



通过预测模型创新并商品化碳捕获工艺

Aspen Technology, Inc., 高级首席软件开发人员, Ying Zhang

Aspen Technology, Inc., 技术总监, Shu Wang

Aspen Technology, Inc., 行业市场营销高级总监, Ron Beck



引言

碳捕获、利用和储存(CCUS)是一套避免二氧化碳排放的关键技术，直接从空气中去除二氧化碳，然后永久地从生态系统中清除所捕获的二氧化碳。这涉及从大型点源捕获二氧化碳（如煤炭或天然气发电，或使用化石燃料或生物质作为过程热的工业设施）或直接从空气中捕获二氧化碳（“直接空气捕获”）。捕获的二氧化碳被压缩（除在目标使用地点附近捕获），然后通过管道、船舶、铁路或卡车运输，用于各种用途。还可以用作提高采收率(EOR)的助剂，将其留在含油地层中，或注入深层地质地层中，从而将二氧化碳永久封存。

“国际能源署(IEA)能源技术展望 2020”提出一种普遍持有的观点，即 CCUS 几乎肯定会在温室气体减排(GHG)和全球能源转型中发挥关键作用。²CCUS 可以在现有的发电厂和工厂进行改造，以解决二氧化碳排放问题，并提供可行途径，支持快速扩大低碳、“蓝”氢生产。对于水泥和钢铁等重工业行业的一些具有挑战性的排放，这是目前最有效的方法。碳捕获也被证明是一种从大气中去除碳的方法（“直接空气捕获”）。

2015 年《巴黎协定》和“2018 年 IPCC 特别报告”引发了人们对碳捕获的新一轮兴趣。截至 2020 年 8 月，14 个国家和欧盟(EU)已经在国家法律或拟议立法中正式通过了净零排放目标，目标日期为 2045 年、2050 年或以后，其他约 100 个国家正在讨论类似的目标³。这导致了整个欧盟征收碳排放税，并在许多其他国家和地区提议征收碳排放税。Blackrock、Barclays 和 JP Morgan Chase 等领先金融机构和行业资本融资来源推动这一议程。此外，包含主要养老基金到主要的基金会（如 Gates Foundation）和 Allianz 在内的主要银行的资金来源联盟正在致力于实现更好的碳市场，为发展中国家的碳减排项目注入资金。最近，Bill Gates 与一些主要的慈善家和创新者共同发起了突破能源风险投资基金，以推动几项关键碳减排技术，特别是绿色氢和直接空气捕获技术。

未来 10 年，CCUS 将得到大力发展和部署。在 IEA（国际能源署）的可持续发展场景下，到 2070 年，能源领域的全球二氧化碳排放可能降至净零，

捕获的二氧化碳量需要增加 20 倍，从目前（2020 年）的 4000 万吨左右增至 2030 年的 8 亿吨以上，这就需要大幅增加平均每年的二氧化碳捕获能力。为



实现碳减排目标所需的碳捕获量，普林斯顿大学的碳减排专家 Robert Socolow⁴ 博士估计，每年需捕获并管理超过 10 亿吨二氧化碳，这些二氧化碳以加压液体的形式存在，其体积相当于每年需要运输和储存的 3000 多万桶石油。

CCUS 目前的一个重点是改造现有的以化石燃料为基础的发电厂和工业工厂，并支持低碳氢生产。到 2030 年，捕获的二氧化碳有一半以上将来自改造后的资产。2025 年至 2030 年期间，平均每年将有大约 20 家燃煤电厂将被改造并采用捕获设备。到 2030³年，全世界装备 CCUS 的设施将生产 1,800 万吨氢。第二个重点是在专门建造的设施中实现有效和高效的碳捕获，例如目前处于可行性研究或设计阶段的“蓝氢”和“蓝氨”工厂。对于这些方法，碳捕获和可再生能源驱动碳捕获的创新集成工艺技术正在覆盖新的领域。

2021年6月一项对186家企业展开的调查涵盖了石油、化工和相关产业，表明89家企业（或约受访企业的一半）如今或在未来5年内计划投资碳捕获设施。计划中的碳捕获应用和二氧化碳利用方式显示了一个有趣的截面，如图1所示。

