(kmol·h ⁻¹)	11 281.79	10 478.68
单位煤气产氢量/(kmol H ₂ /kmol CPG)	1.88	1.75
单位产氢能耗/(kW·h/kmol H ₂)	2.54	3.06
单位产氢水耗/(kmol H ₂ O/kmol H ₂)	1.33	1.37

表 5 系统效率对比
Tab.5 Efficiencies of the systems

项目	强化重整		水蒸气重整		
	能量	烟	能量	烟	
热解煤气	989.12	1 015.49	989.12	1 015.49	
能量输入/ MW	空气	0	0	0.68	
	水	0	3.74	0	
	耗电量	29.48	29.48	33.02	33.02
能量输出/ MW	氢气	758.87	763.12	707.43	710.42
	发电量	51.42	51.42	59.55	59.55
效率/%	79.55	77.63	74.55	73.14	

4 结 论

1) 本文构建了以热解煤气为原料的强化重整制氢系统,该系统采取 CaO 吸收强化水蒸气重整制氢,通过余热蒸汽发电回收系统热量,提高能量利用效率。

2) 利用 Aspen Plus 模拟软件构建了稳态系统模型并进行了重整压力的优化,依据焓效率、单位制氢能耗、水耗等性能指标进行参数选择。结果表明,在钙碳比为 2.75,水碳比为 3.5,重整温度为 650 ℃,重整压力为 0.5 MPa 的条件下,6 000 kmol/h 热解煤气,可制取 11 281.79 kmol/h H₂,能量转化效率为 79.55%,烟效率为 77.63%。

3) 对比传统水蒸气重整制氢,同等条件下,强化重整制氢的氢产量提升了 7.66%,系统能量转化效率提高 6.71%,烟效率提升 6.14%,显示了较高的节能效益。因此,综合系统效率和能耗来看,通过强化重整制氢工艺,热解煤气制氢可作为现阶段制氢的途径之一。

[参 考 文 献]

[1] COMPANY B P. Statistical review of world energy[R]. London: British Petroleum Company, 2020: 1-10.

