

适应风光波动的绿氨多稳态柔性调度方法

郑勇¹, 邓欣³, 吉旭¹, 贺革¹, 范薇¹, 曾扬俊², 邱一苇²

(1. 四川大学 化学工程学院, 四川 成都 610065; 2. 四川大学 电气工程学院, 四川 成都 610065; 3. 吉林电力股份有限公司, 吉林 长春 130028)

摘要: 化工过程电气化和可再生能源整合在迈向新能源道路上相互促进发展。然而, 如果仅通过储能来解决可再生能源的间歇性和可变问题, 则会造成高昂的成本。考虑到大规模化学过程通常倾向于在恒定负载下稳定运行, 基于多稳态柔性工艺概念, 提出了多稳态柔性调度优化方法。以风光可再生能源电解水制氢合成氨系统为例, 对电氢氨系统各工段进行分析建模, 针对电力和化工侧中不同权重的优化目标和约束条件, 进行均衡性的多稳态柔性调度优化计算。结果表明, 该方法的场景适用性强、计算效率高, 多稳态柔性调度方法相比于柔性调度方法的负荷波动次数均降低 50%, 综合经济效益提高 29.39%, 可为大规模绿氨系统适应风光波动条件提供一种安全经济可行的调度优化途径。

关键词: 可再生能源; 电解水制氢; 绿氨; 多稳态柔性; 电氢氨一体化调度

中图分类号: TQ021.8; TK91 **文献标志码:** A **文章编号:** 1006-6772(2025)03-0127-10

Multi-stable flexible scheduling method of green ammonia adapted to wind and light fluctuation

ZHENG Yong¹, DENG Xin³, JI Xu¹, HE Ge¹, FAN Wei¹, ZENG Yangjun², QIU Yiwei²

(1. School of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 2. School of Electrical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 3. Jilin Electric Power Co., Ltd., Changchun 130028, China)

Abstract: Electrification of chemical processes and renewable energy integration promote each other on the road to new energy. However, if only energy storage is used to solve the intermittent and variable problems of renewable energy, it will cause high costs. Considering that large-scale chemical processes usually tend to operate stably under constant load, a multi-stable flexible scheduling optimization method is proposed based on the concept of multi-stable flexible process. Taking the hydrogen and ammonia synthesis system of wind and solar renewable energy electrolysis water as an example, the analysis and modeling of each section of the electro-hydrogen ammonia system are carried out. Aiming at the optimization objectives and constraints of different weights in the power and chemical side, the balanced multi-steady-state flexible scheduling optimization calculation is carried out. The results show that the method has strong scene applicability and high computational efficiency. Compared with the flexible scheduling method, the load fluctuation times of the multi-steady-state flexible scheduling method are reduced by 50%, and the comprehensive economic benefit is increased by 29.39%. It can provide a safe, economical and feasible scheduling optimization way for large-scale green ammonia system to adapt to wind and solar fluctuation conditions.

Key words: renewable energy; electrolysis of water to produce hydrogen; green ammonia; multi-stable flexibility; integrated scheduling of electro-hydrogen ammonia

0 引言

“双碳”目标下, 化工、冶金等工业领域构建的以新能源为主体的低碳能源系统可实现国内减碳 20 亿 t, 占减碳量约 40%。可再生能源电解水制取

“绿氨”作为原料合成氨(简称“绿氨”), 不仅可实现新能源的本地化有效消纳, 也是化工行业绿色转型的重要途径, 具有重大发展机遇, 带来经济社会发展与环境保护多重效益, 意义重大^[1-2]。

绿氨是一个高度动态、非线性的工业系统, 涉

收稿日期: 2025-02-19; 策划编辑: 白娅娜; 责任编辑: 宫在芹

DOI: 10.13226/j.issn.1006-6772.BB25021901

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2021YFB4000502)

作者简介: 郑勇(2003—), 男, 湖南永州人, 硕士研究生。E-mail: zhengyong01@stu.scu.edu.cn

通讯作者: 吉旭(1965—), 男, 四川遂宁人, 教授, 博士。E-mail: jixu@scu.edu.cn

引用格式: 郑勇, 邓欣, 吉旭, 等. 适应风光波动的绿氨多稳态柔性调度方法[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(3): 127-136.

ZHENG Yong, DENG Xin, JI Xu, et al. Multi-stable flexible scheduling method of green ammonia adapted to wind and light fluctuation[J]. Clean Coal Technology, 2025, 31(3): 127-136.



及可再生能源发电、电解水制氢以及合成氨多系统安全、鲁棒并协同的复杂调控要求,其工艺开发与运营面临着巨大挑战^[3]。可再生能源与化工耦合存在着风光资源的不确定性与化工过程“安稳长满优”的矛盾,解决好这一矛盾成为决定绿氨经济、安全、绿色环保的关键。合成氨工艺具备一定的变负载能力^[4],但因反应动力学平衡及热惯性约束,负载调节时间为小时级,与电解水制氢的秒级调节存在时域尺度上的差异^[5]。虽然在制氢工段和合成氨工段之间设置储能和氨缓冲罐可以一定范围内抵消风光发电的波动及原料氢的供应波动,但受投资成本及安全约束,程度有限。因此,需要研究绿氢耦合柔性化工技术,提升风光互补、电制氢储氢和合成氨全流程的高频次、宽范围调控能力,实现光伏及风力发电与合成氨生产柔性协同。

相关机构对可再生能源制绿氨柔性生产及其经济运行模式等关键技术问题展开了研究,取得一定进展^[6-7]。WEN等^[8]对绿色合成氨过程中负荷的调节策略实现了动态仿真与优化。ZHANG等^[9]利用反应动力学和计算流体动力学的组合对绿氨反应器进行了三维建模仿真,为确保绿氨生产的稳定性和优化操作提供了理论基础。SCHULTE BEERBÜHL等^[10]提出基于历史电价的“电-氢-氨”联合调度模型。ALLMAN^[11]等提出风电制氢合成氨的优化调度方法,着重分析合成氨工厂选址和定容对运营成本的影响。SMITH等^[12]分析评估了多种氨合成工艺动态运行和可再生能源波动对绿氨经济可行性的重要性,认为完全灵活的小规模绿氨过程可以动态地调整生产负荷,甚至在低电量时期停机,这对于应对可再生能源发电的变化是必要的。WU等^[13]以最大年收入为目标函数,建立了混合多频柔性绿氨系统容量设计和调度优化的通用数学模型。薛姿杰等^[14]提出考虑网电碳排放因子连续变化的长周期绿氨合成模型。ARMIJO等^[15]对可变太阳能和风能灵活生产绿色氢气和氨进行了案例研究和技术经济分析,发现太阳能和风能相结合可以适度降低生产成本。WANG^[16]利用随机两阶段混合整数规划方法对年度绿氨生产过程中的最大、最小负荷、爬坡和计划性停机以应对长时间的低产量运行进行了研究,并以平准化氨成本对各项因素的进行了灵敏度分析。BOUABOULA等^[17]以氨的平准化成本和合成氨负荷因子两个关键性能指标来评估工厂技术经济性,确定了替代能源的能量间歇性和不可预测性是绿色合成氨工厂的关键障碍,以及为防止对刚性合成氨催化反应器的损害需要维持氨合成的稳定状态。ZHANG等^[18]将动态可再生能源合成氨系统进

