

基于Aspen Plus的玉米秸秆与煤共气化模拟优化研究

黄秀辉*, 杨文凯, 甘奕, 杨婷婷, 赵昱涵

上海理工大学能源与动力工程学院, 上海

收稿日期: 2023年10月24日; 录用日期: 2023年11月22日; 发布日期: 2023年11月29日

摘要

为妥善利用生物质秸秆和减少对传统能源利用方式的依赖, 本文提出了玉米秸秆与煤共气化方案, 利用 Aspen Plus 流程模拟软件对秸秆与煤共气化行为进行模拟研究, 并对不同操作条件对合成气组分等因素进行了灵敏度分析, 结果表明气化温度在750°C之前对模拟结果影响较大, 气化压力和氧气流量的增加对模拟结果产生负面影响, 而水蒸气流量对H₂体积分数和产量有积极作用, 故结合以上规律, 以合成气产率为正交优化目标, 通过极差分析得到最佳操作条件, 将玉米秸秆与煤炭比例设置为40:60, 气化温度设置为723°C, 气化压力设置为1 bar, 气化剂中氧气流量为200 kg·h⁻¹, 水蒸气补充流量为440.43 kg·h⁻¹。得到最优模拟结果, 产气组分中H₂占比29.72%, CO占比20.18%, CO₂占比6.49%, CH₄占比0.298%, 氢气产量为78.21 kg·h⁻¹, 气体产率2.923 Nm³·kg⁻¹。

关键词

秸秆, 煤, 共气化, Aspen Plus, 灵敏度, 模拟优化

Simulation and Optimization of Co-Gasification of Corn Stover and Coal Using Aspen Plus

Xiuhui Huang*, Wenkai Yang, Yi Gan, Tingting Yang, Yuhan Zhao

School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Oct. 24th, 2023; accepted: Nov. 22nd, 2023; published: Nov. 29th, 2023

Abstract

To effectively utilize biomass straw and reduce reliance on traditional energy sources, this study

*通讯作者。

文章引用: 黄秀辉, 杨文凯, 甘奕, 杨婷婷, 赵昱涵. 基于 Aspen Plus 的玉米秸秆与煤共气化模拟优化研究[J]. 建模与仿真, 2023, 12(6): 5875-5886. DOI: 10.12677/mos.2023.126533

proposes a co-gasification scheme of corn straw and coal. The gasification behavior of straw and coal co-gasification is simulated using the Aspen Plus process simulation software. Sensitivity analysis is conducted on various operating conditions, focusing on the composition of synthesized gas. The results indicate that gasification temperature has a significant impact on the simulation results below 750°C. An increase in gasification pressure and oxygen flow rate has a detrimental effect on the simulation results, while steam flow rate has a positive influence on H₂ volume fraction and yield. By integrating these observations, and considering synthetic gas yield as the orthogonal optimization objective, the optimal operational conditions are determined through range analysis. The corn straw-to-coal ratio is set at 40:60, gasification temperature at 723°C, gasification pressure at 1 bar, oxygen flow rate in the gasification agent at 200 kg·h⁻¹, and steam supplementation flow rate at 440.43 kg·h⁻¹. The optimal simulation results yield gas components with H₂ occupying 29.72%, CO occupying 20.18%, CO₂ occupying 6.49%, CH₄ occupying 0.298%. The hydrogen production rate is 78.21 kg·h⁻¹, and the gas yield is 2.923 Nm³·kg⁻¹.

Keywords

Straw, Coal, Co-Gasification, Aspen Plus, Sensitivity, Simulation Optimization

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

秸秆作为农业生产过程中最常见的废弃物,其处理方式包括填埋、燃烧等等,但这些方法具有高污染,资源转换利用率低,处理成本高昂等缺点[1] [2] [3]。且秸秆作为生物质资源的一种,其资源收集形式具有大规模、集中排放等特点,故如何高效、低污染地清洁利用秸秆资源成为众多学者关注的热点问题。研究人员发现,由于秸秆富含纤维素和半纤维素等有机物质,故这些有机物质在气化过程中可以转化为可利用的合成气,从而具备较高的能量转化效率,但生物质作为单组份进料时,其合成气的气体热值偏低,但研究发现如果在秸秆中添加气化活性较高的煤进行双组分共气化可以提高气体热值。而煤炭不仅资源在中国广泛分布,且在全球范围内都具备了可获得性。煤炭主要用于燃烧发电等传统能源领域,但传统利用方式对生态环境产生了严重的影响[4] [5]。相比较而言,煤气化技术可以实现对煤炭的多样化利用,不仅可以减少对环境的污染,而且煤炭资源的稳定供应为生物质气化提供了可靠的碳源[6] [7]。考虑到时间和成本效益,模拟软件对气化流程的建立可以使研究者更加灵活地对气化过程的影响因素进行分析和优化,此外研究人员可以使用模拟软件来进行新型反应器的动力学设计、催化剂的选择,使气化模型更能反应真实情况,为后续的研究提供了基础。故综上所述,本文通过利用 Aspen Plus 模拟软件对秸秆与煤进行共气化模拟,并对不同操作条件进行研究,以优化热解气化模型。

针对秸秆作为生物质单组份进料研究中,王高月[8]以生物质秸秆为研究对象,提出了一种内热式气化循环工艺,并用 Aspen Plus 模拟不同气化剂对生物质热解气化特性的影响,结果表明气化剂中适量的水和 CO₂ 可以提高产品中 H₂ 的体积分数。同样地,卢亚威[9]以玉米秸秆为研究对象,通过 Aspen Plus 建立下吸式固定床气化炉模型,研究空气当量比(ER)、水蒸气通入量(S/B)以及气化剂温度对主要气化特性的影响,并通过正交实验来获得对气化指标影响的最优方案。除了秸秆,大多数学者常用木屑、果壳,药渣等废弃物作为生物质进料组分,如杜铎[10]以木屑为生物质原料,以气体低位热值,热解产气率来评价模型最佳热解气化温度。与上述不同的是,Raquel Tavares [11]则以葡萄牙森林废弃物为研究对象,研

