

**EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS**

**SIMULATION D'UN ECHANGEUR A  
PLAQUES ET AILETTES BRASEES (EPAB)  
REACTIF POUR LA CONVERSION ORTHO-  
PARA DE L'HYDROGENE AVEC  
L'OPERATION UNITAIRE CAPE-OPEN  
PROSEC REACTION**

**INTERET DE L'EXEMPLE**

Cet exemple présente un échangeur-réacteur de liquéfaction d'hydrogène avec prise en compte simultanée de la réaction de conversion ortho-para de l'hydrogène. Le formalisme de cette réaction n'étant pas disponible dans CO-ProSec Reaction elle a été décrite via une DLL externe. Des « tags », dont certains utilisant le mode avancé, affichent des résultats sur le schéma de simulation.

|                  |   |  |  |  |
|------------------|---|--|--|--|
| <b>DIFFUSION</b> | <input checked="" type="checkbox"/> <b>Libre-Internet</b> | <input type="checkbox"/> <b>Réservé aux clients ProSim</b> | <input type="checkbox"/> <b>Restreinte</b> | <input type="checkbox"/> <b>Confidentiel</b> |
|------------------|---|--|--|--|

**FICHIERS PROSIMPLUS CORRESPONDANTS**

*COPROSEC\_EX\_FR-Conversion-ortho-para-hydrogène.pmp3*

*Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.*

**Energy**

**Fives ProSim**

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

---

## TABLE DES MATIÈRES

|                                      |           |
|--------------------------------------|-----------|
| <b>1. MODELISATION DU PROCEDE</b>    | <b>3</b>  |
| 1.1. Présentation du procédé         | 3         |
| 1.2. Schéma du procédé               | 5         |
| 1.3. Constituants                    | 6         |
| 1.4. Modèle thermodynamique          | 6         |
| 1.5. Réactions chimiques             | 7         |
| 1.6. Conditions opératoires          | 8         |
| 1.6.1. Alimentations                 | 8         |
| 1.6.2. Echangeur-réacteur            | 8         |
| 1.7. « Trucs et astuces »            | 13        |
| <b>2. RESULTATS DE LA SIMULATION</b> | <b>14</b> |
| <b>3. BIBLIOGRAPHIE</b>              | <b>16</b> |

# 1. MODELISATION DU PROCEDE

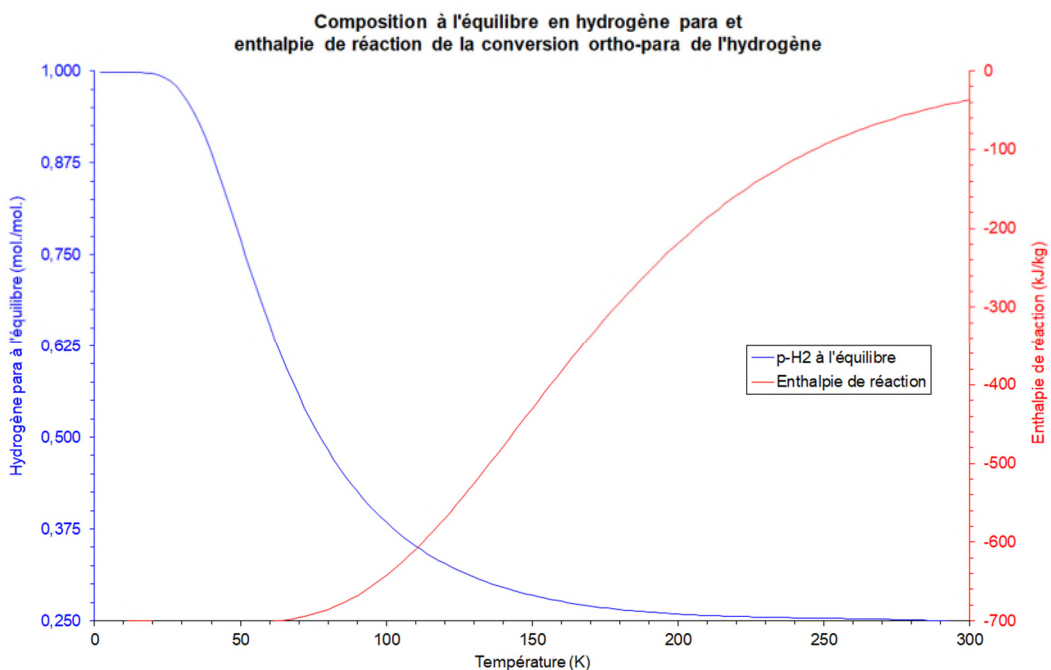
## 1.1. Présentation du procédé

L'hydrogène représente un carburant zéro-émission lorsqu'il est utilisé, par exemple, dans les piles à combustible pour la mobilité ou la production d'électricité. Les seuls rejets émis par les piles à combustible sont de la chaleur et de l'eau [VOL16]. L'hydrogène est obtenu par les principaux modes de production suivants :

- ✓ Le reformage ou la gazéification d'hydrocarbures, cf. « PSPS\_EX\_FR-Procédé-Synthèse-Ammoniac » et « PSPS\_EX\_FR-Centrale-production-électricité-trois-cycles-combinés » ;
- ✓ La dissociation thermochimique de l'eau ou de la biomasse, cf. « PSPS\_EX\_FR-Centrale-CCGI » ;
- ✓ L'électrolyse de l'eau, cf. « PSPS\_EX\_FR-Production-Hydrogene-Electrolyse ».

Un des défis technologiques de l'utilisation de l'hydrogène est associé à son transport et son stockage. Il peut être soit liquéfié (par exemple à 1,3 bar et 21 K), soit comprimé (généralement entre 200 et 700 bars et proche de la température ambiante). La cryo-compression est un autre procédé possible dans lequel la compression est faite en restant en température cryogénique et qui permet d'avoir des masses volumiques de l'ordre de 80-85 kg/m<sup>3</sup> contre 70 kg/m<sup>3</sup> à pression proche de la pression ambiante [CRY23]. Le choix du mode de transport dépend de différents paramètres tels que la quantité d'hydrogène, la distance de transport et l'état physique souhaité pour la distribution et l'utilisation finale. L'avantage de l'hydrogène liquéfié (LH2) est que la densité énergétique est près de 4,5 fois supérieure à celle de l'hydrogène comprimé à 200 bars. Cela réduit le volume et le poids nécessaires des installations de stockage, ce qui devient particulièrement intéressant si de grandes quantités d'hydrogène doivent être transportées depuis des endroits éloignés et distribuées vers des stations-service dans les villes [GOD12].

