

推荐国家自然科学基金项目公示

项目名称	基于 CO ₂ 控制的煤基化工动力多联产系统集成理论与方法
推荐单位	教育部
推荐单位意见： <p>我单位认真审阅了该项目推荐书及附件材料，确认全部材料真实有效，相关栏目均符合国家科学技术奖励工作办公室的填写要求。</p> <p>该项目组在国家自然科学基金委项目、973 计划 07 课题、教育部长江学者奖励计划和创新团队发展计划等资助下，开展了“基于 CO₂控制的煤基化工动力多联产系统集成理论与方法”项目研究。重点解决了煤基多联产过程系统集成控制过程中能量-元素-环境-经济多目标博弈竞争的核心问题，属于工程热物理、化工过程控制与优化技术与工程控制论的交叉学科。通过剖析原料煤的组成、化学结构与热解活性及焦的 CO₂ 气化反应性关系，立足原料组成与反应性特征对单元转化技术、工艺操作特点、流程过程优化等进行差异性集成，阐明了系统生产原料组分转化与能量转换匹配利用特征性规律，解决了了系统整体工况与系统配置在能效、经济与减排性能等多元博弈平衡。项目有三点重要发现：1、创新性构建了以质与量双属性量载体“火用”为纽带的多目标耦联函数机制，原创性提出了元素（环境）-能量-经济内在关联多目标的、具有普适性的多能耦合、产品互补的煤基化工动力多联产系统集成理论与方法；2、首次提出“原料结构优先，依样制宜；产品价值优先，定向转化”的化学组分价值化转化与利用理论基础；实现了原料逐级化工转化一体化过程变组分合成气的燃气轮机的变工况性能调控和最优运行策略；3、揭示了化学转化和热力转化过程在能量耦合和反馈作用影响下的系统拓扑结构规律，提出了以煤为原料的能量转化系统的多工作点、全“化动比”范围设计理念和适用于不同燃料源的“催化一体化”设计准则；从碳衍变足迹与化学能转化释放过程，创新性提出多联产系统-CO₂ 循环转化利用一体化集成原理。</p> <p>该项目经过 9 年研究共发表论文 156 篇，著作 2 部，授权专利 10 件，培养硕/博士 20 人。经检索，8 篇代表性论著 SCI 他引 168 次。</p> <p>对照国家自然科学基金授奖条件，推荐该项目申报 2017 年度国家自然科学基金二等奖。</p>	

项目简介:

该项目立足解决煤炭转化过程系统集成控制过程中能量-元素-环境-经济多目标博弈竞争的核心问题，属于工程热物理、化工系统工程与工程数学运筹学和控制论的交叉学科。煤基多联产系统被认为是煤炭清洁高效可持续利用的重要技术之一，但是其技术多样性，产品多元化以及生产过程高度集成耦合的属性增加了整个系统复杂性和技术选择与工艺匹配的难度。如何根据原料组成特征，依样制宜，通过技术、配置与工艺路线优选，达到整个系统在能量-元素-环境-经济多层次的优化平衡，是解决煤炭清洁高效经济利用的关键。在国家973计划课题，国家自然科学基金，教育部创新团队支持计划、中国工程院重大咨询项目等项目资助下，历经9年时间，取得如下3点科学发现：

1、建立以质与量双属性能量载体“火用”为桥梁的系统多目标耦联函数机制，通过数学运筹学和控制论原理将其与化学反应、化学工程和工程热力学伴随的质能转化过程交叉融合，创新性提出了元素（环境）-能量-经济内在关联多目标的具有普适性的多能耦合、产品互补的煤基能源多联产系统集成理论与方法；通过剖析原料煤的组成、化学结构与热解活性及焦的 CO_2 气化反应性关系，立足原料组成与反应性特征对系统生产技术、工艺操作单元、流程过程配置等进行差异性集成和优选，阐明了生产系统组分转化与能量转换匹配利用特征性规律，解决了了系统整体工况与系统配置在能效、经济与减排性能等多元博弈平衡。

2、基于分级转化控制、反应过程控制、产品分布控制的思路，创新性提出“原料结构优先，依样制宜；产品价值优先，定向转化”为原则的煤分级炼制转化路径；立足联产系统化学工程、工程热力学及热力系统动态学过程中物质、能量与信息综合体的渗透融合，实现了化工逐级转化一体化过程变组分合成气的燃气轮机的变工况性能调控和最优运行策略。