究了气化剂温度、气化温度和生物质比等关键参数对产气成分的影响。而在关于煤与生物质双组分共气化技术的研究上, Singh [12]则通过 Aspen Plus 开发了塑料与木屑的蒸汽共气化模型, 讨论了反应器温度、S/B、塑料含量和反应器压力等工艺参数对气化特性的影响。而 Rosha [13]则尝试对藻类和塑料废弃物进行共气化, 通过建立气化模型来分析气化温度和 ER 对合成气组成、热值和碳转化率的影响。Okati [14]则通过 Aspen Plus 建立准平和模型, 来模拟生物质和煤的等离子体共气化过程, 考虑了 ER、S/B、温度和气化剂对合成气和工艺效率的影响。而董玉瓶[15]通过双回路循环流化床气化实验, 以杞菊地黄丸药渣为研究对象, 分析了 ER 和水蒸气配比对结果的影响, 并确定了最佳操作条件。除了上述双组分生物质原料, 不少研究者还研究了煤与其他生物质双组分共气化特性, 如蔗渣、松木屑和麦秆等[16]-[21]。

综上所述以及对文献的调研来看, 前人对于煤与秸秆的共气化的模拟和研究较少, 只是针对秸秆作为单一组分的气化特性的研究, 且仅关注 ER、气化剂浓度和含水率对气化过程的影响。故本文建立了秸秆和煤共热解气化模型, 并从气化剂中氧气流量、水蒸气流量、气化温度和气化压力等多个因素对合成气组分、氢气产率等气化特性的影响。本研究为今后工艺流程的设计和 optimization 提供必要的理论指导, 可以更全面地了解不同因素对气化过程中合成气组分的影响。对促进秸秆和煤等资源的高效利用, 推动清洁能源的发展具有重要意义。

2. 模型建立

2.1. 物料组成

本文选用农业生产过程中产生的玉米秸秆作为生物质原料, 本文选定的进料来自文献[22], 其工业分析和元素分析如表 1 所示。本模拟为玉米秸秆与煤的高温热解气化工艺, 气体产物以轻气体为主, 故使用 RK-Soave 性质方法。

Table 1. Industrial analysis and elemental analysis of corn stalks and bituminous coal

表 1. 玉米秸秆和无烟煤的工业分析和元素分析

原料	工业分析/%				元素分析/%					低位热值 /MJ·kg ⁻¹
	M	FC	V	A	C	H	O	N	S	
秸秆(BIO)	13.10	13.45	60.77	12.68	42.49	5.36	34.57	1.12	0.63	13.75
煤(BC)	4.33	65.38	7.57	22.72	70.03	3.74	8.23	1.42	0.86	29.76

2.2. 煤与秸秆共气化模拟流程

生物质气化是固体或液体燃料挥发并转化为高热值氢气和合成气的热化学过程。合成气主要 H₂、CO、CO₂、CH₄、N₂、水蒸气、碳氢化合物等气体组成。生物质气化主要有以下三个反应过程: 热裂解反应、氧化反应、还原反应。热解反应是指将物料在无氧或少氧条件下通入热解炉中, 在高温下将有机物质分解成小分子的过程, 主要产物为固体焦炭和部分气体。气化反应主要包括氧化反应和还原反应, 其作用是将通入气化炉的热解产物和气化介质反应生成 CO、H₂、CH₄、CO₂ 等混合气体。共气化过程的主要热化学反应见表 2 [23] [24] [25] [26] [27]。

故以上述原理作为模型建立的基础, 在 Aspen Plus 软件中建立秸秆和煤共气化模型, 如图 1 所示。该模型包括 12 个模块, 详见表 3。物料 FEED-BIO 和 FEED-BC 分别进入 RStoic 模块中干燥, 并分别在 SEP2 模块中分离水分, 分离后的干燥物料进入 RYIELD 模块中分解成单质、H₂O 及灰分, 随后物料经过

SEP2 模块模拟在实际过程中未反应的碳,将剩余碳与气化剂在 RGIBBS 模块中模拟碳的高温燃烧反应(涉及反应主要为 R1、R2 和 R3),将燃烧反应后的物料通入 RGIBBS 反应器模拟气化炉中的高温气化反应(涉及氧化反应和还原反应),反应后的产物经过灰分分离器和水分分离器把产物中的灰分和水分离。

考虑气化反应的复杂性,为了简化模型,作出以下合理假设[28] [29]: (1) 气化炉在运行中保持稳定状态,所有参数不因时间的变化而变化;(2) 反应过程中分为干燥、热解、气化三个阶段,且互不影响;(3) 生物质中灰分视为惰性物质,不参与气化过程;(4) 气化介质与生物质颗粒在气化炉内瞬间完全混合;(5) 所有气相反应快速反应,且均达到平衡;(6) 生物质颗粒温度均匀,温度梯度为零;(7) 气化反应后的气体产物为 H₂、CO、CO₂、CH₄、H₂O、C₂H₄、C₂H₆。

Table 2. Gasification reactions

表 2. 气化反应

反应名称	反应式	编号
完全氧化燃烧反应	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	R1
部分氧化反应	$2C + O_2 \rightarrow 2CO$	R2
一氧化碳燃烧反应	$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$	R3
水合成反应	$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$	R4
甲烷燃烧反应	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	R5
布杜反应	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	R6
一次水煤气反应	$H_2O + C \rightarrow CO + H_2$	R7
二次水煤气反应	$2H_2O + C \rightarrow CO_2 + 2H_2$	R8
水煤气变换反应	$H_2O + CO \rightarrow CO_2 + H_2$	R9
甲烷化反应	$3H_2 + CO \rightarrow CH_4 + H_2O$	R10