Un défi majeur de la liquéfaction de l'hydrogène réside dans sa nature composée de deux isomères de spin : l'hydrogène ortho et l'hydrogène para. Comme le montre la figure ci-dessous, le ratio à l'équilibre entre les deux isomères est d'environ 3:1 à température ambiante. Ce mélange est appelé hydrogène normal n-H<sub>2</sub>. La teneur en hydrogène ortho diminue d'autant plus fortement que les températures deviennent cryogéniques [DON19].



La conversion ortho-para de l'hydrogène est exothermique avec une enthalpie de réaction dépassant la chaleur d'évaporation [BAK78]. De plus, la conversion ortho-para naturelle est intrinsèquement lente [MIL97], ce qui entraîne progressivement la vaporisation de l'hydrogène liquéfié dans les stockages non refroidis. Le couplage de la liquéfaction et de la conversion ortho-para simultanée (induite catalytiquement) permet la gestion de la chaleur de réaction au sein même de l'échangeur, réduisant ainsi les dépenses de reliquéfaction ou les pertes de produit [SCH64], [HAU13].

[HUT65], [HUT66] et [HUT70] présentent à la fois des données expérimentales et des modèles (sans toutefois fournir les paramètres associés) de vitesse de réaction de la conversion ortho-para de l'hydrogène en présence d'un catalyseur. [WEI60a] et [WEI60b] ont également publié des mesures expérimentales dans des conditions différentes. [WIL18], [DON19] et [ONE23] sont repartis de ces données expérimentales pour en déduire une cinétique d'ordre 1 ([WIL18], [DON19], [ONE23]) ou une cinétique du type Langmuir-Hinshelwood ([DON19]). Les modèles cinétiques d'ordre 1 permettent une meilleure représentation de la cinétique de conversion ortho-para de l'hydrogène sur une large gamme de teneur en hydrogène para [ONE23]. Le modèle de [WIL18] a été retenu dans cet exemple. Il a été codé sous la forme d'une DLL avec utilisation des dérivées analytiques pour une diminution du temps de calcul. Un modèle de projet Intel Fortran peut être fourni aux utilisateurs souhaitant développer leur propre modèle cinétique.

Le catalyseur utilisé industriellement est l'oxyde de fer  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  (mélange oxyde / hydroxyde). Le fournisseur Molecular Products garantit une conversion de 46,5% pour un débit de 1200 SCCM d'hydrogène normal à 77 K et 1,36 bar [DON19] après un processus de régénération où le catalyseur est porté à 160°C pendant 16 h sous un flux de  $\text{H}_2$  à 1,36 bar.

Un procédé de liquéfaction de l'hydrogène classique comprend quatre étapes consécutives [OHL14] :

1. Pré-compression du gaz d'alimentation en hydrogène, si nécessaire.
2. Pré-refroidissement de l'hydrogène gazeux jusqu'à environ 80 K.
3. Refroidissement cryogénique de l'hydrogène gazeux jusqu'à 20-30 K, comprenant la conversion ortho-para de l'hydrogène.
4. Expansion finale et liquéfaction de l'hydrogène.

Les procédés présentés dans la littérature diffèrent le plus significativement dans les étapes de pré-refroidissement et de refroidissement cryogénique (étapes 2 et 3). La plupart des technologies actuelles de liquéfaction de l'hydrogène sont caractérisées par la nature du cycle de réfrigération utilisé dans la section de réfrigération cryogénique, par exemple un cycle de Claude ou un cycle de Brayton inversé [OHL14]. Cet exemple se focalise uniquement sur l'échangeur-réacteur de l'étape 3. Mais les autres étapes peuvent tout à fait être simulées avec l'environnement de simulation ProSimPlus.

Cet exemple s'appuie sur le cas de référence de [WIL18]. Il s'agit d'échangeur-réacteur traitant trois fluides d'hydrogène : deux chauds et un froid. Son but est de refroidir et de liquéfier le flux d'hydrogène réactif et le flux d'hydrogène non réactif de 47,8 K à une température de 29,3 K. Le flux non-réactif représente la branche Joule-Thomson d'un procédé de liquéfaction de l'hydrogène de type Claude. Le fluide froid est un flux d'hydrogène à 28,9 K. Il est supposé que l'hydrogène normal correspond à un mélange de 25% molaire d'hydrogène para et 75% molaire d'hydrogène ortho. Le flux d'hydrogène réactif correspond à un mélange d'hydrogène normal et d'hydrogène para permettant d'avoir une composition globale en hydrogène para de 77% molaire en entrée [WIL18]. Les flux d'hydrogène non réactif et froid sont supposés être de l'hydrogène normal.