3、揭示了多层次非同性能源转化系统的拓扑结构与反馈（循环）强度对物质和能量转化以及系统可行工作域的影响机制和作用规律，创新性建立了原料/产品非同性能复杂大系统的耦合与集成理论和方法，实现了有效能损失最小化过程耦合 CO_2 分离、捕集、转化和利用，提出了煤分级炼制多联产系统集成 CO_2 减排控制一体化基础理论，实现了煤炭转化源头节煤、节水，中间过程元素互补匹配、能量梯级利用，终端产品提质（值）和减排 CO_2 的协同。

该项目经过9年研究共发表论文156篇，著作2部，授权专利10件，培养硕/博士20人。经检索，8篇代表性论著SCI他引168次。

客观评价:

1、美国工程院院士/卡耐基梅隆大学化工系原系主任/AIChE J 期刊副主编 I.E. Grossmann 等在其撰写的综述中给予大篇幅正面评价,认为我们在能源多功能互补系统建模及优化方面取得了最新进展;美国工程院院士/普林斯顿大学讲席教授 C. Floudas, MIT 讲席教授 P.I. Barton 等人指出能源系统多目标评价体系的集成优化,是实现能源转化过程可持续性的重要基础,认为我们解决了能源生产过程中能量-经济-元素-环境等多性能博弈平衡的挑战性问题;同时明确指出了多功能煤基能源系统集成 CO₂ 循环转化控制是实现煤炭清洁高效低碳利用的重要举措。项目组应邀发表成果在 IF33 的 Chemical Society Reviews, 44 (2015) 5409-5445. 举例说明评价如下:

- Since a large portion of the world's electricity is supplied by the burning of fossil fuels, such as coal (90 % in Ohio, 50 % in the U.S. and 80 % in China), it is necessary to mitigate GHG emissions from fossil fuels by modifying the process of burning fossil fuels (Gulians, VV. Unit Cincinnati, Sch Energy Environm Biol & Med Engr, USA. Journal of Porous Materials 2013, 20,741-751), 引用本项目代表作 1.
- Yi et al developed and optimized a polygeneration plant using coal and clean coke-oven gas (mainly H₂ and CO) to make dimethyl ether (DME) and methanol. They achieved a total plant thermal efficiency 62.8% (HHV) by using an optimal ratio of 0.56 for the rate of coke-oven gas to coal gasified gas. They also proposed a novel dual feed system (coal-coke oven gas) with CO₂ recycle to the gasifier to increase the carbon conversion and decrease CO₂ emissions. (Adams, TA; McMaster Univ, Dept Chem Engr, Canada. 2013,74,492-504), 引用本项目代表作 2,8.
- Liu et al. studied a system with different feed-stocks and technologies that coproduces electricity and methanol. Their study showed that the conversion rate of technologies, the price of feedstock, the capital investment, and the fixed operating cost have strong influence on the net present value (NPV). They also presented a multiobjective mixed-integer nonlinear programming formulation of a typical polygeneration process operating over a time horizon where both profitability and environmental impacts were considered; Liu et al. presented a multiobjective optimization model for the optimal design of a methanol/electricity polygeneration plant. Economic and environmental criteria are simultaneously optimized over a superstructure capturing a number of possible combinations of technologies and types of equipment. (Ghanbari, H. Abo Akad Univ, Dept Chem Engr, Thermal & Flow Engr Lab, Finland. AIChE Journal 2013, 59, 10, 3659-3670; Salkuyeh, YK. McMaster Univ, Dept Chem Engr, Canada. Energy Conversion and Management 2013, 74,492-504), 引用本项目代表作 3.
- Qin et al. recently investigated the tar yield in an air-steam blown BFB gasifier and observed a decrease in tar yield from 4.6% to 2.3% by increasing the S/B from 0.6 to 2.7 at 800 °C. The results presented in this study show a more distinct effect for higher temperatures. The different behavior of various gaseous species at higher temperatures could be due to the intensified effect of steam on the decomposition of higher molecular mass components. (Mayerhofer, M. Tech Univ Munich, Fac Mech

Engn, Inst Energy Syst, Germany. Fuel, 2012, 99, 204-20; (Meng, XM. Delft Univ Technol, Fac Mech Maritime & Mat Engr, Proc & Energy Dept, Energy Technol Sect, Netherlands. Biomass & Bioenergy 2011, 35,7, 2910-2924), 引用本项目代表作 4.