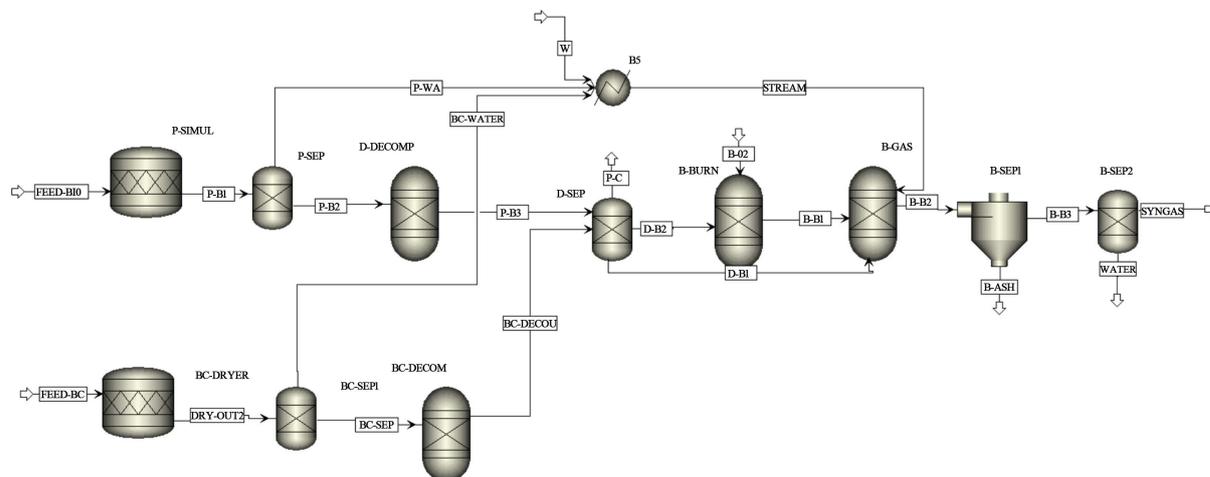


Figure 1. Process flow diagram of straw and coal gasification for hydrogen production

图 1. 秸秆与煤气化工艺流程图

Table 3. Description of Aspen Plus modules
表 3. Aspen Plus 模块说明

模块命名	模块类型	功能	作用
P-SIMUL BC-DRYER	RStoic	化学计量反应器	分离生物质中水分
D-DECOMP BC-DECOM	RYield	产率反应器	生物质裂解的过程
B-BURN		吉布斯反应器	生物质和煤燃烧过程
B-GAS	RGibbs	吉布斯反应器	生物质和煤气化过程
P-SEP BC-SEP1	SEP	组分分离器	分离干燥生物质产生的水分
D-SEP	SEP	组分分离器	分离未参与反应的碳
B-SEP1	SSPLIT	子流股分流器	分离气化产物产生的灰分
B-SEP2	SEP	组分分离器	分离气化产物产生的水蒸气
B5	HEATER	换热器	将分离的水气化成水蒸气

2.3. 模型结果及验证

对于所建立的模型,本文对比了文献中玉米秸秆[9]单组份气化,以及近似体系煤和松木屑双组分[30]气化在文献所述条件下与模拟结果进行模型验证模型,验证结果如表 4 所示,验证结果表明模拟与实验之间具有良好的一致性,偏差在可接受的范围之内,其偏差的来源可能是来源于模型的差异,证明了本文所建模型的可行性。

Table 4. Simulation results vs experimental results

表 4. 模拟结果与实验结果

产气组分	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄
实验值[9]	11%~17%	14%~18%	11%~17%	0%~1%
模拟值	17.251%	14.10%	12.77%	~0%
实验值[30]	50.32	34.71	8.49	4.10
模拟值	55.56	30.89	9.21	3.38

3. 模拟结果与讨论

3.1. 玉米秸秆与煤质量比对模拟结果的影响

如图 2 所示,分析了玉米秸秆与煤质量比对合成气体积分数的影响。总进料流量为 1000 kg·h⁻¹,空气气化剂流量为 2040.78 kg·h⁻¹,控制玉米秸秆与煤的质量比变化,随着煤炭比例增加,可以发现 CO 和 CO₂ 发生明显变化,与模型验证文献[30]具有相同的变化趋势,其中 CO 含量从 16.76% 增长至 32.18%,而 CO₂ 含量从 11.47% 下降至 1.16% 由上述分析可以归结为,煤炭比例增加使得含碳量增加,而由于空气气化剂中氧气流量的限制,使得 C 和氧气发生不完全燃烧反应,由于反应 R1、R3 和 R6,故使得

CO₂ 被消耗, 反应朝着有利于 CO 的方向进行, 而 H₂ 体积分数的上升则可归因于 R7, R8 和 R9 反应的正向进行, 而本文的目的是玉米秸秆的资源化利用故玉米秸秆所占比例不能太小, 故取玉米秸秆与煤碳比例为 40:60。

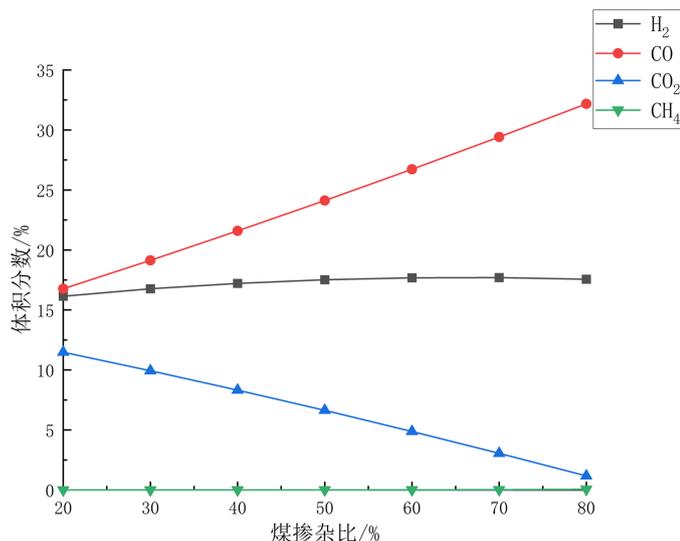


Figure 2. Effect of corn stalk to coal mass ratio on syngas composition
图 2. 玉米秸秆与煤质量比对合成气体积分数的影响