## 1.2. Schéma du procédé

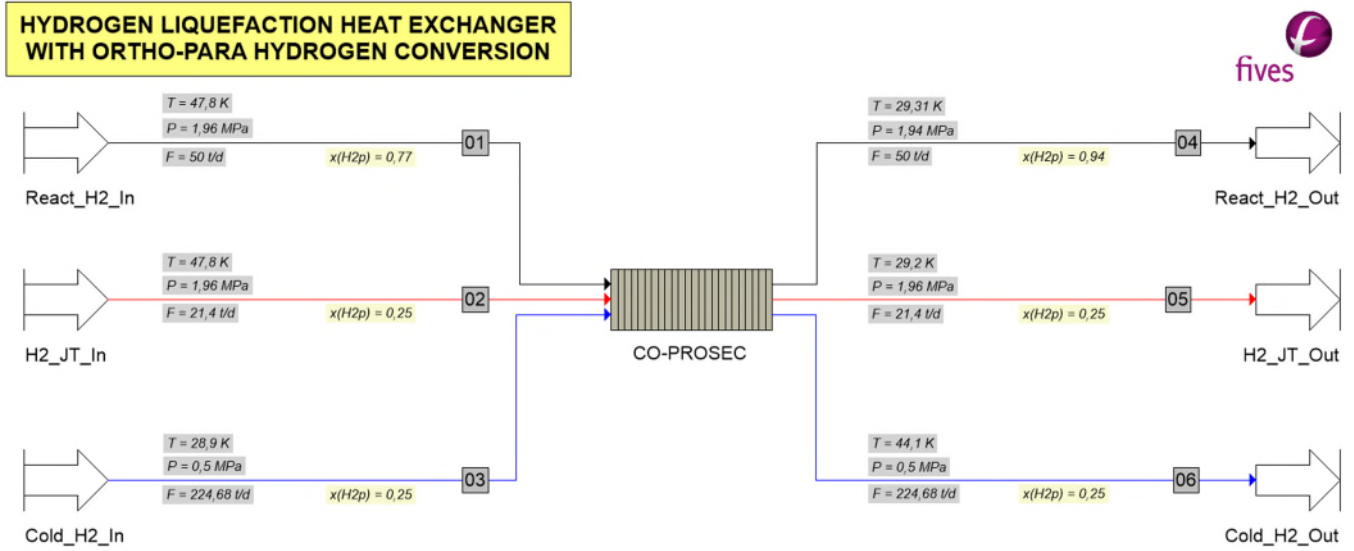


Schéma de simulation d'un échangeur-réacteur pour la conversion ortho-para de l'hydrogène

### 1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques et leurs numéros CAS<sup>1</sup> sont présentés dans le tableau ci-après. Ils sont issus de la base de données « H2 » qui a été développée principalement pour cette application, et à partir de la base de données standard de ProSimPlus [WIL21].

| Constituant                      | Formule chimique | Notation         | Numéro CAS <sup>(1)</sup> |
|----------------------------------|------------------|------------------|---------------------------|
| HYDROGEN (normal, isomers model) | H <sub>2</sub>   | n-H <sub>2</sub> | 1333-74-0                 |
| HYDROGEN (para, isomers model)   | H <sub>2</sub>   | p-H <sub>2</sub> | 55000-01-6                |

Pour être en accord avec la publication de [WIL18], il a été choisi de travailler avec de l'hydrogène normal et de l'hydrogène para. L'hydrogène ortho est également disponible dans la base de données « H2 ». Il est donc possible de bâtir la même simulation et d'obtenir des résultats analogues en utilisant un mélange d'hydrogène ortho et d'hydrogène para à la place du mélange d'hydrogène normal et d'hydrogène para.

### 1.4. Modèle thermodynamique

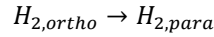
Le profil thermodynamique « Hydrogène (isomères) » est utilisé dans cet exemple. Ce modèle permet de représenter les propriétés énergétiques et de transport de mélange contenant du n-H<sub>2</sub>, du p-H<sub>2</sub> et du o-H<sub>2</sub> pour des températures comprises entre 20 K et 400 K et des pressions comprises entre 0,1 bars et 100 bars. L'équation d'état Redlich-Kwong [RED49] a été sélectionnée ainsi que la fonction alpha Twu-Nancy généralisée [LEG16]. Pour une bonne représentation des propriétés de transport (viscosité dynamique liquide et vapeur, et conductivité thermique liquide et vapeur) les paramètres des modèles de [ASS11], [MUZ13], [REI77] ont été ajustés sur des données expérimentales.

---

<sup>1</sup> CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by Fives ProSim SA with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.

## 1.5. Réactions chimiques

Le modèle réactif retenu dans cet exemple est celui de [WIL18]. La vitesse est exprimée en  $m^3$  de volume libre. Ce modèle n'est donc pas en mesure de traduire l'impact de la porosité du lit de catalyseur sur la cinétique de conversion ortho-para de l'hydrogène. Cette cinétique est établie pour une conversion ortho-para spécifique. Une correction est effectuée dans sa DLL de calcul pour tenir compte du fait que le modèle s'appuie sur de l'hydrogène normal.



$$r = KLn \left( \left( \frac{x_p}{x_p^{eq}} \right)^n \left( \frac{1 - x_p^{eq}}{1 - x_p} \right) \right)$$

$$K = b + c \frac{T}{T_c} + d \frac{P}{P_c}$$

$$a = 1,0924$$

$$b = 0,0597 \text{ kmol}/m^3 \cdot s$$

$$T_c = 32,937 \text{ K}$$

$$c = -0,2539 \text{ kmol}/m^3 \cdot s$$

$$P_c = 1,28377 \text{ MPa}$$

$$d = -0,0116 \text{ kmol}/m^3 \cdot s$$

$$n = a$$

La température et la pression critiques de [WIL18] et non celles des corps purs de la base de données « H2 » (cf. 1.3) ont été utilisées afin de rester cohérent avec la publication de [WIL18].

La fraction molaire d'hydrogène para à l'équilibre est :

$$x_p^{eq} = \frac{a_1}{\exp \left( \frac{a_2}{T/T_c} \right) + a_1} + a_3 \left( \frac{T}{T_c} \right)^3 + a_4 \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 + a_5 \frac{T}{T_c} + a_6$$

$$a_1 = 0,1$$

$$a_2 = -5,313$$

$$a_3 = -2,52 \times 10^{-4}$$

$$a_4 = 3,71 \times 10^{-3}$$

$$a_5 = -2,04 \times 10^{-3}$$

$$a_6 = -0,00227$$

Il est supposé que l'hydrogène normal, n-H<sub>2</sub>, est un mélange à 25% molaire d'hydrogène para, p-H<sub>2</sub>, et 75% molaire d'hydrogène ortho, o-H<sub>2</sub>. Ainsi la fraction molaire globale en hydrogène para sera :

$$x_{H_2p} = 0,25x_{n-H_2} + x_{p-H_2}$$

## 1.6. Conditions opératoires

### 1.6.1. Alimentations

L'alimentation « React\_H2\_In » est l'alimentation en hydrogène qui sera liquéfié et converti au maximum en hydrogène para. Il s'agit d'un fluide chaud. Le second fluide chaud est le fluide « H2\_JT\_In ». Le fluide froid est le fluide « Cold\_H2\_In ». Ces deux derniers courants sont non-réactifs. La composition de l'alimentation « React\_H2\_In » a été calculée afin d'avoir une composition globale en hydrogène para de 0,77 comme le cas de référence de [WIL18].