对于考虑将二氧化碳捕获整合到资产中的企业而言，准确的过程建模对于选择正确的工艺和设计最具可操作性、节能和可持续性解决方案而言是至关重要的要求。

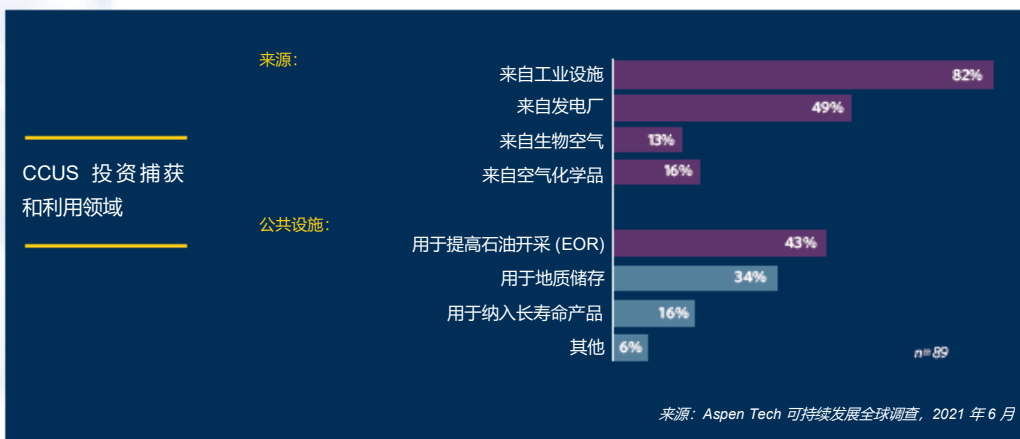


图 1：89 家能源、化工、电力和相关企业报告的碳捕获和利用措施。

二氧化碳捕获的化学和物理吸收技术

使用化学和物理溶剂吸收二氧化碳是目前最成熟的二氧化碳捕获方法。图2显示了通过吸收捕获二氧化碳的典型流程图。此操作通常使用两个塔进行，一个用于二氧化碳吸收，另一个在较高的温度下操作，释放吸收的二氧化碳，并再生溶剂以供进一步操作。

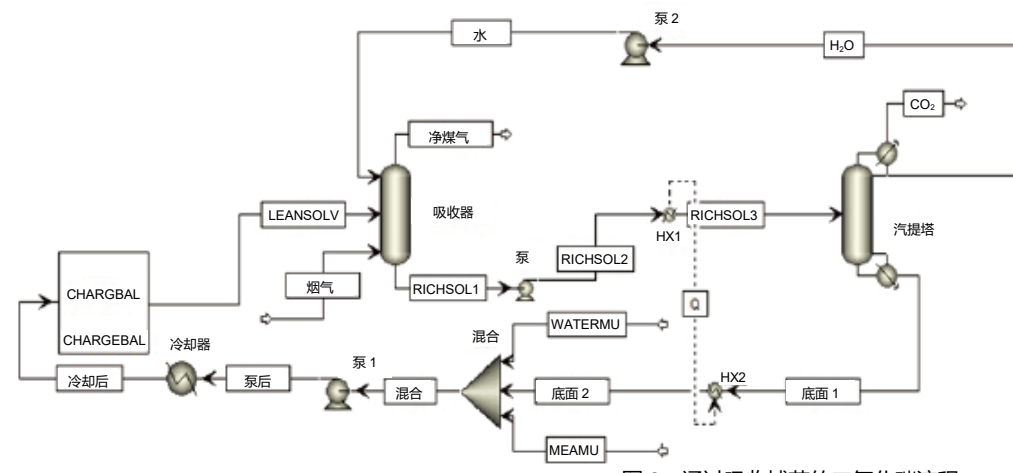


图 2：通过吸收捕获的二氧化碳流程

溶剂吸收二氧化碳是目前最成熟的二氧化碳分离技术，应用于发电、天然气处理、制氢和工业生产（炼钢厂和化肥厂）。截至 2020 年，全球共有 21 座 CCUS 设施，每年可捕获多达 4,000 万吨二氧化碳，另有 3 座在建设设施，以及 41 个处于早期或先进开发阶段³的设施。此外，一家政府和工业联合体在 Technology Centre Mongstad (TCM) 运营着一座商业规模的示范工厂，该工厂包括测试溶剂、塔器设置和膜分离方法，可以在炼油装置和发电设施烟囱的烟气中运行。

二氧化碳捕获通常占 CCUS 成本的 75%，根据二氧化碳的应用和浓度，捕获成本从 15-25 美元/吨到 120 美元/吨³不等。减少能源需求以降低二氧化碳捕获成本一直是近年来世界各地私营和公共研究中心研究和开发的重点。这些成本可通过规模经济、CCUS 运行条件、和供应链优化及技术发展来降低。尽管在过去的几十年里，捕获成本已大幅下降，但研发将在进一步降低成本以加速 CCUS 开发和部署方面发挥关键作用。

二氧化碳捕获过程模拟

过程模拟软件，特别是 AspenTech 公司的 Aspen Plus[®]和 Aspen HYSYS[®]，可为二氧化碳捕获过程建模、设计、优化和制定技术经济评估，提供通用、准确、灵活的模拟环境。⁶⁻⁹