3.2. 气化温度对模拟结果的影响

如图 3 所示, 气化温度是影响合成气组分的关键参数之一, 图 3(a)表明气化温度的上升增加了可燃气体的体积分数, 在 750°C 之前, 合成气各组分发生剧烈变化, 如 CO 和 H₂ 分别从 0.41% 和 5.03% 增加至 25.87% 和 17.99%。此后 H₂ 体积分数略有下降, 但总体保持稳定, 而在 750°C 之后气体组分变化不大。造成上述现象的原因主要如下, 其一, 低温环境下, 燃烧所产生的碳被保留在合成气之中。随着温度的上升, 这种气化过程中的吸热反应被推动, 比如焦炭 - 水蒸气重整反应, 还有 CO₂ 和 C 之间的吸热还原反应, 这些反应生成了 CO, 结果导致 CO₂ 的浓度减少, 而 CO 和 H₂ 的浓度则上升。其二, 在温度超过 750°C 后, H₂ 的体积分数会略有下降, 尽管幅度并不大。这种情况出现是因为这时水煤气的逆反应占主导地位, 而所消耗的 H₂ 与甲烷转化而来的 H₂ 达到了平衡状态, 这也是 H₂ 体积分数变化较为有限的原因。图 3(b)揭示了气化温度对氢气产量的影响在气化压力为 1 bar, 煤和秸秆进料流量总和为 1000 kg·h⁻¹, 气化剂空气流量为 2040.78 kg/h, 气化温度范围为 400°C~1500°C 的情况下, 当气化温度为 750°C 时, 氢气产量达到最大值为 40.57 kg·h⁻¹, 这是因为受到 R6、R7、R8、R9 反应的影响, 使得氢气产量上升, 而当气化温度达到一定值时, 气化炉内反应保持平衡, 氢气产量保持恒定。

3.3. 气化压力对模拟结果的影响

如图 4 所示, 气化压力也是影响合成气组成和产量的重要因素之一。图 4(a)反映了为气化压力对合成气组分和氢气产量的影响, 产气中 H₂ 和 CO 的体积分数降低, 而 CO₂ 和 CH₄ 的气体体积分数升高。H₂ 的体积分数从气化压力为 1 bar 时的 17.68% 降低到气化压力为 50 bar 时的 12.55%, 而 CO 的体积分数则从 26.72% 降低为 17.82%, CO₂ 和 CH₄ 的体积分数则分别增长至 10.01% 和 1.92%。这是因为 R6, R7 都是分子数增大的反应, 提高气化压力, 使得气化反应向分子数减小的方向进行, 即不利于 H₂ 及 CO 的生成, 因此 H₂ 及 CO 的产率是降低的, 反之 CO₂ 的产率升高。并且压力的增加, 使生成 CH₄ 的反应增加,

使 CH_4 的产率上升。由此可知, 气化压力对影响气化合成气的组成有着重要的作用。图 4(b)则展示了气化压力对氢气产量的影响, 保持其他条件不变, 气化压力在 1~50 bar 范围内变化, 氢气产量从 $39.70 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 降低到 $24.79 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$, 由此可见气化压力并非越高越好, 对于氢气产量来说, 低压更能增大氢气产量。

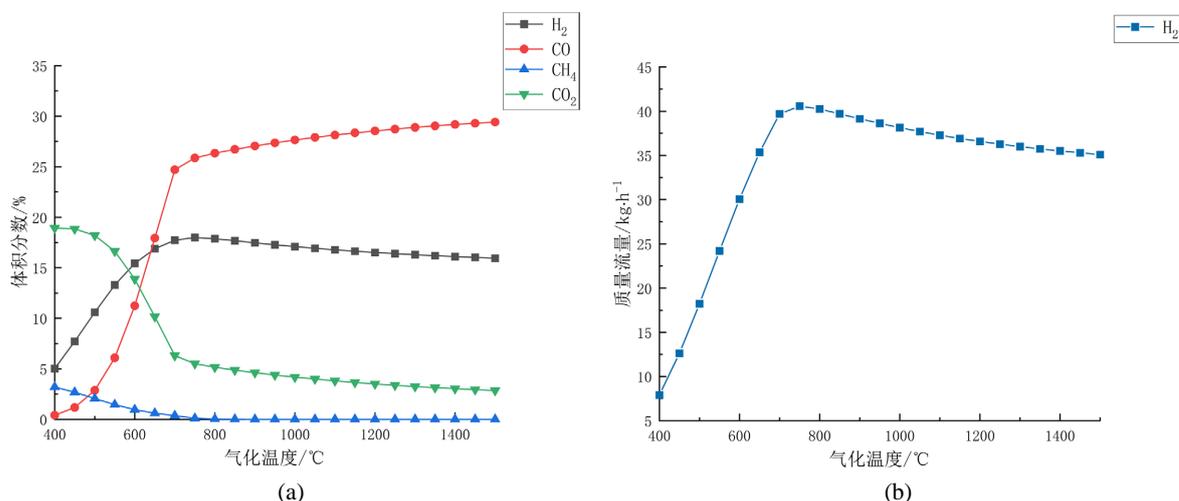


Figure 3. (a) Effect of gasification temperature on syngas composition; (b) Effect of gasification temperature on hydrogen production