- Pyrolysis has been widely investigated as a thermal treatment upgrading method that can upgrade lignite quality in terms of heat value, stability, and moisture absorption. (Li, Y. Zhejiang Univ, Inst Thermal Power Engr, China. Fuel Processing Technology 2015, 134,52-58) 引用本项目代表作 5.
- The effect of the fuel mixture's hydrogen content on the turbomachinery has been investigated by several authors, and possible solutions have been offered (for example the air bleed from the compressor or a combination of reductions in the firing temperature and the nitrogen flow to the combustor, if a separated stream of nitrogen available. (Taamallah, S. MIT, Dept Mech Engr, USA. Applied Energy: 2015,154, 1020-1047), 引用本项目代表作 6.
- A polygeneration system in which three different chemicals (methanol, dimethyl ether and dimethyl carbonate) were produced from COG and coal gasification gas by means of an integrated catalytic synthesis procedure was also recently reported. A simulation of the proposed system (with comments on improvements needed in syngas conversion and reformer design) was also included as part of this work to demonstrate the potential of the technology to efficiently produce high added value chemicals. (J. Angel Menéndez, Inst Nacl Carbon, CSIC, Spain. Fuel Processing Technology, 2013,110,150-159), 引用本项目代表作 7.

2、“多联产过程耦合集成优化理论和模型”973项目课题验收意见

凝练了化工动力联产系统集成的总体原则思路，系统阐明和揭示了联产系统组分转化与能量转换利用的特征性规律和耦合机理，从而原创性构建了联产系统化学能可控转化的集成机制和设计优化方法；遵循项目总体学术思路（免变换，重整，碳氢比梯级转化），首次提出了综合考虑物质、压力、温度综合梯级利用的“催化一体化”醇-醚-酯多联产系统的流程方案及性能特性；提出综合能源、经济、环境、可靠性和可操作性等维度的、适用于双气头多联产系统全生命周期综合评价的指标体系和分析评价方法。

3、“中国煤炭清洁高效可持续发展战略研究”项目验收意见

煤基多联产技术是《中国煤炭清洁高效可持续发展战略研究》第9子课题，其研究成果被中国工程院采纳，并作为国家重大战略建议的核心内容提交给国务院。研究成果主要为：结合我国能源禀赋和技术发展现状，采用全生命周期评价和能源安全损益分析方法，分析研究中国发展煤基替代燃料的最优规模，得到最适合中国国情的多联产发展类型、规模和布局，建设性的提出了多联产近中期发展战略和技术路线图。

代表性论文专著目录:

- [1] Xie Ke-chang, Li Wen-ying, Zhao Wei, (2010). Coal chemical industry and its sustainable development in China, *Energy*, 35:4349-4355. (IF: 4.292, SCI 他引: 49, 总他引: 93).
- [2] Yi Qun, Feng Jie, Li Wen-ying, (2012). Optimization and efficiency analysis of polygeneration system with coke-oven gas and coal gasified gas by Aspen Plus, *Fuel*, 96:131-140. (IF: 3.611, SCI 他引: 13, 总他引: 26).
- [3] Liu Pei, Pistikopoulos E. N., Li Zheng, (2010). A multi-objective optimization approach to polygeneration energy systems design. *AIChE Journal*, 56(6):1218-1234. (IF: 2.980, SCI 他引: 44, 总他引: 61)
- [4] Qin Yu-hong, Feng Jie, Li Wen-ying, (2010). Formation of tar and its characterization during air-steam gasification of sawdust in a fluidized bed reactor, *Fuel*, 89: 1344-1347. (IF: 3.611, SCI 他引: 19, 总他引: 40).
- [5] Yi Qun, Feng Jie, Lu Bing-chuan, Deng Jing, Yu Chang-lian, Li Wen-ying, (2013). Energy Evaluation for Lignite Pyrolysis by Solid Heat Carrier Coupled with Gasification, *Energy Fuels*, 27:4523-4533. (IF: 2.835, SCI 他引: 7, 总他引: 13).
- [6] He Fen, Li Zheng, Liu Pei, Pistikopoulos E. N. (2012). Operation window and part-load performance study of a syngas fired gas turbine. *Applied Energy*, 89(1): 133-141. (IF: 5.746, SCI 他引: 17, 总他引: 25).
- [7] Li Zheng, Liu Pei, He Fen, Wang Ming-hua, Pistikopoulos E. N. (2011). Simulation and exergoeconomic analysis of a dual-gas sourced polygeneration process with integrated methanol/DME/DMC catalytic synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 35(9): 1857-1862. (IF: 2.581, SCI 他引: 13, 总他引: 25).
- [8] Yi Qun, Lu Bing-chuan, Feng Jie, Wu Yan-li, Li Wen-ying, (2012). Evaluation of Newly Designed Polygeneration System with CO₂ Recycle, *Energy & Fuels*, 26: 1459-1469. (IF: 2.835, SCI 他引: 6, 总他引: 12)