行技术经济评估得到:动态平准化能源成本(LCOE)比稳态制氨系统低0.64美元/kWh,比平准化氨成本(LCOA)低0.12美元/kg。CAMPION等^[19]和NAYAK-LUKE等^[20]开发了合成氨工厂的过程级模型,并使用缓冲储存在来调节反应器入口氢气的供应。邓振宇等^[21]对并网/离网风光互补的制氢合成氨系统进行了年度层面的容量-调度优化分析。但以上研究基本为长周期运营优化或经济性分析,没有充分考虑受到可再生能源波动影响下合成氨工段短周期内运行的平稳性问题,尚缺少符合实际连续绿氨生产过程的调度优化研究。

笔者所在团队开发了“多稳态柔性”制氨工艺,以适应可再生能源波动特性,通过多稳态工况设计与柔性控制优化达成系统安全性与经济性的平衡^[22]。该工艺基于风光出力特性,结合氢制储用安全边界与合成氨反应动力学机制,优化整定稳态运行负荷与运行时域,支持宽范围经济可行运行。考虑到化工生产安全稳定的需要与化工负荷实时参与可再生能源消纳、提供电网平衡调节服务之间的均衡性,笔者基于多稳态柔性化工工艺,提出用于适应风光波动且符合实际绿氨生产的多稳态柔性调度优化方法。

首先建立电解水制氢合成氨系统的多稳态柔性调度模型,然后计及风、光出力不确定性,以最优调度时间步长 ΔT 为目标,构建约束条件和基于权重的多个优化目标函数,最后通过24 h调度周期内步长 ΔT 分别为0.25 h和1 h的算例验证了所提方法的有效性及其在优化调度中的应用潜力,适应风光波动的多稳态柔性调度方法的研究框架如图1所示。

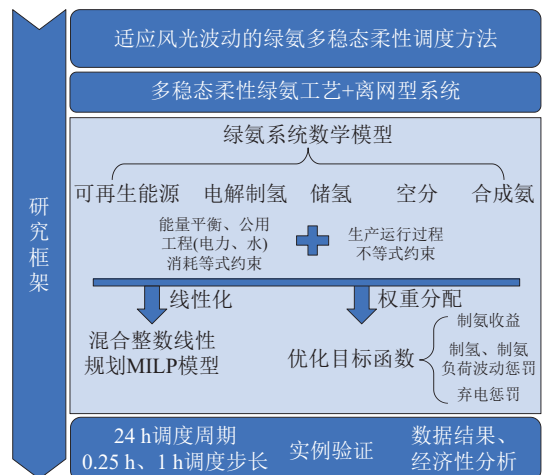


图1 适应风光波动的多稳态柔性调度方法研究框架

Fig. 1 Research framework of multi-stable flexible scheduling method adapted to wind and solar fluctuations

1 多稳态柔性风光制氢合成氨系统建模

1.1 整体概述

风光制氢合成氨系统 (power-to-ammonia, P2A) 由风光电源、电解水制氢工段、空气分离工

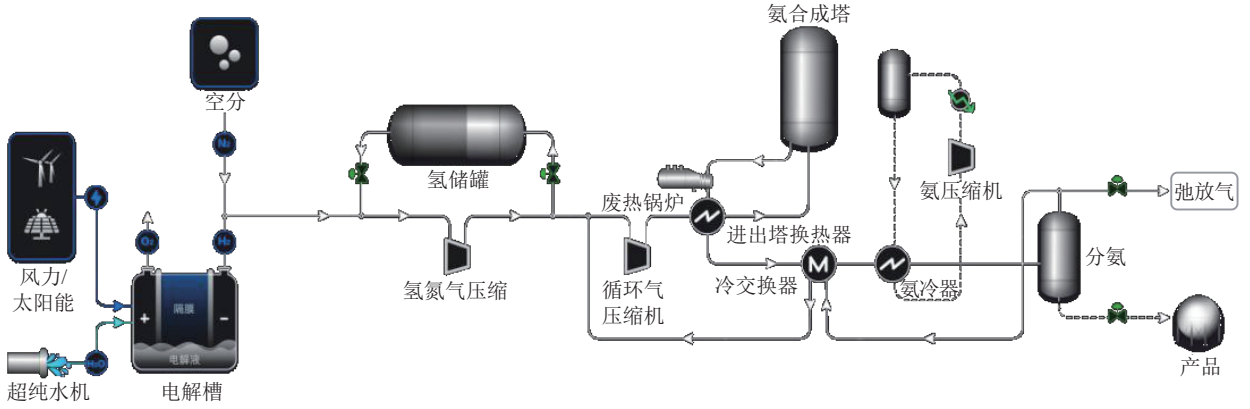


图 2 工业规模的电解水制氢合成氨系统构成示意

Fig. 2 Schematic diagram of industrial scale electrolytic water hydrogen production ammonia synthesis system

上述工艺在质量和能量平衡数据的基础上, 考虑到设备性能、催化剂及控制技术条件等物理和操作约束因素, 使用优化模型来确定经济上的最优设计, 该设计定义了风力、太阳能电源组合, 每个灵活子系统 (电解水和氨合成) 和存储容量的最经济组合, 以及系统不同单元之间物料和能量流的最佳每小时调度。

1.2 适应绿氨生产的多稳态柔性调度优化方法

本文基于多稳态柔性“电制绿氨”工艺展开研究^[22]。图 3 为符合化工多稳态柔性生产概念的特性曲线, 图 3a 揭示了合成氨运行负荷的多稳态特性, 多稳态工艺可满足宽负荷运行要求的多个稳态优化工况, 可降低负荷调整频率, 提升安全性。图 3b 突出了柔性运行的空间灵活度的概念, 柔性优化是在整定稳态负荷下, 合成氨系统可安全承受的负荷波动空间, 即柔性空间。柔性运行空间越大, 系统运行自适应性越好, 安全性越好。

理想情况下, 合成氨生产系统应随风光出力的波动而实时调整, 呈现出一种连续波动的生产曲线, 但这样的模式会带来较大的安全风险, 且在热惯性和控制反馈能力制约下, 制氨工艺对风光波动的跟随性存在一个最优周期。因此, 基于多稳态柔性生产的理念, 提出适应绿氨生产的多稳态柔性调度方法, 利用氢储罐的缓冲能力, 保障合成氨多稳态柔性生产, 本质上是利用储能来平抑用电负荷调度曲线与供电曲线间的波动, 使合成氨实现更优的经济性和更优的安全性。

段、压缩缓冲工段、合成氨工段等构成。其中, 电制氢工段通常采用技术成熟、投资成本低、寿命长的碱性电解水制氢技术^[13]; 合成氨工段采用成熟的 Harbor-Bosch 工艺, 由合成塔、氨分离、循环回路等构成, 如图 2 所示。

1.3 电氢氨一体化系统建模

绿氨系统按照接入方式可以分为并网型和离网型。并网型在经济可行性、电网要求以及绿色认证获取等方面面临着多重挑战^[23]。离网型绿氨系统不依赖于外部电网, 可根据风光资源、氢需求灵活调度和调控, 具有电能成本低、本地化消纳等优势, 是未来电解水制氢合成氨系统发展的主要趋势^[24]。笔者以离网型制氢合成绿氨系统为对象展开研究。