二氧化碳捕获的物性包

Aspen HYSYS 等软件提供两个特殊物性包-“酸性气体-化学溶剂”和“酸性气体-物理溶剂”，让用户可以分别使用化学和物理溶剂对二氧化碳捕获建模。

物理溶剂包基于两个状态方程：聚乙二醇二甲醚 (DEPG) (一种名为 Selexol®的商业溶剂的组成成分) 的扰动链统计相联流体理论(PC-SAFT) 状态方程和甲醇的结合立方型 (CPA) 状态方程。

利用现有的 VLE 和吸收热数据对许多溶剂进行了回归和验证，包括工业中使用的所有主要溶剂，如 MEA, MDEA, DEA, PZ+MDEA, DGA,

DIPA, Sulfolane-DIPA, Sulfolane-MDEA, TEA, DEPG 和甲醇。二氧化碳在 MEA 和 DEPG 水溶液中的溶解度验证结果如图 4 和图 5 所示。回归和验证后的参数存储在专有 Acidgas 数据库中。当在 HYSYS 中选择 Acidgas 流体包时，可自动使用数据库中的参数进

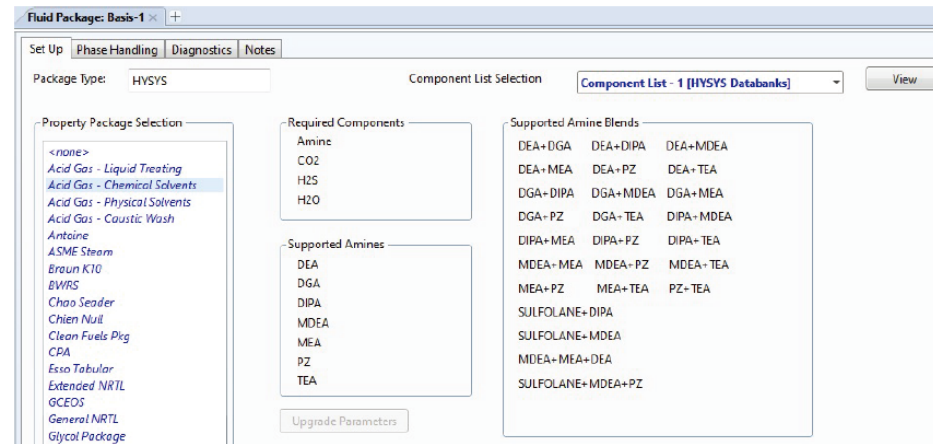


图 3: Aspen HYSYS 的二氧化碳捕获流体包。

化学溶剂的热力学包是基于电解质非随机双液 (Electrolyte NRTL) 模型的电解质热力学和彭-罗宾逊状态方程的气相特性。包括所有必要的水相平衡和动力学反应所需的严格计算过程。

行计算。

Aspen Plus 支持所有相同的热力学模型 (电解质 NRTL、PC-SAFT 和 CPA) 和 Acidgas 数据库用于二氧化碳捕获。此外, Aspen Plus 包括多个模型模板, 其中包含了所有相关的纯组分参数、二元交互参数和反应参数, 以模拟基于化学和物理溶剂的捕获过程。而且, Aspen Plus 允许用户使用他们自己的物性模型参数, 这在指定和评估新溶剂和其他吸附方法 (如 Carbon Capture Inc 正在追求的沸石法) 方面提供了更多灵活性。

基于速率的蒸馏

Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 支持两种模拟塔的方法: 基于速率法和平衡级法。平衡级法是最常见的建模方法, 更容易被更广泛的建模用户群体所接受。然而, 基于速率的方法更准确, 并已被证明对准确预测碳捕获性能特别有价值。