主要完成人情况:

- 1、李文英, 排名 1, 实验室学委会副主任, 教授, 工作单位: 太原理工大学, 完成单位: 太原理工大学, 是该项目主要负责人, 对发现点 1、2、3 均有重要贡献, 具体为: 1) 项目选题申请、总体方案构思和技术路线设计及实施; 2) 探究了煤中大分子、小分子相的结构与产品分布关系, 为煤分级转化工艺的实施、技术的集成方式提供了理论依据; 3) 在化学能梯级利用的基础上, 实现 CO_2 的低能耗捕集和再利用, 提出基于不同变质程度煤分级炼制多联产集成 CO_2 减排控制一体化的新型煤炭清洁高效转化模式; 4) 从系统工程与数学学科交叉点出发, 利用非线性整体优化方法对煤基多联产系统集成设计与优化, 以能源、经济、环境指标为目标函数, 创建了包括能量、元素等综合指标的煤化工耦合集成系统优化原理; 5) 代表性论著 1,2,4,5,6 的通讯(责任)作者。
- 2、李政, 排名 2, 系主任, 教授, 工作单位: 清华大学, 完成单位: 清华大学, 973 项目多联产系统集成课题负责人, 对发现的 1、3 有重要贡献, 具体为 1) 提出基于元素互补, 能级综合利用的“催化一体化”醇-醚-酯煤基多联产系统技术路线; 2) 提出化工逐级转化一体化过程变组分合成气的燃气轮机的变工况性能调控和最优运行策略控制方法; 3) 代表性论著 7、8 的通讯作者。
- 3、易群, 排名 3, 教授, 工作单位: 太原理工大学, 完成单位: 太原理工大学, 是该项目主要骨干成员, 对发现的 1、2 均有重要贡献, 具体为 1) 项目研究方法构建, 相关实验和计算; 2) 从化工-动力多联产系统与 CO_2 控制技术的集成耦合入手, 提出双气头煤基多联产系统集成 CO_2 循环利用一体化技术路线; 3) 构建了多功能能源化工动力系统综合评价指标和方法, 建立单目标向多目标转化(元素、能量、环境、经济等指标)的系统性能集成优化方法与平台; 4) 基于煤结构与反应性关系, 按照“依样制宜, 价值优先”的原则, 提出了褐煤热解-气化耦合分级炼制多联产系统; 5) 代表性论著 2,5,6 的第一作者。
- 4、刘培, 排名 4, 系主任助理, 副研究员, 工作单位: 清华大学, 完成单位: 清华大学, 是该项目主要参与人员, 对发现的 1、3 均有重要贡献, 具体为 1) 参与 973 项目多联产系统集成课题以及工程院重大咨询课题“煤基多联产技术”项目研究, 负责能源多联产系统集成优化的研究工作; 2) 建立了基于超结构的多联产能源系统数学模型, 实现了系统-流程-设备-参数等多个层面的整体优化设计, 开发了同时考虑经济性和环境特性的多联产系统优化设计方法; 3) 代表性论著 3 的第一作者。
- 5、谢克昌, 排名 5, 实验室主任, 教授, 工作单位: 太原理工大学, 完成单位: 太原理工大学, 973 项目首席科学家, 对发现的 1、2 均有重要贡献, 具体为 1) 提供项目研究的指导和协调; 2) 对煤的结构分析与煤反应性的基础研究给予全面指导; 3) 充分考虑煤炭资源转化过程组分互补性, 创新性提出气化煤气-热解煤气耦合共转化的煤基多联产系统; 4) 代表性论著 1 第一作者。

完成人合作关系说明：

本成果是第一完成人李文英与李政、易群、刘培、谢克昌等人协同合作完成的，完成人合作关系说明关系如下：

李政，第二完成人，能源系统分析与能源战略研究主要负责人，于 2006 年开始与李文英合作开展本项目的研究，合作完成了 973 项目 07 课题《多联产过程耦合集成优化理论和模型（2005CB221207）》和中国工程院重大咨询项目“中国煤炭清洁高效可持续发展战略研究”09 课题（2011-ZD-7-9），合作出版著作《煤基多联产技术》与《基于煤气的多联产能源系统》两部。