1.3.1 可再生能源风光发电工段

风能和太阳能在时间、空间呈现一定的互补性, 使得风光互补发电系统具有较好的适用性和匹配性, 有助于平衡可再生能源输出^[25]。其中, 风光发电曲线采用实际历史运行数据。总电源输入由产生的风力和太阳能可再生能源电力组成, 公式如下所示:

$$P_t^{\text{in}} = P_t^{\text{Wind}} + P_t^{\text{PV}} \quad (1)$$

其中, P_t^{in} 为 t 时刻 P2A 系统每小时的输入功率; P_t^{Wind} 、 P_t^{PV} 分别为 t 时刻系统每小时的风力、光伏发电功率。

离网运行方式下, 基于能量守恒得到式 (2)、式 (3):

$$P_t = P_t^{\text{P2H}} + P_t^{\text{SYN}} + P_t^{\text{ASU}} + P_t^{\text{COMP}} \quad (2)$$

$$P_t^{\text{in}} = P_t + P_t^{\text{RES, cut}} \quad (3)$$

式中: P_t 为 t 时刻系统化工侧的功率总和, P_t^{P2H} 、 P_t^{SYN} 、 P_t^{ASU} 、 P_t^{COMP} 、 $P_t^{\text{RES, cut}}$ 分别为 t 时刻的每小时制氢、合成氨、空分制氮、氢气压缩以及可再生能源弃电功率。

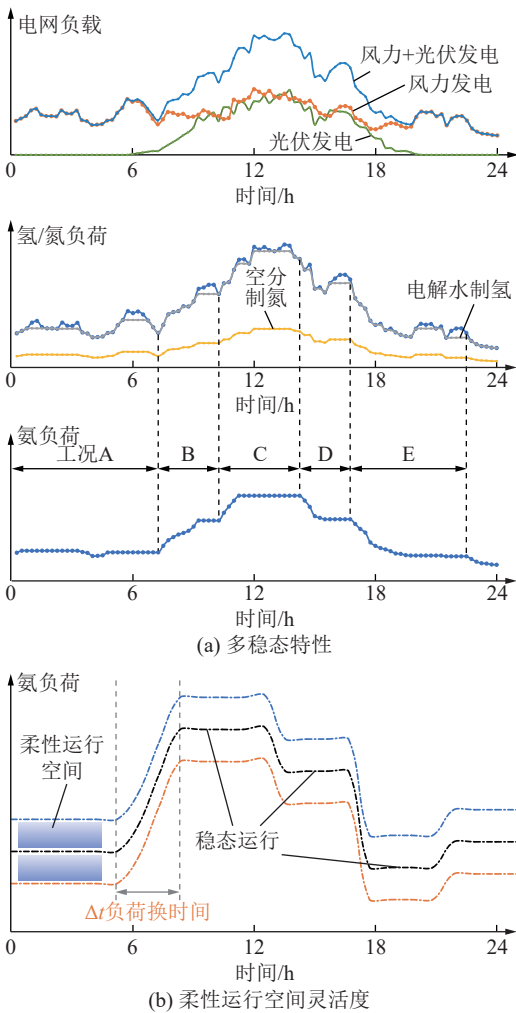


图3 符合化工多稳态柔性生产概念的特性曲线
Fig. 3 Conforms to the characteristic curve of chemical multi-stable flexible production concept

1.3.2 电解水制氢工段

电制氢工段常由多台制氢机构集群构成。单台电解槽的可调负载区间为20%~100%，但对于电解槽集群，通过机组启停组合和负载分配，集群负载可在5%~100%范围内连续变化^[26]，能量转换效率接近线性^[27]。基于此，构建电能消耗 P_t^{P2H} 和制氢流量 F_t^{P2H,H_2} 模型如下：

$$P_t^{P2H} = P^{P2H,0} + c^{P2H} * F_t^{P2H,H_2} \quad (4)$$

$$0 \leq P_t^{P2H} \leq P_{\max}^{P2H} \quad (5)$$

$$CW_t^{P2H} = cw^{P2H} * F_t^{P2H,H_2} \quad (6)$$

$$cKOH_t^{P2H} = cKOH^{P2H} * F_t^{P2H,H_2} \quad (7)$$

式中： P_{\max}^{P2H} 为制氢功率上限； $P^{P2H,0}$ 为t时刻的每小时电解槽的配套辅机设备消耗的功率，包括循环泵、气动仪表、测量控制、分离纯化装置等，由于不同制氢负荷下辅机功率不为定值，将辅机功率和电解槽功率线性关联，令 $P^{P2H,0} = c^{P2H,aux} * P_t^{P2H}$ ， $c^{P2H,aux}$ 为辅机功率系数； c^{P2H} 为制氢功耗，视作常系

数； CW_t^{P2H} 为电解水制氢所用的工艺水流量； cw^{P2H} 为制氢消耗工艺水量系数； $cKOH^{P2H}$ 为碱性电解槽电解水制氢过程中所消耗的KOH量。

调度时间尺度上，电制氢功率调节速率较快。对于兆瓦级工业用碱性制氢机，其负载爬坡速率可达每分钟50%~60%额定负载，动态跟踪电网调峰指令的能力已得到实验验证^[28]。因此，系统的灵活性主要受合成氨调节惯性约束，不考虑制氢工段的负荷爬坡约束。

1.3.3 氢气压缩和储罐工段

电制水制氢工段的负载调控速度在秒/分钟级，化工合成工段的负载调控速度在小时/日级，二者之间需配置缓冲环节以满足化工合成供氢平稳性的要求。氢缓冲罐贮量及压缩氢气所用电力可建模为^[29]：

$$SOH_{t+1}^{H_2} = SOH_t^{H_2} + \Delta T * (F_t^{P2H,H_2} - F_{t+1}^{H_2,out}) \quad (8)$$

$$SOH_{\min} \leq SOH_t \leq SOH_{\max} \quad (9)$$

$$P_t^{COMP} = c^{COMP,0} + c^{COMP} * F_t^{H_2,out} \quad (10)$$

式中： SOH_{\min} 和 SOH_{\max} 分别为储氢罐的容量的上、下限约束， Nm^3 ； P_t^{COMP} 和 $F_t^{H_2,out}$ 分别为t时刻每小时氢气压缩电量，MWh、合成氨氢气用量 Nm^3 ； $c^{COMP,0}$ 、 c^{COMP} 分别为氢气压缩耗电量公式中常系数和系数。

1.3.4 空分工段

合成氨所需氮气由空分制取。其过程需由多级压缩机将空气由常压逐级加压，同时需要膨胀机提供空气分离过程的冷源。空分工段不受风光波动影响，只需要跟踪合成氨工段的原料需求负荷即可。合成氨进料氢氮比一般为3:1，因此为简化模型，与空分工段消耗功率相关的氮气的量，近似用合成氨工段氢气需求量来代替，同样采用线性结构建模：

$$P_t^{ASU} = c^{ASU,0} + c^{ASU} * F_t^{H_2,out} \quad (11)$$

$$CRW_t^{ASU} = CRW^{ASU,0} + crw^{ASU} * F_t^{H_2,out} \quad (12)$$

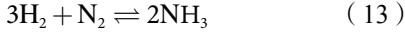
式中， P_t^{ASU} 、 CRW_t^{ASU} 、 $F_t^{H_2,out}$ 分别为t时刻的每小时空分工段消耗的功率、循环水的消耗量及合成氨用氢量。