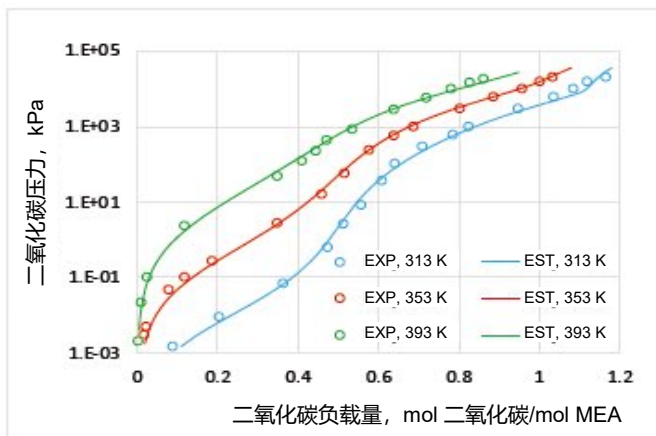


图 4: 实验数据来自 Jou 等人 (点) 与模型预测比较: (线)。¹⁰

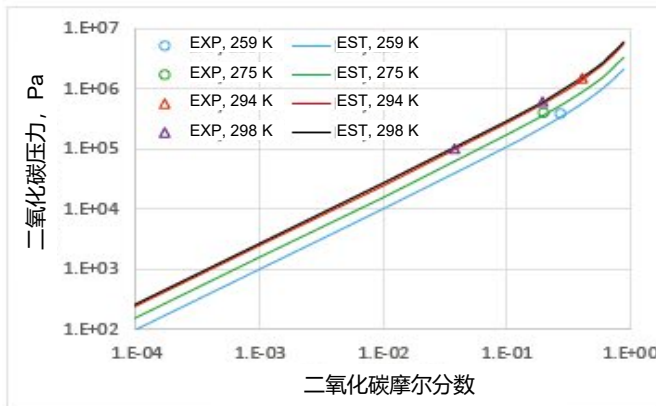
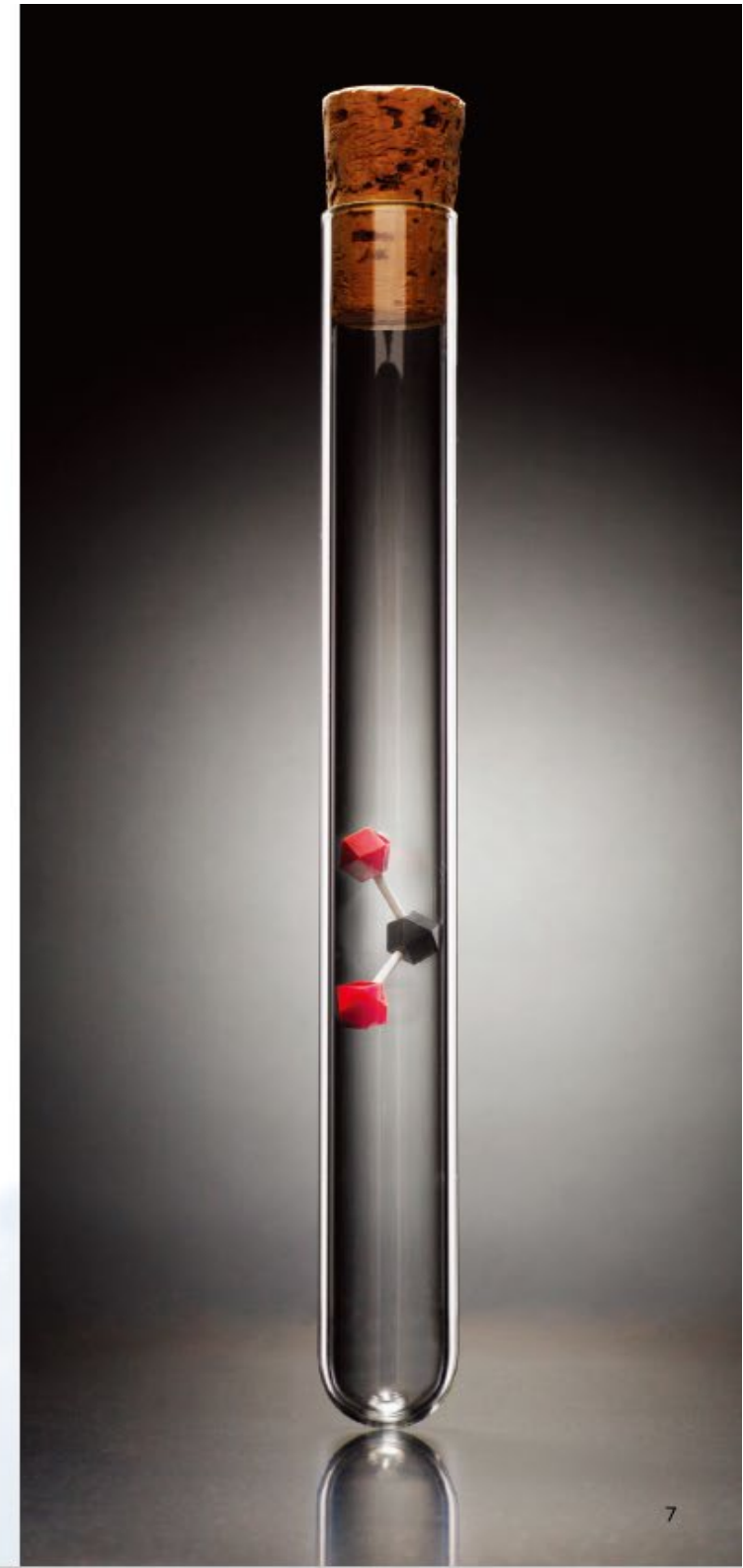