图 3. (a) 气化温度对合成气体积分数的影响; (b) 气化温度对氢气产量的影响

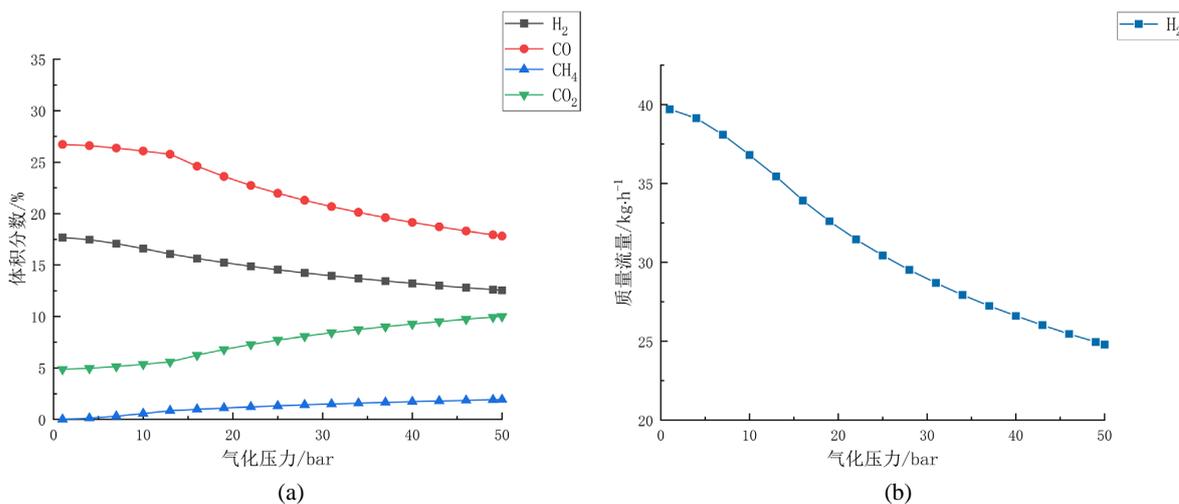


Figure 4. (a) Effect of gasification pressure on syngas composition; (b) Effect of gasification pressure on hydrogen production

图 4. (a) 气化压力对合成气体积分数的影响; (b) 气化压力对氢气产量的影响

3.4. 气化剂流量对模拟结果的影响

3.4.1. 空气气化剂中 O_2 流量对模拟结果的影响

如图 5 所示, 通过改变空气气化剂中 O_2 流量来分析其对合成气体积分数和氢气产量的影响。从图 5(a) 可以发现, 当气化剂中氧气流量在 $200\sim 2000 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 范围内变化时, H_2 和 CO 的体积分数减少, 而 CO_2 的体积分数上升, 这主要是因为由于氧气含量的增加使得 C 与 O_2 发生完全燃烧反应生成 CO_2 , 使得二氧化碳含量增加, 使得反应 R1、R2、R3、R4、R5 正向移动, 从而使的合成器中的可燃组分得以充分消耗, 故 H_2 和 CO 的体积分数减少, CO_2 的体积分数上升, 直至氧气流量为 $1300 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$ 左右时, CO_2 的体积分数到最

大值为 37.98%，这是因为 R1、R2、R3 反应中的碳被完全消耗。而图 5(b)则显示了气化剂中 O₂ 流量对氢气产量的影响，氢气产量从 46.22 kg·h⁻¹ 降低至近 0 kg·h⁻¹。

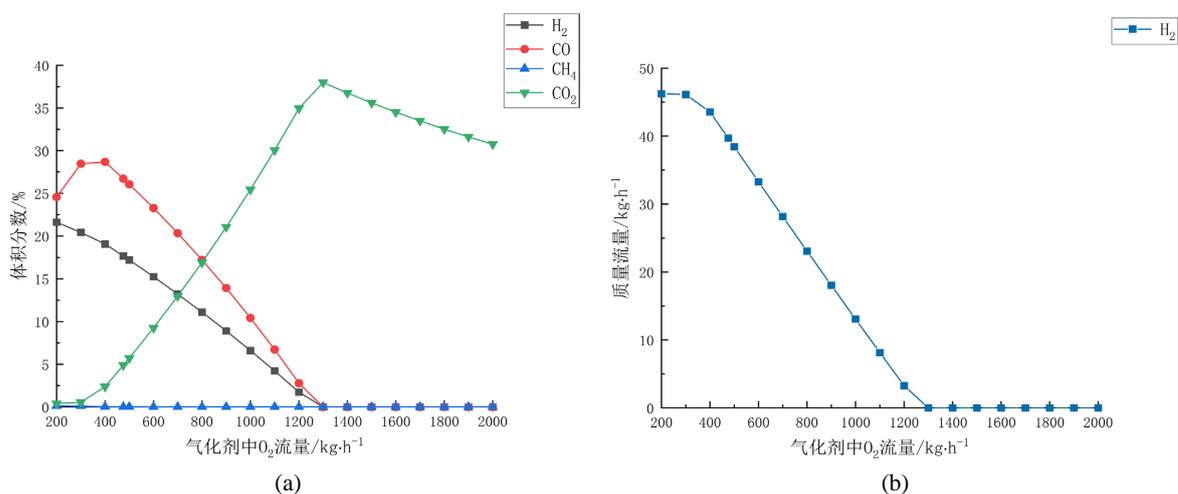


Figure 5. (a) Effect of O₂ flow rate in air gasifying agent on syngas composition; (b) Effect of O₂ flow rate in air gasifying agent on hydrogen production