1.3.5 合成氨工段

由于催化剂活性温度、压力存在一定适应范围，化工合成氨工段的负载水平可在一定范围内调节^[30]。但根据图1所示工艺流程可知，合成氨工段除反应器以外，还包含压缩、换热、分离等单元过程。这些化工单元过程在“电-热-质”多物理意义上相互耦合，与氨合成反应过程的灵活性共同决定化工合成氨工段的负载灵活性。

合成氨采用A301催化剂^[31]，过程中关键工艺参数包括反应器一段反应温度355℃；二段反应温

度 355 ℃; 三段反应温度 355 ℃; 压力为 14 MPa; 氢氮比为 2.8; 循环比为 5.2; 分氨温度 0.1 ℃。合成氨反应如下:



采用 Peng-Robinson 状态方程描述体系组分的非理想行为^[32]。动力学模型以逸度表示的 Dyson^[33]表达式进行变换处理得到其本征动力学方程 (14), 反应速率常数以 Arrhenius 形式表达, 其参数通过迭代计算, 需要解算器对出口成分进行初始估计, 然后进行摩尔平衡以检查反应速率。如果没有达到收敛, 则进行新的估计并执行下一次迭代, 最终得到其表达式 (15)。

$$r_t = k_t \cdot (f_t^{\text{N}_2})^{0.5} \cdot (f_t^{\text{H}_2})^{1.5} / (f_t^{\text{NH}_3}) - k'_t \cdot (P_t^{\text{NH}_3}) / (f_t^{\text{H}_2})^{1.5} \quad (14)$$

$$r_t = k_t \cdot (F_t^{\text{H}_2})^{1.5} \cdot (F_t^{\text{N}_2})^{0.5} \quad (15)$$

$$k_t = 2.0257 \times 10^{15} \exp(-164833/RT_0) \quad (16)$$

$$F_{t+1}^{\text{NH}_3} = \Delta T \cdot r_t \quad (17)$$

式中: ΔT 为调度步长; $F_{t+1}^{\text{NH}_3}$ 、 $F_t^{\text{NH}_3}$ 分别表示为 $t+1$ 、 t 时刻氨产量; r_t 为合成氨反应速率, T_0 为合成塔操作温度, k_t 为反应速率常数, 由于 T_0 在调度过程可认为是一个常量, 则 k_t 也为一个常量。

受热力学平衡、催化剂活性等约束^[34], 合成氨装置负荷率应维持在给定区间内:

$$\eta_{\min} \leq \eta_t \leq \eta_{\max} \quad (18)$$

假设合成氨装置设计产能为 $F_{\text{rated_load}}^{\text{NH}_3}$, 则

$$F_t^{\text{NH}_3} = \eta_t \cdot F_{\text{rated_load}}^{\text{NH}_3} \quad (19)$$

式中: η_{\max} 、 η_{\min} 分别为合成氨装置负荷率上下限, 分别取 110%、30%。

为避免合成氨反应器及分氨、循环、换热等工艺环节的温度、压力越限^[34], 对合成氨装置的负荷调节速率加以限制; 装置负荷率越低, 负荷的可调节速率越低, 反之亦然。定义负荷调节速率系数 $\alpha_t^{\text{NH}_3}$, 则:

$$F_t^{\text{NH}_3} = F_{t-1}^{\text{NH}_3} + F_{\text{rated_load}}^{\text{NH}_3} \cdot \Delta T \cdot \alpha_t^{\text{NH}_3} \quad (20)$$

$$\alpha_{t,\text{down}}^{\text{NH}_3} \leq \alpha_t^{\text{NH}_3} \leq \alpha_{t,\text{up}}^{\text{NH}_3} \quad (21)$$

$$F_{\text{rated_load}}^{\text{NH}_3} \cdot \Delta T \cdot \alpha_{t,\text{down}}^{\text{NH}_3} \leq F_t^{\text{NH}_3} - F_{t-1}^{\text{NH}_3} \leq F_{\text{rated_load}}^{\text{NH}_3} \cdot \Delta T \cdot \alpha_{t,\text{up}}^{\text{NH}_3} \quad (22)$$

式中, $\alpha_{t,\text{up}}^{\text{NH}_3}$ 和 $\alpha_{t,\text{down}}^{\text{NH}_3}$ 分别为负荷调节速率系数上调和下调的最大值。通过动态模型对上述约束合理性进行了验证。

其中, 为将整个电氢氨系统贯穿联通起来, 基于动态仿真模拟和实际工业数据对合成氨的吨氨耗氢量进行了线性拟合如下:

$$F_t^{\text{NH}_3} = \frac{1}{c_{\text{SYN,NH}_3}} \cdot F_t^{\text{H}_2,\text{out}} \quad (23)$$

式中, $c_{\text{SYN,NH}_3}$ 为合成氨的吨氨耗氢量。

合成氨工段中的分氨、循环、压缩等工艺均需耗费一定电力。通常, 将工艺用电 $P_t^{\text{NH}_3}$ 表示为氨产量的函数^[11], 结合合成氨工业实际电耗数据可拟合得到如下近似表达式:

$$P_t^{\text{NH}_3} = c^{\text{NH}_3,0} + c^{\text{NH}_3} \cdot F_t^{\text{NH}_3} \quad (24)$$

式中, $P_t^{\text{NH}_3}$ 为 kWh; $F_t^{\text{NH}_3}$ 为 t/h; $c^{\text{NH}_3,0}$ 、 c^{NH_3} 分别为合成氨耗电量常数项和系数。

类似地, 合成氨工段公用工程换热冷却用水量拟合计算式如下:

$$CRW_t^{\text{NH}_3} = CRW_t^{\text{NH}_3,0} + crw^{\text{NH}_3} \cdot F_t^{\text{NH}_3} \quad (25)$$

式中, $CRW_t^{\text{NH}_3}$ 为 t/h; $F_t^{\text{NH}_3}$ 为 t/h; $CRW_t^{\text{NH}_3,0}$ 、 crw^{NH_3} 分别为合成氨耗循环水量常数项和系数。

1.4 多稳态柔性调度策略优化目标函数

基于多稳态柔性电氢氨一体化系统模型中各变量的等式和不等式约束条件, 计及由于风光波动导致生产变负荷过程中造成的设备损耗成本以及弃风弃光造成资源浪费的情况, 对包含制氨净收益、负荷波动以及弃电惩罚项多个子目标函数在内的绿氨工厂运行总收益最大的总目标函数进行优化, 子目标和总目标函数如下:

合成氨效益因素, 主要包括售氨收益、电力成本、用水成本和包含碱液 KOH 成本等在内的制造费用、公用工程等, 制氨净收益项如下:

$$C_{\text{profit,NH}_3} = \sum_{t=1}^N (c^{\text{pr,NH}_3} \cdot F_t^{\text{NH}_3} - c^{\text{pr,RES}} \cdot P_t - \sum_j C_j) \quad (26)$$