图 5: 实验数据来自 Kutsher 等人 (点) 与模型预测比较: (线)。¹¹



基于速率的模型利用了基于传质特性和塔板/填料几何形状的质量和传热关联，并假设分离受到接触相之间的质量传递的限制。这使其在更大范围的操作条件下更加精确，因为平衡级模型需要经验调整才能实现精确模拟。¹²

基于速率的技术是建立反应塔模型和设计塔的最可靠的方法，无需了解塔板效率或填料的 HETP（相当于理论塔板高度）的信息。实现基于速率的建模让用户更接近实际的精馏塔性能模拟情况，使他们能够在数据拟合较少的情况下对更大范围的操作条件做出更准确的预测。这对于二氧化碳吸收工艺特别有用，因为各组分的效率差别很大。基于速率的建模让用户以更大的可信度外推当前的操作范围，这在数据有限的情况下是有利的。这反过来又让用户有信心设计出更优化的设计，从而使设计在能耗、投资和运营成本方面得到优化。¹²

表 1: 试验工厂数据验证。¹³

案例	PCO ₂ , mbar		精益负载量		富余负载量		二氧化碳去		能源, MJ/kgCO ₂	
	Exp	Exp	Exp	Sim	Exp	Sim	Exp	Sim		
A1	54	0.041	0.45	0.475	81	80	10.3	11.5		
A2	54	0.13	0.448	0.470	91	94	3.72	4.95		
A3	54	0.205	0.465	0.467	91	88	3.76	3.88		
A4	54	0.259	0.438	0.444	91	91	4.2	4.02		
A5	54	0.25	0.388	0.399	90	89	4.72	4.80		
A6	54	0.276	0.415	0.417	90	90	4.63	4.27		
A7	102	0.087	0.52	0.484	87	84	6.37	6.03		
A8	102	0.131	0.507	0.477	90	90	4.65	4.55		
A9	102	0.205	0.464	0.467	90	90	4.07	3.97		
A10	102	0.186	0.437	0.454	91	95	4.09	4.17		
A11	102	0.212	0.444	0.442	87	94	4.22	4.27		
A12	102	0.23	0.427	0.422	91	93	4.56	4.39		
A13	102	0.23	0.515	0.485	93	87	3.63	3.86		
A14	102	0.208	0.481	0.478	91	91	3.82	3.78		
A15	54	0.222	0.511	0.477	88	82	3.23	3.84		
A16	54	0.204	0.494	0.471	91	89	3.57	3.91		
A17	54	0.203	0.494	0.466	90	85	3.88	3.97		
A18	102	0.308	0.479	0.483	58	62	3.95	3.90		
A19	102	0.233	0.461	0.477	78	72	3.94	3.88		
绝对平均相对误差, %				3.3		3.3		6.3		

除了用物理性质数据验证热力学模型外，模拟模型还用试验工厂数据验证，如表 1 所示。

塔水力学分析

最新版本的 Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 提供了塔的水力学分析功能，实现了半自动化的塔尺寸、性能评价、水力学可操作性和水力学约束的可视化。

了解了塔的水力学特性是塔设计的一个重要方面。塔板和填料对工艺操作有一定的限制。在此范围之外，还可能发生漏液、液泛和降液管返混等问题。通过充分了解塔的性能，用户可以解决处理能力有限、能耗高和产品质量等问题。

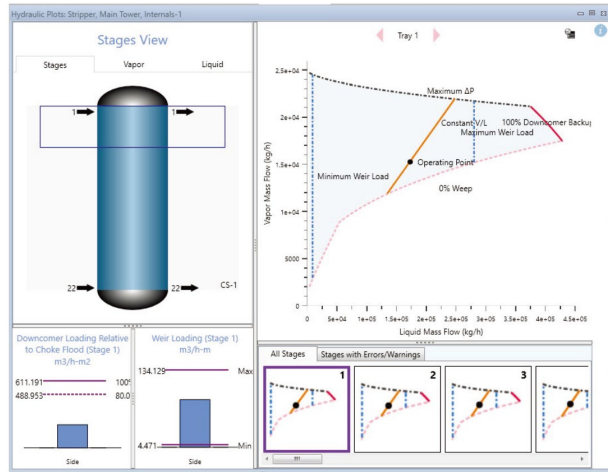


图 6: Aspen HYSYS 的液压图。

塔的分析可用于许多不同的任务。在新的设计和改造中，工程师可通过优化塔的性能来最大化产能和最小化运营成本，在改造中重复使用设备以最小化资本支出，通过对操作条件的评估，保证安全操作，避免操作问题，使操作范围最大化。