图 5. (a) 空气气化剂中 O₂ 流量对合成气体积分数的影响; (b) 空气气化剂中 O₂ 流量对氢气产量的影响

3.4.2. 水蒸气流量对模拟结果的影响

如图 6 所示，以水蒸气作为气化剂，分析其流量对合成气体积分数和氢气产量的影响，其中水蒸气的来源为干燥模块中分离出的水分和补充流股 W。图 6(a)通过改变水蒸气流量在 0~500 kg·h⁻¹ 的范围内变化，可以发现 H₂ 的体积分数从 16.38% 增长至 23.50%，CO 的体积分数从 28.70% 降低至 17.77%，而 CO₂ 的体积分数则从 3.39% 增长至 11.59%。这是因为当水蒸气浓度增加时，会使得反应 R7、R8、R9 反应正向移动，并且其反应速率也随着水蒸气的进料流量增加而增加，从而使得 H₂ 和 CO₂ 的体积分数增加，CO 体积分数降低。图 6(b)则展示了氢气产量和低位热值随水蒸气流量的变化趋势，从 36.23 kg·h⁻¹ 增长至 56.80 kg·h⁻¹，其低位热值则从 5392.64 KJ·m³ 降低至 4778.35 KJ·m³。这主要是因为气体的低位热值的降低主要是因为高热值的可燃气 CO 含量减少，而低热值的 H₂ 和不可燃气 CO₂ 两者含量增多。

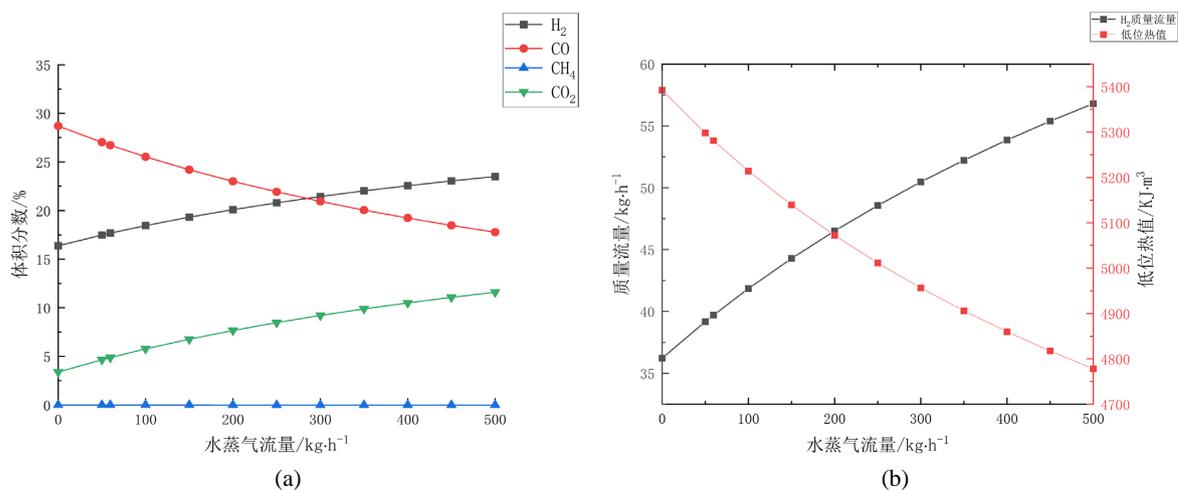


Figure 6. (a) Effect of steam flow rate on syngas composition; (b) Effect of steam flow rate on hydrogen production

图 6. (a) 水蒸气流量对合成气体积分数的影响; (b) 水蒸气流量对氢气产量和低位热值的影响

3.5. 煤进料流量对模拟结果的影响

如图 7 所示, 分析了煤进料流量对合成气体积分数和 CO 和 CO₂ 质量流量的影响。从图 7(a)所示, 保持其他条件参数不变, 使得煤进料流量在 200~1000 kg·h⁻¹ 的范围内变换, 可以发现随着煤进料流量的增加, 氢气的体积分数从 6.45% 变化到 22.63%, CO 的体积分数在煤进料流量为 200 kg·h⁻¹ 的 7.79%, 在进料流量为 850 kg·h⁻¹ 达到最大值为 33.88%, 此后随着进料流量的增加, CO 体积分数稍有下降。CO₂ 的体积分数则从 18.73% 降低到 0.75%。造成上述现象的原因大致是以下原因: 随着煤炭进料流量的增加, 为反应提供了充足的碳源, 促使 R1、R2 和 R3 反应向正向方向移动, 生成大量的 CO 和 CO₂。然而, 由于气化剂中氧气的进料流量是固定的, 当氧气供应不足时, 碳发生不完全燃烧反应, 导致生成更多的 CO。同时, 剩余的碳促使 R6、R7 和 R8 反应向正向方向移动, 使得 CO₂ 被消耗, 进一步生成更多的 H₂ 和 CO。如图 7(b)所示, 反映了煤进料流量对 CO 和 CO₂ 质量流量的影响, CO 增长至 1248.572 kg·h⁻¹, 而 CO₂ 则从 200 kg·h⁻¹ 的 540.42 kg·h⁻¹ 降低至 1000 kg·h⁻¹ 的 43.92 kg·h⁻¹, 这是因为煤进料的增加, 提供的大量碳源, 在有限的氧气条件下, 使得 CO 质量流量得以上升。