式中, $\sum_j C_j$ 为公用工程用水成本 (包括冷却换热循环水和工艺用水成本) 及包含 KOH 成本等在内的制造费用 (计算时暂时只纳入 KOH 成本), 计算公式为:

$$\sum_j C_j = c_{\text{cw}} \cdot CW_t^{\text{P2H}} + c_{\text{crw}} \cdot (CRW_t^{\text{ASU}} + CRW_t^{\text{SYN}}) + c_{\text{KOH}} \cdot CKOH_t^{\text{P2H}} \quad (27)$$

式中: $c^{\text{pr,NH}_3}$ 为氨售价; $c^{\text{pr,RES}}$ 为风光电价; c_{cw} 和 c_{crw} 分别为工艺用水和循环水的单价; c_{KOH} 为碱液 KOH 价格。

由于合成氨工段是在高压的反应条件下进行的, 变负荷过程中会导致压力容器疲劳, 然而在设备的使用寿命内, 疲劳次数是有限的, 因此需要尽量优化控制合成氨变负荷运行中的疲劳操作。对此, 设置制氢、制氨负荷波动惩罚项:

$$C_{\text{penalty}}^{\text{load}} = \sum_{t=1}^N (a \cdot |(F_t^{\text{NH}_3} - F_{t-1}^{\text{NH}_3})| + b \cdot |(F_t^{\text{P2H,H}_2} - F_{t-1}^{\text{P2H,H}_2})|) \quad (28)$$

式中: $F_t^{\text{NH}_3}$ 、 $F_{t-1}^{\text{NH}_3}$ 分别为当前时刻和上一个时刻的

制氢量, F_t^{P2H, H_2} 、 F_{t-1}^{P2H, H_2} 分别为当前时刻和上一个时刻的制氢量, a 、 b 为待定制氢和制氢负荷波动惩罚系数, 用以保证合成氨平稳生产。

为减少模型求解过程的弃电, 设置弃电惩罚项:

$$C_{\text{penalty}}^{\text{cut}} = \sum_{t=1}^{N_t} c * c^{\text{pr, RES}} * P_t^{\text{RES, cut}} \quad (29)$$

式中: c 为待定弃风弃光惩罚系数; $P_t^{\text{RES, cut}}$ 为 t 时刻每小时的弃风弃光电量。

多稳态柔性调度优化总目标函数为:

$$\text{ObjFun} = \max_{x, u} \sum_{t=1}^T [\text{weight1} * C_{\text{profit, NH}_3} - \text{weight2} * C_{\text{penalty}}^{\text{load}} - \text{weight3} * C_{\text{penalty}}^{\text{cut}}] \quad (30)$$

式中: weight1 、 weight2 、 weight3 为权重值, 对应不同子目标函数对多稳态柔性调度优化总目标函数的影响程度。

可以确定的是, 不同权重的设定将对优化结果产生较大的影响, 通过不同子目标函数权重的组合可以构成多种不同调度策略的模型, 给调度人员提供更多可供选择的操作决策方案, 比如需要设置综合效益最优的调度方案, 就可对各子目标函数的权重 weight1 、 weight2 和 weight3 考虑相当的程度, 可使制氢收益、生产平稳性和弃风弃光电量都达到相互平衡下的最佳状态, 使得综合效益最优。还可以设计生产平稳性最佳的调度方案, 考虑设备疲劳、折旧, 在负荷波动的允许范围内, 更多考虑平稳性生产。另外还可以设置绿电消纳最大的目标方案, 使得弃风弃光电量最小, 最大程度消纳可再生能源。

2 实例分析验证

基于某在建工程构造算例, 验证本文所提多稳态柔性调度方法的有效性。基态算例中, 电制氢功率上限 $P_{\text{max}}^{\text{P2H}} = 110 \text{ MW}$; 合成氨额定产能 $F_{\text{rated, load}}^{\text{NH}_3} = 11.6 \text{ t/h}$, 设定其装置负荷上、下限为 30%、110%; 氢缓冲罐贮量的最大值和最小值分别为 $80\,000 \text{ Nm}^3$ 和 $8\,000 \text{ Nm}^3$; 缓冲罐初始贮量设置为 $40\,000 \text{ Nm}^3$ 。P2A 系统由 1 个光伏电站和 1 个风电场共同供电, 直供电综合电价 $c^{\text{pr, RES}}$ 约为 0.2 元/kWh, 产品氨售价 $c^{\text{pr, NH}_3}$ 约为 3 000 元/t。基于多稳态柔性工艺, 系统调度周期取 24 h, 调度步长 ΔT 分别设置为 0.25 h 及 1 h, 即 $T=96$ 和 $T=24$ 。两种调度步长的风、光伏发电总量一致, 风、光伏发电出力曲线均基于历史实际运行数据, 如图 4 和图 5 所示。实例分析验证中模型过程相关参数如表 1 所示。将 P2A 系统建模为混合整数线性规划 (Mixed-Integer Linear Programming, MILP) 问题, 求解器采用 Gurobi。

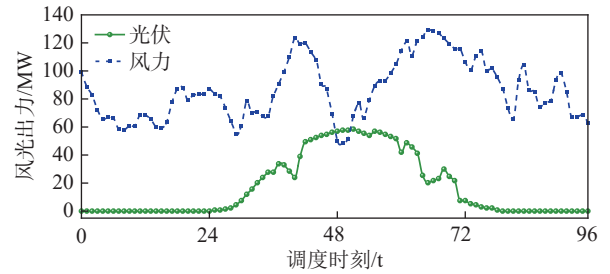


图 4 调度步长 $\Delta T=0.25 \text{ h}$ 中基础案例研究使用的风能和太阳能实际功率曲线

Fig. 4 Actual power curve of wind energy and solar energy used in the basic case study in the scheduling step length $\Delta T=0.25 \text{ h}$

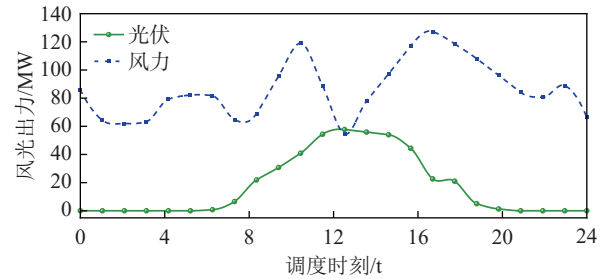


图 5 调度步长 $\Delta T=1 \text{ h}$ 中基础案例研究使用的风能和太阳能实际功率曲线

Fig. 5 Actual power curve of wind energy and solar energy used in the basic case study in the scheduling step length $\Delta T=1 \text{ h}$.