过程模型可作为数字孪生产品上线，以优化生产、降低运营成本、提高装置利用率、诊断运营问题，并快速评估过程变化，以恢复正常运行。

温室气体排放

对于过程工程师而言，使用 Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 估算与工艺相关的温室气体排放是很容易的。温室气体排放是以全球变暖潜能值 (GWP) 的二氧化碳当量为单位来报告的。碳当量是基于报告此类排放的三个常用标准数据：IPCC 的第 2 次 (SAR) 和第 4 次 (AR4) 评估报告，以及美国国家环境保护局 2009 年提出的规则。

人们考虑了两种温室气体排放源：过程中直接产生的温室气体（也称为“范围 1”排放）；过程公用工程间接产生的温室气体，包括加热和冷却（也称为“范围 2”排放）。此外，用户可指定碳排放费用或碳税，并估计相关的碳排放成本。

最终，这些功能使用户可以轻松评估过程产生的“碳当量”，并作出更明智的设计决策。

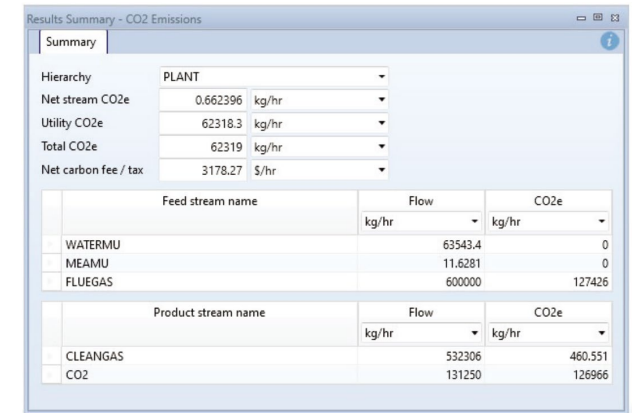


图 7: Aspen Plus 二氧化碳排放报告。

激活经济分析

用户可使用 Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 通过激活经济分析轻松估算成本。该模拟器内的集成功能允许基于过程模拟结果进行成本估算，并优化工厂设计的资本和过程效用成本。