|                         | React_H2_In | H2_JT_In | Cold_H2_In |
|-------------------------|-------------|----------|------------|
| <b>Fraction molaire</b> |             |          |            |
| n-H <sub>2</sub>        | 0,31        | 1        | 1          |
| p-H <sub>2</sub>        | 0,69        | 0        | 0          |
| Débit (t/d)             | 50          | 21,4     | 224,682    |
| Température (K)         | 47,8        | 47,8     | 28,9       |
| Pression (MPa)          | 1,96        | 1,96     | 0,5        |

### 1.6.2. Echangeur-réacteur

✓ Paramètres globaux

| Paramètres                             | Valeurs             |
|--|---------------------|
| Type d'échangeur                       | CO-ProSec           |
| Nombre de corps                        | 1                   |
| Inclinaison                            | Horizontal          |
| Banque d'ondes                         | 2015 -> Maintenant  |
| Matériau                               | Aluminium SASSENAGE |
| Largeur utile (mm)                     | 1500                |
| Epaisseur des barres latérales (mm)    | 27                  |
| Epaisseur des barres d'extrémités (mm) | 27                  |
| Epaisseur des tôles de séparation (mm) | 1,5                 |
| Epaisseur des tôles de fermeture (mm)  | 1,5                 |



✓ Catalyseur

En l'absence d'information sur la géométrie réelle des particules de catalyseur, elles seront supposées sphériques dans cet exemple.

[DON19] mentionne des porosités du lit très faibles et inférieures à 20%. Une valeur plus classique est retenue pour cet exemple. Comme indiqué au paragraphe 1.5, ce paramètre n'a pas d'influence sur la cinétique de conversion ortho-para (limitation du modèle de [WIL18]). De plus, [WIL18] n'estime pas les pertes de charge dans sa publication. Dans ce cas précis, l'impact reste limité sur les résultats.

| Paramètres                         | Valeurs |
|------------------------------------|---------|
| Nom                                | IONEX   |
| Diamètre des particules (mm)       | 0,446   |
| Facteur d'aspect des particules    | 1       |
| Porosité du lit                    | 0,48    |
| Paramètre K1 de l'équation d'Ergun | 150     |
| Paramètre K2 de l'équation d'Ergun | 1,75    |

✓ Paramètres des courants

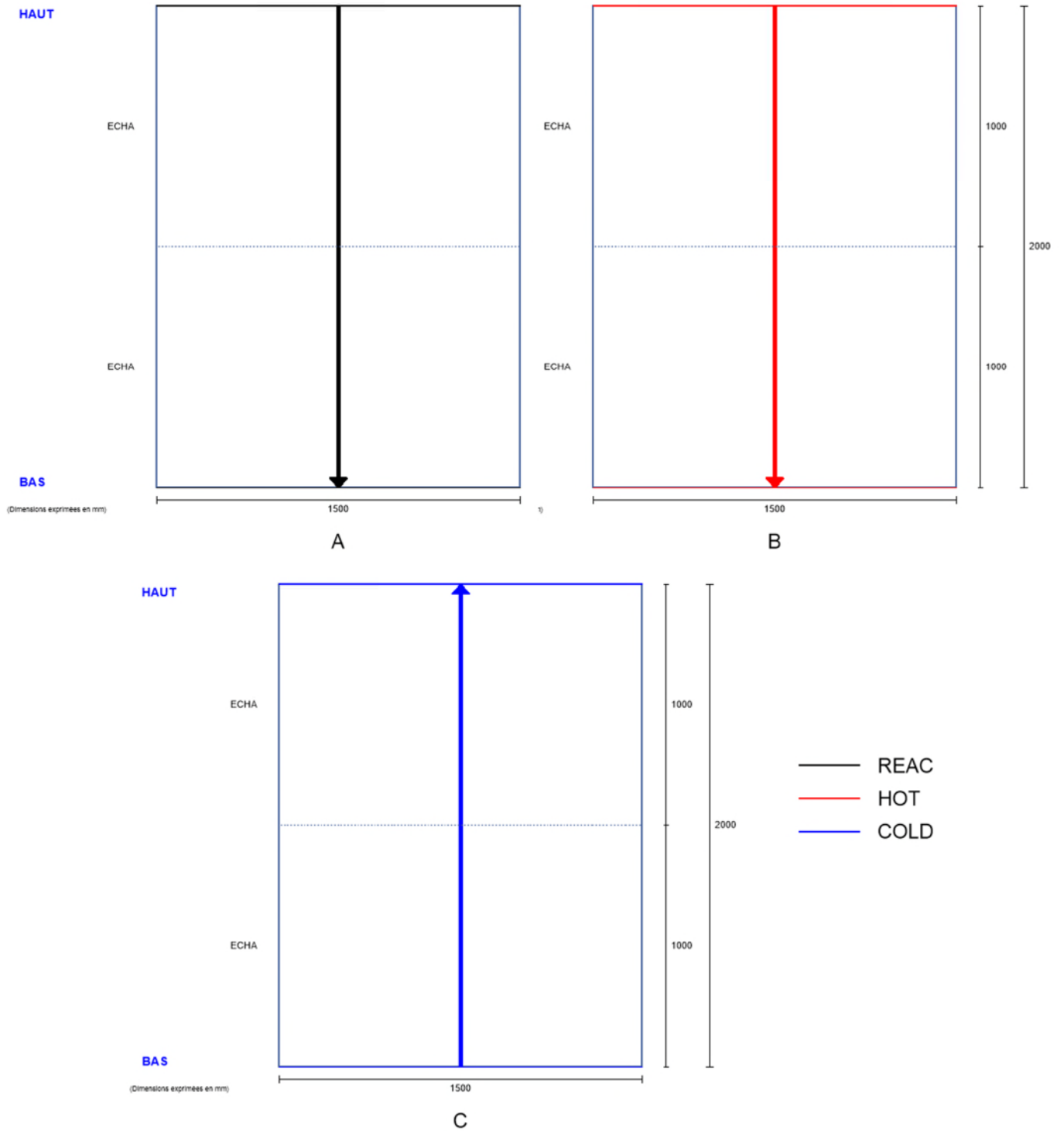
| Paramètres                           | Courants            |          |                     |
|--------------------------------------|---------------------|----------|---------------------|
|                                      | React_H2_In         | H2_JT_In | Cold_H2_In          |
| Nom                                  | REAC                | HOT      | COLD                |
| Thermodynamique continue             | Oui                 |          |                     |
| Réactif                              | Oui                 | Non      |                     |
| Prise en compte d'un catalyseur      | Oui<br>IONEX        | Non      |                     |
| Sens d'écoulement                    | Du haut vers le bas |          | Du bas vers le haut |
| Corrélation du coefficient d'échange | HTFS85              |          |                     |
| Autres paramètres                    | Valeur par défaut   |          |                     |