- [2] 王桂芝. 国外氢气生产技术分析[J]. 化工技术经济, 2006, 24(6): 47-50.
WANG Guizhi. Analysis on overseas hydrogen process technologies[J]. Chemical Techno-economics, 2006, 24(6): 47-50.
- [3] 李文兵, 齐智平. 甲烷制氢技术研究进展[J]. 天然气工业, 2005, 25(2): 165-172.
LI Wenbing, QI Zhiping. Progress on technical study for production of hydrogen from methane[J]. Natural Gas Industry, 2005, 25(2): 165-172.
- [4] HUFTON J R, MAYORGA S, SIRCAR S. Sorption-enhanced reaction process for hydrogen production[J]. AIChE Journal, 1999, 45(2): 248-256.
- [5] HAJJAJI N, PONS M N, HOUAS A, et al. Exergy analysis: an efficient tool for understanding and improving hydrogen production via the steam methane reforming process[J]. Energy Policy, 2012, 42: 392-401.
- [6] ROSEN M A. Thermodynamic investigation of hydrogen production by steam-methane reforming[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 1991, 16(3): 207-217.
- [7] 王逊. 焦炉煤气制氢的流程改进与技术经济性能预报[J]. 中国电机工程学报, 2011, 31(增刊 1): 149-154.
WANG Xun. Process innovation of coke oven gas to hydrogen system and technical-economic performance prediction[J]. Proceeding of the CSEE, 2011, 31(Suppl.1): 149-154.
- [8] 吴嵘. 反应吸附强化焦炉煤气水蒸气重整制氢研究及其工艺评价[D]. 杭州: 浙江大学, 2014: 1.
WU Rong. Studies of the ReSER-COG of hydrogen production and the technology evaluation[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2014: 1.
- [9] TZANETIS K F, MARTAVALTZI C S, LEMONIDOU A A. Comparative exergy analysis of sorption enhanced and conventional methane steam reforming[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012, 37(21): 16308-16320.
- [10] 孙兰义. 化工过程模拟实训: Aspen Plus 教程[M]. 2版. 北京: 化学工业出版社, 2017: 1.
SUN Lanyi. Chemical engineering process simulation using Aspen Plus[M]. 2nd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2017: 1.
- [11] BASSANO C, DEIANA P, PACETTI L, et al. Integration of SNG plants with carbon capture and storage technologies modeling[J]. Fuel, 2015, 161: 355-363.
- [12] YU B Y, CHIEN I L. Design and economic evaluation of a coal-based polygeneration process to coproduce synthetic natural gas and ammonia[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2015, 54(41): 10073-10087.
- [13] 姚永春, 王亦飞, 梁铁, 等. 两段式气化工工艺流程的 Aspen Plus 软件模拟[J]. 计算机与应用化学, 2008, 25(9): 1123-1128.
YAO Yongchun, WANG Yifei, LIANG Tie, et al. Simulation of two-stage coal gasification process on Aspen Plus[J]. Computers and Applied Chemistry, 2008, 25(9): 1123-1128.
- [14] YE C, ZHENG Y, XU Y, et al. Energy and exergy analysis of poly-generation system of hydrogen and electricity via coal partial gasification[J]. Computers & Chemical Engineering, 2020, 141: 1069-1079.
- [15] 吴瑶. 基于 Aspen Plus 对耦合化学链燃烧的焦炉煤气重整制氢系统性能的研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2014: 1.
WU Yao. Study on systematic performance of reforming hydrogen produced from coke-oven gas by coupling with chemical looping combustion based on Aspen Plus[D]. Chongqing: Chongqing University, 2014: 1.
- [16] SMIRNIOTIS P, GUNUGUNURI K. Water gas shift reaction: research developments and applications[M]. New York: Elsevier, 2015: 1.
- [17] KOPYSCINSKI J, SCHILDHAUER T J, FRÉDÉRIC Vogel, et al. Applying spatially resolved concentration and temperature measurements in a catalytic plate reactor for the kinetic study of CO methanation[J]. Journal of Catalysis, 2010, 271(2): 262-279.
- [18] 吴嵘, 吴素芳. 反应吸附强化 C₂/C₃ 烃水蒸气重整制氢反应热力学计算[J]. 化工学报, 2014, 65(6): 1961-1970.
WU Rong, WU Sufang. Thermodynamic calculations for reactive sorption enhanced reforming of C₂/C₃ light hydrocarbons[J]. CIESC Journal, 2014, 65(6): 1961-1970.
- [19] SZARGUT J. Exergy method: technical and ecological applications[M]. Boston: WIT Press, 2005: 1.
- [20] LI K, WANG Q, FANG M, et al. Techno-economic analysis of a coal staged conversion polygeneration system for power and chemicals production[J]. Chemical Engineering & Technology, 2018, 42(1): 73-88.
- [21] WU S F, LAN P Q. A kinetic model of nano-CaO reactions with CO₂ in a sorption complex catalyst[J]. AIChE Journal, 2012, 58(5): 1570-1577.
- [22] WU R, WU S. The ReSER-COG process for hydrogen production on a Ni-CaO/Al₂O₃ complex catalyst[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, 38(27): 11818-11825.
- [23] HIGMAN C, BURGT MVD. Gasification[M]. 2nd ed. New York: Elsevier, 2008: 1.
- [24] LIU K, SONG C, SUBRAMANI V. Hydrogen and syngas production and purification technologies[M]. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2010: 1.
- [25] 王治亚, 何理, 张垚, 等. 整体煤气化联合循环发电 (IGCC) 热力特性分析[J]. 节能, 2016, 35(3): 27-31.
WANG Zhiya, HE Li, ZHANG Yao, et al. Thermal characteristics analysis of integrated gasification combined cycle[J]. Energy Conservation, 2016, 35(3): 27-31.
- [26] 齐鸣斋. 化工能量分析[M]. 上海: 华东理工大学出版社, 2009: 1.
QI Mingzhai. Analysis of energy on chemical engineering[M]. Shanghai: ECUST Press, 2009: 1.
- [27] QUEROL E, GONZALEZ-REGUERAL B, RAMOS A, et al. Novel application for exergy and thermoeconomic analysis of processes simulated with Aspen Plus[J]. Energy, 2011, 36(2): 964-974.
- [28] SZARGUT J, MORRIS D R, STEWARD F R. Exergy analysis of thermal, chemical, and metallurgical processes[M]. New York: Hemisphere Publishing, 1987: 1.
- [29] KOTAS T J. The exergy method of thermal plant analysis[M]. New York: Elsevier, 1985: 1.

(责任编辑 刘永强)