2.1 多稳态柔性调度结果

在合成氨装置变负荷过程中, 存在温度、压力等控制时滞性, 以及设备、催化剂等相关安全因素, 经工艺分析, 设置合成氨变负荷速率区间为 $-2.9 \sim 1.74 \text{ t/h}$ 。基于系统建模和优化目标函数, 采用基态案例的系统参数求解多稳态柔性调度模型。为对比分析多稳态柔性调度方法, 本文特定将优化目标函数中不加任何负荷调节速率的安全惩罚约束作为对比, 这种调度方法称为柔性调度法。对 24 h 调度周期内步长 ΔT 分别为 0.25 h 和 1 h 的模型分别进行优化求解, 所得 P2A 系统的状态轨迹分别如图 6 和图 7 所示。

图 6 对比了调度步长 $\Delta T=0.25 \text{ h}$ 时, 基于所提多稳态柔性调度方法与柔性调度方法优化求解得到的制氢量、氢储罐储量、制氢量曲线。从图 6a 中可以看出, 多稳态柔性调度方法与柔性调度方法相比, 制氢功率较好地跟随了风光功率曲线, 最大程度上利用可再生能源发电, 弃风弃光量差距很小。由图 6b 可看出, 多稳态柔性调度曲线的氢储罐储量曲线更加平稳, 有利于安全。同时, 由图 6c 可见, 相较于柔性调度方法优化方法, 多稳态柔性调度制氢量曲线只在 $t=18 \sim 40$ 和 $t=70 \sim 80$ 之间进行了两次升负荷和一次降负荷过程, 其余时刻保持平稳生

表 1 实例分析验证中模型过程参数

Table 1 The model process parameters in example analysis and verification

符号	参数	数值	符号	参数	数值
$c^{P2H,aux}$	辅机功率系数	1.009	c^{SYN,NH_3}	合成氨每t耗氢量	1 963.41 Nm ³ /t
c^{P2H}	制氢功耗	4.8 kWh/Nm ³	$c^{NH_3,0}$	合成氨耗电常数项	0.578 61 MWh
c_w^{P2H}	制氢工艺水流量系数	0.8 kg/Nm ³	c^{NH_3}	合成氨耗电系数	0.223 26 MWh/Nm ³
c_{KOH}^{P2H}	碱槽制氢耗KOH量	0.000 4 kg/Nm ³	$CRW^{NH_3,0}$	合成氨耗循环水常数项	-7.750 7 t
SOH_{min}	氢气储罐容量下限	8 000 Nm ³	crw^{NH_3}	合成氨耗循环水系数	22.318 t/Nm ³
SOH_{max}	氢气储罐容量上限	80 000 Nm ³	$\alpha_{t,up}^{NH_3}$	合成氨负载爬坡速率可上调最大值	0.15 h ⁻¹
$c^{COMP,0}$	氢气压缩机耗电常数项	0	$\alpha_{t,down}^{NH_3}$	合成氨负载爬坡速率可下调最大值	-0.25 h ⁻¹
c^{COMP}	氢气压缩机耗电系数	0.002 MWh/Nm ³	$F_{rated,load}^{NH_3}$	合成氨装置额定产能	11.6 t/h
$c^{ASU,0}$	空分制氮耗电常数项	1.247 1 MWh	c^{pr,NH_3}	氨售价	3 000 元/t
c^{ASU}	空分制氮耗电系数	0.000 130 52 MWh/Nm ³	$c^{pr,RES}$	风光电价	0.2 元/kWh
$CRW^{ASU,0}$	空分制氮耗循环水常数项	0 (暂无数据)	c_w	工艺水价格	4 元/t
crw^{ASU}	空分制氮耗循环水系数	0 (暂无数据)	c_{crw}	循环水价格	0.2 元/t
a	制氨波动惩罚系数	0.102	c_{KOH}	KOH价格	10 元/kg
b	电解槽制氢波动惩罚系数	280	c	弃风弃光惩罚系数	2

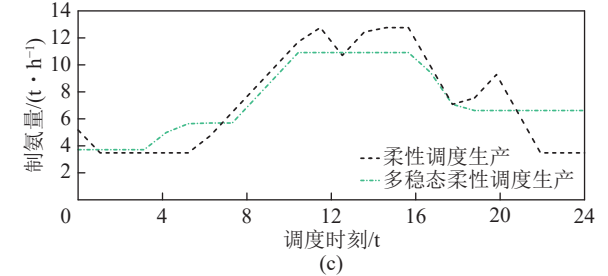
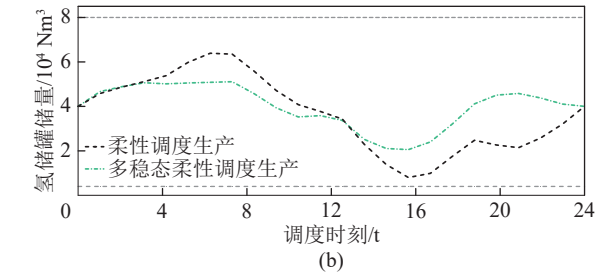
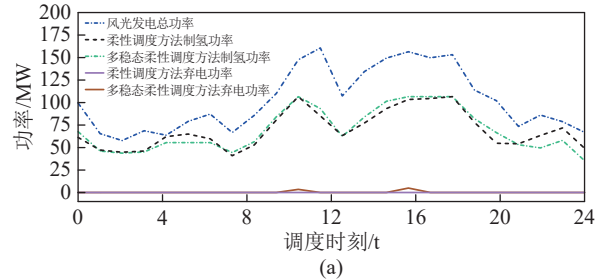
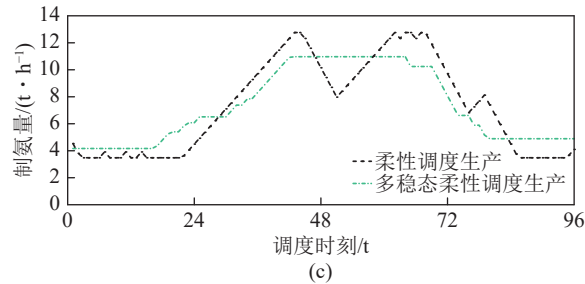
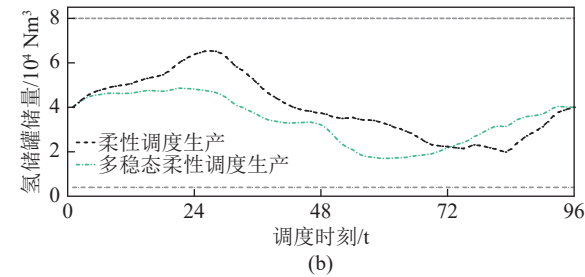
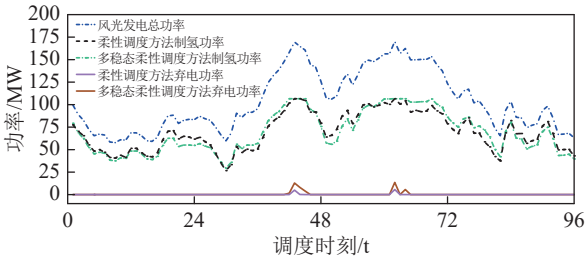


图 6 多稳态柔性调度方法和柔性调度方法在 24 h 调度周期内步长为 $\Delta T=0.25$ h 的调度结果比较

Fig. 6 The proposed multi-stable flexible scheduling method is compared with the flexible scheduling method in the 24-hour scheduling period with a step size of $\Delta T=0.25$ h

图 7 多稳态柔性调度方法和柔性调度方法在 24 h 调度周期内步长为 $\Delta T=1$ h 的调度结果比较

Fig. 7 The proposed multi-stable flexible scheduling method is compared with the flexible scheduling method in the 24-hour scheduling period with a step size of $\Delta T=1$ h