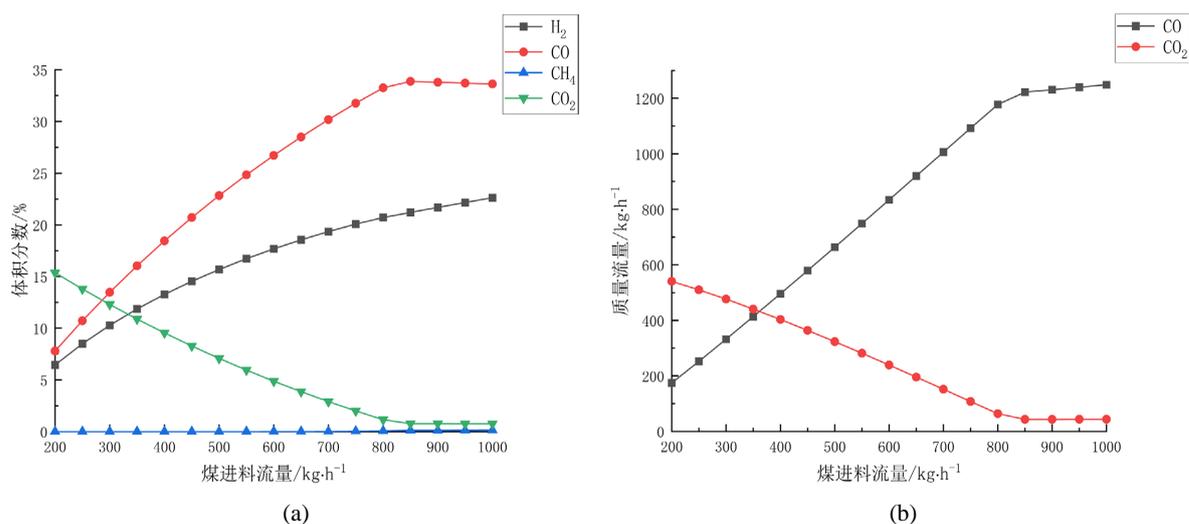


Figure 7. (a) Effect of coal feed rate on syngas composition; (b) Effect of coal feed rate on CO and CO₂ production
图 7. (a) 煤进料流量对合成气体积分数的影响; (b) 煤进料流量对 CO 和 CO₂ 产量的影响

4. 正交实验优化

在上述研究中, 分析了不同因素对气化模拟结果的影响, 其中气化温度、气化压力、气化剂中水蒸气流量和气化剂中氧气流量对合成气组分的影响较为显著, 但为了确保结果的准确性, 故以气体产率为评价指标, 并固定其他变量其中玉米秸秆与煤质量比为: 40:60, 总进料流量为 1000 kg·h⁻¹, 从而针对气化温度、气化压力、气化剂中水蒸气流量和气化剂中氧气流量进行正交实验设计, 以获得最佳实验条件, 其正交实验因素水平表如表 5 所示, 本文选择 L₉(3⁴)即三水平四因素正交实验表以考察四个因素对气体产率的影响, 其正交实验方案如表 6 所示, 极差分析如表 7 所示, 结果表明对气体产率影响的关系为氧气流量 > 气化压力 > 水蒸气流量 > 气化温度, 故根据极差分析结果获得最有工况如表 8 所示, 将气化温度设置为 723℃, 气化压力设置为 1 bar, 气化剂中氧气流量为 200 kg·h⁻¹, 水蒸气补充流股 W 流量为 440.43 kg·h⁻¹, 并获得此工况下的产气组分如表 9 所示, 其中 H₂ 占比 29.72%, CO 占比 20.18%, CO₂ 占比 6.49%, CH₄ 占比 0.298%, 氢气产量为 78.21 kg·h⁻¹, 气体产率 2.923Nm³·kg⁻¹。

Table 5. Orthogonal factor levels table**表 5.** 正交因素水平表

水平	因素			
	A 气化温度(°C)	B 气化压力(bar)	C 水蒸气流量(kg·h ⁻¹)	D 氧气流量(kg·h ⁻¹)
1	723	1	340.43	200
2	748	2	390.43	300
3	773	3	440.43	400

Table 6. Orthogonal experimental design**表 6.** 正交实验方案

实验号	因素					气体产率(Nm ³ ·kg ⁻¹)
	A	B	C	D		
1	1	1	1	1		2.86089
2	1	2	2	2		2.80533
3	1	3	3	3		2.75297
4	2	1	2	3		2.76267
5	2	2	3	1		2.86788
6	2	3	1	2		2.76369
7	3	1	3	2		2.85071
8	3	2	1	3		2.72886
9	3	3	2	1		2.82198

Table 7. Range analysis table**表 7.** 极差分析表

	A	B	C	D
K1	2.806	2.825	2.784	2.850
K2	2.798	2.801	2.797	2.807
K3	2.801	2.780	2.824	2.748
极差	0.008	0.045	0.040	0.102
优水平		D > B > C > A		
优组合	A ₁ B ₁ C ₃ D ₁			

Table 8. Optimal operating conditions from simulation**表 8.** 模拟最优工况

操作参数	气化温度/°C	气化压力/bar	水蒸气流量(kg·h ⁻¹)	氧气流量(kg·h ⁻¹)
参数值	723	1	440.43	200

Table 9. Simulation results at optimal operating conditions
表 9. 最优工况下的模拟结果

气化指标	产气组分/%				氢气产量(kg·h ⁻¹)	气体产率(Nm ³ ·kg ⁻¹)
	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄		
模拟结果	29.72	20.18	6.49	0.298	78.21	2.923

5. 结论

本文基于 Aspen Plus 平台建立了无烟煤与秸秆共气化的热力学平衡模型, 通过分析气化温度、气化压力、气化剂流量、煤进料流量和玉米秸秆与煤进料比对合成气组分和氢气产量的影响, 得到以下结论。

1) 通过灵敏度分析发现, 气化温度对气化炉内的吸热反应起到促进作用, 从而使得 H₂ 和 CO 的体积分数有明显的增加; 气化压力的增加则使得反应朝着不利于 H₂ 和 CO 的方向发生, 故其体积分数减小; 气化剂中氧气流量的增加, 使得合成气中的可燃组分充分燃烧, 从而使得 CO₂ 体积分数上升, 而 H₂ 体积分数下降, 水蒸气流量的增加则促进水蒸气重整反应的发生, 使得 CO₂ 和 H₂ 的含量上升; 而煤进料流量和掺杂比的增加则促进了 C 的不完全燃烧反应和水煤气反应, 导致了 CO 和 H₂ 的含量上升。

2) 结合灵敏度分析和正交实验优化数据, 以气体产率为评价指标, 将气化温度设置为 723℃, 气化压力设置为 1 bar, 气化剂中氧气流量为 200 kg·h⁻¹, 水蒸气补充流股 W 流量为 440.43 kg·h⁻¹, 掺杂比 40:60 (玉米秸秆: 煤炭)。