✓ Caractéristiques des ondes

| Paramètres                  | Valeurs                  |
|-----------------------------|--------------------------|
| Nom                         | Fin #1                   |
| Origine                     | Utilisateur              |
| Référence                   | 1001                     |
| Mode de calcul              | A partir de la géométrie |
| Type                        | Droite et pleine         |
| Hauteur (mm)                | 4                        |
| Epaisseur (mm)              | 0,35                     |
| Nombre d'ailettes par mètre | 909,9                    |
| Autres paramètres           | Valeur par défaut        |

✓ Passages de référence

Les figures ci-dessous montrent les trois passages de référence de cet échangeur.

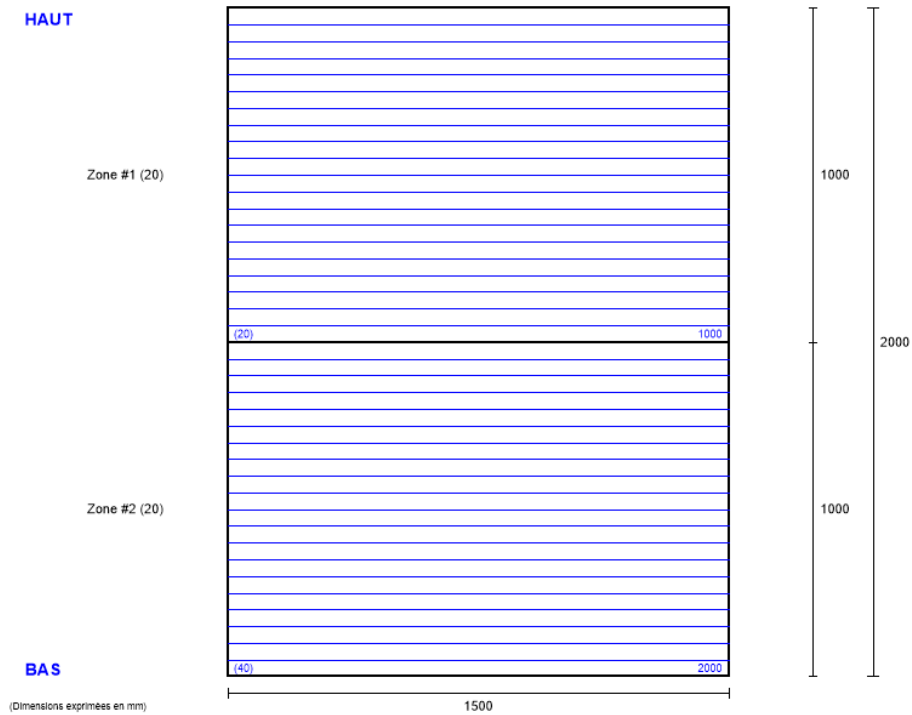


✓ Empilage

Pour un échangeur-réacteur la résolution est faite en suivant l'hypothèse TPC (Température de Paroi Commune). Ainsi, seul le nombre de passages pour chaque passage de référence est à définir.

| Paramètres                           | Valeurs |
|--------------------------------------|---------|
| Séquence 1                           |         |
| Nombre de répétitions de la séquence | 48      |
| Passage 1                            | A       |
| Passage 2                            | B       |
| Séquence 2                           |         |
| Nombre de répétitions de la séquence | 48      |
| Passage 1                            | C       |

✓ Nombre de mailles pour chaque zone élémentaire (les dimensions sont exprimées en millimètres)



✓ Paramètres numériques

| Paramètres  | Valeurs           |
|---|-------------------|
| Exécution seulement du TPC (Température de paroi commune) | Oui               |
| Valeur seuil du critère de convergence                    | 0,001             |
| Non-évolution du critère                                  | 0,01              |
| Marge de sécurité des bornes des enthalpies des fluides   | 500%              |
| Fraction de porosité du lit prise en compte               | 1                 |
| Autres paramètres   | Valeur par défaut |



Marge de sécurité des bornes des enthalpies de fluides

Pour chaque courant, les bornes des enthalpies sont calculées avec le modèle thermodynamique du courant pour la température la plus basse et la température la plus haute des alimentations. Une marge de sécurité est appliquée pour ne pas bloquer la résolution du problème. La valeur par défaut est augmentée pour prendre en compte l'enthalpie de réaction.