易群，第三完成人，教育部创新团队发展计划和国家自然科学基金项目中关于“煤基能源多联产系统集成优化与 CO₂减排控制”的主要研究者，于 2008 年进入太原理工大学本课题组开展项目研究至今。合作获得中国国家发明专利 1 件；在 Energy, Energy and Fuels 和 Fuel 等期刊上发表论文 10 篇（SCI 收录 6 篇，EI 收录 3 篇）；合作完成了教育部长江学者奖励计划项目《煤炭能源低碳化利用的化工基础研究（2009）》和中国工程院重大咨询项目“中国煤炭清洁高效可持续发展战略研究”09 课题《煤基多联产技术（2011-ZD-7-9）》。出版著作《中美煤炭清洁高效利用技术对比》《煤基多联产技术》。

刘培，第四完成人，能源系统工程优化基础研究主要研究者，于 2009 年开始与李文英合作开展本项目的研究，合作完成了中国工程院重大咨询项目“中国煤炭清洁高效可持续发展战略研究”09 课题《煤基多联产技术（2011-ZD-7-9）》，合作完成了著作《煤基多联产技术》与《基于煤气化的多联产能源系统》两部。

谢克昌，第五完成人，中国工程院咨询项目负责人和 973 项目首席科学家。于 2006 年开始与李文英合作开展本项目的研究，创新性提出气化煤气-热解煤气耦合共转化的煤基多联产系统。合作完成了 973 项目 07 课题《多联产过程耦合集成优化理论和模型（2005CB221207）》，合作发表 SCI 收录论文 5 篇，出版著作《煤基多联产系统技术及工艺过程分析》和主编《中国煤炭清洁高效可持续开发利用战略研究》丛书

知情同意证明:

报奖知情同意证明	
项目名称	基于 CO ₂ 控制的煤基化工动力多联产系统集成理论与方法
主要完成人	李文英, 李政, 易群, 刘培, 谢克昌
论文名称	未列入项目主要完成人的论文专著第一作者和通讯作者 签名
Operation window and part-load performance study of a syngas fired gas turbine	He Fen (第一作者) 何芳 Li Zheng (通讯作者) 李政
申明:	本人知晓并同意该论文为申报 2017 年度国家自然科学基金, 对项目完成人排序无异议。
第一作者意见	该论文用于报奖的情况, 已征得本人的同意。以上填写信息如有虚假, 愿意承担相应责任并接受相应处理。如产生争议, 保证积极配合调查处理工作。 何芳 签字 2016 年 12 月 29 日

报奖知情同意证明	
项目名称	基于 CO ₂ 控制的煤基化工动力多联产系统集成理论与方法
主要完成人	李文英, 李政, 易群, 刘培, 谢克昌
论文名称	未列入项目主要完成人的论文专著第一作者和通讯作者 签名
Formation of tar and its characterization during air-steam gasification of sawdust in a fluidized bed reactor	Qin Yu-hong (第一作者) 秦育红 Li Wen-ying (通讯作者) 李英
申明:	本人知晓并同意该论文为申报 2017 年度国家自然科学基金, 对项目完成人排序无异议。
第一作者意见	该论文用于报奖的情况, 已征得本人的同意。以上填写信息如有虚假, 愿意承担相应责任并接受相应处理。如产生争议, 保证积极配合调查处理工作。 秦育红 签字 2016 年 12 月 29 日

ARTE MCFERRIN DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING
DWIGHT LOOK COLLEGE OF ENGINEERING



Dec 25, 2016

To Whom It May Concern

In 2005 I started collaborating with Tsinghua University in the field of modelling and optimization of polygeneration energy systems. Dr. Pei Liu was my PhD student at Imperial College London between 2005 and 2009. Hereby I authorize Dr. Pei Liu, and his current employer, Tsinghua University, to use the following paper, where I am the corresponding author, as part of their application materials for the 'National Natural Science Award in 2017'.

Liu, P., Pistikopoulos, E. N., and Li, Z. (2010). A multi-objective optimization approach to polygeneration energy systems design. *AIChE Journal*, 56(5): 1218-1234.

Please feel free to contact me should you have any questions regarding this.

Sincerely Yours,

Professor Stratos Pistikopoulos FEng
TEES Distinguished Research Professor
Associate Director, Texas A&M Energy Institute
Arte McFerrin Department of Chemical Engineering
Texas A&M University, College Station, TX 77843

255 Jack E. Brown Engineering Building
3122 TAMU
College Station, TX 77843-3122
Tel: 979.845.3351 Fax: 979.845.6446
http://www.cbe.tamu.edu