随后，可根据选型来评估工艺成本，并且可以使用报告的成本和投资指标分析来优化过程或使其更具成本效率。

当过程工程师与评估人员一起工作时，评估人员可以进一步调整经济模型。通过这个调整过程，评估人员可以校准内置的成本模型，以反映

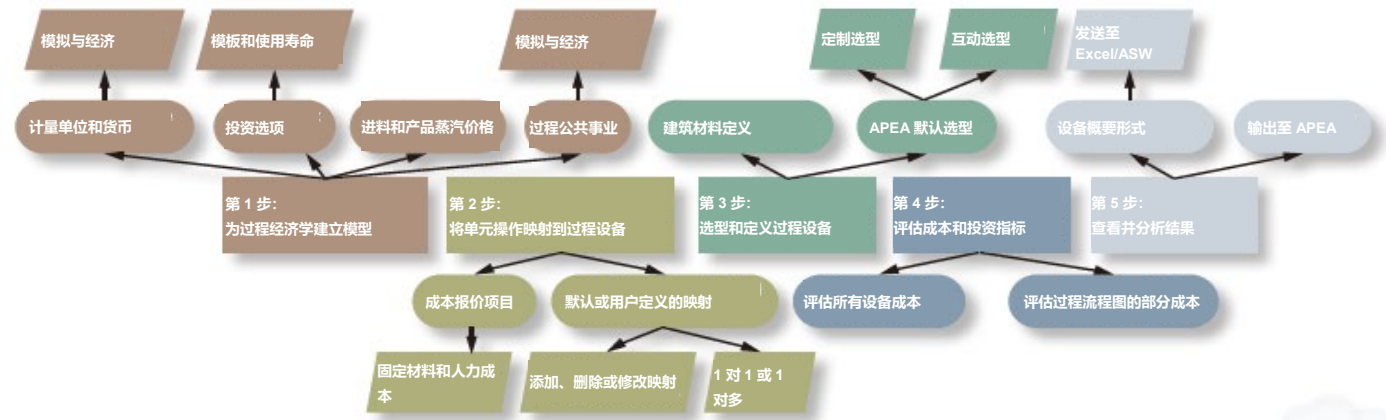


图 8：经济分析的工作流程。

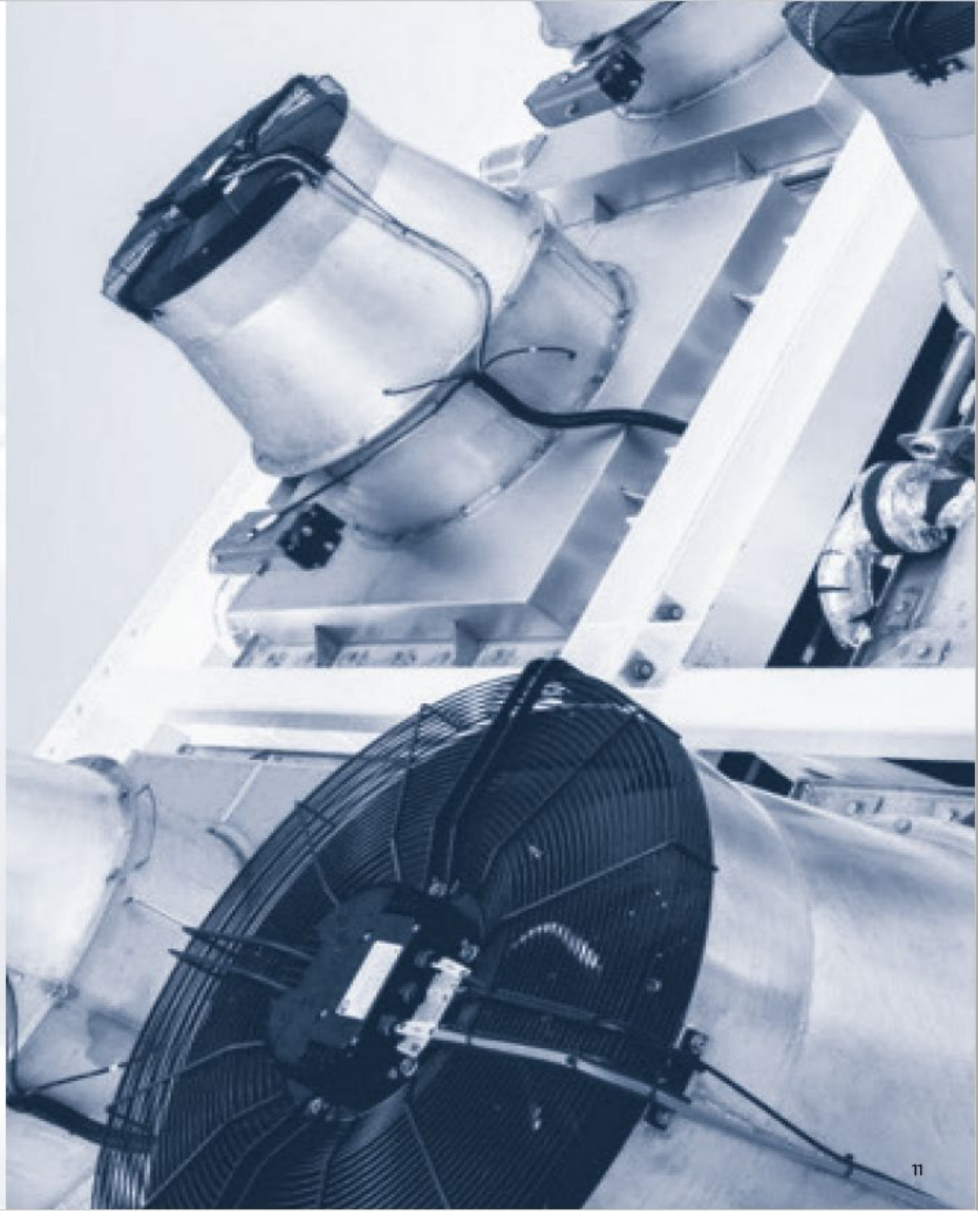
用户一经获得工艺和单元操作的模拟/过程数据，就可以通过识别任何工艺流程和工艺效用条件来建立经济分析模型，将单元操作映射到组成设备，然后根据标准和工艺需求对设备进行选型和定制。

给定公司的成本基础、采购协议和区域基准，以提高技术经济分析的准确性。

对于快速成熟的二氧化碳捕获技术领域，这种组合的过程/经济建模方法对资本规划和投资决策至关重要，也是 AspenTech 建模解决方案得以脱颖而出的方面。

其他新兴碳捕获方法

除溶剂吸收外，人们目前正在开发其他用于碳捕获的技术方法。这些方法包括膜分离方法和其他新方法。其中许多方法目前都是专有的，超出了本文的范围。许多采用这些方法的初创科技公司正在使用 AspenTech 平台来模拟和预测这些新方法的性能。