Fraction de porosité du lit prise en compte

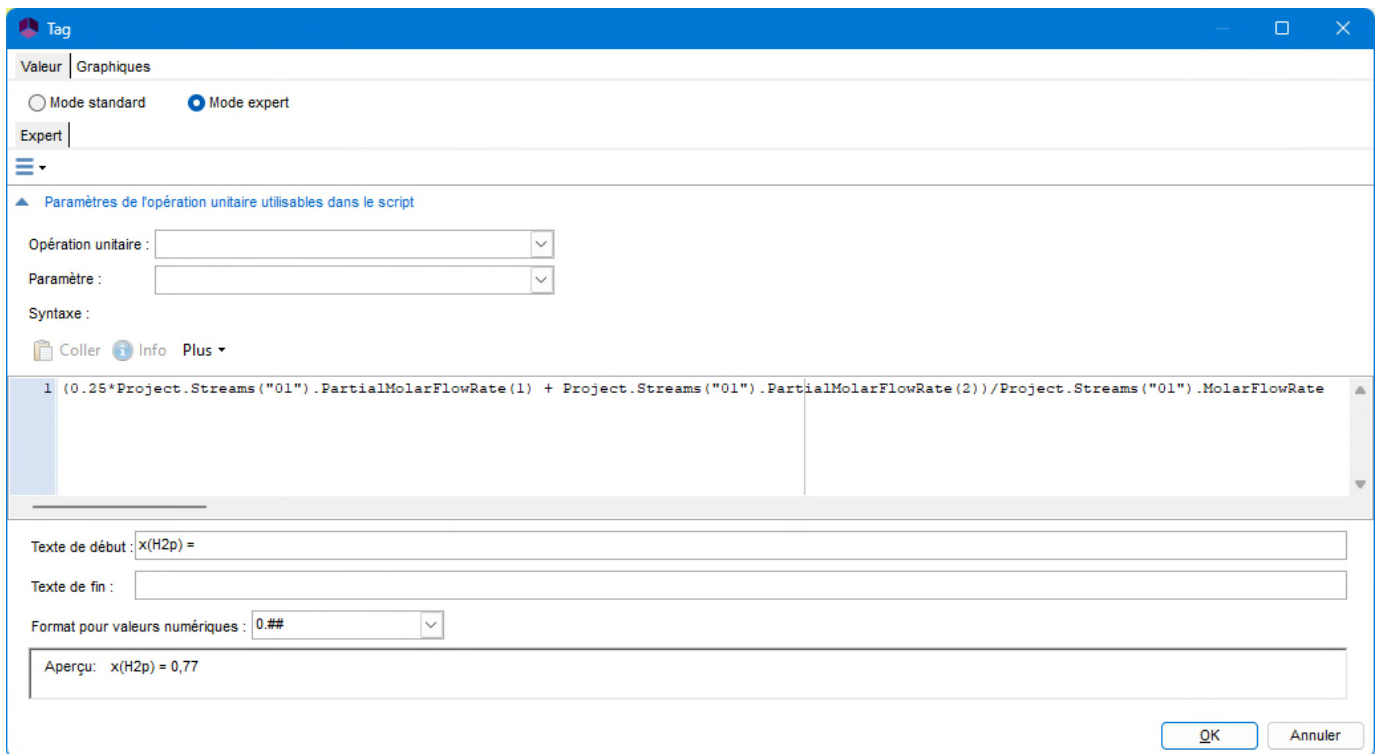
Si un catalyseur solide en lit fixe est spécifié pour un courant réactif, il est possible d'indiquer la fraction de la porosité du lit prise en compte dans le calcul du volume réactionnel. Une valeur de 0 implique que le volume réactionnel est le volume géométrique multiplié par la porosité du lit définie pour chaque catalyseur dans l'onglet Catalyseur. Une valeur de 1 induit que le volume réactionnel correspond au volume géométrique. Pour une valeur entre 0 et 1, le volume réactionnel est le volume géométrique multiplié par cette valeur. Le modèle cinétique de [WIL18] ne prenant pas en compte la porosité du lit (cf. 1.5 **Error! Reference source not found.**), la valeur de 1 a été spécifiée pour que le volume réactionnel soit égal au volume géométrique.

## 1.7. « Trucs et astuces »

Des « Tags » sont utilisés pour afficher, sur le schéma de procédé, les températures, pressions, débits massiques et les fractions molaires en hydrogène para de chacun des courants. Les températures, pressions et débits massiques font partie des grandeurs directement disponibles. Pour afficher la teneur réelle en hydrogène para il faut tenir compte de la relation suivante (voir le paragraphe 1.5) :