3) 将模型调制上述最优工况, 得到最优模拟结果, 产气组分中 H₂ 占比 29.72%, CO 占比 20.18%, CO₂ 占比 6.49%, CH₄ 占比 0.298%, 氢气产量为 78.21 kg·h⁻¹, 气体产率 2.923 Nm³·kg⁻¹。

基金项目

国家自然科学基金青年项目(Grant No. 22308217; Grant No. 62203291)。

参考文献

- [1] 薛俊杰, 蔡伟, 马中青, 等. 气化温度和当量比对玉米秸秆气化多联产产物特性的影响[J]. 农业工程学报, 2022, 38(S1): 265-272.
- [2] 杨传文, 邢帆, 朱建春, 等. 中国秸秆资源的时空分布、利用现状与碳减排潜力[J]. 环境科学, 2023, 44(2): 1149-1162.
- [3] 侯耀国. 玉米秸秆利用的效益分析与评价[D]: [硕士学位论文]. 晋中: 山西农业大学, 2020.
- [4] 丁利春. 煤炭资源型地区碳减排机理及优化路径研究[D]: [博士学位论文]. 太原: 山西财经大学, 2022.
- [5] 张锟. 煤炭资源开发利用“三率”标准调查与分析[J]. 现代矿业, 2023, 39(4): 55-58.
- [6] 胡俊豪. 煤与生物质混合热解/气化特性及交互作用研究[D]: [博士学位论文]. 武汉: 华中科技大学, 2018.
- [7] 李乔同. 煤/生物质共气化过程中物料对合成气组成的调变[D]: [硕士学位论文]. 太原: 太原理工大学, 2019.
- [8] 王高月. 生物质热解气化与可燃气体燃烧循环工艺流程分析[D]: [硕士学位论文]. 天津: 河北工业大学, 2016.
- [9] 卢亚威. 玉米秸秆的气化模拟及优化研究[D]: [硕士学位论文]. 吉林: 东北电力大学, 2019.
- [10] 杜铎. 农林废弃物催化热解特性与模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 秦皇岛: 华北理工大学, 2020.
- [11] Tavares, R., Monteiro, E., Tabet, F., *et al.* (2020) Numerical Investigation of Optimum Operating Conditions for Syngas and Hydrogen Production from Biomass Gasification Using Aspen Plus. *Renewable Energy*, **146**, 1309-1314. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.07.051>
- [12] Singh, M., Salaudeen, S.A., Gilroyed, B.H., *et al.* (2022) Simulation of Biomass-Plastic Co-Gasification in a Fluidized Bed Reactor Using Aspen Plus. *Fuel*, **319**, Article ID: 123708. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123708>

- [13] Rosha, P., Kumar, S., Vikram, S., *et al.* (2022) H₂-Enriched Gaseous Fuel Production via Co-Gasification of an Algae-Plastic Waste Mixture Using Aspen Plus. *International Journal of Hydrogen Energy*, **47**, 26294-26302. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.11.092>
- [14] Okati, A., Khani, M.R., Shokri, B., *et al.* (2023) Parametric Studies over a Plasma Co-Gasification Process of Biomass and Coal through a Restricted Model in Aspen Plus. *Fuel*, **331**, Article ID: 125952. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125952>
- [15] 董玉平, 张彤辉, 常加富, 等. 中药渣双回路循环流化床气化试验[J]. 天然气工业, 2013, 33(10): 127-132.
- [16] 刘晓锋. 基于铁基载氧体的麦秆与褐煤化学链共气化制备合成气研究[D]: [硕士学位论文]. 郑州: 河南农业大学, 2022.
- [17] 王爱军, 陈志强. 基于 ASPEN PLUS 平台的蔗渣与烟煤共气化[J]. 节能, 2018, 37(7): 50-54.
- [18] 肖亚辉. 生物质和煤解耦催化气化制富氢气体工艺研究[D]: [博士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2017.
- [19] 周于梦秋. 基于 ASPEN PLUS 的碱性有机废液与煤共气化特性的研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 华北电力大学(北京), 2018.
- [20] 蔡杰. 基于 ASPEN Plus 的村镇垃圾热解气化燃烧模拟与试验[D]: [硕士学位论文]. 杭州: 浙江大学, 2021.
- [21] 莫菲. 基于铁基氧载体的生物质化学链气化特性及模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 广州: 华南理工大学, 2020.
- [22] 曾曦, 敖先权, 曹阳, 等. 玉米秸秆与煤流化床的共气化特性[J]. 过程工程学报, 2017, 17(3): 551-557.
- [23] 沈元兴. 生物质固体有机废弃物气化技术与建模分析[D]: [硕士学位论文]. 福州: 福州大学, 2018.
- [24] 靳幻. 生物质与水蒸汽高温气化过程模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2013.
- [25] 刘忠慧. 循环流化床煤气化工艺的模拟与优化研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 中国科学院大学(中国科学院工程热物理研究所), 2018.
- [26] 刘凌沁. 生物质气化试验与 Aspen Plus 模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 东南大学, 2016.
- [27] 何深宇. 循环流化床稻壳气化特性模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 沈阳: 沈阳工程学院, 2021.
- [28] 曹斌奇, 刘运权, 王夺. 松木屑在氧气-水蒸气-二氧化碳氛围下的气化模拟研究[J]. 生物质化学工程, 2017, 51(3): 14-20.
- [29] Ramzan, N., Ashraf, A., Naveed, S., *et al.* (2011) Simulation of Hybrid Biomass Gasification Using Aspen Plus: A Comparative Performance Analysis for Food, Municipal Solid and Poultry Waste. *Biomass and Bioenergy*, **35**, 3962-3969. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2011.06.005>
- [30] 孙杰. 农林废弃物与无烟煤共气化模拟分析[D]: [硕士学位论文]. 福州: 福建农林大学, 2022.