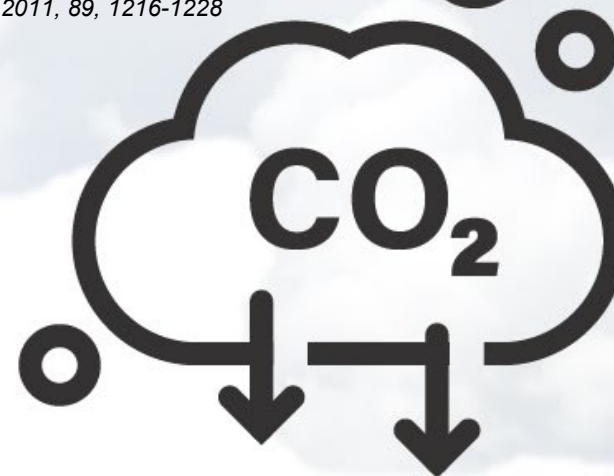
结论

CCUS 可在实现全球能源和气候目标方面发挥重要和多样化的作用。CCUS 的部署需要迅速扩大，重点是在下一个十年改造发电厂和支持低碳氢生产。利用化学和物理溶剂吸收二氧化碳是一种成熟的二氧化碳捕获技术，可用于发电和制氢以解决二氧化碳排放。尽管过去几十年里捕获成本已经显著下降，但仍有必要降低成本，以加速 CCUS 的部署。

用户可以利用 Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 的集成功能（例如，塔分析、二氧化碳排放和经济分析）进行工艺模拟和设备设计，过程优化和降低成本。Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 提供特殊的物性包和更精确的基于速率的二氧化碳捕获建模。塔分析功能支持塔的选择和评估，而经济分析可以估计投资和运营成本。最后，CO₂ 排放也可以在 Aspen Plus 和 Aspen HYSYS 中报告中体现。在 V12.1 中发布了工业规模的二氧化碳捕获的新示例模型，并且在不久的将来将提供电子学习课程和网络研讨会。

引用

1. IEA technology report, About CCUS, 2021, <https://www.iea.org/reports/about-ccus>
2. IEA flagship report, Energy Technology Perspectives 2020, 2020, <https://www.iea.org/reports/energy-technology-perspectives-2020>
3. IEA flagship report, CCUS in Clean Energy Transitions, 2020, <https://www.iea.org/reports/ccus-in-clean-energy-transitions>
4. Robert H. Socolow, Contending with climate change: The next 25 years, *Bulletin of the Atomic Scientists*, 2020, 76, 294-301
5. R Socolow, R Beck and P Ryan, AspenTech Global Sustainability Survey, June 2021
6. E. O. Agbonghae, K. J. Hughes, D. B. Ingham, L. Ma, and M. Pourkashanian, Optimal Process Design of Commercial-Scale Amine-Based CO₂ Capture Plants, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, 53, 14815-14829
7. Udara Sampath P.R. Arachchigea, Neelakantha Aryala, Pramod Ghimire, Maths Halstensena, Morten Christian Melaaen, Multivariate data analysis for parameters effect on CO₂ removal efficiency, *Energy Procedia*, 2013, 37, 2011 – 2020
8. Carol Toro Molina, Chakib Bouallou, Comparison of different CO₂ recovery processes in their optimum operating conditions from a pulverized coal power plant, *Energy Procedia*, 2017, 114, 1360 – 1365
9. Simon Roussanaly, Amy L. Brunsvold, Erik S. Hognesa, Jana P. Jakobsena, Xianping Zhang, Integrated techno-economic and environmental assessment of an amine-based capture, *Energy Procedia* 2013, 37, 2453 – 2461
10. F.-Y. Jou, A.E. Mather, F. Otto, *Can. J. Chem. Eng.* 1995, 73, 140–147
11. Kutsher, G. S.; Smith, G. A. Process for Hydrogen Sulfide Removal from Gas Mixtures Containing H₂S and CO₂. U. S. Patent, 3,362,133, issued Jan. 9, 1968
12. Aspen White Paper, Acid Gas Cleaning using Amine Solvents: Validation with Experimental and Plant Data, 2015
13. Mangalapally HP, Hasse H. Pilot plant study of post-combustion carbon dioxide capture by reactive absorption: methodology, comparison of different structured packings, and comprehensive results for monoethanolamine. *Chemical Engineering Research and Design*, 2011, 89, 1216-1228



关于 AspenTech

Aspen Technology (AspenTech) 是资产绩效优化领域的领先软件供应商。我们的产品能够在复杂的工业环境中茁壮成长，在此类环境下，优化资产设计、操作和维护生命周期至关重要。AspenTech 将数十年的过程建模专业知识与机器学习相结合。我们专门设计的软件平台通过在整个资产生命周期中提供高回报，可实现知识工作的自动化并建立可持续竞争优势。因此，资本密集型行业的公司可以最大限度地延长正常运行时间，提升性能水平，以更安全、更环保、更长久、更快的方式运行资产。

[aspentech.com](https://www.aspentech.com)