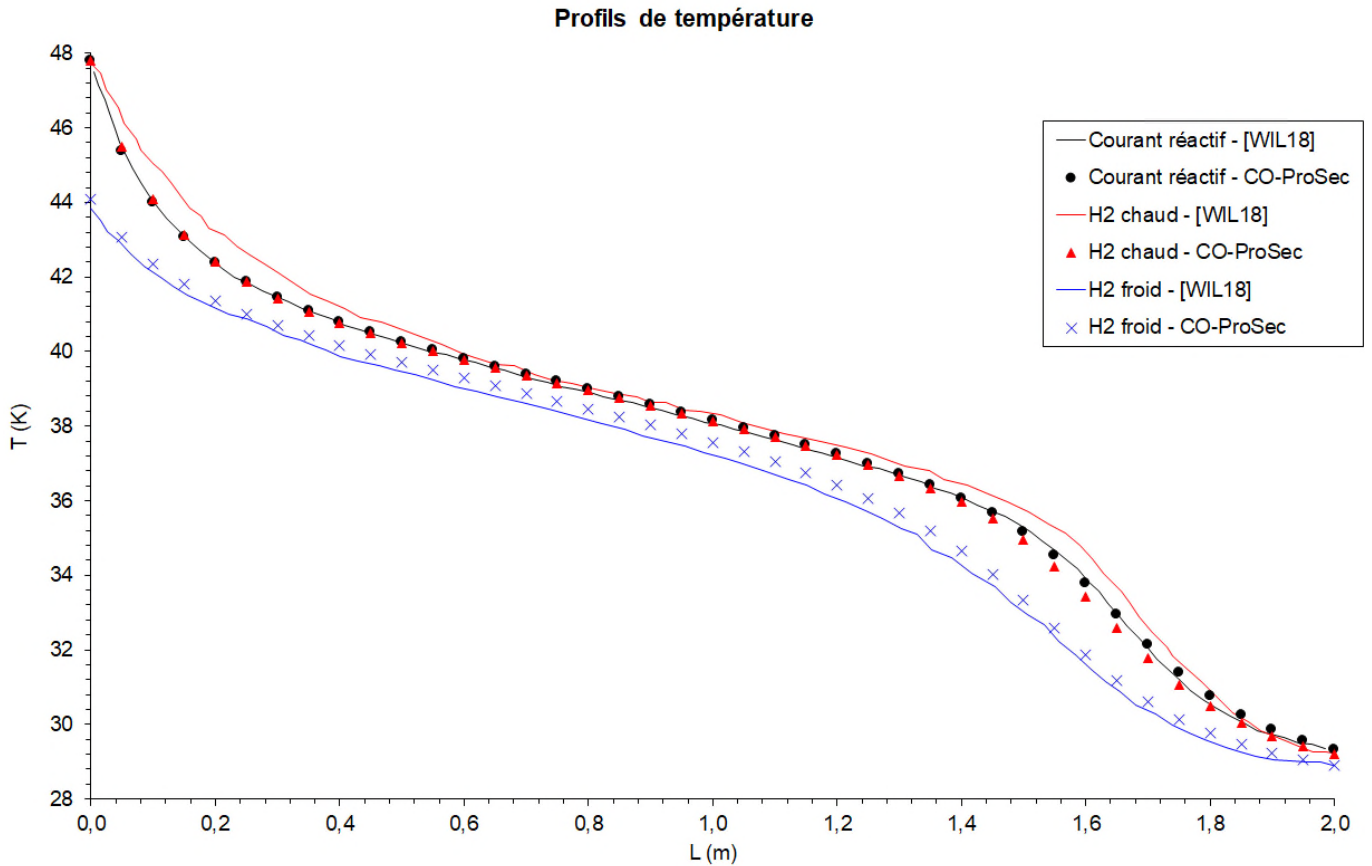
$$x_{H_2p} = 0,25x_{n-H_2} + x_{p-H_2}$$

Le mode expert des tags permet de coder cette réaction en VBS.

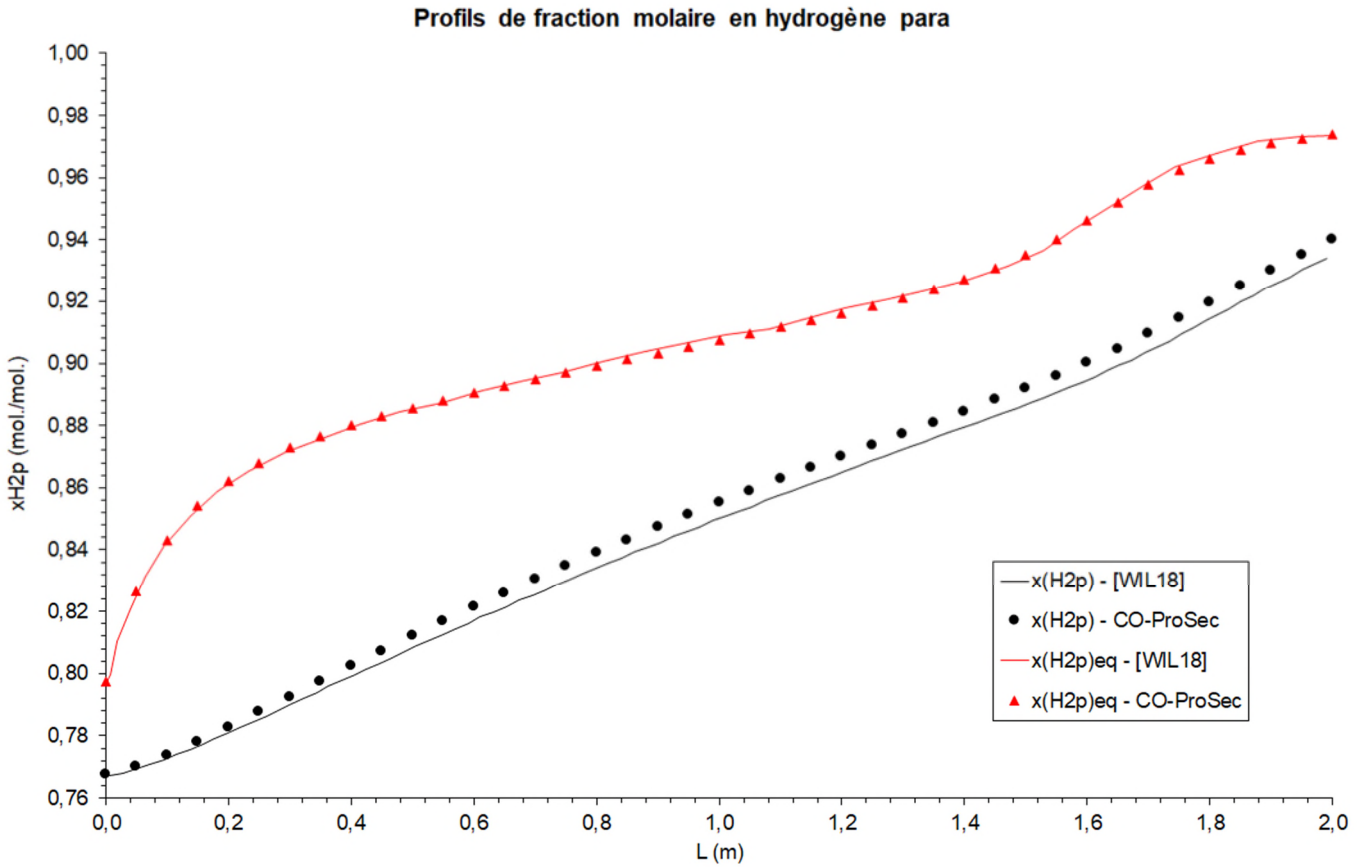


## 2. RESULTATS DE LA SIMULATION

La figure suivante compare les profils de température de chaque fluide obtenus avec CO-ProSec et ceux de [WIL18]. CO-ProSec permet de retrouver des profils similaires à ceux de [WIL18]. Les écarts constatés peuvent s'expliquer par des différences dans la modélisation thermique.