产,而柔性调度方法则有三次升、降负荷共六次变负荷过程。可见,多稳态柔性调度方法,负荷调整率减少50%,更有利于安全性和经济性。

图7为调度周期内步长 $\Delta T=1$ h的多稳态柔性调度方法与柔性调度方法系统状态对比曲线,包含制氢功率和弃电功率曲线(图7a)、氢储罐储量曲线(图7b)及制氢量曲线(图7c)。可以看出,步长 $\Delta T=1$ h的多稳态柔性调度的制氢功率同样是跟踪风光发电曲线生产,相较于柔性调度方法氢储罐储量曲线更平稳。从图7c中可以看出,步长 $\Delta T=1$ h的多稳态柔性调度相较于柔性调度方法,生产负荷调整次数也减少50%。将调度步长 $\Delta T=0.25$ h和 $\Delta T=1$ h两种多稳态柔性调度方法优化曲线对比来看,步长 $\Delta T=1$ h的弃风弃光量更少,氢储罐利用率相对要更大,合成氨负荷变动的规律基本一致。两个调度步长内的多稳态柔性调度制氢量曲线均优于柔性调度方法。当调度步长变大,说明调度结果精细程度下降,但会使得制氨负荷调度曲线更加平

滑,减少了小范围的负荷波动,使合成氨工段更加平稳生产,一定程度上会凸显多稳态柔性调度的效果。

2.2 经济性分析

柔性调度及 $\Delta T=0.25$ h和 $\Delta T=1$ h多稳态柔性调度方法经济测算结果如表2所示。其中,调度步长 $\Delta T=0.25$ h时,多稳态柔性调度目标中的合成氨净收益为25 965.35元,由于目标函数中的弃风、弃光惩罚项,其中用电成本495 669.23元,弃风弃光占比仅为0.46%。作为对比的柔性调度方法的结果中,合成氨产品收益26 089.39元,用电成本497 410.16元,弃风弃光率为0.11%。相较于柔性调度方法,多稳态柔性调度方法的制氨收益虽然降低了0.48%,但是负荷变动次数降低了50%,得益于目标函数中制氢、制氨负荷波动惩罚项。假设合成氨工段中合成塔的设备购置费用为50 000 000元,设备可承受负荷波动所带来的疲劳次数为

表2 多稳态柔性调度方法及柔性调度方法调度结果比较

Table 2 Comparison of scheduling results of the multi-stable flexible scheduling method and the flexible scheduling method

调度周期	评价指标	$\Delta T=0.25$ h			$\Delta T=1$ h		
		多稳态柔性调度方法	柔性调度方法	相对偏差/%	多稳态柔性调度方法	柔性调度方法	相对偏差/%
T=24 h	电解槽总产氢量/ Nm^3	343 499.55	344 727.73	-0.36	343 907.74	345 105.04	-0.35
	弃风弃光总量/ $\text{MW} \cdot \text{h}$	11.38	2.67	76.54	8.49	0.00	100.00
	弃风弃光占比/%	0.46	0.11	76.09	0.34	0.00	100.00
	制氢总量/t	174.95	175.58	-0.36	175.16	175.77	-0.35
	用电成本/元	495 669.23	497 410.16	-0.35	496 247.83	497 945.00	-0.34
	单位产氢成本/(元/kg)	16.24	16.24	0.00	16.24	16.24	0.00
	单位产氨成本/(元/t)	2 851.58	2 851.41	0.01	2 851.53	2 851.35	0.01
	制氨净收益/元	25 965.35	26 089.39	-0.48	26 006.57	26 127.49	-0.46
	变负荷次数/次	3	6	-50.00	3	6	-50.00
	综合效益/元	19 965.35	14 089.39	29.43	20 006.57	14 127.49	29.39
算法运行时长/s	0.84	0.80	4.76	0.77	0.74	3.90	

25 000次,折算下来每次负荷升高或者降低的波动将会带来2 000元的设备维护成本。因此,调度步长 $\Delta T=0.25$ h时多稳态柔性调度方法的综合效益比柔性调度方法要多0.59万元。

调度步长 $\Delta T=1$ h的结果中,多稳态柔性调度的用电成本为496 247.83元,弃风弃光量占比为0.34%,相较于柔性调度方法优化方法的0%,两者的差距并不大。从单位产氢和产氨成本来看,多稳态柔性调度方法和柔性调度方法生产的产氢成本均

为16.24元/kg;多稳态调度方法的产氨成本为2 851.53元/t,与柔性调度方法的2 851.35元/t持平;制氨净收益为26 006.57元,比柔性调度方法的26 127.49元低0.46%。同时由于多稳态柔性的负荷变动次数为3次,而柔性调度方法的变负荷过程次数为6次,故考虑设备折旧的维护成本后,多稳态柔性调度方法的综合效益比柔性调度方法要高29.39%。

通过对比调度周期步长 $\Delta T=0.25$ h和 $\Delta T=1$ h的

数据结果,可以看出,当调度步长增大后,单位产氢成本和单位产氨成本变化不大;在考虑设备维护成本后,多稳态柔性调度方法的综合收益均优于柔性调度方法。当调度步长变长后,制氢量有一定的上升,制氢功率跟踪风光曲线生产的效果更明显,导致多稳态调度方法的弃电量变少,使得综合收益上升 0.21%,计算时间下降 8.33%。因此从经济层面上考虑,可以得出多稳态调度方法优于柔性调度方法,同时调度步长 $\Delta T=1$ h 的调度优化效果要稍优于步长 $\Delta T=0.25$ h。

3 结 论

1) 构建了风光电解水制氢合成氨系统的时序调度控制模型,并通过基于权重的优化目标函数构建得到了多稳态柔性生产调度模型。

2) 通过调度周期 24 h 内调度步长 $\Delta T=0.25$ h 和 $\Delta T=1$ h 的实例验证,证明多稳态柔性调度相较于柔性调度方法具有更平稳的绿氨生产过程,其安全性与经济性更优。多稳态柔性调度方法相比于柔性调度方法的负荷波动次数均降低 50%,综合经济效益提高 29.39%,可为绿氨生产提供有力的调度工具,辅助绿氨生产安全平稳经济运行。

3) 从调度时序曲线轨迹和结果来看,调度步长越长,对氢储罐的空间利用率增大,制氨曲线的平稳程度上升,弃电量更小。

4) 构建的多稳态柔性调度模型求解时间为秒级,满足“电力-绿氢-绿氨”一体化耦合控制系统要求,可为一体化模型预测控制提供模型基础。

参考文献 (References) :

[1] LAN R, IRVINE J T S, TAO S W. Ammonia and related chemicals as potential indirect hydrogen storage materials[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37(2): 1482–1494.

[2] MENG W L, WANG D L, ZHOU H R, et al. Carbon dioxide from oxy-fuel coal-fired power plant integrated green ammonia for urea synthesis: Process modeling, system analysis, and techno-economic evaluation[J]. *Energy*, 2023, 278: 127537.

[3] HE G, DANG Y G, ZHOU L, et al. Architecture model proposal of innovative intelligent manufacturing in the chemical industry based on multi-scale integration and key technologies[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2020, 141: 106967.

[4] ROUWENHORST K H R, VAN DER HAM A G J, MUL G, et al. Islanded ammonia power systems: Technology review & conceptual process design[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2019, 114: 109339.

[5] 吉旭,周步祥,贺革,等.大规模可再生能源电解水制氢合成氨关键技术与应用研究进展 [J]. *工程科学与技术*, 2022, 54(5): 1–11.