La figure suivante compare les profils de fraction molaire d'hydrogène para à l'équilibre et réel obtenus avec CO-ProSec et ceux de [WIL18]. CO-ProSec permet de retrouver des profils similaires à ceux de [WIL18]. Les faibles écarts peuvent s'expliquer par les différences dans les profils de température.



De nombreux autres profils sont disponibles dans CO-ProSec.

### 3. BIBLIOGRAPHIE

- [ASS11] ASSAEL, M. J., ASSAEL, J. -A. M., HUBER, M. L., PERKINS, R. A., TAKATA, Y., "Correlation of the Thermal Conductivity of Normal and Parahydrogen from the Triple Point to 1000K and up to 100 MPa", J. Phys. Chem. Ref. Data, 40, (2011)
- [BAK78] BAKER C.R., SHANER R.L., "A Study of the Efficiency of Hydrogen Liquefaction", Int. J. Hydrogen Energy, 3, 321-334 (1978)
- [CRY23] <https://www.fivesgroup.com/fr/actualites/vue-detaillee/cryomotive-et-fives-sassocient-pour-developper-une-pompe-cryogenique-de-pointe-pour-les-stations-de-remplissage-hydrogene-des-camions>
- [DON19] DONAUBAUER P.J., CARDELLA U., DECKER L., KLEIN H., "Kinetics and Heat Exchanger Design for Catalytic Ortho-Para Hydrogen Conversion during Liquefaction", Chem. Eng. Technol., 42, 669-679 (2019)
- [GOD12] GODULA-JOPEK A., JEHLE W., WELLNITZ J., "Hydrogen Storage Technologies", Wiley-VCH (2012).
- [HAU13] HAÜSSINGER P., LOHMÜLLER R., WATSON A.M., "Hydrogen, 4. Liquefaction" in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH Verlag (2013)
- [HUT65] HUTCHINSON H.L., BARRICK P.L., BROWN L.F., "Experimental Study of Reaction Kinetics for Para-Orthohydrogen at 20 to 80 K", Adv. Cryog. Eng., 10, 190-196 (1965)
- [HUT66] HUTCHINSON H.L., "Analysis of Catalytic Ortho-Parahydrogen Reaction Mechanisms", Ph.D. thesis. Department of Chemical Engineering, University of Colorado (1966)
- [HUT70] HUTCHINSON H.L., BROWN L.F., BARRICK P.L., "A Comparison of Rate Expressions for the Low-Temperature Para-Orthohydrogen Shift", Adv. Cryog. Eng., 16, 96-103 (1970)
- [LEG16] LE GUENNEC Y., PRIVAT R., JAUBERT J.N., "Development of the Translated-Consistent tc-PR and tc-RK Cubic Equations of State for a Safe and Accurate Prediction of Volumetric, Energetic and Saturation Properties of Pure <sup>2</sup>Compounds in the Sub and Super-Critical Domains", Fluid Phase Equilib., 429, 301-312 (2106)
- [MIL97] MILENKO Y.Y., SIBLIEVA R.M., STRZHEMECHNY M.A., "Natural Ortho-Para Conversion Rate in Liquid and Gaseous Hydrogen", J. Low Temp. Phys., 107, 77-92 (1997)
- [MUZ13] MUZNY, C. D., HUBER, M. L., KAZAKOV F., "Correlation for the viscosity of Normal Hydrogen Obtained from Symbolic Regression", J. Chem. Eng. Data, 58, 969-979 (2013)
- [OHL14] OHLIG K, DECKER L., "The Latest Developments and Outlook for Hydrogen Liquefaction Technology", Adv. Cryogenic Eng., AIP Conf. Proc., 1573, 1311-1317 (2014)
- [ONE23] O'NEILL K.T., AL GHAFRI S., DASILVA FALC B., TANG L., KOZIELSKI K., JOHNS M.L., "Hydrogen Ortho-Para Conversion: Process Sensitivities and Optimisation", Chem. Eng. & Proces.: Process Intensification, 184, 109272 (2023)
- [RED49] REDLICH O., KWONG I.N.S., "On the Thermodynamics of Solutions; an Equation of State; Fugacities of Gaseous Solutions", Chem. Rev., 44, 233-244 (1949)



- [REI77] REID R.C., J.M. PRAUSNITZ, B.E. POLING, "The properties of gases and liquids", Fourth ed., McGraw Hill Book Company, New York (1977)
- [SCH64] SCHMUACH G.E., SINGLETON A.H., „Technical Aspects of Ortho-Para Hydrogen Conversion“, Ind. Eng. Chem., 56, 20-31 (1964)
- [VOL16] VOLDSOUND M., JORDAL K., AANATHARAMAN R., “Hydrogen Production with CO<sub>2</sub> Capture”, Int. J. Hydrogen Energy, 41, 4969-4992 (2016)
- [WEI60a] WEITZLE D.H., VAN VALIN C.C., DRAPER J.W., “Design Data for Orthoparahydrogen Converters”, Adv. Cryog. Eng., 3, 73-84 (1960)
- [WEI60b] WEITZLE D.H., BLAKE J.H., KONECNIK M., “Flow Conversion Kinetics of Ortho and Parahydrogen”, Adv. Cryog. Eng., 4, 286-295 (1960)
- [WIL18] WILHELMSEN Ø., BERSTAD D., AASEN A., NEKSA P., SKAUGEN G., “Reducing the Exergy Destruction in the Cryogenic Heat Exchangers of Hydrogen Liquefaction Processes”, Int. J. Hydrogen Energy, 43, 5033-5047 (2018)
- [WIL21] WILDING, W. V.; KNOTTS, T. A., GILES, N. F., ROWLEY, R. L. “DIPPR Data Compilation of Pure Chemical Properties”; Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2021)