Ji Xu, ZHOU Buxiang, HE Ge, et al. Research review of the key technology and application of large-scale water electrolysis powered by renewable energy to hydrogen and ammonia production[J]. *Advanced Engineering Sciences*, 2022, 54(5): 1–11.

[6] GRIGORIEV S A, FATEEV V N, BESSARABOV D G, et al. Current status, research trends, and challenges in water electrolysis science and technology[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 45(49): 26036–26058.

[7] TALLAKSEN J, BAUER F, HULTEBERG C, et al. Nitrogen fertilizers manufactured using wind power: Greenhouse gas and energy balance of community-scale ammonia production[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2015, 107: 626–635.

[8] WEN L M, HUANG C, DAI Z D, et al. Dynamic simulation and optimization for load regulation strategies of the green ammonia synthesis process[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2024, 63(45): 19662–19675.

[9] ZHANG X M, LI G D, ZHOU Z T, et al. How to achieve flexible green ammonia production: Insights via three-dimensional computational fluid dynamics simulation[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2024, 63(28): 12547–12560.

[10] SCHULTE BEERBÜHL S, FRÖHLING M, SCHULTMANN F. Combined scheduling and capacity planning of electricity-based ammonia production to integrate renewable energies[J]. *European Journal of Operational Research*, 2015, 241(3): 851–862.

[11] ALLMAN A, DAOUTIDIS P. Optimal scheduling for wind-powered ammonia generation: Effects of key design parameters[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2018, 131: 5–15.

[12] SMITH C, TORRENTE-MURCIANO L. The importance of dynamic operation and renewable energy source on the economic feasibility of green ammonia[J]. *Joule*, 2024, 8(1): 157–174.

[13] WU Y, ZHAO T T, TANG S, et al. Research on design and multi-frequency scheduling optimization method for flexible green ammonia system[J]. *Energy Conversion and Management*, 2024, 300: 117976.

[14] 薛姿杰,吴艳,崔子元,等.基于经济性分析的长周期绿氨合成模型:考虑电网碳排放因子连续变化的影响 [J/OL]. *化工进展*. <https://doi.org/10.16085/j.issn.1000-6613.2024-1268>.

[15] ARMILJO J, PHILIBERT C. Flexible production of green hydrogen and ammonia from variable solar and wind energy: Case study of Chile and Argentina[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 45(3): 1541–1558.

[16] WANG S C. Optimal sizing of power-to-ammonia plants: A stochastic two-stage mixed-integer programming approach[J]. *Energy*, 2025, 318: 134838.

[17] BOUABOULA H, OUIKHALFAN M, SAADOUNE I, et al. Addressing sustainable energy intermittence for green ammonia production[J]. *Energy Reports*, 2023, 9: 4507–4517.

[18] ZHANG X M, UNIVERSITY S, FAN W, et al. Techno-economic optimization of the renewable power to ammonia system based on a flexible process[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2025, 64(6): 3397–3408.

[19] CAMPION N, NAMI H, SWISHER P R, et al. Techno-economic assessment of green ammonia production with different wind and

- solar potentials[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2023, 173: 113057.
- [20] NAYAK-LUKE R, BAÑARES-ALCÁNTARA R, WILKINSON I. “Green” ammonia: Impact of renewable energy intermittency on plant sizing and leveled cost of ammonia[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2018, 57(43): 14607–14616.
- [21] 邓振宇, 周家辉, 徐钢, 等. 并/离网风光互补制氢合成氨系统容量-调度优化分析 [J]. *热力发电*, 2024, 53(9): 136-146. 补全英文翻译.
- [22] 吉旭, 林今, 聂李红, 等. 适用可再生能源不确定特性的合成氨多稳态柔性工艺技术 [J]. *洁净煤技术*, 2024, 30(2): 23–35. JI Xu, LIN Jin, NIE Lihong, et al. Multistable-flexible ammonia process adapted to renewable energy[J]. *Clean Coal Technology*, 2024, 30(2): 23–35.
- [23] 林今, 余志鹏, 张信真, 等. 可再生能源电制氢合成氨系统的并/离网运行方式与经济性分析 [J]. *中国电机工程学报*, 2024, 44(1): 117–127. LIN Jin, YU Zhipeng, ZHANG Xinzhen, et al. On-grid/off-grid operation mode and economic analysis of renewable power to ammonia system[J]. *Proceedings of the CSEE*, 2024, 44(1): 117–127.
- [24] 邱一苇, 朱杰, 曾扬俊, 等. 离网型可再生能源发电制氢能量管理技术需求分析与展望 [J]. *电力系统自动化*, 2024, 48(22): 43–59. QIU Yiwei, ZHU Jie, ZENG Yangjun, et al. Technological requirement analysis and prospect of energy management for off-grid renewable power-to-hydrogen systems[J]. *Automation of Electric Power Systems*, 2024, 48(22): 43–59.
- [25] KEMPTON W, PIMENTA F M, VERON D E, et al. Electric power from offshore wind via synoptic-scale interconnection[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2010, 107(16): 7240–7245.
- [26] QIU Y W, ZHOU B X, ZANG T L, et al. Extended load flexibility of industrial P2H plants: A process constraint-aware scheduling approach[C]//2022 IEEE 5th International Electrical and Energy Conference (CIEEC). Piscataway, NJ: IEEE, 2022: 3344–3349.
- [27] LI J R, LIN J, HEUSER P M, et al. Co-planning of regional wind resources-based ammonia industry and the electric network: A case study of Inner Mongolia[J]. *IEEE Transactions on Power Systems*, 2022, 37(1): 65–80.
- [28] SAKAS G, IBÁÑEZ-RIOJA A, RUUSKANEN V, et al. Dynamic energy and mass balance model for an industrial alkaline water electrolyzer plant process[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(7): 4328–4345.
- [29] LI J R, LIN J, SONG Y H. Capacity optimization of hydrogen buffer tanks in renewable power to ammonia (P2A) system[C]//2020 IEEE Power & Energy Society General Meeting (PESGM). Piscataway, NJ: IEEE, 2020: 1-5.
- [30] SÁNCHEZ A, MARTÍN M. Optimal renewable production of ammonia from water and air[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2018, 178: 325–342.
- [31] LIU H Z, LI X N, HU Z N. Development of novel low temperature and low pressure ammonia synthesis catalyst[J]. *Applied Catalysis A: General*, 1996, 142(2): 209–222.
- [32] LOPEZ-ECHEVERRY J S, REIF-ACHERMAN S, ARAUJO-LOPEZ E. Peng-Robinson equation of state: 40 years through cubics[J]. *Fluid Phase Equilibria*, 2017, 447: 39–71.
- [33] 自助补缺. HUGO P. Anders Nielsen: An Investigation on Promoted Iron Catalysts for the Synthesis of Ammonia. 3. Auflage. Jul. Gjellerups Forlag, Vedbæk, Dänemark, 1968.264 Seiten, 72 Abbildungen, 61 Tabellen. Preis: D. Kr. 28, – (geheftet); D. Kr. 36, – (gebunden) [J]. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 1968, 72(9-10): 1245-1245.
- [34] VERLEYSEN K, PARENTE A, CONTINO F. How sensitive is a dynamic ammonia synthesis process? Global sensitivity analysis of a dynamic Haber-Bosch process (for flexible seasonal energy storage)[J]. *Energy*, 2021, 232: 121016.